

การสร้างแบบจำลองและการควบคุมกระบวนการกลั่นแบบกะโดยใช้ข่ายงานนิวรัล

นางสาวอาภาวดี เดชาละม้าย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2549

ISBN 974-14-3406-5

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

๒๕๔๙๐๕๖๕๖

MODELING AND CONTROL OF BATCH DISTILLATION PROCESS
BY NEURAL NETWORK APPROACH

Miss Arbhawadee Deachalamai

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering Program in Chemical Engineering

Department of Chemical Engineering

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

Academic year 2006

ISBN 974-14-3406-5

Copyright of Chulalongkorn University

492152

อภาวดี เดชาละมัย : การสร้างแบบจำลอง และการควบคุมกระบวนการกลั่นแบบกะโดยใช้
 ข่ายงานนิวรัล. (MODELING AND CONTROL OF BATCH DISTILLATION
 PROCESS BY NEURAL NETWORK APPROACH) อ. ที่ปรึกษา : รศ.ดร. ไพศาล
 กิตติศุภกร จำนวนหน้า 101 หน้า. ISBN 974-14-3406-5.

กระบวนการกลั่นแบบกะซึ่งเป็นกระบวนการแยกแบบหนึ่งที่ถูกใช้ในหลายอุตสาหกรรม โดยเฉพาะอุตสาหกรรมการผลิตอาหาร ยา และสารเคมี นั้นมีพฤติกรรมที่ซับซ้อน และไม่เป็นเชิงเส้น ดังนั้นจึงเป็นประเด็นที่น่าสนใจในการหาแบบจำลองที่มีความน่าเชื่อถือ และระบบควบคุมที่เหมาะสม ในงานวิจัยนี้ ได้นำข่ายงานนิวรัลชนิดป้อนไปข้างหน้าแบบ โครงสร้างหลายชั้นมาประยุกต์ใช้สำหรับการหาแบบจำลอง และการควบคุมกระบวนการกลั่นแบบกะ โดยงานวิจัยนี้แบ่ง ออกเป็นสองส่วนคือ การประยุกต์ใช้เพื่อจำลองพฤติกรรมของกระบวนการ และการประยุกต์ใช้สำหรับระบบควบคุม

ในส่วนแรกพบว่าข่ายงานนิวรัลแบบ โครงสร้างที่มีชั้นซ่อนสองชั้นสามารถแทนพฤติกรรมของกระบวนการ ได้ดีกว่าข่ายงานที่มีโครงสร้างชั้นซ่อนหนึ่งชั้น อีกส่วนเป็นการสร้างตัวควบคุมแบบ โมเดลพรีดิกทีฟโดยอาศัยแบบจำลองจากการฝึกข่ายงานนิวรัลเพื่อควบคุมส่วนประกอบของ Cyclohexane ที่ยอดหอ พบว่าตัวควบคุมให้ผลการตอบสนองที่ดีสำหรับการควบคุมเพื่อตามรอยของ ส่วนประกอบของ Cyclohexane ซึ่งได้มาจากการจำลองกระบวนการกลั่นแบบกะภายใต้เงื่อนไขของ อัตราการป้อนกลับออปติมอล นอกจากนี้ ตัวควบคุมให้ความสามารถของการทนทานในการตามรอย ภายใต้ความผิดพลาดของกระบวนการหรือแบบจำลอง

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
 สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
 ปีการศึกษา 2549

ลายมือชื่อนิสิต...อภาวดี เดชาละมัย.....
 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา...ไพศาล กิตติศุภกร.....

4670748021 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD : BATCH DISTILLATION / NEURAL NETWORK / MODELING /
MODEL BASED CONTROL

ARBHAWADEE DEACHALAMAI : MODELING AND CONTROL OF
BATCH DISTILLATION PROCESS BY NEURAL NETWORK APPROACH.
THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. PAISAN KITTISUPAKORN, Ph.D.,
101 pp. ISBN 974-14-3406-5.

Batch distillation, one of separation processes used in many industries, especially food, pharmaceuticals, and fine chemicals, is inherently complex and nonlinear dynamic behavior and is therefore very attractive issues in determining reliable models and appropriate control systems. In this work, a multilayer feedforward neural network is applied for modeling and control of a batch distillation process. This work is divided into two sections: *system modeling*, and *control system* applications.

