化学プラントリアルタイム最適化への新しい取り組み

三菱化学（株）科学技術研究ｾﾝﾀｰ　○江本　源一
京都大学大学院　情報学研究科　福島　雅夫

1．はじめに

近年，プロセスのリアルタイム最適化(Real-Time Process Optimization：RTO)は様々なコマーシャルパッケージの普及と共に産業界に広く普及しつつある．RTO は定常状態においてプロセスを物理化学モデル（一般に非線形な代数方程式群として表現される）によって定式化し，さらにコスト最小化を達成するような目標関数を定義して逐次２次計画法などの非線形最適化手法を用いて最適な運転条件を求めることにより，それを運転員を介さずに下位の制御システムの目標値として自動的に設定するものである．

従来の RTO は対象を定常状態として捉え，その時刻における最適化を行うものであった．しかしながら現実のプロセスでは，運転時間と共に触媒の活性が劣化する反応器や，運転時間と共に汚れが進行し効率が劣化するボイラーなど，時間と共に特性の変化するプロセスが少なくない．そのようなプロセスに対して，将来の状態を予測しながら全運転期間を対象とした最適化（時系列最適化と呼ぶ）を実現する取り組みについて紹介する．

２．時系列最適化問題の定式化

時系列最適化問題の対象としてはスケールの堆積によって経時的に効率が劣化するボイラーの負荷配分最適化や触媒の劣化により性能が劣化する反応器の最適化などが考えられる．　これらの問題は瞬時ベースの最適化のみでは不十分であり，全運転期間での利益が最大化されるように考慮しなければならない．したがって，最適化問題としては目標関数を全運転期間の利益最大化とし，制約条件としては２種類の制約，すなわちマスバランスやヒートバランスなど瞬時ベースでの制約条件（同時刻制約と呼ぶ），触媒の劣化など経時的に変化するプロセスの特性をあらわす制約条件（時系列制約と呼ぶ）が存在する．　一般に定式化すれば下記のように表現される．

$$(P)\quad \min_{x} \sum_{t=1}^{T} f_t(\mathbf{x}(t))$$
subject to
$$\sum_{t=1}^{T} \mathbf{c}_t(\mathbf{x}(t)) = 0 \qquad \text{:時系列制約}$$
$$\mathbf{x}(t) \in X(t) \quad t = 1,2,\cdots,T \quad \text{:同時刻制約}$$

3．最適化アルゴリズム

時系列最適化問題ＰをＳＱＰ法を用いて解くことを考える．ＳＱＰ法では反復の都度，ＱＰ部分問題を解く必要があるが，その際に時系列問題構造に着目してＱＰ部分問題を効率的に解く．問題ＰのＳＱＰアルゴリズムの k 回目の反復におけるＱＰ部分問題は下記のように表される．

$$(\mathrm{QP}^{(k)})\quad \min_{\mathbf{d}} \sum_{t=1}^{T} \left\{ \nabla f_t(\mathbf{x}(t)^{(k)})^T \mathbf{d}(t) + \frac{1}{2} \mathbf{d}(t)^T \mathbf{B}_t^{(k)} \mathbf{d}(t) \right\}$$
$$\text{subject to} \sum_{t=1}^{T} \left\{ \mathbf{c}_t(\mathbf{x}(t)^{(k)}) + \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}(t)^{(k)})^T \mathbf{d}(t) \right\} = 0$$
$$\mathbf{d}(t) \in \hat{X}(t)^{(k)} \quad t = 1,\cdots,T$$

ただし，$\hat{X}(k)$ は $X(k)$ を線形近似した制約条件である．ここで，ＳＱＰ法の反復でヘッセ行列(B)の正定値性が常に保たれるように更新すれば，元の問題 P が非凸であっても，QP 部分問題は必ず凸になり，双対性が成立する．このことに着目して，$QP^{(k)}$を解く代わりに，その双対問題を解くことを考える．双対問題は下記にて定義される．

$$(\mathrm{DQP}^{(k)}) \qquad \max_{\mathbf{u}} \phi^{(k)}(\mathbf{u})$$

ただし，$\phi^{(k)}(\mathbf{u})$ は $QP^{(k)}$の Lagrange 緩和問題 $QP^{(k)}(\mathbf{u})$の $\mathbf{d}$ に関する最小値である．$QP^{(k)}(\mathbf{u})$ は下記に定義される．

$$(\mathrm{QP}^{(k)}(\mathbf{u})) \quad \min_{\mathbf{d}} L^{(k)}(\mathbf{d},\mathbf{u})$$
$$\text{subject to} \quad \mathbf{d}(t) \in \hat{X}^{(k)}(t) \quad t = 1,\cdots,T$$

