

บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

กระบวนการเกิดพอลิเมอร์เป็นเรื่องเกี่ยวกับการเกิดปฏิกิริยาที่มีความเป็นเชิงซ้อนสูงมาก เนื่องจากพอลิเมอร์เป็นสารประกอบที่มีโครงสร้างโมเลกุลซับซ้อนมาก และไม่มีกระบวนการผลิตพอลิเมอร์ใดที่ทุกโมเลกุลของพอลิเมอร์ภายในเครื่องปฏิกรณ์ที่จะมีความยาวสายโซ่เฉลี่ย (average chain length) หรือ น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ย (average weight molecular) เท่ากัน ซึ่งคุณสมบัติทั้งสองอย่างของพอลิเมอร์นี้เรียกว่า การกระจายของน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์ (Molecular Weight Distribution) ซึ่งสามารถวัดได้ทางอ้อมโดยการวัด ความหนืด, ดัชนีการหักเหแสง ฯลฯ การกระจายของน้ำหนักโมเลกุลภายในวัตถุพอลิเมอร์จะบอกถึงคุณสมบัติสุดท้ายที่จะนำไปใช้งาน (end-use properties) ซึ่งโดยทั่วไปในทุกๆ เครื่องปฏิกรณ์จะมีสภาวะที่แปรผันกับเวลา ระหว่างการเกิดปฏิกิริยาเป็นตัวกำหนดคุณสมบัติสุดท้ายที่จะนำไปใช้งานหรือคุณภาพของพอลิเมอร์ สภาวะเหล่านี้ เช่น อุณหภูมิและความเข้มข้นของโมโนเมอร์ ฯลฯ และในเครื่องปฏิกรณ์ถังกวนแบบต่อเนื่อง (CSTR) มีเรสซิเดนซ์ไทม์จะเป็นตัวกำหนดคุณภาพการใช้งานของพอลิเมอร์ ด้วยเหตุนี้จึงมีประโยช์ที่พูดเกี่ยวกับพอลิเมอร์ได้ว่า “เป็นผลิตภัณฑ์โดยกระบวนการ” ดังนั้น การเลือกชนิดของกระบวนการ (แบทช์, เซมิแบทช์, ต่อเนื่อง) จึงเป็นสิ่งสำคัญเช่นเดียวกับสภาวะของกระบวนการ (ค่าหรับ, อุณหภูมิ, ฯลฯ) ดังนั้นในบทนี้จะกล่าวถึงเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์ที่มีใช้ในอุตสาหกรรมและเหตุผลในการเลือกใช้รวมไปถึงผลกระทบที่มีกับการควบคุมและตัวควบคุมที่เหมาะสมกับกระบวนการแต่ละแบบ ซึ่งเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์ที่นิยมใช้ในกระบวนการสังเคราะห์ผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ในอุตสาหกรรมมีดังนี้

- 2.1. เครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ (Batch Reactor)
- 2.2. เครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง (Continuous Stirred Tank Reactor and Plug Flow Reactor)
- 2.3. เครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบทช์ (Semi-Batch Reactor)

2.1 เครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ (Batch Reactor)

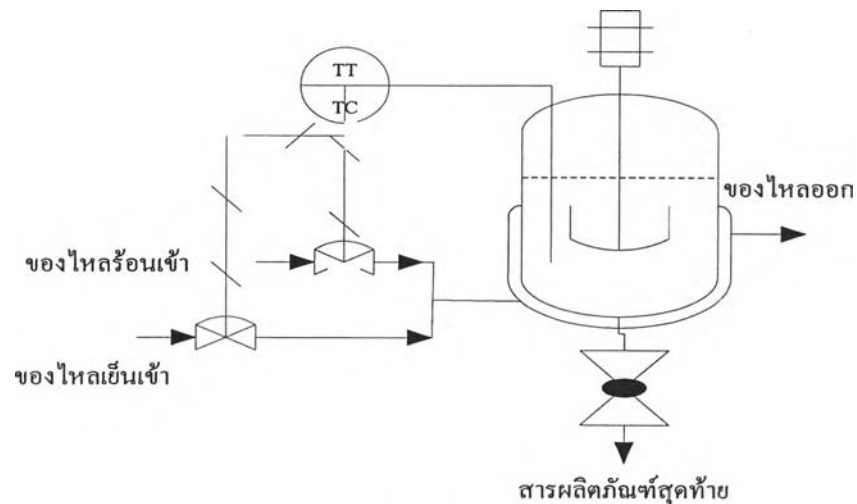
เครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์นิยมใช้กับผลผลิตที่ต้องการเปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันสูงๆ (High Percent Conversion) และเป็นผลิตภัณฑ์ที่มีความพิเศษเช่น ราคาแพง, รวมถึงเป็นผลิตภัณฑ์ที่ทำให้เครื่องปฏิกรณ์มีการเปราะเปื้อนเมื่อทำการผลิตอย่างต่อเนื่อง แต่ข้อเสียของกระบวนการแบบแบทช์คือมีการหยุดชะงักของการปฏิบัติการชั่วขณะจึงยุ่งยาก ใช้บุคลากรและเวลาในการปฏิบัติการมากกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง

โดยวงจรการดำเนินการของกระบวนการแบบแบทช์ดังรูปที่ 2.1-ก. ประกอบด้วย

- 1.) **ขั้นเริ่มต้น (Start up)** โดยป้อนสารตั้งต้นแต่ละชนิดลงในเครื่องปฏิกรณ์
- 2.) **ขั้นการปฏิบัติการทำปฏิกิริยา (Operating Step)** โดยทำให้อิอน้ำถูกป้อนเข้าสู่แจ็กเก็ตเพื่อให้ความร้อนแก่สารตั้งต้นที่อยู่ในเครื่องปฏิกรณ์เพื่อให้สารตั้งต้นทำปฏิกิริยากันที่สภาวะและอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่ต้องการ โดยนำน้ำเย็นเข้าสู่แจ็กเก็ตเพื่อถ่ายเทความร้อนที่คายออกมาจากปฏิกิริยาและทำให้โปรไฟล์ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เป็นไปตามเคอฟของอุณหภูมิกับเวลาที่กำหนด นั่นคืออุณหภูมิเซทพอยท์ที่แปรตามเวลาถูกป้อนเข้าสู่ตัวควบคุมอุณหภูมิเพื่อให้ได้สารผลิตภัณฑ์ที่ต้องการมีผลผลิตและคอนเวอร์ชันมากที่สุด และทำให้เย็นอย่างรวดเร็วเพื่อหยุดปฏิกิริยาหรือเพื่อให้ง่ายต่อการดำเนินการในขั้นตอนต่อไป
- 3.) **ถ่ายสารผลิตภัณฑ์ที่ได้**ออกเพื่อเข้ากระบวนการอื่น (Transfer to other Process) เช่น กระบวนการแยกหรือทำการบรรจุเป็นผลิตภัณฑ์สุดท้ายเพื่อส่งขายต่อไป
- 4.) **ทำความสะอาดเครื่องปฏิกรณ์ (Clean Up)** เพื่อทำการผลิตสารผลิตภัณฑ์อื่น หรือกลับไปทำการดำเนินการในขั้นที่ 1 ในกรณีที่ไม่ว่าจำเป็นต้องทำความสะอาดเครื่องปฏิกรณ์



รูปที่ 2.1-ก.



รูปที่ 2.1-ข.

รูปที่ 2.1 ขั้นตอนการดำเนินการของกระบวนการแบบแบทช์และโครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

รูปที่ 2.1-ก. ขั้นตอนการดำเนินการของกระบวนการแบบแบทช์

รูปที่ 2.1-ข. โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์ถังกวนแบบแบทช์

ความสำคัญของกระบวนการแบบแบทช์จะมีความสำคัญมากขึ้น ถ้าสามารถทำให้วงจรขั้นตอนการดำเนินการของกระบวนการแบบแบทช์ทำได้อย่างต่อเนื่อง ดังนั้นจึงควรพิจารณาออกแบบวงจรของกระบวนการแบบแบทช์ให้สั้นลงได้เนื่องจากสถานะการดำเนินการของปฏิกิริยา

(อุณหภูมิ, ความดัน ฯลฯ) ขึ้นกับเวลา ดังนั้นอาจหาสภาวะของปฏิกิริยาที่เหมาะสมและสามารถทำการควบคุมสภาวะนั้นได้เพื่อทำให้ปริมาณของสารผลิตภัณฑ์ที่ได้ต่อหน่วยปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์มากขึ้น โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์ดังกล่าวแบบเบบเบทซ์ดูได้จากรูปที่ 2.1-ข.

ถึงแม้ว่ากระบวนการวิศวกรรมเคมีขนาดใหญ่ในทางการค้าส่วนมากจะทำการดำเนินการผลิตแบบต่อเนื่อง แต่กระบวนการแบบเบทซ์เป็นปัญหาที่ท้าทายและน่าสนใจมากสำหรับเรื่องเกี่ยวกับการสร้างแบบจำลอง (Modeling) และการควบคุมกระบวนการ เนื่องจากกระบวนการแบบเบทซ์นี้มีพฤติกรรมที่คงไว้ทางพลวัต (inherent Dynamic) หรือมีพฤติกรรมคงไว้ทางจลนพลศาสตร์ (inherent Kinetic) ตามธรรมชาติหรือพูดได้ว่าพฤติกรรมของกระบวนการแบบเบทซ์เป็นจลนพลศาสตร์โดยแท้ ซึ่งเป็นข้อดีที่เหนือกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องอีกข้อหนึ่งสำหรับบางปฏิกิริยาโดยเฉพาะปฏิกิริยาที่มีค่าคงที่อัตราน้อย โดยเฉพาะปัจจุบันมีการใช้เครื่องคิดจลนพลศาสตร์มาใช้ในการควบคุมและหาความเหมาะสม (Optimization) ของกระบวนการแบบเบทซ์กันกว้างมากขึ้น ทำให้กระบวนการแบบเบทซ์มีประสิทธิภาพมากขึ้นและความตึงในเรื่องบุคลากรก็น้อยลง

2.1-1. ตัวอย่างการสร้างแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์

พิจารณาปฏิกิริยาอันดับที่หนึ่งที่ทำตามลำดับกันมาในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์เมื่อเวลาดำเนินไป



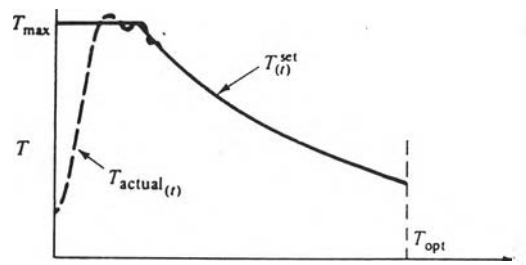
ผลิตภัณฑ์ที่เราต้องการคือองค์ประกอบ B ซึ่งเมื่อเราปล่อยให้ปฏิกิริยาดำเนินต่อไปจะทำให้ B ทำปฏิกิริยากลายเป็น C ซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ที่เราไม่ต้องการมากเกินไปทำให้ค่าผลิตภัณฑ์ (Yield) มีค่าน้อย แต่ถ้าทำการหยุดปฏิกิริยาเร็วเกินไปจะมีองค์ประกอบ A ที่ไม่ได้ทำปฏิกิริยาดังมาในผลิตภัณฑ์ด้วยทำให้คอนเวอร์ชันและค่าผลิตภัณฑ์ต่ำ ดังนั้น เบทซ์ใหม่ที่เหมาะสมคือเวลาที่ควรหยุดปฏิกิริยาโดยการทำให้ส่วนผสมในเครื่องปฏิกรณ์เย็นลงอย่างรวดเร็ว

