研究開発と電子計算機によるシュミレーション

長 瀬 徹 夫*

Computer Simulation in Chemical Research and Development.

Tetsuo NAGASE*

まえがき

電子計算機とその応用技術の発達普及が今日の社会に大きな影響を与えつゝあることは周知の通りであるが、その活動が人間の精神活動の領域に関して行なわれるだけに使い方如何により頗る多面的な応用機能を発揮できるところにその特質がみられる。道具と規定することもできるがその使い方の定型もその効果の限界も見出し難いところに従来の概念では律しきれない。

研究開発の分野ですでに多くの応用分野が開拓されつゝあるが、それがどれだけ効果的な役割を果すかということは電子計算機の側ではなくてそれに如何なる役割を果させるかという人の側の態度、能力にかゝっている。

近代研究は組織化されねばならぬとか、研究者はしっかりしたフィロソフィーと近代的方法論を持って仕事をせねばならぬとかいろいろいわれているが、電子計算機の持つ多面的な能力は正しい研究開発体制と創造的システムの中に組み込まれて真にその活用方法が創造され研究開発の促進に役立つと考える。

電子計算機を単なる計算機械としてみる場合はそれだけの役割しか果さない。電子計算機によるシュミレーションの方法は、その機能の高次の使い方の1つであるが、その知識自体よりもその意義と果す役割を、科学技術発展の方法論的立場で認識することに重要な意味を感じるので本題に関しては電算機シュミレーションを素材として科学技術研究の場における電算機と人との取り組み方

* 東洋高圧工業株式会社システム部（東京都中央区日本橋本石町 4-2-10）

* Systems and Computing Dpt., Toyo Koatsu Ind. Inc. (2-10, 4-chome, Nihonbashi-honseki-cho, Chuo-ku, Tokyo)

に視点をあてたいと思う。

I. システムと OR, システム工学

最初に背景となる2つの基本的事項について簡単に触れておくことが、以後の理解を深める上に重要であろう。その1つは電子計算機（以下電算機と略称する）と結ばれる人間の思考態度と方法に関係するシステム工学（Systems Engineering）ならびにオペレーションズ・リサーチ（Operations Research）の分野の認識であり、第2はシュミレーション（Simulation）そのものへの理解である。

1. システムとシステム工学 例を工学技術の研究開発にとると、最近の大型プラントの建設操業の実現には化学工学機械、電気、計測その他多くの関連工学技術とそれぞれのスペシャリストが関係する総合技術の結集としてその成果が問われる状態となっている。これら専門的分化技術を総合統一する基本的原理、手段の提供を果す役割をシステム工学が担っていると見られるが、そこでシステムとは何かということが問題になる。

システム工学は上述の立場からは「工学系を環境に最も適応するように設計、操作し制御することの原理、手法をその主な内容とする」と説明され、化学工業の様なプロセス工業の場合はプロセスシステム工学と呼ばれる。

2. システムとその特性 システム（System）という言葉は米国あたりでは好んでいろいろな意味に使われているが、いくつかのより簡単な要素が集ってある特定の機能を発揮することのできる集合体を意味するものであって、化学工場の装置の系列などは典型的な例であるが、その他広く人間が機械、設備と相互に関係を持って活動している分野に及んでいる。

後述の様に電算機も個々の構成要素から組立てられた完全なシステムの形をとっている。

ここで Machol¹⁾ が述べているシステムの特徴7項目は後述の OR との関係で重要であるのであげておく。

- i) システムは人間により造られたものである。(人為的システム)
- ii) システムは与えられた入力から何らかの最適な出力を出すことを目的とするものである。
- iii) 上記の各要素が複雑に結合されており、システム内部で相互作用が働く。したがってシステムの表現は一般に複雑となる。
- iv) システムはいわゆるセミ・オートマチックである。
- v) システムへの入力は厳密に統計的な挙動をする。
- vi) システムは数多くの同質或は異質の部分から構成される。
- vii) 最も困難なシステムは競争的なシステムである。

3. システムとサブシステム 今図1に化学製品

図1 生産プロセス・フローシート

の製造プロセスの簡単なフローシートを例示したが、反応、吸収、蒸留各工程共にそれぞれ実際は熱交換器、ポンプ、圧縮器、測定および制御装置等を結合したそれぞれ独立のシステムを形成し、プロセス全体に対してはサブシステムを構成している。さらにこの設備が複数系列となりあるいは製品がさらに次のプラントの原料として供給されるという様な場合はシステムの大きさはますます大きくかつ挙動が複雑になってくる。

4. システムの最適化 一方において工業プロセスは技術的にも経済的にも工業としてなり立ち、操業により最大の利益を得られる様に設計も運転も最適化されることが工学の寄与する究極の目的であるとするならば、システムを最適化することの範囲は部分部分の最適化を超えてシステムでつながるより広いシステムの最適化に奉仕するのではなくてはならない。

