XXXVIII. 最適化

編集 西村 肇*・大高 易男**

最適化の第1回レビューは、1964年（本誌第28巻10号）に最適化特集の中で行なわれた。第1回のレビューでは、計算機制御を除いては各単位操作の中における最適化問題のレビューが中心となっていた。

つぎの1967年第4号では、プロセスシステム工学の特集としてプロセスのシミュレーション、最適化、感度分析などが解説された。

今回のレビューは、この2つの特集を基礎とし、一方にシステム工学的な立場からの諸問題を、一方には各単位操作の中における最適化の問題について最近の研究を展望し、御紹介して戴いたものである。各単位操作の中で最適化の論文が比較的少ないと思われる分野については割愛し、拡散と反応操作に限りてレビューして戴いたことを御了解願いたい。また、短い時間で最新の情報を御紹介戴いた著者各位に感謝する次第である。

■ I. プロセスシステム工学と最適化

1. 展望[†]

西村 肇*

今回プロセスシステム工学を中心とするレビューを行なうことになった。これは、はじめ最適化のレビューとして企画されたものであるが、二、三の執筆の方々と相談しているうちに、最適化という枠にかならずしもとらわれずに、プロセスシステム工学の中でも最近特に発展が目ざましいいくつかの分野をえらんで報告してみようということになり、プロセスシステム工学を中心とす

るレビューというような形に落着いたものである。したがってこれはプロセスシステム工学に関する完全なレビューを意図したものではない。えらばれた項目も「構成の最適化」というような理論面での分類と、「計算機制御」というような技術面での分類が交錯しており、しかも網羅的ではない。たとえば、「システムの感度解析」とか、「システムの安定性解析」というような重要な項目も紙数の関係で割愛せざるをえなかった。

このレビューが以上のような性格のものであるし、ま

* Hajime Nishimura (正会員) 東京大学工学部化学工学科

** Yasuo Ohtaka (正会員) 日本揮発油(株) エンジニアリング本部

[†] 昭和47年8月28日受理

たプロセスシステム工学という学問が誕生間もなく、しかも発展変ぼうの絶え間ない分野であるので、はじめに、プロセスシステム工学の現状について簡単な展望をおこない、ここで取り上げた各項目について位置づけを行なってみたいと思う。読者諸賢のご参考になれば幸である。

プロセスシステム工学の形成

ここ数年のうちに、わが国ではプロセスシステム工学に関するすぐれた総説、成書¹⁻⁵⁾がつつぎに発表された。外国でも同様であった⁶⁻⁹⁾。これを見るとプロセスシステム工学は一体何であるかという点に関しては、研究者によって考えがさまざまである。これに関しては、それぞれの著作なり論文なりを通じて理解していただくことにして、ここでは、プロセスシステム工学という分野がどのようにして形成され、何を基礎にしているのかをまず説明しよう。

プロセスシステム工学の源流としては、「プロセス制御」と「オペレーションズリサーチ (OR)」の二つをあげることができる。このうち前者は、フィードバック制御の技術を流量、圧力、温度などの制御に適用することによって、プロセス全体を設定された条件のとおり正確に、しかも安定に運転することを目的とするものである。これに対し後者は、原料、市場などの環境条件に合わせて、プロセス全体の運営を最適にするような運転条件を見出すことを目的としている。つまり OR は運転条件を決め、プロセス制御はこれを実現する形になっている。

1955 年以降、わが国では化学プラントの計装化、自動化は急速に進み、特に石油化学系のプラントでは、プロセス制御はかなり早い時期に実用的に見て一応満足できるレベルに達したと考えられる。OR も、たとえば石油精製工業では、はやくから実用されて来た。ここでは、ガソリン、灯油、重油など各製品ごとの需要予想にもとづいて原油の買付計画、タンカーの配船計画、各装置の稼動計画などを線形計画法 (LP) を用いて最適に決定することがおこなわれて来た。

システム工学の目的が、システムに関する最適な計画を作り、これを安定に確実に実現することにあるならば、プロセスシステム工学は、1960 年代のはじめにはすでに存在していたといえるだろう。しかしながら、これだけならば、自動制御理論や OR 理論の化学工業への適用とはいいいえても、プロセスシステム工学という独自の分野の誕生とはいえないであろう。

プロセスシステム工学と呼べるためには、プロセス自体の理論的な把握という事が中心になって、制御の問題

も運営の問題も共通の基礎に立って論ぜられるようにならなければならないからである。

そのためには、化学工学の中心分野であるプロセス設計の分野が、制御や OR を中心とするシステム工学理論と本格的な接触をし、プロセス設計の考え方や方法がシステム工学的な考え方と方法で体系化され、統一されることが必要であったと思われる。

