

บทที่ 4

การประมาณค่าความร้อนในถังปฏิกรณ์เคมี โดยใช้อัลกอริธึมของคาลมาน

การควบคุมโดยระบบควบคุมโมเดลพรีดิกทีฟ ระบบควบคุมจะหาค่าตัวแปรปรับที่เหมาะสมโดยอาศัยแบบจำลองกระบวนการ ซึ่งประกอบด้วยตัวแปรที่สามารถวัดและไม่สามารถวัดได้ ค่าตัวแปรที่วัดไม่ได้สามารถประมาณค่าได้จากตัวแปรวัด ดังเช่นในถังปฏิกรณ์เคมีที่มีปฏิกิริยาเคมีชนิดคายความร้อน การควบคุมอุณหภูมิภายในถังจำเป็นต้องทราบค่าความร้อนที่เกิดในถังปฏิกรณ์ จึงมีความจำเป็นต้องประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาเคมีจากอุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์เคมีและอุณหภูมิในถังแจ็คเก็ต การประมาณค่าความร้อนในถังปฏิกรณ์เคมีเคยปรากฏในงานวิจัยของ Jutan and Uppal (1984) ใช้วิธีการประมาณแบบนิวตันรอปสัน (Newton Rophson) และ Cott and Macchato (1989) ใช้ตัวกรองเอ็กซ์โปเนนเชียล (Exponential Filter) และระบบประมาณค่าคาลมานแบบ Extended Kalman Filter ของ Kershenbaum and Kittisupakorn (1994) ในงานวิจัยนี้จะใช้ตัวกรองคาลมาน (Kalman Filter) ตามหนังสือของ Astrom and Wintenumak (1990) เพื่อประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นในถังปฏิกรณ์สำหรับระบบควบคุม

4.1 การประมาณค่าโดยใช้อัลกอริธึมคาลมาน

การประมาณค่าโดยใช้อัลกอริธึมของคาลมาน ถูกเสนอโดย R. E. Kalman (1960), Kalman and Bucy (1961) ซึ่งได้อธิบายตัวกรองเชิงเส้นแบบไม่ต่อเนื่อง (Discrete) โดยอาศัยหลักการของการลดกำลังสองของค่าผิดพลาด (least-square method) และ หลักการการลดความแปรปรวน (minimum variance method) ในหนังสือของ Astrom and Wintenumak (1990) และงานวิจัย Ricker (1990) ได้กล่าวถึงอัลกอริธึมของตัวกรองคาลมานที่เป็นเชิงเส้นเนื่องจากแบบจำลองใช้เป็นแบบจำลองเชิงเส้นในรูปของสมการสเตท เทคนิคการประมาณค่าคาลมานจะประมาณค่า ตัวแปรโดยอาศัยแบบจำลองของกระบวนการในการหาค่าเกน (Gain) ของการประมาณให้ค่าที่ประมาณได้มีค่าใกล้เคียงกับการวัดจริง โดยเทคนิคการลดการแปรปรวน

(Minimum Variance Estimation) ซึ่งทำการลดความแปรปรวนร่วม โดยความแปรปรวนที่ใช้เป็นความแปรปรวนร่วม (Covariance Function) ระหว่างค่าที่ประมาณจากแบบจำลองกระบวนการกับค่าที่ประมาณจากแบบจำลองที่มีความไม่แน่นอน และกำหนดค่าความแปรปรวนร่วมของตัวแปรสเตรท (Q) และ ค่าความแปรปรวนร่วมของตัวแปรวัด (R) ให้มีค่าคงที่ เรียกตัวสังเกตนี้ว่าตัวกรองคาลมานที่สภาวะคงตัว (Steady State Kalman Filter)

นอกจากนี้ยังมีการประยุกต์ใช้แบบจำลองไม่เชิงเส้นในงานวิจัยของ Jang et al. (1986); Valliere and Bonvin (1989); Myer and Luechke (1991); Lee and Ricker (1994); Gutta and Zafiriou (1995) เรียกระบบประมาณค่านี้ว่า Extended Kalman Filter โดยการประยุกต์ใช้การประมาณค่าแบบคาลมานกับระบบควบคุมโมเดลพรีดิกทีฟพบว่า Lee and Ricker (1994); Gattu and Zafiriou (1994) โดยประมาณค่าความร้อนเพื่อช่วยในการควบคุมอุณหภูมิในกระบวนการผลิตพอลิเมอร์

