

バッチプロセス制御の新潮流 反応温度精密制御のための モデルベース B2B 制御の開発※

New Trends in Batch Process Control Development of a Model-Based B2B (Batch to Batch) Control for Precise Reaction Temperature Control

アズビル株式会社
アドバンスオートメーションカンパニー

小河 守正
Morimasa Ogawa

アズビル株式会社
アドバンスオートメーションカンパニー

佐々木 亨
Tohru Sasaki

キーワード

バッチプロセス制御, バッチ重合プロセス, 反応温度, プロセスモデル, 不安定システム, モデルベース制御, PID 制御, ゲインスケジューリング, フィードフォワード補償, Batch to Batch Control

現場密着型プロセス制御問題解決活動を通して、バッチ重合プロセスの反応温度を精密制御するモデルベース B2B (Batch to Batch) 制御システムを開発した。そのすべての設計ステップにおいて、厳密な重合プロセスモデルが中核になっている。たとえば、バッチ運転実績データを活用したこのモデルの適応調整は重要な設計要素である。この B2B 制御システムは、ゲインスケジューリング I-PD/II²-PD 制御、フィードフォワード補償および B2B モデル適応調整から構成される。その応用実績から、従来の制御システムと比較して、格段に優れた制御性能を示すことが実証されている。現在は、本技法の応用拡大を図るとともに、B2B 制御システム設計工具箱の製品化を進めている。

Through activity in the field to resolve actual process control problems, Azbil Corporation has developed a model-based batch-to-batch (B2B) control system for industrial batch polymerization processes. In order to precisely control the reaction temperature, several methods based on a rigorous polymerization process model were used at each design stage of the B2B control system. For example, adaptive adjustment of the model according to actual batch operation results is one of the most important features of the design. The B2B control system consists of gain-scheduled I-PD/II²-PD (I-PD with double integral) control, feed-forward compensation, and the B2B model modification mentioned above. In actual batch operations, B2B control provides superior control performance compared to conventional control systems. We are currently working to apply this methodology to a wider variety of systems, and to commercialize a toolbox for B2B control system design.

1. はじめに

azbil グループの理念にある「私たちはお客さまとともに現場で価値を創ります」のコア・コンピタンスの一

つとして、われわれは現場密着型プロセス制御問題解決を実践している。これは、プロセス制御に関するあらゆる技法を駆使して、現場の様々な課題を解決していく活動である^{(1),(2)}。そこには、課題を一般化して、新たに実用的な解決技法をつくりあげる研究開発の側面もある⁽³⁾。

その成果の一つが、バッチ重合プロセスの反応温度を

※ 計測自動制御学会論文集 46-3 (2010) に発表したものを編集加筆した

精密に制御する、モデルベース B2B (Batch to Batch) 制御の実用技術開発である⁽⁴⁾。これは、一般性と実用性を重視し、厳密な重合プロセスモデルを核にした、PID 制御と B2B 制御による反応温度精密制御システムである。本技法はすでに、複数のバッチ・セミバッチ重合プロセスに適用し、いずれも優れた制御性能を得ている。

本論文では、バッチ重合プロセスの反応温度精密制御のための、モデルベース B2B 制御の枠組みと実現技法について述べる。最初に、バッチ重合プロセス制御の課題と反応温度精密制御の設計要件を明らかにする。次に、プロセスフローと B2B 制御システムの構成を説明する。そして、厳密な重合プロセスモデルと、それを逐次線形化したプロセス動特性モデルを導出する。その上で、プロセス動特性モデルに基づく、I-PD コントローラの PID 設定則と Π^2 -PD コントローラ (I-PD コントローラに 2 重積分動作を付加したもの) の Π^2D 設定則を与え、その制御実績を簡単に紹介する。最後に、バッチ運転実績データを活用して、重合プロセスモデルを適応調整する B2B 制御の方法を示す。

2. バッチ重合プロセス制御の課題と設計要件

バッチ重合プロセスの制御は、原料モノマーなどの定量仕込制御と反応温度制御だけと言ってもよい。反応温度を精密に制御することが要求され、その主目的は処方定められた目標値軌道への追値制御である。さらに、反応量や伝熱特性がバッチ経過時間と共に変化し、これらが持続性のランプ状外乱として作用するので、その補償も重要である。

2.1 反応温度精密制御の課題

このような特徴を持つ反応温度精密制御の課題は、次のようにまとめられる。

- (1) 反応温度制御には、PID 制御にフィードフォワード補償などの機能を付加した方式^{(5), (6)}が多用されている。その PID パラメータなどは、バッチ運転を積み重ね経験的に調整している。しかし、本質的に非線形プロセスであり、バッチ経過時間と共にプロセス動特性が大きく変化するので、経験則だけで PID パラメータを適切に調整することは難しい。このため、運転担当者による手動調整が常態化している。なかには、PID 制御の性能を厳しく追求することをあきらめ、反応温度の周期変動を許容したオンオフ制御に置き換えることすらある^{(7), (8)}。
- (2) 機能性ポリマーなどの新製品では、研究開発段階の試作から直ちに本格生産に入る早期製品化が求められる。特に初回バッチから処方どおりに運転することが望まれる。
- (3) 国内のバッチプロセスシステムに関する研究開発は、JBF (Japan Batch Forum) の活動に見られるように、バッチ管理システムの標準化⁽⁹⁾に力点が

置かれてきた。そして、バッチプロセス制御の技術開発には長い間取り組まれていない。このため、反応温度精密制御の標準的な設計技法はいまだに確立されていない。

- (4) プロセス制御の新しい研究成果を活用するには、連続重合プロセスを対象に開発された非線形モデル制御^{(10), (11)}を、バッチプロセスに拡張することがまず挙げられる。さらに、一般化予測制御に基づいたセルフチューニング PID 制御設計法⁽¹²⁾などの、適応制御を応用する選択肢もある。また、製品品質の制御のために、バッチ運転実績を反復学習する機能を持つモデル予測制御⁽¹³⁾も提案されている。これらの研究は、一部を除いて、シミュレーションにより検証されたプロトタイプを与えるもので、実プロセスに適用できる段階には至っていない。

