

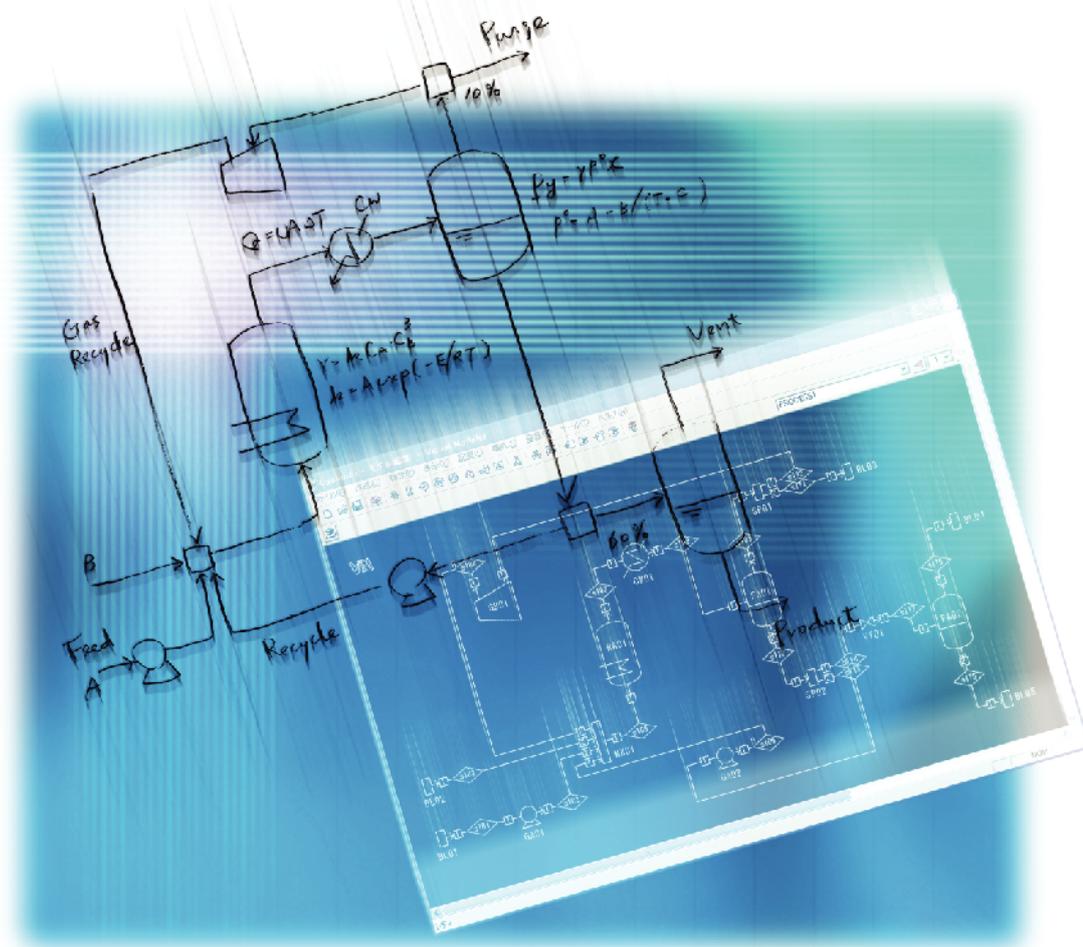


数式モデルで記述したモジュールを組み合わせて、あれこれ試して、手軽にシミュレーション。その機能はとてもフレキシブルです。

## VM-EQUATRANの概要

モデル化する対象をモジュールに分割し、EQUATRAN\*を用いて数式モデルで各モジュールを記述します。これらのモジュールを、流量や組成など伝達するストリームで、あるいはデータを受け渡す信号線で接続して、プロセスあるいはシステムとして全体のモデルを構築していきます。このようにして構築したプロセスモデルは、リアルタイムで計算して動的な動きをシミュレーションしたり、あるいは定常状態計算でプロセス全体の静的なバランスを求めたりと、さまざまなシミュレーションに応用できます。

