化学プロセスの最適化問題

西尾雅年・城子克夫・梅田富雄

1. はじめに

化学プロセスは所与の原料から，より付加価値の高い製品を物理的，化学的な各種操作によって経済的に製造するシステムであり，中心的な役割を果たす生産設備および原料，製品の入出荷設備，熱，動力，水などを供給する用役設備を含んでいる．

化学プロセスの計画，設計，運用に関する各種問題を数理計画的な観点から分析してみると，一般にそれらは各種制約条件を満足する独立な決定変数を，所定の評価関数が最大または最小となるように決定する問題とみることができる．問題が定式化されれば，数理計画法の適用によって所望の解を得ることが期待されるが，観点を変えれば数理計画法が適用可能なように問題を巧みに定式化しなければならないことに留意する必要がある．すべての計画，設計，運用業務が数値計算によって実施されるわけではないので，必然的に一部の計画，設計，運用業務だけが数理計画問題として取り扱われることになる．

ここでは，まずプロセスの設計と運用について概説し，数理計画法の応用面からどのような問題が数理計画の対象となるかについて触れたのち，最近の研究成果の一端として「化学プロセスの最適燃料供給システムの決定」について紹介する．

にしお　まさとし，しろこ　かつお，うめだ　とみお
千代田化工建設

2. 化学プロセスの設計と運用

化学プラントに代表される生産設備は反応，分離，混合などの単位操作を行なう装置が有機的に結合されたシステムであり，入荷設備から供給される原料を，用役設備から各種操作に必要な水，蒸気，電力などの供給を受けて製品に変換するものであるといえる．多くの化学プラントは，原料から製品にいたる物質の流れが連続的であり，原料の入荷や製品の出荷が断続的に行なわれる場合には，プラントの連続処理とのギャップを調整するための貯蔵設備が必要になる．図1[1]は，これらの設備と物質およびエネルギーの流れについての関係を概念的に示したものである．化学プラントの設計にあたり，生産設備とその他の設備との関係から種々の制約条件が課せられ，トータル・システムのなかの生産設備として整合性のあるシステムを設計する必要がある．基本計画段階で化学プラントの設計条件が決定され，プロセスの基本設計，詳細設計，構成機器や配管の設計，制御システムの設計などを経て一連の設計作業が終了する．図2[2]は，プロセス設計の作業系統を示したものであり，意思決定の内容としてはシステムの構造に関するものと，システムの構成要素の特性に関するものより構成されていると考えることができる．費用・効果分析の観点から化学プロセスをながめると，プロセスシステムの効果

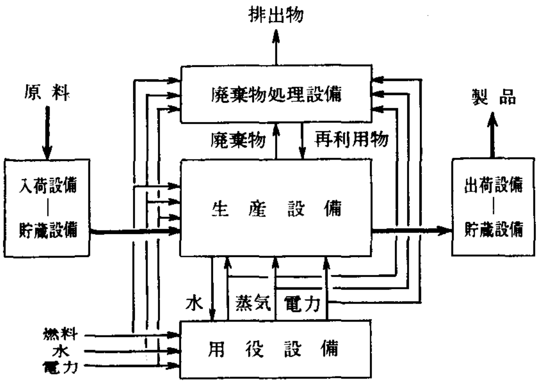

図 1 プロセスシステムの設備構成

は設計および運用の両段階において決定されるので，システムの多面的な評価尺度を設定し，設計，運用の目標を明らかにする必要がある．

化学プロセスの設計および運用問題を，設定された評価関数を最大または最小になるよう独立変数を決定する最適化問題としてとらえることができるが，通常の設計手順を考慮し運用に関する諸問題を内蔵した形のサブ問題により構成すると，図3[3]に示す関連図が得られる．個々の設計，運用業務の内容を支配するものはそれぞれの固有技術であり，これらが個々の評価関数を設定し，固有技術の数式表現の結果を制約条件の一部としてこれを満足しながら評価関数を最適にするよう個々の設計または運用に関する意思決定を行なうことになる．数理計画問題としてこれらの個別の設計または運用問題を定式化し，最適解を求めることの可能性が理解されることと思う．固有技術の数式表現にあたって経験的な要素をいかにして取り扱うかは重要な課題の1つとなる．

