節すればよい。 $\theta = \theta^*$ とするためには、(11)～(13) 式から y および dt を消去した式

$$\frac{d\theta}{d\xi} = \frac{[\beta(\theta - \theta_0) + r(\theta - \theta_w)][\alpha\xi^2 + N_f\xi^2 + \xi(1 - \xi) + N_r]}{\varepsilon y_0} - \left(\frac{\partial}{\partial \xi}\right)\xi \quad (14)$$

において、 $d\theta/d\xi = 0$ でなければならない。 $\theta_w = \theta_0 = 0$ のときには、 $\theta = \theta^*$ において、

$$y_0 = [(\beta + r)\theta^*/\delta\xi^2][(\alpha + N_f - 1)\xi^2 + \xi + N_r] \quad (15)$$

したがって、反応装置から排出されるガス中の CO_2 および CO 組成 (y_{CO_2} および y_{CO}) を検出し、

$$\xi^3 = \left(1 - \frac{n_0}{n_{\text{CO}}}\right) = \left(\frac{FM_0}{2m\rho_g\pi L^3x}\right) \int_0^t (y_{\text{CO}_2} + y_{\text{CO}}) dt \quad (16)$$

によって、 ξ を算出し、(15) 式にもとづいて供給ガス中の酸素濃度 y_0 を操作すれば、 θ は θ^* に保たれることになる。このような制御系のアナログ計算機による模擬回路を図 8 (b) に示す。関数発生器 FG 2 には (15) 式の関係を設定しておく。この回路を反応装置の動特性を模擬した図 8 (a) の回路に接続する

図 9 供給酸素濃度による温度制御

ことによって、このような制御系を採用した場合の非定常状態が求められる。計算の結果を図 9 に示す。 $0 < t < t_1$ が $y_0 = y_{\text{air}}$ とする範囲であり、ここで温度が急激に上昇する。 $\theta = \theta^*$ (ここでは、許容温度上限を 600°C とする) に到達すると ($t = t_1$)、 y_0 を (15) 式にしたがって操作することによって、 $\theta = \theta^*$ に保ち得る。 $t = t_2$ において $y = y_{\text{air}}$ になるので、それ以後は空気を供給するが粒子内拡散抵抗のため反応速度が小さく θ は漸次低下して行く。なお y_0 を y_{air} より大きくすることが可能な場合には、再生反応期間全体にわたって、つねに (15) 式を満足するよう y_0 を操作すれば、 θ はつねに θ^* となり、再生反応完結時間は最小となることは明らかである。

4 結 論

反応開始初期に極めて激しい発熱を伴う固体触媒再生反応の温度制御法として、反応開始初期における化学反応速度に直接影響をおよぼす供給酸素濃度を操作変数とする方法を試みた。まず、ガス境膜抵抗および粒子内拡散抵抗を分離したコーク燃焼反応の速度を測定し、その速度が酸素濃度に関して 1 次であり、活性化エネルギーが 25.7 kcal/g-mol であることを見出した。この化学反応速度とさきに求めた酸素の粒子内拡散速度にもとづいて、触媒再生反応装置の非定常状態を理論的、実験的に解析しモデル化を行なった。そして、系をある温度に維持するために必要な供給ガス中の酸素濃度とコーク反応率との関係を導いた。ついでこのモデルをアナログ型電子計算機によって模擬し、このような制御法を適用した場合の、再生反応完結時間を最小にする操作方式を確立した。

本研究の費用の一部は文部省科学研究費 (試験研究) および東洋レーヨン科学技術研究助成金によった。ここに記して感謝の意を表する。

トレーサー応答の計算機による処理方法

(昭和 42 年 10 月 5 日受理)

堀田 和之・尾添 紘之・井伊谷 鋼一^{*1}

反応器や吸収塔などの化学装置の性能を予言するためには、まずプロセス流体の装置内での滞留時間分布を知ることが必要である。その数学的な表現には、従来拡散モデルとか完全混合槽列モデルなどの簡単な線形モデルが使われ、成功をおさめてきた。しかし、これらの装置を厳密に制御しようとするような場合には、これらの初歩的なモデルは充分ではなく、もっと高級な数式モデルが要求される。

本報では、まず従来の諸モデルの性質を展望し、それらの多くを包括するような二、三の新しい形の線形モデルを提案した。次に、それらモデルのパラメータをトレーサー応答実験のデータを用いて決定する方法を詳細に論じた。このとき、パラメータ決定にこれまで使われてきたものとはやや性質の異なった滞留時間密度曲線のモーメントを導入し、モデルが応答の高周波特性をよく近似するようにした。なお本報の議論には終始電子計算機が使用できることを前提としている。