\*「EQUATRANとは」を参照ください。



```

MACRO COND
  -D = L(J) - (DHL(J) - UC(J)*w*(J) - V(J)*wv(J) - UC(J)*w*(J) + V(J)*wv(J) - UC(J)*w*(J) + V(J)*wv(J)
  UC(J)*w*(J) = L(J) - (DHL(J) - UC(J)*w*(J) - V(J)*wv(J) - UC(J)*w*(J) + V(J)*wv(J)
  = -7DHL(J) + UC(J) + V(J) + UC(J) + V(J)
  PHYCLBPT( 1, P(J), x(J), T(J), w(J), h(J) )
  PHYCLHLQ( 1, T(J), P(J), x(J), h(J) )
  PHYCLHVP( 1, T(J), P(J), x(J), h(J) )
END COND

MACRO TRAY
  /m 25 J 19 2 1 w
  L(J) = V(J) - L(J) + V(J) = 0
  UC(J)*w*(J) = L(J) - (DHL(J) - UC(J)*w*(J) - V(J)*wv(J) - UC(J)*w*(J) + V(J)*wv(J)
  UC(J)*w*(J) = L(J) - (DHL(J) - UC(J)*w*(J) - V(J)*wv(J) - UC(J)*w*(J) + V(J)*wv(J)
  = L(J) - (DHL(J) - UC(J)*w*(J) - V(J)*wv(J) - UC(J)*w*(J) + V(J)*wv(J)
  = L(J) - DHL(J) + UC(J)*w*(J) + V(J)*wv(J)
  PHYCLBPT( 1, P(J), x(J), T(J), w(J) )
  PHYCLHLQ( 1, T(J), P(J), x(J), h(J) )
  PHYCLHVP( 1, T(J), P(J), x(J), h(J) )
END TRAY
  
```

## VM-EQUATRANの特長

### 高機能なモデリングツール

VM-EQUATRANはモジュールを組み合わせてシステム化が容易に行える、フレキシブルかつ高機能なモデリングツールです。各モジュールはEQUATRANを用いて数式モデルで記述できます。

### 簡易シミュレーションツール

インタラクティブなGUI ( Graphical User Interface ) をもったシミュレータを、比較的安価に実現することができます。モジュラーアプローチを採ったシンプルなシミュレーションツールと言えます。

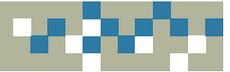
### 高いシステム拡張性

VM-EQUATRANはOmegaLand\*の統合環境に組み込んで使用できます。すなわち、実行制御機能、グラフィック機能、データベース機能、自動運転機能、外部接続機能などの各パッケージモジュールを組み合わせて、応用システムを開発することができます。また、COM/DCOMのインタフェースを持っていますので、Visual BasicやExcel/VBAからアクセスするようなアプリケーションを作成することが可能です。

\* 「OmegaLandとは」を参照ください。

### 物性計算機能

物性計算オプションを追加すると、純成分の物性データや物性推算式をモデル計算の中から利用できます。混合成分の気液平衡定数やエンタルピなどを計算する関数が用意されています。



## プロセスの概念設計など、簡易なシミュレーションに幅広く応用できます

### プロセスの概念設計

プロセスを設計するときには、プロセスを構成する要素、すなわち主要な装置（ユニット）を大まかに捉えて、ブロック・フロー・ダイアグラムを描くことから始めます。化学プロセスなら反応器や分離器などの主要な装置の組み合わせになります。物質収支計算を行って妥当なフローになっているか、反応器ではどのくらいの転化率が必要か、分離器ではどのような組み合わせで分離させたら要求の製品ができるか、などを検討します。このような概念設計では、各要素のモデルは流量と組成を考慮したモデルを作ります。

### バッチプロセスのシミュレーション

バッチプロセスのダイナミックシミュレーションが可能です。たとえば、バッチ反応器では、反応槽に反応物を仕込んでからジャケットに熱媒を通して昇温し、ある温度に達したら攪拌して反応を開始します。発熱反応の場合にはジャケットに冷媒を流して定温に保ちます。最後には降温して反応を終了します。このようにバッチプロセスには運転のシーケンスがつき物ですが、自動操作の機能でケーススタディすることができます。

### 制御系のシミュレーション

連続系の動特性を表現する数式モデルを用いて制御対象や制御ロジック、コントローラをモデル化することにより、制御系のシミュレーションが簡単に行えます。実行時に数式モデルをインタラクティブに変更できるので、レスポンスの良いケーススタディが可能です。

### 教育用のシミュレータ

市販のプロセスシミュレータでは、モデルの中身が必ずしも明示されていないユニット（モジュール）を組み合わせることでシミュレーションを行います。つまり、ユニットはブラックボックスになっています。これに対して、VM-EQUATRANではモデルはすべてEQUATRANの数式モデルで記述します。すべてのモデルは後から参照が可能です。モデルの中身が見える、すなわちブラックボックスになっていないという意味から、教育用のシミュレータとして有効です。