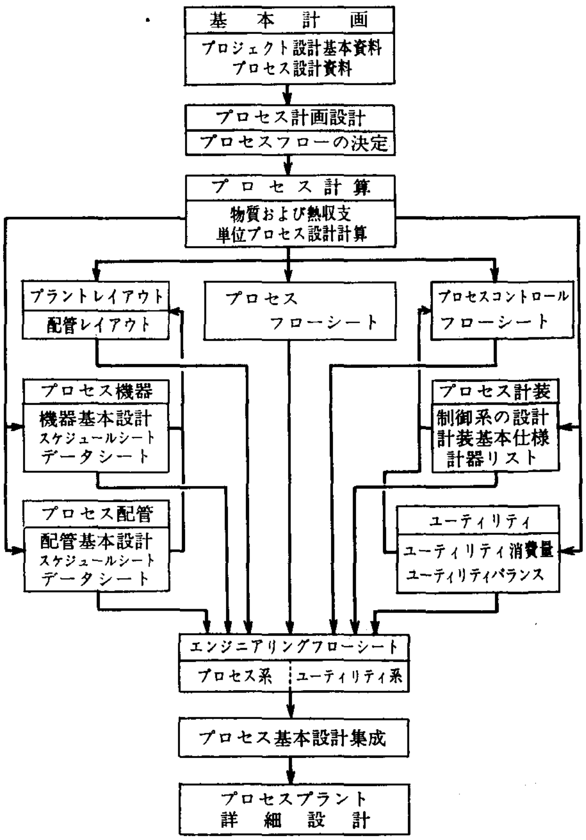

図 2 プロセス設計作業系統図

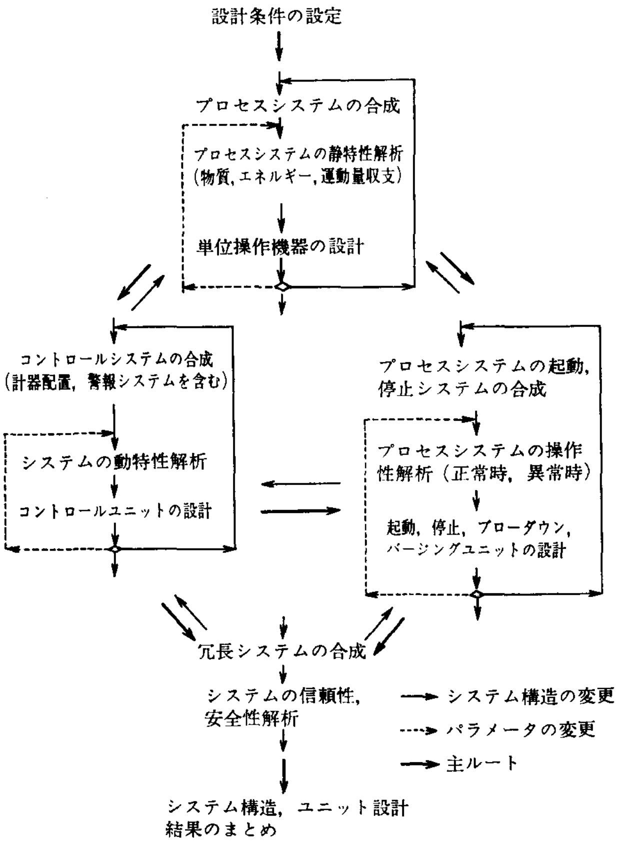

図 3 プロセスシステムの合成，解析，最適化

表 1 プロセスシステムの最適化における各種の特徴

立場	最適問題	目的関数	制約条件	変数の数	状態	代表的手法	決定のレベル
設計	計画	線形	線形	大	定常	線形計画法	上位
	設計	非線形	非線形	小	定常	非線形計画法 探索法	下位
運用	運用計画	線形	線形	大	非定常	線形計画法	上位
	運用	非線形	非線形	小	非定常	変分原理にもとづく方法	下位