2.2 反応温度精密制御の設計要件

これらの課題を解決する制御システムの設計要件は次の 4 項目に集約できる。

- (1) 実用性と一般性を重視し、PID 制御とフィードフォワード補償を基本とする制御システムとする。
- (2) 厳密な重合プロセスモデルを核とする。これは非線形時変モデルなので、プラントテストとシステム同定では対応できず、解析的なモデリングによるしかない。この重合プロセスモデルをバッチ基準軌道に沿って逐次線形化し、PID 制御設計に用いるプロセス動特性モデルを得る。
- (3) PID 制御アルゴリズムは I-PD か PI-D で、プロセス動特性に基づくモデルベース PID 設定則により、ゲインスケジューリングすることが必須である。また、ランプ状外乱による定常偏差を取り除く 2 重積分補償も考慮する。
- (4) バッチ運転実績をフィードバックし、制御条件 (たとえば反応温度目標値軌道や制御パラメータ) を適正化する Batch to Batch Control (Run to Run Control と呼ばれる)^{(6), (14)}が有用とされている。この考え方を取り入れた制御システムにする。

3. バッチ重合プロセスと B2B 制御システム

3.1 バッチ重合プロセス

バッチ重合プロセスのフローを図 1 に示した。攪拌機を備えた完全混合槽型反応器に、原料モノマーと溶媒を定量仕込み反応温度まで昇温する。そこに重合開始剤 (触媒) を定量加えると、数分以内の誘導時間 (induction period) だけ遅れて急激にラジカル重合反応が始まる。反応温度を一定に保つ主反応は数時間である。その後さらに反応温度を昇温し、重合開始剤を追加添加して反応を加速し、数時間で反応終点となる。昇温開始から生成ポリマーの抜き出しを完了するまでのバッチ時間はおおむね十数時間である。

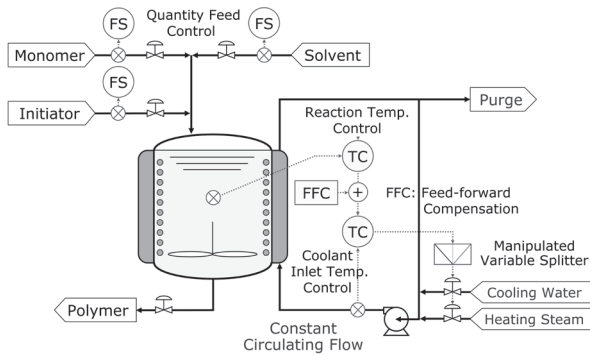


図1. バッチ重合プロセス

重合反応による発熱量は、反応器のコイルとジャケットを一定流量で循環する冷媒により除熱する。循環冷媒の入口温度を冷却水もしくは蒸気の供給量を調節することにより制御する。反応温度制御は冷媒入口温度制御とのカスケード制御による。さらに、バッチ経過時間に対応して冷媒入口温度の目標値を変更する、フィードフォワード補償 (FFC: Feed-Forward Compensation) を付加している。

3.2 B2B 制御システム

B2B 制御システムの構成を図2に示した。これは、重合反応の物質収支と熱収支を表す重合プロセスモデルを中核にして、次の四つの機能から成っている。

- (1) 重合反応速度定数を実験データからパラメータ推定する。
- (2) 反応温度を目標値軌道に一致させる冷媒入口温度をシミュレーションにより求める。それをフィードフォワード補償として実行する。
- (3) I-PD(もしくはII²-PD)コントローラのPID(PII²D)パラメータを、バッチ経過時間に対応して求める。それをゲインスケジューリングしながら、反応温度をフィードバック制御する。

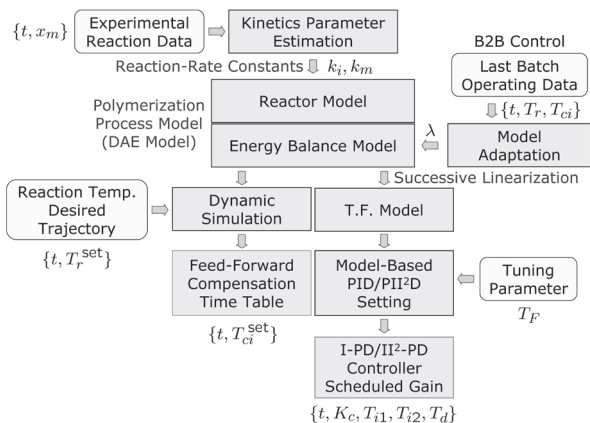


図2. B2B 制御システム

- (4) バッチ運転実績データを用いて、重合プロセスモデルを適応的に調整する。この適応モデルに基づいて、フィードフォワード補償パラメータとPIDパラメータのゲインスケジューリングを更新する。これにより B2B 制御を実現する。

4. 重合プロセスモデル

重合プロセスのダイナミクスモデルは、ラジカル重合の反応モデル (重合反応モデル) と熱収支モデルから成る。まず、重合反応モデル^{(15), (16)} は、開始剤とモノマーの重量濃度 (残存量の仕込量に対する分率) x_i, x_m の時間変化を表すもので、それぞれの反応速度定数 $k_i, k_m > 0$ である。そして、反応温度 T_r と冷媒温度 T_c に関する熱収支モデルでは、反応液と冷媒の熱容量 C_r, C_c 、重合反応熱 ($-\Delta H_r$) > 0 による発熱量 Q_r 、反応液と冷媒の熱交換による除熱量 Q_{c1} 、循環冷媒による除熱量 Q_{c2} である。このとき、バッチ経過時間 t における重合プロセスモデルは次式のようになる。

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} x_i(t) = -k_i x_i(t) \\ \frac{d}{dt} x_m(t) = -k_m \sqrt{x_i(t)} x_m(t) \\ \frac{d}{dt} T_r(t) = \frac{1}{C_r} (Q_r(t) - Q_{c1}(t)) \\ \frac{d}{dt} T_c(t) = \frac{1}{C_c} (Q_{c1}(t) - Q_{c2}(t)) \end{cases} \quad (1)$$

