



รายการอ้างอิง

ภาษาไทย

- ธนากร ธนาราม. การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์แบบเซมิเบดซ์โดยใช้ตัวควบคุมจีเอ็มซี. วิทยานิพนธ์ปริญญาโทมหาบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2541.
- ธิดาพันธ์ สีสัตยวงษ์. การออกแบบไมซ์เครื่องปฏิกรณ์ถังกวนแบบต่อเนื่องภายใต้ความไม่แน่นอน. วิทยานิพนธ์ปริญญาโทมหาบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2542.
- นุศรา บุญประเสริฐ. การประยุกต์ใช้การควบคุมแบบเจเนติกโมเดล สำหรับเครื่องปฏิกรณ์การเกิดพอลิไวนิลคลอไรด์. วิทยานิพนธ์ปริญญาโทมหาบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2542.
- ปริญญาพร รักสวิด. การประยุกต์ใช้การควบคุมแบบโมเดลพรีดิกทีฟ ร่วมกับคาลมานฟิลเตอร์ สำหรับการควบคุมอุณหภูมิของถังปฏิกรณ์ต่อเนื่อง. วิทยานิพนธ์ปริญญาโทมหาบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2542.
- ไพศาล กิตติศุกร. เอกสารประกอบคำสอนวิชา 2105-619 Advance Automatic Process Control. ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2540.
- ศราวุธ ภูไพจิตรกุล. การประยุกต์ใช้การควบคุมแบบโมเดลพรีดิกทีฟบน MATLAB สำหรับการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบกะ. วิทยานิพนธ์ปริญญาโทมหาบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2541.

ภาษาอังกฤษ

- Arkun. Y. and Zafiriou, E. : Pergamon Press. Oxford, 1989.
- Astrom, Karl J. and Wintennak, Bjorn, Computer-Control Systems : Theory and Design, 2nd Edition New Jersey :Prentice Hall, Inc., 1990.
- Ballehen, Jens. G.; Liungquist, Dag and Strand, Stig, State-Space Predictive Control. Chemical Engineering Science. Vol.47, No.4, 1992: 787-807.

- Bazara, Mokhtar S. et. al., Nonlinear programming theory and algorithm, 2nd edition Wiley inter-sciences series in discrete mathematics and optimizations. John Wiley and Son. Inc.,1979: 1-10.
- Bemporad, Alberto and Morari, Manfred., Robust Model Predictive Control : A survey, <http://control.ethz.ch/>
- Bequette, B. Wayne., REVIEW Nonlinear control of chemical Processes : A Review, Ind. Eng. Chem, Vol 30,1991: 1391-1413.
- Biran, Adrian. and Moshe, Breiner., MATLAB for Engineers. Addison-Wesley, 1992.
- Bonvin, D., Application of estimation techniques to batch reactors-II. Experimental studies in state and parameter estimation, Computer Chem Eng, Vol. 17, No.1/2, 1989: 11-20.
- Bonwin, D. ; Valliere, P. and Rippin, D. W. T., Application of Estimation Techniques to Batch Reactor-I.II Modeling Thermal Effects, Computer. Chem. Eng., Vol. 13, No.1/2,1989 pp. 1-20.
- Chang, Jyh-shyong and chen, Wen-jang., Simulation of a Jet-Assisted circulation jacketed batch reactor for polymerizaion of methylmethacrylate, The Canadian journal of chemical engineering, Vol.70, June 1992.
- Chang, Jyh-Shyong and Lai, Jia-Lin., Computation of Optimal Temperature Policy for Molecular Weight Control in a Batch Polymerization Reactor, J. Ind. Eng. Res., Vol.31, 1992: 861-868.
- Choi, K. Y. and Rhinehart, R. R., Nonlinear Process-Model-Based-Control of Batch Polymerization Reactor, Proceeding the American Control Conference, June 1997: 3455-59.
- Chylla, R. W. and Haase, D. Randall., Temperature control of semibatch polymerization reactor, Computer chem eng, Vol.17, No.3, 1993: 257-264.
- Cott, J. Barry and Macchietto., Temperature Control of Exothermic Batch Reactor Using Generic Model Control, Ind. Eng. Res., Vol. 28, 1989: 1177-1184
- Crowley, Timothy J. and Choi, Kyu-Yong., On-line monitoring and control a Batch Polymerization Reactor, J. Proc. Cont., Vol.6, No.2/3, 1996: 119-127.
- Crowley, Timothy J. and Choi, Kyu-Yong., Discrete Optimal Control of Molecular Weight Distribution in a Batch Polymerization Process, J. Ind. Eng Res., Vol.36, 1997: 3676-3684.

- Crowley, Timothy J. and Choi, Kyu-Yong, Calculation of Molecular Weight Distribution from Molecular Weight Moments in Free Radical Polymerization, Ind. Eng. Chem. Res., Vol.36, 1997: 1419-23.
- Cutler, C. R. and Ramaker, B. L., Dynamic Matrix Control- A computer control algorithm, Proc. Automatica control conf. San Francisco. Paper. WP5-B.(1980): AIChE Mtg paper, Houston 1979: No. 51B..
- Daniel, R. Lewin and Ram, Lavie, Design and Implementing Trajectories in an Exothermic Batch Chemical Reactor, Ind. Eng. Chem. Res., Vol.29, 1990: 89-96.
- Eaton, John W. and Rawings, James B., Model-Predictive Control of Chemical Processes, Chemical Engineering Science, Vol.47, No.4.,1992: 705-720
- Eaton, J. W. and Rawling, J. B., Feedback Control of Nonlinear Processes Using On-line Optimization Techniques, Computer. Chem. Eng., Vol.14, 1990a
- Edgor, T. F. and Himmelblau, D.M., Optimization of Chemical Processes. Singapore: McGraw-Hill, 1989
- Edward, Katende and Arthur, Jutan, Nonlinear Predictive Control of Complex Processes, Ind. Eng. Chem. Res. Vol. 35, No. 10, 1996: 3539-3546.
- Ellis, Mark F.; Taylor, Tad W.; Gonzalez, Victor and Jensen, Klavs F., Estimation of the molecular Weight Distribution in Batch Polymerization, AIChE. Journal, Vol.34, No.8, 1988: 1341-1353
- Fletcher, R., Practical Method of Optimization. 2nd ed, Chichester: John Wiley & sons.,1996
- Friedrend, M. and R, Perne., Design and Control of Batch Reactors –An Industrial Viewpoint, Comp. Chem. Eng. Vol.19, 1995: S357-S368.
- Garcia, C. E. and Morari, M., A Unifying Review and some New results, Ind. Eng. Chem Process. Des. Dev.,Vol.21, 1982
- Gattu, Gangadhar and Zafiriou, Evangelos, Observer Based Nonlinear Quadratic Dynamic Matrix Control for State Space and Input/Output Models, The Canadian Journal of Chemical Engineering. Vol.73, Dec 1995: 883-895
- Gentric, C.; Pla, F., Experiment Study of the Nonlinear Geometric Control of Batch Polymerization Reactor, Computers chem. Eng., Vol. 21, 1997: S1043-48.
- Grace, A., Optimization Toolbox for use with MATLAB – User’s Guide. Massachusetts: The Math Works

- Grosdidier, P.; Froisy, B. and Hammann, M., The IDCOM-M controller in T. J. McAvoy, Y. Arkun and E. Zfiriou, Proceeding of the 1988 IFAC Workshop on Model-based Process Control. Pergamon Press. Oxford, 1987: 31-36.
- Gulke, Eric A., Polymer Process Engineering, RTR Prentice Hall. Inc., 1994: 129-157.
- Gutta, G. and Zafiriou, E., Nonlinear Quadratic Dynamic Matrix Control with state Estimation. Ind. Eng. Chem. Res. Vol.31, 1994: 1096-1104
- Halmilton, J. C. and Seborg, An experimental evaluation of kalman filter, AIChE journal. Vol.19, 1973 : 901-907.
- Hidalgo, P. M. and Brosilow, C. B., Nonlinear Model Predictive Control of Styrene Polymerization at unstable operating points, Comp Chemical Engineer. Vol.14, No.4/5, 1990: 481-494.
- Inglis, M. P. et. al., Long Range Predictive Control of Polymerization Reactor, The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol.69, February,1991: 120-129.
- Jo, J. H. and Bankoff, S. G., Digital Monitoring and Estimation of Polymerization Reactors, AIChE journal. Vol.22, No.2, 1976.
- Jutan, Arthur and Uppal, Ashok, Combined Feedforward-Feedback Servo Control Scheme for Exothermic Batch Reactor, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol.23, 1984 : 597-602.
- Kalman, R. E. and Bucy, R. S., New result in linear filtering and prediction theory. Trans ASME J. basic Engng. Vol.83, 1961: 95-108.
- Kershenbaum, L. S. and Kittisupakorn, P., The use of a Partially Simulated Exothermic (PARSEX) Reaction for experimental testing of control algorithm, Trans I ChemE. Vol.72 Part A, 1994
- Kim Kee Jeong. Modeling and Control of Continuous Free Radical Polymerization Reactor. Dissertation for Doctor of Philosophy, 1991
- Kiparissides, C., Polymerization reactor Modeling: A Review of Recent developments and Future Directions, Chemical Engineering Sciences. Vol. 51, No.10, 1996: 1637-1659.
- Kiparissides, C. et. al., Dynamic Simulation of Industrial Poly (Vinyl Chloride) Batch Suspension Polymerization Reactor, Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 36, 1997: 1253-67.
- Lee, Jay H. and Ricker, N. Lawrence., Extended Kalman Filter Based Nonlinear Model Predictive Control, Ind. Eng. Chem. Res. Vol.33, 1994: 1530-1541.

