

EQUATRAN-Gの開発と商品化

小 口 梧 郎*
横 山 克 己*
林 田 豊*
養 島 広 泰*
片 桐 伸 一**

1. はじめに

化学工業における解析・設計業務や化学工学の研究においてシミュレーションは重要な武器であり、近年のコンピュータ特にパソコンやワークステーションの普及によって日常的に活用されている。シミュレーションは、工業プロセスや実験装置における現象を数学モデルとして連立方程式(代数方程式や微分方程式など)で表現し、これを解いて最適化を図るものである。しかし実際には、方程式の組合せの複雑さ、規模の大きさ、与えられた条件との整合性あるいは計算の安定性や収束性など、プログラミング上の困難のため解を得るのに多大な精力と時間を費やしていた。

筆者らは、これらの困難を解決しシミュレーションを技術者、研究者の身近なものとするには、多様な組合せの連立方程式を簡単かつ確実に解くための汎用なソフトウェアが有効であるとの発想に達し、汎用方程式解法ソフトEQUATRANを開発し、すでにこれをパソコン用のEQUATRAN-Mとして商品化した¹⁾、本技術は、この技術を基礎に新たな技術的發展と機能の大幅な拡張、改良を図ることによって、応用分野の拡大とより詳細かつ大規模なシミュレーションを可能にすることをねらいとした。

EQUATRAN-GはUNIXワークステーション上で開発されたが、単なるEQUATRAN-Mのワークステーション版ではない。EQUATRAN-Gでは、問題を分割しモジュール化するとともに複雑な複合問題を扱うための機構として関数を導入したこと、新たなモデル記述機能と計算法を追加したことによって、飛躍的に扱える問題の規模と分野が拡大している。さらに、ソ

フトウェアとしてのオープン性を高めることによって他のシステムとの連携・結合による新たな可能性を切り開いたことも大きな特長である。

2. 開発の動機と経過

本技術のベースとなっているEQUATRANとEQUATRAN-Mは、プログラミングの知識に乏しい技術者にも自らシミュレーションが容易に行えるようにすることを目的として開発した。この経過については文献¹⁾に述べられているので省略する。

EQUATRAN-Mをパソコン用の商品として開発したことによって、ユーザーが大幅に増加するとともに、その利用方法も高度化していった。すなわち、より大規模な問題をより高速に解きたい、あるいは2点境界値問題、多重積分あるいは常微分方程式のパラメータ最適化といった、より複雑な複合問題を扱えないかといった要望がユーザーから多く寄せられるようになった。一方、ソフトウェアの実行環境としては、ワークステーションの高速化と低価格化が進展したことから、ワークステーション上の高機能EQUATRANとしてEQUATRAN-Gを開発するに至った。

開発にあたっては、新機能をいかに既存の体系に矛盾無く組み込むかに苦心した。既にEQUATRAN-Mは社内はもとより全国で多くのユーザーに利用されており、一方要求される新しい機能は、方程式型(あるいは論理型)の言語としては表現しにくいものも多いためである。EQUATRAN-Mに対して上位互換を維持すること、論理型言語の原則を崩さないこと、また、将来的な発展性も考慮して設計した。

*三井東圧化学(株)システム部 ** (株)トパックス

3. 開発の内容と特色

はじめに基本となったEQUATRAN-Mの機能について簡単にふれておく。

EQUATRAN-Mでは、線形・非線形連立方程式、常微分方程式(高階または非線形を含む)、最適化計算を数値的に解くことができる。方程式は通常の数学的表記法により入力すればよく、変形したり、解く順序に並び換える必要はない。数式モデルをそのまま入力すれば自動的に最適化された計算の手順が生成され、必要に応じて数値計算手法のルーチンが組み込まれる。さらに、グラフ作成機能があり、計算結果を即座にグラフ化して評価できる。