図2 プロセス工業の機能²⁾

したがってこれらは最終的には研究開発の立場から始まって実生産、販売に至る企業経営システム全体の最適化につながってゆき、高松²⁾によれば図2の様なシステムが時間的に空間的に常に最適を指向すべきであるとされている。

現段階ではこの様な大規模なシステムの最適化問題を実用的見地から定量的に取り扱える状態ではないが、問題を絶えずより大きいシステムの中のサブシステムとして取り扱うシステムの思考方法、そしてその中での最適を考える立場が実は次に述べるOR的な立場を吸収していることになるのである。

実際に企業を取りまく経済環境の中で新しく開発したプロセスを最適な設計に持ってゆく過程そのものも、時間的に変化する市場の予測、経済効果を総合して適切な解を得る必要は誰しも認めるのであるが、合理的にその解を導くための試みもシステムの接近によって逐次試みられつつある^{3,4)}。

5. OR とシステム工学 複雑な挙動をするシステム全体から最適な出力を取り出すという問題に対し科学的な方法論としてORが登場する。

ORはもともと二次大戦中連合軍に従事していた科学者のグループが

「敵の潜水艦が何処にかくれているか解らない時に、何処を通るのが一番安全か?、兵員物資の輸送」

といった問題にどうするかを決める時にとった「決め方」に端を発して広く使われる様になったもので、数学とか公式ではないから定義も難しい。

したがって定義らしいものも幾通りもあるが⁵⁾、これらを通覧してみると「人間の関与するシステムの問題を解決するための科学的な方法」として理解すべきもので、その特性としては次の様な手順を踏むものである。

- 何が問題かを明確にする
- 問題を含むシステムを数式モデルとする

●数式モデルより解を導く

●解の吟味, テストをする

われわれが現実には解決をせまられるような問題は予めでき上った問題として特定のモデルや型式で代表されるようなことは稀であり, 問題そのものの本質を見付け出すことが解決のための重要条件となっていることが多いが, 上記のステップを下記のように繰返すことにより次第に問題の本質が明らかとなつてゆき, それにつれて, より現実 に即した解決策が浮び上ってくることになる。

モデル作成とその解を出す段階では, 確率論, 統計的手法, 解析的方法, 情報理論, その他いろいろな数学的手法が使用される(シュミレーションも同様に使われる)がこれらのどれを使うかは場合に応じて皆異なり定式化されたものではない。必要なのは問題の本質への接近する仕方にあるのであって, システム工学における問題への接近方法も全く同じ思想と手法によっている。

OR とシステム工学の実際上の区別は, 対象とするシステムの種類によって行われており^{6,7)} OR が応用社会科学経営科学の分野に適用されるのに対し, システム工学は既述の如く狭義の工学, 技術分野を一応の守備範囲としているに過ぎない。したがってこれら用語が交錯して使われることがしばしばある。

6. プロセスシステム工学の課題と手順 先にあげた図2の如きシステム環境の中で新しいプロジェクトを開始する場合, プロジェクトチームの編成, 業務処理, プロジェクト本体の検討設計の各ステップを, OR 的, ないしシステム工学の立場から最適化することについて最近の報文が^{8,9)} あるが, 矢木ら¹⁰⁾ はプロセスシステム工学においてプロセスの計画設計の段階での課題とその取り扱いをのべ, 問題が与えられた時必要な知識データの十分な供給条件が充たされればフローシート, 装置, プラントシステム, 操業等の最適化問題を組織的な方法で解くことの可能性を提示している。

表 1 システム最適化手順の比較

八 木・西 村 ¹⁰⁾	W.O. Cochran ¹¹⁾
①問題の定式化	①問題を設定し, システムの入出力をきめる
②装置の数学モデルの作成	②システム・サブシステムの関係を使って取扱いを簡素化する
③プロセス回路網の解法	③目的函数を数式化し, 制御条件を明かにする
④最適化計算	④最適化計算

ところでこれらの課題が解かれる手順は 表 1 に示す如く, 人によって多少表現が異なるにしても, いずれも OR 的な手法をとっている。

いずれにしてもこれらの中で個々のユニットプロセスの数式モデルを作る段階が大きな仕事になるが, 特に問題になるのはシステムの個々の構成要素を結合するロジックであつて, 電気工学, 計測工学における回路網理論に相当するところが化学プロセスでは体系化されていない点が指摘されている¹²⁾。

