

การประยุกต์ตัวควบคุมแบบเจเนริกโมเดล สำหรับ
เครื่องปฏิบัติการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์



นางสาว นุศรา บุญประเสริฐ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษา ตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2542

ISBN 974-333-657-5

ลิขสิทธิ์ของ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

GENERIC MODEL CONTROLLER APPLICATION FOR POLYVINYL CHLORIDE
POLYMERIZATION REACTOR

Miss Nussara Boonprasert

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

Department of Chemical Engineering

Faculty of Engineering

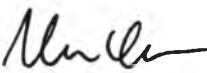
Chulalongkorn University

Academic Year 1999


ISBN 974-333-657-5


หัวข้อวิทยานิพนธ์ การประยุกต์ตัวควบคุมแบบเจเนติก โมเดล สำหรับเครื่องปฏิกรณ์การเกิด
โพลีไวนิล คลอไรด์
โดย นางสาว นุศรา บุญประเสริฐ
ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ไพศาล กิตติศุภกร


คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการ
ศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต



..... คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์
(ศาสตราจารย์ ดร. สมศักดิ์ ปัญญาแก้ว)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์


..... ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร. อูรา ปานเจริญ)


..... อาจารย์ที่ปรึกษา
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ไพศาล กิตติศุภกร)


..... ที่ปรึกษาร่วม
(นายพงษ์พันธ์ เชื้อเจริญประกิจ)


..... กรรมการ
(อาจารย์ ดร. มนตรี วงศ์ศรี)

นุศรา บุญประเสริฐ : การประยุกต์ตัวควบคุมแบบเจเนริกโมเดล สำหรับเครื่องปฏิกรณ์
การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ (GENERIC MODEL CONTROLLER APPLICATION FOR
POLYVINYL CHLORIDE POLYMERIZATION REACTOR) อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วย
ศาสตราจารย์. ดร. ไพศาล กิตติศุภกร : 113 หน้า. ISBN 974-333-657-5

ในกระบวนการอุตสาหกรรมทางเคมี อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เป็นค่าพารามิเตอร์สำคัญที่มีอิทธิพลต่อคุณภาพ
ของผลิตภัณฑ์และประสิทธิภาพของกระบวนการผลิต อย่างไรก็ตามกระบวนการ โพลีเมอไรเซชันทางเคมีของการเกิด
พอลิเมอร์ส่วนใหญ่มีแบบจำลองที่มีความไม่เป็นเชิงเส้นสูงและกระบวนการมีความว่องไวต่อการเปลี่ยนแปลงค่า
พารามิเตอร์ ส่งผลให้ทำการควบคุมกระบวนการได้ยาก โดยเฉพาะอย่างยิ่งกระบวนการในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ของ
การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์แบบคายความร้อน การควบคุมอุณหภูมิเป็นสิ่งที่ยากมากเพราะมีความร้อนเกิดมาจากการเกิดปฏิกิริยา
และสมบัติของพอลิเมอร์ที่เปลี่ยนแปลงตลอดเวลา นอกจากนี้ พารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับเครื่องปฏิกรณ์ อย่างเช่น
ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวมลดลงและค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาที่ไม่ทราบค่าแท้จริงหรือมีค่าที่ไม่คงที่
พฤติกรรมดังกล่าวก่อให้เกิดปัญหาคือทำให้ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์มีโอกาสเกิดการ โอเวอร์ชูตสูงที่ผ่านมาเทคนิค
การควบคุมแบบพีไอดียังไม่สามารถทำการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ของกระบวนการทางเคมีให้เข้าสู่จุด
เซ็ทพอยท์ได้โดยปราศจากการเกิด โอเวอร์ชูต

งานวิทยานิพนธ์นี้ได้นำเสนอการประยุกต์ใช้การควบคุมแบบเจเนริกโมเดล (จีเอ็มซี) ในการควบคุมอุณหภูมิของ
เครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ของปฏิกิริยาการเกิด โพลีไวนิล คลอไรด์แบบคายความร้อนเป็นที่ทราบกันดีว่าการควบคุมแบบ
จีเอ็มซีนี้อาจเหมาะสำหรับควบคุมแบบจำลองของกระบวนการที่เป็นเชิงเส้นหรือไม่เป็นเชิงเส้นก็ได้ เพราะสามารถใช้งาน
ได้โดยกำหนดผลตอบสนองได้ โดยไม่ต้องทำแบบจำลองให้เป็นเชิงเส้นเสียก่อนทำให้สามารถรับประกันเสถียรภาพของ
ระบบได้ครบเท่าที่แบบจำลองของกระบวนการสามารถที่จะเป็นตัวแทนของระบบได้อย่างถูกต้องและมีความน่าเชื่อถือ

เนื่องจากการควบคุมแบบจีเอ็มซีใช้แบบจำลองของระบบในการคำนวณการควบคุม จึงมีการนำเทคนิคการ
ประมาณค่าสเตทและพารามิเตอร์มาใช้ร่วมกับการควบคุมแบบจีเอ็มซีในการประมาณค่าสเตทและพารามิเตอร์ที่ไม่สามารถ
วัดค่าได้ ในงานวิทยานิพนธ์นี้ได้ทำการประยุกต์ใช้ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีร่วมกับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจาก
ปฏิกิริยาควบคู่ไปด้วย โดยการควบคุมแบบจีเอ็มซีให้ผลการควบคุมที่ดีกว่าแบบพีไอดี นอกจากนี้ยังมีการทดสอบ
สมรรถนะความทนทานของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีเปรียบเทียบกับแบบพีไอดีโดยนำไปทดสอบกับแบบจำลองที่มีความผิด
พลาดของพารามิเตอร์และโมเดล

ภาควิชา ...วิศวกรรมเคมี.....
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี.....
ปีการศึกษา2542.....

ลายมือชื่อนิสิต
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา
ลายมือชื่อที่ปรึกษาร่วม

3970854821 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

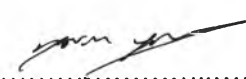
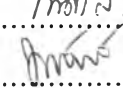
KEYWORD : PROCESS CONTROL: VINYL CHLORIDE POLYMER REACTOR.

NUSSARA BOONPRASERT : GENERIC MODEL CONTROLLER APPLICATION FOR POLYVINYL CHLORIDE POLYMERIZATION REACTOR. THESIS ADVISOR : ASSIST . PROF.PAISAN KITTISUPRAKORN,Ph.D.113 pp. ISBN 974-333-657-5

In chemical industrial processes, the temperature of a reactor is an important parameter influencing on the quality of product and process's efficiency. However, most chemical polymerization processes have nonlinear models and exhibit strong parametric sensitivity resulting in the difficulty of process control, especially for the process of an exothermic batch polyvinyl chloride polymerization reactor. This is because the heat released of an exothermic reaction and polymer properties change all the time. In addition, parameters involved in the reactor such as, heat transfer coefficient and heat of reactions are not known exactly or uncertain. These oftently cause reactor temperature's overshoot even though it is controlled by a conventional PID controller. In other words, oftently a PID controller cannot control the reactor temperature at a desired set point without any overshoot.

This thesis presents the application of Generic Model Control (GMC) to control the temperature of a batch polyvinyl chloride polymerization reactor. It is well-known that the GMC is simple and can be applied to control linear and nonlinear processes. This is because the GMC can incorporate the nonlinear model of a reactor in its control formulation. In addition the GMC controller can gauranty the steady state of a system which has a reliable process model.

Since the GMC control formulation uses the model of a system to determine a control action, state and parameter estimation techniques are involved to estimate unknown/uncertain states and parameters of the system. In this work, heat released of reactions is needed in the GMC formulation but not available for measurement, on-line heat released estimator is used to estimate the heat released of the reactions. With these estimates, the GMC controller can give better control performance than the PID controller does. Furthermore, the GMC controller is more robust than the PID controller in the presence of plant/model mismatches.

ภาควิชา ...วิศวกรรมเคมี.....	ลายมือชื่อนิติดี	
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี.....	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา	วิทวัส ก่อสร้อยแก้ว
ปีการศึกษา2542.....	ลายมือชื่อที่ปรึกษาร่วม	



กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ก่อเกิดขึ้นและสำเร็จได้เนื่องจากความกรุณาสนับสนุนอย่างยิ่ง จาก ท่านอาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ไพศาล กิตติสุขกร ซึ่งท่านได้สละเวลาให้คำปรึกษา แนะนำแนวทางการวิจัย รวมถึงการให้ความช่วยเหลือในการแก้ไขปัญหาต่างๆ ที่เกิดขึ้นด้วยดีตลอดมาจนทำให้งานวิทยานิพนธ์นี้สามารถเสร็จสมบูรณ์ได้ ผู้จัดทำจึงขอขอบพระคุณอาจารย์ที่ปรึกษาเป็นอย่างสูงมา ณ ที่นี้

ขอขอบพระคุณ คณะอาจารย์ที่สละเวลาและให้เกียรติมาเป็นคณะกรรมการในการสอบ ซึ่งประกอบด้วย ประธานกรรมการ รศ. ดร. อูรา ปานเจริญ กรรมการ และ อาจารย์ ดร. มนตรี วงศ์ศรี ซึ่งท่านให้ข้อคิดเห็นที่เป็นประโยชน์ ทำให้งานวิทยานิพนธ์ฉบับนี้สมบูรณ์ยิ่งขึ้น

ขอขอบคุณพงพันธ์ เชาว์เจริญประกิจ ที่ช่วยอนุเคราะห์ทางด้านข้อมูลจากโรงงานและมีส่วนสนับสนุน ให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงด้วยดี

ขอขอบคุณเพื่อนพ้องรวมถึงรุ่นพี่และรุ่นน้อง ที่ภาควิชาวิศวกรรมเคมี สำหรับความช่วยเหลือทุกด้าน ขอขอบคุณเพื่อนๆ พี่ น้อง และญาติสนิทที่ให้กำลังใจที่ดีในการศึกษาตลอดมา

สุดท้ายนี้ ขอกราบขอบพระคุณบิดาและมารดาของผู้จัดทำวิทยานิพนธ์ เป็นอย่างสูง ที่ช่วยเหลือเป็นกำลังใจ และเป็นทุกสิ่งทุกอย่างตลอดมา จนลูกสามารถจัดทำวิทยานิพนธ์นี้เสร็จสมบูรณ์ได้ด้วยดี

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญรูปภาพ.....	ญ
สารบัญตาราง.....	๗
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 คำนำ.....	1
1.2 ความสำคัญและที่มาของการทำวิทยานิพนธ์.....	2
1.3 วัตถุประสงค์.....	3
1.4 ขอบเขตของงานวิจัย.....	3
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับ.....	4
1.6 ขั้นตอนการทำวิทยานิพนธ์.....	4
บทที่ 2 ทฤษฎีขั้นพื้นฐาน.....	5
2.1 ชนิดของเครื่องปฏิกรณ์ที่นิยมใช้ในอุตสาหกรรม.....	5
2.2 ผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	9
2.2.1 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับตัวควบคุมที่ใช้แบบจำลองเป็นพื้นฐาน.....	9
2.2.2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องการประยุกต์ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีสำหรับเครื่อง ปฏิกรณ์ เคมีแบบแบทช์.....	13
2.2.3 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ เคมีแบบแบทช์.....	14
2.3 แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ที่เกี่ยวข้อง.....	16
2.4 การควบคุมอุณหภูมิเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์.....	21
บทที่ 3 การควบคุมแบบเจเนริกโมเดลหรือตัวควบคุมจีเอ็มซี.....	23
3.1 เทคนิคการควบคุมแบบเจเนริกโมเดล(จีเอ็มซี).....	23

3.2	การควบคุมแบบจีเอ็มซีร่วมกับการประมาณค่าสเตทและพารามิเตอร์.....	25
3.3	การประยุกต์ใช้การควบคุมแบบจีเอ็มซีในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์.....	25
3.4	การจูนการควบคุมแบบจีเอ็มซี.....	30
3.5	การประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา.....	32
3.5.1	งานวิจัยที่มีการนำเอาจีเอ็มซีมาใช้ควบคุมการประมาณความร้อน.....	34
3.6	การทดสอบสมรรถนะหาความทนทาน.....	34
3.6.1	งานวิจัยที่มีการทดสอบสมรรถนะหาความทนทานของจีเอ็มซี.....	35
บทที่ 4	กระบวนการของปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	37
4.1	ประวัติความเป็นมา.....	37
4.2	กระบวนการที่เกี่ยวข้อง.....	37
4.2.1	วัตถุดิบที่ใช้ในการผลิต.....	38
4.2.2	เทคนิคที่ใช้ในการเตรียมโพลีไวนิล คลอไรด์.....	38
4.2.3	งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาของการเกิดโพลีเมอไรเซชันแบบขั้น.....	39
4.3	งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	45
4.4	กระบวนการผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์ในอุตสาหกรรม.....	47
4.5	ลักษณะการนำไปใช้งานผลิตภัณฑ์.....	48
4.6	คุณสมบัติที่สำคัญ.....	49
4.7	ผลงานการวิจัยการออกแบบจำลองของปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	49
4.7.1	การศึกษาแบบจำลองของปฏิกิริยาของ C. Kiparissides.....	49
4.7.2	จลนศาสตร์ของปฏิกิริยา.....	52
4.7.3	อัตราการเกิดปฏิกิริยา คูลพลังงาน และคูลมวลสาร.....	53
4.7.4	การจำลองเครื่องปฏิกรณ์.....	55
4.7.5	วิธีการจำลองของงานวิจัยที่นำมาอ้างอิง.....	59
4.7.6	ผลการจำลองของงานวิจัยที่นำมาอ้างอิง.....	60
4.7.7	สรุปผลการจำลองของงานวิจัยที่นำมาอ้างอิง.....	64
บทที่ 5	การจำลองกระบวนการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์	66