開始剤の反応速度定数は一定とし、モノマーの反応速度定数だけに温度依存性があるとする。このモノマー反応速度をアレニウス式 (Arrhenius rate expression) で表す。ここで、基準状態値 T_{r0}, k_{m0} 、温度依存定数 b_m である。

$$k_m(t) = k_{m0} \exp \left[-b_m \left(\frac{1}{T_r(t)} - \frac{1}{T_{r0}} \right) \right] \quad (2)$$

重合レート R_m は、モノマー濃度の変化速度の絶対値にモノマー仕込量 W_m を乗じた次式で与えられる。

$$R_m(t) = k_m(t) \sqrt{x_i(t)} x_m(t) W_m \quad (3)$$

熱収支モデルの発熱量と除熱量は次のようになる。コイルとジャケットを循環する冷媒の出入口温度 T_{ci}, T_{co} の差が小さいので、冷媒温度はその出入口温度の算術平均とし等温とした。ここで、冷媒の比熱 c_c 、循環流量 f_c である。

$$Q_r(t) = (-\Delta H_r) R_m(t) \quad (4)$$

$$Q_{c1}(t) = U(t) A (T_r(t) - T_c(t)) \quad (5)$$

$$Q_{c2}(t) = 2c_c f_c (T_c(t) - T_{ci}(t)) \quad (6)$$

コイルとジャケットの伝熱面積 A_c, A_j と総括伝熱係数 U_c, U_j , 全伝熱面積 $A = A_c + A_j$ とする。それぞれの伝熱面積で加重平均した総括伝熱係数 $U(t) = (U_c(t) A_c + U_j(t) A_j) / A$ である。 U_c, U_j はモノマー濃度などから推算できる。

数値例

特定品種について、反応温度を目標値に一致させる冷媒温度を、重合プロセスモデルのシミュレーションにより求め図3に示した。このうち、冷媒入口温度はフィードフォワード補償に用いることになる。

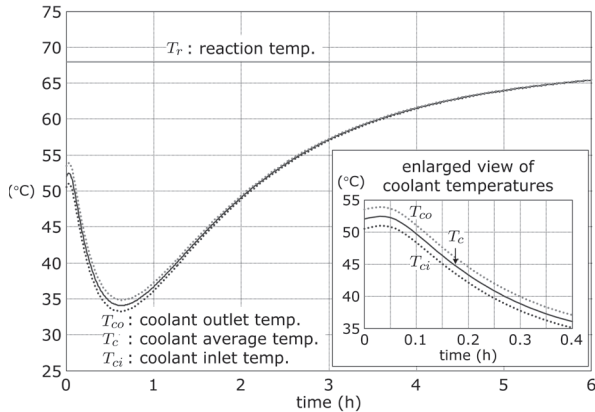


図3. 重合プロセスモデルシミュレーション

5. プロセス動特性モデル

I-PD/PI²-PD コントローラによる反応温度制御を設計するには、操作量：冷媒入口温度と制御量：反応温度の関係を表す、線形のプロセス動特性モデルが必要になる。そこで、重合プロセスモデルを逐次線形化し、状態方程式モデルを得る。それを伝達関数モデルに変換し、モデルベース PID/PII²D 設定則の導出に用いる。

バッチプロセスの状態変数は常に変化し、連続プロセスでは一般的な定常状態（すべての状態変数が一定の状態）が存在しない。そこで、バッチ経過時間に対応して与えられる反応温度目標値軌道に、反応温度を完全に追値制御できると仮定する。そのときの重合レートを式(1)の重合反応モデルと式(2), (3)から定まり、さらに総括伝熱係数も決まる。

そして、反応温度目標値軌道に沿った重合レートのもとで、式(1)における熱収支モデルの左辺=0となる状態、すなわち反応温度が目標値軌道に常に一致するよ

うに冷媒入口温度が調節されている状態を、仮想的な基準軌道と呼ぶことにする。この基準軌道に沿って熱収支モデルだけを逐次線形化することにより、反応温度のプロセス動特性モデルを得る。

たとえば、バッチ経過時間 t の基準軌道における重合レートを \bar{R}_m のように表す。このとき、反応温度の微小変化 $\Delta T_r(t)$ による重合レート変化量 $\Delta R_m(t)$ は次式で表される。

$$\begin{aligned} \Delta R_m(t) &= \frac{\partial R_m}{\partial k_m} \Delta k_m = \frac{\partial R_m}{\partial k_m} \frac{dk_m}{dT_r} \Delta T_r(t) \\ &= \bar{R}_m \frac{b_m}{\bar{T}_r^2} \Delta T_r(t) \end{aligned}$$

発熱量の変化量 $\Delta Q_r(t)$ は、 $\bar{Q}_r = (-\Delta H_r) \bar{R}_m$ なので、次のようになる。

$$\Delta Q_r(t) = (-\Delta H_r) \Delta R_m(t) = \frac{b_m \bar{Q}_r}{\bar{T}_r^2} \Delta T_r(t)$$

5.1 状態方程式モデル

逐次線形化したうえで、基準軌道からの変化量を $\Delta T_r(t) \rightarrow T_r(t)$ のように書き換えると、状態方程式モデルは次のように表される。

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{A} \mathbf{x}(t) + \mathbf{b} u(t) \\ \mathbf{y}(t) = \mathbf{c} \mathbf{x}(t) \end{cases} \quad (7)$$

状態量 $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$, 操作量 $u(t)$, 制御量 $\mathbf{y}(t)$ は

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} T_r(t) & T_c(t) \end{bmatrix}^T$$

$$u(t) = T_{ci}(t), \quad \mathbf{y}(t) = T_r(t)$$

であり、 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^{2 \times 1}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^{1 \times 2}$ はそれぞれ次のようになる。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ b_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \frac{1}{C_r} \left(\bar{U} A - \frac{b_m \bar{Q}_r}{\bar{T}_r^2} \right), \quad a_{12} = \frac{\bar{U} A}{C_r}$$

$$a_{21} = \frac{\bar{U} A}{C_c}, \quad a_{22} = \frac{\bar{U} A + 2c_c f_c}{C_c}$$

$$b_2 = \frac{2c_c f_c}{C_c}$$

5.2 伝達関数モデル

状態方程式モデルから、伝達関数モデル $P(s)$ は

$$P(s) \equiv \frac{y(s)}{u(s)} = c(sI - A)^{-1}b$$

$$= \frac{n_0}{d_2s^2 + d_1s + 1} \quad (8)$$

であり、 n_0, d_2, d_1 は次のようになる。

$$n_0 = \frac{a_{12}b_2}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}$$

$$d_2 = \frac{1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}, \quad d_1 = \frac{a_{11} + a_{22}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}$$