表 2 プロセス設計，運用における数理計画法の主要応用分野

各種問題 ＼ 技法	ヒューリスティックス	分解原理	線形計画	動的計画	整数計画（組合せ問題の処理を含む）	非線形計画（制約条件つき最適化）	グラフ・ネットワーク理論
システム構成要素の決定	○				○		
大規模システムの構成			○				
基本システム構造の決定	○				○	○	
反応，分離システムの構成	○	○		○	○	○	
熱交換システムの構成	○	○	○		○		
単位操作機器の設計	○	○				○	○
システムの運転条件の決定			○			○	
コントロールシステムの構成	○	○			○		○
コントロールユニットの設計	○					○	
起動停止システムの構成	○						○
システムの異常診断							○
システムの高信頼度設計	○					○	
システムのデータ処理			○			○	

3. プロセスの最適化の手法と応用分野[1][3][4][5]

定式化された最適化問題を解く場合，問題の内容によって採用すべき最適化手法が異なるが，最適化手法の選定に当っては問題を次の各項目に着目して分析すればよいと考えられる．

(1) 静的システムか動的システムか
(2) 線形システムか非線形システムか
(3) 制約条件（不等号，等号）があるか否か
(4) システム構造が複雑か否か
(5) システムの規模（独立変数の数）が大きいか否か

表1は，プロセスシステムの計画，設計，運用の各段階において，最適化問題の特徴を手法の選択を行なう意図からまとめたものである．従来比較的多く取り扱われてきたものとして，線形計画法によるリファイナリ（製油所）生産設備計画および生産計画，探索法を用いた個別プロセスシステムの最適設計および最適運転をあげることができる．表2[6]は，代表的な数理計画法と図3に含まれるサブ問題とを関連づけたものである．

表2に示した各種問題に対する数理計画の応用は，これまで必ずしも成功しているとは言い難い．その理由の1つとして数理計画法の応用は複雑な問題に対して必要であるにもかかわらず，複雑な問題に対する数理計画法による定式化がしばしば難解であるうえに，最適解に対する物理的解釈が自明でないことである．ヒューリスティックス(経験または一般則）を利用したプロセスの固有技術による取り扱いが依然として多くみられるのは，結果に対する物理的解釈が比較的容易である点にある．固有技術によるアプローチと数理計画法にもとづくアプローチの適当な組合せが，さらに検討される必要があると思われる．

数理計画法に着目して，特定の問題が解けるよう問題を分析し定式化されるためには，分解原理にもとづくシステムの分割，元問題の分解，マルチレベル的接近の採用などが必要である．元問題は一般に複雑，異質なものの集合であることが多く，巧妙にサブ問題に分解し構造化がなされれば，数理計画法が適用可能となり，同じ問題に複数の解き方が見い出し得る．現実問題に仮定を設けて数理計画法の適用を可能にすることも多いが，得られる解を現実的な解の近似値として検討の対象にするか，仮定の除去法をアルゴリズムとして組み込んだ形で数理計画法の適用を考え，より現実的な解を求めるようにするかなどの配慮が必要不可欠になる．

