バッチ冷却晶析プロセスのモデルベース精密温度制御設計ベンチマーク

小 河 守 正*

A Benchmark of Model-based Precise Temperature Control Design for an Industrial Batch Cooling Crystallization Process

Morimasa OGAWA*

This paper provides a benchmark of model-based design method for temperature control of an industrial batch-cooling crystallizer. In order to control the crystallization temperature precisely, a process-model-based approach is employed for designing the control system. The designed control system is comprised of the PI-D cascade control with the feed-forward compensation. The derived PID settings formula is extremely suitable for tracking to the ramp set-point change. In addition, by partially slow down the set-point trajectory, the undershoot error of the temperature control can be significantly reduced. The simulation results of the designed control system shows superior control performance and proper applicability.

Key Words: process control, batch-cooling crystallization temperature, process dynamics model, model-based PID control, set-point trajectory modification

1. 緒 言

連続プロセスの制御技法は、PID 制御、オーバライド制御などのアドバンスト制御、そしてモデル予測制御の三つの柱からなる。それぞれの役割分担は明確で、現場への実装と調整方法に至るまで、ほぼ完全に規範が確立されている。これに対してバッチプロセスでは、過去の成功事例に頼り制御系設計することが多く、そのプロセスモデリング、制御アルゴリズム、チューニングは一般化されることなくさまざまな方法が適用されている。その制御性能に問題を抱えているバッチプロセスは少なくない。このような現状を打破するには、バッチプロセス制御の重要な対象ごとに、まずベンチマークとなりうる制御技法を開発する。その内容を広く開示し、それを踏み台として、より高度で実用的な規範に仕上げていくことが大切だと考えている。

著者はこのような狙いで、すでにバッチ重合プロセスの反応温度精密制御のベンチマークを提案した¹⁾。続いてここでは、バッチ冷却晶析プロセスの晶析温度精密制御のベンチマークを取り上げる。特に製薬プロセスにおいて、その重要性が指摘されている^{2),3)}。

本稿では第一に、バッチ冷却晶析プロセスと晶析温度制御システムの構成を説明する。第二に、プロセス動特性モデルを導き、このモデルに基づく PID 設定則とフィードフォワード

ド補償則を数値例と共に与える。このプロセス特有のランプ状目標値変更に対して、高いトラッキング性能を有するもので、その制御性能をシミュレーションで検証する。第三に、晶析温度目標値をランプ状変更から定値に切替後、PID 制御ではアンダーシュートが生じる。これを最小化するために、目標値の変更速度を区分的に減速する方法を与える。

Fig. 1 Batch cooling crystallization process

2. バッチ冷却晶析プロセス

バッチ冷却晶析プロセスの晶析温度制御システムを Fig. 1 に示す。攪拌晶析器に原料溶液を定量仕込み、所定の温度まで昇温後、晶析温度目標値の時間パターン（目標値軌道）に従い定速度で冷却する。原料溶液が飽和濃度を越え結晶析出が始まり、安定的に結晶化する準安定領域の温度で一定時間保持する。その後、準安定領域を保ちながら、さらに定速度で晶析温度を下げ、結晶を成長させ安定化する^{4)~6)}。規定時

* アズビル 倉敷市西阿知町新田 657-1

* Azbil Corp., 657-1 Shinden, Nishiichi-cho, Kurashiki
(Received June 6, 2016)
(Revised August 23, 2016)

間経過後，晶析操作を終了し晶析液を抜き出す．この一連のバッチ晶析時間は，数時間から 1 日程度である．

晶析温度は，晶析器のジャケットを循環する冷媒の温度を変え調節する．ジャケット内部における冷媒の伝熱係数が変化しないように，冷媒の循環流量を一定に保つ．そして，冷水（加温時は蒸気）の注入量を調整して，冷媒のジャケット入口温度を変えることにより晶析温度を調節する．

3. 晶析温度精密制御システム

ベンチマークとする晶析温度精密制御システムは，一般的な実用システムをベースにした．その概念図を **Fig. 2** に示す．まず，晶析温度のフィードバック制御を，冷媒入口温度制御へのカスケード制御として構成する．それに，晶析温度目標値軌道を実現するためのフィードフォワード補償を組み合わせる．ここで，晶析開始からの経過時間 t ，フィードバック制御の目標値 r ，制御量 y ，操作量 u ，外乱量 d で，フィードフォワード補償の操作量 u_f は差分量として u に加算する．

晶析温度制御は，実用性を重視して PID 制御による．時変なプロセス動特性モデルをベースにした PID 設定則に基づき，PID 設定値をゲインスケジューリングする．フィードフォワード補償則は，晶析温度目標値軌道とプロセス動特性モデルから，冷媒入口温度制御の目標値をあらかじめ決定するものである．PID 制御では，晶析温度目標値をランプ状変更から定値に切替後にアンダーシュートが生じる．これを最小化するために，PID 制御に対する目標値の変更速度を区分的に減速する．