式(8) の分母多項式の根の逆数である時定数 T_{p1}, T_{p2} は

$$\{T_{p1}, T_{p2}\} = \frac{a_{11} + a_{22}}{2(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})}$$

$$\times \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})}{(a_{11} + a_{22})^2}} \right] \quad (9)$$

となり、ゲイン K_p は次式で表される。

$$K_p = \frac{a_{12}b_2}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \quad (10)$$

動特性を支配する時定数を T_{p1} ($|T_{p1}| > T_{p2} > 0$) とする。 T_{p1} が負のとき不安定プロセスとなり、その条件は

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} < 0 \quad (11)$$

である。このときは式(10) で表されるゲインも負になる。

重合反応の進行に伴い不安定から安定なシステムに移っていく特性を、伝達関数モデルで因果律を保つように表現するため、ゲインと時定数は絶対値を取り $|K_p| \rightarrow K_p, |T_{p1}| \rightarrow T_{p1}$ として、正の値^{*1}にする。そして分母分子の負符号を消去する。これにより次式の伝達関数モデルを得る。分母第1項の±符号が、正のとき安定プロセス、負になると不安定プロセスである。プロセスむだ時間は無視する。

$$P(s) = \frac{K_p}{(T_{p1}s \pm 1)(T_{p2}s + 1)} \quad (12)$$

*1 プロセスのゲインが正であることは、操作量：冷媒入口温度と制御量：反応温度の物理的な因果律から明らかである。

不安定条件を物理的に解釈するために状態方程式モデルに戻ると、 $a_{11} < 0$ のとき不安定プロセスになる。すなわち、

$$\bar{U}A - \frac{b_m \bar{Q}_r}{\bar{T}_r^2} < 0$$

である。基準軌道 $\bar{Q}_r = \bar{Q}_{c1} = \bar{U}A(\bar{T}_r - \bar{T}_c)$ から $\bar{U}A = \bar{Q}_r / (\bar{T}_r - \bar{T}_c)$ なので、不安定条件は次の簡単な関係式で与えられる。

$$\bar{T}_r - \bar{T}_c > \frac{\bar{T}_r^2}{b_m} \quad (13)$$

このように、反応速度定数に温度依存性があり、反応温度と冷媒温度の温度差が上式の条件を満たすとき、重合反応プロセスは不安定になる。これは、重合レートが高く発熱量が大きい反応初期において、ポリマーの生成により総括伝熱係数が急激に低下するため、冷媒温度を下げ反応温度との温度差を大きくとり除熱量を確保している状態を意味する。

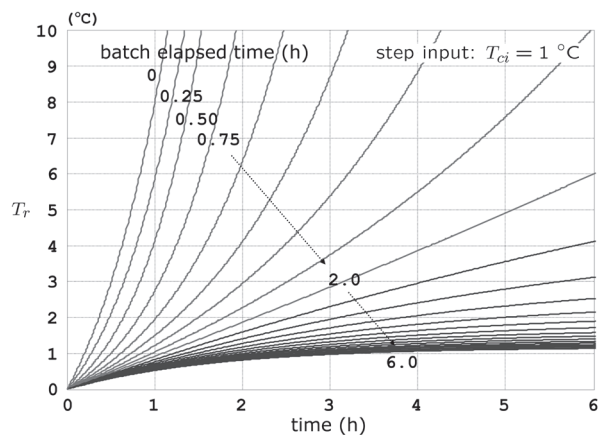


図4. 伝達関数モデルのステップ応答の推移

数値例

伝達関数モデルのステップ応答がバッチ経過時間と共に大きく変化する様子を、特定品種について図4に示した。バッチ経過時間0.25h刻みで、そのときのモデルパラメータを用い、冷媒入口温度を1℃階段状に上げたときの反応温度の時間変化を描いたものである。

重合反応開始後2時間までは不安定プロセス、その後は安定プロセスとなることがわかる。また、モデルパラメータのゲインと応答を支配する時定数は1000倍以上も変化する。しかし、ゲインが大きいときは時定数が長く、逆にゲインが小さいときの時定数は短い。このため、応答初期の立ち上がり速度（ステップ応答の時間15minまでの反応温度変化量）は、重合開始時と6時間後で7.5倍変わるだけで、変化速度の連続性も保たれる。これは、ゲインスケジューリングにより反応温度制御が可能であることを示唆している。

6. 反応温度精密制御

反応温度の精密制御システムを図5に示した。反応温度の目標値軌道に対応して冷媒入口温度を調整するフィードフォワード補償と、反応温度と冷媒入口温度のカスケード制御で構成される。

フィードフォワード補償則は、反応温度目標値軌道を与え、重合プロセスモデルによるシミュレーションにより、冷媒入口温度の時間パターンとして定まる。得られた結果を時系列テーブルとして制御システムに設定する。

以降では、I-PD/II²-PDコントローラによる反応温度制御のモデルベースPID/PII²D設定則を与え、それによりゲインスケジューリングした制御実績を示す。

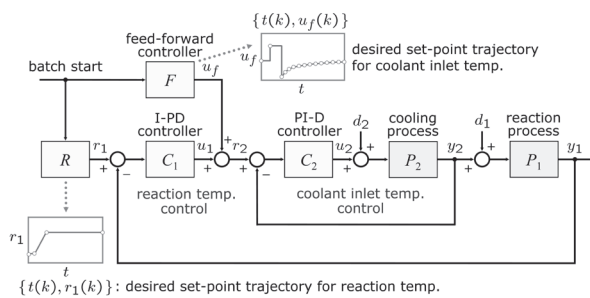


図5. 反応温度精密制御システム

6.1 I-PD 制御 PID 設定則

カスケード制御2次ループの冷媒入口温度制御は、混合プロセスが制御対象なので、非常に速い応答を示し動特性は無視できる。さらに、式(12)の伝達関数モデルにおける、冷媒の熱容量による遅れの時定数は $T_{p2} < 1\text{min} \ll (T_{p1}/10)$ で無視できる。そして、プロセス動特性を次の1次遅れ特性とみなす。

$$P(s) \approx \frac{K_p}{T_{p1}s + 1} \quad (14)$$

I-PDコントローラのPIDパラメータ $\{K_c, T_i, T_d\}$ 、微分ゲイン $1/\gamma$ とする。目標値 $r(s)$ 、制御量 $y(s)$ 、制御偏差 $e(s) = r(s) - y(s)$ として、操作量 $u(s)$ は次式で表される。

$$u(s) = K_c \left(-y(s) + \frac{1}{T_i s} e(s) - \frac{T_d s}{1 + \gamma T_d s} y(s) \right) \quad (15)$$