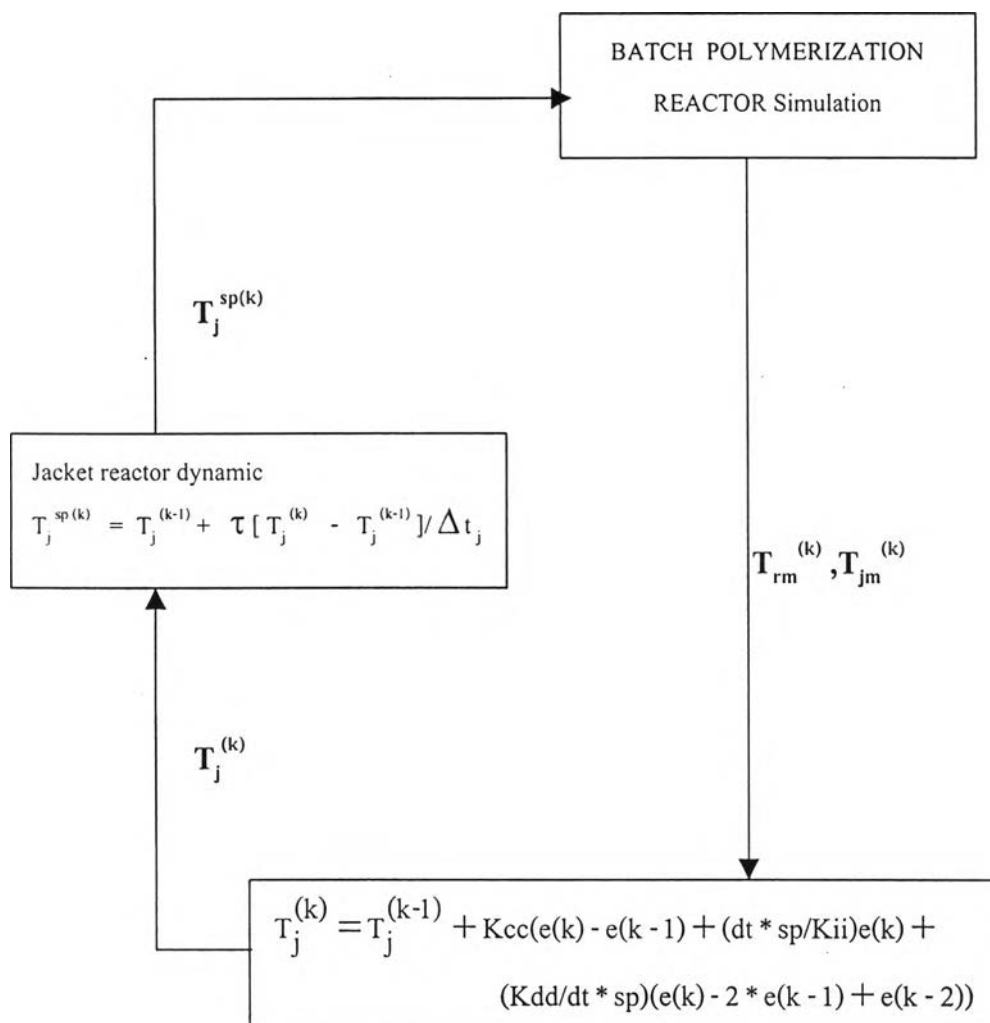
- Lee, Kwang S., Model Predictive Technique Combined with Iterative Learning for Batch Process, AIChe journal. Vol.45, No.10, October 1999.
- Lee, P. L. and Sullivan, G. R., Generic Model Control (GMC), Comp. Chem. Eng. Vol.12, 1988: 573-580.
- Lee, P. L.; Newell R. B. and Sullivan, G. R., Generic Model Control—A Case Study, The Canadian Journal of Chemical Engineering. Vol.67, 1989: 478-484.
- Liptak, B. G., Controlling and Optimizing Chemical Reactors, Chemical Engineering. May 26 1986.
- Loeblein, C.; Perkins, J. D, Structure Design for Online Process Optimization: I. Dynamic Economics of MPC. AIChe Journal. Vol.45, No.5, 1999: 1018-1029.
- Luenberger, David G., Introduction to linear and nonlinear programming. Addison Wesley publishing company, 1973.
- Masoud, Soroush and Costas, Kravaris, Nonlinear Control of a Batch Polymerization Reactor: An Experimental study, AIChe Journal. Vol.38, No.9, 1992 : 429-1448.
- Mcgreavy, C. Polymer reactor engineering, Brackie Academic & Professional, 1994: 134-154.
- Morari, Manfred.; Garcia Carlos E. and Prett David M., Model Predictive Control : Theory and Practice. IFAC Model Based Process Control. USA, 1988: 1-12
- Myers, M. A. and Luecke, R. H., Short Note : Process Control Application of an Extended Kalman Filter Algorithm, Comp. Chem. Eng.. Vol.15, No.12. 1991: 853-857.
- Peterson, T. et. al., A Nonlinear DMC Algorithm and its Application to a Semibatch Polymerization Reactor, Chemical Engineering Science. Vol.47, No.4, 1992:1735-753.
- Prett, D. M. and Gillette, R.D., Optimization and Constrained Multivariable Control of Catalytic Cracking Unit, AICHE Nation Mtg. Houston, TX; also Proc. Joint Automatica control conf, San francisco, 1979.
- Prett, and Garcia, Fundamental Process Control. Butterworths, Stoneham, MA, 1988.
- Qin, S. Joe and Badwell, Thomas A., An overview of industrial model preidictive control technology, Aiche Symposium series. Third international Conference on chemical process control, Vol.93., 1997: 232-255.
- Rao, S. S., Optimization Theory and Applications. India Wiley Eastern, 1979.
- Rardin, Ronald L., Optimization in Operations Research. USA:Prentic-Hall International, 1998 .
- Reklaitis, G. V., Engineering optimization methods and applications. John Wiley and Son, 1983.

- Richalet, Rault J.; Testud, A. and Papon, J. L, Model predictive Heuristic Control : Application to industrial Process, Automatica. Vol. 14, 1976: 413.
- Ricker, N. L., Model Predictive Control with State Estimation, Ind. Eng. Chem. Res. Vol.29, No.3, 1990: 374-382.
- Ricker, N. L.,The use of quadratic Programming for constained internal model control, Ind. Eng. Chem. Res. Vol.24., 1985: 925-936.
- Ross, R. T. and Laurence, R. L., AICHE Symposium Ser., Vol.72, No.74, 1976.
- Semino, D.; Morretta, M. and Scali, C., Parameter Estimation in Extended Kalman Filters for Quality control in Polymerization Reactors, Comp. Chem. Eng., Vol.20, 1996: S913-S918.
- Sifu, Li.; Kain, Y.; Lim, d. and Grant, Fisher., A State Space Formation for Model Predictive Control, AICHE Journal.. Vol.35, Feb 1989.
- Sistu, Phani B. and Bequette, B. Wayne, A Comparison of Nonlinear Control Techniques for Continuous Stirred Tank Reactors, Chemical Engineering Science. Vol.47, No.9-11, 1992 : 2553-2558.
- Srinivas, Tatiraju and Masoud, Soroush, Nonlinear State Estimation in a Polymerization Reactor, Ind. Eng. Chem. Res., Vol.36, 1997: 2679-2690.
- Takamatsu, T. Takeichiro et. al., Molecular Weight Distribution Control in a Batch Polymerization Reactor, Ind. Eng. Chem. Res. Vol.27, 1988: 93-99.
- Tor, Steinar Schei and Peter, Sinstad, Non-linear Model Predictive Control of Batch Polymerization Process, Proceeding the American Control Conference. June 1998: 3381-3385.
- Vassilios, K. Tzounas and Shah, Sirish L., Adaptive pole-Assignment Control of A Batch Polymerization Reactor, Chemical Engineering Science., Vol.44, No.5, 1989: 1183-1193.
- White, I. and Chelsea, C. Joint., Optimum System Control. Prentice Hall., Inc., 1977.
- Wu, R. S. H., Chem. Eng. Progr. Vol. 81, No. 9, 1985: 57.

Yumoto, T. and Ohtani, T., Robust Controller Design for Batch Polymerization Reactor,
Proceeding of the American Control Conference. PACC. June 1994.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก แผนภาพการประยุกต์ใช้การควบคุมแบบพีไอดี



รูปที่ ก.1แผนผังการประยุกต์ใช้ พีไอดีที่ใช้ในงานวิจัย

- T_r คือค่าอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์
- T_{rm} คือค่าอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่ได้จากการวัด
- e คือค่าผิดพลาดระหว่าง T_r และ T_{rsp}
- K_{cc} , K_{ii} และ K_{dd} คือ ค่าพารามิเตอร์การจูนของพีไอดี

ภาคผนวก ข การจูนพารามิเตอร์การควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล

(Generic Model Control, GMC)

เจนเนริกโมเดลเป็นการควบคุมที่ต้องอาศัยแบบจำลองของกระบวนการ แบบจำลองที่ใช้ในการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดลจะเป็นแบบจำลองเชิงเส้นหรือไม่เป็นเชิงเส้นก็ได้ ปรับจูนค่าพารามิเตอร์เพียง 2 ค่าเพื่อให้ได้ค่าการตอบสนองของระบบที่ต้องการ สามารถใช้แบบจำลองแบบไม่เชิงเส้นในตัวควบคุมแบบเจนเนริกโมเดลโดยตรงเพื่อที่จะกำหนดผลตอบสนองที่ต้องการตั้งนั้นแบบจำลองที่ใช้จึงไม่ต้องทำให้เป็นเชิงเส้นก่อน

อัลกอริทึมเจนเนริกโมเดล

แบบจำลองของระบบ (Lee และ Sullivan, 1988)

$$\frac{dx}{dt} = F(x,u,t) \quad (๗-1)$$

$$Y = H(x) \quad (๗-2)$$

เลือกตัวแปรปรับคั้งนี้คือ

$$Y = K_1 \varepsilon(t) + \int_0^t K_2 \varepsilon(t) dt$$

โดย $\varepsilon = (\dot{Y} - Y)$

และ Y^* คือค่าเอาต์พุตที่ต้องการ

จาก (๗-2) ทำการหาอนุพันธ์

$$\dot{Y} = \frac{\partial H(x)}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t}$$

$$Y = \frac{\partial H(x)}{\partial x} \cdot F(x,u,t)$$

ดังนั้น

$$K_1 \varepsilon(t) + \int_0^t K_2 \varepsilon(t) dt = \frac{\partial H(x)}{\partial x} \cdot F(x,u,t) \quad (๗-3)$$