これに対して、本技術で拡張・強化された機能について以下に説明する。

EQUATRAN-Mでは、解こうとする連立方程式全体は常に一体として扱われている。すなわち、問題を部分問題に分割して記述することができない。このため、問題の規模が大きくなるにしたがって、正しい方程式系を完成するのが難しくなってくる。また、EQUATRAN-Mでは、積分計算、最適化計算あるいは繰り返し収束計算の複合した問題を扱えるが、これらの組み合わせには制限があり、たとえば、積分計算の結果を最適化計算や繰り返し計算のために使うことができないため、多くの実用的な問題が対象外とされていた。

EQUATRAN-Gの最大の特長は、部分問題を記述する関数の概念が新たに導入されていることである。すなわち、EQUATRANで記述した関数(この関数は複数の変数を出力としてよい)をEQUATRANから自由に呼び出すことができる。関数の利点は2つある。ひとつは、大規模な問題をいくつかのモジュールに分割して作成でき、ソーステキスト(方程式を記述したテキスト)の見通しをよくし、また、汎用性のある関数はライブラリにして共用できることである。もうひとつは、関数呼び出しを用いることによって繰り返し計算、最適化計算および積分計算を自由に多重化(ネスティング)できることである。積分計算を含む関数を積分することによって多重積分が、初期値を引き数に含む積分計算の関数を繰り返し収束計算から呼び出すことによって2点境界値問題が、常微分方程式のパラメータを引き数とする積分計算の関数を呼び出すことによって最小2乗法や最適化計算によるパラメータの決定問題がそれぞれ扱えるようになった。また、線

り返し収束計算をネスティングすることによって、複雑な非線形方程式の解法が制御し易くなったことも大きな利点として挙げられる。

ここでは、関数を利用した2点境界値問題の例として、PSA吸着のシミュレーションを提示しておく。図1のような循環定常状態を仮定した向流型二相流モデル²⁾を考えると、その基礎式は表1のようになる。図2がこのための数式モデルを記述したものであり、図3がその計算結果をグラフ表示したものである。

つぎの大きな特長は、大規模問題への対応である。EQUATRAN-Mでは、メモリの制約から一度に解ける方程式の数が数100程度に制限されている。たとえば、化学プロセスの物質収支・熱収支計算では、[成分数×ストリーム数] オーダーの方程式が必要である。モデル化は通常簡略なものから詳細化していく方法がとられるが、その過程でこの制限に掛かることがあった。ユーザーからもこの制限の解除を強く要望されていた。これに対して、EQUATRAN-Gではメモリの制限は事実上ないので、方程式の数が1000を越えるような、かなり大規模な問題でも取り扱えるようになった。

EQUATRANでは、方程式を変数の頂点と演算の頂点とからなる2部グラフで表現することによって処理し、計算の手順を自動生成することを特長としている。EQUATRAN-Gでは、この手法をさらに発展させることによって新たな機能を実現している。1つは、積分計算における不連続性を記述する機能である。不連続性の扱いは従来の方程式型の言語では表現しにく

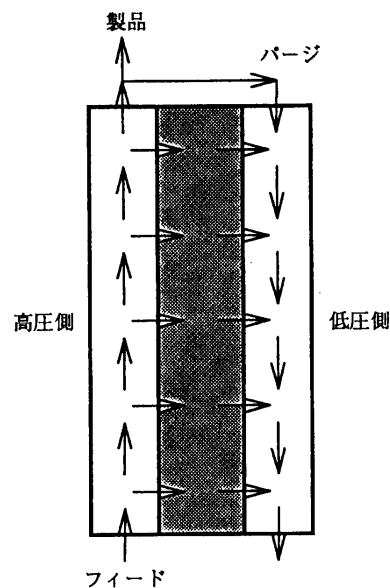


図1 PSA吸着(循環定常法)向流型二相流モデル

表1 PSA吸着(循環定常法)の基礎式

分圧と濃度(非吸着成分に対するモル比)の関係

$$p_{i,H} = [C_{i,H} / (1 + \sum C_{i,H})] P_H \quad (1)$$

$$p_{i,L} = [C_{i,L} / (1 + \sum C_{i,L})] P_L \quad (2)$$

ここで H は高圧側、L は低圧側、i は成分

物質収支式

$$u_H \frac{dC_{i,H}}{dz} + N_i = 0 \quad (3)$$

$$u_L \frac{dC_{i,L}}{dz} + N_i = 0 \quad (4)$$

境界条件 $\left[\begin{array}{l} z = 0 : C_{i,H} = C_{i,H}(\text{入口}), C_{i,L} = C_{i,L}(\text{出口}) \\ z = Z : C_{i,H} = C_{i,L} \end{array} \right.$