กระบวนการนี้ต้องการโปรไฟล์ของอุณหภูมิ (Optimal Temperature Profile) ที่เหมาะสมซึ่งทั้งสองปฏิกิริยานี้ อุณหภูมิจะไม่มีผล ถ้าทั้งสองปฏิกิริยานี้มีค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเฉพาะ (k_1 และ k_2) เหมือนกัน (ถ้าค่าพลังงานกระตุ้นของทั้งสองปฏิกิริยาเท่ากัน) ซึ่งปฏิกิริยานี้ควรถูกรันที่

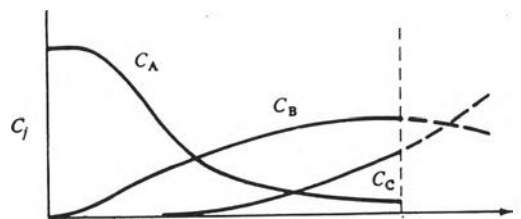
ที่อุณหภูมิสูงเท่าที่เป็นไปได้ที่แบทช์ใหม่ต่างๆ เพื่อป้องกัน ไม่ให้เกิดปฏิกิริยาการสลายตัวหรือเกิดปฏิกิริยาการเกิดพอลิเมอร์ของผลิตภัณฑ์ B ที่อุณหภูมิสูงๆ โดยอุณหภูมิสูงสุดที่ใช้รันปฏิกิริยาช่วงนี้ขึ้นอยู่กับขีดจำกัดของกระบวนการ เช่น ความดันของเครื่องมือและอุณหภูมิสูงสุดที่ระบบจะทำงานได้ เป็นต้น

ถ้า k_1 ขึ้นกับอุณหภูมิมากกว่า k_2 เราต้องรันที่อุณหภูมิที่สูงที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้เพื่อให้ A เกิดปฏิกิริยาไปเป็น B ให้มากที่สุด ในทั้งสองกรณีนี้ต้องทำการหยุดปฏิกิริยาที่เวลาที่ถูกต้องเพื่อป้องกันไม่ให้องค์ประกอบ B เปลี่ยนแปลงเป็นสารอื่น

ถ้า k_1 ขึ้นกับอุณหภูมิน้อยกว่า k_2 โพรไฟล์ของอุณหภูมิที่เหมาะสมจะเริ่มที่อุณหภูมิสูงเพื่อทำให้เกิดปฏิกิริยาที่หนึ่งให้มากที่สุดแต่หยุดการสูญเสียขององค์ประกอบ B ดังรูปที่ 2.2-ก และรูปที่ 2.2-ข ได้แสดงโพรไฟล์ของอุณหภูมิและความเข้มข้นที่เหมาะสมให้เห็น ซึ่งเส้นจุดเป็นตัวอย่างของอุณหภูมิทั่วไปซึ่งควรจะถูกทำให้สำเร็จในเครื่องปฏิกรณ์จริง ส่วนเส้นทึบเป็นโพรไฟล์อุณหภูมิที่เหมาะสมที่จะถูกป้อนเป็นเซตพอยท์ให้กับตัวควบคุม



รูปที่ 2.2-ก



รูปที่ 2.2-ข

รูปที่ 2.2 โพรไฟล์ของสถานะที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

รูปที่ 2.2-ก) โพรไฟล์ของอุณหภูมิที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

รูปที่ 2.2-ข) โพรไฟล์ของความเข้มข้นของแต่ละองค์ประกอบในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

ที่กล่าวมานี้เราสามารถเขียนเป็นแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการนี้โดยสมมุติว่า ความหนาแน่นของสารที่อยู่ในเครื่องปฏิกรณ์มีค่าคงที่หลังจากที่สารตั้งต้นได้ถูกชาร์จแล้วและวัฏจักร แบบที่เริ่มขึ้น

จากสมการความต่อเนื่องทั้งหมด :

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = 0 - 0 \quad \dots\dots\dots 2.2$$

นั่นคือไม่มีการไหลเข้าและการไหลออกของมวลและความหนาแน่นคงที่ดังนั้น $dV/dt = 0$ หรือ ปริมาตรของสารในเครื่องปฏิกรณ์คงที่

สมการความต่อเนื่องขององค์ประกอบ A :

$$V \frac{dC_A}{dt} = -Vk_1 C_A \quad \dots\dots\dots 2.3$$

สมการความต่อเนื่องขององค์ประกอบ B :

$$V \frac{dC_B}{dt} = Vk_1 C_A - Vk_2 C_B \quad \dots\dots\dots 2.4$$

สมการทางจลนพลศาสตร์ :

$$k_1 = \alpha_1 e^{-E_1/RT}; k_2 = \alpha_2 e^{-E_2/RT} \quad \dots\dots\dots 2.5$$

ใช้แบบจำลอง (Lumped Model) สำหรับผนังโลหะของเครื่องปฏิกรณ์และใช้สมการเอนทาลปีอย่างง่าย $h = C_p T$, สมการอนุรักษ์พลังงานของของเหลวที่ทำปฏิกิริยาและผนังโลหะของเครื่องปฏิกรณ์ สามารถเขียนได้ดังนี้

สมการอนุรักษ์พลังงานของกระบวนการ :

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = -\lambda_1 V k_1 C_A - \lambda_2 V k_2 C_B - h_i A_i (T - T_M) \quad \dots\dots\dots 2.6$$

สมการอนุรักษ์พลังงานสำหรับผนัง :

$$\rho_M V_M C_M \frac{dT_M}{dt} = h_0 A_0 (T_J - T_M) - h_i A_i (T_M - T) \quad \dots\dots\dots 2.7$$

เมื่อ λ_1 และ λ_2 เป็นความร้อนที่คายออกมาจากปฏิกิริยาของปฏิกิริยาทั้งสอง

หมายเหตุ เมื่อเครื่องปฏิกรณ์ถูกให้ความร้อนด้วยไอน้ำค่าของ, T_J มีค่ามากกว่า T_M และค่า T_M มีค่ามากกว่า T และเมื่อคูลลิ่งด้วยน้ำหล่อเย็นผลของอุณหภูมินี้จะเป็นตรงข้ามกัน ดังนั้นควรเข้าใจด้วยว่า h_0 ที่ใช้ในสมการมีค่าต่างกันสำหรับไอน้ำและการไหลของน้ำหล่อเย็น

สำหรับการเปลี่ยนจากการทำให้ร้อนไปเป็นการคูลลิ่งทันทีนั้นเป็นวิธีที่ค่อนข้างเป็นกลยุทธ์ โดยเฉพาะการทำให้อุณหภูมิถึง T_{max} ควรทำให้เร็วที่สุดเท่าที่เป็นไปได้แต่ไม่ควรเกิดการโอเวอร์ชูต โดยทั่วไปการดำเนินการแบบนี้ทำได้โดยใช้ตัวควบคุมอุณหภูมิรักษาการเปิดปิดวาล์วไอน้ำให้เปิดและปิดวาล์วน้ำหล่อเย็นเข้าและวาล์วน้ำหล่อเย็นออกแต่วาล์วคอนเดนเสดเปิดเมื่อกำลังดำเนินการให้ความร้อน

เมื่อต้องการคูลลิ่งตัวควบคุมอุณหภูมิจะรักษาการปิดวาล์วไอน้ำและวาล์วคอนเดนเสดและรักษาการเปิดวาล์วน้ำหล่อเย็นทั้งน้ำหล่อเย็นเข้าและน้ำหล่อเย็นออกเพื่อนำน้ำหล่อเย็นเข้าสู่แจ็กเก็ต

เพื่อให้ง่ายต่อการศึกษารายละเอียดการเชื่อมโยงและการควบคุมระบบที่คล้ายกับระบบนี้ จะให้ความสัมพันธ์ง่าย ๆ ระหว่างค่าสัญญาณความผิดพลาด (E) ซึ่งเป็นผลต่างระหว่างอุณหภูมิเซ็ทพอยท์กับอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ ($T_{set}-T$) และค่าอัตราการไหลเชิงปริมาตรของไอน้ำ F_S และอัตราการไหลเชิงปริมาตรของน้ำเย็น F_W ดังนี้

$$F_S = f_1(E); F_W = f_2(E) \quad \dots\dots\dots 2.8$$

สมการนี้อธิบายว่าเรากำลังทำอะไรในแจ็กเก็ต ซึ่งอาจต้องกำหนดสองความแตกต่างของสมการขึ้นอยู่กับขั้นตอนการทำให้ร้อนหรือการคูลลิ่ง เราอาจจำเป็นต้องพิจารณาขั้นตอนที่สาม นั่นคือการบรรจุน้ำหล่อเย็นเข้าสู่แจ็กเก็ต ซึ่งถ้าอัตราการไหลของน้ำหล่อเย็นสูงและ/หรือปริมาตรของแจ็กเก็ตมีค่าน้อยอาจละลายไม่ต้องนำเวลาในการบรรจุแจ็กเก็ตมาคิด

2.1-1A เฟสการให้ความร้อน(Heating Phase)

ระหว่างที่ทำการปฏิบัติการให้ความร้อนกับเครื่องปฏิกรณ์ด้วยไอน้ำให้พิจารณาสมการความต่อเนื่องทั้งหมดและสมการอนุรักษ์พลังงานของไอน้ำนั้น

สมการความต่อเนื่องทั้งหมด :

$$V_J \frac{d\rho_J}{dt} = F_s \rho_s - W_c \quad \dots\dots\dots 2.9$$

เมื่อ ρ_J = ความหนาแน่นของไอน้ำในแจ็กเก็ต

V_J = ปริมาตรของแจ็กเก็ต

ρ_s = ความหนาแน่นของไอน้ำที่เพิ่มเข้ามา

W_c = อัตราการควบแน่นของไอน้ำ (มวล/เวลา)

โดยของเหลวที่กลั่นตัวลงมาจะถูกปล่อยออกทางแทรปไอน้ำ (Stream Trap)

สมการอนุรักษ์พลังงานสำหรับไอน้ำ :

$$V_J \frac{d(U_J \rho_J)}{dt} = F_s \rho_s H_s - h_0 A_0 (T_J - T_M) - W_c h_c \quad \dots\dots\dots 2.10$$

เมื่อ U_J = พลังงานภายในของไอน้ำในแจ็กเก็ต

H_s = เอนทาลปีของไอน้ำที่เข้ามา

h_c = เอนทาลปีของของเหลวที่กลั่นตัวลงมา

พลังงานภายในที่เปลี่ยนแปลงปกติสามารถยกเว้นไม่ต้องนำมาคิดเมื่อเปรียบเทียบกับผลของความร้อนแฝงทำให้ได้สมการพีชคณิตง่ายๆเมื่อสมการอนุรักษ์พลังงานอยู่ที่สภาวะคงตัว (Steady State) ดังนี้

$$W_c = \frac{h_0 A_0 (T_J - T_M)}{H_s - h_c} \quad \dots\dots\dots 2.11$$

สมการของสถานะสำหรับไอน้ำหรือตารางไอน้ำสามารถถูกใช้ในการคำนวณอุณหภูมิของแจ็กเก็ต T_j และความดัน P_j จากความหนาแน่น ρ_j ยกตัวอย่างเช่นถ้าเป็นก๊าซสมบูรณ์และสมการความดันไอน้ำ (Vapor-Pressure Eqⁿ) อย่างง่ายสามารถถูกใช้ได้

$$\rho_j = \frac{M}{RT_j} \exp\left(\frac{A_w}{T_j} + B_w\right) \dots\dots\dots 2.12$$