สำหรับระบบที่ไม่เชิงเส้นสามารถจัดให้อยู่ในรูปเชิงเส้นได้คั้งนี้

$$F(x,u,t) = F'(x) + G(x)U$$

จาก (๗-3) ได้

$$K_1 \varepsilon(t) + \int_0^t K_2 \varepsilon(t) dt = \frac{\partial H(x)}{\partial x} \cdot [F'(x) + G(x)U] \quad (๗-4)$$

ส่วนใหญ่ $\frac{\partial H(x)}{\partial x} = 1$

ในที่สุด จะได้สมการสำหรับการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดลคั้งนี้

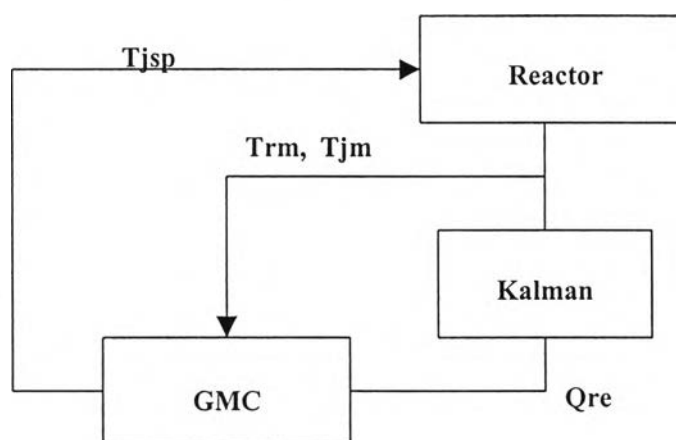
$$K_1 \varepsilon(t) + \int_0^t K_2 \varepsilon(t) dt = [F'(x) + G(x)U] \quad (9-5)$$

เนื่องจากการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล เป็นการควบคุมที่ขึ้นกับแบบจำลองของกระบวนการ เพราะฉะนั้นในการคำนวณค่าตัวแปรปรับเพื่อควบคุมตัวแปรควบคุมให้อยู่ที่ค่าที่ต้องการนั้น ค่าตัวแปรอื่นๆ รวมทั้งพารามิเตอร์ของกระบวนการมีส่วนเกี่ยวข้องด้วย ดังนั้น เมื่อค่าตัวแปรอื่นๆ ผิดพลาด หรือค่าพารามิเตอร์ต่างๆ ที่ใช้ในตัวควบคุมเจนเนริกโมเดลแตกต่างจากกระบวนการจริง จะทำให้การคำนวณค่าตัวแปรปรับไม่เหมาะสม ทำให้ควบคุมไม่ได้ดังที่ต้องการ

การควบคุมแบบเจนเนริกโมเดลร่วมกับตัวประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์

เทคนิคการควบคุมแบบที่ขึ้นกับแบบจำลองถ้าแบบจำลองผิด พารามิเตอร์ผิด จะทำให้คำนวณค่าตัวแปรปรับผิด การประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์ เพื่อช่วยในการประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์ให้ถูกต้องหรือใกล้เคียงกับค่าที่ถูกต้อง แต่สำหรับตัวควบคุมแบบพีไอดีจะไม่เกี่ยวข้องกับกรณีมีแบบจำลองและพารามิเตอร์ผิดพลาด เพราะการควบคุมแบบนี้ไม่ได้ขึ้นกับแบบจำลอง

เมื่อการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดลมีการนำเอาตัวประมาณค่าเข้ามาช่วยประมาณค่าสเททหรือพารามิเตอร์ที่ไม่ทราบค่าหรือไม่รู้ค่าที่แท้จริง สามารถแสดงได้ดังแผนภาพ



รูปที่ ข.1 แผนผังการประยุกต์ใช้ เจเนริก โมเดลร่วมกับตัวประมาณค่าความร้อนที่ใช้ในงานวิจัย โดย Qre คือค่าประมาณความร้อนที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยา

จะเห็นได้ว่า ค่าเอาท์พุทของกระบวนการที่วัดค่าได้จะนำมาใช้ในการประมาณค่าสเททหรือพารามิเตอร์โดยใช้ตัวประมาณค่า อย่างเช่นคาลมานฟิลเตอร์ ซึ่งค่าสเททและพารามิเตอร์ที่ได้

จากการประมาณจะส่งเข้าตัวควบคุมเจเนริกโมเดลเพื่อทำการคำนวณค่าตัวแปรปรับต่อไป ดังนั้นตัวประมาณค่าจะมีบทบาทอย่างมากต่อประสิทธิภาพของตัวควบคุมแบบเจเนริกโมเดล ถ้าตัวประมาณค่าให้ผลการประมาณที่ดี ตัวควบคุมเจเนริกโมเดลจะสามารถคำนวณค่าตัวแปรปรับได้อย่างเหมาะสม ทำให้สามารถควบคุมตัวแปรควบคุมให้อยู่ที่ค่าที่ต้องการได้ โดยมีค่าออฟเซตน้อยหรือไม่มีเลย

สรุปเจเนริกโมเดล

จากสมการ (ข.4) จัดรูปใหม่ได้

$$U(k) = \frac{K_1 \varepsilon(t) + \int_0^t K_2 \varepsilon(t) dt - F(x)}{G(x)} \quad (ข-6)$$

ทำการจัดสมการในรูปแบบดิสครีต

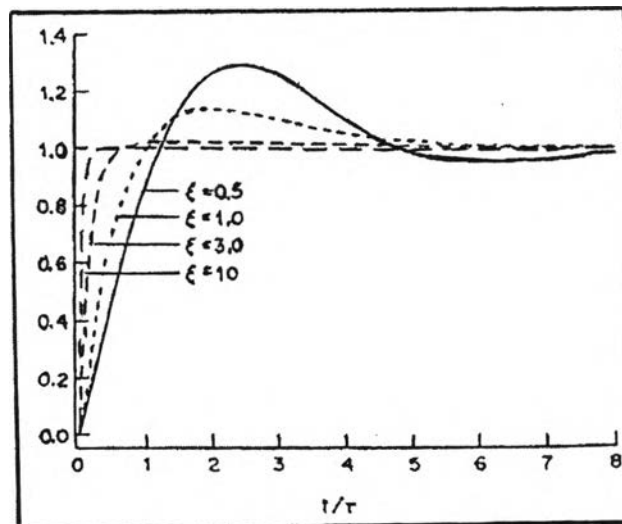
$$U(k) = \frac{K_1 (Y_{sp} - Y(k)) + \sum_{k=0}^k K_2 (Y_{sp} - Y_{(k)}) \Delta t - F(k)}{G(k)} \quad (ข-7)$$

โดยที่มีค่าการจูนเป็น

$$K_1 = \frac{2\xi}{\tau}$$

$$K_2 = \frac{1}{\tau^2}$$

ซึ่งค่า ξ และ τ สามารถหาได้จากแผนภาพข้างล่างนี้



รูปที่ ข.2 แผนภาพการตอบสนองของระบบการควบคุมเจเนริกโมเดล (P. L. Lee, 1988)

หลักการปรับตัวแปรปรับเพื่อให้ได้ผลการตอบสนองที่ต้องการ

1 เลือก ξ จากรูปเพื่อให้ได้ผลการตอบสนองที่ต้องการ

2. เลือก จากรูปเพื่อให้ได้จังหวะเวลาที่เหมาะสมที่สุดคล้องกับความเร็วของผลตอบสนองของกระบวนการ
3. คำนวณหาค่า K_1, K_2

ตัวอย่าง. ถ้าต้องการให้ผลตอบสนองเข้าสู่ set point ที่เวลา 20 นาที โดยเลือก $\xi = 10$ =?

$$\frac{t}{\tau} = 0.25 \rightarrow \frac{20}{\tau} = 0.25 \rightarrow \therefore \tau = 80 \text{ นาที}$$

ดังนั้น

$$K_1 = \frac{2\xi}{\tau} = \frac{2 \times 10}{80} = \frac{1}{4}$$

$$K_2 = \frac{1}{\tau^2} = \frac{1}{80^2}$$

- การใช้ GMC ต้องตรวจสอบ

- linear in control

- zeros dynamics (หมายถึง internal dynamics ในสถานะที่ตัวแปรควบคุมถูกควบคุมให้อยู่ในตำแหน่งเป้าหมายที่ต้องการ นั่นคือตัวแปรควบคุมจะมีค่าเท่ากับศูนย์ (ในรูปของค่าเบี่ยงเบน) ซึ่งจะบอกว่ากระบวนการที่ถูกควบคุมมีเสถียรภาพหรือไม่ เมื่อตัวแปรควบคุมถูกควบคุมโดยตัวควบคุมให้อยู่ที่ค่าเป้าหมายที่ต้องการ

ในกรณีต้องการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เคมี (T_r) ให้อยู่ที่ค่าอุณหภูมิที่ต้องการ ($T_{r,sp}$) จากสมการแสดงตัวแปรสเททอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ปอลิเมอไรเซชันที่เราสนใจ ผลลัพธ์จากการแก้สมการนี้ จะให้อุณหภูมิทั่วไปของแจ็กเก็ตที่เวลา k ($T_j^{(k)}$) ซึ่งไม่ใช่อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ของแจ็กเก็ต ($T_j^{sp(k)}$) ที่ทำให้อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เข้าสู่อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ ($T_r^{(k)}$) ถ้าใช้ค่า $T_j^{(k)}$ ในการควบคุมโดยตรงเลยจะส่งผลทำให้การเข้าสู่เซ็ทพอยต์ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ช้าลง หรือไม่เข้าหาจุดเซ็ทพอยต์เลย