In the first one, it can be seen that the network with two hidden layers is able to represent the process behavior better than that with only one layer. In the other one, a model predictive controller based on neural network models is formulated to control the cyclohexane composition at the top plate. It can be seen that the controller provides good control response for tracking the cyclohexane composition determined by an optimization approach of batch distillation process under an optimal reflux ratio condition. Moreover, the controller gives robust tracking capability under plant/model mismatch.

Department: Chemical Engineering
Field of Study: Chemical Engineering
Academic Year 2006

Student's Signature: Arbhawadee Deachalamai
Advisor's Signature: paisan Kittisupakorn

ACKNOWLEDGEMENTS

Many people assisted me in this work. Without this help the results now obtained would not have been.

First, I would like to thank my advisor, Associate Professor Paisan Kittisupakorn, Ph.D., who provides me valuable guidance and suggestions over the three years. I would also like to thank Professor Associate Tharathon Mongkhonsi, Ph.D., Akawat Sirisuk, Ph.D., and Amornchai Arpornwichanop, D.Eng. for serving on my thesis committee and providing valuable recommendations for improvement of this thesis.

Special thanks are extended to all members of Control and Systems engineering Laboratory in the Department of Chemical Engineering, Chulalongkorn University for their help, with friendly and great care, solving arising problems when working on the simulation of the entire this research.

Finally, the most special and importance persons, I am grateful and thankful to my family and my beloved friends for all of their support and encouragement.

TABLE OF CONTENTS

	PAGE
ABSTRACT IN THAI.....	iv
ABSTRACT IN ENGLISH.....	v
ACKNOWLEDGEMENTS.....	vi
TABLE OF CONTENTS.....	vii
LIST OF FIGURES.....	xi
LIST OF TABLES.....	xii
NOMENCLATURES.....	xiii
CHAPTER I INTRODUCTION.....	1
1.1 Batch Distillation.....	2
1.2 Neural Network.....	2
1.3 Model Predictive Control.....	2
1.4 Research Objectives.....	3
1.5 Scopes of Research.....	3
1.6 Contributions.....	4
1.7 Overview of This Thesis.....	4
CHAPTER II LITURATURE REVIEWS.....	5
2.1 Batch Distillation.....	5
2.1.1 Batch Distillation Modeling.....	5
2.1.2 Optimization Problem.....	6
2.2 Neural Networks.....	7
2.2.1 Neural Network Modeling.....	7
2.2.2 Neural Network Model Predictive Control.....	8

TABLE OF CONTENTS

	PAGE
2.3 Model Predictive Control	9
CHAPTER III METHODOLOGY.....	12
3.1 Batch Distillation	12
3.1.1 Conventional System	12
3.1.2 Operation Periods.....	13
3.1.3 Operation Control	14
3.1.4 Mathematical Model	15
3.1.5 Optimization Problem.....	15
3.2 Neural Network	16
3.2.1 Biological Neurons	16
3.2.2 Artificial Neurons	17
3.2.3 Neural Network Models.....	18
3.2.4 Multilayer Feedforward Neural Networks.....	24
3.2.5 Backpropagation Neural Networks.....	25
3.2.6 Neural Network Applications in Control System	27
3.3 Model Predictive Control	28
CHAPTER IV SYSTEM MODELING APPLICATION.....	30
4.1 Batch Distillation Process.....	30
4.1.1 Problem Definition and Simulation	31
4.1.2 Simulation Results	34
4.2 Neural Network Modeling.....	37
4.2.1 Neural Network Design	39

TABLE OF CONTENTS

	PAGE
4.2.2 Performance Evaluation.....	40
4.2.3 Results and Discussions.....	41
CHAPTER V CONTROL SYSTEM APPLICATION	47
5.1 Off-line System.....	49
5.1.1 Dynamic Optimization.....	49
5.1.2 Process Simulation.....	56
5.2 On-line System	57
5.2.1 NNMPC Controller.....	57
5.2.2 BD Control Using NNMPC Controller.....	64
CHAPTER VI CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS.....	77
6.1 Conclusions.....	77
6.2 Recommendations.....	78
REFERENCES	79
APPENDICES.....	83
APPENDIX A A RIGOROUS BATCH DISTILLATION MODEL.....	84
APPENDIX B NEURAL NETWORK LEARNING ALGORITHM	95
APPENDIX C PHYSICAL PROPERTY	99
VITA	101