Fig. 2 Crystallization temperature control system

このベンチマークへの要求性能を，制御偏差 $\pm 1^\circ\text{C}$ （晶析温度計測スパン 100°C として $\pm 1\%$ ）以内とする．著者の現場経験の限りでは，その平均的な制御偏差は $\pm 3^\circ\text{C}$ であることから，これは高い設計仕様といえるだろう．

エネルギー収支モデルの結晶化熱と総括伝熱係数を，バッチ運転実績データを用いて推定すれば，バッチごとにモデルを適応できる．これにより B2B 制御 (Batch to Batch Control) が可能になるが，まだ実績データが十分に揃っておらず今後の課題とする．

4. プロセス動特性モデル

4.1 エネルギー収支モデル

つぎの仮定をおくことにより，晶析溶液，晶析器壁，冷媒のエネルギー収支を得る．

- ・晶析器内の晶析溶液は攪拌機で完全混合されている．
- ・晶析器壁とジャケット内の冷媒の温度は均一である．
- ・冷媒入口温度制御の目標値応答が速く遅れを無視できる．

$$\begin{cases} c_c W_c \frac{d}{dt} T_c(t) = Q_c(t) + Q_a(t) - Q_i(t) \\ c_m W_m \frac{d}{dt} T_m(t) = Q_i(t) - Q_o(t) \\ c_w W_w \frac{d}{dt} T_w(t) = Q_o(t) - Q_w(t) - Q_\ell(t) \end{cases} \quad (1)$$

記号の意味を晶析運転条件（左右の数値は晶析開始・終了時点の条件）と共に **Table 1** に示した．また，結晶化熱 Q_c ，攪拌熱 Q_a ，放熱 Q_ℓ である．そして，晶析器内壁と外壁の除熱量 Q_i ， Q_o ，冷媒除熱量 Q_w はつぎのように表わせる．

$$Q_i(t) = h_i(t) A_i(t) (T_c(t) - T_m(t))$$

$$Q_o(t) = h_o A_o (T_m(t) - T_w(t))$$

$$\begin{aligned} Q_w(t) &= c_w f_w (T_{wo}(t) - T_{wi}(t)) \\ &= 2 c_w f_w (T_w(t) - T_{wi}(t)) \end{aligned}$$

Table 1 Operation conditions of batch-cooling crystallizer

symbol	description	units	value
A_i	heat transfer area	m^2	7.00
A_o	i : inside, o : outside	m^2	7.00
c_c	specific heat	$\text{kcal}/(\text{kg K})$	0.95
c_m	c : cryst., m : metal	$\text{kcal}/(\text{kg K})$	0.14
c_w	w : coolant	$\text{kcal}/(\text{kg K})$	1.00
f_w	coolant flow rate	kg/h	15000
h_i	heat transfer coeff.	$\text{kcal}/(\text{m}^2 \text{h K})$	$350 \rightarrow 200$
h_o	i : inside, o : outside	$\text{kcal}/(\text{m}^2 \text{h K})$	700
T_c	cryst. temp.	$^\circ\text{C}$	$70 \rightarrow 50 \rightarrow 30$
T_m	metal wall temp.	$^\circ\text{C}$	$70 \rightarrow 50 \rightarrow 30$
T_w	coolant temp.	$^\circ\text{C}$	$70 \rightarrow 50 \rightarrow 30$
T_{wi}	coolant in temp.	$^\circ\text{C}$	$70 \rightarrow 50 \rightarrow 30$
T_{wo}	coolant out temp.	$^\circ\text{C}$	$70 \rightarrow 50 \rightarrow 30$
W_c	solution weight	kg	2500
W_m	metal wall weight	kg	1100
W_w	coolant weight	kg	1000

晶析溶液は原料溶液と結晶（固形物）の混合物質で，その粘度は結晶が高濃度になるにつれ増加する．このため，晶析器内壁の伝熱係数 h_i は時変で減少する．外壁の伝熱係数 h_o は不変で，冷媒流量 f_w を一定に保つ．そのジャケット入口と出口の温度差が小さいので，冷媒温度は平均値 $T_w = (T_{wi} + T_{wo})/2$ で近似する．

4.2 晶析温度伝達関数モデル

エネルギー収支モデルを状態方程式で表現する．結晶化熱量と放熱量は不確定外乱として扱いここでは除外する．

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{A} \mathbf{x}(t) + \mathbf{b} u(t) \\ y(t) = \mathbf{c} \mathbf{x}(t) \end{cases} \quad (2)$$

状態変数 $\mathbf{x}$: { 晶析温度, 器壁温度, 冷媒平均温度 } で, 操作量 u : 冷媒入口温度, 制御量 y : 晶析温度である．それぞれの温度計測スパン $\mathcal{K}_u, \mathcal{K}_y$ とする．