เมื่อ M = น้ำหนักโมเลกุลของไอน้ำ(เท่ากับ 18)

A_w, B_w = ค่าคงที่ความดันไอน้ำ

สมการที่ 2.12 นี้สามารถถูกแก้เพื่อหา T_j ด้วยวิธีไอเทอเรทีฟ (Iterative Method) เพื่อหาค่า ρ_j จากสมการที่ 2.9 เมื่อทราบค่า T_j แล้วสามารถหาค่า P_j จากสมการความดันไอ (Vapor-Pressure equation) ซึ่งปกติแล้วเราจำเป็นที่จะต้องทราบค่า P_j เพื่อคำนวณค่าอัตราการไหลของไอน้ำที่ผ่านวาล์วเข้ามาเมื่ออัตราการไหลขึ้นกับความดันลดข้ามวาล์ว

ถ้ามวลของโลหะที่อยู่รอบๆแจ็กเก็ตมีความสำคัญสมการพลังงานจำเป็นสำหรับมันหรืออาจจะละเลยไม่คิดมันก็ได้ถ้ามันไม่มีความสำคัญมากนัก

เครื่องปฏิกรณ์ที่มีแจ็กเก็ตส่วนใหญ่ปริมาตรของไอน้ำที่อยู่ในแจ็กเก็ตมีค่าค่อนข้างน้อยเมื่อเทียบกับอัตราการไหลของมันทำให้พลวัตการตอบสนองของมันเร็วมาก ดังนั้นสมการสมดุลมวลและพลังงานที่เป็นพีชคณิตง่าย ๆ บ่อยครั้งที่สามารถถูกนำมาใช้ได้ อัตราการไหลของไอน้ำถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับอัตราการไหลควบแน่นซึ่งถูกคำนวณหาความสัมพันธ์ของการถ่ายเทความร้อน ($Q = UA\Delta T$) ด้วยวิธีไอเทอเรทีฟและสมการการไหลของวาล์วสำหรับความดันในแจ็กเก็ต และการไหลควบแน่น

2.1-1B เฟสการกลึง (Colling Phase)

ระหว่างที่น้ำเย็นกำลังไหลผ่านแจ็กเก็ตเพียงแค่สมการอนุรักษ์พลังงานสมการเดียวก็เพียงพอเมื่อสมมติว่าของเหลวในแจ็กเก็ตมีการผสมกันอย่างสมบูรณ์แบบสมการอนุรักษ์พลังงานในแจ็กเก็ต :

$$\rho_j V_j C_j \frac{dT_j}{dt} = F_w C_j \rho_j (T_{j0} - T_j) + h_0 A_0 (T_M - T_j) \dots\dots\dots 2.13$$

เมื่อ T_j = อุณหภูมิของน้ำหล่อเย็นในแจ็กเก็ต

ρ_j = ความหนาแน่นของน้ำหล่อเย็น

C_j = ความจุความร้อนของน้ำหล่อเย็น

T_{j0} = อุณหภูมิของน้ำหล่อเย็นขาเข้า

2.1-2. การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ (Temperature Control Of Batch Reactor)

จากตัวอย่างการสร้างแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ข้างบนนี้จะเห็นว่ากระบวนการแบบแบทช์เป็นกระบวนการที่ไม่เป็นเชิงเส้นและยังคงมีการรักษาพฤติกรรมที่เป็นจลศาสตร์โดยแท้คือไม่มีสถานะคงตัว คุณสมบัตินี้ทำให้ผู้เชี่ยวชาญได้ศึกษาเกี่ยวกับการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์กันมากเพราะการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์เป็นงานหนักที่ท้าทายและจำเป็นต้องใช้การควบคุมที่ไม่เป็นเชิงเส้นในการควบคุม

โดยเฉพาะการดำเนินการที่เริ่มต้นให้ความร้อนกับส่วนผสมของปฏิกิริยา (Reaction Mixture) จากอุณหภูมิในแจ็กเก็ตและตามด้วยการควบคุมอุณหภูมิของปฏิกิริยาโดยความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์นั้นเป็นงานที่ยาก โดย Shinsky ได้ให้เหตุผลว่าเกิดจากปริมาณความร้อนที่คายออกมาจากการเกิดปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วรวมถึงมีค่ามากอย่างต่อเนื่องเมื่อส่วนผสมของปฏิกิริยาได้รับความร้อนและปฏิกิริยาที่เกิดในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ไม่มีสถานะคงตัวและความไม่เป็นเชิงเส้นของกระบวนการ ทำให้เกิดการรันอะเวย์ของอุณหภูมิ (Temperature Runaway) ของเครื่องปฏิกรณ์ ถ้าอัตราการปล่อยความร้อนที่ออกมาจากปฏิกิริยามีค่ามากและมากกว่าอัตราการถ่ายเทความร้อนผ่านผนังไปสู่ น้ำหล่อเย็นที่ไหลผ่านแจ็กเก็ต การรันอะเวย์ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์นี้มีผลกระทบต่ออุปกรณ์และบุคลากรในโรงงานเป็นอย่างยิ่ง ดังนั้นการควบคุมอัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์จึงต้องระมัดระวังเป็นพิเศษเพื่อทำให้เกิดการ โอเวอร์ชูตของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เหลือน้อยที่สุดจึงเป็นสิ่งที่ต้องการ และจำเป็นอย่างยิ่ง นอกจากนี้ในขั้นตอนการเพิ่มความร้อน (Heat Up) ให้กับส่วนผสมของปฏิกิริยาเพื่อให้อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ถึงจุดเซ็ทพอยท์ควรทำด้วยความเร็วโดยไม่ให้เกิดการ โอเวอร์ชูตก็เป็นสิ่งจำเป็นเพื่อลดวงจรในการดำเนินการ แต่อย่างไรก็ตามการควบคุมการให้ความร้อนกับส่วนผสมของปฏิกิริยาก็ขึ้นกับความจำเป็นของกระบวนการผลิตรวมถึงความปลอดภัยและคุณภาพของผลิตภัณฑ์นั้นด้วย

2.1-2.1 การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ด้วยตัวควบคุมที่เป็นเชิงเส้น

จากตำราของ William L. Luyben ได้ใช้การควบคุมป้อนกลับที่เป็นเชิงเส้นแบบ
 พรอบพอสันอด (Linear P-Feedback Controller) ในการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่มีการ
 ดำเนินการง่าย ๆ ที่เริ่มจากการป้อนไอน้ำเพื่อให้ความร้อนกับปฏิกิริยาที่ทำตามลำดับกันในหัวข้อ 2.1-1
 หลังจากนั้นใช้การป้อนน้ำหล่อเย็นเพื่อเอาความร้อนที่คายออกมาจากปฏิกิริยาออก

โดยใช้สัญญาณตัวแปรออกของตัวควบคุมอุณหภูมิไปปรับขอบเขตของวาล์ว 2 ระดับที่แยก
 ออกจากกันเป็น 2 ส่วนคือวาล์วไอน้ำ (Stream Valve) และวาล์วน้ำหล่อเย็น (Cooling Valve) ซึ่งเป็นนิ
 วแมททิควาล์ว (Pneumatic Valve) ทั้งหมด เมื่อความดันซึ่งเป็นตัวแปรออกของตัวควบคุมอุณหภูมิ
 P_c มีขอบเขต (Range) จาก 3 ไปถึง 15 Psig โดยวาล์วนี้จะถูกปรับคั้งนี้คือวาล์วไอน้ำจะถูกเปิดกว้าง
 เมื่อตัวแปรออกของตัวควบคุม P_c อยู่ที่ 15 Psig และปิดที่ $P_c=9$ ซึ่งเป็นครึ่งหนึ่งของขอบเขตของตัว
 แปรออกของตัวควบคุมอุณหภูมิ ส่วนวาล์วน้ำหล่อเย็นจะถูกปิดเมื่อ $P_c=9$ และถูกเปิดกว้างที่ $P_c=3$
 ส่วนเหตุผลในการเลือกแอกชันของวาล์วมาใช้ก็ขึ้นอยู่กับตำแหน่งที่ถูกต้องของของวาล์วเมื่อเครื่อง
 มือที่ส่งลมเกิดการล้มเหลว (Fail-Safe Action Of Valve)

โดยที่ วาล์วไอน้ำจะต้องปิดเมื่อระบบล้มเหลว (Fail Close Valve) ดังนั้นจึงต้องใช้ลมมาเปิด
 (Air to Open หรือ AO-Valve)

วาล์วน้ำหล่อเย็นจะต้องเปิดเมื่อระบบล้มเหลว (Fail Open Valve) ดังนั้นจึงต้องใช้ลมมา
 ปิด (Air to Close หรือ AC-Valve)

เพราะถ้าเกิดอุบัติเหตุขึ้นเราต้องการเอาแหล่งให้ความร้อนออกและเปิดน้ำเย็นเข้าจนสุดขอบเขตของ
 วาล์ว

ขอบเขตของตัวแปรออกของตัวควบคุม	3	9	15
สัดส่วนการเปิดของวาล์วไอน้ำ X_s :		0 (ปิด)	1 (เปิด)
สัดส่วนการเปิดของวาล์วน้ำหล่อเย็น X_w :	1 (เปิด)	0 (ปิด)	

สมการของของเหลวที่เกิดปฏิกิริยาข้างในเครื่องปฏิกรณ์และเวสเซลโลหะ (Vessel Metal) มีดังนี้

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \quad \dots\dots\dots 2.13$$

$$\frac{dC_b}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B \quad \dots\dots\dots 2.14$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-\lambda_1}{\rho C_P} k_1 C_A - \frac{-\lambda_2}{\rho C_P} k_2 C_B - \frac{Q_M}{V \rho C_P} \quad \dots\dots\dots 2.15$$

$$Q_M = h_i A_i (T - T_M) \quad \dots\dots\dots 2.16$$

$$\frac{dT_M}{dt} = \frac{Q_M - Q_J}{\rho_M C_M V_M} \quad \dots\dots\dots 2.17$$