4.1.1 เทคนิคการประมาณค่า

การประมาณค่าจะอาศัยแบบจำลองกระบวนการที่มีความคล้ายกับกระบวนการจริง ซึ่งอาจได้จากการนำข้อมูลของระบบมาสร้างแบบจำลองหรือที่เรียกว่า Identification หรือการสร้างแบบจำลองกระบวนการทฤษฎีพื้นฐานของถึงปฏิกรณ์ก็ได้ สมการที่ใช้สามารถใช้ได้ทั้งแบบเชิงเส้นและไม่เชิงเส้น ในงานวิจัยนี้จะเขียนสมการให้อยู่ในรูปสมการตัวแปรสเตรท (State Space Model) ดังนี้

$$\begin{aligned}\bar{x}_{k+1} &= G\bar{x}_k + H u_k \\ \bar{y}_k &= C\bar{x}_k\end{aligned}\quad (4-1)$$

การประมาณค่าแบบลดกำลังสองของความผิดพลาด (Least Square Method) จะทำการประมาณค่าตัวแปรสเตรทใหม่ นำไปเปรียบเทียบกับตัวแปรวัดจริง (y) และนำผลต่างกำลังสองของค่าผิดพลาดที่เกิดจากการประมาณสเตรท และผลต่างกำลังสองของค่าผิดพลาดในการประมาณค่าตัวแปรวัด มารวมกันเป็นดัชนีสมรรถนะในการประมาณค่า เขียนความสัมพันธ์ระหว่างความผิดพลาดทั้งสองได้ดังนี้

$$S = (\bar{x}_{k+1} - \bar{x}_0)^T a (\bar{x}_{k+1} - \bar{x}_0) + (y - \bar{y}_k)^T b (y - \bar{y}_k) \quad (4-2)$$

โดยที่ a และ b เป็นค่าคงที่ที่ใช้ในการประมาณ และ \bar{x}_0 เป็นค่าตัวแปรสเตรทที่ประมาณ ทำการหาอนุพันธ์ของฟังก์ชันและให้มีค่าเท่ากับศูนย์เพื่อหาค่า \bar{x}_{k+1} ที่ทำให้ค่า S มีค่าน้อยที่สุดและจะได้สมการของการประมาณค่า ตัวแปรสเตรทดังนี้

$$\bar{x}_{k+1} = \bar{x}_0 + K(y - C\bar{x}_k) \quad (4-3)$$

โดยที่ K คือค่าเกนของการประมาณ

ในการประมาณค่าที่วัดให้ถูกต้องหรือการประมาณค่าตัวแปรที่วัดไม่ได้ ความผิดพลาดในการประมาณที่เกิดขึ้น อาจเกิดจากความไม่แน่นอนของกระบวนการ ทำให้ไม่สามารถประมาณค่าจริงได้ถูกต้อง จึงมีการนำเทคนิคลดความแปรปรวน (Minimum Variance Method) มาช่วยประมาณค่าตัวแปร โดยอาศัยสมการความไม่แน่นอน (Stochastic) ของกระบวนการซึ่งเขียนสมการได้ดังสมการที่ 4-4

$$x_{k+1} = Gx_k + Bu_k + v_k \quad (4-4)$$

$$y_k = Cx_k + w_k$$

เปรียบเทียบค่าตัวแปรสเตรทที่ประมาณจากแบบจำลองของกระบวนการตามสมการที่ 4-1 กับสมการความไม่แน่นอนของกระบวนการในสมการ 4-4

$$(x_{k+1} - \bar{x}_{k+1}) = G(x_k - \bar{x}_k) - KC(x_k - \bar{x}_k) - Kw_k + v_k \quad (4-5)$$

เพื่อให้ค่าความแตกต่างระหว่างค่าประมาณกับค่าจริงที่มีความแปรปรวนมีค่าน้อยลง Kalman (1960) จึงใช้ฟังก์ชันความแปรปรวนร่วม (covariance function) ของค่าประมาณจากสมการแบบจำลองที่มีความไม่แน่นอนกับสมการแบบจำลองของกระบวนการในสมการที่ 4-1 ($P_k = E[(x_k - \bar{x}_k)(x_k - \bar{x}_k)]^T$) เพื่อหาค่าเกนที่เหมาะสม และปรับค่าเกนทุกครั้งที่มีการประมาณค่าเพื่อให้ค่าความแปรปรวนมีค่าลดลง ทำให้การประมาณค่าสามารถลดไม่แน่นอนของกระบวนการ และประมาณค่าตัวแปรได้ถูกต้องมากขึ้น