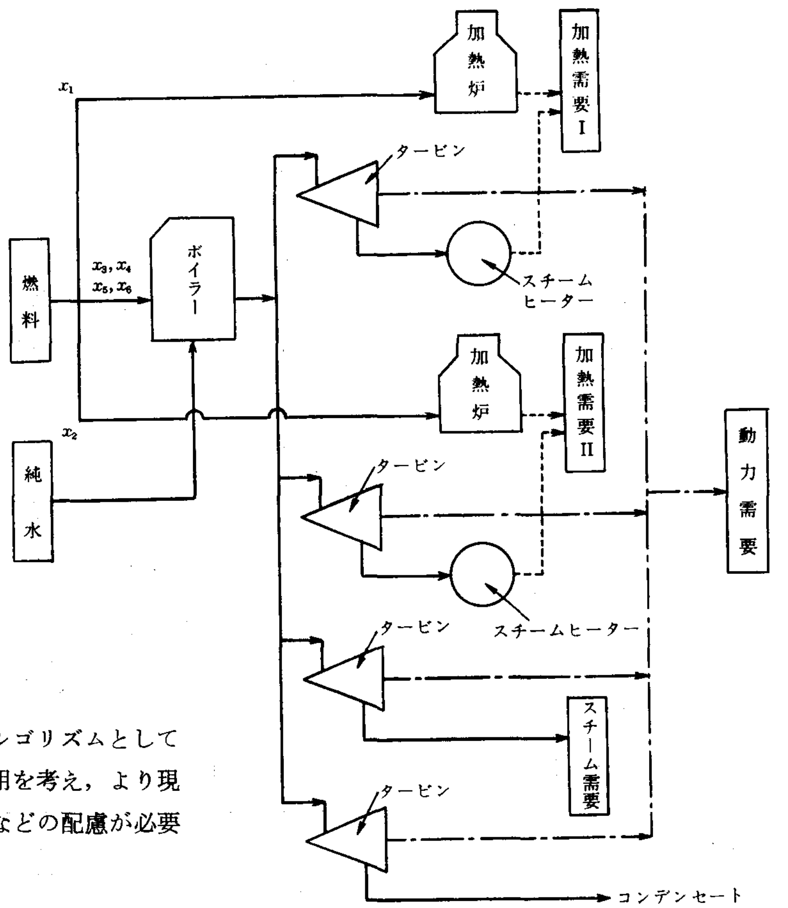

図 4　エネルギーフローダイヤグラム
実線：燃料，スチーム，純水，コンデンセート
破線：加熱負荷
一点鎖線：動力負荷

4. 化学プロセスの最適燃料供給システムの決定

4.1 問題の記述

化学プロセスに供給される燃料は，反応に使用される他は大部分，プロセス加熱用加熱炉に使用されるものと用役設備としてのボイラーで使用されるもので占められている．ボイラーで発生されるスチームは，一部プロセス注入用等を除いてスチームタービンによる動力発生およびプロセス加熱用に利用される．このように燃料は，最終的には加熱需要，動力需要を賄うために供給されているといえる．それでは加熱需要，動力需要が与えられた場合，燃料をどのように加熱炉とボイラーへ供給配分するのがよいだろうか．

従来高温の熱負荷に対して加熱炉を用いていたが，昨今のエネルギー事情により加熱炉の効率向上，あるいは他の加熱方式の選択などが検討されている．高温の加熱負荷に対してボイラーで発生するスチームを用いるスチーム加熱方式は，これまでボイラーの高圧化の技術的問題と装置費用の面からあまり用いられていなかったが，上述のごとく見直されてきている．特に背圧タービン方式による動力と熱を同時に供給する方式は，エネルギー効率上きわめて好ましいことが予想される．以上の観点から燃料の供給配分問題を取り上げ，定式化を行ない解法を提示する．

いま，2種の加熱需要 H_1，H_2，スチーム需要 H_3 および動力需要 W が与えられた場合の設備相互関連図を図4に示す．加熱需要 H_1，H_2 に加熱

炉が使用されるとした場合，供給される燃料を x_1, x_2, 熱併給動力発生方式が採用される場合に供給される燃料を x_3, x_4, 動力発生と同時にスチーム需要供給のために送られる燃料 x_5, 動力発