สมการสำหรับแจ็กเก็ตเป็นความแตกต่างของสามเฟสของวัฏจักรแบบเบบท์ ดังนี้ -

A. สมการของแจ็กเก็ตเมื่อมีการป้อนไอน้ำเข้าสู่แจ็กเก็ตและคงไว้อย่างนั้น (35 Psia ความดันของไอน้ำที่จ่าย)

$$V_J \frac{d\rho_s}{dt} = w_s - w_c \quad \dots\dots\dots 2.18$$

$$\rho_s = \frac{MP_J}{R(T_J + 460)} \quad \dots\dots\dots 2.19$$

$$P_J = \exp\left(\frac{A_{vp}}{T_J + 460} + B_{vp}\right) \quad \dots\dots\dots 2.20$$

$$w_s = C_{vs} X_s \sqrt{35 - P_J} \quad \dots\dots\dots 2.21$$

$$Q_J = -h_{os} A_{os} (T_J - T_M) \quad \dots\dots\dots 2.22$$

$$w_s = -\frac{Q_J}{H_s - h_s} \quad \dots\dots\dots 2.23$$

B. ขณะที่กำลังบรรจุน้ำหล่อเย็นเข้าแจ็กเก็ต (20 Psia เมื่อมีการจ่ายน้ำเย็น)

$$A_o = \left(\frac{A_o}{V_J}\right)_{total} V_J \quad \dots\dots\dots 2.24$$

$$\frac{dV_J}{dt} = F_{wo} \quad \dots\dots\dots 2.25$$

$$\frac{d(V_J T_J)}{dt} = F_{wo} T_{JO} + \frac{Q_J}{\rho_J C_J} \quad \dots\dots\dots 2.26$$

$$Q_J = h_{ow} A_o (T_M - T_J) \quad \dots\dots\dots 2.27$$

$$F_{wo} = C_{vw} X_w \sqrt{20} \quad - \dots\dots\dots 2.28$$

ตารางที่ 2.1 พารามิเตอร์และค่าเริ่มต้นสำหรับเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์ในหัวข้อ 2.1-1

สัญลักษณ์	ค่า/หน่วย	สัญลักษณ์	ค่า/หน่วย
α_1	729.55 min ⁻¹	V_J	18.83 ft ³
α_2	6569.6 min ⁻¹	C_{vw}	100 gpm/Psi ^{0.5}
E_1	15000 Btu/lb.mol	T_{JO}	80 °F
E_2	20000 Btu/lb.mol	A_i	56.5 ft ²
A_{vp}	-8744.4 °R	λ_1	-40000 Btu/lb.mol
B_{vp}	15.70	λ_2	-50000 Btu/lb.mol
C_{AO}	0.80 lb.mol A/ft ³	C_p	Btu/lb _m °F
T_o	80 °F	V	42.5 ft ³
K_c	10 psi/psi	ρ	50 lb/ft ³
C_{vs}	112 lb _m /min.psi ^{0.5}	C_M	0.12 Btu/lb _m °F
h_{os}	1000 Btu/h °F ft ²	V_M	9.42 ft ³
h_{ow}	400 Btu/h °F ft ³	ρ_M	512 lb _m /ft ³
h_i	160 Btu/h °F ft ³	ρ_J	62.3 lb _m /ft ³
A_o	56.5 ft ²	C_J	1 Btu/lb _m °F
H_S-h_C	939 Btu/lb _m		

C. เมื่อนำเต็มแจ็กเก็ต

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_{wo}}{V_J} (T_{Jo} - T_J) + \frac{Q_J}{C_J V_J \rho_J} \dots\dots\dots 2.29$$

ทรานสมิตเตอร์อุณหภูมิมีขอบเขตตั้งแต่ 50 ถึง 250 องศาฟาเรนไฮต์ ดังนั้นสัญญาณความดันที่เป็นตัวแปรออกของมันจะมีค่าจาก 3 Psig ที่ 50 องศาฟาเรนไฮต์ไปถึง 15 Psig ที่ 250 องศาฟาเรนไฮต์

$$P_{TT} = 3 + (T - 50) \frac{12}{200} \dots\dots\dots 2.30$$

ตัวควบคุมป้อนกลับแบบพรอบพอชันนอลถูกใช้ในการควบคุมโดยมีค่าไบแอสที่ 7 Psig หรือค่าความดันเป็น 7 Psig เมื่อไม่มีความผิดพลาด (Error) ดังนั้น สมการการควบคุมจึงเขียนได้ว่า

$$P_C = 7 + K_C (P^{set} - P_{TT}) \dots\dots\dots 2.31$$

สัญญาณเซ็ทพอยท์ (P^{set}) มาจากฟังก์ชันของเครื่องกำเนิดลม เมื่ออุณหภูมิของกระบวนการขึ้นไปถึง 200 องศาฟาเรนไฮต์สัญญาณเซ็ทพอยท์ (P^{set}) จะค่อยๆเป็นแร่มพ์ลดลงเรื่อยๆเพื่อป้องกันการสูญเสียของค้ประกอบ B มากเกินไป ดังที่ได้อธิบายไว้ในหัวข้อ 2.1-1ซึ่งเขียนเป็นสมการดังนี้

$$P^{set} = 12 - RAMP(t - t_{200}) \dots\dots\dots 2.32$$

เมื่อ $RAMP$ = อัตราการเปลี่ยนแปลงของ P^{set} ตามเวลา (psi/min)

t = แบบทซ์ไทม์ (นาที)

t_{200} = เวลาเมื่ออุณหภูมิของกระบวนการมาถึง 200 °F

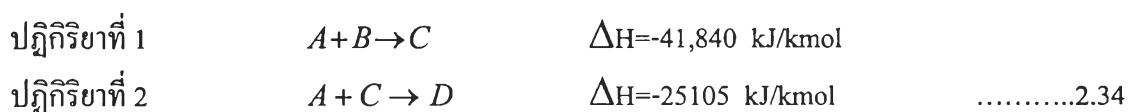
สำหรับค่าเริ่มต้นและค่าพารามิเตอร์ต่างๆของเรื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์ที่ใช้ในการชิมูเลชันดูได้จากตารางที่ 2.1 และผลการตอบสนองที่ได้จากการใช้การควบคุมป้อนกลับแบบพรอบพอชันนอลนั้น

ปรากฏว่าสามารถยอมรับในการใช้งานได้พอสมควร แต่ผลการตอบสนองของอุณหภูมิที่ได้ไม่เป็นไปตามโปรไฟล์ของอุณหภูมิที่ต้องการ

สำหรับปัญหาการควบคุมที่ยากกว่าโจทย์ปัญหาที่ได้ถูกแก้และเพิ่งกล่าวไปแล้วนั้น เป็นปัญหาของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ที่มีการดำเนินการที่เริ่มต้นด้วยการให้ความร้อนเพื่อให้อุณหภูมิถึงเซ็ทพอยท์ และตามด้วยการควบคุมอุณหภูมิของปฏิกิริยาคายความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ให้คงที่ที่อุณหภูมิเซ็ทพอยท์นั้น Shinsky และ Weinstein (Barry J. Cott and Sandro Macchietto, 1989) ได้ใช้ยุทธวิธีการควบคุมแบบคูอล-โหมด (Dual-Mode Control) ไปทำการชิมูเลชันและมีการใช้ยุทธวิธีนี้กับเครื่องปฏิกรณ์ในอุตสาหกรรมอีกด้วย ซึ่งยุทธวิธีนี้เป็นการใช้การควบคุมแบบลูปเปิดในการกำหนดโปรไฟล์ที่เหมาะสมในช่วงการให้ความร้อนให้กับสารในเครื่องปฏิกรณ์โดยการให้ความร้อนให้สูงที่สุดจนกระทั่งอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ถึงจุดที่กำหนดไว้ก่อนแล้ววกี้องศาาก่อนถึงอุณหภูมิเซ็ทพอยท์ และตามด้วยการเปลี่ยนเป็นการให้น้ำหล่อเย็นให้สูงสุดเพื่อทำให้อัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิเป็นศูนย์เมื่ออุณหภูมิถึงเซ็ทพอยท์สุดท้ายที่ต้องการ ซึ่งเมื่อถึงจุดนี้ตัวควบคุมป้อนกลับมาตรฐาน (Standard Feedback Controller) สามารถถูกเปิดสวิตซ์เพื่อใช้ในการรักษาอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ให้คงที่อยู่ที่ค่าอุณหภูมิเซ็ทพอยท์ ซึ่งแอกชันของการควบคุมแบบคูอล-โหมด คือต้องการนำอุณหภูมิของสารในเครื่องปฏิกรณ์ให้ถึงอุณหภูมิเซ็ทพอยท์ให้เร็วที่สุด และเกิดการโอเวอร์ชูตของอุณหภูมิน้อยที่สุด

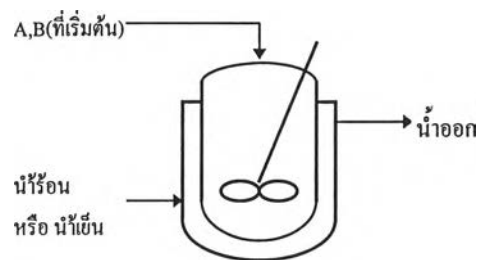
ซึ่ง Shinsky และ Weinstein ได้ใช้แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ที่ได้ถูกพัฒนาจากแถบวาร์เรน สปริงส์ (Pulley) และใช้เครื่องปฏิกรณ์ที่มีแจ็กเก็ตเดี่ยวในการให้ความร้อนและถูกล้างซึ่งค่าพารามิเตอร์ทางกายภาพ เช่น ปริมาตร, สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน, พื้นที่ผิวขึ้นกับรูปร่างและโครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์ซึ่งได้อธิบายโดย Luyben และอุณหภูมิของแจ็กเก็ตถูกควบคุมด้วยตัวแปรเข้า คืออุณหภูมิเข้าแจ็กเก็ต ซึ่งต้องใช้เครื่องแลกเปลี่ยนความร้อนในการควบคุมอุณหภูมินี้ เครื่องแลกเปลี่ยนความร้อนนี้ไม่มีแบบจำลองจึงประมาณจากค่าคงที่ใหม่ของการตอบสนองของแจ็กเก็ต ซึ่งพอจะสรุปเป็นปัญหาและแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ได้ดังนี้ คือ

กระบวนการที่พวกเขาใช้ชิมูเลชันเป็นการควบคุมอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบเบตซ์ (Batch Reactor) โดยปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์เคมีเป็นปฏิกิริยาคายความร้อน มี 2 ปฏิกิริยา ดังนี้



โดยที่ C คือผลิตภัณฑ์ที่ต้องการ และ D คือผลิตภัณฑ์ข้างเคียง

วัตถุประสงค์ของการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบแบทช์นี้ คือต้องการเพิ่มอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เคมีจากอุณหภูมิเริ่มต้นที่ 20 องศาเซลเซียสไปเป็นอุณหภูมิ 95 องศาเซลเซียส (อุณหภูมิที่เหมาะสม) หลังจากนั้นทำการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์นี้ให้อยู่ที่อุณหภูมิเซตพอยท์นี้จนกว่าสารตั้งต้นจะเปลี่ยนแปลงไปเป็นผลิตภัณฑ์ทั้งหมด ระบบของเครื่องปฏิกรณ์เคมีเขียนแสดงดังรูปข้างล่างนี้