พิจารณาเทคนิคการประมาณค่าโดยใช้ฟังก์ชันความแปรปรวนร่วมในการประมาณค่าตัวแปรสเตรท(x) จากตัวแปรวัด (y) จะเกิดค่าความไม่แน่นอนในกระบวนการทั้งตัวแปรสเตรทและตัวแปรวัด ดังตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 ความแปรปรวนร่วมของการประมาณค่า

ความแปรปรวนร่วมเกี่ยวข้องกับ x	$E(x_k) = \bar{x}_k$	
ความแปรปรวนร่วมเกี่ยวข้องกับผลต่างค่า x ที่ประมาณกับค่าจริง	$E(\bar{x}_k - x_k)^2 = \sigma_x^2$	การประมาณจะเชื่อถือได้เมื่อ $\sigma_x^2(k+1) < \sigma_x^2(k)$
ความแปรปรวนร่วมเกี่ยวข้องกับ y	$E(y) = 0$	
ความแปรปรวนร่วมเกี่ยวข้องกับผลต่างค่า y ที่ประมาณกับค่าจริง	$E(y - C\bar{x}_k)^2 = \sigma_n^2$	การประมาณจะเชื่อถือได้เมื่อ $\sigma_n^2(\infty) = 0$

จากการใช้การแก้สมการด้วยฟังก์ชันตัวแปรร่วมจะได้สมการในการหาค่าเมตริกซ์ความแปรปรวนร่วมของค่าสเตรต $x_{k+1} - \bar{x}_{k+1}$ (P) ที่ใช้ปรับให้ค่าประมาณจากแบบจำลองกระบวนการและค่าประมาณจากแบบจำลองที่ไม่แน่นอนมีค่าใกล้เคียงกัน จะได้สมการรีคาติที่ใช้ในการหาค่า P ที่เหมาะสมเพื่อหาค่าเกณฑ์ของการประมาณ (K) ได้ดังนี้

$$P_{k+1} = Q + GP_k G - GPC^T(R + CPC^T)^{-1}CPG^T \quad (4-6)$$

$$K = GP_k C^T (R + CP_k C^T)^{-1} \quad (4-7)$$

โดยที่

$$P_k = E\{\bar{x}_k \bar{x}_k^T\}, \quad Q = E\{v_k v_k^T\}, \quad R = E\{w_k w_k^T\}, \quad E\{v_k\} = 0, \quad E\{w_k\} = 0$$

$$R + CP_k C^T > 0 \quad (P_k > 0 \text{ หรือเป็นเมตริกซ์ } \cdot \cdot \cdot)$$

ในการประมาณค่าต้องใช้สมการความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรวัดและตัวแปรที่หาค่าไม่ได้ ซึ่งสมการความสัมพันธ์ดังกล่าวจะต้องสังเกตได้ (มี Observability) จึงจะสามารถใช้ประมาณค่าตัวแปรได้

4.1.2 อัลกอริธึมคาลมาน

ในการศึกษานี้ ตัวกรองคาลมานที่ใช้สามารถนำมาเขียนเป็นอัลกอริธึมเป็นขั้นตอนของการลดค่าความแปรปรวนร่วมเพื่อใช้ในการคำนวณค่าเกณฑ์สำหรับการประมาณและหาตัวแปรสเตรตป้อนสู่ระบบควบคุม ดังต่อไปนี้