表 3　可能解のセット

番号	ϕ（燃料消費量）	制　約　条　件	x_1 , x_2 , x_3 , x_4 , x_5 , x_6
(1)	$x_1+x_2+x_3+x_5$	$\frac{R_2}{R_1}H_1+H_3>R_2W>H_3$	$\frac{R_1}{R_2\eta_1}\left(\frac{R_2}{R_1}H_1+H_3-R_2W\right)$, $\frac{H_2}{\eta_2}$, $\frac{1}{R_2\eta_3}(R_2W-H_3)$, 0, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, 0
(2)	$x_1+x_2+x_4+x_5$	$H_2+H_3>R_2W>H_3$	$\frac{H_1}{\eta_1}$, $\frac{1}{\eta_2}(H_2+H_3-R_2W)$, 0, $\frac{1}{R_2\eta_4}(R_2W-H_3)$, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, 0
(3)	$x_1+x_2+x_5$	$H_3\geq R_2W$	$\frac{H_1}{\eta_1}$, $\frac{H_2}{\eta_2}$, 0, 0, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, 0
(4)	$x_1+x_2+x_5+x_6$	$R_2W>H_3$	$\frac{H_1}{\eta_1}$, $\frac{H_2}{\eta_2}$, 0, 0, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, $\frac{1}{R_2\eta_5}(R_2W-H_3)$
(5)	$x_1+x_3+x_4+x_5$	$\frac{R_2}{R_1}H_1+H_2+H_3>R_2W>H_2+H_3$	$\frac{R_1}{R_2\eta_1}\left(\frac{R_2}{R_1}H_1+H_2+H_3-R_2W\right)$, 0, $\frac{1}{R_2\eta_3}(R_2W-H_2-H_3)$, $\frac{H_2}{R_2\eta_4}$, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, 0
(6)	$x_1+x_4+x_5$	$H_2+H_3\geq R_2W$	$\frac{H_1}{\eta_1}$, 0, 0, $\frac{H_2}{R_2\eta_4}$, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, 0, 0
(7)	$x_1+x_4+x_5+x_6$	$R_2W>H_2+H_3$	$\frac{H_1}{\eta_1}$, 0, 0, $\frac{H_2}{R_2\eta_4}$, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, $\frac{H_1}{R_2\eta_5}(R_2W-H_2-H_3)$
(8)	$x_2+x_3+x_4+x_5$	$\frac{R_2}{R_1}H_1+H_2+H_3>R_2W>\frac{R_2}{R_1}H_1+H_3$	0, $\frac{1}{\eta_2}\left(\frac{R_2}{R_1}H_1+H_2+H_3-R_2W\right)$, $\frac{H_1}{R_1\eta_3}$, $\frac{1}{R_2\eta_4}(R_2W-\frac{R_2}{R_1}H_1-H_3)$ 0, 0
(9)	$x_2+x_3+x_5$	$\frac{R_2}{R_1}H_1+H_3\geq R_2W$	0, $\frac{H_2}{\eta_2}$, $\frac{H_1}{R_1\eta_3}$, 0, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, 0
(10)	$x_2+x_3+x_5+x_6$	$R_2W>\frac{R_2}{R_1}H_1+H_3$	0, $\frac{H_2}{\eta_2}$, $\frac{H_3}{R_1\eta_3}$, 0, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, $\frac{1}{R_2\eta_5}(R_2W-\frac{R_2}{R_1}H_1-H_3)$
(11)	$x_3+x_4+x_5$	$\frac{R_2}{R_1}H_1+H_2+H_3\geq R_2W$	0, 0, $\frac{H_1}{R_1\eta_3}$, $\frac{H_2}{R_2\eta_4}$, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, 0
(12)	$x_3+x_4+x_5+x_5$.	$R_2W>\frac{R_2}{R_1}H_1+H_2+H_3$	0, 0, $\frac{H_1}{R_1\eta_3}$, $\frac{H_2}{R_2\eta_4}$, $\frac{H_3}{R_2\eta_4}$, $\frac{1}{R_2\eta_5}(R_2W-\frac{R_2}{R_1}H_1-H_2-H_3)$