5.1	กระบวนการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	66
5.2	การวิเคราะห์กระบวนการของเครื่องปฏิกรณ์การเกิดปฏิกิริยาโพลี ไวนิล คลอไรด์	66
5.2.1	สมการดุลมวลสาร.....	72
5.2.2	สมการดุลความร้อนของเครื่องปฏิกรณ์.....	73
5.2.3	สมการดุลความร้อนของแจ็กเก็ตรอบเครื่องปฏิกรณ์.....	74
5.3	ขั้นตอนการผลิตโพลีไวนิลคลอไรด์.....	77
5.4	การประยุกต์การควบคุมแบบจีเอ็มซีมาใช้ในการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	77
5.5	การปรับสมการให้อยู่ในรูปของอัลกอริทึมของจีเอ็มซี.	79
5.6	การจูนตัวควบคุมและพารามิเตอร์ที่ใช้ในการจูน.....	81
5.7	การประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา.....	81
5.8	การทดสอบสมรรถนะความทนทานของตัวควบคุม.....	83
บทที่ 6	ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง.....	85
6.1	การวิเคราะห์ความน่าเชื่อถือของแบบจำลอง.....	85
6.1.1	ผลการควบคุมโดยใช้แบบจำลองเทียบกับผลงานวิจัยของ C. Kiparissides	85
6.2	การศึกษาการควบคุมแบบจีเอ็มซีที่สภาวะการดำเนินการปกติ.....	87
6.2.1	การวิเคราะห์ควบคุมแบบจีเอ็มซีที่สภาวะการดำเนินการปกติ.....	89
6.3	การศึกษาการควบคุมแบบจีเอ็มซีที่สภาวะการดำเนินการผิดปกติ.....	90
6.3.1	การวิเคราะห์ควบคุมแบบจีเอ็มซีที่สภาวะการดำเนินการผิดปกติ.....	96
6.3.2	การวิเคราะห์ควบคุมแบบจีเอ็มซีที่เปรียบเทียบกับระบบจริง.....	96
บทที่ 7	สรุปผลและข้อเสนอแนะ.....	98
7.1	สรุปผลการตอบสนองการเปรียบเทียบผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีกับพีไอดี.....	99
7.2	สรุปการวิเคราะห์ความน่าเชื่อถือของแบบจำลอง.....	99
7.3	ข้อเสนอแนะ.....	100
รายการอ้างอิง.....		101
ภาคผนวก ก.การปรับจูนค่าพารามิเตอร์สำหรับการควบคุมแบบพีไอดี.....		104

ภาคผนวก ข. ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีและแบบพีไอดีที่ได้จากการจำลอง.....	107
ภาคผนวก ค. ผลการควบคุมแบบพีไอดีที่บันทึกจากระบบจริง.....	111
ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์.....	113

สารบัญรูปร่างภาพ

หน้า

รูปที่ 2.2	วงจรการดำเนินการกระบวนการแบบเบทซ์.....	6
รูปที่ 2.3	ไดอะแกรมระบบการทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์.....	6
รูปที่ 2.4	โปรไฟล์ของอุณหภูมิที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์.....	17
รูปที่ 2.5	โปรไฟล์ของความเข้มข้นของแต่ละองค์ประกอบในเครื่องปฏิกรณ์ แบบเบทซ์.....	17
รูปที่ 3.1	การควบคุมแบบเจเนริกโมเดลร่วมกับการประมาณค่าสเททหรือพารามิเตอร์.....	26
รูปที่ 3.2	การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์โดยใช้จีเอ็มซีร่วมกับการประมาณค่าความร้อน.....	29
รูปที่ 3.3	แผนภาพแสดงตัวปรับจูนที่ใช้การควบคุมจีเอ็มซี.....	30
รูปที่ 3.4	ความแตกต่างของการควบคุมเมื่อใช้ค่าในการปรับจูนแตกต่างกัน.....	31
รูปที่ 3.4	ผลการประมาณค่าความร้อนแบบออนไลน์เทียบกับความร้อนที่เกิดขึ้นจริง.....	33
รูปที่ 4.1	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิกับค่าคอนเวอร์ชัน.....	45
รูปที่ 4.2	แสดงสัดส่วนของผลิตภัณฑ์พีวีซีแบบซัสเพนชัน.....	48
รูปที่ 4.3	เครื่องปฏิกรณ์ในระบบการทดลอง.....	54
รูปที่ 4.4	โปรไฟล์ตามชนิดของสัญญาณขาออกจากปฏิกิริยา.....	58
รูปที่ 4.5	การเปรียบเทียบผลการทำนายกับผลจากการทดลองในรูปความดัน อัตราการเกิดปฏิกิริยา.....	60
รูปที่ 4.6	การเปรียบเทียบผลการทำนายกับผลการทดลองของอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์และแจ็กเก็ต.....	60
รูปที่ 4.7	สมบัติทางกายภาพและการถ่ายโอนของผสมในปฏิกิริยาและเวลา.....	61
รูปที่ 4.8	การเปรียบเทียบผลการจำลองกับผลการทดลองของ Xie et al.,1991.....	62
รูปที่ 4.9	การเปรียบเทียบผลอุณหภูมิการจำลองกับผลการทดลองของ Cebollada et.al.,1989.....	63
รูปที่ 4.10	การเปรียบเทียบผลคอนเวอร์ชันการจำลองกับผลการทดลองของ Cebollada et.al.,1989.....	63
รูปที่ 5.1	ไดอะแกรมการควบคุมอุณหภูมิโดยใช้แบบจีเอ็มซีควบคู่ไปกับการประมาณค่าความร้อน.....	83
รูปที่ 6.1	ผลการควบคุมอุณหภูมิโดยใช้ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีในสถานะเดียวกับงานวิจัย.....	86
รูปที่ 6.2	ผลการควบคุมอุณหภูมิของ C.Kipassidies เทียบกับผลจากการทดลองในห้องทดลอง.....	86
รูปที่ 6.3	เปรียบเทียบค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจริงกับการประมาณค่าในสถานะการทำงานปกติ.....	87
รูปที่ 6.4	ผลการตอบสนองของตัวควบคุมจีเอ็มซีเมื่อสถานะการดำเนินการของโรงงานปกติ.....	88
รูปที่ 6.5	ผลการตอบสนองของตัวควบคุมพีไอดีเมื่อสถานะการดำเนินการของโรงงานปกติ.....	88

รูปที่ 6.6	เปรียบเทียบผลการควบคุมจีเอ็มซีกับแบบพีไอดีเมื่อสภาวะการดำเนินการของโรงงานปกติ.....	89
รูปที่ 6.7	เปรียบเทียบค่าความร้อนที่เกิดจริงกับการประมาณค่าในสภาวะการเปลี่ยนแปลง นำหนักวัสดุดิบเพิ่มขึ้น 30%	91
รูปที่ 6.8	เปรียบเทียบค่าความร้อนที่เกิดจริงกับการประมาณค่าในสภาวะการเปลี่ยนแปลง สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %.....	91
รูปที่ 6.9	เปรียบเทียบค่าความร้อนที่เกิดจริงกับการประมาณค่าในสภาวะการเปลี่ยนแปลง อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	92
รูปที่ 6.10	เปรียบเทียบค่าความร้อนที่เกิดจริงกับการประมาณค่าในสภาวะการเปลี่ยนแปลง สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	92
รูปที่ 6.11	เปรียบเทียบผลการควบคุมจีเอ็มซีกับแบบพีไอดีเมื่อสภาวะการเปลี่ยนแปลง นำหนักวัสดุดิบเพิ่มขึ้น 30%	93
รูปที่ 6.12	เปรียบเทียบผลการควบคุมจีเอ็มซีกับแบบพีไอดีเมื่อสภาวะการเปลี่ยนแปลง สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %.....	94
รูปที่ 6.13	เปรียบเทียบผลการควบคุมจีเอ็มซีกับแบบพีไอดีเมื่อสภาวะการเปลี่ยนแปลง อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	94
รูปที่ 6.14	เปรียบเทียบผลการควบคุมจีเอ็มซีกับแบบพีไอดีเมื่อสภาวะการเปลี่ยนแปลง สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	95
รูปที่ ข-1	ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีเมื่อสารตั้งต้นเพิ่ม 30%.....	107
รูปที่ ข-2	ผลการควบคุมแบบพีไอดีเมื่อสารตั้งต้นเพิ่ม 30%.....	107
รูปที่ ข-3	ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีเมื่อสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %.....	108
รูปที่ ข-4	ผลการควบคุมแบบพีไอดีเมื่อสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %.....	108
รูปที่ ข-5	ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีเมื่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	109
รูปที่ ข-6	ผลการควบคุมแบบพีไอดีเมื่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	109
รูปที่ ข-7	ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีเมื่อสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %และ อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	110
รูปที่ ข-8	ผลการควบคุมแบบพีไอดีเมื่อสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25 %และ อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%.....	110
รูปที่ ค-1	ลักษณะผลการตอบสนองที่บันทึกจากระบบจริง	111
รูปที่ ค-2	ลักษณะผลการตอบสนองที่บันทึกจากระบบจริงในเรื่องอุณหภูมิ.....	112

สารบัญญัตินี้

หน้า

ตารางที่ 4.1	สูตรสำเร็จรูปสำหรับการโพลีเมอไรเซชันแบบแวนดอว.....	38
ตารางที่ 4.2	ค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ของทำปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	56
ตารางที่ 4.3	แสดงสมบัติทางกายภาพของวัตถุดิบที่ใช้ในการทำปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	57
ตารางที่ 4.4	ปริมาณส่วนผสมของปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ในการทดลอง ของ C.Kiparissides(1997).....	59
ตารางที่ 5.1	ค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ของทำปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	71
ตารางที่ 5.2	ค่าสมบัติทางกายภาพของวัตถุดิบที่ใช้ในการทำปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	75
ตารางที่ 5.3	ปริมาณสารและค่าเริ่มต้นที่ใช้ในเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์.....	75
ตารางที่ 5.4	พารามิเตอร์ของระบบน้ำหล่อเย็นและขนาดรูปร่างของเครื่องปฏิกรณ์.....	76
ตารางที่ 5.5	ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการปรับจูนตัวควบคุมแบบพีไอดี.....	84
ตารางที่ ก-1	ค่าไอเอสทีที่ใช้ในการหาค่าพารามิเตอร์ของตัวควบคุมพีไอดีตอนปรับจูน.....	106

บทที่ 1

บทนำ



1.1 คำนำ

ในกระบวนการอุตสาหกรรมทั่วไป มีตัวแปรมากมายที่มีอิทธิพลต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์และประสิทธิภาพของกระบวนการผลิต ดังนั้นเทคนิคการควบคุมกระบวนการจึงถูกนำมาใช้และพัฒนาขึ้นอย่างแผ่ขยายหลาย

โดยงานวิทยานิพนธ์นี้จะนำวิธีการควบคุมแบบเจเนติกโมเดลคอนโทรล ซึ่งจะขอเรียกสั้นๆว่าการควบคุมแบบจีเอ็มซี มาใช้ในการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ ซึ่งเป็นปฏิกิริยาคายความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ โดยจะทำการเปรียบเทียบผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีกับการควบคุมแบบเดิมที่ใช้งานอยู่อย่างแผ่ขยายหลายในปัจจุบันคือ การควบคุมแบบพีไอดี (PID Control) ซึ่งตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีสามารถใช้งานได้โดยกำหนดผลตอบสนองได้โดยตรง โดยไม่ต้องทำแบบจำลองให้เป็นเชิงเส้นเสียก่อน

การควบคุมแบบจีเอ็มซีนี้อาจสามารถทำการควบคุมกระบวนการที่มีแบบจำลองกระบวนการเป็นเชิงเส้นหรือไม่เป็นเชิงเส้นก็ได้ ซึ่งจะเหมาะกับแบบจำลองไม่เป็นเชิงเส้นที่มีรูปแบบที่ยากต่อการทำให้เป็นเชิงเส้น เนื่องจากการควบคุมแบบจีเอ็มซีนี้อาจใช้งานได้โดยตรงไม่ต้องนำแบบจำลองที่ไม่เป็นเชิงเส้นซึ่งจะพบทั่วไปในปฏิกิริยาคายความร้อนมาทำให้เป็นเชิงเส้นเสียก่อน ซึ่งทำให้สามารถกำหนดผลตอบสนองที่ต้องการได้โดยตรง นำไปใช้งานได้ง่ายและสะดวกสามารถใช้งานกับการควบคุมที่มีแบบจำลองที่ผิดพลาดไปจากของจริง (Plant/Model Mismatch) โดยการนำการควบคุมแบบจีเอ็มซีนี้นี้มาใช้ร่วมกับการประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์ควบคู่ไปกับแบบจำลองที่มีความน่าเชื่อถือ

โดยบทนี้จะกล่าวถึงความสำคัญและที่มาของงานวิจัย, วัตถุประสงค์ของงานวิจัย, ขอบเขตของงานวิจัย, ขั้นตอนและวิธีดำเนินงานวิจัย, ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับและเนื้อหาของวิทยานิพนธ์

1.2 ความสำคัญและที่มาของการทำวิทยานิพนธ์

กระบวนการผลิตในอุตสาหกรรมเคมีที่เป็นปฏิกิริยาคายความร้อนส่วนใหญ่ จะมีกระบวนการเป็นแบบไม่เชิงเส้นสูง ทำให้เทคนิคการควบคุมแบบพีไอดี (PID Control) ที่ใช้อยู่อย่างแพร่หลายในปัจจุบันให้ประสิทธิภาพต่ำกว่าความต้องการ ทั้งนี้เนื่องจากเทคนิคการควบคุมนี้ต้องทำรูปแบบสมการที่ไม่เป็นเชิงเส้น ให้อยู่ในรูปเชิงเส้นก่อน (Linearization) เป็นเหตุให้การควบคุมต่อกระบวนการที่มีรูปแบบไม่เป็นเชิงเส้นมากๆ มีขีดจำกัดและความยุ่งยากมากขึ้น ส่งผลกระทบต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์ และ ประสิทธิภาพของกระบวนการผลิตมีความคลาดเคลื่อนมากขึ้น โดยเฉพาะอุณหภูมิก็จัดเป็นพารามิเตอร์ที่สำคัญมากที่จะมีผลต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์ ดังนั้นการควบคุมอุณหภูมิในกระบวนการผลิตจึงเป็นปัจจัยที่สำคัญอย่างยิ่งในกระบวนการผลิตที่ต้องการผลิตภัณฑ์ที่มีคุณภาพสม่ำเสมอ และ มีการรักษาด้านทุนในการดำเนินการผลิตให้ต่ำที่สุดเท่าที่จะสามารถทำได้ โดยแนวทางการแก้ไขเริ่มต้นจากการหาวิธีการควบคุมที่เหมาะสมกับกระบวนการเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการควบคุมให้มากที่สุด

สำหรับงานวิทยานิพนธ์นี้จะทำการควบคุมอุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์แบบแบทช์ของกระบวนการผลิตพอลิไวนิล คลอไรด์ (Polyvinyl chloride) โดยปัจจุบันกระบวนการผลิตใช้เทคนิคการควบคุมอุณหภูมิแบบพีไอดี (PID Control) และให้ประสิทธิภาพในการควบคุมยังไม่ดีเท่าที่ควรนัก เนื่องจากกระบวนการนี้มีการคายความร้อนเกิดขึ้นขณะทำปฏิกิริยาตลอดเวลาทำให้มีการสะสมความร้อนเกิดขึ้น โดยเฉพาะช่วงเวลาที่เกิดปฏิกิริยา อุณหภูมิจะพุ่งสูงขึ้นจากอุณหภูมิเซ็ทพอยท์มาก และ กระบวนการเป็นแบบไม่เป็นเชิงเส้นส่งผลให้คุณสมบัติทางกายภาพของพอลิเมอร์ขณะเกิดปฏิกิริยามีการเปลี่ยนแปลง โดยการควบคุมที่เหมาะสมและสามารถเพิ่มประสิทธิภาพในการควบคุมของกระบวนการนี้คือ การควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล (Generic Model Control, GMC) เนื่องจากสามารถใช้แบบจำลองไม่เป็นเชิงเส้นในตัวควบคุมแบบจีเอ็มซี ได้โดยตรงเพื่อที่จะกำหนดผลตอบสนองที่ต้องการ