จากงานวิจัยของ Liptak (1986) อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ของแจ็กเก็ต สามารถหาโดย สมมติแบบจำลองพลวัตของแจ็กเก็ตเป็นแบบจำลองอันดับหนึ่ง และกำหนดให้ τ_j เป็นค่าคงที่เวลาของแจ็กเก็ตที่ถูกประมาณขึ้น

$$T_j^{(k)} = T_j^{(k-1)} + \Delta t [T_j^{sp(k)} - T_j^{(k-1)}] / \tau_j \quad (\text{ข-8})$$

จัดรูปสมการใหม่ได้

$$T_j^{sp(k)} = T_j^{(k-1)} + \tau_j [T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}] / \Delta t \quad (\text{ข-9})$$

ดังนั้น เมื่อเราหาค่า $T_j^{sp(k)}$ ได้ ก็สามารถควบคุมอุณหภูมิของภายในเครื่องปฏิกรณ์เข้าสู่เซ็ทพอยต์ได้ (T^{sp}) สามารถจัดรูปให้อยู่ในรูปของสมการตัวแปรปรับของอัลกอริทึมเจเนริก โมเดล

ได้ดังนี้

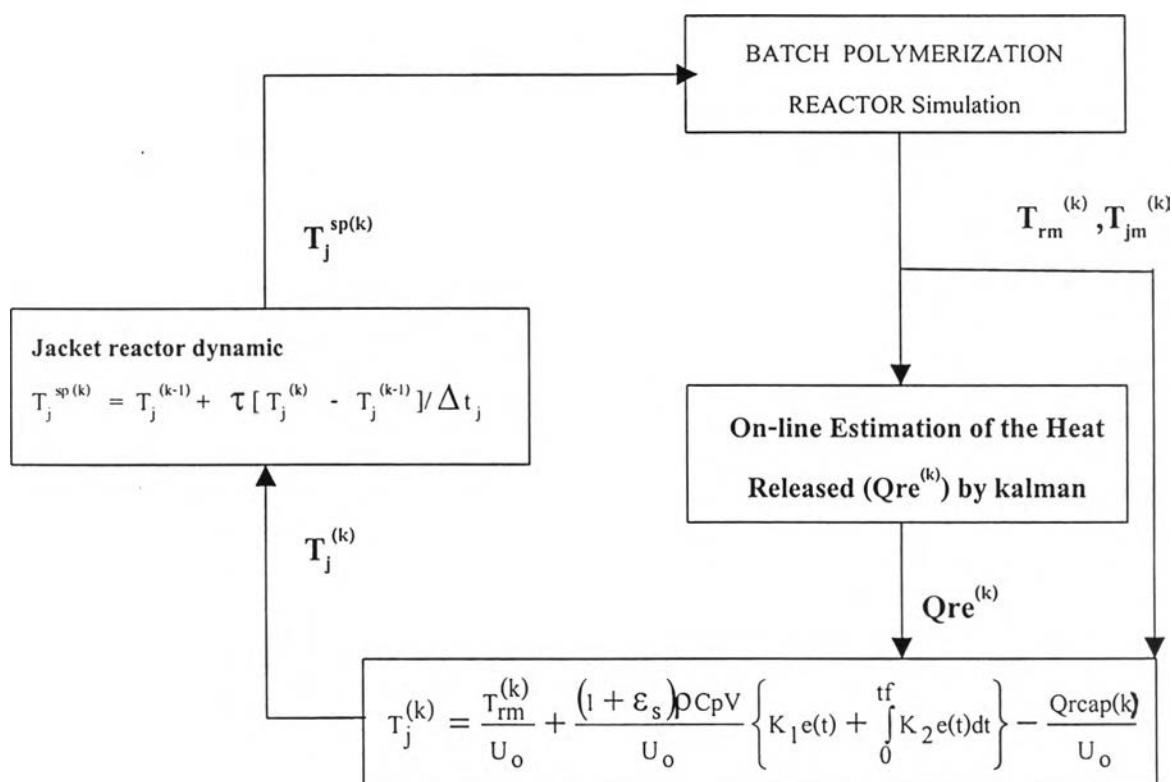
$$T_j^{(k)} = \frac{T_j^{(k)}}{U_o} + \frac{(1 + \varepsilon_s) \rho C_p V}{U_o} \left\{ K_1 e(t) + \int_0^{tf} K_2 e(t) dt \right\} - \frac{(-\Delta H V_{kpMP})}{U_o} \quad (\text{ข-10})$$

โดยที่ $Q_g^{(k)} = (-\Delta H V_{kpMP})$

$$e(t) = T_{rsp}^{(k)} - T_r^{(k)}$$

ผลลัพธ์จากสมการ (ข-10) จะให้อุณหภูมิทั่วไปของแจ็กเก็ต ($T_j^{(k)}$) ไม่ใช่อุณหภูมิ เซ็ทพอยต์ของแจ็กเก็ต ($T_{jsp}^{(k)}$)

ปกติค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา ($Q_g^{(k)}$) ไม่สามารถวัดได้ต้องอาศัยการประมาณ ค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา $Q_{re}^{(k)}$ โดยจะใช้ควบคู่ไปกับการควบคุมแบบเจเนริกโมเดล



รูปที่ ข.3 แผนผังการประยุกต์ใช้ เจเนริก โมเดลร่วมกับตัวกรองคาลมานที่ใช้ในงานวิจัย

ภาคผนวก ค ระบบประมาณค่าเอกซ์โพเนนเชียล

จากเอกสารของ Cott และ Macchietto (1989)

ประกอบด้วยการกรองสัญญาณตัวแปรวัด

$$\frac{dTre_j}{dt} = \frac{Trm_j - Tre_{j-1}}{\tau_f} \quad (\text{ค-1})$$

$$\frac{dTje_j}{dt} = \frac{Tjm_j - Tje_j}{\tau_f} \quad (\text{ค-2})$$

การประมาณค่าอุณหภูมิโดยใช้ฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียล

$$\frac{dTre_j}{dt} = \frac{3Tre_j - 4Tre_{j-1} - Tre_{j-2}}{2} \quad (\text{ค-3})$$

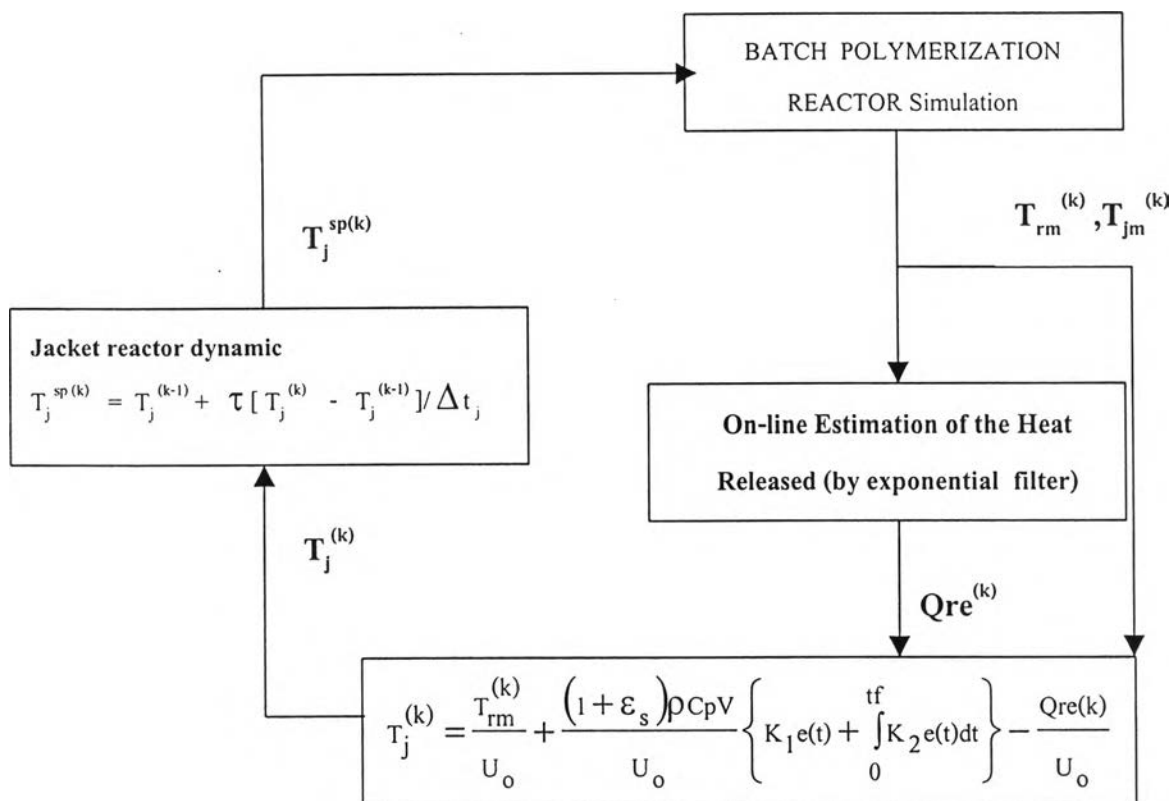
ประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้น

$$\frac{Qre_j}{UrAr} = \frac{C_p \rho r}{2Ur} \frac{dTre_j}{dt} + Tre_j - Tje_j \quad (\text{ค-4})$$

กรองสัญญาณความร้อน

$$\frac{dQr_j}{dt} = \frac{Qre_j - Qr_j}{\tau_f} \quad (\text{ค-5})$$

สามารถประยุกต์การประมาณค่าด้วยตัวกรองเอกซ์โพเนนเชียลสำหรับงานวิจัยนี้
กับระบบที่ใช้ในงานวิจัย ดังนี้



รูปที่ ค.1 แผนผังการประยุกต์ใช้ เจนริก โมเดลร่วมกับตัวกรองเอกซ์โพเนนเชียลที่ใช้ในงานวิจัย