รูปที่ 2.3 โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

แบบจำลองของกระบวนการจากการทำสมการสมดุลมวลและพลังงานของระบบสามารถเขียนได้ดังต่อไปนี้

$$\frac{dM_A}{dt} = -R_1 - R_2 \quad \dots\dots\dots 2.34a$$

$$\frac{dM_B}{dt} = -R_1 \quad \dots\dots\dots 2.34b$$

$$\frac{dM_C}{dt} = +R_1 - R_2 \quad \dots\dots\dots 2.34c$$

$$\frac{dM_D}{dt} = +R_2 \quad \dots\dots\dots 2.34d$$

$$R_1 = k_1 M_A M_B \quad \dots\dots\dots 2.34e$$

$$R_2 = k_2 M_A M_C \quad \dots\dots\dots 2.34f$$

$$k_1 = \exp(k_1^1 - k_1^2 / (T_r + 273.15)) \quad \dots\dots\dots 2.34g$$

$$k_2 = \exp(k_2^1 - k_2^2 / (T_r + 273.15)) \quad \dots\dots\dots 2.34h$$

$$W = MW_A M_A + MW_B M_B + MW_C M_C + MW_D M_D \quad \dots\dots\dots 2.34i$$

$$M_r = M_A + M_B + M_C + M_D \quad \dots\dots\dots 2.34j$$

$$Cp_r = (Cp_A M_A + Cp_B M_B + Cp_C M_C + Cp_D M_D) / M_r \quad \dots\dots\dots 2.34k$$

$$V = W / \rho \quad \dots\dots\dots 2.34l$$

$$A = 2V / \rho \quad \dots\dots\dots 2.34m$$

$$Q_J = UA(T_J - T_r) \quad \dots\dots\dots 2.34n$$

$$Q_r = \Delta H_1 R_1 - \Delta H_2 R_2 \quad \dots\dots\dots 2.34o$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{Q_r + Q_J}{M_r Cp_r} \quad \dots\dots\dots 2.34p$$

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_J \rho_J Cp_J (T_J^{SP} - T_J) - Q_J}{V_J \rho_J Cp_J} \quad \dots\dots\dots 2.34q$$

การควบคุมแบบคูลดโมดสามารถทำได้ง่ายโดยใช้ตัวเปิดให้ความร้อนกับระบบ และตามด้วยลูปปิดของการควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดี (PID) เพื่อควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ให้คงที่อยู่ที่อุณหภูมิเซ็ทพอยท์ โดยการควบคุมแบบคูลดโมดมีขั้นตอนตามลำดับดังนี้

- 1.) ให้ความร้อนเต็มที่ ด้วยการปรับอุณหภูมิแจ็กเก็ตเซ็ทพอยท์ให้มีค่าสูงสุดจนกระทั่งอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์อยู่ในอุณหภูมิที่เข้าใกล้เซ็ทพอยท์ประมาณ E_m องศา
- 2.) เปิดคลุ่ลิ่งเต็มที่ โดยปรับอุณหภูมิแจ็กเก็ตเซ็ทพอยท์ของน้ำในแจ็กเก็ตที่ต่ำสุดเป็นเวลา TD1 นาที
- 3.) เซ็ทอุณหภูมิของแจ็กเก็ตเซ็ทพอยท์ไว้ที่ PL องศาเป็นเวลา TD2 นาที
- 4.) ควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ไว้ที่อุณหภูมิเซ็ทพอยท์ต่อด้วยการควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดี ได้ดังนี้ที่อยู่ในรูปแบบเวโลซิตี (Velocity Form)

$$T_{JSP}^{(k+1)} = T_J^{(k+1)} + K_C(T_r^{(k)} - T_r^{(k+1)}) - K_i(T_{rsp} - T_r^{(k+1)})\Delta t + \frac{K_d}{\Delta t}(2T_r^{(k)} - T_r^{(k+1)} - T_r^{(k-1)}) \dots\dots 2.35$$

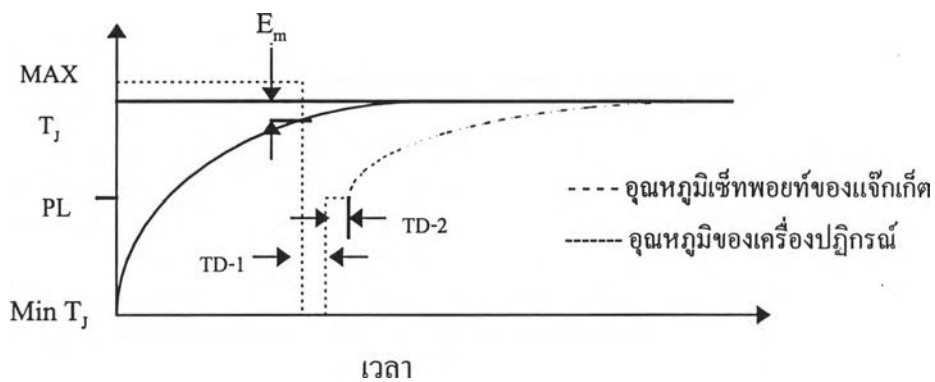
เมื่อ

$$K_i = \frac{K_C}{\tau_i}$$

$$K_d = \frac{K_C}{\tau_d}$$

ตารางที่ 2.2 ค่าพารามิเตอร์ต่างๆและค่าเริ่มต้นของเครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบเบบแบตช์

ตัวแปร	ค่า	หน่วย	ตัวแปร	ค่า	หน่วย
MW_A	30	kg/kmol	k_2^2	17,000	-
MW_B	100	kg/kmol	ΔH_1	-41,840	kJ/kmol
MW_C	130	kg/kmol	ΔH_2	-25,105	kJ/kmol
MW_D	160	kg/kmol	ρ	1,000	kg/m ³
C_{pA}	75.31	kg/(kmol °C)	U	0.6807	kW/(m ² °C)
C_{pB}	167.31	kg/kmol	r	0.5	m
C_{pC}	217.57	kg/kmol	ρ_j	1,000	kg/m ³
C_{pD}	334.73	kg/kmol	V_j	0.6912	m ²
k_1^1	20.9057	-	F_j	0.0058	kg/s
k_1^2	10,000	-	C_{pj}	1.8828	kJ/(kmol °C)
k_2^1	38.9057	-	M_D^0	0	kmol
M_A^0	12	kmol	T_r^0	20	°C
M_B	12	kmol	T_j	20	°C
M_C^0	0	kmol			



รูปที่ 2.4 ความสัมพันธ์ของค่าคงที่ต่างๆของตัวควบคุมคูลดโมด

ตารางที่ 2.3 ค่าคงที่ที่ถูกใช้ในตัวควบคุมดูลโมด

สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
E_m	4.0	$^{\circ}\text{C}$	K_c	26.25	$^{\circ}\text{C}$ แจกเกิด/ $^{\circ}\text{C}$ เครื่อง ปฏิกรณ์
TD-1	2.5	นาที	τ	2.75	นาที
PL	50.0	$^{\circ}\text{C}$	τ	0.406	นาที
TD-2	2.0	นาที	Δt	0.2	นาที

จะเห็นว่าการควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดีจะวัดอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ T_r แล้วนำไปเปรียบเทียบกับเซ็ทพอยท์ T_{rsp} เพื่อคำนวณอุณหภูมิแจกเกิดเซ็ทพอยท์โดยมีพารามิเตอร์ 3 ตัวที่ต้องทำการจูน คือ K_c, τ_i, τ_D และยังมีอีก 4 ค่าคงที่ในตัวควบคุมลูฟเปิดคือ $E_m, PL, TD-1, TD-2$ ซึ่งการจูนตัวควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดีสามารถทำได้โดยการปฏิบัติการที่ลูฟเปิดและให้ตัวควบคุมอุณหภูมิของแจกเกิดมีการเปลี่ยนแปลงเป็นฟังก์ชันขั้น (Step Function) โดยให้มีการเปลี่ยนแปลงเซ็ทพอยท์ของมันจาก 20°C ไปเป็น 30°C เมื่อมีการบรรจุสารในเครื่องปฏิกรณ์ตามปกติ และกฎการจูนของโคเฮนและคูล (Cohen and Cool Tuning Rule) ถูกประยุกต์มาใช้หาค่าพารามิเตอร์ K_c, τ_i, τ_D ส่วนค่าคงที่ของตัวควบคุมแบบลูฟเปิดสามารถหาได้จากการทำซิมูเลชัน โดยค่าพารามิเตอร์และค่าคงที่ต่าง ๆ มีค่าดังในตารางที่ 2.5

ผลการจำลองที่ได้ของพวกเขาปรากฏว่าที่สภาวะการดำเนินการปกติตัวควบคุมดูลโมดมีสมรรถนะที่ดี อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์อยู่ที่อุณหภูมิเซ็ทพอยท์ตามที่ต้องการไม่มีการโอเวอร์ชูดและอันเดอร์ชูด (Overshoot and Undershoot) และการทรานซิชันระหว่างโมดลูฟเปิดที่ให้ความร้อนและตัวควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดีถูกทำให้เป็นผลสำเร็จไม่มีรอยฉีกขาดออกจากกันสำหรับในกรณีของการดำเนินการปกตินี้ แต่ในกรณีที่มีความผิดพลาดของพารามิเตอร์ปรากฏว่าผลการตอบสนองของตัวควบคุมดูลโมดจะเกิดการโอเวอร์ชูด นอกจากนี้การทรานซิชันระหว่างโมด ลูฟเปิดและโมดตัวควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดีมีการฉีกขาด ทำให้การควบคุมแบบนี้ไม่เหมาะกับระบบที่มีความไม่เป็นเชิงเส้นสูงๆอย่างเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์ ซึ่งการควบคุมแบบใช้โมเดลถูกพิจารณาต่อมา

จากวารสารของ Masoud Soroush and Costas Kravaris, 1992 ได้ทำงานเกี่ยวกับเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์แบบเบทซ์ซึ่งการดำเนินการของกระบวนการเป็นจลนพลศาสตร์โดยแท้ไม่มีสภาวะคงตัว (Steady State) และคุณสมบัติของสารภายในเครื่องปฏิกรณ์เช่นความหนืด, ความหนา

แน่น, สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน, ฯลฯ มีการเปลี่ยนแปลงตลอดเวลา ทำให้ค่าคงที่เกนและค่าคงที่เวลา (gain and Time Constant) ของกระบวนการแปรผันกับเวลา ซึ่งคุณสมบัติเหล่านี้มีขอบเขตกว้างมากระหว่างวัฏจักรของแบทช์ (Batch Cycle) และมากกว่ากระบวนการแบบต่อเนื่องหลายๆ กระบวนการซึ่งมีขอบเขตเล็กๆเมื่อถูกเปรียบเทียบกันในข้อนี้ เพราะลักษณะเด่นข้อนี้ของกระบวนการแบบแบทช์ดังนั้นการที่จะทำให้การควบคุมกระบวนการแบบแบทช์ประสบผลสำเร็จจึงต้องการตัวควบคุมที่สามารถกำหนดการตอบสนองที่ดีเหนือขอบเขตการดำเนินการของตัวแปรของกระบวนการ ถ้านำการควบคุมที่เป็นเชิงเส้นมาใช้ในการควบคุมกับกระบวนการแบบแบทช์การจูนใหม่ (Retuning) จะถูกพิจารณานำมาใช้เพื่อขยายความเร็วของการตอบสนองของลูปปิดเหนือความกว้างของการดำเนินการภายนอก ซึ่ง Juba and Hamer ; Ray ได้พิจารณาความบ่้อยของการจูนใหม่ของตัวควบคุมแบบเชิงเส้น (แบบพีไอดีทั่วไป) ว่าเป็นการควบคุมที่ตั้งซึ่งกระบวนการแบบแบทช์อาจจะสามารถดำเนินการได้

ด้วยความสำคัญ of กระบวนการแบบแบทช์ข้างบนนี้ทำให้จำเป็นต้องใช้การควบคุมแบบไม่เป็นเชิงเส้นในการควบคุม