การควบคุมแบบจีเอ็มซี จึงเป็นการควบคุมที่ขึ้นอยู่กับแบบจำลองของกระบวนการเป็นหลัก ทำให้ในการคำนวณค่าตัวแปรปรับเพื่อควบคุมตัวแปรควบคุมให้อยู่ที่ค่าที่ต้องการนั้นมีค่าตัวแปรอื่นๆ รวมทั้งพารามิเตอร์ของกระบวนการเข้ามาเกี่ยวข้องด้วย ดังนั้นเมื่อพารามิเตอร์อื่นๆผิดพลาดไปจากความเป็นจริงจะทำให้การคำนวณค่าตัวแปรปรับไม่เหมาะสมทำให้การควบคุมไม่ได้อยู่ที่เซ็ทพอยท์ตามที่ต้องการจึงทำให้มีการป้องกันการคลาดเคลื่อนนี้ โดยมีการประเมินค่าตัวแปรสเตรทหรือพารามิเตอร์เข้ามาช่วยในการประมาณค่าพารามิเตอร์ที่ไม่แน่นอนรวมทั้งค่าตัวแปรสเตรทที่วัดค่าไม่ได้

เนื่องจากกระบวนการเป็นปฏิกิริยาแบบคายความร้อน งานวิทยานิพนธ์นี้จึงมีการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาควบคุมไปกับการควบคุมแบบจีเอ็มซีนี้ด้วย ดังนั้นในการทำวิทยานิพนธ์เราจึงศึกษาและประยุกต์ใช้ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีกับกระบวนการจริง โดยจะจำลองแบบจำลองและใช้ตัวควบคุมแบบ

จีเอ็มซีเปรียบเทียบกับตัวควบคุมแบบพีไอดี เพื่อศึกษาผลการควบคุมรวมถึงเพื่อใช้เป็นแนวทางในการเลือกตัวควบคุมที่เหมาะสมกับกระบวนการผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์เพื่อเป็นประโยชน์ในการรักษาต้นทุนและเวลา รวมทั้งคุณภาพของผลิตภัณฑ์

1.3 วัตถุประสงค์

1. เพื่อศึกษาแบบจำลองของปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์
2. เพื่อประยุกต์และศึกษาการออกแบบ การใช้เทคนิคการควบคุมแบบจีเอ็มซี สำหรับใช้ในการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ควบคู่ไปกับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา
3. เพื่อเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการควบคุมแบบจีเอ็มซีร่วมกับการประมาณค่าความร้อนกับการควบคุมที่ใช้งานจริงอยู่ในปัจจุบันคือการควบคุมแบบพีไอดี
4. เพื่อประเมินสมรรถนะความทนทานของการควบคุมแบบจีเอ็มซี ในสภาวะที่มีความไม่แน่นอนของพารามิเตอร์ต่างๆเกิดขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ เช่น สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน หรือ นำหนักสารตั้งต้นเปลี่ยน เป็นต้น

1.4 ขอบเขตของงานวิจัย

1. เขียนแบบจำลองของกระบวนการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ และนำมาประยุกต์ใช้ให้อยู่ในรูปของการควบคุมแบบจีเอ็มซี โดยใช้โปรแกรม MATLAB ในการคำนวณ
2. ใช้วิธีการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาคายความร้อนของกระบวนการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ ให้เหมาะสมเพื่อนำมาใช้ควบคู่ไปกับการควบคุมแบบจีเอ็มซี
3. ประยุกต์ใช้การควบคุมแบบจีเอ็มซี ร่วมกับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาและทดสอบประสิทธิภาพของการควบคุมที่ออกแบบขึ้น โดยเปรียบเทียบกับการควบคุมแบบพีไอดี
4. ทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุม (Robustness test) ในสภาวะที่มีความไม่แน่นอนของพารามิเตอร์ เช่น สัมประสิทธิ์ในการถ่ายเทความร้อน หรือ นำหนักสารตั้งต้นเปลี่ยน เป็นต้น

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. สามารถเขียนแบบจำลองของปฏิกิริยาคายความร้อนของเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิลคลอไรด์ได้
2. สามารถออกแบบการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิลคลอไรด์ โดยใช้เทคนิคการควบคุมแบบจีเอ็มซี ควบคุมค่าประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาได้
3. สามารถประเมินประสิทธิภาพของการควบคุมแบบจีเอ็มซี ที่ออกแบบไว้โดย เปรียบเทียบกับการควบคุมแบบพีไอดีได้
4. สามารถทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุม (Robustness test) โดยการเปลี่ยนค่าพารามิเตอร์ที่อาจเกิดการเปลี่ยนแปลงได้ เช่นสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนหรือน้ำหนักสารตั้งต้นเปลี่ยนเป็นต้น
5. เป็นแนวทางในการนำการควบคุมแบบจีเอ็มซี นี้ไปประยุกต์ใช้กับการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิลคลอไรด์ เพื่อให้เกิดประโยชน์ในการเพิ่มคุณภาพของผลิตภัณฑ์ และการประหยัดค่าใช้จ่ายในการผลิตได้

1.6 ขั้นตอนการทำวิจัย

1. ศึกษาแบบจำลองของกระบวนการผลิตโพลีไวนิลคลอไรด์ ในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์
2. ศึกษาการนำการควบคุมแบบจีเอ็มซีมาประยุกต์ใช้ในการควบคุมอุณหภูมิของกระบวนการที่สนใจจากแหล่งข้อมูล ต่างๆ เช่น งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง
3. ศึกษาและฝึกฝนการเขียนโปรแกรม MATLAB เพื่อใช้ในการคำนวณ โดยสามารถจำลองการควบคุมอุณหภูมิแบบจีเอ็มซีในโปรแกรม MATLAB
4. ทาวิธีที่เหมาะสมในการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์
5. นำการประมาณค่าความร้อนมาใช้ควบคู่กับการควบคุมแบบจีเอ็มซีและเปรียบเทียบประสิทธิภาพเทียบกับการควบคุมแบบพีไอดี
6. ทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุมโดยการเปลี่ยนพารามิเตอร์ที่มีความไม่แน่นอนแล้วประมาณสมรรถนะของตัวควบคุมที่ออกแบบขึ้นโดยจะแสดงในรูปของกราฟ
7. จัดทำรายงานวิทยานิพนธ์เป็นรูปเล่ม
8. แก้ไขและปรับปรุงรายงานวิทยานิพนธ์
9. จัดทำรายงานวิทยานิพนธ์ฉบับสมบูรณ์

บทที่ 2

ทฤษฎีพื้นฐาน

กระบวนการทางเคมีของการเกิดพอลิเมอร์ส่วนใหญ่มีความไม่เป็นเชิงเส้นสูงและมักแสดงพฤติกรรมของลูปเปิดที่ซับซ้อน (Complex open loop behavior) เช่นกระบวนการที่มีความหลากหลายของตัวแปรอินพุตตัวแปรเอาต์พุต (input output multiplicity), กระบวนการที่มีความไวต่อการเปลี่ยนแปลงค่าพารามิเตอร์ (strong parametric sensitivity), กระบวนการที่มีหลายสถานะคงตัว (multiple steady state) และกระบวนการที่มีความแกว่งเนื่องมาจากความไม่เป็นเชิงเส้นอย่างมาก (nonlinear oscillation) เป็นต้น พฤติกรรมดังกล่าวเกิดขึ้นเนื่องจากพอลิเมอร์เป็นสารประกอบที่มีโครงสร้างโมเลกุลซับซ้อน ส่งผลให้การเลือกชนิดของเครื่องปฏิกรณ์ให้เหมาะสมกับกระบวนการผลิตพอลิเมอร์ถูกนำมาพิจารณามากยิ่งขึ้นซึ่งเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์ที่นิยมใช้ในอุตสาหกรรมมีดังนี้

2.1 ชนิดของเครื่องปฏิกรณ์ที่นิยมใช้ในอุตสาหกรรม

2.1.1 เครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

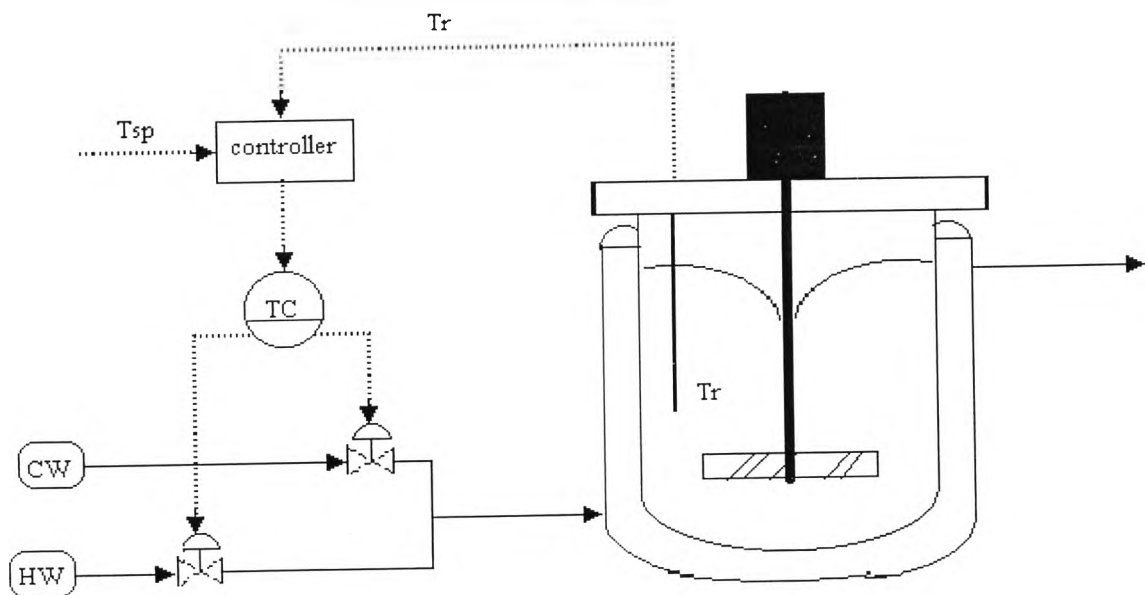
เครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ (Batch Reactor) เป็นการผลิตที่อาศัยช่วงเวลาของการเกิดปฏิกิริยาที่สมบูรณ์เป็นตัวกำหนด การสิ้นสุดของกระบวนการ ถ้ามีการควบคุมสถานะการผลิตได้ตามสถานะการเกิดปฏิกิริยาที่ดี จะส่งผลให้เวลาที่ใช้ในการผลิตของกระบวนการสั้นลงและเพิ่มคุณภาพของผลิตภัณฑ์ เครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์นิยมใช้กับผลิตภัณฑ์ที่ต้องการเปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันสูงๆ (High Percent Conversion) และเป็นผลิตภัณฑ์ที่มีความพิเศษเช่น ราคาแพง, รวมถึงเป็นผลิตภัณฑ์ที่ทำให้เครื่องปฏิกรณ์มีการเปรอะเปื้อน โดยสามารถเขียนขั้นตอนการดำเนินการของกระบวนการได้ดังนี้

1. ทำการป้อนสารตั้งต้นแต่ละชนิดทั้งหมดลงในเครื่องปฏิกรณ์
2. ขั้นตอนปฏิบัติการ (Operating Step) โดยให้ความร้อนจนถึงจุดที่สารตั้งต้นสามารถทำปฏิกิริยากันที่สถานะและอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่ต้องการ โดยนำน้ำเย็นเข้าสู่แจ็กเก็ตเพื่อถ่ายเทความร้อนที่คายออกมาจากปฏิกิริยาแล้วควบคุมอุณหภูมิตามเวลาที่กำหนดได้ที่จุดเซ็ทพอยท์นั้น จนกระทั่งปฏิกิริยาเกิดสมบูรณ์ ทำให้น้ำเย็นอย่างรวดเร็วเพื่อหยุดปฏิกิริยาโดยอาศัยการถ่ายเทความร้อนจากน้ำเย็นในแจ็กเก็ต

3. ถ่ายสารผลิตภัณฑ์ที่ได้ ออกเพื่อเข้ากระบวนการอื่น (Transfer to Other Process) เช่น กระบวนการแยกหรือทำการบรรจุเป็นผลิตภัณฑ์สุดท้ายเพื่อส่งขายต่อไป
4. ทำความสะอาดเครื่องปฏิกรณ์ (Clean Up) เพื่อทำการผลิตสารผลิตภัณฑ์อื่น



รูปที่ 2.1 วงจรการดำเนินการของกระบวนการแบบแบทช์



รูปที่ 2.2 ไลอะแกรมของระบบการทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

การควบคุมอุณหภูมิของปฏิกิริยาแบบคายความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ทำได้ยากเนื่องจากปฏิกิริยาที่เกิดขึ้น ส่งผลให้เกิดความไม่แน่นอนของพารามิเตอร์บางตัวในระบบดังนี้

- 1.) ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นไม่มีสภาวะคงตัว (Unsteady State) ทำให้เกิดการรันอะเวย์ (Runaway) ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ เนื่องจากปริมาณความร้อนที่ปล่อยออกมาอย่างต่อเนื่องมากกว่าความร้อนที่ถูกดูดออกไปโดยแจ็กเก็ตทำให้เกิดการโอเวอร์ชูตขึ้น ดังนั้นการป้องกันการเกิดโอเวอร์ชูตของอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์นี้ให้เหลือน้อยที่สุดจึงเป็นสิ่งที่ต้องการและจำเป็นอย่างยิ่ง
- 2.) ผลของการที่คุณสมบัติของสารภายในเครื่องปฏิกรณ์เปลี่ยนตามเวลาความหนืดและความหนาแน่นของรีแอกชันมิกเจอร์เพิ่มขึ้นเมื่อเวลาเปลี่ยนไป มีผลทำให้เกิดความไม่แน่นอนของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนและพารามิเตอร์ต่างๆในระบบ
- 3.) แบบจำลองทางจลนศาสตร์เคมีของกระบวนการการเกิดพอลิเมอร์ส่วนใหญ่จะเป็นแบบไม่เป็นเชิงเส้นและ สามารถทำให้เกิดผลของการเกิดเจล (Gel Effect) ได้
- 4.) การหาแบบจำลองทางจลนศาสตร์เคมี ของกระบวนการการเกิดพอลิเมอร์ที่ถูกต้อง เพื่อให้การออกแบบจำลองของกระบวนการอยู่ในรูปที่ง่ายและน่าเชื่อถือจะกำหนดข้อจำกัดของปฏิกิริยาคายความร้อนในระบบดังนี้
 1. ไม่คำนึงถึงอิทธิพลจากการเกิดเจล“Gel Effect”
 2. โครงสร้างทางเคมีของผลิตภัณฑ์ จะถูกกำหนดโดยอุณหภูมิของรีแอกชันมิกเจอร์ โดยที่อุณหภูมิเซ็ทพอยท์ไม่เกิดปฏิกิริยาข้างเคียง
 3. ปฏิกิริยาเกิดการผสมเกิดขึ้นอย่างสมบูรณ์