つまり、プロセス設計の分野で、システム工学的な最適設計の方法が確立される見通しができた時がプロセスシステム工学の誕生といえるだろう。

この時期は当然のことながら、化学工業の分野でかなり自由に計算機が利用できる見通しができた時期と一致している。

このような理由から、プロセスの最適設計または、プロセスの最適化というのがプロセスシステム工学の原点になっているといえるだろう。

プロセスシミュレーション

プロセス最適化に必要なものは、プロセスシミュレーションの技術と最適化の方法である。

プロセスシミュレーションをおこなうには、要素となる部分についての数学モデルを確立することと、これらを組合せてえられる連立方程式を解くための手法が必要になる。

数学モデルとしてはどの程度のものが要求されるかということは、プロセスシミュレーションが何に使われるかによってこととなるが、プロセスの最適設計に使うためには、化学工学に十分に基礎を置いた理論的定常モデルが必要となろう。既存プラントの最適運転のためには、非定常モデルを含めた正確なモデルが必要となるかも知れないが、この場合は、一般に適用範囲もせまくてよく、さらにプラントの実績データが使えるのでモデルは簡単になるであろう。

このようなモデルを組合わせてシステム全体の特性を求める場合、各モデルが非線形であったり、システムがリサイクル構造をもつ場合は、実際に解を求めることは容易でない。

これは非線形の連立方程式になるが、連立方程式を解く計算手順を決める問題と、くり返し計算の収束速度と収束の安定性が問題になる。個々の問題については、計算手順は人間が考えてもよいが、汎用シミュレータを作る場合は、システムと数学モデルの構造に応じて自動的に計算手順を決めるような方法が必要になる。これにはグラフ理論が非常に有効に使える^{1), 8)-10)}。

しかしながら収束性の問題は別であって、グラフ理論だけから速い安定な収束をする計算法を見出すことはで

きない。特別な形をした連立方程式には、有効な方法が知られているが、一般に通用する規則はまだ十分に明らかにされていないようである。

最適化の方法

最適化の理論と方法はシステム工学の中でも特に研究が盛んな分野である。たとえば、MP や DP がそのよい例である。これらはその適用対象にかなり限界はあるものの、問題の本質を明らかにするようすくれた方法であるといえることができる。

システムモデルと最適化の方法というのは、無関係に独立なものと考えるべきでなく、システムの構造、モデルの性質からえらぶべき最適化の方法がきまり、逆に最適化の方法から、モデルの性質、評価関数の形に関して要求が出て来るという性質のものであろう。このようにして最適化の方法が問題の性格によくマッチした時、目覚ましい成果が得られるのである。

最適化の方法としては実にさまざまな方法があるが、プロセスシステムに適した方法として特に、階層的最適化の方法に注目すべきであると思う。これはシステムの最適化問題を、各サブシステムの最適化問題と、システム全体としての最適化問題との二つのレベルに分け、二つのレベルの間の協調を取りながら最適化を進める方法で、プロセスシステムのように最適化すべき変数が多く、システムの構造が複雑な場合に適していると思われる。この種の方法にも幾通りものやり方がある。

プロセスシステム工学の理論的發展

一般に理論体系を拡張発展させる原動力は二方面に分けて考えることができると思う。一つは純粋に学問的なものであって、現在の理論の制約となっている諸条件をつぎつぎに取り払ってゆこうとする努力である。たとえば、線形から非線形への拡張、定常系から非定常系への拡張、確定系から不確定系への拡張などである。プロセスシステム工学でも、たえずこのような努力がつつけられている。

しかし一般にX系から非X系への拡張という点で気を付けなければならないことは、X系は具体的内容をもっているが、非X系は具体的内容がないからこそ非X系なのであって、このままでは理論的取扱いが成功するはずがないということである。

理論を進めるためには非X系の中から、何か具体的な内容をもった部分をすくい出して来る必要がある。不確定系の中に確率分布という概念を導入し、非定常系の中に定常確率過程という概念を導入するのはこのためであ

る。

もちろんこのような抽象化をおこなってもそのあとの理論の展開は、もとのX系にくらべてはるかにむずかしく、具体的な結論がえにくいことは覚悟せねばならない。したがって非X系への理論の拡張にあまり大きな期待を掛けることは禁物である。

しかしながら、不確定要素をもつプロセスシステムの最適設計の理論においては不確定性要素の性格をうまく限定して、近似的に理論をすすめている高松らの仕事¹⁰⁾は実際に大いに参考になろう。

システムの拡大

理論を拡張させるもう一つの契機は、技術の目的から見た実際上の必要性である。プロセスを最適に設計するという技術目的の観点から現状のプロセス最適化技術を見てみると、たとえそれが完全におこなわれてもまだ不十分な点があることに気づく。

一つは評価関数の中のパラメータの取り方である。製品の価格、特に中間製品や廃ガスの価格づけ、隣接プロセスからスチームなどを導入した場合の用役費の評価などが問題になる。

これは広い意味でいえば、全システムを注目するシステムと環境に分けた時、環境の条件をあらわすパラメータである。しかしながら、システムとその環境への分割という方法は、つねに便宜的なものであって、全体を本当に最適化しようとするならば、今まで環境と考えていたものまでも、システムの中に含めて最適化を考えねばならない。このように最適化を追求すればどうしてもシステムの範囲はひろがって来ざるをえない。