理論的, 解析的の接近の効果が低い場合でも問題を解決する現実の必要性ある場合矢張りこれは OR の問題であることは既述のことによって了解されるであろう。

一般に化学プロセスは多変数, 多次元, 多段階である上, さらに大きい特徴として, すべての変化が流れている状態で起っており, 混合状態がプロセスシステムの数式モデル, 出力に大きく影響し複雑さを倍加している。したがってこれらを解くのに電算機の助けを借りぬと, 理論モデルあるいはそれを近似化したものであつても到底実用にならぬが, 理論的な組合せが未詳であるようなシステムに就ても論理的科学的方法で実際に即した解決の接近は, 今やシステム工学と OR の発展した手法と, 高速大容量の電算機の活用を必須としている。電算機によるシュミレーションはかかる意味で複雑大規模なシステムの挙動を解明する中心的役割を持つと認められ, このことはまた研究開発の効率化, 技術の高度化に大きな影響を持つに至ることはあとで述べる。

化学工学分野で始めてシステム工学の概念を登場させた¹³⁾ T.J. Williams は最近日本に寄せた彼の論文¹⁴⁾に “今やシステム工学とは一般に 化学プラントの設計とプロセス制御の問題に電算機および高度の数学的方法を応用することを意味する言葉となっている。この方面では計測と制御のための電算機によるシュミレーションと計算機制御が, この数年の間素晴らしい発展を遂げた。

とその冒頭に述べている。

II. シュミレーションと電算機

1. シュミレーションの意味 今電算機のことを一応分離してシュミレーションということ自体の意味を考えると, その表現はいろいろあつて定義することにも困難が¹⁵⁾あるが抽象的にその1つ¹⁶⁾を述べると

「ある体系(システム)において, その一部に変化があつた時, それが他にどういふ変化をきたすかを研究する場合, その研究に必要な体系の本質的構造, 性質をとり出してモデルを作り, そのモデルを操作するこ

とにより体系そのものに発生する状況と同様な状況を発生させることをいう」という風に規定することでもできる。

科学技術の分野における模型または模擬実験がこれに相当し、考察の対象とする実際の状況の模型をつくり、それによって実際の動作に似たものを、他の手段で表現して実験を行うものである。

示例としては Flight Simulator は飛しょう体の運動をシュミレートする装置で、その実験操作がシュミレーションであり、原子炉 Simulator は原子炉の動作のシュミレーションを行う装置といえる。

2. シュミレーションと理論 シュミレーションは前述の様に実体の挙動を取り出して調べるために実験する手段であって、実体が明確に理論的に解明されたものについてはその本来の意義はなくなる(教育目的のある場合は別として)。

たとえば普遍的な熱力学の法則、質量作用の法則等過去多くの実験や経験から帰納され、現実に普遍妥当性が確認された理論によって結果がただちに判明するものをわざわざ実験によって解を得ようとする人は居ない。

電算機によるシュミレーションは、システムの挙動を模擬するのに数式モデルを使うが、これが知ろうとする挙動がすべて普遍妥当性のある法則による理論式で表現されているとすれば、如何に複雑な数式の組合せであろうともこれに条件を与えて結果を出すことは単なる計算に過ぎない。

科学技術の研究において理論的解析の立場から事象の数式モデルが電算機にかけられ解を求められることが多いが、それが実験としての意味を持つかどうかによりシュミレーションであるか数学計算に止まるが判断される。もちろん現実から一応離れて抽象化した数学的パターンのいろいろの組合せを電算機にかけて解の性質をいろいろ吟味することもあるがこれを pure science の立場からの実験とみることも出来ようが、厳密にはシュミレーションの一部としての意味を持たねば数学実験と称して区別するのが工学研究の建前であろう。(電算機実験を一面数学実験と表現する立場も見受けられる)。

学術研究論文に電算機による数式計算の例を多く見受けられるようになったが、計算結果の数字の価値如何は問わず、その使われ方が数学計算としての役割に止っている場合が多い。

前章に述べた如くシステムは多くの要素が相互依存的にからみ合った複雑さにありその挙動を如何に解析するかがシステム工学に課せられた課題であるが、これらの状況においては従来駆使された解析的接近はしばしば挫

折するかあるいは実用に程違いものとなる場合が多い。そしてこの様な場合にこそ OR 的立場に立ったシュミレーションによってシステムの解析実験を行うことが、その挙動を明かにするために残された現実的唯一の方法といえるであろう¹⁷⁾。

3. シュミレーションの構成

i. 論理構造 ここまで1つのブラックボックス(単位システム)があって、ある入力を与えるとそれにしたがってある出力が得られると考える。ボックスの中の状態はわからないが、いろいろな入力に対する出力を調べて入力変動と出力変動との関係を知ることができる。この関係は多くの変数を持つ関係で現わされるが、簡単な機械システムの様な場合がそうであるがこの関係から入力によって出力が言える。