ความสำคัญของกระบวนการแบบเบตซ์จะมีความสำคัญมากขึ้น ถ้าสามารถทำให้วงจรขั้นตอนการดำเนินการของกระบวนการแบบเบตซ์ทำได้อย่างต่อเนื่อง ดังนั้นจึงควรพิจารณาออกแบบวงจรของกระบวนการแบบเบตซ์ให้สั้นลงได้เนื่องจากสภาวะการดำเนินการของปฏิกิริยา (อุณหภูมิ, ความดัน ฯลฯ) ขึ้นกับเวลา ดังนั้นอาจหาสภาวะของปฏิกิริยาที่เหมาะสมและสามารถทำการควบคุมสภาวะนั้นได้เพื่อทำให้ปริมาณของสารผลิตภัณฑ์ที่ได้ต่อหน่วยปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์มากขึ้น โครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์ถึงกวนแบบเบตซ์ดูได้จากรูปที่ 2.2

ถึงแม้ว่ากระบวนการวิศวกรรมเคมีขนาดใหญ่ในทางการค้าส่วนมากจะทำการดำเนินการผลิตแบบต่อเนื่อง แต่กระบวนการแบบเบตซ์เป็นปัญหาที่ท้าทายและน่าสนใจมากสำหรับเรื่องเกี่ยวกับการสร้างแบบจำลอง (Modeling) และการควบคุมกระบวนการ ซึ่งเป็นข้อดีที่เหนือกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องอีกข้อหนึ่งสำหรับบางปฏิกิริยาโดยเฉพาะปฏิกิริยาที่มีค่าคงที่อัตราน้อย โดยเฉพาะปัจจุบันมีการใช้เครื่อง

ดิจิทัลคอมพิวเตอร์มาใช้ในการควบคุมและหาความเหมาะสม (Optimization) ของกระบวนการแบบเบบัทซ์กันกว้างมากขึ้น ทำให้กระบวนการแบบเบบัทซ์ให้ผลิตภัณฑ์ที่มีคุณสมบัติดีขึ้นเนื่องจากการพัฒนากระบวนการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์แบบเบบัทซ์ให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น

2.1.2 แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเคมีเบบัทซ์

เครื่องปฏิกรณ์แบบเคมีเบบัทซ์มีการควบคุมอัตราการป้อนสารตั้งต้นเข้าความร้อนที่ปล่อยออกมาจึงน้อยกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบเบบัทซ์ทำให้สามารถควบคุมอุณหภูมิได้ง่ายกว่าเครื่องปฏิกรณ์แบบเบบัทซ์ และเนื่องจากในบางปฏิกิริยามีสารตั้งต้นเป็นสารที่ว่องไวในการทำปฏิกิริยาได้หลายทางทำให้เกิดผลิตภัณฑ์หลายตัวเมื่อทำการผลิตในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบบัทซ์ ซึ่งความเข้มข้นของสารตั้งต้นมีค่ามากจึงเป็นการเสี่ยงต่อการเกิดปฏิกิริยาข้างเคียงค่อนข้างมาก ทำให้เครื่องปฏิกรณ์แบบเคมีเบบัทซ์ได้รับการพิจารณา การดำเนินการแบบเคมีเบบัทซ์ยังได้รับการยอมรับความสามารถในการควบคุมคุณภาพของผลิตภัณฑ์พอลิเมอร์ว่ายืดหยุ่นได้มากกว่าอีกด้วย ยกตัวอย่างเช่น การดำเนินการแบบเคมีเบบัทซ์นี้สามารถเป็นประโยชน์ในตัวอย่างการควบคุมการเพิ่มของโคโมโนเมอร์ หรือ การควบคุมสารตัวถ่ายเทสายโซ่ (Chain Transfer Agents) ถูกต้องการ มันยังยอมให้สำหรับการใช้ชนิดของตัวเริ่ม (Initiator) ที่ขึ้นของกระบวนการเกิดพอลิเมอร์ต่างกัน ซึ่งชนิดของตัวเริ่มที่ถูกหามาได้ในปัจจุบันสามารถที่จะดึงดูดใจได้มากพอ และเพื่อเป็นการหลีกเลี่ยงการหยุดการดำเนินการเพื่อทำความสะอาดเครื่องปฏิกรณ์โดยไม่จำเป็นเมื่อเกิดการเปรอะเปื้อน และผลของการที่มีเปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันต่ำในเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องอีกทางหนึ่งด้วย

2.1.3 เครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง

เครื่องปฏิกรณ์ชนิดนี้นิยมใช้เพราะการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์สามารถทำได้ง่ายเนื่องจากกระบวนการแบบต่อเนื่องมีสภาวะคงตัว เนื่องจากการไหลเข้าของสารตั้งต้นและการไหลออกของสารผลิตภัณฑ์ และความร้อนที่ปล่อยออกมามีค่าน้อยกว่า แต่เปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันของสารตั้งต้นต่อหน่วยปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์มีค่าน้อย ในการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์แบบนี้ถ้าต้องการเปอร์เซ็นต์คอนเวอร์ชันสูงๆ จำเป็นต้องออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ที่มีขนาดใหญ่ หรือใช้เครื่องปฏิกรณ์หลายตัวต่อกัน

2.2 ผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.2.1 ผลงานที่เกี่ยวข้องกับตัวควบคุมที่อาศัยแบบจำลองเป็นพื้นฐาน

ปี 1976 Richalet ได้อธิบายความสัมพันธ์ระหว่างอินพุตและเอาต์พุตต่างๆ ของกระบวนการโดยใช้แบบจำลองของการตอบสนองอิมพัลส์แบบดิสครีต (Discrete-time Finite Impulse Response (FIR) Model) โดยได้อธิบายถึงการประยุกต์ใช้อัลกอริทึมนี้กับหน่วยของฟลูอิดคระตะไลติกแครกกิง (Fluid Catalytic Cracking Unit, FCCU) ซึ่งเกี่ยวกับการควบคุมอุณหภูมิของเทรย์ที่เป็นกุญแจสำคัญ (key tray) เพื่อที่จะคงเสถียรภาพขององค์ประกอบของสายผลิตภัณฑ์ต่างๆ เพื่อชดเชยสำหรับอุณหภูมิขาเข้าซึ่งเป็นตัวแปรกระบวนการและเพื่อรักษาระดับของสารกุญแจสำคัญในเทรย์ , การประยุกต์ใช้กับโรงงานผลิตพลังงานจากไอน้ำซึ่งเกี่ยวกับการควบคุมอุณหภูมิและความดันไอน้ำของเทอร์ไบน์ ซึ่งการประยุกต์ใช้ในงานนี้มีความน่าสนใจเนื่องจากเวลาการตอบสนองของกระบวนการแปรเปลี่ยนกลับกับโพลในกระบวนการ

Culter and Ramaker (1990) ได้เสนอรายละเอียดของอัลกอริทึมของการควบคุมแบบหลายตัวแปรที่ไม่มีขอบเขตจำกัดซึ่งให้ชื่อว่าการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ (Dynamic Matrix Control, DMC) ในการประชุมของ AIChE ในปี 1979 และในการประชุมของ Joint Automatic Control ในปี 1980 ซึ่งในปีเดียวกันนี้ Prett and Gillette (1980) ได้อธิบายถึงการประยุกต์ใช้เทคโนโลยีของไดนามิกส์เมตริกซ์ กับเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดคระตะไลติกซึ่งอัลกอริทึมได้ถูกปรับปรุงให้สามารถแก้ไขปัญหาค่าความไม่เป็นเชิงเส้นและการมีขอบเขตจำกัดต่างๆ รูปแบบที่สำคัญของอัลกอริทึมของการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ คือการใช้แบบจำลองของการตอบสนองแบบสเต็ปแบบเชิงเส้น (Linear Step Response Model) สำหรับกระบวนการ, สมรรถนะสามารถกำหนดผ่านออฟเซตที่ฟีดแบ็คผ่านแกนการทำงานที่จำกัด, พฤติกรรมของเอาต์พุตของกระบวนการในอนาคตถูกกำหนดโดยความพยายามในการติดตามค่าเซ็ทพอยท์ให้ใกล้เคียงที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้ และค่าอินพุตที่เหมาะสมสามารถคำนวณโดยการหาค่าตอบของปัญหาของการหาค่าที่น้อยที่สุดของกำลังสอง (least-square) ซึ่งแบบจำลองเชิงเส้นของการตอบสนองแบบสเต็ปที่ใช้ในอัลกอริทึมของไดนามิกส์เมตริกซ์จะโยงความสัมพันธ์ของการเปลี่ยนแปลงเอาต์พุตของกระบวนการกับผลรวมน้ำหนักของการเปลี่ยนแปลงอินพุตในอดีต โดยวัตถุประสงค์สำคัญของการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์คือความต้องการที่จะผลักดันให้อาต์พุตเข้าใกล้เซ็ทพอยท์ให้มากที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้โดยการปรับออฟเซตที่ฟีดแบ็คที่กำหนดขึ้น

Culter and Ramaker (1979) ได้แสดงผลการประยุกต์ใช้การควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ในการควบคุมอุณหภูมิของเตาหลอมโลหะ เพื่อที่จะแสดงให้เห็นถึงสมรรถนะการควบคุมที่ดีขึ้นเนื่องจากการตอบสนองแบบป้อนไปข้างหน้าของอัลกอริทึมของการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ต่อการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิขาเข้านั้นดีกว่าการควบคุมแบบพีไอดีธรรมดาที่ใช้ตัวชดเชยแบบลีด/แลค

Cutler, Morshedi and Haydel (1983) ได้อธิบายอัลกอริทึมของควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์ครั้งแรกในบทความในการประชุมของ AIChE ซึ่ง Garcia and Moshedi (1986) ได้รวบรวมรายละเอียดเพิ่มขึ้นในหลายปีต่อมา เริ่มต้นด้วยการนำเสนออัลกอริทึมของไดนามิกส์เมตริกซ์แบบไม่มีขอบเขตจำกัดรวมทั้งการอธิบายที่น่าสนใจเกี่ยวกับการปรับจูนเครื่องควบคุมซึ่งแสดงให้เห็นว่าอัลกอริทึมของไดนามิกส์เมตริกซ์จะมีเสถียรภาพในลูปปิดเมื่อแกนการทำนาย (prediction horizon) ถูกกำหนดให้ยาวพอ นอกจากนี้ยังแสดงวิธีการเขียนออฟเจกทีฟฟังก์ชันของการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ใหม่ในรูปของควอดราติกโปรแกรมแบบมาตรฐาน ซึ่งโปรเจกต์เอาท์พุทในอนาคต (future projected outputs) สามารถถูกเชื่อมโยงโดยตรงกลับไปยังเวกเตอร์ของการเคลื่อนที่ของอินพุทผ่านไดนามิกส์เมตริกซ์ซึ่งทำให้ขอบเขตจำกัดต่าง ๆ ทั้งหมดของอินพุทและเอาท์พุทถูกเก็บในเมตริกซ์ซึ่งเกี่ยวกับเวกเตอร์ของการเคลื่อนที่ของอินพุท นอกจากนี้ยังได้เสนอผลของการประยุกต์ใช้กับเตาไพโรไลซิส (pyrolysis furnace) โดยเครื่องควบคุมแบบควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์จะทำการปรับความดันของก๊าซเชื้อเพลิงในเตาเผา (burners) - เตาเพื่อที่จะควบคุมอุณหภูมิของไอน้ำที่ 3 ตำแหน่งในเตาไพโรไลซิส และยังได้รายงานผลในการประยุกต์ใช้กับปัญหาต่าง ๆ ในการควบคุมของเซลล์ซึ่งรวมถึงกระบวนการที่มีจำนวนอินพุทและเอาท์พุทมากถึง 12x12 ตัว ได้เป็นอย่างดี

การพัฒนาของการควบคุมแบบควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์ในช่วงแรกนั้นเป็นการพัฒนาสำหรับกระบวนการที่เป็นเชิงเส้นซึ่งต่อมาได้ประสบความสำเร็จในการขยายไปสู่กระบวนการที่ไม่เป็นเชิงเส้นโดยนักวิจัยจำนวนมาก (Garcia, 1984; Eaton and Lawlings, 1989; Sistu and Bequette, 1992) ข้อดีของการควบคุมแบบโมเดลพรีดิกทีฟแบบไม่เป็นเชิงเส้นคือสามารถควบคุมกระบวนการที่มีความหน่วงเวลา (time-delays), กระบวนการที่มีขอบเขตจำกัด (constraints) ต่างๆ กระบวนการที่ไม่มีเฟสต่ำสุด (non-minimum phase) และรวมถึงการกระบวนการที่มีการเปลี่ยนแปลงเซตพอยท์ในอนาคตด้วย

ดังนั้นต่อมา Garcia (1984) ได้อาศัยพื้นฐานของการควบคุมแบบควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์ในการควบคุมกระบวนการต่าง ๆ ที่ไม่เป็นเชิงเส้น โดยการปรับปรุงเบื้องต้นในการคำนวณสำหรับความไม่เป็นเชิงเส้นต่าง ๆ เป็นวิธีซึ่งผลของการเคลื่อนที่ของการควบคุมในอดีต (past control move) ถูกคำนวณในเฟสของการทำนาย (prediction phase) ซึ่งโปรเจกชันนั้นทำได้โดยการอินทิเกรตสมการอนุพันธ์ที่ไม่เป็นเชิงเส้น (nontlinear ODEs) จากค่าสเตทในปัจจุบันผ่านแกนการทำนายโดยให้ตัวแปรปรับคั้งที่ การสมมติที่สำคัญในการควบคุมแบบควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์แบบไม่เป็นเชิงเส้น (Nonthnear Quadratic Dynamic Matrix Control, NDQDMC) คือสัมประสิทธิ์ของแบบจำลอง (model coefficients) ยังคงคงที่สำหรับแต่ละการเคลื่อนที่ของการควบคุมในอนาคตที่ถูกคำนวณและมีการใช้ไดนามิกซ์ (dynamic matrix) ในการคำนวณผลของแอกชั่นของตัวแปรปรับในอนาคตบนเอาท์พุทที่ทำนาย โดยแบบจำลองเชิงเส้นที่ใช้

ได้มาจากการทำการประมาณเชิงเส้น (linearization) ของแบบจำลองแบบไม่เชิงเส้นที่แต่ละช่วงเวลา ในการคำนวณสัมประสิทธิ์ของการตอบสนองแบบสแต็ป ซึ่งจะใช้ในการทำนายที่สแต็ปถัดไป