その目標値応答特性 $W_c(s) = y(s)/r(s)$ は次のようになる。

$$W_c(s) = \frac{1}{1 + T_i s + T_i T_d s^2 + (T_i s / K_c P(s))} \quad (16)$$

望ましい目標値応答特性 $W_d(s)$ を2次臨界制動応答とし、応答の速さを規定するチューニングパラメータ T_F を用いる。

$$W_d(s) = \frac{1}{(1 + T_F s)^2} \quad (17)$$

$W_c(s)$, $W_d(s)$ の分母多項式の係数相等条件から、微分時間がゼロとなる制約のもとで、比例ゲインと積分時間が求まる。微分時間は経験的に $T_d = T_i/8$ とする。このPID設定則を表1に整理した。ここで、 $q \equiv T_F/T_{p1} < 1$ である。

表1. I-PDコントローラのモデルベースPID設定則

	unstable process	stable process
K_c	$\frac{1}{K_p} \left(\frac{2}{q} + 1 \right)$	$\frac{1}{K_p} \left(\frac{2}{q} - 1 \right)$
T_i	$q(q+2)T_{p1}$	$q(2-q)T_{p1}$
T_d	$\frac{T_i}{8}$	$\frac{T_i}{8}$

短い時定数 T_{p2} を無視できない場合は、次の直列補償型PIDアルゴリズムでまず設計し、その結果を並列補償型であるI-PDアルゴリズムに等価変換すればよい⁽¹⁷⁾。これを簡単にするため不完全微分項は無視する。

$$\tilde{C}(s) = \tilde{K}_c \left(1 + \frac{1}{\tilde{T}_i s} \right) \left(1 + \tilde{T}_d s \right) \quad (18)$$

この微分時間 $\tilde{T}_d = T_{p2}$ に設定すれば、{定常ゲイン1, 時定数 T_{p2} } の1次遅れ特性を、コントローラの微分動作項で極ゼロ相殺できる。

これにより、前述したPI設定則の結果を \tilde{K}_c, \tilde{T}_i にそのまま適用する。そして次式により、I-PDアルゴリズムのPIDパラメータに等価変換する。

$$K_c = \left(1 + \frac{\tilde{T}_d}{\tilde{T}_i} \right) \tilde{K}_c$$

$$T_i = \tilde{T}_i + \tilde{T}_d \quad (19)$$

$$T_d = \frac{\tilde{T}_i \tilde{T}_d}{\tilde{T}_i + \tilde{T}_d}$$

数値例

伝達関数モデル数値例の特定品種において、チューニングパラメータ $T_F = 3.0\text{min}$ としたPIDパラメータのゲインスケジューリングを図6に示した。高い比例ゲインが特徴で、バッチ経過時間が進むにつれ初期値8.5から増大していく。計測ノイズによる操作量の無用な変動を抑えるため、上限値30で飽和させる。積分時間は一定とみなしてよく6.2minである。微分時間は積分時間の1/8で0.8minとした。

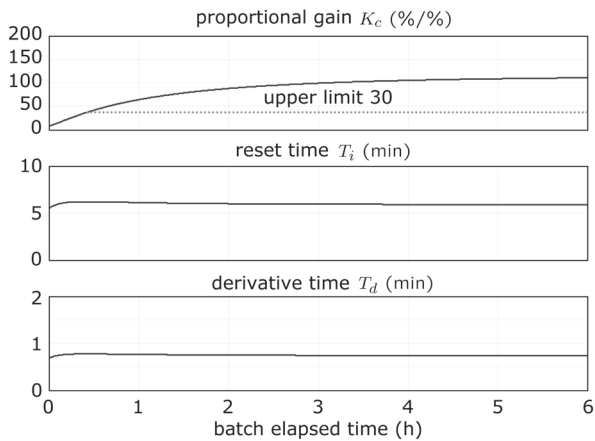


図 6. PID ゲインスケジューリング

制御実績

ある品種のゲインスケジューリング I-PD 制御による制御実績を図 7 に示した。フィードバック制御だけでも十分な制御性能が得られる。重合開始直後は、冷媒入口温度の低下が遅れるため反応温度は + 0.50℃ オーバーシュートするが、その後は目標値 ± 0.20℃ 未満の変動に抑えられる。これは、要求性能（目標値 ± 0.50℃ 以内）を十分に満たしている。

冷媒入口温度はいくぶん振動的である。これは、プロセスが不安定状態にあるとき、操作量を揺らし続けて制御量を安定化する動作であろうと推測している。あるいは、流出熱がないために、平衡状態のまわりで冷却と加熱を繰り返す、バッチ重合プロセス特有の現象とも解釈できる。これを抑えるため比例ゲインを小さくすると、外乱抑制性能が低下し、制御量の変動が増大することを確認している。