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} T_c(t) & T_m(t) & T_w(t) \end{bmatrix}^T u(t) = T_{wi}(t)/\mathcal{K}_u$$

$$y(t) = T_c(t)/\mathcal{K}_m$$

$\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ はつぎのようになる．

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{T_1} & \frac{1}{T_1} & 0 \\ \frac{\mathcal{K}_{21}}{T_2} & -\frac{1}{T_2} & \frac{\mathcal{K}_{23}}{T_2} \\ 0 & \frac{\mathcal{K}_{32}}{T_3} & -\frac{1}{T_3} \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\mathcal{K}_u \mathcal{K}_{3u}}{T_3} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\mathcal{K}_m} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$T_1 = \frac{c_c W_c}{h_i(t) A_i}, \quad T_2 = \frac{c_m W_m}{h_i(t) A_i + h_o A_o}$$

$$T_3 = \frac{c_w W_w}{h_o A_o + 2c_w f_w}$$

$$\mathcal{K}_{21} = \frac{h_i(t) A_i}{h_i(t) A_i + h_o A_o}, \quad \mathcal{K}_{23} = \frac{h_o A_o}{h_i(t) A_i + h_o A_o}$$

$$\mathcal{K}_{32} = \frac{h_o A_o}{h_o A_o + 2c_w f_w}, \quad \mathcal{K}_{3u} = \frac{2c_w f_w}{h_o A_o + 2c_w f_w}$$

この状態方程式モデルから晶析温度制御のための伝達関数モデル $P(s)$ を得る．

$$\begin{aligned} P(s) &\equiv \frac{y(s)}{u(s)} = \frac{n_0}{D(s)} \\ &= \frac{K_p}{(T_{p1}s + 1)(T_{p2}s + 1)(T_{p3}s + 1)} \end{aligned} \quad (3)$$

分母多項式 $D(s) = 0$ の安定な実数根を $p_1, p_2, p_3 < 0$ とし, 時定数は $T_{p1} = -1/p_1, T_{p2} = -1/p_2, T_{p3} = -1/p_3$ となる．動特性を支配する最長の時定数を $T_{p1} (\gg T_{p2}, T_{p3})$ とする．

$$D(s) = s^3 + d_2 s^2 + d_1 s + d_0$$

$$d_2 = \frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_3}$$

$$d_1 = \frac{1}{T_1 T_2 T_3} [(1 - \mathcal{K}_{23} \mathcal{K}_{32}) T_1 + T_2 + (1 - \mathcal{K}_{21}) T_3]$$

$$d_0 = \frac{1}{T_1 T_2 T_3} (1 - \mathcal{K}_{21} - \mathcal{K}_{23} \mathcal{K}_{32})$$

定常ゲイン K_p は, $\mathcal{K}_{23} \mathcal{K}_{3u} = 1 - \mathcal{K}_{21} - \mathcal{K}_{23} \mathcal{K}_{32}$ に注意して, つぎのようになる．

$$n_0 = \frac{\mathcal{K}_u \mathcal{K}_{23} \mathcal{K}_{3u}}{\mathcal{K}_m T_1 T_2 T_3} \rightarrow K_p = \frac{n_0}{d_0} = \frac{\mathcal{K}_u}{\mathcal{K}_m}$$

(数値例)

晶析温度の伝達関数モデルパラメータを **Fig. 3, Table 2** に示した．これは Table 1 の晶析運転条件において, 晶析器内壁の伝熱係数が同図最下段に示したように $h_i = 350 \rightarrow 200 \text{ kcal}/(\text{m}^2 \text{hK})$ まで減少したときのものである．定常ゲイン $K_p = 1$ で不変, 時定数 T_{p1} が 40% 程度長くなり, T_{p2}, T_{p3} は微増する．

Fig. 3 Time varying process dynamics model

Table 2 Process dynamics model parameters

symbol	description	units	value
$\mathcal{K}_m$	cryst. temp. measured span	$^{\circ}\text{C}/\%$	100/100
$\mathcal{K}_u$	coolant temp. measured span	$^{\circ}\text{C}/\%$	100/100
K_p	steady-state gain		1.00
T_{p1}	time constant 1	min	92.9 $\nearrow$ 136
T_{p2}	time constant 2	min	2.19 $\nearrow$ 2.38
T_{p3}	time constant 3	min	1.08 $\nearrow$ 1.18

5. 制御設計

晶析温度制御の主目的をランプ状目標値軌道へのトラッキングとして, PID 制御のアルゴリズムを選定しモデルベース PID 設定則を与え, フィードフォワード補償則を導出する．要求性能は, 3 章で示したように, 晶析温度計測スパンに対する百分率で表わした制御偏差が $\pm 1\%$ (通常は $\pm 1^{\circ}\text{C}$) 以内とする．その制御性能を調整するパラメータは, 要求性能に結び付いた許容制御偏差を用いる．