しかし今一定の入力を加えた時、出力が不安定にバラツクと入力変動に対し出力変動の関係をはっきり知ることができない。

これは前のシステムの中の多くの変数に対し、これらに影響を与える別の変数が作用している場合に相当するので、これを関係式に追加してゆかねばならぬ。

今プラントモデルについて簡単な例を引用¹⁸⁾すると、図3が後者の場合に相当する構造式で書くと

$$Y=f(X, D)$$

で示される。

図3 システムモデルの構成

ここにXは装置の入口の状態を、Yは出口の状態を現わすベクトルで、Xを与えるときYが出るようになっている。ただしこの関係は装置の構造、操作条件などのいわゆる設計変数に依存するので、これらをまとめてDで示してある。これらの関係を示すモデルを使うと、たとえば段数、環流比などの与えられた蒸留塔に原料を供給すると、塔頂塔底からどのような留分が出てくるかをただちに知ることができ、複雑な計算であっても電算機によってきわめて短時間に答が出る。

ii. モデル作成の手順 シュミレーションを行う手順は目的により多少異なるが、一般的には図4の如く、まず問題が設定され、これに基いて実際の状況のデータが収集整理される。

そしてこれらの関係、挙動を表現した最初のモデルが作られ、それから電算機を使う時はこれをプログラムし条件を与えて計算実験を行い実データとの比較吟味を経てモデルの修正(この際不足データのため実データの再

図 4 シュミレーションの手順

収集を追加することもしばしばある)を行う過程を繰返し、モデルをだんだん実体の挙動に近づけてゆく過程は前提の OR 手法そのものである。

iii. シュミレーションモデルの分類 シュミレーションは結果の定まる状況から次の様に分類される。

- a. 確定的シュミレーション
- b. 不確定的シュミレーション

前者はその挙動が物理、化学的な法則性が支配している様なシステム、人の造ったルール、スケジュール等を中心に組み立てたシステム等でモデルの形が複雑になることが多い。

後者は文字通り不確定要素の多いシステムで結果の確率分布や平均値、分散を求める必要がしばしばあって、モンテカルロ法モデルを使ってきわめて多数回の実験を反覆することになるが、さらに複雑なのは競合マーケットの状況の如く相手の出方でどうでも変る可能性のあるような競争システムの場合の考察を進める時に用いられるゲーミングシュミレーションなども OR 的立場で意志決定によく用いられるので多くの政策についてきわめて多数回行って比較する必要がある。

電算機によるシュミレーションはいろいろなモデルについて短時間に多数の繰返しの実験を行うことができるが、このことは現実の挙動についてそれが実際に起るよりもはるかに早くその結果を推定できることである。

モデルの内容は文字、記号、図式等抽象概念の助けを借りて実際の挙動の構造が明らかにされればよいから、いくつかの変数の間に微分方程式で表わされる関係もあり、また PERT として知られる計画システムの様にある動作と動作の間の前後関係の様な論理関係や、既述の確率分布で表現されるようなものも含まれるので、複雑なシステムの挙動を詳細広範囲にシュミレートしようと

する程モデルも複雑になり、データの収集整理がうまく行ってもモデルとして実際の状況を再現してみることには相当困難な仕事になる。

実際の立場からは、ポイントになる問題に集約して必要かつ十分なモデルを設計する態度が重要で不必要に多くの特徴を持ち込まないようにする反面、単純化し過ぎて実体の状況を十分表現できないようなことでも困る。

したがって同じシステムのシュミレーションでもそのモデルは目的に応じて異なった表現の仕方があることに留意する必要がある。

4. 電算機について 電算機は大別してアナログ型とデジタル型との2つに分けられるが今日電算機として大規模広範な応用がクローズアップしているのはデジタル型である。

シュミレーションはどちらの型を用いても実施することができるが、たゞ目的に適した電算機を選ぶことが有効であるから、両型の特徴と使用方法、分類の差について簡単にのべる。

i. アナログ型電算機 現在のアナログ型は演算増巾器、積分器、加算器その他多くの演算要素を組合せて構成され、本質的には微分方程式を解けるようにしたものである。

次のデジタル型と対比しながらその特質をみると、まづ最も問題となるのはその精度である。求める結果に電算機の構成機器の特性、精度が直接介入してくる。デジタル型は論理演算であるから原理上この欠点がなく高精度の計算はデジタル型に頼る必要がある。またアナログ型は計算対象が複雑になる程、電算機を大規模にし価格が上昇するが、デジタル型ではある程度以上になるとこの点は主としてプログラム技術の方にしわ寄せがゆく。アナログ型の重要な長所は、デジタル型と異なって実際の事象に近い形で近似するためパラメーターを簡単に変更してみることができ、入出力間に論理的な時間遅れがなく、結果がただちに直視できる点である。

ii. デジタル型電算機 デジタル型は数字という符号を用いてその組合せの間の論理的な操作を行うことにより結果は直接的に数値として得られることがアナログ型との最大の差であるが、今1つの大きな特色はプログラム内蔵型逐次制御の自動機械であることにある。アナログ型が既述のように各種演算器を多数その都度組合せて計算する(ダイアグラミングが必要)のに対しデジタル型は原理的には1個の加算器を持っているだけで、この計算を順次に一ステップ宛進めてゆくもので、この逐次制御をプログラムの命令がコントロールする。