吸着速度式

$$N_i = (K_{Fav})_0 (p_{i,H} - p_{i,L}) / RT \quad (5)$$

$$(K_{Fav})_0 = \frac{\delta (K_{Fav})_{i,H} \cdot (1-\delta) (K_{Fav})_{i,L}}{\delta (K_{Fav})_{i,H} + (1-\delta) (K_{Fav})_{i,L}} \quad (6)$$

吸着平衡式(ラングミュア式)

$$q_i = \frac{q_i^\infty K_i p_i^*}{1 + \sum K_i p_i^*} \quad (7)$$

$$p_i^* = \frac{\delta (K_{Fav})_{i,H} \cdot p_{i,H} + (1-\delta) (K_{Fav})_{i,L} \cdot p_{i,L}}{\delta (K_{Fav})_{i,H} + (1-\delta) (K_{Fav})_{i,L}} \quad (8)$$

| | | |
|------------------|------------|------------------------------|
| p | 分圧 | [atm] |
| P | 操作圧力 | [atm] |
| C | 濃度 | [-] |
| u | 不活性ガス流速 | [mol/cm ² ·sec] |
| z | 距離 | [cm] |
| N | 吸着速度 | [mol/cm ² ·sec] |
| δ | 吸着時間の占める割合 | [-] |
| p* | 平衡分圧 | [atm] |
| q | 吸着量 | [mol/g] |
| K _{Fav} | 総括物質移動係数 | [1/sec] |
| R | 気体定数 | [atm·cm ³ /mol·K] |
| T | 温度 | [K] |

く、また処理も難しかったが、これによって装置の切り換えに伴う不連続現象や、データのサンプリングなどの扱いが可能となった。また、陰公式による数値積分法が加えられ、スティックな系の積分計算が安定して行えるようになった。陰公式の積分法では、微係数の計算に積分結果(たとえば1きざみ先の値)を用いるため、一般には積分計算を繰り返しながら収束計算によってこれを求める方法が採られる。EQUATRAN-Gでは、積分公式自体をグラフの中に取り込むことによって不要な繰り返し計算を取り除き効率のよい計算を可能にしている³⁾。