5.1 PID 制御アルゴリズム: PI-D 選定

実用 PID コントローラには, Appendix A で解説したように, PID, PI-D, I-PD の三種類のアルゴリズムがある．まずその選定を行なう．目標値 $r(s)$, 制御量 $y(s)$, 制御偏差 $e(s) = r(s) - y(s)$, 操作量 $u(s)$ とする．PID パラメータ $\{K_c, T_i, T_d\}$ として, PID アルゴリズム $C(s)$ と目標値フィルタ $F(s)$ はつぎのとおりである．これらは, 不完全微分を無視 ($\gamma = 0$) したものであるが, その影響が軽微なことを

後述する制御シミュレーションで確認している。

$$C(s) = \frac{K_c}{T_i s} (1 + T_i s + T_i T_d s^2) \quad (4)$$

$$F(s) = \begin{cases} 1 & (\text{PID}) \\ \frac{T_i s + 1}{T_i T_d s^2 + T_i s + 1} & (\text{PI-D}) \\ \frac{1}{T_i T_d s^2 + T_i s + 1} & (\text{I-PD}) \end{cases} \quad (5)$$

このとき、PID 制御の目標値応答はつぎようになる。

$$y(s) = \frac{C(s)P(s)}{1 + C(s)P(s)} F(s) r(s)$$

目標値変更速度 v_r のランプ状目標値変更 $r(s) = v_r/s^2$ に対する、定常制御偏差は次式で示される。

$$e(\infty) = \begin{cases} \frac{v_r T_i}{K_p K_c} & (\text{PID}) \\ \frac{v_r T_i}{K_p K_c} & (\text{PI-D}) \\ \frac{v_r T_i}{K_p K_c} + v_r T_i & (\text{I-PD}) \end{cases} \quad (6)$$

I-PD アルゴリズムの定常制御偏差は PID, PI-D アルゴリズムに比べて非常に大きくなる。たとえば、 $K_p = 1.0$, $K_c = 10$, $T_i = 10$ min, $v_r = -20\%/90$ min のとき、PID, PI-D アルゴリズムの定常制御偏差 $e(\infty) = -0.22\%$ は要求性能 1% 以内を十分満足する。これに対して、I-PD アルゴリズムでは -2.44% で 11 倍にもなり要求性能を満たせない。

このため、プロセス制御で最も多く実用されている I-PD アルゴリズムは、この晶析温度制御には使えない。微分動作が目標値に作用しない PI-D アルゴリズムを適用するのがよいことになる。

5.2 モデルベース PID 設定則

プロセス制御で多用されるモデルベース PID 設定則に、IMC (Internal Model Control) 法がある。ステップ状の目標値変更に対する望ましい制御量応答を規定して、PID 設定値を一意に決定する方法である。その積分時間を $T_i \approx T_{p1}$ に設定するため、ランプ状目標値変更に対する定常制御偏差が非常に大きくなる。このため、常にランプ状目標値変更が行なわれる晶析温度制御に IMC 法は適用できない。

ここでは、晶析温度制御に適した PID 調整指標を定め、それを満たすモデルベース PID 設定則を与える。簡便な設定則とするためにつぎの二段階の手順による。まず、伝達関数モデルを長い時定数のみの 1 次遅れ特性に近似して PI 設定則が定まる。その結果である PI 設定値と伝達関数モデルの二つの短い時定数から、直列補償型 PID アルゴリズムの特性を利用して PID 設定則を得る。

(1) PID 調整パラメータ

晶析温度制御の PID 調整指標として、二つのパラメータ e_r , e_u を用いる。

- e_r : ランプ状目標値に対する定常制御偏差

- e_u : 目標値がランプ状から定値に移行後の

制御量アンダーシュート許容値

目標値変更に対する制御量応答の例を Fig. 4 に示した。その上段グラフの拡大部で、定常制御偏差の存在とアンダーシュートを確認できる。

前者は、目標値をランプ状に変更中、十分に時間が経過したときの制御偏差の許容値である。目標値変更が終了し定値制御に移行後は、PID 制御では制御量の行き過ぎ（アンダーシュート）が避けられない。後者は、そのアンダーシュートの最大許容値である。いずれも、制御性能に結び付いた直観的なパラメータなので、調整者には使いやすいと考えている。

Fig. 4 Steady-state error and under-shoot response

(2) PI 設定則

伝達関数モデル(3)式において、短い時定数 T_{p2}, T_{p3} ($\ll T_{p1}$) を無視し 1 次遅れ特性に近似する。これにより、PI-D アルゴリズムの微分動作は不要になり、PI アルゴリズムを適用できる。目標値は、Fig. 4 のように、変更時間 t_r 、変更速度 v_r でランプ状に変更され、それ以降は定値になる。PI 設定則で必要となる制御量応答を Appendix B のように導出した。