生用凝縮タービンのために供給される燃料を x_6，とする時，燃料最適供給問題は以下のごとく定式化される．

$$\text{Min.}\ \phi = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6$$
$$\{x_1, \cdots, x_6\}$$
$$\eta_1 x_1 + R_1 \eta_3 x_3 \geq H_1 \cdots (1)$$
$$\eta_2 x_2 + R_2 \eta_4 x_4 \geq H_2 \cdots (2)$$
$$R_2 \eta_4 x_5 \geq H_3 \cdots (3)$$
$$\eta_3 x_3 + \eta_4 x_4 + \eta_4 x_5 + \eta_5 x_6 \geq W \cdots (4)$$
$$0 < \eta_3 < \eta_4 < \eta_5 < 1.0,\ \eta_1 < 1.0,\ \eta_2 < 1.0$$

ここで η_1，η_2：加熱炉熱効率

η_3，η_4：燃料が熱併給方式で動力に変換される総合熱効率

η_5：燃料が動力に変換される総合熱効率

R_1，R_2：燃料から回収される熱量の変換動力に対する比率

4.2 問題の解法

上述の問題は線形計画法（ＬＰ）を用いて解くことが可能である．通常ＬＰで定式化された問題は，与えられた条件下でＬＰコードを用いて数値解を得る方法を取る．条件が異なるケースに対しては，パラメトリックスタディを行ない組織的に解を得ることができるが，あくまでも特定的な最適結果を与えるにすぎず，しかも他の可能解を同時に提示することはない．特定の条件下で数値解を得る代わりに，任意の条件に対して一般解を求め分岐構造に解を整理する方法が次元の少ないＬＰ問題に対して報告されているが[７]，上記問題に対して適用すると非常に多岐（181本）に分れた樹木構造となり実用性メリットは少ない．

表３に示す解は，問題の本質的解析にもとづき導出した一般可能解である．これらの解の中に任意の条件に対する最適解が存在することは，線形計画法の性質にもとづき保証されるが，可能解は単に制約条件を満たしているにすぎない．ここで等号付制約条件は制約条件式(1)～(4)が満足されねばならないこと，不等号制約条件は変数が正でなければならないことからそれぞれ求められる．

表３に示した可能解を加熱需要および動力需要の大きさによって可能解を分類すると，表４のようにに表わされる．最適なケースの決定は各領域における可能解の比較によって行なわれることになるが，この方式による解の提示の利点は，需要に対応した解の構造が明確であり代替案との比較が容易である点にある．現実に，システム選定は省エネルギー以外の評価項目を考慮した総合評価にもとづいて行なわれることになるので，このような可能解の整理は有効と思われる．

4.3 数値例

上で示した方法の例題として，典型的な加熱および動力需要が与えられた場合，すなわち動力需要にくらべて加熱需要が多い場合(領域Ｉ)および加熱需要にくらべて動力需要が多い場合(領域Ｖ)

表 4　需要の大きさによる可能解の分類

領域番号	解 ＼ 領域	解の番号 $\frac{R_2}{R_2}H_1 \geq H_2$	解の番号 $\frac{R_2}{R_1}H_1 < H_2$
I	$R_2W \leq H_3$	(3)，(6)，(9)，(11)	(3)，(6)，(9)，(11)
II	$H_3 < R_2W \leq H_2 + H_3$	(1)，(2)，(4)，(6)，(9)，(11)	(1)，(2)，(4)，(6)，(9)，(11)
III	$H_2 + H_3 < R_2W \leq \frac{R_2}{R_1}H_1 + H_3$	(1)，(4)，(5)，(7)，(9)，(11)	(2)，(4)，(6)，(8)，(10)，(11)
IV	$\frac{R_2}{R_1}H_1 + H_3 < R_2W \leq \frac{R_2}{R_1}H_1 + H_2 + H_3$	(4)，(5)，(7)，(8)，(9)，(11)	(4)，(5)，(7)，(8)，(10)，(11)
V	$\frac{R_2}{R_1}H_1 + H_2 + H_3 < R_2W$	(4)，(7)，(10)，(12)	(4)，(7)，(10)，(12)