ただし，

$$L^{(k)}(\mathbf{d},\mathbf{u}) = \sum_{t=1}^{T}\left(\mathbf{g}_t^{(k)T}\mathbf{d}(t) + \frac{1}{2}\mathbf{d}(t)^T\mathbf{B}_t^{(k)}\mathbf{d}(t) - \mathbf{u}^T(\mathbf{c}_t^{(k)} + \mathbf{A}_t^{(k)}\mathbf{d}(t))\right)$$

$$\mathbf{g}_t^{(k)} = \nabla f_t(\mathbf{x}(t)^{(k)}),\ \mathbf{c}_t^{(k)} = \mathbf{c}_t(\mathbf{x}(t)^{(k)}),\ \mathbf{A}_t^{(k)} = \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}(t)^{(k)})^T$$

である．ここで $DQP^{(k)}$は制約なし非線形最適化問題となるので準ニュートン法を用いて解く．また，準ニュートン法の反復の都度，$QP^{(k)}(\mathbf{u})$を解く必要があるが，$QP^{(k)}(\mathbf{u})$は下記のように T 個の時系列単位の問題に分割できるため効率的に解くことができる．

$$\min_{\mathbf{d}} \quad \mathbf{g}_t^T\mathbf{d}(t) + \frac{1}{2}\mathbf{d}(t)^T\mathbf{B}_t\mathbf{d}(t) - \mathbf{u}^T(\mathbf{c}_t + \mathbf{A}_t\mathbf{d}(t))$$
$$\text{subject to} \quad \mathbf{d}(t) \in \hat{X}(t)$$

4．計算実験

簡略されたボイラーの時系列運転最適化問題[1]に対して，本最適化手法を適用した場合の計算時間と従来のＳＱＰ法を適用した場合の比較を表１に示す．表１において Case-1 は本手法を適用した場合，Case-2 は従来のＳＱＰ法を適用した場合の計算時間である．全運転期間の長さが長くなるにつれ本手法が有効であることが判る．また，並列計算が実現できた場合はその効果は更に大きいことが推定される．(* 理想的な並列計算が実現された場合)

Time Horizon		5	10	15	20
Case1	Comp. Time (sec)	38.28	156.54	286.11	620.71
	Ideal Comp. Time* (sec)	16.76	70.45	91.84	214.79
	No. of Iterations	12	25	29	34
Case2	Comp. Time (sec)	23.23	123.53	305.72	1074.4
	No. of Iterations	11	16	18	35

表１　計算時間の比較

5．最適化計算結果

経時的な触媒の劣化により反応収率が低下する化学反応器の運転最適化に本手法を適用した例を示す．最適化の目的はバッチあたりの反応収率最大化であるが，反応活性劣化に伴い反応器出口の副生物が増加するため，運転員はこれを一定のレベルに抑えるために操作変数を調整する必要がある．図１において実線は運転員の運転履歴であり，点線は最適化計算結果である．最適化を実施することにより，より高い反応収率が得られることが示された．

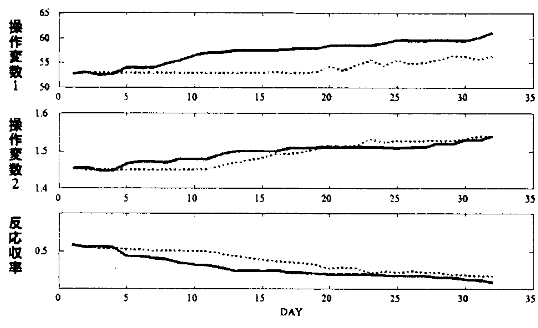

図１　反応器最適化結果

参考文献

[1] 江本，福島：ﾌﾟﾛｾｽ産業における時系列最適化のための逐次２次計画分解法，ｼｽﾃﾑ制御情報学会誌 (掲載予定)

[2] 茨木，福島：最適化の手法，共立出版，1993

[3] 福島：非線形最適化の基礎，朝倉書店，2001