ランプ状目標値変更に対する定常制御偏差を規定値に保つ条件で、アンダーシュート最大値がその許容値にできるだけ近くなるように PI 設定値を求める。これは、定常制御偏差を等式制約とし、アンダーシュート最大値とその許容値の 2 乗誤差を最小化する最適化問題として、つぎのように定式化できる。

$$\{K_c^\circ, T_i^\circ\} := \arg \min_{K_c, T_i} (e_{\max} - e_u)^2 \quad (7)$$

subject to

$$e_r = \frac{v_r T_i}{K_p K_c}$$

$$e_{\max} := \max \{r(t) - y(t)\} \quad (t \geq t_r)$$

これを最適化ソルバー (MATLAB^(注1) fmincon 関数) によ

(注1) MATLAB は The Mathworks Inc. の登録商標です。

り数値的に解き、比例ゲイン K_c° と積分時間 T_i° を得る.

(3) PID 設定則

伝達関数モデルの短い時定数 T_{p2} , T_{p3} を考慮した PID 設定則を導出する. このために、つぎの直列補償型 PID アルゴリズムを利用する.

$$\tilde{C}(s) = \tilde{K}_c \left(1 + \frac{1}{\tilde{T}_i s} \right) (1 + \tilde{T}_d s) \quad (8)$$

微分時間を $\tilde{T}_d = \lambda(T_{p2} + T_{p3})$ に設定することにより、時定数 T_{p2} , T_{p3} の 2 次遅れ特性を微分動作項で近似的に極ゼロ相殺する. 調整係数 $\lambda \approx 1$ でよい. これにより、比例ゲインと積分時間に PI 設定則の結果を適用でき、 $\tilde{K}_c = K_c^\circ$, $\tilde{T}_i = T_i^\circ$ とする. そして、次式により PI-D アルゴリズムの PID パラメータに等価変換する.

$$\begin{aligned} K_c &= \left(1 + \frac{\tilde{T}_d}{\tilde{T}_i} \right) \tilde{K}_c \\ T_i &= \tilde{T}_i + \tilde{T}_d \\ T_d &= \frac{\tilde{T}_i \tilde{T}_d}{\tilde{T}_i + \tilde{T}_d} \end{aligned} \quad (9)$$

$\tilde{T}_d = \lambda(T_{p2} + T_{p3})$ において、実用上は $\lambda \approx 1$ として差支えないことをつぎのように確かめた. 時定数 T_{p2} , T_{p3} の 2 次遅れ特性と $\tilde{T}_d$ を時定数とする 1 次遅れ特性のステップ応答から、両応答の誤差 2 乗面積を最小にする λ を数値的に求めて **Fig. 5** に示した. 時定数比 $T_{p3}/T_{p2} = 1$ における λ の最大値はただだか 1.033 なので 1 を実用できる.

Fig. 5 Coefficient λ to minimize ISE

(数値例)

PID 調整パラメータを **Table 3** 上段のようにした. 晶析温度目標値の変更時間 $t_r = 90$ min, 変更速度 $v_r = -20^\circ\text{C}/90$ min $= -20\%/90$ min とする. 伝達関数モデルパラメータが 4.2 節 (数値例) のように変化するときの PID 設定値を **Fig. 6**, **Table 3** に示した. 比例ゲインが大きい特徴があり、比例ゲインと積分時間は晶析終了時に開始時の 1.9 倍になる. 微分時間はわずかに増加する. これを、バッチ経過時間に対応して PID ゲインスケジューリングする.

この設計結果の一部を実プロセスでトライアルし、公表できないが良い結果を得ている. また、同様な伝達関数モデルをもつバッチ重合プロセスの反応温度精密制御において、高

比例ゲイン $K_c = 30$ でも良好な制御実績を得ている¹⁾ことから、この設計結果は妥当であろう.

Fig. 6 PID gain scheduling

Table 3 PID tuning parameters and PID settings

tuning parameters	units	value
e_r	%	0.1
e_u	%	1.0
PID settings	units	value
K_c		24.5 $\nearrow$ 47.2
T_i	min	11.0 $\nearrow$ 21.2
T_d	min	2.30 $\nearrow$ 2.47

5.3 フィードフォワード補償則

晶析温度制御の目標値変更を定速度 $dT_c/dt = v_r$ で行ない変更時間を t_r とする. エネルギー収支モデル(1)式を $Q_c, Q_a = 0$ として時間微分すれば、その右辺から器壁温度、冷媒温度の変化速度も v_r に等しいことがわかる.

$$\frac{d}{dt}T_c(t) = \frac{d}{dt}T_m(t) = \frac{d}{dt}T_w(t) = v_r$$

この条件をエネルギー収支モデルに適用して、冷媒入口温度の目標値軌道 $\tilde{T}_{wi}$ を得る.