ภาคผนวก ง. การโปรแกรมควอดราติกอย่างเป็นลำดับ

(Sequential quadratic programming : SQP หรือ recursive quadratic programming)

SQP เป็นวิธีการแก้ปัญหาไม่เชิงเส้น โดยอาศัยหลักการประมาณฟังก์ชันออปเจกทีฟที่เป็นสมการไม่เชิงเส้นให้เป็นสมการควอดเรติก แล้วหาจุดต่ำสุดหรือต่ำสุดของสมการควอดเรติก โดยมีข้อจำกัดที่เป็นสมการเชิงเส้น ที่ได้จากการประมาณเชิงเส้น (linearization)

Wilson (1963) เป็นคนแรกที่ได้พัฒนา SQP โดยเขียนโปรแกรมชื่อว่า SOLVER ที่ใช้สำหรับแก้ปัญหาไม่เชิงเส้น โดยอาศัยหลักการประมาณฟังก์ชันออปเจกทีฟที่ไม่เชิงเส้นเป็นสมการควอดเรติก และอาศัยการประมาณแบบเชิงเส้นช่วยประมาณสมการข้อจำกัดให้เป็นสมการเชิงเส้น ซึ่งนับเป็นหลักการของ SQP ต่อมา Han (1976) และ Powell (1978) ได้เสนอให้ใช้วิธีกึ่งนิวตัน (Quasi-Newton method) ช่วยในการปรับปรุงค่าเฮซเซียนเมตริกซ์ของฟังก์ชัน

ลากรางเจียน (Hessian of the Lagrangian) เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของ SQP ใช้ลู่เข้า มีความถูกต้องในการหาคำตอบ และจำนวนครั้งที่หาคำตอบได้ของ SQP เปรียบเทียบกับวิธีการออปติไมซ์แบบไม่เชิงเส้นวิธีต่าง ๆ นั้นจะน้อยจำนวนครั้งกว่า

หลักการ SQP เป็นวิธีการแก้ปัญหาการโปรแกรมควอดราติกอย่างเป็นลำดับ จนกว่าจะลู่เข้าคำตอบที่เหมาะสม สำหรับการควอดราติก มีลักษณะของข้อจำกัดเป็นเชิงเส้น แต่ออปเจกทีฟฟังก์ชันเป็นสมการควอดราติก ในปัญหาเกี่ยวข้องกับการหาจุดต่ำสุดและสูงสุดโดยทั่วไป จึงมีบทบาทสำคัญในหาคำตอบของสมการไม่เชิงเส้นในวิธีของ SQP

สำหรับในงานวิจัยนี้ใช้โปรแกรมเมทแลบ ซึ่งมีทูลบ็อกซ์ (Toolbox) สำหรับช่วยออปติไมซ์หาจุดที่เหมาะสมของปัญหาไม่เชิงเส้น โดยการเรียกใช้ฟังก์ชันคำสั่ง `fmincon.m` (Grace, 1993) ซึ่งมีลักษณะอัลกอริธึมแบบ SQP ที่เป็นวิธีออปติไมซ์สำหรับปัญหาข้อจำกัดไม่เชิงเส้นที่มีประสิทธิภาพสูง ใช้การคำนวณซ้ำน้อยกว่าวิธีอื่น และเป็นวิธีนิยมในปัจจุบัน แสดงขั้นตอนการคำนวณของ SQP ได้ดังนี้ เริ่มจากพิจารณาปัญหาออปติไมซ์ (ง-1)

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & C(\mathbf{x}) \\ \text{โดยมีเงื่อนไข} \quad & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \end{aligned} \quad (\text{ง-1})$$

เมื่อ \mathbf{x} แทน เวกเตอร์ของตัวแปรตัดสินใจ

$C(\mathbf{x})$ แทน สมการออปเจกทีฟฟังก์ชันซึ่งเป็นความสัมพันธ์ของ \mathbf{x}

$\mathbf{h}(\mathbf{x})$ แทน เวกเตอร์ข้อจำกัดที่เป็นสมการ: $[h_1, h_2, \dots, h_l]^T$

$\mathbf{g}(\mathbf{x})$ แทน เวกเตอร์ข้อจำกัดที่เป็นอสมการ: $[g_1, g_2, \dots, g_m]^T$

อัลกอริธึมของ SQP ในฟังก์ชัน `fmincon.m` สำหรับแก้ปัญหาออปเจกทีฟฟังก์ชัน ประกอบด้วย 5 ขั้นตอนดังนี้

1. **ขั้นเริ่มต้น** กำหนดให้ค่าเริ่มต้นของการคำนวณขั้นที่ 1 $k = 0$, ค่าเริ่มต้นตัวแปรตัดสินใจ: \mathbf{x}^0 , ค่าเริ่มต้นของเฮซเซียนเมตริกซ์ของฟังก์ชันลากรางเจียน \mathbf{B}^0 โดยทั่วไปจะกำหนดให้ \mathbf{B}^0 เป็นเมตริกซ์เอกลักษณ์ (Identity matrix)
2. **แก้ปัญหา QP (Quadratic programming)** โดยประมาณออปเจกทีฟฟังก์ชันเป็นสมการควอดเรติกและทำการประมาณเชิงเส้นสมการข้อจำกัด เพื่อหาทิศทางของคำตอบในทางที่จะให้ฟังก์ชันลดลง (descent direction: \mathbf{s}) ในกรณีหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชัน C โดยมีข้อจำกัดที่เป็นสมการคือ \mathbf{h} และมีข้อจำกัดที่เป็นอสมการคือ \mathbf{g} ซึ่งจากปัญหาสมการ (ง-1) สามารถเขียนอยู่ในรูปปัญหาย่อย QP (quadratic programming subproblem) ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{s}} \quad & \nabla C(\mathbf{x}^T) \mathbf{s} + \frac{1}{2} \mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s} \\ \text{โดยมีเงื่อนไข} \quad & \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^T) \mathbf{s} = 0 \end{aligned} \quad (\text{ง-2})$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}^T) \mathbf{s} \leq 0$$

เมื่อ C คือออปเจ็คทีฟฟังก์ชัน

\mathbf{s} คือเวกเตอร์ทิศทางของคำตอบ

3. หาระยะห่าง (step length): α ของคำตอบที่เปลี่ยนไปตามทิศทางของเวกเตอร์ \mathbf{s} นั่นคือจะได้คำตอบใหม่เท่ากับ $\mathbf{x}_{new} = \mathbf{x} + \alpha \mathbf{s}$ โดยใช้วิธีการออปติไมซ์ฟังก์ชัน 1 ตัวแปร เช่น quadratic interpolation หรือ cubic interpolation นั่นคือ ช่วยในการหาระยะห่าง α ของคำตอบในแต่ละขั้นตอนการคำนวณที่ทำให้ฟังก์ชันเมริท (Merit function) ตามสมการที่ (ง-2) มีค่าต่ำสุด นั่นคือประมาณฟังก์ชันเมริทด้วยฟังก์ชันควอดเรติกหรือคิวบิก ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่หาค่าต่ำสุดได้ง่ายแล้วหา α ที่ทำให้สมการควอดเรติก หรือคิวบิกมีค่าต่ำที่สุด

$$\Psi(\mathbf{x}_{new}) = C(\mathbf{x}_{new}) + \sum_{i=1}^l \lambda_i |h_i(\mathbf{x}_{new})| + \sum_{j=1}^m \lambda_j (\max[0, g_j(\mathbf{x}_{new})]) \quad (ง-3)$$

α คือระยะห่างของตัวแปรตัดสินใจ (step length)

Ψ คือฟังก์ชันเมริท (Merit function)

4. ปรับปรุงค่าเฮซเซียนเมตริกซ์ของฟังก์ชันลากรองจ์ (Hessian of the Lagrangian): \mathbf{B} สำหรับการคำนวณซ้ำ ในขั้นต่อไปใช้วิธี BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb และ Shanno, 1970) ช่วยประมาณค่า \mathbf{B}_{new} เพื่อใช้ในการคำนวณขั้นต่อไป

$$\mathbf{B}_{new} = \mathbf{B} + \frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T \mathbf{P}} - \frac{\mathbf{B} \mathbf{P} \mathbf{P}^T \mathbf{B}}{\mathbf{P}^T \mathbf{B} \mathbf{P}} \quad (ง-4)$$

เมื่อ \mathbf{B} เฮซเซียนเมตริกซ์ของฟังก์ชันลากรองจ์ (Hessian of the Lagrangian)

\mathbf{P} แทน เวกเตอร์ผลต่างระหว่างตัวแปรตัดสินใจขั้นตอนใหม่กับขั้นตอนเก่า

$$\mathbf{P} = \mathbf{x}_{new} - \mathbf{x} \quad (ง-5)$$

γ แทน ผลต่างของ gradient of the Lagrangian

$$\gamma = \nabla_x L(\mathbf{x}_{new}) - \nabla_x L(\mathbf{x}) \quad (ง-6)$$

และ L แทนฟังก์ชันลากรองจ์ โดยมี λ คือตัวคูณฟังก์ชันลากรองจ์

$$L = C(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^l \lambda_i h_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j g_j(\mathbf{x}) \quad (ง-7)$$

5. กลับไปขั้นที่ 2 จนกระทั่งคำตอบจะคู่เข้า โดยใช้เกณฑ์ตามสมการที่ (ง-8), (ง-9) และ (ง-10) เป็นเกณฑ์ในการหยุด

$$\frac{\|\mathbf{x}_{new} - \mathbf{x}\|}{\mathbf{x}_{new}} < \varepsilon_1 \quad (ง-8)$$

และ $|\mathbf{s}^T \nabla C| < \varepsilon_3 \quad (ง-9)$

และ $\max \{h_j(\mathbf{x}_{new})\} < \varepsilon_2$ (ง-10)
 เมื่อ ε ค่าความผิดพลาดของการคำนวณซ้ำ