いくつかのプロセスの間で中間製品や用役が受け渡しされる場合、これらに価格をつけて各プロセスを最適化するのには便宜的な方法であって、本当はコンビナート全体をシステムとして最適化せねばならない。

コンビナート全体の最適計画に関してもいくつかの仕事が発表されている⁸⁾。これらは、最終製品の需要量と価格を環境条件にして、全体が物質収支をみたし、しかも最適になるように各プロセスの規模を決定することを目的としており、方法としては、普通LPが用いられる。

しかしながらこのような拡張の仕方は、やはり観念的であって、実際の観点から見るとはなはだしく不十分であるように思える。それはシステムがコンビナートぐらい大きくなると、その計画にあたっては一つには、需要構造や原料条件などかなり長いタイムスケールでおこる変化を予測することなく計画を進めることはできないということであり、もう一つには、コンビナートが大きけ

れば、それが地域社会やまわりの自然環境に与える影響を予測することなく、計画を進められないということである。

このようにして社会経済的な予測をふくめ自然環境の予測をおこなう環境システム論がこれからのプロセスの計画には重要になるであろう。

システム構造の最適化

実際の技術目的から見た理論への要請として、最適なシステム構造を理論的に決定する方法はないかという問題がある。実際のプロセス最適化では、経験を積んだ人が最適と思われるフローパターンをいくつかえらび、それぞれについて最適化をおこなったあとで、相互の比較をおこなって最適なパターンを決定している。

そこで最適なフローパターンを決定するための有効な理論的方法はないかということが問題である。この問題には二つのアプローチがある。一つは特にしばしば問題となるようなシステムについて、それを近似的に表わししかも理論的取扱いが簡単になるような理想的システムというものを考え、この理想的システムについて、最適な構成を具体的な規則の形で示す方法である。これは熱交換系や蒸留系ではできている。これに対し、こういう特別な近似をおこなわずに一般的な形で問題を扱おうとするアプローチがある。これは対象とするシステムに制限がないことが利点であるが、具体的な結論を得にくいという難点がある。

コンピューターコントロール

コンピューターコントロールという分類は、技術の目的による分類でもなく、学問の性格による分類でもなく、技術の形態による分類というべきであろう。

したがってコンピューターコントロールが何を目的にしているのかは、はじめから決まっているわけではない。一番単純な機能はデータロギングによるプラントの管理であり、少し進んだ機能としては、それまでのアナログ計器で行なわれていたプラント中のフィードバック制御機能を計算機によって集中的に代替するものがある。さらに進んだ機能としては、企業の MIS (Management Information System) と関係を取りながら、プラントの最適運転条件を決定してゆくものがある。

プロセスシステム

プロセスシステムにおけるプロセスとは何かというのはむずかしい問題である。常識的には、蒸留、反応などの単位操作から作られるシステムをプロセスと呼ぶわけだが、プロセスシステム工学の対象が広がるにつれて、もっと一般性のあるとらえ方が必要になるだろう。

その一つとしてプロセスとは、反応、拡散、流動、伝熱などの物理化学的な変化過程だと考え、このようなプロセスが組み合わさってできるシステムの問題を取扱うのがプロセスシステム工学だという考えができる。この考えによれば、熱と物質の流れであらわされるシステムはすべてプロセスシステムということになる。その中には化学プロセスばかりでなく、物質の循環をあらわす自然環境システムや、経済活動における物の流れをあらわす投入産出分析も入って来ることになる。

つまりプロセスシステムというのは、機械関係のシステム、土木関係のシステムというような便宜的な分類の中の一項目なのではなく、論理的な手続きの流れを設計するのが論理システムであるのと同じような意味で、原理的な分類であるといえよう。そして物質と熱の流れのシステムを解析したり設計する方法としてさらに発展させる必要がある。

引用文献

- 1) 矢木栄, 西村隆:「化学プロセス工学」丸善 (1969)
- 2) 松原正一:「プロセスシステム工学」朝倉書店 (1970)
- 3) 高松武一郎, 市川淳信編:「プロセス制御ハンドブック」朝倉書店 (1971)
- 4) 高松武一郎:「プロセスシステム」日刊工業新聞 (1972)
- 5) 市川淳信他:「プロセスシステム工学」, 化学工学, 33, p.216, 642, 751, 1213, (1969)
- 6) Himmelblau, D.M. et al: "Process Analysis and Simulation," John Wiley and Sons (1968)
- 7) Rudd, D.F. et al: "Strategy in Process Engineering", John Wiley and Sons (1969)
- 8) Нагиев, М.Ф.: теория рециркуляции и оптимальности химических процессов наука (1970) (化学プロセスのリサイクルおよび最適化の理論)
- 9) Наятмани, К.: Analyse und Steuerung von Prozessen der Stoffwirtschaft, Akademie Verlag (1971)
- 10) 高松武一郎他:「パラメータの不確定性を含むプロセスの合理的設計について」, システムと制御, 18, No.2, p.141 (1972)