$$\tilde{T}_{wi}(t) = \tilde{T}_c(t) + \Delta\tilde{T}_{wi}(t) \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{T}_{wi}(t) &= v_r \left[c_c W_c \left(\frac{1}{h_i(t)A_i} + \frac{1}{h_o A_o} + \frac{1}{2c_w f_w} \right) \right. \\ &\quad \left. + c_m W_m \left(\frac{1}{h_o A_o} + \frac{1}{2c_w f_w} \right) + \frac{c_w W_w}{2c_w f_w} \right] \end{aligned} \quad (11)$$

フィードフォワード補償の操作量一次差分 Δu_f を、冷媒入口温度制御の目標値変更量として PID 制御の操作量に加算する.

$$\Delta u_f(t) = \begin{cases} \frac{\Delta\tilde{T}_{wi}(t)}{K_u} & (0 \leq t < t_r) \\ 0 & (t \geq t_r) \end{cases} \quad (12)$$

(数値例)

Table 1 の晶析運転条件で、晶析温度目標値の変更時間

$t_r = 90 \text{ min}$, 変更速度 $v_r = -20\%/90 \text{ min}$ のとき, フィードフォワード補償による冷媒入口温度制御の目標値変更量はつぎのようになる.

$$\Delta u_f(t) = \begin{cases} -21.4\% & (0 \leq t < 90 \text{ min}) \\ 0\% & (t \geq 90 \text{ min}) \end{cases}$$

6. 制御シミュレーション

ベンチマークとして設計した PID カスケード制御とフィードフォワード補償の妥当性を制御シミュレーションで数値検証する. 晶析プロセスをエネルギー収支モデル (1) 式で直接表現し, Table 1 の晶析運転条件とする.

制御シミュレーション結果を Fig. 7 に示す. 晶析温度の目標値軌道を $70 \rightarrow 50 \rightarrow 30^\circ\text{C}$ と 2 段階に変更し, いずれも変更速度 $v_r = -20^\circ\text{C}/90 \text{ min}$ とした. 外乱として, 結晶化熱量 (冷媒入口温度を -15°C 調節する熱量相当) と, 晶析器内壁の伝熱係数変化を 4.2 節 (数値例) のように与え, それぞれ同図中段と下段に示した.

晶析温度制御は PI-D アルゴリズムで, PID 設定値は 5.2 節 (数値例) のようにゲインスケジューリングする. フィードフォワード補償も数値例のように適用する. また, 冷媒入口温度のプロセス動特性を定常ゲイン 1, 時定数 1min の 1 次遅れ特性, その PI 制御の比例ゲイン 5, 積分時間 1min とした. このときの晶析温度の制御偏差最大値は 1°C (1.0%) で, 要求性能を満たすことが確かめられた.

Fig. 7 Crystallization temperature control simulation

7. アンダーシュート最小化

晶析温度制御の目標値がランプ状変更から定値に切替わった後に, 晶析温度がアンダーシュートすることはすでに述べた. より高い制御性能を得るには, これを最小化することが必要になる. 閉ループ系の操作量と状態変数の制約を考慮し, 最適な制御性能を得るように目標値軌道を生成する, リファレンスガバナと呼ばれる方法が提案されている⁷⁾. ここでは, その基本的な考え方にに基づき, ランプ状目標値変更への

精密なトラッキングを目的として, 目標値変更速度を区分的に減速することによって, アンダーシュートを最小化する方法を与える.

7.1 目標値変更速度の区分的減速

Fig. 8 に示すように, 目標値が時間 $t = 0$ の始点 r_0 からランプ状に定速度 v_r で変更され, 時点 t_r で定値 r_1 に切り替えられるものとする. 切替時点 t_r 前後の時間 $t_s \leq t < t_e$ において, 目標値変更速度を v_s に減速する. これを実効目標値と呼び次式のようにする. ここで, 減速開始時点の目標値 $r_s = r_0 + v_r t_s$ である. これにより, 目標値切替時点における操作量の行き過ぎを抑え, 制御量のアンダーシュートを最小化する.

$$r(t) = \begin{cases} r_0 + v_r t & (0 \leq t < t_s) \\ r_s + v_s (t - t_s) & (t_s \leq t < t_e) \\ r_1 & (t_e \leq t) \end{cases} \quad (13)$$

Fig. 8 Set-point trajectory with piecewise slow down

7.2 実効目標値軌道の決定則

実効目標値軌道のパラメータ $\{t_s, v_s\}$ 決定則を, 最適化問題としてつぎのように定式化する.

$$\{t_s^\circ, v_s^\circ\} := \arg \min_{t_s, v_s} \int_{t_r}^{t_e} e^2(t) dt \quad (14)$$

subject to

$$t_s < t_r, |v_s| < |v_r|$$

ここで, プロセス伝達関数モデルと PI-D アルゴリズムの PID 設定値は 5.2 節のようにする. また, 目標値減速終了時間 t_e は $r(t_e) = r_1$ からつぎのように定まる.

$$t_e = \frac{r_1 - r_s}{v_s} + t_s \quad (15)$$

これを制御シミュレーションベース最適化 (control simulation based optimization) により数値的に解く. MATLAB の simulink と fmincon 関数を組み合わせたものを使った.