เมื่อ $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ และ ε_3 เป็นค่าความผิดพลาดที่ยอมรับได้ของแต่ละเกณฑ์ โดยมีค่าเท่ากับ $1 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-4}$ และ 1×10^{-6} ตามลำดับ โดยที่

ภาคผนวก จ: ความรู้พื้นฐานเรื่องพอลิเมอร์

พอลิเมอร์ คือสารประกอบ โมเลกุลใหญ่ที่ประกอบขึ้นจากหน่วยโมเลกุลเล็กที่ซ้ำกันเป็นจำนวนมาก (โมโนเมอร์)

กลไกการเกิดพอลิเมอร์ มี 2 ลักษณะใหญ่ๆ

1. Condensation polymerization : ปฏิกิริยาสาร โมโนเมอร์ทำปฏิกิริยากันแล้วทำให้เกิดพอลิเมอร์ที่มีสายโซ่ยาวขึ้น ซึ่งมีการปล่อยสารโมเลกุลเล็กออกมาจากปฏิกิริยา ตัวอย่างเช่น PET
2. Addition polymerization : ปฏิกิริยาสาร โมโนเมอร์ที่มาทำปฏิกิริยากันจะมีการเปลี่ยนแปลงพันธะคู่ให้เป็นพันธะเดี่ยวแล้วทำให้เกิดพอลิเมอร์ที่มีสายโซ่ยาวขึ้น ตัวอย่างเช่น PMMA

สมบัติของพอลิเมอร์

การกระจายของน้ำหนักโมเลกุลบอกถึงสมบัติของผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ที่จะถูกนำไปใช้งาน ซึ่งการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลพอลิเมอร์ขึ้นอยู่กับเครื่องปฏิกรณ์เคมีที่ใช้ สถานะการดำเนินการ จึงสามารถเรียกได้ว่า พอลิเมอร์เป็น “ผลิตภัณฑ์โดยกระบวนการ”

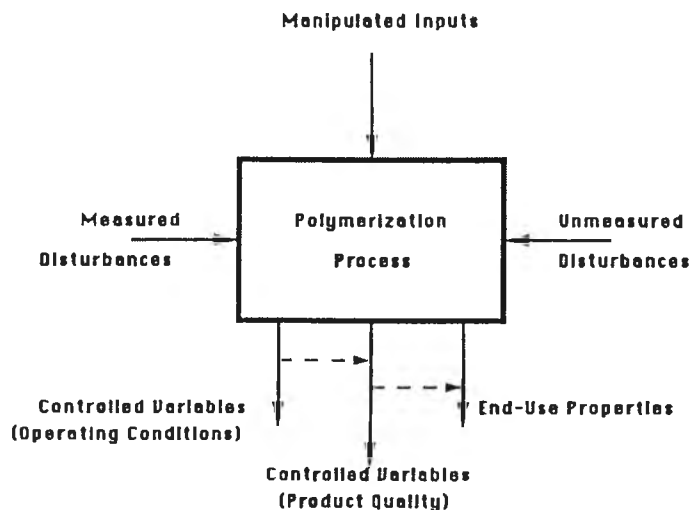
ปัจจัยสำคัญที่ทำให้เลือกดำเนินการ โดยเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์

1. เศรษฐศาสตร์: การดำเนินการในเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวนต่อเนื่องให้ผลิตภัณฑ์ที่ถูกเมื่อทำการผลิตเป็นจำนวนมากๆ แต่สำหรับเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์แล้วการผลิตจะมักจะเป็นวัสดุที่ราคาแพง
2. คุณภาพของผลิตภัณฑ์ : พอลิเมอร์หลายชนิดที่ไม่สามารถดำเนินการในเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวนต่อเนื่องให้ผลิตภัณฑ์ที่มีคุณภาพ
3. ความยืดหยุ่น : การผลิตพอลิเมอร์ในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์สามารถเปลี่ยนแปลงได้หลากหลายชนิด

นอกจากนี้ยังพบว่า ผลิตพอลิเมอร์ที่ได้จากเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ให้สารองค์ประกอบผลิตภัณฑ์ที่สม่ำเสมอดีกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวนต่อเนื่องทั้งนี้เนื่องมาจากการดำเนินการมีเรซิเดนซ์ไทม์ ผลิตพอลิเมอร์ที่ได้จากเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ยังให้ค่าพอลิดีสพอสซิติ (polydispersity) ที่ต่ำกว่าสำหรับพอลิเมอร์บางชนิด

ระบบการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์เคมีพอลิเมอร์

วัตถุประสงค์ของการสังเคราะห์พอลิเมอร์คือให้ได้ผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ที่มีสมบัติถูกต้องตรงกับสมบัติถูกนำไปใช้งาน เนื่องจากการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลพอลิเมอร์เป็นเครื่องวัดสมบัติของพอลิเมอร์ ขึ้นอยู่กับเครื่องปฏิกรณ์เคมีที่ใช้ สถานะการดำเนินการ สมบัติของพอลิเมอร์ที่ต้องการจะมีไม่ได้ถ้าไม่มีการควบคุมสถานะการดำเนินการ ซึ่งไม่สามารถจะละเลยการพิจารณาเรื่องเครื่องมือวัดและการควบคุม ก่อนอื่นพิจารณาตัวแปรระบบ ตามรูปที่ จ-1



รูปที่ จ-1 ตัวแปรระบบเครื่องปฏิกรณ์เคมีพอลิเมอร์ (Mcgravy, 1994)

ตัวแปรระบบเครื่องปฏิกรณ์เคมีพอลิเมอร์ แบ่งออกได้เป็น

1. ตัวแปรเอาต์พุต แบ่งออกได้เป็น 3 ประเภท :
 - 1 สมบัติถูกนำไปใช้งาน (end-use properties) เป็นสมบัติที่บอกถึงการนำไปใช้งาน ได้แก่ tensile strength ค่าการละลาย สี ค่าดัชนีการหักเห เป็นต้น ซึ่งสิ่งเหล่านี้ไม่สามารถทำการวัดออนไลน์ได้

- 2 ตัวแปรที่บอกถึงสมบัติของผลิตภัณฑ์ (controlled variables affecting product quality) ได้แก่ การกระจายของน้ำหนักโมเลกุล น้ำหนักโมเลกุลโดยเฉลี่ย คอนเวอร์ชัน ซึ่งส่วนใหญ่ไม่สามารถทำการวัดออนไลน์ได้
 - 3 ตัวแปรควบคุมที่บอกถึงสภาวะการดำเนินการ (controlled variables specifying operating conditions) ได้แก่ อุณหภูมิ ความดัน อัตราไหลของกระบวนการ
2. ตัวแปรอินพุทแบ่งออกเป็น 2 ประเภทหลัก ได้แก่ ตัวแปรปรับและตัวแปรรบกวน
- ตัวแปรรบกวนแบ่งออกได้เป็น
1. deterministic disturbance คือ ตัวแปรรบกวนที่รู้สาเหตุที่มา ซึ่งมักจะเกิดเป็นช่วงระยะเวลาสั้น เช่น การเปลี่ยนแปลงคุณภาพของสารป้อนในแต่ละล็อต
 2. stochastic disturbance คือ ตัวแปรรบกวนเกิดจากธรรมชาติของกระบวนการเอง เช่น ความไม่ถูกต้องของ การวัดค่าอัตราการไหลเนื่องมาจากความไม่ถูกต้องทางกล

โดยที่อินพุทประเภท ตัวแปรรบกวนไม่สามารถกำจัดได้ แต่สามารถทำการชดเชยโดยการปรับตัวแปรปรับ

การกระจายของน้ำหนักโมเลกุลบอกถึงสมบัติของผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ที่จะถูกนำไปใช้งาน ซึ่งการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลพอลิเมอร์ขึ้นอยู่กับเครื่องปฏิกรณ์เคมีที่ใช้ สภาวะการดำเนินการ จึงสามารถเรียกได้ว่า พอลิเมอร์เป็น ‘ผลิตภัณฑ์โดยกระบวนการ’

ปัจจัยสำคัญที่ทำให้เลือกดำเนินการโดยเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์

1. เศรษฐศาสตร์: การดำเนินการในเครื่องปฏิกรณ์แบบดังกล่าวต่อเนื่องให้ผลิตภัณฑ์ที่ถูกเมื่อทำการผลิตเป็นจำนวนมากๆ แต่สำหรับเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์แล้วการผลิตจะมักจะเป็นวัสดุที่ราคาแพง
2. คุณภาพของผลิตภัณฑ์: พอลิเมอร์หลายชนิดที่ไม่สามารถดำเนินการในเครื่องปฏิกรณ์แบบดังกล่าวต่อเนื่องให้ผลิตภัณฑ์ที่มีคุณภาพ
3. ความยืดหยุ่น: การผลิตพอลิเมอร์ในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์สามารถเปลี่ยนแปลงได้หลากหลายชนิด

นอกจากนี้ยังพบว่าผลิตพอลิเมอร์ที่ได้จากเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ให้สารองค์ประกอบผลิตภัณฑ์ที่สม่ำเสมอดีกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบดังกล่าวต่อเนื่องทั้งนี้เนื่องมาจากการดำเนินการ

มีเรซินซ์ใหม่ ผลิตภัณฑ์ที่ได้จากเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดซ์ยังให้ค่า polydispersity ที่ต่ำกว่าสำหรับพอลิเมอร์บางชนิด

ตารางที่ จ-1 แสดงพอลิเมอร์ทางการค้าที่ได้จากกระบวนการฟรี-เรดิคัลพอลิเมอไรเซชัน (Gulke, 1994)

Polymer or Copolymer	Method of Manufacture*	Major Uses
Polyethylene. low density	HP, B, Sol	Packaging film, wire and cable insulation, toys, flexible bottles, housewares, coatings
Poly(vinyl chloride)	B, S, Sol, E	Construction, rigid pipe, flooring, wire and cable insulation, film and sheet
Polystyrene [†]	B, S, Sol, E	Packaging (foam and film), foam insulation, appliances, housewares, toys
Polychloroprene (neoprene rubber)	E	Tires, wire coatings, belting, hoses, shoe heels, coated fabrics
Poly(methyl methacrylate)	BS	Automotive parts, molding, compositions, decorative panels, skylights, glazing
Polyacrylonitrile	S	Textile fibers, food packaging
Poly(vinyl acetate)	B, S, Sol, E	Water-based paints, adhesives, conversion to poly(vinyl alcohol)
Poly(acrylic acid) and poly(methacrylic acid)	Sol, E, HP	Adhesives, thickening agents, ionomers
Polyacrylamide	E	Thickening agent, flocculent
Polytetrafluoroethylene	HP, S, Sol	Electrical insulation, gaskets, bearings, bushings, valves, nonstick cooking utensils
Polytrichlorofluoroethylene	S, Sol	Gaskets, tubing, wire insulation
Poly(vinylidene fluoride)	S, Sol, E	Protective coatings, gaskets, pipe
Poly(vinyl fluoride)	S, Sol	Protective coatings
Allyl resins [‡]	B, Sol	Lenses, electronics parts

* HP = high pressure; B = bulk; E = emulsion; S = suspension; Sol = solution.