純粹の計算に限らず、すべての論理操作はこれと同じ手法で行えるから、この意味でデジタル型はプログラムを理解する自動機械であり、人間がはっきり論理的に説明できるものはすべてこれを機械に受け持たせる原理的な可能性を持っている。

iii. アナログ型・デジタル型の比較 以上両型の基本的特質をみたが、実用上の比較、応用分野の展望については最近の解説¹⁹⁾に適切な表示があるので表2と図5を参照されたい。

表2 電算機の比較¹⁹⁾

	アナログ型	デジタル型
長所	<ul style="list-style-type: none"> ○並列計算で計算速度大 ○入出力量が連続で得られる ○解が図形で理解し易い ○オンライン演算が容易 ○ビルディングブロックが容易 	<ul style="list-style-type: none"> ○データ処理性がよい ○論理演算が容易 ○精度が高く桁数の多い数値計算に適する ○再現性がよい ○記憶容量が大きく内容変換が容易
短所	<ul style="list-style-type: none"> ○プログラミングが容易 ○安価である ○計算価格が安い 	<ul style="list-style-type: none"> ○大規模演算に適当 ○比較的高価である ○演算速度が遅い ○並列演算が不可能 ○プログラミングが困難

両型いずれも目的と場合により一長一短がある。

アナログ型は科学技術計算の分野では歴史も古く、アナログシュミレーションは比較的早い時期に化学工学の検討に用いられ、1960年代より大型アナログ電算機が取

り入れられてきている^{14,20)}。

最近ではアナログ型では特殊ユニットの附加により、デジタル型では高速化とプログラミング技術の向上により両者の機能はかなり接近してきている面が多いので、いずれも自動制御系を始め、広く科学技術分野の研究、設計調査、制御の面で活用されているが、デジタル型がその他事務管理、経営その他広範な社会機構全域にその活用が広がっているのに比べると、主にアナログ型の活動分野は科学技術分野に限定されているといえることができる。科学技術が企業その他広く経済社会と密接につながってゆくという意味で次節以下電算機シュミレーションはデジタル型で代表させることとする。このことはまたデジタル型がプログラム言語を理解できる論理的自動機械でより広範な用途の展開が期待されることに重点を置く意味もある。

iv. ハイブリッド型電算機 上述の両型それぞれの欠点を相補うものとしてハイブリッド型(アナログデジタル型)の開発研究が進められている。特にこれは化学プロセス系のシュミレーションにおいて、論理判断機構を含むシステムの動的特性モデルを得る際の現在のシュミレーション技術上の制約を超えることができると期待され、Williams^{前出)}によると今後数年間の内にプロセス工業ではこの種の電算機が普及するものとみられる。

v. デジタル電算機のシステム デジタル電算機は演算、記憶、入力、出力、制御の5つの機能を有機的に結合したハードウェア(Hardware)と、これを効果的に動作させるためのソフトウェア(Software)さらに入力すべきモデルとデータのプログラム(Applicationware)より構成されるマシンシステムであるから、システム全体として果すいろいろな機能はこれらの要素の組合せを変えることによるいろいろな特徴を出すことができる。

5. デジタル電算機の重要な応用機能

i. 基本的な機能 共通的な基本機能としては事務作業の機械化に見られる様に、量的に膨大な作業を迅速正確に遂行できることであり、さらに情報処理システムに使用される時は、データの収集、分類、貯蔵、比較、集計といった機能が利用され計算機械としてよりは論理的処理機械としての特徴がはっきりする。

論理機械として高度な応用がはっきりする点ではさらに相互に関連する膨大な諸変数を迅速に処理する能力で、これが他の諸機能と新しくシステムに付加される付随機能と結びついて数多くの応用機能を生み出してゆく。

ii. 実験とデザイン 科学技術の分野で特に重視すべき能力を2つに絞ってみるとそれは「実験とデザイン」

図5 計算規模・速度と適用計算技術の関係

ならびに「管理と制御」であろう。

先程の大量の諸変数の組合せを迅速に比較判断する能力がさらに図型 $\longleftrightarrow$ 数式変換処理能力と組合せられて、たとえばブラウン管の面上に light pen で製図すると同時に、材料強度計算を行い、そのデータをただちに工作機械に操作させることによって、機械製図の場合により省略して工作を可能ならしめることも可能になり、もちろん図面そのものも計算と対話しながら改良してゆくことも実用化されている²¹⁾。図型入出力処理はグラフィックデータプロセッシングといわれ、化学プロセスのデザインについても応用ができ、たとえば類似のやり方でプロセスフローシートを電算機が描き出した例が示されてある²²⁾。