### オンラインシミュレータのモデル記述

OmegaLandの外部接続の機能を利用して、生産管理システム（PIMS）にモデルを使った高度な計算機能を付加することができます。EQUATRANの非線形連立方程式や常微分方程式の解法、最適化・最小2乗法計算の機能がフルに活躍します。

以下のような用途に利用できます。

#### 物質収支、熱収支計算

データリコンシレーション処理を行った物質収支計算、複数機器間での熱バランス計算など。

#### 計測できない量の推算

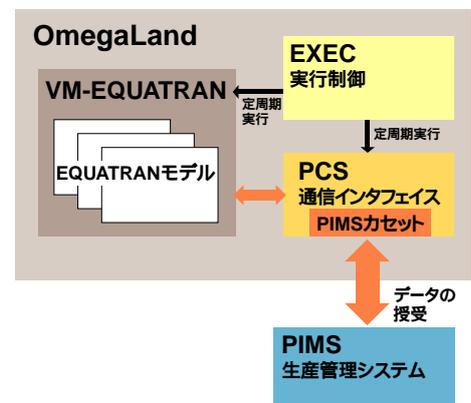
製品物性の推算（たとえばポリマーのMIや など）装置の係数や効率の計算（たとえば熱交換器のUなど）触媒活性や反応率、選択率の計算など。

#### 先行シミュレーションによる運転予測

触媒劣化速度の推定、爆発限界や温度範囲の逸脱予測など。

#### その他

生産管理用データの作成、他システムでの利用など。



## EQUATRANとは

EQUATRANの基本機能はさまざまな方程式の解法です。方程式をそのまま入力すると直接数値解を得ることができます。方程式は解く順序に並べる必要はありません。対象となる問題の関係式を書き並べるだけです。したがって、プログラミングせずに数式モデルで問題解決を図ることができます。

### 方程式解法機能

EQUATRANでは、線形連立方程式、非線形連立方程式、常微分方程式(高階または非線形を含む)、そして最適化計算、最小2乗法計算(非線形を含む)を数値的に解くことができます。

方程式はそのままの形で入力すればよく、変形したり、解く順序に並び替えたりする必要はありません。解く順序は、EQUATRANが自動的に生成してくれます。

線形・非線形連立方程式の場合は、そのまま入力するだけです。特に非線形の場合は、一般に直接解くことができないので、繰り返し収束計算が必要になりますが、EQUATRANでは線形部分や非線形部分を判断して、それぞれの計算手法を自動的に組み込みます。なお、ユーザーが繰り返し収束計算の方法を指定することも可能です。常微分方程式の場合は、積分の指定をする文をひとつ記述するだけで、高階の方程式でもそのまま扱うことができます。最適化計算も独立変数と評価変数を指定するだけです。EQUATRANでは、以上の方程式を解く問題のほかに、

これらの方程式が混在した複合問題、たとえば常微分方程式と線形・非線形連立方程式が混在した問題、最適化計算の中に非線形連立方程式が含まれるような問題なども、扱うことができます。さらにユーザー関数を利用すれば、高度な複合問題(多重積分、2点境界値問題、動的システムのパラメータ同定問題、MINIMAX問題など)も扱えます。