表 5 例題のパラメータ値および計算結果

パラメータ値			需要量	ϕの順位	解の番号	ϕ (10⁶kcal/H)	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
									(10^6 kcal/H)			
η_1	0.887	ケースA	H_1 50×10^6 kcal/H	1	(3)	151.86	56.36	53.48	0	0	42.01	0
η_2	0.935		H_2 50×10^6 kcal/H	2	(9)	167.50	0	53.48	72.01	0	42.01	0
η_3	0.08		H_3 30×10^6 kcal/H	3	(6)	168.39	56.36	0	0	70.02	42.01	0
η_4	0.131		W 5,000 kW	4	(11)	184.03	0	0	72.01	70.02	42.01	0
η_5	0.195	ケースB	H_1 50×10^6 kcal/H	1	(12)	189.30	0	0	72.01	70.02	42.01	5.27
R_1	8.66		H_2 50×10^6 kcal/H	2	(7)	203.33	56.36	0	0	70.02	42.01	34.94
R_2	5.44		H_3 30×10^6 kcal/H	3	(10)	220.07	0	53.48	72.01	0	42.01	52.57
			W 25,000 kW	4	(4)	234.10	56.36	53.48	0	0	42.01	82.25

の2ケースを取り上げる．表5に使用したパラメータ値およびそれぞれのケース（ケースA，ケースB）の計算結果を示す．

表5で明らかなように，動力需要にくらべて加熱需要が多い場合，加熱炉へ燃料を供給するほうが望ましく，加熱需要にくらべて動力需要が多い場合ボイラーへ燃料供給し熱併給で加熱，動力需要を賄うほうが望ましい．もちろん，使用するパラメータ値によって結果は変わり得るが，代替案との比較が容易であるので，省エネルギー以外の評価項目を含む総合評価によるシステムの最終選定に有用な情報となる．

5. おわりに

プロセスの設計，運用に関する種々の問題を定式化することができれば，それらの多くは数理計画問題として取り扱うことが可能になるが，実際業務に直接関係しているエンジニアはそれぞれの経験に応じて適当に問題を処理しているのが現状である．数理計画法の応用面から考えると，問題の所在を明らかにし定式化していく必要がある．そのためには，数理計画法についての基礎的理解と対象とする問題がもっている特徴をよく知ることが重要であると思われる．

ここではプロセスの最適化問題の展望を試み，最近の研究成果の一端として「化学プロセスの最適燃料供給システムの決定」について紹介した．数理計画法のプロセスの最適化問題に対する応用は今後いっそう進められるものと思われるが，ヒューリスティック・ルールや経験的な判断をいかに利用したり組み合わせていくかが課題として残される．知識ベースの系統的な確立は今後の展開の鍵となる可能性を含んでいるように思われる．さらに実際のプロセスの最適化に際し，システムの評価には互いに矛盾する諸事項が含まれるため，多目的評価による意思決定が重要であり，多目的評価によるプロセスの最適化の応用[8]が今後期待されるものと思われる．

参考文献

[1] 梅田富雄：プロセスシステム工学概要，日刊工業新聞社通信講座テキスト(1978)

[2] 梅田富雄：ペトロテック，3.(11) 34(1980)

[3] Nishio, M: 2nd PACHEC Proceedings p.716 (1977)

[4] Nishio, M., J. Itoh, K. Shiroko, T. Umeda: *I & EC Process Design & Develop.*, 9, 9, April, 306, (1980)

[5] Nishio, M, K. Shiroko, T. Umeda: AICHE 90th National Meeting (1981) Houston, USA

[6] 梅田富雄：数理計画講座—数理計画の応用，産業図書(昭55)

[7] Bleay, J. A. and Felles, I.: *Journal of the Institute of Technology*〔125〕September(1979)

[8] Takama, N. et al.: AICHE 74th Annual Meeting (1981) New Orleans, USA