[†] Poly(*p*-methylstyrene) also available.

[‡] Cross-linked diallyl and triallyl esters and ethers.

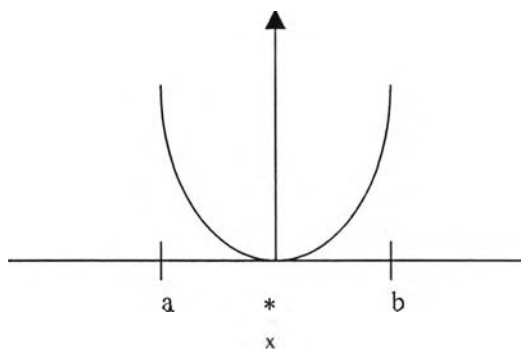
ภาคผนวก ฉ : ปัญหาการหาค่าสูงสุดต่ำสุด (White, 1977)

ปัญหาหลายปัญหาในทฤษฎีระบบ สามารถเขียนเป็นปัญหาของการหาค่าสูงสุดและค่าต่ำสุด จากนั้นจึงใช้ความรู้จากวิชาแคลคูลัสหาค่าพารามิเตอร์ ซึ่งทำให้ดัชนีสมรรถนะมีค่าสูงสุดหรือค่าต่ำสุด แล้วแต่กรณี โดยดัชนีสมรรถนะเป็นฟังก์ชันของพารามิเตอร์เหล่านี้ ในงานวิจัยนี้จะหาค่าสูงสุดและค่าต่ำแบบไม่มีเงื่อนไข (Unconstrained Optimization)

การหาค่าสุดโต่งของฟังก์ชันตัวแปรแบบไม่มีเงื่อนไข แบ่งออกเป็น

1. การหาค่าสุดโต่งของฟังก์ชันตัวแปรเดียว

ให้ $f(x)$ เป็นฟังก์ชันซึ่งมีค่าจริง เมื่อ การหาค่าของ x ซึ่งจะหาค่าต่ำสุด สามารถอธิบายได้ดังรูป



รูปที่ ฉ.1 จุดต่ำสุดเฉพาะย่าน (White, 1977)

คุณสมบัติที่สำคัญของการหาค่าต่ำสุดคือ จุดต่ำสุดเฉพาะย่าน (Local Minimum) โดยฟังก์ชัน $f(x)$ มี Local Minimum ที่จุด x^* ก็ต่อเมื่อ x เพียงจุดเดียวในช่วง (a, b)

ปัญหาการหาค่าสุดโต่งของฟังก์ชันตัวแปรเดียว

สมมติว่า $f(x)$ เป็นฟังก์ชันของ x ซึ่งมีความหมายในช่วง (a, b) และ f มีอนุพันธ์ถึงอันดับที่ n ในช่วงดังกล่าว ถ้า x^* เป็นจุดในช่วง (a, b) เมื่อ x เปลี่ยนจาก x^* ไปเป็น $x^* + \epsilon$ เราสามารถใช้ อนุกรมเทเลอร์หาค่าการเปลี่ยนแปลงของ f ได้ดังนี้

$$\nabla f = f(x^* + \epsilon) - f(x^*) = \epsilon \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x^*} + \frac{\epsilon^2}{2!} \left. \frac{d^2f(x)}{dx^2} \right|_{x=x^*} + \dots \quad (\text{ฉ-1})$$

เงื่อนไขจำเป็นที่ทำให้ x^* เป็นจุดต่ำสุดเฉพาะย่านคือ

$$1. \quad \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x^*} = 0 \quad (\text{ฉ-2})$$

$$2. \quad \left. \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right|_{x=x^*} \geq 0 \quad (\text{ฉ-3})$$

เงื่อนไขทั้งสองนี้เป็นเงื่อนไขจำเป็น ซึ่งหมายความว่า ถ้า x^* ไม่เป็นไปตามเงื่อนไขทั้งสองนี้ x^* ไม่ใช่จุดต่ำสุดเฉพาะย่าน จากนิยามของจุดต่ำสุดเฉพาะย่าน x^* เป็นจุดต่ำสุดเมื่อ x ทั้งหมดในย่านรอบจุด x^* เป็นไปตาม

$$f(x) \geq f(x^*) \quad \text{หรือ} \quad \nabla f = f(x) \geq f(x^*) \geq 0 \quad (\text{ฉ-4})$$

$$\text{หรือ} \quad \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x^*} + \frac{\epsilon^2}{2!} \left. \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right|_{x=x^*} + \dots \geq 0 \quad (\text{ฉ-5})$$

$$\text{หรือ} \quad \left. \frac{\epsilon^2}{2!} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right|_{x=x^*} \geq 0$$

เมื่อเทอมแรกมีค่าเป็นศูนย์ เนื่องจาก ϵ^2 มีค่าเป็นบวกเสมอจึงสรุปได้สมการ 1 และ 2 เป็นเงื่อนไขจำเป็นที่จะทำให้ x^* มีค่าต่ำสุดเฉพาะย่าน

2. การหาค่าสูงสุดและค่าต่ำสุดของฟังก์ชันหลายตัวแปร

สมมติว่า $f(x)$ เป็นฟังก์ชันที่ต่อเนื่องและมีอนุพันธ์อันดับสอง ซึ่งมีความหมายในช่วง (a, b) เมื่อ x เปลี่ยนจาก x^* ไปเป็น $x^* + \epsilon$ เราสามารถกระจาย $f(x)$ รอบๆ จุด x^* ด้วยอนุกรมเทเลอร์หาค่าการเปลี่ยนแปลงของ f ได้ดังนี้ ให้ $x = x^* + \delta x$

$$f(x) = f(x^* + \delta x) = f(x^*) + \left. \frac{\partial f^T(x)}{\partial x} \right|_{x=x^*} * \delta x + \frac{1}{2!} \delta x^T \left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \right|_{x=x^*} * \delta x + \dots \quad (\text{ฉ-6})$$

$$\nabla f = f(x) - f(x^*) + \left. \frac{\partial f^T(x)}{\partial x} \right|_{x=x^*} * \delta x + \frac{1}{2!} \delta x^T \left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \right|_{x=x^*} * \delta x + \dots$$

เงื่อนไขจำเป็นที่ทำให้ x^* เป็นจุดต่ำสุดเฉพาะย่านคือ

$$1. \quad \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x^*} = 0 \quad (\text{ฉ-7})$$

$$2. \quad \left. \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right|_{x=x^*} \geq 0 \quad (\text{ฉ-8})$$

เงื่อนไขทั้งสองนี้เป็นเงื่อนไขจำเป็น ซึ่งหมายความว่า ถ้า x^* ไม่เป็นไปตามเงื่อนไขทั้งสองนี้ x^* ไม่ใช่จุดต่ำสุดเฉพาะย่าน จากนิยามของจุดต่ำสุดเฉพาะย่าน x^* เป็นจุดต่ำสุดเมื่อ x ทั้งหมดในย่านรอบจุด x^* เป็นไปตาม

$$f(x) \geq f(x^*) \quad \text{หรือ} \quad \nabla f = f(x) - f(x^*) \geq 0 \quad (\text{ฉ-9})$$

หรือ
$$\nabla f \equiv f(x) - f(x^*) = \frac{1}{2} \delta x^T H_f \delta x \geq 0 \quad (\text{ฉ-10})$$

เมื่อ
$$H_f = \left. \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \right|_{x=x^*}$$

การแก้ปัญหาการหาค่าสูงสุดและค่าต่ำสุดของฟังก์ชันตัวแปรแบบไม่มีเงื่อนไข (Unconstrained Extreme)

จะใช้วิธี Lagrange Multiplier ของนายลากรองจ์โดยที่จะสร้างฟังก์ชันพิเศษขึ้นใหม่เรียกว่า Augmented cost function โดยที่ฟังก์ชันพิเศษนี้มีความสัมพันธ์กับตัวแปร x u และ λ จาก

$$L(x, u, \lambda) = \theta(x, u) + \lambda^T f(x, u) \quad (\text{ฉ-11})$$

โดยที่ $\lambda \in R^n$ คือ Lagrange Multiplier

เราต้องทำการปรับ x u และ λ เพื่อให้ฟังก์ชันวัตถุประสงค์มีค่าต่ำที่สุด โดยให้เงื่อนไขจำเป็นคือ

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 0 = \frac{\partial \theta(x, u)}{\partial x} + \frac{\partial f(x, u)}{\partial x} * \lambda \quad (\text{ฉ-12})$$

$$\frac{\partial L}{\partial u} = 0 = \frac{\partial \theta(x, u)}{\partial u} + \frac{\partial f(x, u)}{\partial u} * \lambda \quad (\text{ฉ-13})$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0 = f(x, u) \quad (\text{ฉ-14})$$