1 緒 言

反応器をはじめとし、精留塔、吸収塔あるいは熱交換器等々、

異なった流体間の直接、間接の相互接触を促進することによって、プロセスが効率よく進行するような化学装置においては、装置内での流体の流動・混合の様子を知ることが重要になる。これを解析的な方法で推定することは多くの場合むづかしく、普通はトレーサー応答試験などによって、滞留時間分布という形で実験

^{*1} Kazuyuki HOTTA, Hiroyuki OZOE, Koichi IINOYA 京都大学工学部化学工学教室：京都市左京区吉田

的に決定される。

線形な移動現象については、滞留時間分布、特にインパルス状またはステップ状に注入されたトレーサーに対する応答に相当する滞留時間密度曲線、または滞留時間分布曲線を知ることによって、装置内で生起する現象を一義的に記述することができる。しかし、流動、混合に伴って1次以外の反応のような非線形現象の起こる場合には、滞留時間分布を知るだけでは現象の結果を一義的に決定することはできず、さらに装置内での流体分子の微視的な混合状態を知る必要がある。しかし、その場合にも、もし、滞留時間分布さえわかれば、complete segregation と maximum mixedness¹⁾ という、微視的混合状態に関する1対の両極端をなす場合を想定することによって、実際に起こりうる現象の限界を計算することができ、その限界間の幅が十分に狭い場合には、工学的には使用しうる結果を得ることになる。

このように、滞留時間分布は装置設計上重要な役割を果たすものであるが、それは装置内で実際に生起する現象から、反応あるいは物質や熱の移動という部分を取除いた純粋な流動、混合現象をあらわすものであるから、それが非線形性を示すと考える根拠は見当らない。事実、現在までこの現象を種々の簡単な線形モデルで表現して成功をおさめてきている。

モデルの形が簡単であることは、もちろん好ましいことであるが、そのパラメータを実験データから決定するのに手計算によった時代と、電子計算機を駆使しうる現在とでは、モデルの複雑さやデータ処理の方法に多少の違いが生ずるのは当然で、より精度の高いモデルで、より良い設計を目指すことができる。

本報は、計算機の使用を前提として、トレーサー応答実験から滞留時間分布をあらわす線形モデルを決定するための新しい方法および新しい形のモデルの提案を目的としている。

2 従来の方法の展望

装置内の流動状態に関し従来用いられた最も簡単なモデルは、完全混合および押し出し流れという二つの理想的なものである。滞留時間密度関数のラプラス変換を装置の流動、混合特性をあらわす伝達関数と考えると、これらのモデルはそれぞれ

$$G_1(s) = K/(1+\tau s) \quad (1)$$

$$G_d(s) = Ke^{-\tau s} \quad (2)$$

であらわされる。ここに τ は流体の装置内での平均滞留時間で、

$$\tau = V/q \quad (V: \text{容積}, q: \text{体積流量}) \quad (3)$$

である。実際の状態はこれら二つの中間にあると考えると

$$G_{1d}(s) = Ke^{-Ls}/(1+Ts) \quad (4)$$

$$L+T=\tau \quad (5)$$

という形のモデルが、式(1)や式(2)よりは現実的なモデルとなることが推定され、事実、プロセス制御の分野ではこのモデルがよく使用される。しかし滞留時間分布をあらわすためには、従来式(4)よりはむしろ拡散モデルおよび完全混合槽列モデルが用いられてきた²⁾。前者はその微分方程式が、 c を濃度、 x を空間座標とすると

$$\partial c/\partial t = D\partial^2 c/\partial x^2 - u\partial c/\partial x \quad (6)$$

であらわされる2パラメータ・モデルである。また後者は、実際の流動状態を、式(1)の形の同一の完全混合槽が直列につながれた形のモデルで近似するもので、次式で示される。

$$G_{mt}(s) = K/(1+Ts)^n \quad (7)$$

このモデルは $n=1$ の場合として式(1)を、また $T \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$ の場合として式(2)を含んでいる。

式(6)および(7)のパラメータは、従来滞留時間密度曲線(以下ではインパルス応答と呼ぶ)の低次モーメントを用いて決定されてきた。したがって、これらは必然的に系の低周波モデルであり、その低周波特性、たとえば反応器の何らかの条件変化に伴う最終的な収率の変化や、その大体のおくれ時間を推定するには適している。しかし、反応器の過渡状態を厳密に制御するような場合には、もっと高周波部での精度のよいモデルが要求される。このためには滞留時間分布をあらわすモデルにも、もっと高級なものを、もっと洗練された方法で決定して使用しなければならない。

本報ではそのような方法を論ずるが、その場合式(6)で与えられるような、いわゆる分布定数モデルではなくて、式(7)のような集中定数モデルを検討する。その理由は、実際の現象が装置の空間座標に依存するものであっても、大抵の実用目的には装置の出入口間での変量の対応を知れば充分であり、かつ s の超越関数を含む分布定数モデルに較べて、集中定数モデルは電子計算機、特にアナログ計算機での取扱いが、格段に容易であるからである。