4. 実績と波及効果

EQUATRAN-Gは、化学工業を中心に自動車を始めとした機械工業、電子工業などの産業分野、大学等

```

1: /* P S A 吸着 循環定常法 */
2:
3: GLOBAL n = 2 /* 2成分 (CO, N2) + H2 */
4:
5: FUNCTION PSA( CHin, CLin, PH, PL, uH, uL; CH, CL )
6:
7:   VAR CH(n), CL(n), CHin(n), CLin(n)
8:   , pH(n) "分圧 (高圧側) [atm]"
9:   , pL(n) "分圧 (低圧側) [atm]"
10:  , KFavH(n) = ( 0.05, 0.05 )
11:  "総括物質移動係数 (高圧側) [1/sec]"
12:  , KFavL(n) "総括物質移動係数 (低圧側) [1/sec]"
13:  , KFav0(n) "平均総括物質移動係数 [1/sec]"
14:  , delt = 0.5 "吸着時間の占める割合 [-]"
15:  , N(n) "吸着速度 [mol/cm3.sec]"
16:  , p_ast(n) "平衡分圧 [atm]"
17:  , q(n) "吸着量 [mol/g]"
18:  , R = 82.05 "気体定数 [atm.cm3/mol.K]"
19:  , T = 273.15+30 "温度 [K]"
20:  , z "距離 [cm]"
21:
22: /* ラングミュア定数 */
23: /* CO N2 */
24: VAR K(n) = ( 0.228, 0.354 )
25: , q_inf(n) = ( 87.5, 260 )
26:
27: pH = CH / ( 1 + SUM(CH) ) * PH /* (1)式 */
28: pL = CL / ( 1 + SUM(CL) ) * PL /* (2)式 */
29: uH * CH' + N = 0 /* (3)式 */
30: uL * CL' + N = 0 /* (4)式 */
31: N = KFav0 * ( pH - pL ) / ( R * T ) /* (5)式 */
32: KFav0 = delt*KFavH * (1-delt)*KFavL ..
33: / ( delt*KFavH + (1-delt)*KFavL ) /* (6)式 */
34: KFavL = KFavH * PH / PL
35: q = q_inf * K * p_ast / ( 1 + SUM(K*p_ast) ) /* (7)式 */
36: p_ast = ( delt*KFavH*pH + (1-delt)*KFavL*pL ) ..
37: / ( delt*KFavH + (1-delt)*KFavL ) /* (8)式 */
38:
39: /* 初期条件 */
40: CH # CHin
41: CL # CLin
42:
43: INTEGRAL z[0,30] STEP 0.1
44: TREND q, CH, CL, pH, pL STEP 5
45: OUTPUT1 z, q(1), q(2), pH(1), pH(2), pL(1), pL(2) STEP 0.1
46: END PSA
47:
48: VAR CH(n) "濃度 (高圧側) [-]"
49: , CL(n) "濃度 (低圧側) [-]"
50: , CHin(n) "CHの初期条件 [-]"
51: , CLin(n) "CLの初期条件 [-]"
52: , CLinit(n) "CLの初期値 [-]"
53: , CHlast(n)
54: , CLlast(n)
55: , PH = 10 "操作圧力 (高圧側) [atm]"
56: , PL = 1 "操作圧力 (低圧側) [atm]"
57: , uH = 2e-4 "不活性ガス流速 (高圧側) [mol/cm2.sec]"
58: , uL = 0.428e-4 "不活性ガス流速 (低圧側) [mol/cm2.sec]"
59: , y(n) = ( 0.05, 0.25 ) ..
60: "モル分率 (入口) [-]"
61:
62: PSA( CHin, CLin, PH, PL, uH, uL, CH, CL )
63: PSA( CHin, CLin, PH, PL, uH, uL, CHlast, CLlast ) ..
64: WITH (TREND, OUTPUT1)
65:
66: /* 初期条件 */
67: CHin = y/(1-SUM(y))
68: CLinit = CHin*uH/uL /* 初期値 */
69:
70: eq: CH = CL
71: RESET CLin # CLinit [0,5] BY eq
72:
73: OUTPUT PH, PL, uH, uL

```

図2 PSA吸着(循環定常法)EQUATRAN-Gによる記述

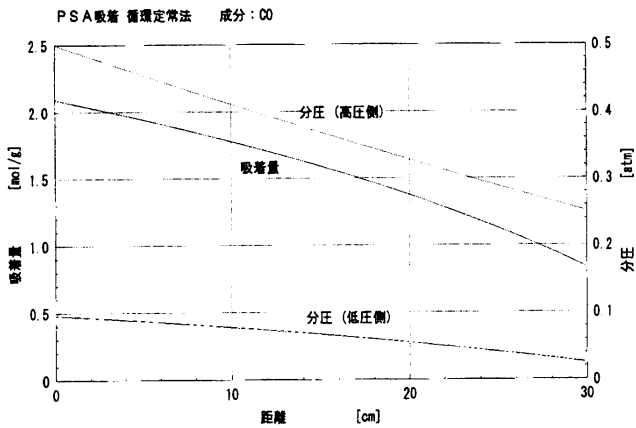


図3 PSA吸着(循環定常法)計算結果をグラフ化したもの

における教育・研究用など、広い分野に及んでおり、現在100セット以上が利用されている。

本来、汎用的なツールだが、特に化学工業分野では適応例が数多くあり、物質収支・熱収支計算、気液平衡計算、化学平衡計算、制御系の解析と設計、連続系の動的シミュレーション、反応速度の検討、実験データの回帰式決定とグラフ化などに使われている。文献⁴⁾にはEQUATRAN-Gの機能を利用した事例として、回分蒸留塔の詳細モデルによるシミュレーションが紹介されている。