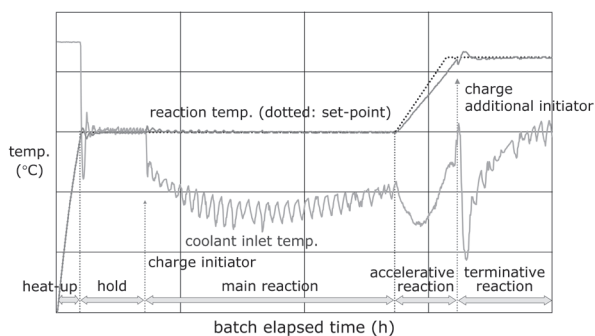


図 7. ゲインスケジューリング I-PD 制御実績

6.2 II²-PD 制御 PII²D 設定則

II²-PD 制御の必要性

このように、I-PD 制御は良い制御性能を示すが、それを注意深く観察すると、微小な定常偏差が生じていることがわかる。これはバッチ経過時間を通して、ランプ状外乱が作用していることによる。操作量変化を時間軸について上下反転したものが外乱に相当し、重合の進行

に伴う発熱量と伝熱特性の変化に起因する。図 7 の操作量変化を時間区分すると、複数のランプ状外乱の存在が明らかになる。

プロセスの伝達関数が原点に極を持たない場合、フィードバック制御システムがランプ状外乱にオフセットフリーとなるには、内部モデル原理から、コントローラは自身の極に、ランプ状外乱と同じ原点の 2 位極を含まなければならない⁽¹⁸⁾。すなわち、2 重積分動作が必要になる。

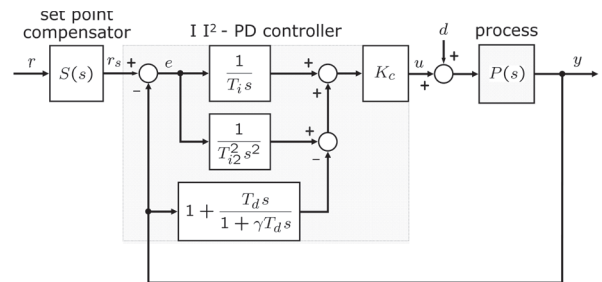


図 8. II²-PD 制御システム

II²-PD コントローラでプロセス $P(s)$ をフィードバック制御するシステムを図 8 に示した。2 重積分動作による目標値応答の行き過ぎを抑えるため、目標値 $r(s)$ は目標値補償器 $S(s)$ を通し、その出力 $r_s(s)$ をコントローラに与える。外乱 $d(s)$ は操作量 $u(s)$ に加法的に作用するプロセス入力等価外乱とする。II²-PD コントローラは、積分動作と 2 重積分動作が制御偏差 $e(s) = r_s(s) - y(s)$ に作用し、比例動作と微分動作(微分ゲイン $1/\gamma$)は制御量 $y(s)$ だけに働く。これにより、1 組の PII²D パラメータ $\{K_c, T_i, T_{i2}, T_d\}$ で、目標値追従性と外乱抑制性を同時に満たす 2 自由度制御システムを構成する。

PII²D 設定則

プロセス伝達関数モデルとして式 (12) を用い、一般性のある PII²D 設定則を与える。ランプ状外乱は、持続時間 t_r の間に操作量等価な外乱量 d_r だけ、定速度 $a \equiv d_r/t_r$ で変化する。

$$d(s) = \frac{a}{s^2} \quad (a \equiv d_r/t_r) \tag{20}$$

この外乱に対する制御量の望ましい応答特性 $W_d(s)$ を一般化臨界制動応答とする⁽¹⁹⁾。制御システムの因果律を保つため、プロセス動特性モデルの相対次数 r^{*2} に対して一般化臨界制動の次数 $n = r + 2$ とし、制御量応答をプロセスむだ時間だけ遅らせる。ここには、制御性能を調整する二つのパラメータがある。整定時間を決めるパラメータ T_F と、制御量の減衰比を規定するパラメータ αK_p である。

※ 2s に関する分母多項式の次数と分子多項式の次数の差

$$W_d(s) = \frac{y(s)}{d(s)} = \frac{\alpha K_p T_F s^2 / a}{(1 + T_F s)^n} e^{-T_L s} \quad (21)$$

ランプ状外乱に対する望ましい制御量応答を実現する PII²D 設定則を導く⁽²⁰⁾。II²-PD 制御に内在する目標値フィルターを目標値入力側（制御偏差演算部の前）に出すと、コントローラを次式の PII²D コントローラ $C_2(s)$ として PII²D 設定則を設計できる。

$$C_2(s) = K_c \left(1 + \frac{1}{T_i s} + \frac{1}{T_{i2}^2 s^2} + \frac{T_d s}{1 + \gamma T_d s} \right) \quad (22)$$

外乱応答が望ましい制御量応答に一致する条件から、この PII²D コントローラは次のように定まる。

$$C_2(s) = \frac{1}{P(s)} \left(\frac{P(s)}{W_d(s)} - 1 \right) \quad (23)$$

これに、 $n = 4$ とした $W_d(s)$ と $P(s)$ を代入し、むだ時間を Maclaurin 展開近似すると、分数多項式表現は次のようになる。 α は無次元で、ランプ状外乱速度 a が時間の逆数の次元 h^{-1} を持つので、分数多項式の係数の次元はいずれも一致する。

$$C_2(s) = \frac{1 + n_1 s + n_2 s^2 + n_3 s^3 + n_4 s^4}{d_0 s^2 (1 + d_1 s + d_2 s^2 + d_3 s^3 + \dots)} \quad (24)$$

$$n_1 = 4T_F, \quad n_2 = 6T_F^2 \mp \frac{\alpha}{a} T_F$$

$$n_3 = 4T_F^3 - \frac{\alpha}{a} T_F (T_{p1} \pm T_{p2})$$

$$n_4 = T_F^4 - \frac{\alpha}{a} T_F T_{p1} T_{p2}$$

$$d_0 = \frac{\alpha K_p T_F}{a}, \quad d_1 = -T_L, \quad d_2 = \frac{T_L^2}{2}, \quad d_3 = -\frac{T_L^3}{6}$$

式 (22) の PII²D アルゴリズムの不完全微分項を無視したものと式 (24) を分母多項式で表し、係数相等条件から PII²D 設定則を得る。

$$K_c = \frac{n_2 - (n_1 - d_1) d_1 - d_2}{d_0} \quad (25)$$

$$T_i = \frac{n_2 - (n_1 - d_1) d_1 - d_2}{n_1 - d_1} \quad (26)$$

$$T_{i2} = \sqrt{n_2 - (n_1 - d_1) d_1 - d_2} \quad (27)$$

$$T_d = \frac{n_3 - [n_2 - (n_1 - d_1) d_1 - d_2] d_1}{n_2 - (n_1 - d_1) d_1 - d_2} - \frac{(n_1 - d_1) d_2 - d_3}{n_2 - (n_1 - d_1) d_1 - d_2} \quad (28)$$