2.1-2.2 การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์แบบแบทช์ด้วยตัวควบคุมที่ไม่เป็นเชิงเส้น

Masoud Soroush and Costas Kravaris, 1992 ได้ศึกษาการทดลองประยุกต์วิธีจีแอลซี (Globally Linearizing Control (GLC)) มาควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์การเกิดพอลิเมอร์แบบแบทช์ ซึ่งเป็นปฏิกิริยาการเกิดพอลิเมอร์ของเมทิลเมทาคริลเลท (MMA) ที่มีเอโซ-บิส-ไอโซบิวทิลโรโนไตรัล (AIBN) และโทลูอิน (Toluene) เป็นตัวเริ่มและตัวทำละลาย อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ถูกควบคุมโดยการปรับตัวแปรอินพุตสองตัวที่มีความสำคัญเท่าเทียมกันคือ กำลังไฟฟ้าที่ให้ความร้อน (Electric Heat) และอัตราการไหลของน้ำเย็น โดยมี "รีดิคส์-ออคเตอร์ ออบเซอเวอ์" เป็นตัวประเมินค่าความเข้มข้นของตัวเริ่มและความเข้มข้นของโมโนเมอร์

2.2-2.2.A แบบจำลองของกระบวนการ

ซึ่งสมการทางคณิตศาสตร์ที่ใช้อธิบายกระบวนการ (Match Model) นี้ถูกสังเคราะห์จากสมการอนุรักษ์มวลและอนุรักษ์พลังงานตามสมมุติฐานดังนี้

1. ประมาณให้อยู่ที่สภาวะคงตัวควอซี (Quasi-Steady-State Approximation) และสมมติความยาวสายโซ่ (Long-Chain Hypothesis)
2. ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นทั้งหมดเป็นปฏิกิริยาไม่ผันกลับแบบอีเลเมนทารี (Elementary Irreversible Reaction)

3. อัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นกับความยาวสายโซ่ของไลว์พอลิเมอร์ (Live Polymer Chain Length)

4. อัตราการถ่ายเทสายโซ่ถึงตัวทำละลายละเหว่นได้ไม่นำมาคิดเมื่อเทียบกับปฏิกิริยาอื่น ซึ่งจะได้สมการทางคณิตศาสตร์เพื่อใช้อธิบายกระบวนการได้ดังนี้

$$\frac{dC_m}{dt} = \left(1 + \varepsilon \frac{C_m}{C_{mo}}\right) R_m \quad \dots\dots\dots 2.36a$$

$$\frac{dC_i}{dt} = R_i + \varepsilon \frac{C_i}{C_{mo}} R_m \quad \dots\dots\dots 2.36b$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\alpha_o k_p \xi_o C_m}{1 + \varepsilon \frac{C_m}{C_{mo}}} + \alpha_1(\chi_m)(T_J - T) \quad \dots\dots\dots 2.36c$$

$$\frac{dT_J}{dt} = \alpha_2(\chi_m)(T - T_J) + \alpha_3(T_{\infty} - T_J) + \alpha_4 u \quad \dots\dots\dots 2.36d$$

โดยที่ $\alpha_1(\chi_m) = \alpha_{1o}(1 - \varepsilon\chi_m)[a + (1 - a)\exp(-b\chi_m^t)] \quad \dots\dots\dots 2.36e$

$$\alpha_2(\chi_m) = \alpha_{2o}(1 + \varepsilon\chi_m)[a + (1 - a)\exp(-b\chi_m^t)] \quad \dots\dots\dots 2.36f$$

เมื่อ α_{1o} และ α_{2o} เป็นค่าของ α_1 และ α_2 ที่ $\chi_m = 0$

$$\alpha_3 = \frac{U_{\infty} A_{\infty}}{c_w m_o}, \alpha_4 = \frac{1}{c_w m_o}, \alpha_o = \frac{(-\Delta H)V_o(1 + \varepsilon)}{mc} \quad \dots\dots\dots 2.36g$$

$$R_m = -C_m \xi_o (k_p + k_m) \quad \dots\dots\dots 2.36h$$

$$R_i = -k_i C_i \quad \dots\dots\dots 2.36i$$

$$\xi_o = \left(\frac{2fk_i C_i}{k_t} \right)^{0.5} \quad \dots\dots\dots 2.36j$$

$$k_t = \frac{k_{to}}{1 + \frac{\xi_o k_{to}}{Dk_{\alpha t}}} ; k_p = \frac{k_{po}}{1 + \frac{\xi_o k_{po}}{Dk_{\alpha p}}} \quad \dots\dots\dots 2.36k$$

$$D = \exp\left(\frac{2.3(1 - \phi_p)}{A(T) + B(1 - \phi_p)} \right) \quad \dots\dots\dots 2.36l$$

$$\phi_p = \frac{\frac{\mu_1}{\rho_p}}{\frac{\mu_1}{\rho_p} + \frac{C_m M_m}{\rho_m} + \frac{C_s M_s}{\rho_s}}, \quad \chi_m = \frac{1 - \frac{C_m}{C_{mo}}}{1 - \varepsilon \frac{C_m}{C_{mo}}} \quad \dots\dots\dots 2.36m$$

$$V = V_o(1 + \varepsilon \chi_m), \quad \varepsilon = \phi_{mo} \left(\frac{\rho_m}{\rho_p} - 1 \right) \quad \text{เมื่อ} \quad \phi_{mo} = \frac{C_{mo} M_m}{\rho_m} \quad \dots\dots\dots 2.36n$$

$$k_{to} = Z_{to} \exp\left(\frac{-E_{to}}{RT} \right), \quad k_{\alpha} = C_i(0) Z_{\alpha} \exp\left(\frac{-E_{\alpha}}{RT} \right) \quad \dots\dots\dots 2.36o$$

$$A = 0.168 - 8.21 \times 10^{-6} (T - T_{gp})^2 \quad \dots\dots\dots 2.36p$$

$$k_{po} = Z_{po} \exp\left(\frac{-E_{po}}{RT} \right), \quad k_{\alpha p} = Z_{\alpha p} \exp\left(\frac{-E_{\alpha p}}{RT} \right) \quad \dots\dots\dots 2.36q$$

$$k_{fm} = Z_{fm} \exp\left(\frac{-E_{fm}}{RT} \right), \quad k_i = Z_i \exp\left(\frac{-E_i}{RT} \right) \quad \dots\dots\dots 2.36r$$

เพราะว่าใช้ LCH ดังนั้นความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทั้งหมดสามารถกำหนดได้ดังนี้

$$R_H = (-\Delta H_p) k_p \xi_o C_m \dots\dots\dots 2.36s$$

$$u = P - F_{cw} c_w \rho_w (T_J - T_{cw}) \dots\dots\dots 2.36t$$

โดยที่

$$P = \begin{cases} u, & \text{if } 0 \leq u < P_{\max} \\ P_{\max}, & \text{if } u \geq P_{\max} \\ 0, & \text{if } u < 0 \end{cases} \dots\dots\dots 2.36u$$

และ

$$F_{cw} = \begin{cases} \frac{-u}{c_w \rho_w (T_J - T_{cw})}, & \text{if } -F_{cw_{\max}} c_w \rho_w (T_J - T_{cw}) \leq u \leq 0 \\ F_{cw_{\max}}, & \text{if } u < -F_{cw_{\max}} c_w \rho_w (T_J - T_{cw}) \\ 0, & \text{if } u \geq 0 \end{cases} \dots\dots\dots 2.36v$$

2.1-2.2B. สถานะการดำเนินการและโปรไฟล์อุณหภูมิที่เหมาะสม

การใช้การควบคุมที่เหมาะสมเพื่อควบคุมขนาดสภาวะและโปรไฟล์อุณหภูมิที่เหมาะสมแล้ว ควรจะได้ผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ที่มีคุณสมบัติดังนี้

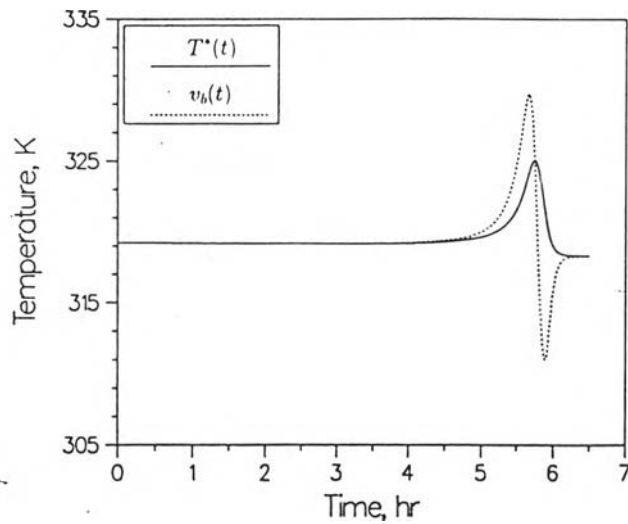
1. ค่าการกระจายน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์ (Molecular Weight Distribution(MWD)) มีค่าที่แคบเท่าที่เป็นไปได้

2. น้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยของมันมีค่าประมาณ 4×10^5

และโมโนเมอร์คอนเวอร์ชันต้องมากกว่า 0.975, แบทช์ไทม์ 6 ชม. และสัดส่วนตัวทำละลายเริ่มต้น 0.30

ตารางที่ 2.4 ค่าพารามิเตอร์ต่างๆของแบบจำลอง

$T_{cw} = 2.797 \times 10^2 \text{ } ^\circ K$	$T_\infty = 2.932 \times 10^2 \text{ } ^\circ K$
$c_w = 4.2 \times 10^0 \text{ } kJ.kg^{-1}.^\circ K^{-1}$	$\rho_w = 1.0 \times 10^3 \text{ } kg.m^{-3}$
$P_{max} = 3.13 \times 10^0 \text{ } kJ.s^{-1}$	$F_{cwmax} = 2.55 \times 10^{-4} \text{ } m^3.s^{-1}$
$B = 0.03$	$E_{to} = 2.9442 \times 10^3 \text{ } kJ.kmol^{-1}$
$Z_{to} = 9.800 \times 10^7 \text{ } m^3.kmol^{-1}.s^{-1}$	$E_{po} = 1.8283 \times 10^4 \text{ } kJ.kmol^{-1}$
$Z_{po} = 4.9167 \times 10^5 \text{ } m^3.kmol^{-1}.s^{-1}$	$E_\alpha = 1.4584 \times 10^5 \text{ } kJ.kmol^{-1}$
$Z_\alpha = 1.454 \times 10^{20} \text{ } s^{-1}$	$E_\phi = 1.1700 \times 10^5 \text{ } kJ.mol^{-1}$
$Z_\phi = 3.0233 \times 10^{13} \text{ } s^{-1}$	$-\Delta H = 5.78 \times 10^4 \text{ } kJ.kmol^{-1}$
$T_{gp} = 3.872 \times 10^2 \text{ } ^\circ K$	$E_{fm} = 7.4479 \times 10^4 \text{ } kJ.kmol^{-1}$
$R = 8.345 \times 10^0 \text{ } kJ.kmol^{-1}.^\circ K^{-1}$	$E_i = 1.2877 \times 10^5 \text{ } kJ.kmol^{-1}$
$Z_{fm} = 4.6610 \times 10^9 \text{ } m^3.kmol^{-1}.s^{-1}$	$\rho_i = 9.15 \times 10^2 \text{ } kg.m^{-3}$
$Z_i = 1.0533 \times 10^{15} \text{ } s^{-1}$	$f = 5.8 \times 10^{-1}$
$M_i = 1.6421 \times 10^2 \text{ } kg.kmol^{-1}$	$\rho_m = 9.151 \times 10^2 \text{ } kg.m^{-3}$
$c = 2.20 \times 10^0 \text{ } kJ.kg^{-1}.K^{-1}$	$\rho_p = 1.200 \times 10^3 \text{ } kg.m^{-3}$
$m = 1.257 \times 10^{0kg}$	$M = 9.214 \times 10^1 \text{ } kg.kmol^{-1}$
$\rho_s = 8.420 \times 10^2 \text{ } kg.m^{-3}$	$b = 7.0 \times 10^0$
$M_m = 1.0012 \times 10^2 \text{ } kg.kmol^{-1}$	$a = 2.0 \times 10^{-1}$
$\ell = 3.0 \times 10^0$	$U_\infty A_\infty = 0.00557 \text{ } kJ.s^{-1}.^\circ K^{-1}$
$C_i^*(0) = 0.13 \text{ } kmol.m^{-3}$	$\alpha_{10} = 0.0038 \text{ } s^{-1}$
$C_m^*(0) = 6.01 \text{ } kmol.m^{-3}$	$\alpha_{20} = \alpha_{10} \alpha_4$
$\alpha_3 = 0.00037 \text{ } s^{-1}$	$\alpha_4 = 0.0664 \text{ } ^\circ K.kJ^{-1}$