- 1) วัดตัวแปรควบคุมที่ทำการควบคุม ณ เวลาที่ผ่านมา
- 2) ทำการหาค่าเมตริกซ์คงที่ G และ H ของกระบวนการ ณ เวลาที่ทำการประมาณ
- 3) ใช้แบบจำลองสเตรตในการคำนวณหาค่าตัวแปรสเตรต ณ เวลาปัจจุบัน

$$\bar{x}_{k+1} = G\bar{x}_k + Hu_k$$

- 4) วัดค่าตัวแปรวัด (y)
- 5) นำค่าเมตริกซ์คงที่ G และ C เพื่อหาเมตริกซ์ความแปรปรวนร่วม P_k จากสมการรีคาติจนกระทั่งเมตริกซ์ P_k มีค่าคงที่

$$P_{k-1} = Q + GP_kG - GPC^T(R + CPC^T)^{-1}CPG^T$$

- 6) นำค่าเมตริกซ์ P_k ที่ได้ คำนวณหาค่าเกณฑ์ของการประมาณตามสมการ

$$K = GP_kC^T(R + CP_kC^T)^{-1}$$

- 7) หาค่าตัวแปรสเตรตของกระบวนการ ณ เวลาปัจจุบัน

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k + K(y + C\hat{x}_k)$$

- 8) นำค่าตัวแปรสเตรตที่ได้ป้อนเข้าสู่ระบบควบคุมเพื่อหาตัวแปรปรับกระบวนการและเริ่มขั้นตอนที่ 1 อีกครั้ง

4.2 การประมาณค่าความร้อนในถังปฏิกรณ์เคมีโดยใช้อัลกอริธึมของคาลมาน

การประมาณค่าตัวแปรที่จะนำไปใช้ในระบบควบคุมโมเดลพรีดิกทีฟสำหรับควบคุมอุณหภูมิในถังปฏิกรณ์ ตัวแปรที่ใช้แสดงพฤติกรรมเชิงพลวัตของการเปลี่ยนแปลงความร้อนในถังปฏิกรณ์ประกอบด้วยอุณหภูมิในถังปฏิกรณ์ อุณหภูมิในถังเจ็คเก็ต ความร้อนที่เกิดขึ้นในถังปฏิกรณ์ และมวลของสารตั้งต้น โดยลดความซับซ้อนของแบบจำลองทำให้คำนวณได้รวดเร็ว ดังตารางที่ 4.2

ตารางที่ 4.2 ตารางแสดงเงื่อนไขของตัวแปรในถังปฏิกรณ์แบบกะ

การนำความร้อนภายในผนังของถังปฏิกรณ์ ทำให้มีการถ่ายความร้อนที่แต่ละจุดห่างจากขอบผนังไม่เท่ากัน	สมมติว่าผนังบางและนำความร้อนได้ดีทำให้ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนคงที่
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของสารภายในถังเปลี่ยนแปลงตามอัตราส่วนของสารในถัง	สมมติว่าคงที่
ค่าคงที่ทางจลนพลศาสตร์ เช่นค่าคงที่ในการเกิดปฏิกิริยาที่เปลี่ยนแปลงเป็นฟังก์ชันเอ็กโปเนนเชียลของอุณหภูมิและคูณกับปริมาณของสารตั้งต้น	สมมติให้มีความสัมพันธ์กับอุณหภูมิภายในถังคูณกับค่าคงที่ $k=c \cdot Tr$
ค่าตัวแปรวัดไม่แน่นอนเนื่องจากมีสัญญาณรบกวนทั้งจากเครื่องมือวัดและอุปกรณ์ในกระบวนการ	ถือว่าค่าที่วัดได้คือค่าจริง

พิจารณาความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาในกระบวนการจริงสามารถแบ่งเป็น 3 ช่วง คือ ช่วงที่มีการให้ความร้อนกับสารในถังปฏิกิริยาซึ่งความร้อนในถังปฏิกิริยาเกิดจากการให้ความร้อนจากถังแจ็คเก็ตและการเกิดปฏิกิริยา ช่วงที่เกิดปฏิกิริยาเป็นช่วงที่ดึงความร้อนออกจากถังปฏิกรณ์ และช่วงที่สารตั้งต้นมีปริมาณลดลงทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาและความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาลดลง ดังนั้น ตัวแปรที่มีความสำคัญในการประมาณค่าในกระบวนการนี้จึงประกอบด้วย คือ อุณหภูมิภายในถังปฏิกิริยา, อุณหภูมิน้ำในถังแจ็คเก็ต, ความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาเคมี และ ปริมาณสารตั้งต้น ทำให้แบบจำลองที่ใช้ในการประมาณจึงประกอบด้วยสมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิภายในถังปฏิกิริยา สมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิในถังแจ็คเก็ต สมการการเกิดของปฏิกิริยาในถังปฏิกรณ์เคมี และสมการการเปลี่ยนแปลงของสารตั้งต้นในถังปฏิกรณ์ เพื่อใช้ในการประมาณความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาคายความร้อนในถังปฏิกรณ์ อุณหภูมิในถังปฏิกรณ์ อุณหภูมิในถังแจ็คเก็ต และสารตั้งต้นในถังปฏิกรณ์ ซึ่งสมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิภายในถังปฏิกิริยา สมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิในถังแจ็คเก็ต เป็นสมการเดียวกับที่ใช้ในระบบควบคุม สามารถเขียนได้ดังสมการที่ 4-8 และ 4-9 ตามลำดับ

สมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิภายในถังปฏิกิริยา

$$\frac{dT_{rm}}{dt} = \frac{Q_r - U_r A_r (T_{rm} - T_{jm})}{W_r C_p} \quad (4-8)$$

สมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิกายนอกถัง

$$\frac{dT_{jm}}{dt} = \frac{U_r A_r (T_{rm} - T_{jm})}{V_j C_{p_j}} - \frac{F_j}{V_j} (T_{rm} - T_{jm}) \quad (4-9)$$

สมการการประมาณมวลของสารตั้งต้นในถังปฏิกรณ์ สามารถหาได้จากสมการการเกิดปฏิกิริยาอันดับหนึ่งและสามารถเขียนสมการเคมีได้เป็น $R \rightarrow P$ โดยใช้สมการแบบจำลองของอาลีเนียสที่มีความสัมพันธ์กับมวลสารตั้งต้น (R) และอุณหภูมิภายในถังปฏิกิริยาในการหาการเปลี่ยนแปลงมวลสารตั้งต้น

$$\frac{dM_R}{dt} = k_0 M_R \exp\left(\frac{-E_a}{RT_r}\right) \quad (4-10)$$

โดยที่ $M_R = Ma + Mb$

เขียนสมการการเปลี่ยนแปลงมวลของ R ให้อยู่ในรูปผลคูณของมวลของสาร A และ อุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์ เพื่อให้ง่ายต่อการทำคำนวณในตัวกรองคาลมานได้ดังนี้

$$\frac{dM_R}{dt} = CTrM_R \quad (4-11)$$

โดยที่ $C = 1 \times 10^5 \text{ (sC)}^{-1}$

ความสัมพันธ์ของความร้อนจะเป็นฟังก์ชันของการเปลี่ยนแปลงมวลของสาร A และ ค่าความร้อนของการเกิดปฏิกริยาทำให้สามารถเขียนสมการประมาณค่าความร้อน และสมการของการเปลี่ยนแปลงความร้อนในรูปของสมการอนุพันธ์ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} Q_r &= -\Delta H \left(\frac{dM_R}{dt} \right) \\ \frac{dQ_r}{dt} &= -C\Delta H \left(M_R \frac{dTr}{dt} + Tr \frac{dM_R}{dt} \right) \end{aligned} \quad (4-12)$$

โดยที่ $\Delta H = -\Delta H_1 - \Delta H_2 \quad \text{kJ/kmol}$

จากความสัมพันธ์ดังกล่าว นำสมการทั้งสี่สมการและทำการเปลี่ยนให้อยู่ในรูปเชิงเส้น เพื่อนำไปใช้เป็นแบบจำลองกระบวนการในการประมาณค่าของคาลมานในหัวข้อที่ได้ตั้งนี้

$$\begin{bmatrix} Tr_{k+1} \\ Tj_{k+1} \\ Q_{r_{k+1}} \\ M_{R_{k+1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{UrAr}{WCp} & \frac{UrAr}{WCp} & \frac{1}{WCp} & 0 \\ \frac{UrAr}{WCp} & -\frac{UrAr}{WCp} - \frac{Fj}{Vj} & 0 & 0 \\ \frac{Vj\rho_j Cpj}{-C\Delta H M_{R_{k+1}}} & -\frac{Vj\rho_j Cpj}{Vj} & 0 & -C\Delta H Tr_{k+1} \\ CM_{R_k} & 0 & 0 & CTr_{k+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Tr_k \\ Tj_k \\ Q_{r_k} \\ M_{R_k} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ Fj \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} Tj_{sp} \quad (4-13)$$