3 新しい形のモデル

一つの装置の出口を通過する各流体粒について、それが装置内に留った時間、すなわち滞留時間 l の分布を考える。流出流体粒の中、滞留時間が l より短いものの割合を $f(l)$ とすると、 $F(l)$ は滞留時間分布関数で、 l の単調増加関数である。一方 $F(l)$ を実際に測定する一手段として、時刻 $t=0$ において装置入口流体の何らかの特性をステップ状に変化させ、以後時間 $t=t$ において、出口で新しい特性を持つ流体粒の割合を観測するとする。これは滞留時間が t より短い流体粒の割合を観測したことに他ならないから、観測結果は $f(t)$ を与えているはずである。このことから、トレーサーによる装置のステップ応答はつねに単調増加であることがわかる。

この事実より、装置の流動・混合特性をあらわす伝達関数 $G_P'(s)$ は次に示す $G'_{MN}(s)$ の形のモデルでうまく近似表示できることがわかる。

$$G'_P(s) \approx G'_{MN}(s) = \sum_{i=1}^N [K_i e^{-L_i s} / \{(1+T_i s) \prod_{j=1}^{n-1} (1+\lambda_{ij} T_j s)\}] \quad (8)$$

ここで、 K_i , L_i および T_i は正の実数で、 $1 \geq \lambda_{ij} > 0$, $\sum_{i=1}^N K_i = 1$ である。 T_i が複素数となる場合を除外したのは応答が単調なことによる。 N は装置内を通過する流体の、性格を異にする別個な流路の数であると考えることができ、顕著な短絡流路や“よどみ”のある場合を除けば大部分の場合 $N=1$ となるものと推定される。また、管形反応器の場合のように、応答に純粋なむだ時間が含まれるような場合をも、普通の s に関する多項式の比の形の伝達関数で表現すると無理を生ずるので、[]内の各項に純むだ時間 $e^{-L_i s}$ を付加した。なお[]内の各項の分子に s の多項式

1) T. N. Zwietering, *Chem. Eng. Science*, 11, No. 1 (1959).

2) O. Levenspiel, "Chemical Reaction Engineering", John Wiley & Sons Inc., New York (1962), p. 501.

を含まないことについては、充分な根拠がないが、この各項が上述のようにそれぞれ別個な流体流路に対応するとすれば、それをあたかも一本の管路のごとく考えることができ、その場合、たとえば式(6)で与えられるような混合流動については、それが式(8)の各項のような分子に s を含みぬ伝達関数によって精度よくあらわせることが示されている^{*)}。

さて、実際には装置の流動・混合特性を式(8)のようなかなり一般的な形に仮定しても、その数多いパラメーターを合理的に決定することはできない。そこで次のように前提する。

まず注目する装置では $N=1$ であるとする。さらに実際の応答の純むだ時間に相当する量 L ($N=1$ であるから suffix を省略)は既知なものとする。すなわち、図1において入力 $y(t)$ に対する応答が $x'(t)$ であるとする、それらがはじめて立ち上がる時刻の差を L とし、この装置の正しい伝達関数 $G'_P(s)$ からこの純むだ時間を取除いた部分 $G_P(s)$ に着目する。すなわち、

$$G_P(s) = G'_P(s)/e^{-Ls} = \mathcal{L}[x(t)]/\mathcal{L}[y(t)]^{**}$$

以下で“系の伝達関数”等という場合はこの $G_P(s)$ を指すことと約束する。したがって、 $G_P(s)$ のモデル $G_{M1}(s)$ は以上の前提により

$$G_{M1}(s) = K/\{(1+Ts)^{n-1} \prod_{j=1}^{n-1} (1+\lambda_j Ts)\} \doteq G_P(s)^{**} \quad (8')$$

後に述べるように、その系のおくれ次数 n を応答実験によって推定することは可能である。 n が高々3程度であれば、モデルを式(8')の形に仮定し、パラメーターを決定することができるが、普通 n はかなり大きく、式(8')のモデルでは、パラメーター数が多くなって、それらを決定するのがむづかしくなる。そこで、 $G_P(s)$ のモデルとしてもっとパラメーター数の少ないものを考案する。

図1 むだ時間 L と $G_P(s)$ の出力 $x(t)$

そのために、まず従来広く使われてきた式(7)の形のモデルを考察すると、それは式(8')で $\lambda_1=\lambda_2=\dots=\lambda_{n-1}=1$ とした場合、すなわちモデルの n 個の極がすべて $s=-1/T$ に集中した特殊な場合であることがわかる。したがって式(7)のモデルをもう少し一般化することを考えるとすれば、極めて自然に次の二つのモデルが提案される。