รูปที่ 2.5 โพรไฟล์อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่เหมาะสม

ถ้าใช้สภาวะและพารามิเตอร์ตามตารางที่ 2.4 และโพรไฟล์อุณหภูมิที่เหมาะสมตามรูปที่ 2.5 และค่าแบทช์ไทม์ (t_f) เท่ากับ 6.0 ชม. จะได้ผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ที่มีน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ย ($M_w(t_f)$) = 3.95×10^5 , โมโนเมอร์คอนเวอร์ชัน ($x(t_f)$) = 0.99, ดัชนีพอลิดีสเพอซิตี ($PDI(t_f)$) = 2.45 และรูปร่างของอุณหภูมิที่เหมาะสมที่มีขึ้นและลงเป็นระฆังนี้เป็นปัญหาที่ท้าทายเนื่องจาก

1. เมื่อไม่เกิดปฏิกิริยาทำให้ไม่มีความร้อนเกิดขึ้นโดยปฏิกิริยาและสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนไม่ลดลง โพรไฟล์อุณหภูมิแบบนี้ทำได้ยาก
2. อุณหภูมิที่เพิ่มขึ้นทางด้านซ้ายทำให้อัตราการเกิดพอลิเมอร์มากขึ้นทำให้อุณหภูมิยิ่งเพิ่มมากขึ้นและเกิดผลการเจลมากขึ้น และขณะที่ยอดพิกนี้อุณหภูมิควรจะลดลงแต่ความร้อนที่คายออกจากปฏิกิริยามีค่ามากที่สุด
3. ช่วงที่อุณหภูมิเพิ่มทางด้านซ้ายของระฆังทำให้อัตราการเกิดพอลิเมอร์เพิ่มขึ้น, ความหนืดเพิ่มขึ้น, สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง, การผสมน้อยลง

เนื่องจากความแรงของอุณหภูมिन้อยลงที่เวลาที่ยอดพิก ดังนั้นควควบคุมที่นำมาใช้ควรจะมีแอกชันที่เห็นด้วยและเวลาที่เหมือนกันอย่างถี่ถ้วน

2.1-2.2C. สมการของตัวควบคุมที่ไม่เป็นเชิงเส้น

ขั้นตอนการควบคุมดังรูปที่ 2.9 จะเห็นว่าตัวแปรสถานะไม่ทุกตัวที่สามารถวัดได้ดังนั้นจึงต้องมีตัวออกแบบรับประมาณค่าของตัวแปรที่ไม่ได้ถูกวัดให้กับตัวควบคุม สมการของตัวควบคุมที่ไม่เป็นเชิงเส้นที่ใช้ควบคุมกระบวนการนี้ถูกสังเคราะห์ขึ้นจากวิธีจีแอลซี (ดูรายละเอียดที่ Kravaris and Chang, 1987) ตามขั้นตอนดังนี้

1. จากสมการแบบจำลอง ในสมการที่ 2.36 ทั้งหมดสามารถเขียนให้อยู่ในรูปสแตตสเปสได้ดังนี้

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_m \\ C_i \\ T \\ T_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(C_m, C_i, T) \\ f_2(C_m, C_i, T) \\ f_3(C_m, C_i, T, T_j) \\ f_4(C_m, T, T_j) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \alpha_4 \end{bmatrix} u$$

$y = T$ 2.37

ที่ $x = [C_m \ C_i \ T \ T_j]^T \in \mathcal{R}^4$ เป็นเวกเตอร์ตัวแปรสแตต

2. กำหนดความสัมพันธ์ของอันดับ $r = 2$ ($L_g h = 0$ และ $L_g L_f h = \alpha_1 \alpha_4 \neq 0$)

3. กำหนดอินพุท/เอาต์พุทลีนีเยโรซิงสแตตฟีดแบค (Input/Output Linearizing State Feedback)

$$u = \Psi(v, x) = \frac{v - \beta_2 \sum_{i=1}^4 \frac{\partial f_3(x)}{\partial \alpha_i} f_i(x) - \beta_1 f_3(x) - T}{\beta_2 \alpha_1(x) \alpha_4}$$

.....2.38

ภายในสแตตฟีดแบคนี้ถูกปิด $v - y$ สามารถให้ได้โดย

$$\beta_2 \frac{d^2 y}{dt^2} + \beta_1 \frac{dy}{dt} + y = v$$

.....2.39

เมื่อ β_1 และ β_2 เป็นพารามิเตอร์ที่ต้องจูน

4. ตัวควบคุมเชิงเส้นภายนอก (External Linear Controller) ใช้ตัวควบคุมพีไอ

$$v(t) = v_b(t) + K_C \left\{ [T^*(t) - T(t)] + \frac{1}{\tau_I} \int_0^t [T^*(t) - T(t)] \right\} \quad \dots\dots\dots 2.40$$

ที่ K_C, τ_I เป็นพารามิเตอร์ที่ต้องจูนและ $v_b(t)$ ค่าไบแอสของตัวควบคุมโดย

$$v_b(t) = T^*(t) + \beta_1 \frac{dT^*(t)}{dt} + \beta_2 \frac{d^2T^*(t)}{dt^2} \quad \dots\dots\dots 2.41$$

ในบางการทดลองเราสามารถให้ $v_b(t) = T^*(t)$.

เมื่อทำการจำลองระบบในเครื่องคอมพิวเตอร์สามารถเขียนสมการของตัวควบคุมให้อยู่รูปดิคริตดังนี้

$$u(t_k) = \Psi \left\{ v(t_k), [\bar{C}_m(t_k), \bar{C}_i(t_k), T(t_k), T_I(t_k)]^T \right\} \quad \dots\dots\dots 2.43$$

โดยที่ Ψ เป็นฟังก์ชันที่ได้ให้จำกัดคามไว้ในสมการที่ 2.38 และ $v(t_k)$ ถูกคำนวณจาก

$$v(t_k) = v_b(t_k) + v''(t_k) \quad \dots\dots\dots 2.44$$

$$v''(t_k) = v''(t_{k-1}) + K_C \left\{ \left(\frac{\Delta t}{\tau_I} + 1 \right) [T^*(t_k) - T(t_k)] - [T^*(t_{k-1}) - T(t_{k-1})] \right\} \quad \dots\dots\dots 2.45$$

2.1-2.2D. รีคิวส์อเดอส์เตทออบเซิร์ฟเวอร์

ในสเตตพีคแบค (Eqⁿ 2.38) u เป็นฟังก์ชันของสี่ตัวแปรสเตทคือ C_m, C_i, T, T_I ซึ่งค่าตัวแปรสเตท C_m, C_i ไม่สามารถวัดได้โดยตรงดังนั้น "รีคิวส์อเดอส์เตทออบเซิร์ฟเวอร์" ถูกใช้ในการประเมินค่าความเข้มข้นของโมโนเมอร์และตัวเริ่ม ซึ่งแบบจำลองในสมการที่ 2.36a และ 2.36b ถูกอินทิเกรตได้โดยตรงเพื่อหาค่าตัวแปรสเตทสองตัวนี้โดยการวัดอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์มาเป็นอินพุทจะได้แบบจำลองของรีคิวส์อเดอส์เตทออบเซิร์ฟเวอร์ดังนี้

$$\begin{cases} \frac{d\bar{C}_m}{dt} = f_1(\bar{C}_m, \bar{C}_i, T), \bar{C}_m(0) = C_m(0) \\ \frac{d\bar{C}_i}{dt} = f_2(\bar{C}_m, \bar{C}_i, T), \bar{C}_i(0) = C_i(0) \end{cases} \dots\dots\dots 2.42$$

ที่ \bar{C}_m, \bar{C}_i เป็นค่าความเข้มข้นที่ถูกประมาณค่าได้

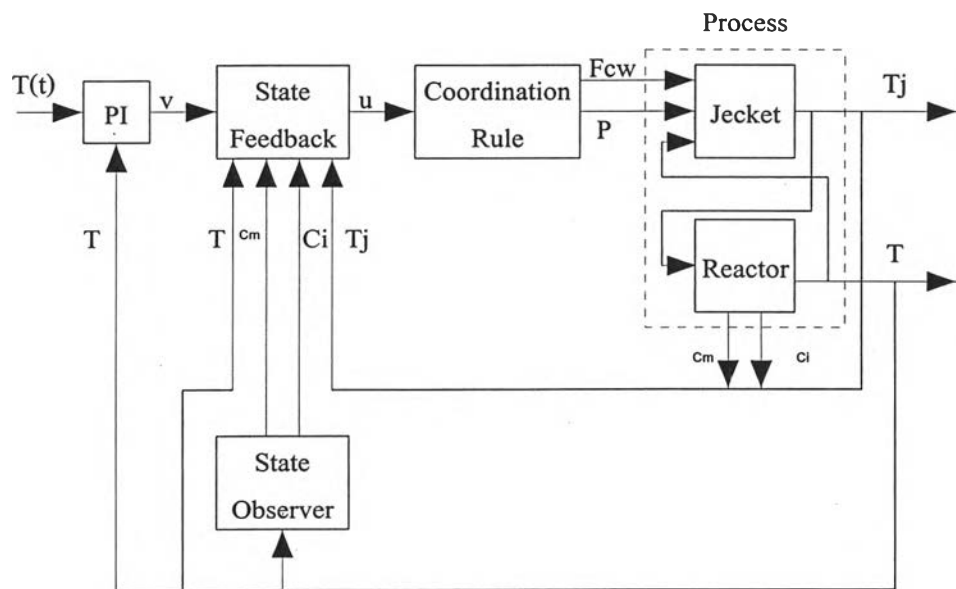
2.2-2.2E ค่าพารามิเตอร์ที่ถูกคูณ

ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการคูณในตารางที่ 2.5 เป็นค่าที่ได้จากผลการตอบสนองที่ได้จากการให้การเปลี่ยนแปลงฟังก์ชันขั้น (Step Function) ในเครื่องปฏิกรณ์ที่มีเพียงตัวทำละลายเพียงอย่างเดียว จากรูปที่ 2.5 เป็นบล็อกไดอะแกรมของกระบวนการและตัวควบคุม ซึ่งการทำงานของตัวควบคุมมีขั้นตอนดังนี้