ต่อมาได้มีการพัฒนาอัลกอริทึมสำหรับการควบคุมร่วมกับเทคนิคการประมาณค่าสแต็ปและพารามิเตอร์โดย Gattu and Zafriou (1992) ได้นำเสนอผลการค้นคว้าในการประยุกต์ใช้ควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์แบบไม่เชิงเส้นและได้ใช้คาลมานฟิลเตอร์ (Kalman filter) เป็นพื้นฐานในการทำนายค่าสแต็ป โดยได้แสดงให้เห็นถึงความสามารถในการควบคุมในการนี้ที่มีการรบกวนระบบที่จุดการดำเนินการที่ไม่มีเสถียรภาพของลูฟเปิด สำหรับการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์โพลีเมอไรเซชัน ในขณะที่ควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์แบบเชิงเส้นไม่สามารถใช้สำหรับกระบวนการที่ไม่มีเสถียรภาพของลูฟเปิดได้

นอกจากการพัฒนาจากการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์มาเป็นควอดราติกไดนามิกส์เมตริกซ์แล้ว Lee and Park (1992) ได้เสนอวิธีการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ที่ใช้ร่วมกับข่ายงานนิวรัล (Neural Network) โดยเชื่อมต่อข่ายงานนิวรัลในแนวนอนกับตัวควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ โดยมีสมมติฐานว่าตัวรบกวนหลัก ๆ สามารถวัดได้ซึ่งได้ประยุกต์ใช้ในการควบคุมหอกลับ และการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์แบบไม่เชิงเส้น จากผลการทดลองพบว่าตัวควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ที่ใช้ข่ายงานนิวรัลเป็นตัวควบคุมแบบป้อนไปข้างหน้ามีสมรรถนะที่ดีกว่าการใช้ตัวควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์เพียงอย่างเดียว

สำหรับการศึกษาค้นคว้าอีกด้านหนึ่ง Garcia and Morari (1982) ได้นำเสนออัลกอริทึมที่เรียกว่า การควบคุมแบบอินเทอร์เนลโมเดล (Internal Model Control, IMC) ซึ่งกล่าวกันว่าการควบคุมแบบอินเทอร์เนลโมเดลเป็นตัวแทนของการเริ่มต้นที่ดีสำหรับการออกแบบและวิเคราะห์เครื่องควบคุมสำหรับกระบวนการแบบเชิงเส้นที่มีตัวแปรอินพุตและเอาต์พุตเดี่ยว (Single Input Single Output, SISO) หรือมีตัวแปรอินพุตเอาต์พุตหลายตัวแปร (Multi Input Multi Output, MIMO) ในเบื้องต้นการควบคุมแบบอินเทอร์เนลโมเดลถูกใช้ในการควบคุมระบบต่าง ๆ ที่มีเวลาหน่วง (dead-time) (Smith, 1985)

การควบคุมแบบอินเทอร์เนลโมเดล เป็นการควบคุมที่มีประสิทธิภาพสำหรับระบบที่เป็นเชิงเส้นซึ่งอธิบายโดยแบบจำลองของทรานสเฟอร์ฟังก์ชัน (transfer function models) วิธีการออกแบบเครื่องควบคุมอยู่บนพื้นฐานของแบบจำลองของกระบวนการแบบเชิงเส้นที่สมมติขึ้นทั้งเวลาต่อเนื่องและดิสครีตและมีการเชื่อมโยงการตั้งเครื่องควบคุมกับค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ ของกระบวนการโดยตรง อีกทั้งสามารถให้ผู้ออกแบบทดสอบสมรรถนะและความทนทานของการควบคุมต่อการเปลี่ยนแปลงต่าง ๆ ของกระบวนการและความผิดพลาดต่าง ๆ ของแบบจำลอง ค่าการตอบสนองที่ทำนายโดยแบบจำลองจะถูกหักออกจากค่าการตอบสนองจริง ค่าความแตกต่าง (เนื่องจากความผิดพลาดของแบบจำลองหรือตัวรบกวนระบบที่ไม่ทราบค่า) จะถูกส่งผ่านทิศทางการป้อนกลับโดยได้มีผู้แสดงให้เห็นถึงความคล้ายคลึงกันของการควบคุมแบบอินเทอร์เนลโมเดลกับการควบคุมแบบป้อนกลับธรรมดา นอกจากนี้อินทิกรัลแอกชัน (integral action) ยังสามารถรวมเข้าไว้ในโครงสร้างของเครื่องควบคุม

ต่อมาได้มีการประยุกต์ใช้การควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดล ร่วมกับเทคนิคการประมาณค่าเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการควบคุม โดยจะช่วยให้เครื่องควบคุมมีความทนทานมากขึ้น “Wellsons and Edgar (1987) ได้แสดงให้เห็นวิธีการประยุกต์ใช้การควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลร่วมกับตัวทำนายค่าแบบ GPA (Generalized Analytical Predictor) เพื่อปรับปรุงการควบคุมในกรณีที่มีค่าตัวแปรกระบวนการให้มีประสิทธิภาพดียิ่งขึ้น

นอกจากนี้ยังได้มีผู้นำเสนอการแปลงวิธีการของการควบคุมแบบไดนามิกส์เมตริกซ์ไปเป็นการควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดล ที่สอดคล้องกัน (Xi, 1984) ได้มีการนำใช้เครื่องควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดล/ไดนามิกส์เมตริกซ์ ในการควบคุมเครื่องบดกระดาษ (paper mill) นำเสนอโดย Matsko (1985) Matsko ได้กล่าวถึงสมรรถนะที่ดีของเครื่องควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลในการควบคุมหน่วยปฏิบัติการต่าง ๆ ในช่วงกว้าง Levten (1985) ได้สรุปถึงการควบคุมโดยอาศัยเครื่องควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลสำหรับคอลัมน์ที่ใช้แยกองค์ประกอบของสารผสม 3 อย่าง (Ternary mixture) ซึ่งให้ผลดีกว่าเครื่องควบคุมแบบตัวแปรอินพุทเอาต์พุทตัวแปรเดียว 3 ตัว

จากการที่ตัวควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลแบบเชิงเส้นนั้น จำกัดสำหรับกระบวนการแบบไม่เชิงเส้นต่าง ๆ เนื่องจากการควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลแบบเชิงเส้นอยู่บนพื้นฐานของแบบจำลองทรานสเฟอร์ฟังก์ชัน ในขณะที่ระบบต่าง ๆ ที่ไม่เป็นเชิงเส้นมักอธิบายด้วยแบบจำลองสเตทสเปซที่ไม่เป็นเชิงเส้น ดังนั้นจึงได้มีการพัฒนาการควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลแบบไม่เชิงเส้นขึ้นมา (Nonlinear Internal Model Control, NIMC) โดยเริ่มจาก Economou (1986) ได้นำเสนอวิธีการของการควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลสำหรับระบบต่าง ๆ ที่ไม่เป็นเชิงเส้นที่มีเสถียรภาพในลูปเปิด (openloop stable) และมีการผกผันที่คงตัว (stable inverses) โดยใช้ตัวดำเนินการอินพุทเอาต์พุตต่าง ๆ (input – output operators) เพื่อแสดงให้เห็นว่าเทคนิคของการควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลแบบไม่เชิงเส้นที่พัฒนาขึ้นมาทำให้ผลการควบคุมที่ดีไม่มีออฟเซต (offset) และมีเสถียรภาพเช่นเดียวกับแบบเชิงเส้น เครื่องควบคุมอยู่บนพื้นฐานของอินเวอร์สของแบบจำลองแบบไม่เชิงเส้นและฟิลเตอร์ถูกเพิ่มเข้าไปเพื่อคำนวณเกี่ยวกับขอบเขตจำกัดของอินพุท และความผิดพลาดต่าง ๆ ของแบบจำลอง อย่างไรก็ตามวิธีการของ Economou นั้นจำกัดต่อระบบที่มีเสถียรภาพในลูปเปิดและมีการผกผันที่คงตัวเท่านั้น

ต่อมา Calvet and Arkun (1988) ได้ใช้วิธีการควบคุมแบบอินเทอนัลโมเดลโดยการนำใช้การประมาณเชิงเส้นสเตทสเปซ (state space linearization) สำหรับกระบวนการที่ไม่เป็นเชิงเส้นต่าง ๆ ที่มีตัวแปรกระบวนการ ซึ่งข้อเสียของการใช้วิธีการประมาณเชิงเส้นสเตทสเปซคือจะมีเอาต์พุทที่ถูกควบคุมที่ไม่แท้จริง (artificial controlled output) เกิดขึ้นในการออกแบบเครื่องควบคุมข้อเสียอีกอย่างหนึ่งของวิธีนี้คือเครื่องควบคุมแบบไม่เชิงเส้นนั้นต้องการการป้อนกลับสเตท (state feedback)

ทางเลือกอีกทางหนึ่งสำหรับวิธีการของการควบคุมแบบอินเทอนัล โมเดลสำหรับระบบต่าง ๆ ที่ไม่เป็นเชิงเส้นนำเสนอโดย Alvarez and Alvarez (1989) การติดตามค่าและการกำหนดพฤติกรรมของระบบถูกปิดสามารถกำหนดได้โดยอิสระผ่านแบบจำลองอ้างอิง 2 แบบจำลอง ซึ่งพัฒนาสำหรับการควบคุมแบบอินเทอนัล โมเดลแบบเชิงเส้นนอกจากนี้วิธีการดังกล่าวยังไม่ต้องการการย้อนกลับสเตท เนื่องจากแบบจำลองของกระบวนการทำหน้าที่เป็นตัวสังเกตการณ์ลูปเปิด (open loop observal) แต่อย่างไรก็ตามการออกแบบแบบจำลองอ้างอิงเพื่อให้ได้สมรรถนะที่กำหนดนั้นทำได้ยาก

ต่อมา Isidori (1989) ได้นำเสนอการควบคุมแบบอินเทอนัล โมเดลแบบใหม่ ในรูปแบบของสมการสเตทสเปซซึ่งง่ายต่อการนำใช้มากกว่าของ Fconomou (1986) การใช้แบบจำลองผกผันของเครื่องควบคุม กับตัวกรองแบบไม่เชิงเส้น ช่วยทำให้เครื่องควบคุมมีเสถียรภาพและมีความสามารถในการนำใช้เพิ่มขึ้น ในการประยุกต์ใช้ Henson and Seborg (1991) ได้นำเสนอการประยุกต์ใช้สำหรับระบบต่าง ๆ ที่มีตัวแปรอินพุทเอาต์พุตตัวเดียวแบบไม่เชิงเส้น เครื่องควบคุมได้ถูกออกแบบเพื่อให้ได้สมรรถนะที่ดีขึ้นและมีการใช้ตัวกรองแบบไม่เชิงเส้นเพื่อคำนวณสำหรับกรณีที่มีความผิดพลาดของแบบจำลองและกระบวนการผลการจำลองสำหรับถังหมักแบบต่อเนื่อง (continuous fermentor) แสดงให้เห็นประสิทธิภาพที่เหนือกว่าการควบคุมแบบพีไอธรรมดา

การพัฒนาอัลกอริทึมต่างๆ ที่ผ่านมาเช่น ไลนามิกส์เมตริกซ์ (Culter, 1983), โมเดลอัลกอริทึม (Richalet et al., 1976) และอินเทอนัล โมเดล (Garcia and Morari, 1982) นั้นแบบจำลองสำหรับการทำนายพฤติกรรมของกระบวนการและการคำนวณค่าการควบคุมนั้นมักมาจากการประมาณเชิงเส้นของกระบวนการของข้อมูลการตอบสนองแบบเสถียรที่ได้จากการทดลอง ซึ่งยังมีข้อเสียเนื่องจากในกระบวนการเคมีจริงมักแสดงพฤติกรรมที่ไม่เป็นเชิงเส้นและกระบวนการทางเคมีหรือชีวเคมีบางกระบวนการที่มีการเปลี่ยนแปลงพฤติกรรมผ่านช่วงเวลา สำหรับกระบวนการเหล่านี้ทำให้มีความต้องการที่จะพัฒนาตัวควบคุมที่มีแบบจำลองที่ไม่เป็นเชิงเส้นโดยตัวของมันเอง

2.2.2 ผลงานการประยุกต์ตัวควบคุมแบบเจเนริกโมเดลสำหรับเครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบเบซท์

ดังนั้น Lee and Sullivan (1988) จึงได้นำเสนอตัวควบคุมที่ชื่อว่าเจเนริกโมเดล (Generic model control, GMC) ในบทความได้อธิบายถึงโครงสร้างของการควบคุมว่าเป็นการควบคุมที่อาศัยแบบจำลองของกระบวนการ โดยแบบจำลองที่ใช้ในการควบคุมจะเป็นแบบจำลองเชิงเส้นหรือไม่เชิงเส้นก็ได้เนื่องจากสามารถใช้แบบจำลองแบบไม่เชิงเส้นในตัวควบคุมแบบเจเนริกโมเดลได้โดยตรง เพื่อที่จะกำหนดผลการตอบสนองที่ต้องการได้ ดังนั้นแบบจำลองที่ใช้จึงไม่จำเป็นต้องทำให้เป็นเชิงเส้นเสียก่อน แต่การประยุกต์ใช้งานของตัวควบคุมจะจำกัดแต่เพียงระบบซึ่งมีความเป็นเชิงเส้นในตัวแปรปรับ (linear in

control) หรือระดับกำลังหนึ่ง (relative degree one) เท่านั้น โดยตัวควบคุมแบบเจนเนริกโมเดลมีเทคนิคการปรับตัวควบคุมโดยการปรับจูนค่าพารามิเตอร์เพียง 2 ค่าเพื่อให้ได้ค่าการตอบสนองของระบบที่ต้องการ

2.2.3 ผลงานการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบแบทช์

Barry J. Cott and Sandro Macchietto (1989) ได้ประยุกต์ใช้อัลกอริทึมแบบเจนเนริกโมเดลของ Lee and Sullivan (1988) ในการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบแบทช์ของปฏิกิริยาคายความร้อน โดยใช้วิธีการควบคุมแบบตัวโหมด (Dual-Mode Control) ไปทำการชิมูเลชันและอาศัยหลักการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาของ Jutan and Uppal (1984) โดยมีการใช้ยุทธวิธีนี้กับเครื่องปฏิกรณ์ในอุตสาหกรรมอีกด้วย ซึ่งยุทธวิธีนี้เป็นการใช้การควบคุมแบบลูฟเปิดในการกำหนดโปรไฟล์ที่เหมาะสมในช่วงการให้ความร้อนให้กับสารในเครื่องปฏิกรณ์โดยการให้ความร้อนให้สูงที่สุดจนกระทั่งอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ถึงจุดที่กำหนดไว้ก่อนแล้วที่ถึงค่าอุณหภูมิเซ็ทพอยท์ และตามด้วยการเปลี่ยนเป็นการให้น้ำหล่อเย็นให้สูงสุดเพื่อทำให้อัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิเป็นศูนย์เมื่ออุณหภูมิถึงเซ็ทพอยท์สุดท้ายที่ต้องการ ซึ่งเมื่อถึงจุดนี้ตัวควบคุมป้อนกลับมาตรฐาน (Standard Feedback Controller) สามารถถูกเปิดสวิตช์เพื่อใช้ในการรักษาอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ให้คงที่อยู่ที่ค่าอุณหภูมิเซ็ทพอยท์ ซึ่งแอกชันของการควบคุมแบบคูล-โหมด คือต้องการนำอุณหภูมิของสารในเครื่องปฏิกรณ์ให้ถึงอุณหภูมิเซ็ทพอยท์ให้เร็วที่สุด และเกิดการโอเวอร์ชูตของอุณหภูมิน้อยที่สุด ผลการควบคุมนี้สามารถควบคุมอุณหภูมิของกระบวนการเกิดปฏิกิริยาคายความร้อนได้เป็นอย่างดีแต่การประมาณค่าความร้อนยังไม่ดีนัก