その一つは、モデルの極を $s=-1/T$ 以外の点へも分散させるとき、それを n 個の異なった点へ一つずつ規則的に配分することである。一般に動特性の表示には、その周波数軸に対数目盛を使用することからも明らかなように、極の s 平面の原点からの距離の相対比が重要な意味を持つ。そこで極を s 平面の実軸上に等比級数的に配布すると次のモデルを得る。

$$G_{gn}(s) = K/\{(1+Ts)^{n-1} \prod_{j=1}^{n-1} (1+\lambda_j Ts)\} \quad (0 < \lambda \leq 1) \quad (9)$$

これは K 以外に T 、 n および λ という三つのパラメーターを持つ3パラメーター・モデルである。 λ がかなり小さいときには、 j の増加とともに極 $s=-1/(\lambda T)$ は急激に原点より遠距離、動特性にあまり影響を与えない。そのときには、式(9)で $n \rightarrow \infty$ としてもその性質が大きくは変化しない。かくして

$$G_{g\infty}(s) = K/\{(1+Ts)^{\infty} \prod_{j=1}^{\infty} (1+\lambda_j Ts)\} \quad (0 < \lambda < 1) \quad (9')$$

という2パラメーター・モデルを得ることもできる。式(9)は $\lambda=1$ の場合として式(7)のモデルを含むので、当然式(1)および式(2)をもその特殊な場合として含んでいる。

次に式(8')の n 個の極を、 $n_1+n_2=n$ となるような n_1 個と n_2 個の組に分けて、2カ所に配置することを考えると

$$G_{m2}(s) = K/\{(1+T_1s)^{n_1}(1+T_2s)^{n_2}\} \quad (T_1 \geq T_2) \quad (10)$$

という4パラメーター・モデルを得る。このモデルは $\lambda=T_2/T_1=1$ の場合式(7)に、また $\lambda \rightarrow 0$ 、 $n_2 \rightarrow \infty$ の場合には式(4)よりもっと一般的な式に帰着するので、結局式(1)、(2)、(4)および(7)等、従来使用されたすべてのモデルをその特殊な場合として含むが、式(9)を含むことはできない。

さらに式(9)および式(10)を包括するモデルとして

$$G_{gm}(s) = K/\{(1+Ts)^{n_1} \prod_{j=1}^{n_2} (1+\lambda_j Ts)\} \quad (\lambda > 0) \quad (11)$$

を考察することができるが、後述するようにこのモデルは、そのパラメーターを決定しにくいという弱点を持っている。

4 モーメントと累積率

従来、モデルのパラメーターの決定には、系のインパルス応答 $g(t)$ のモーメント a_k または平均値まわりのモーメント c'_k が使われた。

$$a_k = \int_0^{\infty} g(t) t^k dt \quad (12)$$

$$c'_k = \int_0^{\infty} g(t) (t - a_1/a_0)^k dt \quad (13)$$

ここではむしろ $g(t)$ の累積率(cumulant) c_k を用いる。それは $\mathcal{L}[g(t)] = G_P(s)$ とすると

$$\log G_P(s) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (-s)^k / k! \quad (14)$$

で定義され

$$\left. \begin{aligned} c_0 &= \log_e a_0 \\ c_1 &= a_1/a_0 \\ c_2 &= c_2' = a_2/a_0 - (a_1/a_0)^2 \\ c_3 &= c_3' = a_3/a_0 - 3a_1a_2/a_0^2 + 2(a_1/a_0)^3 \\ c_4 &= c_4' - 3c_2'^2 = (a_4/a_0) - 4(a_3a_1/a_0^2) + 12(a_2a_1^2/a_0^3) \\ &\quad - 3(a_2/a_0)^3 - 6(a_1/a_0)^4 \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

の関係式の成立することは統計学との対応より明らかである。 c_k を用いる理由は、それが任意の伝達関数から計算され、かつ以下に述べるように実験による測定も容易であるからである。

いま系 $G_P(s)$ への任意の入力を $y(t)$ 、出力を $x(t)$ とし、それらのラプラス変換を $Y(s)$ 、 $X(s)$ とすると

$$X(s) = G_P(s) \cdot Y(s) \text{ または } \log G_P(s) = \log X(s) - \log Y(s) \quad (16)$$

したがって、 $x(t)$ のモーメントおよび累積率をそれぞれ a_k および c_k で示し、 $y(t)$ のそれらについても同様の表記法を用

3) 堀田和之, 化学工学, 28, 577 (1964).