LIST OF FIGURES

	PAGE
Figure 3.1	A flow schematic for a conventional batch distillation system 12
Figure 3.2	A temperature control schematic for a batch distillation system 14
Figure 3.3	An ideal biological neuron..... 16
Figure 3.4	An artificial neuron 17
Figure 3.5	An artificial single-input neuron model 18
Figure 3.6	A multi-input neuron..... 21
Figure 3.7	The abbreviated notation of a multiple-input neuron..... 22
Figure 3.8	A layer of S neurons 22
Figure 3.9	Two layers network..... 23
Figure 3.10	A multilayer feedforward neural network..... 24
Figure 3.11	A back propagation neural network..... 25
Figure 3.12	Plant identification 27
Figure 3.13	Neural network model predictive control 28
Figure 3.14	Basic concept for model predictive control 29
Figure 4.1	The composition profiles in start-up period 32
Figure 4.2	The composition profiles in production period..... 33
Figure 4.3	Simulation result of the base case..... 35
Figure 4.4	Neural network configuration for modeling process 38
Figure 4.5	Training, validation, and test performances..... 41
Figure 4.6	Comparison of output profiles calculated from the mathematical model and the NN model with two hidden layers (16 – 6 – 4 – 2) 46

LIST OF FIGURES

		PAGE
Figure 5.1	Control system block diagram	48
Figure 5.2	Process response from using a constant optimal reflux profile	52
Figure 5.3	Process response from using two constant optimal reflux profile	53
Figure 5.4	Process response from using four constant optimal reflux profile	54
Figure 5.5	Process response from using eight constant optimal reflux profile	55
Figure 5.6	Response of cyclohexane composition at the condenser used the optimal reflux profile with eight constant.....	56
Figure 5.7	Multilayer NN with two hidden layers representing the model in NNMPC controller.....	59
Figure 5.8	Comparison of output profiles calculated from the mathematical model and the NN model in NNMPC controller (12 – 10 – 10 – 7)	63
Figure 5.9	Response of Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the nominal condition.....	68
Figure 5.10	Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the NN model mismatch condition	69
Figure 5.11	Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the process mismatch condition : + 30% of V_1	70
Figure 5.12	Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the process mismatch condition : - 30% of V_1	71
Figure 5.13	Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the process mismatch condition : + 30% of H_C	72

LIST OF FIGURES

	PAGE
Figure 5.14 Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the process mismatch condition : - 30% of H_C	73
Figure 5.15 Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the process mismatch condition : + 30% of H_j	74
Figure 5.16 Response of reflux ratio (a) and cyclohexane composition (b) under the process mismatch condition : - 30% of H_j	75

LIST OF TABLES

	PAGE
Table 2.1 Summary of the past work on optimization problem of batch distillation	7
Table 2.2 Applications of neural network.....	8
Table 2.3 The effects of control parameters on control performance.....	11
Table 3.1 Sample of transfer function.....	20
Table 3.2 Effect of values of design parameters.....	26
Table 4.1 Nominal operating conditions of the batch distillation column.....	31
Table 4.2 The components of neural network design	40
Table 4.3 Effect of number of nodes in a hidden layer on the MSE obtained with the training and validation sets	43
Table 4.4 Effect of number of hidden nodes in two hidden layer on the MSE obtained with the training and validation sets.....	44
Table 4.5 The percentage of RAE of the simulation results of NN model with two hidden layers (16-6-4-2) compared with the base case results	45
Table 5.1 The amount of product and that composition using optimal reflux policies with different time intervals.	51
Table 5.2 Effect of the number of hidden nodes in two hidden layer representing the model in NNMPC controller on the MSE obtained with the training, validation, and test sets.....	60