ต่อมา P.Kittisupakorn (1994) ได้เสนอวิธีการประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาโดยอาศัยตัวกรองคาลมาน (Kaman filter) ตามเอกสารงานวิจัยดังกล่าวแสดงให้เห็นว่าการประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยานั้นดีมาก สามารถประมาณได้ใกล้เคียงกับความร้อนที่เกิดขึ้นจริง ซึ่งแสดงให้เห็นว่าการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล ที่ใช้ร่วมกับการประมาณค่าความร้อนสามารถควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เคมีได้เป็นอย่างดี มีความทนทานสูงสามารถประยุกต์ใช้กับกระบวนการจริงได้ดีกว่าการควบคุมแบบพีไอดี การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์โดยใช้ตัวควบคุมแบบเจนเนริกได้ประสบความสำเร็จในการประยุกต์ใช้ทั้งในระดับของโรงงานต้นแบบ (pilot plant scale) และในระดับอุตสาหกรรมจำนวนมากให้ผลเปรียบเทียบดีกว่าหลายเทคนิคที่เป็นแบบตัวแปรอินพุทเอาต์พุทหลายตัวแปรที่อาศัยการประเมินเชิงเส้น

Riggs and Rhinehart (1988) ได้ใช้อัลกอริทึมนี้ในการควบคุมระบบเตาหลอมทองเหลือง ซึ่งให้ผลที่ดีกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับวิธีการควบคุมแบบพีไอดี และได้มีการค้นพบว่าแบบจำลองสถานะคงตัว (steady-state model) เหมาะสำหรับการลดความไม่แน่นอนเชิงเส้นในตัวควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล

ซึ่ง Shinsky และ Weinstein ได้ใช้แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ที่ได้ถูกพัฒนาจากแถบวาร์เรนสปริงส์ (Pulley) และใช้เครื่องปฏิกรณ์ที่มีแจ็กเก็ตเดี่ยวเดียวในการให้ความร้อนและหล่อเย็น ซึ่งค่าพารามิเตอร์ทางกายภาพ เช่น ปริมาตร, สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน, พื้นที่ผิวขึ้นกับรูปร่าง และโครงสร้างของเครื่องปฏิกรณ์ซึ่งได้อธิบายโดย Luben และอุณหภูมิของแจ็กเก็ตถูกควบคุมด้วยตัวแปรเข้า คือ อุณหภูมิเข้าแจ็กเก็ต ซึ่งต้องใช้เครื่องแลกเปลี่ยนความร้อนในการควบคุมอุณหภูมินี้ เครื่องแลกเปลี่ยนความร้อนนี้ไม่มีแบบจำลองจึงประมาณจากค่าคงที่ใหม่ของการตอบสนองของแจ็กเก็ต ซึ่งพอจะสรุปเป็นปัญหาและแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ จากวารสารที่อ้างถึงกล่าวว่า การควบคุมแบบตัวโมลสามารถทำได้ง่ายโดยใช้ลูฟเปิดให้ความร้อนกับระบบ และตามด้วยลูฟปิดของการควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดี (PID) เพื่อควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ให้คงที่อยู่ที่อุณหภูมิเซ็ทพอยท์

การศึกษาโดยจำลองแบบจำลอง ได้ผลว่าที่สภาวะการดำเนินการปกติตัวควบคุมตัวโมลมีสมรรถนะที่ดี อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์อยู่ที่อุณหภูมิเซ็ทพอยท์ตามที่ต้องการไม่มีการโอเวอร์ชูตของอุณหภูมิ (Overshoot and Undershoot) และการทรานซิชั่นระหว่างโมดลูฟเปิดที่ให้ความร้อนและตัวควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดีถูกทำให้เป็นผลสำเร็จไม่มีรอยฉีกขาดออกจากกันสำหรับในกรณีของการดำเนินการปกตินี้ แต่ในกรณีที่มีความผิดพลาดของพารามิเตอร์ปรากฏว่าผลการตอบสนองของตัวควบคุมตัวโมลจะเกิดการโอเวอร์ชูต นอกจากนี้การทรานซิชั่นระหว่างโมด ลูฟเปิดและโมดตัวควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดีมีการฉีกขาด ทำให้การควบคุมแบบนี้ไม่เหมาะกับระบบที่มีความไม่เป็นเชิงเส้นสูง ๆ อย่างเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ ซึ่งการควบคุมแบบใช้แบบจำลองจึงถูกพิจารณาต่อมา

Luma and Hamer (1986) ทำการทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุมแบบเจนริกเปรียบเทียบกับแบบตัวโมล (Dual Mode) ในกรณีที่มีความผิดพลาดของพารามิเตอร์ที่อาจเกิดขึ้นในกระบวนการได้เช่นเมื่อน้ำหนักของสารตั้งต้นเพิ่มขึ้น สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลงเป็นต้น ผลการทดสอบตัวควบคุมแบบเจนริกโมเดลให้สมรรถนะความทนทานที่ดีกว่าตัวควบคุมแบบตัวโมลจึงสรุปได้ว่าการควบคุมแบบเจนริกโมเดล เหมาะสมกับระบบที่มีความไม่เป็นเชิงเส้นสูงๆ เช่นการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบแบทช์ของปฏิกิริยาคายความร้อน

Masoud Soroush and Costas Kravaris (1992) ได้ทำงานเกี่ยวกับเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์แบบแบทช์ ซึ่งการดำเนินการของกระบวนการเป็นจลนพลศาสตร์โดยแท้ไม่มีสภาวะคงตัว (steady State) และคุณสมบัติของสารภายในเครื่องปฏิกรณ์เช่นความหนืด, ความหนาแน่น, สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน, ฯลฯ มีการเปลี่ยนแปลงตลอดเวลา ทำให้ค่าคงที่เกนและค่าคงที่เวลา (gain and Time Constant) ของกระบวนการแปรผันกับเวลา ซึ่งคุณสมบัติเหล่านี้มีขอบเขตกว้างมากระหว่างวัฏจักรของแบทช์ (Batch Cycle) และมากกว่ากระบวนการแบบต่อเนื่องหลาย ๆ กระบวนการซึ่งมีขอบเขตเล็ก ๆ เมื่อถูกเปรียบเทียบในข้อนี้ เพราะลักษณะเด่นชัดของกระบวนการแบบแบทช์ดังนั้นการที่จะทำให้การควบคุมกระบวนการ

แบบเบทซ์ประสบความสำเร็จจึงต้องการตัวควบคุมที่สามารถกำหนดการตอบสนองที่ดีเหนือขอบเขตการดำเนินการของตัวแปรของกระบวนการ ถ้านำการควบคุมที่เป็นเชิงเส้นมาใช้ในการควบคุมกับกระบวนการแบบเบทซ์การจูนใหม่ (Returning) จะถูกพิจารณานำมาใช้เพื่อขยายความเร็วของการตอบสนองของลูปปิดเหนือความกว้างของการดำเนินการภายนอก ซึ่ง Juba and Hamer ; Ray ได้พิจารณาความบ่ยของการจูนใหม่ของตัวควบคุมแบบเชิงเส้น (แบบพีไอดีทั่วไป) ว่าเป็นการควบคุมที่มีขอบเขตจำกัด ซึ่งกระบวนการแบบเบทซ์อาจจะสามารถดำเนินการได้

ด้วยความสำคัญของกระบวนการแบบเบทซ์ข้างบนนี้ทำให้จำเป็นต้องใช้การควบคุมแบบไม่เป็นเชิงเส้นในการควบคุม

2.3 แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์ที่เกี่ยวข้อง

พิจารณาปฏิกิริยาอันดับที่หนึ่งที่ทำตามลำดับกันในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบทซ์เมื่อเวลาดำเนินไป

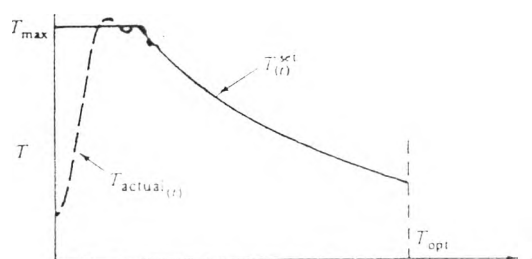


ผลิตภัณฑ์ที่เราต้องการคือองค์ประกอบ B ซึ่งเมื่อเราปล่อยให้ปฏิกิริยาดำเนินต่อไปจะทำให้ B ทำปฏิกิริยากลายเป็น C ซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ที่เราไม่ต้องการมากเกินไปทำให้ค่าผลิตภัณฑ์ (Yield) มีค่าน้อย แต่ถ้าทำการหยุดปฏิกิริยาเร็วเกินไปจะมีองค์ประกอบ A ที่ไม่ได้ทำปฏิกิริยาติดมาในผลิตภัณฑ์ด้วยทำให้คอนเวอร์ชันและค่าผลิตภัณฑ์ต่ำ ดังนั้นเบทซ์ใหม่ที่เหมาะสมคือเวลาที่ควรหยุดปฏิกิริยา โดยการทำให้ส่วนผสมในเครื่องปฏิกรณ์เย็นลงอย่างรวดเร็ว

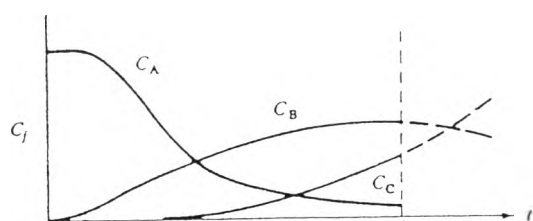
กระบวนการนี้ต้องการโปรไฟล์ของอุณหภูมิ (Optimal Temperature Profile) ที่เหมาะสม ซึ่งทั้งสองปฏิกิริยานี้อุณหภูมิจะไม่มีผล ถ้าทั้งสองปฏิกิริยานี้มีค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาเฉพาะ (k_1 และ k_2) เหมือนกัน (ถ้าค่าพลังงานกระตุ้นของทั้งสองปฏิกิริยาเท่ากัน) ซึ่งปฏิกิริยานี้ควรถูกทำที่อุณหภูมิสูงเท่าที่เป็นไปได้ที่เบทซ์ใหม่ต่ำ ๆ เพื่อป้องกันไม่ให้เกิดปฏิกิริยาการสลายตัวหรือเกิดปฏิกิริยาการเกิดพอลิเมอร์ของผลิตภัณฑ์ B ที่อุณหภูมิสูงๆ โดยอุณหภูมิสูงสุดที่ใช้ทำปฏิกิริยาช่วงนี้ขึ้นอยู่กับขีดจำกัดของกระบวนการ เช่น ความดันของเครื่องมือและอุณหภูมิสูงสุดที่ระบบจะทำงานได้ เป็นต้น

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

ถ้า k_1 ขึ้นกับอุณหภูมิน้อยกว่า k_2 โพรไฟล์ของอุณหภูมิที่เหมาะสมจะเริ่มที่อุณหภูมิสูงเพื่อทำให้เกิดปฏิกิริยาที่หนึ่งให้มากที่สุด แต่หยุดการสูญเสียขององค์ประกอบ B ดังรูปที่ 2.4 และรูปที่ 2.5



รูปที่ 2.4 โพรไฟล์ของอุณหภูมิที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์



รูปที่ 2.5 โพรไฟล์ของความเข้มข้นของแต่ละองค์ประกอบในเครื่องปฏิกรณ์

จากรูปได้แสดงโพรไฟล์ของอุณหภูมิและความเข้มข้นที่เหมาะสมให้เห็น ซึ่งเส้นจุดเป็นตัวอย่างของอุณหภูมิทั่วไปซึ่งควรจะเกิดขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์จริง ส่วนเส้นทึบเป็นโพรไฟล์อุณหภูมิที่เหมาะสมที่จะถูกป้อนเป็นเซตพอยท์ให้กับตัวควบคุม ที่กล่าวมานี้เราสามารถเขียนเป็นแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการนี้โดยสมมติว่าความหนาแน่นของสารที่อยู่ในเครื่องปฏิกรณ์มีค่าคงที่หลังจากที่สารตั้งต้นได้ถูกป้อนลงไปแล้วและวงจรแบทช์เริ่มขึ้น

จากสมการดุลมวลสารทั้งหมด :

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

นั่นคือ ไม่มีการไหลเข้าและการไหลออกของมวลและความหนาแน่นคงที่ดังนั้น $dV/dt = 0$ หรือ ปริมาตรของสารในเครื่องปฏิกรณ์คงที่

สมการดุลมวลสารขององค์ประกอบ A :

$$\frac{VdC_A}{dt} = -Vk_1C_A \quad (2.3)$$

สมการดุลมวลสารขององค์ประกอบ B :

$$\frac{VdC_B}{dt} = Vk_1C_A - Vk_2C_B \quad (2.4)$$

สมการทางจลนพลศาสตร์ :

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

ใช้แบบจำลอง (Lumped Model) สำหรับผนังโลหะของเครื่องปฏิกรณ์และใช้สมการเอนทัลปีอย่างง่าย $h = CpT$, สมการอนุรักษ์พลังงานของของเหลวที่ทำปฏิกิริยาและผนังโลหะของเครื่องปฏิกรณ์สามารถเขียนได้ดังนี้

สมการอนุรักษ์พลังงานของกระบวนการ :

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = -\lambda_1 V k_1 C_A - \lambda_2 V_2 C_B - h_i A_i (T - T_M) \quad (2.6)$$

สมการอนุรักษ์พลังงานสำหรับผนัง :

$$\rho_M V_M C_M \frac{dT_M}{dt} = h_o A_o (T_j - T_M) - h_i A_i (T_M - T) \quad (2.7)$$

เมื่อ λ_1 และ λ_2 เป็นความร้อนที่คายออกมาจากปฏิกิริยาของปฏิกิริยาทั้งสอง

หมายเหตุ เมื่อเครื่องปฏิกรณ์ถูกให้ความร้อนด้วยไอน้ำค่าของ T_j มีค่ามากกว่า T_M และค่า T_M มีค่ามากกว่า T และเมื่อหล่อเย็นด้วยน้ำหล่อเย็นผลของอุณหภูมินี้จะเป็นตรงข้ามกัน ดังนั้นควรเข้าใจด้วยว่า Ho ที่ใช้ในสมการมีค่าต่างกันสำหรับไอน้ำและการไหลของน้ำหล่อเย็น