*2 $\mathcal{L}[x(t)]$ は $x(t)$ のラプラス変換をあらわす。

*3 トレーサー応答においては $K \equiv 1$ であるが、ここでは K が1の一般の場合をも含ませるため K を残す。

いと,

$$c_k = x c_k - y c_k \quad (17)$$

$x(t)$, $y(t)$ が図1のようにモーメントを持つ信号であれば, それらモーメント $x a_k$ 等より式 (15) により $x c_k$ 等を求めれば式 (17) により $g(t)$ の c_k が求められる。

$y(t)$ がステップ関数である場合には, まず入力 $y(t)$ が正しいステップ関数であるとし, その出力は系のステップ応答 $f(t)$ である場合を考える。今の場合, $f(t)$ は当然微分可能で

$$g(t) = df(t)/dt \quad (18)$$

が成立する。この時 a_k が次のようにして求められる。

$$\begin{aligned} \int_0^\infty t^{k-1} [f(\infty) - f(t)] dt &= (t^k/k) \{f(\infty) - f(t)\} \Big|_0^\infty \\ &+ (1/k) \int_0^\infty t^k (df/dt) dt = (1/k) \int_0^\infty t^k g(t) dt = a_k/k \\ \therefore a_k &= k \int_0^\infty t^{k-1} [f(\infty) - f(t)] dt \quad (k \geq 1) \end{aligned} \quad (20)$$

$$a_0 = f(\infty) \quad (21)$$

また, もし $y(t)$ が正確なステップ関数でないときは, 図2に示すように, この $y(t)$ を伝達関数 $I(s)$ を持つ仮空の系のステップ応答と考える。すると $x(t)$ は $[I(s) \cdot G_P(s)]$ という系のステップ応答になり, 上述の方法で $I(s)$ および $I(s) \cdot G_P(s)$ の累積率を求め, それらをそれぞれ $i c_k$ および $i p c_k$ とすれば

$$c_k = i p c_k - i c_k \quad (21)$$

図2 不完全ステップ入力の処理

さて, モデルのパラメーターを決定するには, その数に等しい数の c_k ($k=0, 1, 2, \dots$) を測定しなければならないが, 普通, $k \geq 2 \sim 3$ での c_k は実験によっては正確に求めにくい。それは式 (12) や式 (20) の積分を数値的に実行するとき, t^k または t^{k-1} という項が t の急激な増加関数となり, 応答の末尾部の微小な誤差が結果に大きな影響を与えるからである。そこで $g(t)$ の代りに $g(t)e^{-\sigma t}$ ($\sigma > 0$) のモーメントおよび累積率を考え, それらを a_k および r_k とすれば, これらは a_k , c_k より精度よく求められる。かつ

$$\mathcal{L}[g(t)e^{-\sigma t}] = G_P(s+\sigma) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k (-s)^k/k! \quad (22)$$

$$\log G_P(s+\sigma) = \sum_{k=0}^{\infty} r_k (-s)^k/k! \quad (22')$$

であるから, 伝達関数からも直接計算できる。なお α_k や r_k は a_k や c_k に比べて, 系のより高周波部での特性を代表する量であることも証明されている⁴⁾。

いま実際の $G_P(s)$ が式 (23) の形の n 次おくれ系であるとする。

$$G_P(s) = K / \prod_{j=1}^n (1 + T_j s) \quad (23)$$

この時, 式 (22') を参照すると

$$r_1 = \sum_{j=1}^n \{T_j/(1+T_j\sigma)\} \quad r_2 = \sum_{j=1}^n \{T_j^2/(1+T_j\sigma)^2\}$$

となる。そこで

$$n_{eq}(\sigma) = r_1^2/r_2 \quad (24)$$

という量を定義すると, 今の場合

$$n_{eq}(\sigma) = \left[\sum_{j=1}^n \{T_j/(1+T_j\sigma)\} \right]^2 / \sum_{j=1}^n \{T_j^2/(1+T_j\sigma)^2\} \quad (25)$$

$$\therefore \lim_{\sigma \rightarrow \infty} n_{eq}(\sigma) = n \quad (26)$$

という性質がある。実際には実験応答 $x(t)$ を使って $x(t)e^{-\sigma t}$ の累積率を計算するのに σ をあまり大きくすることはできない。それは, $x(t)$ の初期には図3に示すように信号値が小さくて高周波ノイズに汚されている部分が多少とも存在し, この期間に $e^{-\sigma t}$ があまり小さな値にまで減少してしまうようであると, 実測される累積率が系に関する有効な情報を与えなくなるからである。しかし, もしノイズ等に関する諸条件を考慮して σ に許しうる最大値 σ_h を定め得たとすると, 式 (25) の $n_{eq}(\sigma)$ は σ とともに単調に変化するので, $n_{eq}(\sigma_h)$ および $\sigma < \sigma_h$ での $n_{eq}(\sigma)$ を使って外挿法によって n の推定値 n_{est} を計算することができる。以下では, この n_{est} を n の近似値として使用する。

図3 σ の上限に対する考察

次に式 (23) については

$$c_1 = \sum_{j=1}^n T_j, \quad c_2 = \sum_{j=1}^n T_j^2, \quad c_3 = 2 \sum_{j=1}^n T_j^3 \quad (27)$$