また、EQUATRAN-Gは実行モジュール(方程式の解析結果から生成される計算手順を実行するモジュール)の独立性が高く設計されているため、別のシステムに組み込んだ形で実行することができる。このような応用システムの1つとして、プロセス制御システムに組み込んで、運転解析・高度制御に利用するものをリアルタイムEQUATRAN⁵⁾と呼んでいる。これは既に2社の異なる制御システムで実用化・販売されている。

ほかに、EQUATRAN-Gで装置のモデルを記述できる化学プラントのダイナミックシミュレータが開発され、販売されている。さらに、このシミュレータを利用した運転者訓練用のトレーニングシミュレータ⁶⁾の販売も開始されたばかりである。

このように、EQUATRAN-Gは高度なモデル記述能力とオープン性によって、より広い分野で利用されるとともに、新しい応用システムの開発に効果を上げている。

5. おわりに

最後に、今回の技術賞の直接の対象ではないが、先頃EQUATRAN-GのWindows版⁷⁾が商品化されたことを申し添えておく。パソコン上でも手軽に高機能なEQUATRAN-Gが利用できるようになったわけである。同時にWindowsに対応したことにより、図4のようなマルチ・ウインドウによって数式モデルの入力、計算結果の表示、グラフの表示などを別々のウインドウで実行できるため、作業が効率的に進められ、初心者でも扱いやすくなった。

今後も、ユーザーの要望を取り入れて、開発・研究業務の効率向上に貢献できるよう改良を続けていく所存である。

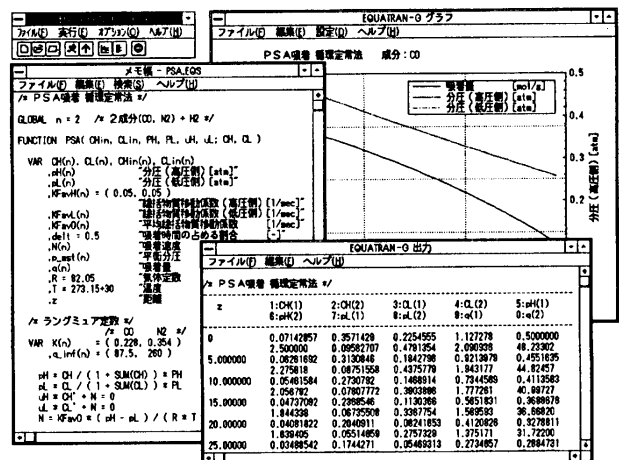


図4 EQUATRAN-G Windows版の画面例

引用文献

- 1) 宮原ほか：汎用方程式解法ソフト「EQUATRAN-M」の開発と商品化，化学工学，Vol.56，No.6，p.398 (1992)
- 2) 鈴木：圧力スイング吸着における動的定常状態の簡易推定法，吸着操作の最近の進歩シンポジウムプロシーディングスSH-309，p.50 (1985)
- 3) 小口：方程式解法ソフトEQUATRAN-2部グラフの応用，応用数理，Vol.1，No.3，p.214 (1991)
- 4) 横山：方程式解法ソフト「EQUATRAN-M/G」ケミカルエンジニアリング臨時増刊CEN，No.14，p.215 (1993)
- 5) 大村：リアルタイム解析ソフト「rt-EQUATRAN」，実用産業情報，No.1，p.107 (1994)
- 6) 清水，小口：モデリングを容易にした高機能シミュレータの特徴と使い方，計装，Vol.36，No.7，p.29 (1993)
- 7) 横山：方程式解法ソフトEQUATRAN-Gとその応用，化学装置，Vol.36，No.8，p.38 (1994)