### 方程式記述機能

数式モデルを簡潔に記述するために、以下のような豊富な記述機能を持っています。

#### 配列変数

1次元および2次元の配列変数が扱えます。

#### 組み込み関数

対数、指数、三角関数など36個の関数が内蔵されています。

#### 数表

変数間の関係が図や表として与えられている場合に、数表として定義し、方程式の中で関数のように利用できます。

#### 条件付きの式

条件によって場合分けされるような式を表現できます。

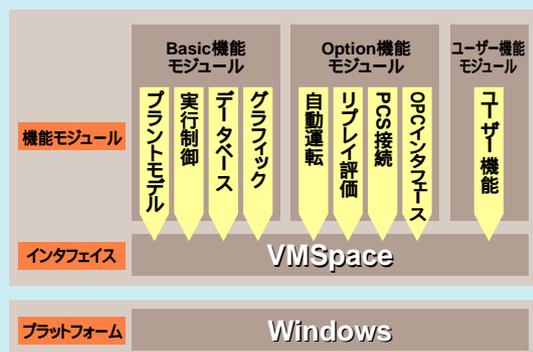
#### ユーザー関数とマクロ

規模の大きな数式モデルはモジュール化して記述できます。

## OmegaLandとは

OmegaLandとは、統合ダイナミックシミュレーション環境の総称です。さまざまな機能モジュールを組み合わせ、応用システムを構築するための環境です。

OmegaLandではユーザーがモジュールを作成できるように、モジュール間を接続するためのインターフェイスが公開されています。COM/DCOMのインターフェイスを使ってVisual BasicやExcel/VBAからアクセスするようなアプリケーションを作成することが可能です。さらに、OPC(OLE for Process Control)インターフェイスに対応したモジュールを提供しており、サーバ、クライアントのいずれにもなりうる機能があります。OPCインターフェイスがあるパッケージなら簡単に接続できて、データ交換が可能となります。



OmegaLand構成図

### OmegaLandのモジュール

#### 実行制御モジュール( EXEC )

OmegaLand全体の実行を制御するとともに、それを構成するモジュール、およびモジュールが使用するデータの管理を行います。いわばOmegaLandの司令塔としての役割を果たします。

#### データベースモジュール( DB )

リアルタイムで利用可能なタグデータベース機能を提供します。プロセスモデルの履歴データを貯えたり、計算機能によりデータを加工したりでき、スプレッドシート形式でタグの登録、編集が可能です。

#### グラフィックモジュール( VIEW )

エンドユーザーが直接操作することになるGUI(Graphical User Interface)を提供します。

#### 自動運転モジュール( AUTO )

シミュレーション実行を自動化する機能を提供します。同様な操作を繰り返し正確に実行することができ、運転操作の検証に利用できます。

#### PCS接続モジュール( PCS )

DCSに代表されるPCSとの接続機能を提供します。OPCクライアントとしての機能も持ちます。

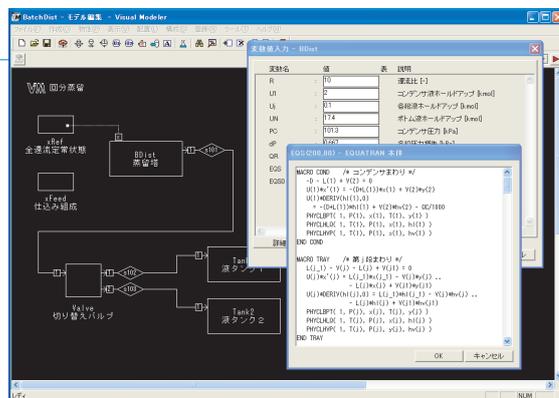
#### OPCインタフェースモジュール( OPC )

OLE/COM技術をベースにしたインターフェイスの標準規格であるOPCのインターフェイス機能を提供します。OPCに準拠した他のシステムとの接続が容易にできます。

# VM-EQUATRANの機能

## [ 編集機能 ]

編集機能を使ってユニット(モデルでのモジュールに相当)を組み合わせたモデルを構築します。まず、ユニット作成ウィザードを使ってユニットに関する属性を定義し、その数式モデルをEQUATRANで記述します。ユニットをストリームや信号線で接続してブロック・フロー・ダイアグラムを作成し、モデル全体を完成します。なお、物質成分を考えてプロセスモデルを扱う場合には、あらかじめ扱う成分や物性計算法を定義します。



編集画面

## ■ ユニット作成ウィザード

ウィザードを使用して、ユニットのタイプを決め、生成パラメータや、変数、ノズルを定義し、図形の選択を行います。まず、ユニットタイプでは記述する言語(EQUATRANのほかにC言語も使えます)と実行のタイプを指定します。生成パラメータとして配列変数のサイズなどを表すシンボルとその値を定義します。変数のダイアログでは、使用する変数の中で画面から入力したり計算結果を表示したりする変数を定義します。最後に、ユニットを接続するためのノズルと表示に使う図形を指定します。

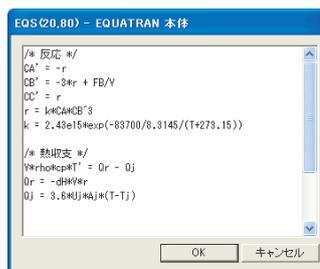


ユニット作成ウィザード

## ■ ユニットのモデル記述と変数入力

各ユニットは通常EQUATRANを使って記述します。EQUATRAN<sup>\*</sup>の基本機能は方程式の解法です。数式モデルを解く順序に関係なく自然な形で入力すれば、数値計算によって解を求めることができます。また、ユニット作成ウィザードで定義した入力変数に値を与えて置くことができます。