であるから, 時定数 T_j の平均値 $\bar{T}$ は

$$\bar{T} = \sum_{j=1}^n T_j/n \doteq c_1/n_{est} \quad (28)$$

また時定数の分散 v_T は

$$v_T = \sum_{j=1}^n (T_j - \bar{T})^2/n = (c_2 - c_1^2/n)/n$$

c_1 および n を一定としたとき v_T はただ一つの時定数が c_1 に, 他が0に接近した極限で最大値 v_{Tmax} となるので, この値を使って v_T を無次元化したものを μ_2 とすると,

$$\mu_2 = n \{ (1/n_{eq}) - (1/n) \} / (n-1) \quad (29)$$

ただし, $n_{eq} = n_{eq}(0) = c_1^2/c_2$ とする。全く同様に

$$s_T = \sum_{j=1}^n (T_j - \bar{T})^3/n$$

という量を s_T の最大値で無次元化した量を μ_3 とすると

$$\mu_3 = \frac{n^2}{n_{eq}(n-1)(n-2)} \left[\frac{1}{n'_{eq}} - \frac{3}{n} + 2 \frac{n_{eq}}{n^2} \right] \quad (30)$$

$$\text{ただし} \quad n'_{eq} = 2c_1 c_2 / c_3 \quad (31)$$

μ_2 は $1 \geq \mu_2 \geq 0$ の変域を持ち, $G_P(s)$ の時定数のばらつきの度を与える。一方, μ_3 は $1 \geq \mu_3 \geq -1/(n-1)^3$ の変域を持ち, $G_P(s)$ の時定数が平均値まわりに対称に分布するとき0, 平均値より大きい時定数の多いとき負となり, その逆の場合に正となる。

5 パラメータの決定

本報で用いる累積率は伝達関数との関係が明確であるから, モ

デルの伝達関数について、その累積率をパラメーターの関数として一般的に表すことができる。それらを実験から得た実際の c_k と等置して解けばパラメーターが決定される。 c_k の代りに r_k を用いると、式 (14) と式 (22') の比較によってわかるように、 $G_P(s)$ のモデルではなくて、 $G_P(s+\sigma)$ のモデルができるので、その中で $s \rightarrow s-\sigma$ の置換をすれば $G_P(s)$ のモデルを得る。

たとえば、かなり一般的なモデルである式 (11) の $K=a_0$ 以外の四つのパラメーターは次式を解けば得られる。

$$\left. \begin{aligned} n_1 T + (1-\lambda^{n_2}) \lambda T / (1-\lambda) &= c_1 \\ n_1 T^2 + (1-\lambda^{2n_2}) \lambda^2 T^2 / (1-\lambda^2) &= c_2 \\ 2n_1 T^3 + 2(1-\lambda^{3n_2}) \lambda^3 T^3 / (1-\lambda^3) &= c_3 \\ n_1 + n_2 &= n \doteq n_{\text{est}} \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

これを解析的に解くことはむづかしく、たとえば最急降下法等の探索法を用いて電子計算機によって解かねばならない。このような高級な探索法を用いれば、インパルス応答が二つ以上の峰を持つような系、すなわち式 (8) で $N \geq 2$ としなければならないような場合にも、そのかなりの数にのぼるパラメーターを決定することができる。しかし、このような方法はその収束値が真の解であるかどうかを検証する方法のないこと、およびたとえ電子計算機を用いても試行錯誤の過程を含む場合には、計算時間がしばしば毎り難い長さとなること等の理由により、できれば避けられるべきである。そこで、ここではパラメーターがもっと確実に定まる場合のみを考察する。

最初に式 (10) のモデルを考える。パラメーターの決定式は

$$\left. \begin{aligned} K &= a_0 \\ n_1 + n_2 &= n \doteq n_{\text{est}} \\ n_1 T_1 + n_2 T_2 &= c_1 \\ n_1 n_2 \{ (T_1 - T_2) / (n_1 T_1 + n_2 T_2) \}^2 / (n_1 + n_2 - 1) &= \mu_2 \\ \frac{n_1 n_2 (n_2 - n_1)}{(n_1 + n_2 - 1)(n_1 + n_2 - 2)} \left[\frac{T_1 - T_2}{n_1 T_1 + n_2 T_2} \right]^3 &= \mu_3 \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

各式の左辺は式 (10) のモデルについて計算された、右辺に相当する量である。この連立方程式は $T_1 \geq T_2$ の仮定があるので、第4式より $T_1 - T_2$ を一意的に解くことができ、全体が解析的に解かれる。すなわち、

$$\left. \begin{aligned} n_1 &= (n_{\text{est}}/2) [1 \pm (n_{\text{est}} - 2) \mu_3 / \sqrt{4(n_{\text{est}} - 1) \mu_2^2 + (n_{\text{est}} - 2)^2 \mu_3^2}] \\ n_2 &= n_{\text{est}} - n_1 \\ T_1 &= c_1 [1 \pm n_2 \sqrt{(n_{\text{est}} - 1) \mu_2 / (n_1 n_2)}] / n_{\text{est}} \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