II²-PD 制御シミュレーション

特定品種のバッチ重合開始から 6 時間にわたる、制御シミュレーションの結果を図 9 に示した。

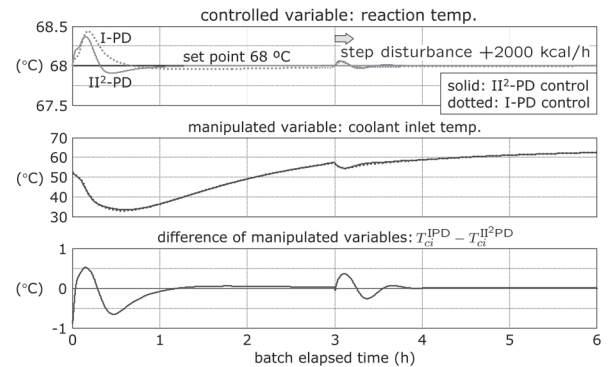


図 9. I-PD/II²-PD 制御シミュレーション

上段が制御量である反応温度。中段は操作量である冷却水入口温度制御目標値で、II²-PD 制御の操作量を実線、I-PD 制御のそれは破線で表した。下段には I-PD 制御と II²-PD 制御の操作量の差を示した。バッチ経過時間 3 h の時点で、そのときの重合反応発熱量の 30% に相当する発熱量増加外乱をステップ状に与えている。I-PD 制御のチューニングパラメータ $T_F = 3 \text{ min}$ とした。II²-PD 制御では、整定時間調整定数 $T_F = 3 \text{ min}$ 、減衰度調整定数 αK_p は $T_d \approx 0.1 T_i$ となるように数値的に求めた。

シミュレーションでは II²-PD 制御が優れた制御性能を示した。I-PD 制御と比較すると次のように言える。今後は実運転でその優位性と実用上の課題を確認していく。

- (1) 重合開始後の急激なランプ状外乱による反応温度の上昇は、I-PD 制御の $+0.45 \text{ }^\circ\text{C}$ に対し、II²-PD 制御では $+0.35 \text{ }^\circ\text{C}$ に抑えられる。さらに、目標値 $68 \text{ }^\circ\text{C}$ に回復する時間を $1/2$ に短縮できる。
- (2) その後の緩やかなランプ状外乱に対して、II²-PD 制御は定常偏差なく目標値に追従するが、I-PD 制御ではバッチ経過時間 $1 \sim 3 \text{ h}$ の間 $-0.043 \text{ }^\circ\text{C}$ 程度の微小な定常偏差が生じる。これは実運転でも観察されており、図 9 下段に示したように、I-PD 制御の操作量が II²-PD 制御のそれよりも僅か $0.043 \text{ }^\circ\text{C}$ 程度高いことに起因している。
- (3) ステップ状外乱に対して、II²-PD 制御はやや振動的な応答となる。これは、2 重積分動作により操作量がオーバーシュートするためである。

7. B2B 制御

ここでいう B2B 制御は、バッチ運転の実績データを用いて重合プロセスモデルを適応的に調整し、その結果をこれまで述べてきたモデルベース制御に反映するものである。同品種の実績データを使うので、重合反応モデルは固定し、熱収支モデルを適応させる。熱収支モデルの主な変動要因は、反応液粘度とコイル・ジャケット総括伝熱係数の推算誤差、さらに伝熱面の汚れによる総括伝熱係数の変化である。

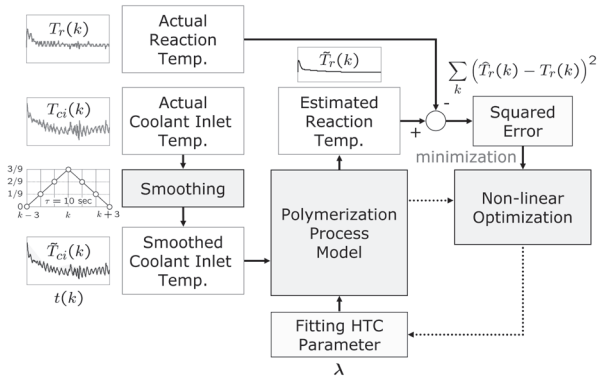


図 10. 重合プロセスモデルの B2B 適応調整機構

実績データとして、バッチ経過時間、冷媒入口温度、反応温度の時系列データ $\{t(k), T_{ci}(k), T_r(k)\}$ を用いる。ここで、 k はサンプリング周期 T の時点を表す。平滑化した冷媒入口温度 $\hat{T}_{ci}(k)$ を重合プロセスモデルの入力とし、その出力である反応温度 $\hat{T}_r(k)$ を得る。その実績値との 2 乗誤差を最小とする非線形最適化問題を数値的に解き、重合プロセスモデルの伝熱特性適応パラメータ λ を得る。この一連の仕組みを図 10 に示した。

$$\min_{\lambda} \sum_k (\hat{T}_r(k) - T_r(k))^2 \quad (29)$$

適応パラメータ $\lambda = [\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3]$ は次の意味を持つ。まず、総括伝熱係数 U は反応液粘度 μ や攪拌機回転数 N などにより変化する。その推算値 $\hat{U}(t) = h(\mu(t), N, \dots)$ をパラメータ λ_1 で調整し、 $U(t) = \lambda_1 \hat{U}(t)$ とする。次に、反応液の粘度はそのモノマー濃度 x_m により変わる。これを、初期粘度 μ_0 、モノマー濃度依存定数 μ_1 、 n にパラメータ λ_2, λ_3 を用いて、 $\mu(t) = \lambda_2 \mu_0 + \mu_1 (1 - x_m(t))^{\lambda_3}$ のように近似する。