\*「EQUATRANとは」を参照ください。



EQUATRANの編集

## ■ 複数のユニットの接続

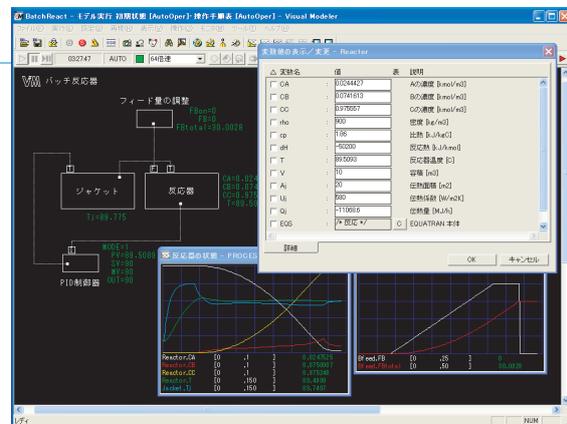
複数のユニットを連携して実行するために、ユニット間を信号線(外部変数またはユニットに接続)やストリームで接続します。外部変数への接続は1つ1つの変数をそれぞれ受け渡し、ユニットへの接続は1つの信号線でユニット内変数を一括して受け渡します。ストリームはストリームに定義されている変数を一括して接続します。

## ■ 成分と物性計算の定義

多成分系のプロセスモデルを作成する場合には、成分定義を行うことによって、組成や成分流量をベクトル変数として扱うことができます。さらに物性計算オプションを導入すると、物性値ライブラリと物性値計算関数ライブラリが使えるようになります。物性値ライブラリにはDIPPRのデータベースをもとにした約1,600成分の純成分物性が登録されています。また、物性値計算関数ライブラリには、混合成分について気液平衡定数、エンタルピー、密度、粘度などの物性値の計算法が用意されており、EQUATRANまたはC言語から呼び出すことができます。

## [ 実行機能 ]

実行モードの画面は、編集モードで作成したブロック・フロー・ダイアグラムをそのまま使います。ダイナミック計算と定常状態(ステディステート)計算を使ったシミュレーションが可能です。ダイナミック計算では運転を開始すると時間経過とともに状態が刻々変化します。定常状態計算では各ユニットのバランスが成り立つまで繰り返し収束計算を行います。ユニットの変数やストリームの変数を更新表示する機能や、計算結果をグラフ化するトレンド機能で、モデルの状態や変化を知ることができます。また、ダイナミック計算では、あらかじめ決め



実行画面

## ■ 実行制御

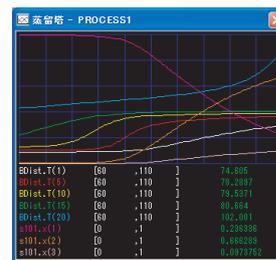
ダイナミック計算では計算を実行することを運転、一時的に止めることを休止と言います。休止はすぐに運転を再開でき、1周期分だけ実行して休止する1ステップ実行も可能です。また、途中状態を一時的に保存しておくスナップショット、その保存状態に戻るステップバック、さらにシミュレーションの計算速度をリアルタイムに対して加速、減速して実行するタイムスケールの変更も可能です。定常状態計算では、リサイクルしているストリームに出発値を与えると、ストリームの接続順にユニットの計算が行われます。



実行制御

## ■ モニタ機能

計算過程のモニタリングを行う機能として、トレンドと監視パネルがあります。トレンドは変数の値をグラフで表示する機能です。1つのトレンドには8つの変数をプロットでき、複数のトレンド画面を表示できます。監視パネルは注目している操作変数や監視変数をまとめて表示するものです。そのパネルから変数の値を変更することも可能です。



トレンド

変数名	値
1 Bfeed.FBtotal	1
2 Bfeed.FBtotal	26.0306
3 Reactor.T	90.3482
4 Jacket.Tj	82.2807
5 Reactor.CA	0.171062
6 Reactor.CB	0.116796
7 Reactor.CC	0.828938
8 PID.MODE	2
9 PID.PV	90.3486
10 PID.SV	90