$T_1 > T_2$ であるから、 $n_1 < n_2$ のとき $\mu_3 > 0$ となる事実を利用し、 n_1 の式の複号は

$$(n_2 - n_1) \mu_3 > 0 \quad (35)$$

となるように選ばれよ。

次に式 (9) の $G_{\text{gn}}(s)$ のパラメーターを決定するための方程式は

$$\left. \begin{aligned} K &= a_0 \\ n &= n_{\text{est}} \\ (1-\lambda^n) T / (1-\lambda) &= c_1 \\ (1-\lambda^{2n}) T^2 / (1-\lambda^2) &= c_2 \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

第2、第3式より式 (24) を参照すれば

$$n_{\text{eq}} = n_{\text{eq}}(0) = c_1^2 / c_2 = (1-\lambda^n)(1+\lambda) / [(1+\lambda^n)(1-\lambda)]$$

これより

$$E(\lambda) = (n_{\text{eq}} - 1) \lambda^{n+1} - (n_{\text{eq}} + 1) \lambda^n + (n_{\text{eq}} + 1) \lambda - (n_{\text{eq}} - 1) = 0 \quad (37)$$

n_{eq} は系が完全混合のとき1、押し出し流れのとき ∞ となることを考えれば、 $n_{\text{eq}} > 1$ としてよい。したがって

$$\text{i) } E(0) = -(n_{\text{eq}} - 1) < 0, E(1) = 0$$

$$\text{ii) } [\partial E / \partial \lambda]_{\lambda=0} = n_{\text{eq}} + 1 > 0, [\partial E / \partial \lambda]_{\lambda=1} = -2(n - n_{\text{eq}}) < 0$$

$n > n_{\text{eq}}$ であることは、 $n_{\text{eq}}(0) = n_{\text{eq}}$, $n \doteq \lim_{\sigma \rightarrow \infty} n_{\text{eq}}(\sigma)$ および式 (25) により $n_{\text{eq}}(\sigma)$ が σ の単調増加関数なることより保証される。

$$\text{iii) } [\partial^2 E / \partial \lambda^2] = n \lambda^{n-2} [(n+1)(n_{\text{eq}} - 1) \lambda - (n-1)(n_{\text{eq}} + 1)]$$

は $0 \leq \lambda \leq 1$ において正にならない。

以上の性質および $E(\lambda)$ が $0 \leq \lambda \leq 1$ において連続なことより、 $E(\lambda) = 0$ は $\lambda = 1$ 以外に、 $0 \leq \lambda \leq 1$ の区間にただ一つの根を有し、かつ iii) の性質により $\lambda = 0$ を初期値とする Newton 法がこの根に収束することが保証される。よって、式 (36) より n , T および λ は確定する。

なお式 (9') の $G_{\text{g}\infty}(s)$ の場合には、式 (36) で $n \rightarrow \infty$ とした式を解いて

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= (n_{\text{eq}} - 1) / (n_{\text{eq}} + 1) \\ T &= c_1 (1 - \lambda) \end{aligned} \right\} \quad (38)$$

を得る。

次にこの $G_{\text{g}\infty}(s)$ を用いて多パラメーター・モデルを決定する方法を述べよう。最初 a_0 , c_1 および c_2 を使って $G_{\text{g}\infty}(s)$ モデルを作る。すなわち、式 (38) より λ , T を決定し、それらを λ_1 , T_1 とすると

$$G_{\text{g}\infty}(s) = a_0 / [(1 + T_1 s)(1 + \lambda_1 T_1 s)(1 + \lambda_1^2 T_1 s) \cdots] \quad (39)$$

いまこの無限積を適当な所、たとえば2項で打切った近似式を ${}_1G_{\text{g}\infty}(s)$ とする。

$${}_1G_{\text{g}\infty}(s) = a_0 / [(1 + T_1 s)(1 + \lambda_1 T_1 s)] \quad (40)$$

式 (40) のモデルの任意の σ に対する $r_k(\sigma)$ を ${}_1r_k(\sigma)$ と記すと、それらは容易に計算される。次に系の伝達関数 $G_P(s)$ が

$$G_P(s) = {}_1G_{\text{g}\infty}(s) \cdot {}_1G_M(s)$$

の形にあらわされるとする。ただし $|{}_1G_M(0)| = 1$ と約束する。 ${}_1G_M(s)$ を再度 $G_{\text{g}\infty}(s)$ モデルで近似するが、このときには $0 < \sigma \leq \sigma_h$ の範囲の適当な σ を選び、 ${}_1G_M(s)$ の r_k が $G_P(s) / {}_1G_{\text{g}\infty}(s)$ の r_k と一致するようにそのパラメーターを決定する。すなわち ${}_1G_M(s)$ のモデルの λ , T をそれぞれ λ_2 , T_2 とすれば、それらは次式で決定する。

$$\left. \begin{aligned} T_2 / (1 - \lambda_2) &= r_1 - {}_1r_1 \\ T_2^2 / (1 - \lambda_2^2) &= r_2 - {}_1r_2 \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