สำหรับการเปลี่ยนจากการทำให้ร้อนไปเป็นการหล่อเย็นทันทีนั้นเป็นวิธีที่ค่อนข้างเป็นกลยุทธ์ โดยเฉพาะการทำให้อุณหภูมิถึง T_{max} ควรทำให้เร็วที่สุดเท่าที่เป็นไปได้แต่ไม่ควรเกิดการโอเวอร์ชูตโดยทั่วไป การดำเนินการแบบนี้ทำได้โดยใช้ตัวควบคุมอุณหภูมิรักษาการเปิดปิดวาล์วไอน้ำให้เปิดและปิดวาล์วน้ำหล่อเย็นเข้าและวาล์วน้ำหล่อเย็นออกแต่วาล์วคอนเดนเสตเปิดเมื่อกำลังดำเนินการให้ความร้อน

เมื่อต้องการหล่อเย็นตัวควบคุมอุณหภูมิจะรักษาการปิดวาล์วไอน้ำและวาล์วคอนเดนเสตและรักษาการเปิดวาล์วน้ำหล่อเย็นทั้งน้ำหล่อเย็นเข้าและน้ำหล่อเย็นออกเพื่อนำน้ำหล่อเย็นเข้าสู่แจ็กเก็ต

เพื่อให้ง่ายต่อการศึกษารายละเอียดการซิมูเลชันและการควบคุมระบบที่คล้ายกับระบบนี้จะให้ความสัมพันธ์ง่าย ๆ ระหว่างค่าสัญญาณความผิดพลาด (E) ซึ่งเป็นผลต่างระหว่างอุณหภูมิเซ็ทพอยท์กับอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ ($T_{set} - T$) และค่าอัตราการไหลเชิงปริมาตรของไอน้ำ F_s และอัตราการไหลเชิงปริมาตรของน้ำเย็น F_w ดังนี้

$$F_s = f_1(E) : F_w = f_2(E) \quad (2.8)$$

สมการนี้อธิบายว่าเรากำลังทำอะไรในแจ็กเก็ต ซึ่งอาจต้องกำหนดความแตกต่างของสองสมการ ขึ้นอยู่กับขั้นตอนการทำให้ร้อนหรือการหล่อเย็น เราอาจจำเป็นต้องพิจารณาขั้นตอนที่สามนั้น คือการบรรจุน้ำหล่อเย็นเข้าสู่แจ็กเก็ต ซึ่งถ้าอัตราการไหลของน้ำหล่อเย็นสูงและปริมาตรของแจ็กเก็ตมีค่าน้อยอาจอนุโลมโดยไม่ต้องนำเวลาในการบรรจุแจ็กเก็ตมาคิด

2.3.1 เฟสการให้ความร้อน (Heating Phase)

ระหว่างที่ทำการปฏิบัติการให้ความร้อนกับเครื่องปฏิกรณ์ด้วยไอน้ำให้พิจารณาสมการความต่อเนื่องทั้งหมดและสมการอนุรักษ์พลังงานของไอน้ำนั้น

สมการความต่อเนื่องทั้งหมด :

$$\frac{V_j d\rho_j}{dt} = F_s \rho_s - W_c \quad (2.9)$$

- เมื่อ ρ_j = ความหนาแน่นของไอน้ำในแจ็กเก็ต
 V_j = ปริมาตรของแจ็กเก็ต
 ρ_s = ความหนาแน่นของไอน้ำที่เพิ่มเข้ามา
 W_c = อัตราการควบแน่นของไอน้ำ (มวล/เวลา)

โดยของเหลวที่กลั่นตัวลงมาจะถูกปล่อยออกทางกับดักไอน้ำ (Steam Trap)
สมการอนุรักษ์พลังงานสำหรับไอน้ำ :

$$V_J \frac{d(U_J \rho_J)}{dt} = F_S D_S H_C - h_O A_O (T_J - T_M) - W_C h_C \quad (2.10)$$

เมื่อ U_J = พลังงานภายในของไอน้ำในแจ็กเก็ต
 H_S = เอนทาลปีของไอน้ำที่เข้ามา
 h_C = เอนทาลปีของของเหลวที่กลั่นตัวลงมา

พลังงานภายในที่เปลี่ยนแปลงปกติสามารถยกเว้นไม่ต้องนำมาคิดเมื่อเปรียบเทียบกับผลของความ
ร้อนแฝงทำให้ได้สมการพีชคณิตง่าย ๆ เมื่อสมการอนุรักษ์พลังงานอยู่ที่สภาวะคงตัว (Steady State) ดังนี้

$$W_C = \frac{h_O A_O (T_J - T_M)}{H_S - h_C} \quad (2.11)$$

สมการของสถานะสำหรับไอน้ำหรือตารางไอน้ำสามารถถูกใช้ในการคำนวณอุณหภูมิ
ของแจ็กเก็ต T_J และความดัน P_J จากความหนาแน่น ρ_J (ยกตัวอย่างเช่น ถ้าเป็นก๊าซสมบูรณ์และสมการความ
ดันไอน้ำ) อย่างง่ายสามารถถูกใช้ได้

$$\rho_J = \frac{M \exp\left(\frac{A_w}{T_J} + B_w\right)}{RT_J} \quad (2.12)$$

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) ซึ่งปกติแล้ว
เราจำเป็นต้องทราบค่า P_J เพื่อคำนวณค่าอัตราการไหลของไอน้ำที่ผ่านวาล์วเข้ามาเมื่ออัตราการไหลขึ้น
กับความดันลดคร่อมผ่านวาล์ว

ถ้ามวลของโลหะที่อยู่รอบ ๆ แจ็กเก็ตมีความสำคัญสมการพลังงานจำเป็นสำหรับมันหรืออาจจะละ
เลยไม่คิดมันก็ได้ถ้ามันไม่มีความสำคัญมากนัก

เครื่องปฏิกรณ์ที่มีแจ็กเก็ตส่วนใหญ่ปริมาตรของไอน้ำที่อยู่ในแจ็กเก็ตมีค่าค่อนข้างน้อยเมื่อเทียบกับ
กับอัตราการไหลของมันทำให้พลวัตการตอบสนองของมันเร็วมาก ดังนั้นสมการดุลมวลและพลังงานที่เป็น
พีชคณิตง่าย ๆ บ่อยครั้งที่สามารถถูกนำมาใช้ได้ อัตราการไหลของไอน้ำถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับอัตราการ

ไหลควบแน่นซึ่งถูกคำนวณหาความสัมพันธ์ของการถ่ายเทความร้อน ($Q = UA\Delta T$) ด้วยวิธีไอเทอเรทีฟ และสมการการไหลของวาล์ว สำหรับความดันในแจ็กเก็ต และการไหลควบแน่น

2.3.2 เฟสการหล่อเย็น (Cooling Phase)

ระหว่างที่น้ำเย็นกำลังไหลผ่านแจ็กเก็ตเพียงแค่สมการอนุรักษ์พลังงานสมการเดียวก็เพียงพอ เมื่อสมมติว่าของเหลวในแจ็กเก็ตมีการผสมกันอย่างสมบูรณ์แบบสมการอนุรักษ์พลังงานในแจ็กเก็ต :

$$\rho_J V_J C_J \frac{dT_J}{dt} = F_w C_w \rho_J (T_{JO} - T_J) + h_O A_O (T_M - T_J) \quad (2.13)$$

เมื่อ	T_J	=	อุณหภูมิของน้ำหล่อเย็นในแจ็กเก็ต
	P_J	=	ความหนาแน่นของน้ำหล่อเย็น
	C_J	=	ความจุความร้อนของน้ำหล่อเย็น
	T_{JO}	=	อุณหภูมิของน้ำหล่อเย็นขาเข้า

2.4 การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ (Temperature Control of Batch Reactor)

จากตัวอย่างการสร้างแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ข้างบนนี้จะเห็นว่ากระบวนการแบบแบทช์เป็นกระบวนการที่ไม่เป็นเชิงเส้นและยังคงมีการรักษาพฤติกรรมที่เป็นจลนศาสตร์โดยแท้ คือไม่มีสภาวะคงตัว คุณสมบัตินี้ทำให้ผู้เชี่ยวชาญได้ศึกษาเกี่ยวกับการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์กันมาก เพราะการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์เป็นงานหนักที่ทำหายและจำเป็นต้องใช้การควบคุมที่ไม่เป็นเชิงเส้นในการควบคุม

โดยเฉพาะการดำเนินการที่เริ่มต้นให้ความร้อนกับส่วนผสมของปฏิกิริยา (Reaction Mixture) จากอุณหภูมิในแจ็กเก็ตและตามด้วยการควบคุมอุณหภูมิของปฏิกิริยาคายความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์นั้นเป็นงานที่ยาก โดย Shinsky ได้ให้เหตุผลว่าเกิดจากปริมาณความร้อนที่คายออกมาจากการเกิดปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วรวมถึงมีค่ามากอย่างต่อเนื่องเมื่อส่วนผสมของปฏิกิริยาได้รับความร้อนและปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ไม่มีสภาวะคงตัวและความไม่เป็นเชิงเส้นของกระบวนการ ทำให้เกิดการ

รันอะเวย์ของอุณหภูมิ (Temperature Runaway) ของเครื่องปฏิกรณ์ ถ้าอัตราการปล่อยความร้อนที่ออกมาจากปฏิกิริยามีค่ามาก และมากกว่าอัตราการถ่ายเทความร้อนผ่านผนังไปสู่ น้ำหล่อเย็นที่ไหลผ่านแจ็กเก็ต การรันอะเวย์ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์นี้มีผลกระทบต่ออุปกรณ์และบุคลากรในโรงงานเป็นอย่างยิ่ง ดังนั้นการควบคุมอัตราการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์จึงต้องระมัดระวังเป็นพิเศษ เพื่อทำให้เกิดการ โอเวอร์ชูตของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เหลือน้อยที่สุดจึงเป็นสิ่งที่ต้องการ และจำเป็น อย่างยิ่ง นอกจากนี้ในขั้นตอนการเพิ่มความร้อน (Heat Up) ให้กับส่วนผสมของปฏิกิริยาเพื่อให้อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ถึงจุดเซ็ทพอยท์ควรทำความเร็วโดยไม่ให้เกิดการ โอเวอร์ชูตก็เป็นสิ่งจำเป็นเพื่อลด วงจรในการดำเนินการ แต่อย่างไรก็ตามการควบคุมการให้ความร้อนกับส่วนผสมของปฏิกิริยาก็นับกับ ความจำเป็นของกระบวนการผลิตรวมถึงความปลอดภัยและคุณภาพของผลิตภัณฑ์นั้นด้วย

บทที่ 3

การควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล, จีเอ็มซี(Generic Model Control)

กระบวนการทางเคมีส่วนใหญ่ในอุตสาหกรรม มีแบบจำลองแบบไม่เป็นเชิงเส้น จึงทำให้ปัจจุบันมีการพัฒนาเทคนิคการควบคุม ระบบที่ไม่เป็นเชิงเส้นมากขึ้น โดยเทคนิคส่วนใหญ่จะเน้นในความสะดวกต่อการใช้งาน สามารถนำไปใช้ในทางปฏิบัติได้จริง

เทคนิคการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล(จีเอ็มซี)เป็นอีกเทคนิคหนึ่งที่มีการพัฒนามาเพื่อให้สามารถใช้แบบจำลองแบบไม่เป็นเชิงเส้น ในตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีโดยตรงโดยอาศัยการปรับจูนสองพารามิเตอร์ เพื่อที่จะกำหนดผลตอบสนองที่ต้องการได้ ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีเป็นการควบคุมโดยอาศัยแบบจำลองกระบวนการในการคำนวณหาค่าตัวแปรปรับและอาศัยการปรับจูนพารามิเตอร์ 2 ค่าเท่านั้นเพื่อให้ได้ค่าตอบสนองของระบบที่ต้องการ ซึ่งสามารถใช้แบบจำลองของกระบวนการที่ไม่เป็นเชิงเส้นแทรกอยู่ในคอนโทรลอัลกอริทึมได้โดยไม่ต้องผ่านการทำให้เป็นเชิงเส้น (Linearization) ซึ่งสามารถอธิบายการประยุกต์เพื่อนำไปใช้ควบคุมกระบวนการทั่วไป โดยเริ่มพิจารณาจากแบบจำลองของกระบวนการ โดยมีเทคนิคดังต่อไปนี้

3.1 เทคนิคการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล (จีเอ็มซี)

สิ่งสำคัญที่การควบคุมแบบจีเอ็มซีต้องการคือแบบจำลองของกระบวนการและการวัดค่าตัวแปรที่ต้องการควบคุม

1. หาแบบจำลองของระบบ ซึ่งอยู่ในรูปความสัมพันธ์ของตัวแปรสถานะ(State Variable,x) กับตัวแปรปรับ(Manipulate Variable,u) และเวลา (time,t)

$$dx/dt = F(x, u, t) \quad (3.1)$$

โดยที่ฟังก์ชัน F นี้จะเป็นฟังก์ชันแบบเชิงเส้น หรือไม่เป็นเชิงเส้นก็ได้

2. เปลี่ยนแบบจำลองให้อยู่ในรูป จีเอ็มซีอัลกอริทึม (GMC Algorithm) โดยการทำอนุพันธ์แบบจำลองของตัวแปรสถานะ ให้มีค่าเท่ากับเทอมพหุคูณอินทิกรัล (Proportional Integral Term) ที่กระทำบนผลต่างของตัวแปรควบคุมที่เวลาใด ๆ กับค่าของตัวแปรที่ต้องการควบคุม (Y^*) นั่นคือ

$$\dot{x}/dt = F(x,u,t) \quad (3.2)$$

$$Y = H(x) \quad (3.3)$$

$$\dot{Y} = \frac{\partial H(x)}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t} \quad (3.4)$$

$$\dot{Y} = \frac{\partial H(x)}{\partial x} \cdot F(x,u,t) \quad (3.5)$$

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

เพราะเราสามารถวัด ค่า $Y = H(x) = x$ ได้ ดังนั้น $\frac{\partial H(x)}{\partial x} = \frac{\partial x}{\partial x} = 1$

ดังนั้นจะได้ $\dot{Y} = F(x,u,t) \quad (3.6)$

กำหนดให้ Y^* คือค่าเอาต์พุตที่ต้องการ และ Y คือค่าตัวแปรออก ดังนั้น $Y^* - Y = \mathcal{E}$ สามารถเขียนสมการได้ดังนี้

$$Y^{\#} = K_1(Y^* - Y) \quad (3.7)$$

$$Y^{\#} = \int_0^t K_2(Y^* - Y) dt \quad (3.8)$$

กรณีแรก $Y^{\#}$ คือฟังก์ชันของเอาต์พุตของกระบวนการที่มีการย้อนกลับเข้าสู่สถานะคงตัว

กรณีสอง $Y^{\#}$ คือฟังก์ชันของค่าเอาต์พุตของกระบวนการที่ต้องการค่าเอาต์พุตเท่ากับค่าเซ็ทพอยท์ (Offset = 0)