実施例を図 11 に示した。上段は初期の重合プロセスモデルのシミュレーションと実績データを対比したもので、下段がパラメータ適応後の同様の比較である。反応温度はもとより冷媒入口温度のシミュレーション結果が、実績データに最小 2 乗の意味で接近していることがわかる。このときの適応パラメータは、総括伝熱係数を 1.3 倍に、反応液の初期粘度を 1/7.5 にするものとなった。

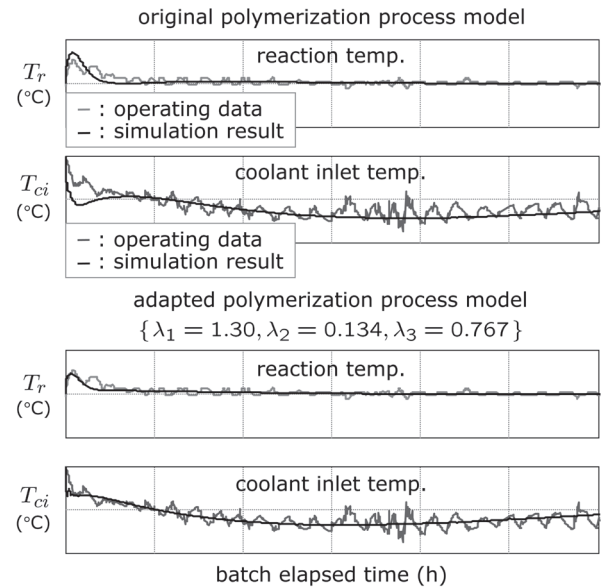


図 11. 重合プロセスモデルの B2B 適応調整結果

8. おわりに

本技法は、すでに複数のバッチ・セミバッチ重合プロセスに適用し、その優れた制御性能を実証している。これらのプロジェクトでは、取り扱う物質と反応機構がそれぞれ異なる。このため、重合反応モデル作成が重要な設計要素になっている。

この B2B 制御システムは特許出願を終えており、現在はその設計道具箱の製品化を鋭意進めている。まもなく、2013 年前半には発売できる段階にある。今後は、本技法を広く応用しながら機能増強を図るとともに、道具箱の普及に注力していく。

高機能性ポリマーや医薬品中間原料の製造などでますます重要性の高まるバッチプロセスにふさわしい、一般性のある優れた制御方式の枠組みを確立することが求められている。ここで示した厳密なプロセスモデルをベースにしたアプローチは、そのベンチマークの一つといえよう。

9. 謝辞

この制御システムを開発する機会を与えていただいた関係者の皆さまに、心からお礼申し上げます。また、多くの有益なコメントをいただいた、James B. Rawlings 教授（ウィスコンシン大学）、北森俊行名誉教授（東京大学）、片山徹名誉教授（京都大学）、加納学教授（京都大学）に深く感謝します。

<参考文献>

- (1) 小河, 加納: 化学プロセス制御技術者の実践と挑戦; システム / 制御 / 情報, 52-8, pp.2-9 (2008)
- (2) M.Kano and M.Ogawa: The state of the art in chemical process control in Japan: Good practice and questionnaire survey, *Journal of Process Control*, 20, pp.969-982 (2010)
- (3) 小河, 藤本, 川野, 北村: 現場密着型プロセス制御問題解決; 第 52 回自動制御連合講演会予稿 (2009)
- (4) 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, pp.139-148 (2010)
- (5) Lipták, B. G.: Controlling and optimizing chemical reactor, *Chemical Engineering*, May 26, pp.69-81 (1986)
- (6) Seborg, D.E., T.F. Edgar & D.A. Mellichamp: *Process Dynamics and Control Second Edition*, pp.602-610, John Wiley & Sons, Inc. (2004)
- (7) 大塚, 古谷, 松島: ジャケット付き反応器の温度制御, 化学装置, 2000 年 6 月号, pp.66-71 (2000)
- (8) 鈴木秀明: 化学工学エンジニアは何でも屋, それが好き, 化学工学, 70-4, p.269 (2006)
- (9) JBF: S88 入門 (2004)
- (10) 関, 大山, 小河: 逐次線形化に基づく非線形モデル予測制御 - 化学反応器への応用, 計測自動制御学会論文集, 38-1, pp.61-66 (2002)
- (11) Bindlish, R. and J.B. Rawlings: Target linearization and model predictive control of polymerization processes, *AIChE Journal*, 49-11, pp.2885-2899 (2003)
- (12) 三浦, 今枝, 橋本, Wood, 服部, 大西: PVC 重合反応器における一般化予測制御法に基づくオートチューニング PID 制御系設計法, 化学工学論文集, 25-2, pp.248-252 (1999)
- (13) Lee, K.S. and J.H. Lee: Iterative learning control-based batch process control technique for integrated control of end product properties and transient profiles of process variables, *Journal of Process Control*, 13, pp.607-621 (2003)

- (14) Clarke-Pringle, T.L. and J.F. MacGregor: Optimization of molecular-weight distribution using batch-to-batch adjustments, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 37, pp.3660-3669 (1998)
- (15) 橋本健治: 反応工学, pp.17-21, 培風館 (1982)
- (16) Rawlings, J.B. and J.G. Ekerdt: *Chemical Reactor Analysis and Design Fundamentals*, pp.538-543, Nob Hill Publishing (2002)
- (17) 小河, 関: バッチ冷却晶析プロセスのモデルベース晶析温度精密制御 - 第 1 報, 第 55 回自動制御連合講演会予稿集, OS7-3 (2012)
- (18) 片山徹: 新版フィードバック制御の基礎, pp.133-135, 朝倉書店 (2002)
- (19) 荒木光彦: PID 調節計のパラメータ調整則の発展, システム / 制御 / 情報, 50-12, pp.441-446 (2006)
- (20) 北森俊行: 制御の現場と制御理論の整合性, pp.46-61, 計測自動制御学会プロセス制御専門家養成塾補講 (2008)

<著者所属>

- | | |
|-------|---|
| 小河 守正 | アドバンスオートメーションカンパニー
エンジニアリング本部アドバンスト・ソリューション部 |
| 佐々木 亨 | アドバンスオートメーションカンパニー
エンジニアリング本部アドバンスト・ソリューション部 |