1. วัดอุณหภูมิของแจ็กเก็ต ๓. เวลาที่สุ่มตัวอย่างมาได้ $T_j(t_k)$
2. อ่านค่าอุณหภูมิที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์ $T^*(t_k)$ และคำนวณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่ง และสอง และคำนวณหาค่าไบแอสของตัวควบคุม $v_b(t_k)$
3. หาค่า $v(t_k)$ จากตัวควบคุมพีไอในสมการที่ 2.44
4. หาค่าตัวแปรสแตตจากสเตทออบเซิร์ฟเวอร์โดยแก้สมการที่ 2.42 ด้วยวิธีรุงกัตตาอันดับสี่ (4th-Order Rung-Kutta Method) ที่มีค่า $T(t_k)$ ที่สามารถวัดได้เป็นอินพุตและมีค่าเริ่มต้นเป็นความเข้มข้นเริ่มต้นของโมโนเมอร์และตัวเริ่ม
5. คำนวณค่า $u(t_k)$ จากสเตทพีคแบค
6. คำนวณค่า $P(t_k)$ และ $F_{cw}(t_k)$
7. ส่งสัญญาณ $P(t_k)$ และ $F_{cw}(t_k)$ ให้ฮีทเตอร์และวาล์วควบคุม
8. กลับไปที่ 1. ใหม่

ตารางที่ 2.5 ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการจูน

สัญลักษณ์ของพารามิเตอร์	ค่าของพารามิเตอร์
β_1	1100s
β_2	$1.0 \times 10^5 s^2$
τ_I	1000s
K_C	10



รูปที่ 2.5 บล็อกไดอะแกรมของการควบคุมแบบจีแอลซี

จากผลการทดลองของ Masoud Soroush and Costas Kravaris, 1992 ซึ่งเป็นผลการตอบสนองของกระบวนการแบบเบทซ์ที่มีต่อตัวควบคุมจีแอลซีที่กรณีการดำเนินการปกติ จะเห็นว่าตัวควบคุมที่ไม่เป็นเชิงเส้นที่ถูกประยุกต์มาจากวิธีจีแอลซีสามารถใช้ควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์แบบเบทซ์ที่มีแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่เป็นเชิงเส้นสูงและปฏิกิริยาที่เกิดเป็นปฏิกิริยาที่มีความซับซ้อนมากๆ ได้ดี โดยที่ง่ายต่อการหาสูตรและการจูนอีกด้วย

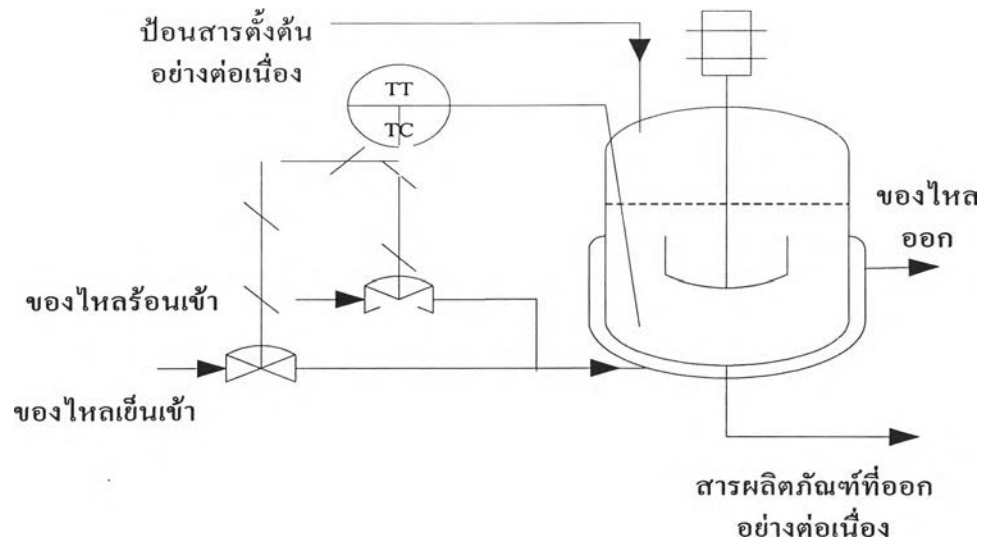
2.2 เครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง(Continuous Stirred Tank Reactor(CSTR) and Plug Flow Reactor(PFR))

เครื่องปฏิกรณ์ชนิดนี้นิยมใช้เพราะการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์สามารถทำได้ง่าย เนื่องจากกระบวนการแบบต่อเนื่องมีสภาวะคงตัว เนื่องจากมีการไหลเข้าของสารตั้งต้นและการไหลออกของสารผลิตภัณฑ์ และความร้อนที่ปล่อยออกมามีค่าน้อยกว่า แต่เปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันของสารตั้งต้นต่อหน่วยปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์มีค่าน้อย ในการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์แบบนี้ถ้าต้องการเปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันสูงๆจำเป็นต้องออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ที่มีขนาดใหญ่หรือใช้เครื่องปฏิกรณ์หลายตัวต่ออนุกรมกัน โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์ดังกล่าวแบบต่อเนื่องดูได้จาก รูปที่ 2.6-ก

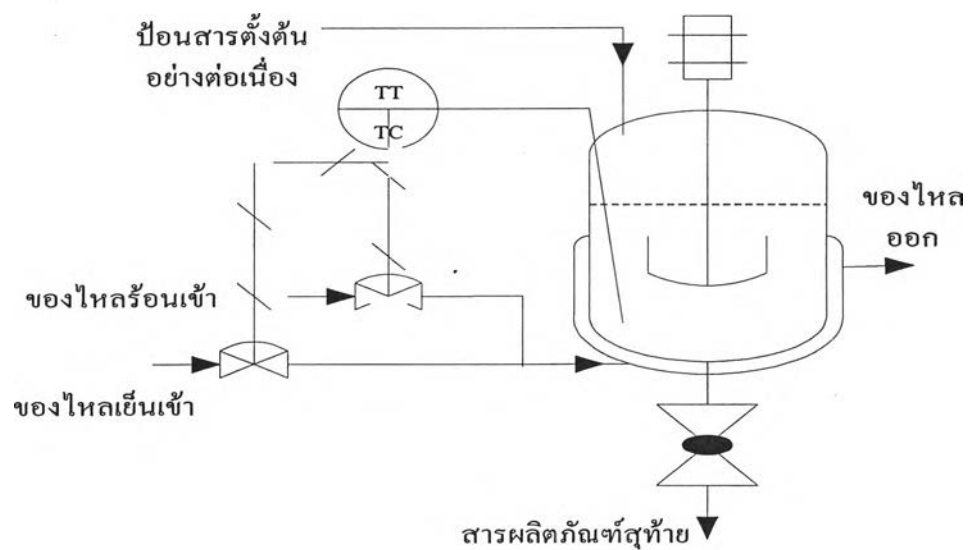
2.3 เครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบทช์ (Semi-Batch Reactor)

เนื่องจากเครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบทช์มีการควบคุมอัตราการป้อนสารตั้งต้นเข้าความร้อนที่ปล่อยออกมามีค่าน้อยกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบทช์ทำให้สามารถควบคุมอุณหภูมิได้ง่ายกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ และเนื่องจากในบางปฏิกิริยามีสารตั้งต้นเป็นสารที่ว่องไวในการทำปฏิกิริยาได้หลายทางทำให้เกิดผลิตภัณฑ์หลายตัวเมื่อทำการผลิตในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ซึ่งความเข้มข้นของสารตั้งต้นมีค่ามากจึงเป็นการเสี่ยงต่อการเกิดปฏิกิริยาข้างเคียงค่อนข้างมาก ทำให้เครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบทช์ได้รับการพิจารณา ถึงแม้ว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องจะถูกชอบมากในอุตสาหกรรมเคมีส่วนมากเนื่องจากมีศักยภาพสำหรับคุณภาพที่ดีในการควบคุมและความจุในการผลิตมากก็ตาม แต่ในวารสารของ F. Teymour, 1997 ยืนยันว่าการดำเนินการแบบเซมิแบทช์ถูกพิสูจน์ว่าเป็นที่ดึงดูดใจสำหรับปฏิกิริยาการเกิดพอลิเมอร์ และการดำเนินการแบบเซมิแบทช์ยังไม่ต้องอาศัยผู้เชี่ยวชาญในการดำเนินการและการซ่อมบำรุงมากนักเช่นเดียวกับการดำเนินการแบบต่อเนื่อง นอกจากนี้การดำเนินการแบบเซมิแบทช์ยังได้รับการยอมรับความสามารถในการควบคุมคุณภาพของผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ว่ายืดหยุ่นได้มากกว่าอีกด้วย ยกตัวอย่างเช่น การดำเนินการแบบเซมิแบทช์นี้สามารถเป็นประโยชน์ในตัวอย่างการควบคุมการเพิ่มของโคโมโนเมอร์ หรือ การควบคุมสารตัวถ่ายเทสายโซ่ (Chain Transfer Agents) ถูกต้องการ มันยังยอมให้สำหรับการใช้ชนิดของตัวเริ่ม (Initiator) ที่ขึ้นของกระบวนการเกิดพอลิเมอร์ต่างกันซึ่งชนิดของตัวเริ่มที่ถูกหามาได้ในปัจจุบันสามารถที่จะดึงดูดใจได้มากพอ และเพื่อเป็นการหลีกเลี่ยงการหยุดการดำเนินการเพื่อทำความสะอาดเครื่องปฏิกรณ์โดยไม่จำเป็นเมื่อเกิดการเปราะเปื้อน และผลของการที่มีเปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันต่ำในเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องอีกทางหนึ่งด้วย

โดยโครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบตช์ดูได้จากรูปที่ 2.6-ข.



รูปที่ 2.6-ก



รูปที่ 2.6-ข

รูปที่ 2.6 โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวนอย่างต่อเนื่องและโครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบตช์

รูปที่ 2.6-ก โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวนอย่างต่อเนื่อง

รูปที่ 2.6-ข โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์แบบเซมิแบตช์

2.3-1. แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเชมิแบตซ์

แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเชมิแบตซ์ได้แสดงการถูกตีโรวไว้ให้ใกล้เคียงกับแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ถังกวนแบบต่อเนื่อง (CSTR) โดย Teymour And Rey, 1992b ซึ่งโมด-กระบวนการแบบเชมิแบตซ์นี้ทุกๆองค์ประกอบของสารผสมในปฏิกิริยาถูกป้อนในเวลาเดียวกันลงสู่เครื่องปฏิกรณ์ที่ว่างเปล่าหรือบางส่วนของเครื่องปฏิกรณ์ ผลลัพธ์ของสมการแสดงถึงลักษณะโครงสร้างของสมการคล้ายกับแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องยกเว้นไม่มีเทอมการไหลออกปรากฏในแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเชมิแบตซ์ และสเทพขึ้นกับปริมาตรของเครื่องส่วนผสมของปฏิกิริยา