このことは、 ${}_1G_M(s)$ は ${}_1G_{\text{g}\infty}(s)$ より $G_P(s)$ の比較的小さい時定数を含むものであるから、より高周波部での特性を代表する r_k を使ってパラメーターを決定することになる。式 (41) より λ_2 , T_2 を解いたとすると

$${}_1G_M(s + \sigma) = K_2 / \prod_{j=0}^{\infty} (1 + \lambda_2^j T_2 \sigma)$$

$$\therefore {}_1G_M(s) = K_2 / \left[\prod_{j=0}^{\infty} (1 - \lambda_2^j T_2 \sigma) \{ 1 + \lambda_2^j T_2 s / (1 - \lambda_2^j T_2 \sigma) \} \right]$$

約束により $K_2 / \prod_{j=0}^{\infty} (1 - \lambda_2^j T_2 \sigma) = 1$ となる。

このようにして定まった ${}_1G_M(s)$ を再度適当な項で打ち切り、それを ${}_2G_{\text{g}\infty}(s)$ とすると、 ${}_1G_{\text{g}\infty}(s) \cdot {}_2G_{\text{g}\infty}(s)$ は ${}_1G_{\text{g}\infty}(s)$ より精度のよいモデルとなる。このような操作を順次大きな σ を使って繰返せば、多元の連立方程式を解くことなく、多パラメーター・モデルが決定できる。

6 数値例と考察

新しく提案された諸モデルの従来の完全混合槽列モデルからの改良の度合いを見るために表1に示す2種類の被験系を想定し、それらを種々のモデルで近似したときのインパルス応答の誤差を

(a) 系Aの場合

(b) 系Bの場合

図4 各種モデルのインパルス応答の誤差

計算して図4(a), (b)に示した。

表1 数値例で想定された二つの系

	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6	T_7	T_8	σ_h	n_{est}
系A	1.0	0.5	0.2	0.1	0.07	0.04	0.02	0.01	1.819	4.747
系B	1.0	1.0	0.2	0.1	0.1	0.07	0.03	0.01	1.370	4.601

この時、被測定系の次数 n の推定値 n_{est} を求めるための σ_h の大きさは別報⁴⁾の考察によって定めた。図4において、 $[G_{g\infty}]_5$ と記されたモデルは、 $\sigma=0$ を用いた $G_{g\infty}$ モデルを第2項で打ち切り、 $\sigma=\sigma_h$ を用いて作った ${}_1G_M$ の $G_{g\infty}$ の形のモデル(4節参照)の第3項までを取った、合計五つの時定数をもつモデルであり、 $[G_{g\infty}]_{10}$ は、全く同様にただ ${}_1G_M$ を7項まで取った10個の時定数を持つモデルである。

両方の数値例とも $[G_{g\infty}]_5$ は完全混合槽列モデル G_{mt} に較べてあまり改良されていないが、 G_{m2} 、 G_{gn} および $[G_{g\infty}]_{10}$ はいずれもその性能が大幅に向上している。表1の時定数 T_i の分布をみると系Aには、どちらかといえば時定数の分散した G_{gn} または $G_{g\infty}$ の形が適し、系Bには G_{m2} の形のモデルが適することがわかり、図4の結果もそのようになっているが、被測定系の実験応答のみから、これらの中のいずれのモデルを使うべきかを判定する方法はない。

なお、 G_{m2} モデルの場合、 n_1, n_2 は一般には整数にはならないので、このままの形ではラプラス逆変換ができない。しかし $1 > \epsilon > 0$ とするとき、次のような近似の成立するような正の実数 T_A, T_B および T_C を求めることがつねに可能である。

$$1/(1+Ts)^2 \approx (1+T_Cs)/\{(1+T_As)(1+T_Bs)\} \quad (42)$$

すなわち、式(42)の両辺の伝達関数の c_1, c_2 および c_3 が相互に一致する条件式を解くことにより

$$\left. \begin{aligned} T_A &= T\{\epsilon - (1-\epsilon)/(2\eta)\} \\ T_B &= \epsilon T(1+\eta) \\ T_C &= T\{\epsilon + \epsilon\eta - (1-\epsilon)/2\eta\} \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

ただし $\eta = \{1 - 2\epsilon + \sqrt{(2-\epsilon)(1+\epsilon)/2}\}/(3\epsilon)$

図4の G_{m2} はこのような変換を施している。