(数値例)

晶析運転条件が Table 1, 伝達関数モデルパラメータを Table 2, PID 設定値を Table 3, それぞれ晶析開始時点の値を用いる. 晶析温度目標値の変更時間 $t_r = 90 \text{ min}$, 変更速

度 $v_r = -20\%/90 \text{ min} = -0.222\%/ \text{min}$ とする．アンダーシュート最小とする実効目標値軌道のパラメータは **Table 4** のようになる．この実効目標値軌道に対する PID 制御シミュレーション結果を **Fig. 9** に示した．ここでは，フィードフォワード補償を停止し外乱は印加していない．目標値変更速度を区分的に減速することにより，晶析温度のアンダーシュートが 1.0% から 0.12% まで 1/8 に減少する．

Table 4 Set-point trajectory with piecewise slow down for crystallization temperature control

set-point trajectory	units	value
t_r	min	90
v_r	%/min	-0.222
t_s	min	85.2
t_e	min	114
v_s	%/min	-0.0376

Fig. 9 Control simulation applying piecewise slow down set-point trajectory

8. 結 言

バッチ冷却晶析プロセスの実用的な制御規範を確立することを目的として，そのベンチマークを提案した．継続した技術開発が必要で課題を三つ挙げる．

第一に，本方法の有効性を実プロセスで検証すること．第二は，バッチ運転実績データに基づく結晶化熱量と伝熱係数の推定である．ベンチマークではこれらを不確定外乱としたが，適切な精度で定量化し制御系設計に活用することによって，制御性能をさらに向上できる．これは，バッチ間のバラツキを低減する B2B (Batch to Batch) 制御にもつながる．第三に，制御アルゴリズムの高度化である．たとえば，目標値予見型モデルベース制御によれば，ベンチマークのフィードフォワード補償と目標値軌道の区分的減速を包含できよう．

謝辞 本稿を著すにあたって有益なコメントをいただいた，関 宏也准教授（東京工業大学）と James B. Rawlings 教授（ウィスコンシン大学）に深謝します．

参 考 文 献

- 1) 小河守正：バッチ重合プロセスのモデルベース B2B 制御，計測自動制御学会論文集，**46-3**, 139/148 (2010)
- 2) 三菱化学ほか：IMS0234 バッチ晶析プロセスの設計と制御の

高度化に関する研究成果報告書（要約版），製造科学技術センター IMS センター (2003)

- 3) G.M. Troup and C. Georgakis: Process Systems Engineering Tools in The Pharmaceutical Industry, *Proceedings of AIChE CPC (Chemical Process Control)*, 8 (2012)
- 4) M. Fujiwara, Z.K. Nagy, J.W. Chew and R.D. Braatz: First-principles and direct design approaches for the control of pharmaceutical crystallization, *Journal of Process Control*, **15**, 493/504 (2005)
- 5) P.A. Larsen, D.B. Patience and J.B. Rawlings: Industrial Crystallization Process Control, *IEEE Control Systems Magazine* August, 70/80 (2006)
- 6) U. Diwekar: *Batch Processing Modeling and Design*, 129/145, CRC Press (2014)
- 7) 杉江，山本：状態および入力の変動を考慮した閉ループ系の目標値生成，計測自動制御学会論文集，**37-9**, 849/855 (2001)

《付 録》

Appendix A：実用 PID コントローラの実アルゴリズムと目標値フィルター

実用 PID コントローラには PID, PI-D, I-PD の三種類のアルゴリズムがあり，微分項に 1 次遅れフィルターを付加した不完全微分動作が用いられる．その比例ゲイン K_c ，積分時間 T_i ，微分時間 T_d ，微分ゲイン $1/\gamma$ とする．目標値 r ，制御量 y ，操作量 u ，外乱量 d ，そして制御対象プロセス P として，これらのアルゴリズムによるフィードバック制御システムを **Fig. A.1** に示した．

Fig. A.1 Block diagram of PID, PI-D and I-PD control system

実用 PID コントローラは，目標値フィルター $F(s)$ と次式の PID アルゴリズム $C(s)$ に分離して一般化できる．その一般化 PID 制御システムを **Fig. A.2** に，目標値フィルターの伝達関数を **Table A.1** に示した．

$$C(s) = \frac{K_c}{T_i s} \left(1 + T_i s + \frac{T_i T_d s^2}{\gamma T_d s + 1} \right)$$