LIST OF TABLES

	PAGE
Table 5.3 The percentage of RAE of the simulation results of NN model in NNMPC controller (12-10-10-7) compared with the base case results	62
Table 5.4 The performance of NNMPC for tracking the cyclohexane composition under different conditions	76

NOMENCLATURES

NOMENCLATURE

A, B, C, D, E	Regression coefficients for chemical compound
C	The set of constant parameters
C_p	Heat capacity (J/mol·K)
F	Initial feed (kmol)
H	Liquid holdup (kmol)
J	The objective function
N_p	The number of plates
N_C	The number of components
$N_{PREDICT}$	The output prediction horizon
$N_{CONTROL}$	The manipulated variables horizon
P	Column pressure (mmHg)
R	The number of input
U	The set of control variables
V	Vapor flow (kmol/hr)
S	The number of neurons
T	Temperature (K)
T_B	Boiling point temperature (K)

NOMENCLATURES

NOMENCLATURE

T_C	Critical temperature (K)
T_P	Plate temperature (K)
$T_{P,PROCESS}$	Temperature of process
X	The set of all state variables
X'	Time derivative of x
W_1	Weighting factor on the output error
W_2	Weighting factor on the rates of manipulated variables
W	Weight matrix
a	Output signal
\mathbf{a}	Output vector
b	Threshold or bias weight
\mathbf{b}	Bias weight vector
d	Sampling time
f	Activation function
n	Number of data
p	Input signal
\mathbf{p}	Input vector

NOMENCLATURES

NOMENCLATURE

r	Internal reflux ratio [0 1]
r_{GUESS}	The initial guess of reflux ratio profile
r_L	Lower bounds of the reflux ratio
$r_{OPTIMAL}$	The optimal reflux ratio profile
r_U	Upper bounds of the reflux ratio
t_F	Batch time of operation
$x_{D1,PROCESS}$	Top composition of the process
r_{MV}	The reflux ratio used as the manipulated variable
t	Time (hr)
t_F	Batch time (hr)
u	The input of process
u'	The optimization variables
w	Weight
x_{A1}	The purity of accumulated product (molefraction)
x_{A1}^*	The specified purity of accumulated product (molefraction)
x_D	Liquid composition at condenser (molefraction)
x_{D1}	Top composition of Cyclohexane (molefraction)

NOMENCLATURES

NOMENCLATURE

$x_{D1,SETPOINT}$	The setpoint profile
x_{D2}	Top composition of n-Heptane (molefraction)
y_{ACTUAL}	The actual value from the mathematical model
y_M	The output of model prediction
y_{NN}	The output value from neural network model
$y_{PROCESS}$	The output of actual process
$y_{SETPOINT}$	Output setpoint
z	Feed composition (molefraction)
ΔH°	Enthalpy of formation (kJ/mol)

SUPERSCRIPTS

L	Liquid
V	Vapor
SAT	Saturated

SUBSCRIPTS

A	Accumulator
$ACTUAL$	Actual value(Mathematical model)

NOMENCLATURES

SUBSCRIPTS

C	Condenser
F	Final
L	Lower
M	Model
NN	Neural network
$SETPOINT$	Setpoint profile
P	Plate
$PROCESS$	Process
R	Reboiler
U	Upper
MV	Manipulated variable
i	Component number (1, N_C)
j	Plate number
n	Plate number (1, N_P)

GREEK LETTER

ξ	Net input
ξ	Net input vector

NOMENCLATURES

GREEK LETTER

Σ Summation function

ACRONYM

ANN Artificial Neural Network

BD Batch Distillation

BP Backpropagation

CSTR Continuous Stirred Tank Reactor

DAEs Differential and algebraic equations

DMC Dynamic Matrix Control

EKF Extended Kalman Filter

GPC Generalized Predictive Control

IDCOM Identification Command

IAE Integral absolute error

MFFN Multilayer Feedforward Network

MSE Mean square error

MPC Model Predictive Control

NN Neural Network

NNMPC Neural Network Model Predictive Control

NOMENCLATURES

ACRONYM

ODEs	Ordinary differential equations
RAE	Relative absolute error
TT	Temperature Transmitter
TC	Temperature Control
SQP	Sequential Quadratic Programming