人に入ってくる情報の 80% は視覚を通じてくるといわれ、特に機械、電気、建築などの構造設計、製作等のエンジニアリングになると図の重要性は決定的であるが電算機と視覚を通じて対話しながら人間の思考を進めてゆくような方式は、人間の創造的精神活動を増進することにも重要な改革を与えることになるかもしれない。

iii. 管理と制御 これはプロセスの電算機制御が適例であるが、機械的システムに限らず、希望水準、すなわち基準を設定することのできるあらゆるプロセスシステムに対し同じことが適用される。予想したことと実際遂行中の異なった変化の一切を検出し、標準との偏差を回復する命令が出せるから、事務システムでは生産管理、在庫管理等もできるし、この機能は今後企業に著しく大きな影響を持ってくるであろう。

電算機は今後ソフト、ハードウェアの進歩と共にますますフレキシブルな能力を具備してゆくと共にその利用の方法もますますその範囲を広げてゆくことと思われる。

III. 研究開発における電算機シュミレーション

1. 研究開発における電算機応用の一般 生産技術開発過程で、新しいプロセスが誕生し、工場操業が確立するまでの過程に電算機が如何に適用されているか筆者の小文²³⁾から引用した図を 図 6 に示す。

そのうち R&D の段階に限っていえば、まづ基礎研究、応用研究の段階では主として化学反応そのものゝ発見と解明、応用目的に応じた諸条件の相関関係を見出す努力がなされるが、関与する物質と反応の機構に関する基礎データが、電算機技術の利用により有効に得られるようになった。

たとえば複雑な反応系での反応次数、速度常数、平衡関係の決定等の解析手段として、シュミレーションモデ

図 6 技術開発の各段階における電算機の活用例

ルを使った試行錯誤法が電算技術で実用化され、同様に測定困難な条件での物性値の推定等も高度な計算テクニック (Non-linear Programming 等) の駆使により、容易に入手し得る範囲が広がった。

尚物性常数については、すべての段階で必要となる基礎的なものであるが、実測できない状態の値を推算するのに従来同じ目的に関してもいろいろの相関式があり、出した値の精度も比較判断の基準に迷うことが通例であったが、最近米国の Du Pont, Celanese, U.C.C., Monsanto 社等々のサポートの下に A.I. Ch. E. が指導し、A.D. リットル社の開発した物性常数推算プログラムが入手し得るようになったが、これは、関連あるいくつかのデータが与えられた場合それに適する計算方法を自動的に電算機が判断選択する機能を含んでいることが注目される。

電算機シュミレーションで反応機構を推定ないし決定する方法については従来 T.J. Williams¹³⁾によって示されていたが、山下²⁴⁾はこの方法によりアクリルニトリルのオキシ反応における Co-触媒の関与するメカニズムを追及しさらにその反応モデルから触媒と原料の濃度と反応速度、副反応物収量との関係を明かにしている。(この場合アナログ)。開発段階になると、製造プロセスとしての構想が固まり、モデルプラントを主体として工学的見地から反応操作や各単位操作を含めたデータ採取、解析が行われる。

反応速度の解析ができれば、適用した反応型式についての最適条件を、指定された制限の下にたとえば連立常微分方程式の繰返し計算や試行錯誤法によって求めることができる。

蒸留、抽出、分離、吸収といった単位操作関係も、物理平衡、物質収支、熱収支を満足する解を求めるため各種の手法が開発されている。

種々の装置の解析の後、これらを結合して演算テストと吟味を繰返ししながら全体としての物質収支と熱収支とのシステムにまとめ上げて、シュミレーションモデルができ上り、次の段階の設計面で威力を発揮することとなる。

設計段階では各プラントのスケールアップ、反応器の設計等が最も工学的に難しいところで電算機の本格的な活動分野でもあるが、これだけで1つの大きな領域であるし、多数の解説、論文があるので省略する。

なお研究開発体制の問題としては、技術情報、文献の収集、調査への電算機使用も1つの分野で、特に化学文献の場合物理構造による検索技術が開発され実用化が試みられつつあるのも電算機技術の別の分野の発展 (Information Retrieval) である。

この他高度な分析機器の開発と普及に見られる如く、研究手段の武器装備が進歩するにつれて、研究のやり方も変化を受けるが、同時に研究開発のすべての段階を通じて、実験計画法や PERT 等の管理、解析手法も電算機技術により実用性が一段と高まり、今や研究の方法も体制も大きな変貌を遂げつつあることを見逃すわけにはいかない。