Fig. A.2 Generalized PID control system with set-point filter

Table A.1 Set-point filter in generalized PID control system

algorithm	set-point filter $F(s)$
PID	1
PI-D	$\frac{\gamma T_i T_d s^2 + (T_i + \gamma T_d) s + 1}{(1 + \gamma) T_i T_d s^2 + (T_i + \gamma T_d) s + 1}$
I-PD	$\frac{\gamma T_d s + 1}{(1 + \gamma) T_i T_d s^2 + (T_i + \gamma T_d) s + 1}$

Appendix B : 制御量応答

晶析温度伝達関数モデル(3)式を1次遅れ特性に近似する.

$$P(s) = \frac{K_p}{T_{p1}s + 1}$$

つぎのPIコントローラを用いる.

$$C(s) = \frac{K_c}{T_i s} (1 + T_i s)$$

目標値はつぎのように与えられる.

$$r(s) = \begin{cases} \frac{v_r}{s^2} & (0 \leq t < t_r) \\ \frac{v_r}{s^2} - \frac{v_r}{s^2} e^{-t_r s} & (t \geq t_r) \end{cases}$$

このとき, 目標値応答特性 $W_c(s)$ はつぎようになる. PIコントローラを用いるので, 目標値フィルター $F(s) = 1$ である.

$$W_c(s) \equiv \frac{y(s)}{r(s)} = \frac{C(s)P(s)}{1 + C(s)P(s)} F(s) = \frac{b_1 s + b_0}{s^2 + a_1 s + a_0}$$

この係数はつぎのとおりである.

$$b_1 = \frac{K_p K_c}{T_{p1}}, \quad b_0 = \frac{K_p K_c}{T_{p1} T_i}$$

$$a_1 = \frac{1}{T_{p1}} (K_p K_c + 1), \quad a_0 = \frac{K_p K_c}{T_{p1} T_i}$$

特性方程式の共役複素根もしくは実根をつぎのようにする. 制御系が安定になるようにPID設定値を設計するので, $\alpha > 0$ である.

$$s^2 + a_1 s + a_0 = 0 \rightarrow s = \begin{cases} -\alpha \pm j\beta \\ -\alpha, -\beta \end{cases}$$

安定な共役複素根をもつ場合, 制御量応答は次式となる.

$$y(t) = \begin{cases} v_r t - \frac{v_r T_i}{K_p K_c} + 2\sqrt{c^2 + d^2} e^{-\alpha t} \sin(\beta t + \phi) \\ v_r t_r + 2\sqrt{c^2 + d^2} e^{-\alpha t} \\ \times \left[\sin(\beta t + \phi) - e^{\alpha t_r} \sin(\beta(t - t_r) + \phi) \right] \end{cases}$$

安定な実根をもつ場合はつぎようになる.

$$y(t) = \begin{cases} v_r t - \frac{v_r T_i}{K_p K_c} + \frac{v_r K_p K_c}{(\alpha - \beta) T_p T_i} \\ \times \left(\frac{T_i \alpha - 1}{\alpha^2} e^{-\alpha t} - \frac{T_i \beta - 1}{\beta^2} e^{-\beta t} \right) \\ v_r t_r + \frac{v_r K_p K_c}{(\alpha - \beta) T_p T_i} \\ \times \left[\frac{T_i \alpha - 1}{\alpha^2} (1 - e^{\alpha t_r}) e^{-\alpha t} \right. \\ \left. - \frac{T_i \beta - 1}{\beta^2} (1 - e^{\beta t_r}) e^{-\beta t} \right] \end{cases}$$

両式の上段が $0 \leq t < t_r$, 下段は $t \geq t_r$ に対応する. 上段第2項がランプ状目標値変更に対する定常制御偏差を示している. c, d, ϕ はつぎのとおりである.

$$c = \frac{v_r [(2b_0 \alpha - b_1 (\alpha^2 + \beta^2))]}{2(\alpha^2 + \beta^2)^2}$$

$$d = \frac{v_r [b_0 (\alpha^2 - \beta^2) - b_1 \alpha (\alpha^2 + \beta^2)]}{2\beta (\alpha^2 + \beta^2)^2}$$

$$\phi = \begin{cases} \tan^{-1} \frac{c}{d} & \forall c, d > 0 \\ \pi + \tan^{-1} \frac{c}{d} & \forall c, d < 0 \end{cases}$$

[著者紹介]

小河 守 正 (正会員・フェロー)

1966年三菱化学(旧三菱化成)入社. 2004年まで三菱化学. 2004年よりアズビルに転身し現在に至る. プロセス制御の実践業務に従事. 93年度システム制御情報学会論文賞, 99, 2011年度計測自動制御学会論文賞, 2003年度計測自動制御学会論文賞武田賞, 2009年度計測自動制御学会教育貢献賞, 2011年度計測自動制御学会技術賞, IFAC Control Engineering Practice Prize Paper Award 2002を受賞. 京都大学博士(工学).