監視パネル

## ■ 自動操作とファイル出力

ダイナミック計算ではユニットのパラメータ変更など、画面から行う操作をあらかじめ設定しておき、自動実行する機能があります。モデル時刻や変数の値を条件として実行する操作を記述します。あらかじめ決められた運転を自動的に行わせることができます。また、ファイル出力機能により、実行結果をモデル時刻に対する変数の値として、ファイルに書き出すことができます。

```

[time = 00:01:00]
PID.MV = 120
[time >= 400:00:00]
& [Reactor.T >= 80]
Bfeed.FBtotal = 1
PID.MV = 80
[time >= 400:12:00]
PID.MODE = 2
PID.SV = 90
[time >= 400:00:00]
& [Bfeed.FBtotal >= 30]
Bfeed.FBtotal = 0
PID.MV = 1
PID.MODE = 80
[time >= 400:30:00]
PID.MODE = 1
PID.MV = 20
[time >= 400:00:00]
& [Reactor.T <= 40]
FREEZE "反応終了"
    
```

自動操作

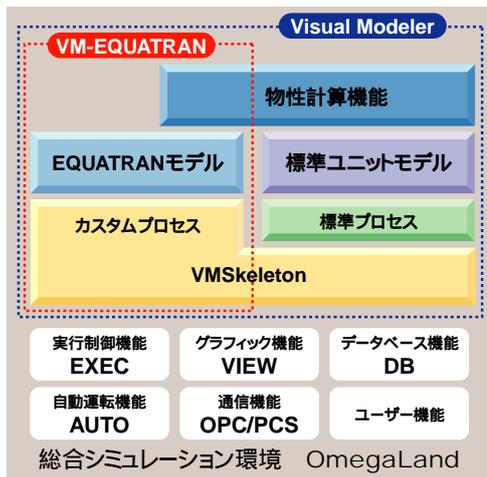
# 機能の比較



機能		EQUATRAN-G	VM-EQUATRAN	Visual Modeler
編集機能	テキストエディタ			
	PFD画面	×		
	ブロック作成ウィザード	×		
	標準プロセスユニットモデル	×	×	
	標準計装ユニットモデル	×	×	
モデル作成	EQUATRANコンバータ	×	×	
	EQUATRANインタプリタ			
	簡易C	×		
物性	物性計算機能	×	*1	
	物性データライブラリ	×	*1	
計算機能	インタプリタ実行			
	ダイナミック計算			
	定常状態計算			
	圧力流量バランス計算		×	
	ストリームの熱計算		×	
実行制御	初期状態	×		
	スナップショット・ステップバック	(実行制御機能がない)		
	タイムスケール変更			
	自動操作機能			
モニタ機能	トレンド・監視パネル			
	ストリーム表		×	
外部環境	OmegaLand環境	×		
	OPCインタフェース	×		
	COM/DCOMインタフェース	×		
出力機能	バランス表	×	×	
	ファイル出力			
	グラフ作成		*2	×

\*1 オプション扱い \*2 出力ファイルをEQUATRAN-Gでグラフ化可能  
 (注)EQUATRAN-GはEQUATRANによるモデル作成機能を行うための独立したソフトウェア製品です

## Visual Modelerとの関係



VMSkeletonはVisual Modelerの骨格部分です。  
 VM-EQUATRANはVMSkeletonが提供するカスタムプロセスの上にEQUATRANモデルを構築して実行します。物性計算機能はオプション扱いで、使用する場合と使用しない場合があります。  
 Visual ModelerにはこのVM-EQUATRANの仕組みも含まれていますが、右側の標準プロセスと標準ユニットモデルが内蔵部分です。標準プロセスでは、ストリームでの状態変数の計算や圧力流量計算が行われます。標準ユニットモデルは、蒸留塔、熱交換器、バルブなど標準で提供される詳細なユニットモデルです。

Visual ModelerおよびEQUATRANは三井化学(株)の登録商標です。  
 OmegaLandは(株)オメガシミュレーションの登録商標です。  
 VM-EQUATRANはDIPPR Project No.801 Databaseを使用しています。  
 DIPPRは米国AIChEの登録商標です。  
 その他、会社名、製品名などは一般に各社の商標または登録商標です。



## 株式会社オメガシミュレーション

〒169-0051 東京都新宿区西早稲田2-20-9 ウィン西早稲田ビル  
 TEL 03-3208-4921 FAX 03-3208-4911  
 E-Mail sales@omegasim.co.jp http://www.omegasim.co.jp

お問い合わせ先