2. シュミレーションに伴う問題

i. 数式モデルのまとめ方 対象とするシステムの特性とシュミレーションの目的、電算機とプログラムの関係でモデルの形、規模が様々なタイプになるので今のところ定説とか、規格化されたルートがないといった方がよいが多くの場合理論解析と統計解析を組合せながら OR 的手法で段階的に精度を高めてゆく方法がよく用いられる。

シュミレーションの欠点は、従来計算量が膨大でコストがかかり過ぎるという点と、信頼度の不安があげられていたが、確かに相当単純化した条件でないと、デジタルの場合特にそうであるが、余程大きな演算能力を持つ電算機システムでないと、実用的なシュミレーションは困難であることは事実である。もっともこれはモデルの形をどう現わすか数学的な手法とプログラミング技術にも密接な関係を持つものである。

確定的シュミレーション(前出)の型でモデルの精度

を早く上げるには、矢張りそのシステムに関してそれを確かに支配していると思われる法則的な関係を早く抜き出し、それ等を支柱として組み立てることが必要で、系に関する知識がほとんどない時は適当に見当をつけた仮定から出発して試行錯誤を繰返すため能率は確かに悪い。

分類的な表示をすれば¹⁹⁾

- i) 理論モデル法：完全に理論モデルだけで組立ててみる方法で、挙動追究実験という意味ではシュミレーションという表現には疑問がある。
- ii) 理論モデル修正法：理論モデルを一応作成し、これを実際と比較して理論モデルを修正する。
- iii) 実験式による方法：実験データよりモデルを作成する。

能率、経済性を別とすれば、iii)の方法が最もシュミレーションの特色を発揮する面であり、不確定形シュミレーションに適用されるのはもちろん、技術分野でもプロセスに理論的に未知の分野があったり、プロセス変数間に相互干渉やパラメーターの変化があって理論的解析が困難なことがあり、実験式を用いざるを得ぬ場合も多い。

解析的に数式化する場合化学プロセスにおいては

- a. 物質収支式
- b. 熱収支式
- c. 移動速度式

を基礎とし、これらの関係からプロセス特性を表わす方程式を導くのが普通である。

ii. シュミレーションプログラム 数式モデルができても、これをどうして解くかが次の問題で、その解法を、電算機のロジックに併せてプログラムで指示をしてやる必要がある。

複雑な化学プロセスのシュミレーションプログラムを1つ開発するにも相当の労力を要する。シュミレーションの度毎に始めからスタートし直したのでは結局この方法の普及が妨げられ実用から遠ざかる結果になる。

現在では化学工学でいえば、各単位操作ごとに、あるいはまた反応器、等の設計プログラム、物質収支式、熱収支式、プロセスの単位構造等に夫々開発したプログラムを標準化しこれらユニットプログラムを必要なだけ組合せて任意の規模、型のモデルについてシュミレーションプログラムを作り上げるビルディングブロック構造体系をつくり、プロセス全体に共通母体として使える汎用プログラムの開発が各所で行われ、それぞれ大きな実用目的を達している。汎用プログラムの構成の1例を図7に示す。

図 7 Building Block Program System

- Level-I : 物理化学常数計算プログラム
 ~ II : 熱力学計算プログラム
 ~ III : 単位操作反応及操作計算プログラム
 ~ IV : 副計算実行プログラム
 ~ V : 主実行コントロールプログラム

これらについての解説は最近の資料で得られるのでそれらを参照されたい^{25,26)}。

3. シュミレーションによる研究開発の実例

(プロピレン法イソプレンプロセス)

電算機シュミレーションという最新武器を活用してベンチスケールの実験データから一挙に 17,000 倍のスケールアップに相当する本格工場を建設して見事成功させた例が報告²⁷⁾されているのでその概要を紹介する。

これは Goodyear Tire & Rubber Co. の有名なイソプレンモノマーの製造プロセスの研究開発物語である。

周知の如く合成イソプレングムのモノマーの最も理想的な製造プロセスを求めて、実験室段階で十数種のプロセスをスクリーニングした結果選び出したというのがプロピレンジマー法といわれるもので化学的には次の三段階による。

第1工程 二量化工程

第2工程 異性化工程

第3工程 熱分解工程

特に詳細にのべられている第1工程 2 量化反応ステップについては、

直立熱交換型管式反応器にプロピレンと触媒の Pr_2Al の均相混合物を供給して加圧下で反応させる。

基礎実験で得られた反応の解析データを基にしたデジタル電算機での数学モデルを基にして、ベンチ反応器の諸条件を入れたシュミレーションモデルを作り熱収支、物質収支等の数字を満足する条件でシュミレートした結果、電算機実験で予測した実装置の温度は最大 3°F 、温度の変動範囲は 0.2°F 位のおどろくべき一致を示したという数式モデルの型も示されているが詳細は原報を参照されたい。