ซึ่งการแก้ปัญหา สามสมการนี้จะได้ ผลเฉลยเป็น x^* u^* และ λ^* เงื่อนไขเพียงพอคือ

- $$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x^*} = 0 \quad (\text{ฉ-15})$$

- $$P = \left. \begin{array}{cc} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial u} \\ \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial u} & \frac{\partial^2 L}{\partial u^2} \end{array} \right|_{x=x^*} \geq 0 \quad (\text{ฉ-16})$$

ในการแก้ปัญหาหา u ที่ทำให้ฟังก์ชันสมรรถนะมีค่าต่ำสุด โดยเงื่อนไขที่ 2 เป็นจริงจะให้ x^* u^* ที่ เป็นจุดต่ำสุดของฟังก์ชันสมรรถนะ และให้ x^* เป็นคำตอบของสมการ โดยเมื่อแทน u^* ทำ

ให้เกิด x^* โดยที่ $f(x, u) = 0$

สมมติ u เปลี่ยนไปเล็กน้อย เป็น u : $u = u^* + \delta u$

ทำให้ x^* เปลี่ยนแปลงไป : $x = x^* + \delta x$

λ ไม่เป็นฟังก์ชันกับ x และ u $L(x, u, \lambda) = L(x^* + \delta x, u^* + \delta u, \lambda)$

ใช้อนุกรมเทเลอร์หาการเปลี่ยนแปลงของ augment cost function ได้

$$\begin{aligned}
 &= L(x, u, \lambda) + \left. \frac{\partial L^T(x)}{\partial x} \right|_{u, \lambda} * \delta x + \left. \frac{\partial L^T(x)}{\partial u} \right|_{u, \lambda} * \delta u + \\
 &\quad \frac{1}{2!} \delta x^T \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta x + \frac{1}{2!} \delta u^T \left. \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta u \\
 &\quad + \frac{1}{2!} \delta x^T \left. \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial L}{\partial u} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta x + \frac{1}{2!} \delta u^T \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial u} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta u + \dots
 \end{aligned} \tag{ก-17}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial u} \right) = \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right) \right]^T \tag{ก-18}$$

ดังนั้น $\nabla L = L(x, u, \lambda) - L(x, u, \lambda)$ (ก-19)

$$\begin{aligned}
 &= \left. \frac{\partial L^T(x)}{\partial x} \right|_{u, \lambda} * \delta x + \left. \frac{\partial L^T(x)}{\partial u} \right|_{u, \lambda} * \delta u + \\
 &\quad \frac{1}{2!} \delta x^T \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta x + \frac{1}{2!} \delta u^T \left. \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial L}{\partial x} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta u \\
 &\quad + \frac{1}{2!} \delta x^T \left. \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial L}{\partial u} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta x + \frac{1}{2!} \delta u^T \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial u} \right) \right|_{u, \lambda} * \delta u + \dots \\
 &= \left. \frac{\partial L^T(x)}{\partial x} \right|_{u, \lambda} * \delta x + \left. \frac{\partial L^T(x)}{\partial u} \right|_{u, \lambda} * \delta u + \frac{1}{2!} \begin{bmatrix} \delta x^T & \delta u^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial u} \\ \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial u} & \frac{\partial^2 L}{\partial u^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta u \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

$$= \delta L + \delta^2 L + \dots \tag{ก-20}$$

เงื่อนไขจำเป็นคือ

$$1. \quad \delta L = \left. \frac{\partial L^T}{\partial x} \right|_{u, \lambda} * \delta x + \left. \frac{\partial L^T}{\partial u} \right|_{u, \lambda} * \delta u = 0 \tag{ก-21}$$

$$2. \quad \nabla L = L(x, u, \lambda) - L(x, u, \lambda) = \delta^2 L \tag{ก-22}$$

ดังนั้น เมื่อ δx มีขนาดน้อยๆ $\delta^2 L$ จึงมีอิทธิพลเหนือกว่า ดังนั้นจากเงื่อนไขทั้งสอง จึง

พอเพียงที่จะทำให้ x, u เป็นจุดต่ำสุดเฉพาะที่

จากปัญหาที่แก้แล้วถ้าเรานิยาม Augment vector z

$$\text{ถ้าแทน } z = \begin{bmatrix} x \\ u \\ \lambda \end{bmatrix}$$

เราจะเขียน $L(x, u, \lambda)$ ได้เป็น $L(z) = L(x, u, \lambda)$ เงื่อนไขจำเป็นใหม่คือ

$$1. \quad \frac{\partial L}{\partial z} = 0 \quad (ท-23)$$

$$2. \quad \delta^2 L = \frac{1}{2!} \delta z^T \cdot \frac{\partial^2 L}{\partial z^2} \cdot \delta z \quad (ท-24)$$

เงื่อนไขจำเป็นสำหรับจุดสูงสุดและต่ำสุดคือทอมอนูพันธ์อันดับหนึ่ง

$$\delta J = \frac{\partial \theta^T}{\partial x} * \delta x + \frac{\partial \theta^T}{\partial u} * \delta u = 0 \quad (ท-25)$$

สำหรับกรณีที่ไม่มีเงื่อนไข จะได้ว่า δx เป็นอิสระจาก δu กล่าวคือ เป็นอะไรก็ได้ทำให้ $\delta J = 0$

$$\text{จะได้ว่า } \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial \theta}{\partial u} = 0 \quad (ท-26)$$

สำหรับกรณีที่มีเงื่อนไข จะได้ว่า δx ไม่เป็นอิสระจาก δu ในกรณีที่แต่ละตัวแปรไม่เป็นอิสระ

จากกันและมีความสัมพันธ์กัน ทำให้เป็นไปตามสมการ

$$\delta f = \frac{\partial f^T(x)}{\partial x} * \delta x + \frac{\partial f^T(x)}{\partial u} * \delta u = 0 \quad (ท-27)$$

ให้ $\lambda \in \mathbb{R}^n$ เป็น Arbitrary parameter เรียกว่า Lagrange Multiplier คูณเข้าไปในสมการดังนี้

$$\text{จะได้} \quad \lambda^T \delta f = \lambda^T * \frac{\partial f^T}{\partial x} * \delta x + \lambda^T * \frac{\partial f^T}{\partial u} * \delta u = 0 \quad (ท-28)$$

$$\lambda^T \delta f = \left[\frac{\partial \theta^T}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial f^T(x)}{\partial x} \right] * \delta x + \left[\frac{\partial \theta^T}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f^T(x)}{\partial u} \right] * \delta u = 0 \quad (ท-29)$$

ดังนั้นสามารถเลือก λ เพื่อให้ทอมในวงเล็บเป็นศูนย์กล่าวคือ

$$\frac{\partial \theta^T}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial f^T(x)}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial \theta^T}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f^T(x)}{\partial u} = 0$$

$$\text{จะได้} \quad \begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial L}{\partial u} &= 0 \end{aligned} \quad (ท-30)$$

เงื่อนไขทั้งสองนี้เป็นเงื่อนไขจำเป็นที่ทำให้ x และ u สอดคล้อง มีโอกาสที่จะเป็นจุดต่ำสุดของฟังก์ชันสมรรถนะ

$$\delta^2 L = \frac{1}{2!} \delta z^T \cdot \frac{\partial^2 L}{\partial z^2} \cdot \delta z$$

ภาคผนวก ช : การประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์ (State and Parameter Estimation)

หลักการการประมาณค่าด้วยตัวกรองคาลมาน ดันแบบมาจากวิธีค่ากำลังสองน้อยที่สุด (least square approach) โดยการประมาณค่า x เพื่อหาค่าการประมาณที่ดีที่สุด (\hat{x}) เพื่อที่จะลดผลรวมน้ำหนักยกกำลังสองให้น้อยที่สุด :

$$s = a(\hat{x} - x_0)^2 + b(y - c\hat{x})^2 \quad (\text{ข.1})$$

โดยที่ a และ b คือ ค่าถ่วงน้ำหนัก
 x_0 และ y คือ ค่าการคาดหมาย และค่าการวัด ตามลำดับ

สุดท้ายจะได้ว่า

$$\hat{x} = x_0 + \frac{bc}{a+bc^2}(y - cx_0) \quad \text{หรือ} \quad \hat{x} = x_0 + k(y - cx_0) \quad (\text{ข.2})$$

เมื่อ $\frac{bc}{a+bc^2}$ คือค่าเกน (Gain)

ซึ่งต่อมาจะใช้ความรู้ของความไม่แน่นอนที่เกี่ยวข้องกับ x และ y แทน เป็นที่มาของตัวกรองคาลมานคือ วิธีหลักการของการความแปรปรวนต่ำสุด (Minimum Variance approach) โดยในการประมาณค่าแต่ละครั้งโดยอาศัยค่าที่วัดได้ที่เชื่อถือได้จะสามารถลดค่าความไม่แน่นอนของการประมาณลงได้

ตารางที่ ช-1 ขั้นตอนในการหาค่าสเททที่ไม่สามารถวัดได้และพารามิเตอร์ที่ไม่แน่นอน

ขั้นตอน	คำอธิบาย
1	เขียนสมการสเททใหม่ในรูปแบบสเททสเปซ
2	ระบบสามารถสังเกตได้
3	แปลงสมการสเททไปอยู่ในรูปดีสคริต
4	แทนสมการในรูปดีสคริตลงไปในการคาลมานฟิลเตอร์ โดยกำหนด P_0 , Q , R และค่าการวัดที่เชื่อถือได้
5	ปรับปรุงค่าการประมาณทุกครั้งโดยใช้ค่าการวัดค่าใหม่



ประวัติผู้เขียน

นางสาวสุพัตรา ทองมีสี เกิดเมื่อวันที่ 6 พฤศจิกายน พ.ศ. 2517 อำเภอเมือง จังหวัดเพชรบูรณ์ สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรีวิทยาศาสตร์บัณฑิต สาขาเคมี ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ในปีการศึกษา 2539 และเข้าศึกษาต่อในหลักสูตร วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีพ.ศ. 2541