報告はこのプロセスがガスクロマトグラフ、電算機等最新の武器を、小試験の段階から駆使し、実験計画法、専門家の協力体制等あらゆる近代的方法と道具を有効に使って時間と金を大いに節約した効果を強調している。

特に初めから電算機が協力したことは、その後の開発にあたってしっかりしたデータの基礎に基いて、プロセスの望ましい姿を明確に把握し、また何処にその後の問題があるのかをはっきりさせ、判断が適確に行われる基になったという。

IV. 結 語

電算機とその応用に触れた報文、書籍は最近著しい数にのぼるが読んで見たあとで結局難しいものだという印象を持つ人が多い。また電算機の周辺専門家と、研究開発その他現実の事象にとり組んでいる専門家との間に共通のコミュニケーションルートを見出すことが難しいような気がする。電算機は専門家の道具ではなく、すべての人が頭脳の増巾器として今後使いこなしてゆくのが未来の姿であろう。人と電算機をつなぐ一つの隘路であったプログラムの問題も、図形処理法の開発にみられる如く、だんだん使い易くなるであろう。最後には自動車の免許証をとる位の努力、素養で自由に使える時代が必ずくると思う。研究開発への応用にもあらゆる新しい可能性がまたあると思われる。技法におち入り、実体を見失わぬよう、できるだけそのフレキシブルな特性を浮かび上げさせることに留意したつもりであるが、シュミレーションということの概念規定だけでは OR もシステムもそうであるが、矢張り解ったようで解らぬ結果になりはしないかを恐れる。しかしこれらは皆公式とか知識として理解するものではない。環境に適應してフレキシブルに発揮する科学精神に基く方法論であって、固定的概念知識と化することを最も嫌うものである。

シュミレーションも結局やってみて、実体が解ってくるたぐいのものかもしれない。諸賢への問題提起の意味で浅学を顧えりみず敢えて筆をとった次第である。

この上のご教示、ご叱正を賜れば幸いである。

(昭和42年5月9日受理)

文 献

- 1) R.E. Machol, *Systems Engineering Handbook* Mc Graw Hill (1965)
- 2) 高松武一郎, 化学工学 **30** 8 (1967)
- 3) 松本勝男, 化学工業 **17** 51 (1966)
- 4) 綾部孝夫, 中島正司, 化学工学 **31** 324 (1967)
- 5) 北川敏男, オペレーションズ・リサーチ **2** 7 (1967)
- 6) M.C. Molstad, 化学工学 **27** 41 (1963)
- 7) 森芳郎, 化学工学 **28** 842 (1964)
- 8) 森八蔵, 化学工学 **28** 849 (1964)
- 9) Asher and Disman, *Chem. Eng. Progress* **59** 1 (1963)
- 10) 矢木栄, 西村肇, 化学と工業 **19** 1074 (1966)
- 11) W.O. Cochran, *Chem. Eng. Progress, Symp. Series*, **56** 31, 88 (1960)
- 12) 西村肇, 化学工学 **31** 323 (1967)
- 13) T.J. Williams, *Systems Engineering for the Process Industries*, Mc-Graw-Hill (1962)
- 14) T.J. Williams, 化学工学 **31** 302 (1967)
- 15) 石原善太郎, 電子計算機と企業経営 118, 鹿島研究所出版会 (1966)
- 16) 太田文平, 味村重臣, 日本の電子計算機 200, 日本能率協会 (1965)
- 17) 経営化学協会編, シュミレーション入門, 日刊工業新聞社 (1960)
- 18) 西村肇, 化学工学 **31** 319 (1967)
- 19) 大部操, 化学装置 12 (1967)
- 20) 東山尚, 石油と石油化学 **10** 67 (1966)
- 21) 穂坂衛, 自然 36 (1967)
- 22) 石原善太郎, 鴛田正春, 化学経済 91 (1967)
- 23) 長瀬徹夫, ケミカル・エンジニアリング3, 2, (1967)
- 24) 山下直, 富田潔, 化学工学 **31** 10 (1967)
- 25) 東山尚, 化学工学 **31** 313 (1967)
- 26) 大島柴二, オペレーションズ・リサーチ 27 (1967)
- 27) J.J. Garmom, W.E. Morrow, V.J. Anhorn, *Chem. Eng. Progress* **61** 57 (1965)

協会誌専用

ファイル

協会誌専用の保存ファイルを準備しております。

ご希望の方は実費でお頒け致します故代金を添えてお申込み下さい。

定 価 1 部 150 円 (12 冊綴り)

送 料 1 部 75 円