เมื่อ K_1 และ K_2 เป็นค่าคงที่การจูน (Tunning Constant) เป็นพารามิเตอร์เพียง 2 ค่าที่ทำให้ค่าการตอบสนองของระบบเป็นไปตามต้องการ

เพื่อเพิ่มสมรรถนะ (Performance) ของการควบคุม รูปแบบของจีเอ็มซีอัลกอริทึมจึงเป็นการรวมแบบจำลองของกระบวนการทั้งสองสถานะ ในสมการที่ 3.7 และ 3.8 โดยเขียนสมการรวมได้ดังนี้

$$\dot{Y} = K_1(Y^* - Y) + K_2 \int_0^t (Y^* - Y) dt \quad (3.9)$$

สมการไม่เป็นเชิงเส้นสามารถจัดให้อยู่ในรูปเชิงเส้นได้ดังนี้

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

$$dx/dt = F(x, u, t) = K_1 \mathcal{E}(t) + K_2 \int_0^t \mathcal{E}(t) dt \quad (3.10)$$

ในสมการ (12) เป็นอัลกอริทึมแบบต่อเนื่อง ซึ่งสามารถทำให้อยู่ในรูปดิสคริต (Discrete Form) โดยใช้วิธีเชิงตัวเลข (Numerical Method) ได้ดังนี้

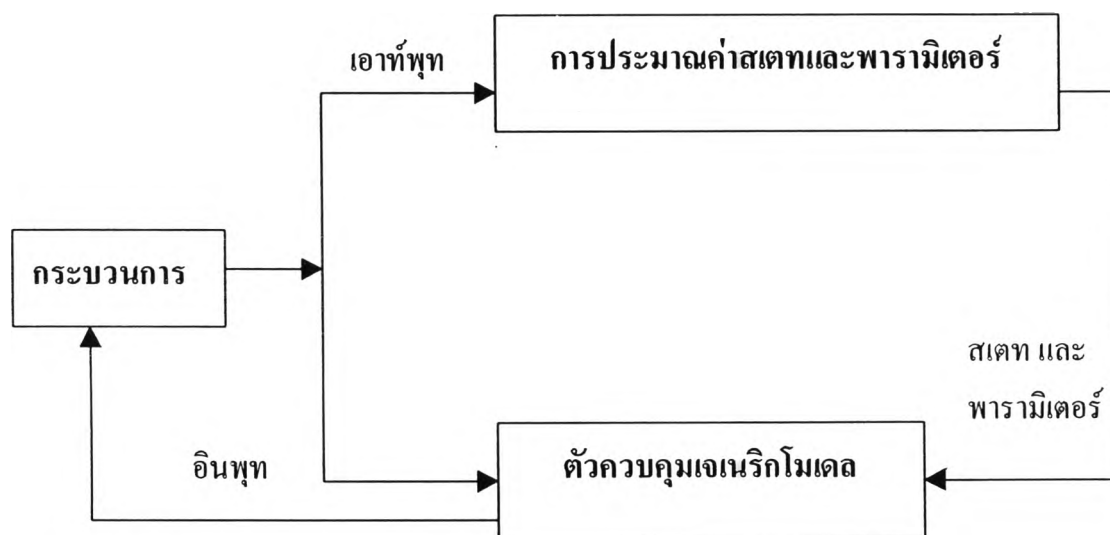
$$F(x, u, t)^{(k)} = K_1(t)(Y^* - Y^{(k)}) + K_2(t) \sum_0^k (Y^* - Y^{(k)}) \Delta t \quad (3.11)$$

ข้อได้เปรียบและข้อจำกัดของการควบคุมแบบจีเอ็มซี

จากสมการแสดงให้เห็นว่าสมรรถนะของการควบคุมแบบจีเอ็มซี นี้เกี่ยวข้องกับความผิดพลาดของแบบจำลองของกระบวนการมากกว่าค่าแอมโพลิตูดพารามิเตอร์จึงเป็นข้อได้เปรียบของการควบคุมแบบจีเอ็มซี อย่างไรก็ตามการควบคุมแบบจีเอ็มซีก็ยังมีข้อจำกัดคือ การประยุกต์ใช้งานของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซี จะจำกัดแต่เพียงระบบซึ่งมีความเป็นเชิงเส้นในตัวแปรปรับ (Linear in Control) หรือระดับกำลังหนึ่ง (Relative Degree One) เท่านั้น

3.2 การควบคุมแบบเจนริกโมเดลร่วมกับตัวประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์

เนื่องจากการควบคุมแบบจีเอ็มซีเป็นการควบคุมที่ขึ้นอยู่กับแบบจำลองของกระบวนการดังนั้นในการคำนวณค่าตัวแปรปรับเพื่อควบคุมตัวแปรควบคุมให้อยู่ที่ค่าที่ต้องการนั้น ค่าตัวแปรอื่นๆ รวมทั้งพารามิเตอร์ของกระบวนการที่มีส่วนเกี่ยวข้องด้วย ดังนั้นเมื่อมีค่าสเททหรือพารามิเตอร์ต่างๆที่ใช้ในตัวควบคุมที่ไม่ทราบค่าที่แท้จริงหรือวัดค่าไม่ได้ จึงทำให้การควบคุมแบบจีเอ็มซี มีการนำการประมาณค่าสเททหรือพารามิเตอร์มาใช้ร่วมกับการควบคุม



รูปที่ 3.1 การควบคุมแบบจีเอ็มซีควบคู่ไปกับการประมาณค่าสเทตและพารามิเตอร์

จากรูปที่ 3.1 แสดงให้เห็นว่าค่าเอาต์พุตของกระบวนการที่วัดค่าได้จะถูกนำมาใช้ในการประมาณค่าสเทตหรือพารามิเตอร์โดยใช้ตัวประมาณค่า เช่น ตัวประมาณค่าออนไลน์ (On-line Estimator) ซึ่งค่าสเทตและพารามิเตอร์ที่ได้จากการประมาณค่าจะถูกส่งเข้าตัวควบคุมจีเอ็มซีเพื่อทำการคำนวณค่าตัวแปรปรับต่อไป ดังนั้นตัวประมาณค่าจะมีบทบาทอย่างมากต่อประสิทธิภาพของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีถ้าตัวประมาณค่าได้ผลการประมาณที่ดีตัวควบคุมจีเอ็มซีจะสามารถคำนวณค่าตัวแปรปรับได้อย่างเหมาะสม ทำให้สามารถควบคุมตัวแปรควบคุมให้อยู่ที่ค่าที่ต้องการได้

3.3 การประยุกต์รูปแบบของสมการจีเอ็มซีมาใช้ในการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

วารสารของ Barry J. Cott and Sandro Macchietto (1989) ได้ทำการศึกษาแบบจำลองของปฏิกิริยาคายความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ โดยเป้าหมายของการควบคุมคือให้ความร้อนกับเครื่องปฏิกรณ์เคมีเพื่อเพิ่มอุณหภูมิจากอุณหภูมิห้องจนถึงอุณหภูมิเซ็ทพอยท์ที่กำหนดไว้และควบคุมอุณหภูมิให้คงที่ไว้ที่ค่านี้ตลอดช่วงเวลาของการเกิดปฏิกิริยา

พิจารณาสมการดุลพลังงานรอบเครื่องปฏิกรณ์

อัตราการสะสมพลังงาน = พลังงานที่เข้า - พลังงานที่ออก + พลังงานที่เกิดขึ้น - พลังงานที่หายไป

$$C_p W_r \frac{dT_r}{dt} = UA(T_j - T_r) + Q_r \quad (3.12)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{UA(T_j - T_r)}{C_p W_r} + \frac{Q_r}{C_p W_r} \quad (3.13)$$

นำความสัมพันธ์นี้มาประยุกต์ใช้ในสมการจีเอ็มซีอัลกอริทึม สมการที่ 3.10 โดยแทนค่า x ด้วย T_r สมการในการควบคุมอุณหภูมิในรูปแบบสมการจีเอ็มซีอัลกอริทึมดังนี้

$$\frac{dT_r}{dt} = K_1(T_r^{sp} - T_r) + K_2 \int (T_r^{sp} - T_r) dt \quad (3.14)$$

$$K_1(T_r^{sp} - T_r) + K_2 \int (T_r^{sp} - T_r) dt = \frac{[UA(T_j - T_r) + Q]}{C_p W_r} \quad (3.15)$$

โดยเราสามารถหาสมการความสัมพันธ์ของตัวแปรปรับ (T_j) กับตัวแปรที่ต้องการควบคุม (T_r) ในรูปของสมการจีเอ็มซีอัลกอริทึมได้ดังนี้

$$T_j^{(k)} = T_r - \frac{Q}{UA} + W_r C_p \left[K_1(T_r^{sp} - T_r) + K_2 \int_0^t (T_r^{sp} - T_r) \Delta t \right] \quad (3.16)$$

3.4 โดยนำมาประยุกต์ในรูปการหาค่าตอบของสมการ ให้ง่ายขึ้นโดยให้อยู่ในรูปแบบดิสมิตของจีเอ็มซีอัลกอริทึมสามารถเขียนได้ดังนี้

$$T_j^{(k)} = T_r^{(k)} - \frac{Q^{(k)}}{UA} + W_r C_p \left[K_1(T_r^{sp} - T_r^{(k)}) + K_2 \sum_0^k (T_r^{sp} - T_r^{(h)}) \Delta t \right] \quad (3.17)$$

ผลลัพธ์จากสมการนี้ จะให้อุณหภูมิทั่วไปของแจ็กเก็ต ($T_j^{(k)}$) ไม่ใช่อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ของแจ็กเก็ต ($T_j^{sp(k)}$) ที่ทำให้อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เข้าสู่อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ ($T_r^{(k)}$) ถ้าใช้ค่า $T_j^{(k)}$ ในการควบคุมโดยตรงจะส่งผลทำให้การเข้าสู่เซ็ทพอยต์ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ช้าลง หรือไม่เข้าหาจุดเซ็ทพอยต์เลย

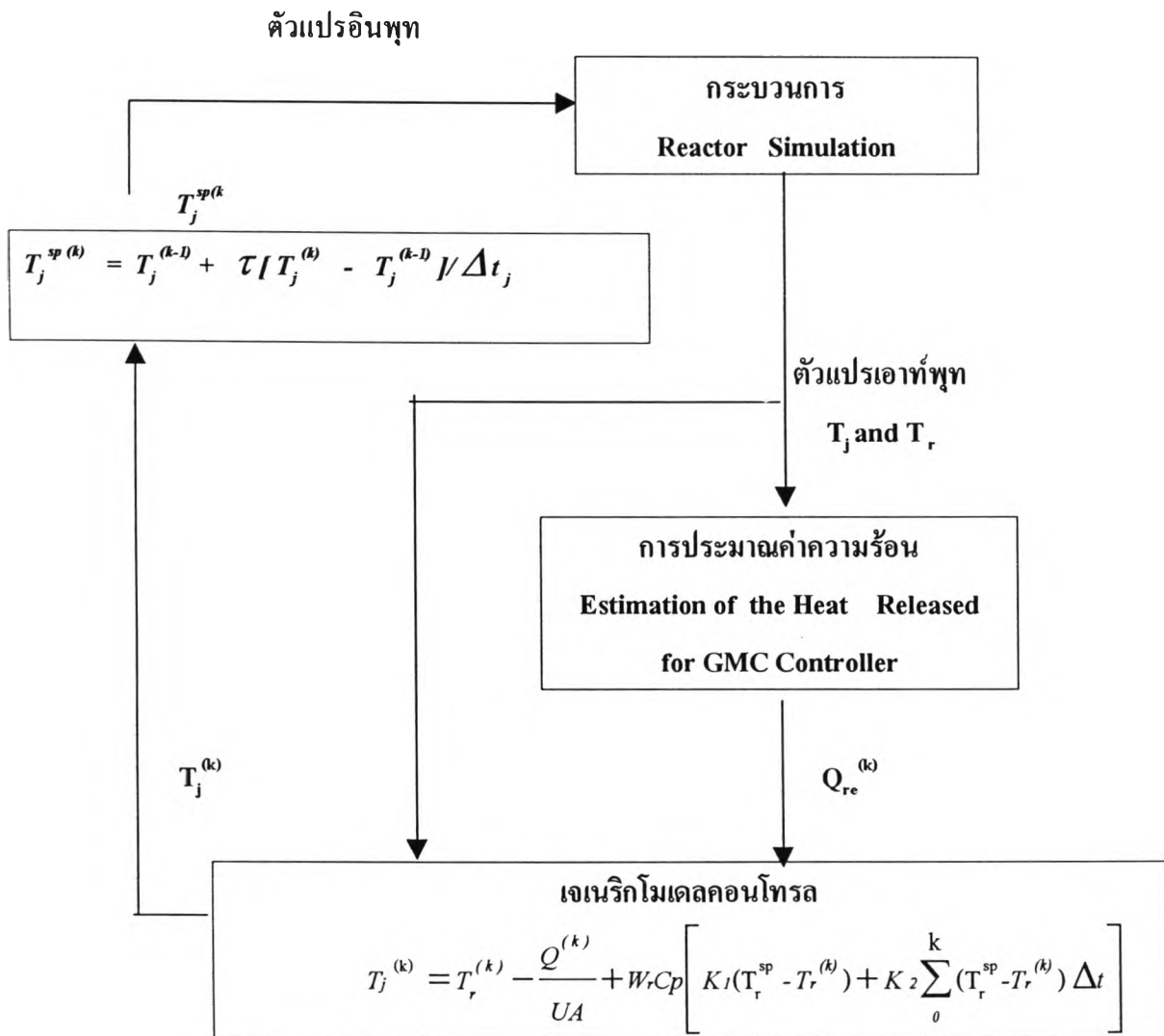
จากสมมติฐานปี 1986 ของ Liptak อุณหภูมิเซ็ทพอยท์ของแจ็กเก็ต สามารถหาได้โดย สมมติแบบจำลองพลวัตของแจ็กเก็ตเป็นแบบจำลองอันดับหนึ่ง และกำหนดค่าให้ τ_j เป็นค่าคงที่เวลาของแจ็กเก็ตที่ถูกระบาดขึ้น โดยให้เหตุผลว่าแจ็กเก็ตของเครื่องปฏิกรณ์มีไดนามิกส์คอมเพนเซต (dynamic compensation)

$$T_j^{(k)} = T_j^{(k-1)} + \Delta t [T_j^{sp(k)} - T_j^{(k-1)}] / \tau_j \quad (3.18)$$

นั่นคือ
$$T_j^{sp(k)} = T_j^{(k-1)} + \tau [T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}] / \Delta t_j \quad (3.19)$$

เมื่อเราหาค่า $T_j^{sp(k)}$ ได้ ก็สามารถมาควบคุมอุณหภูมิของภายในเครื่องปฏิกรณ์เข้าสู่เซ็ทพอยท์ได้ ($T_r^{sp}, T_j^{(k)}$) ต้องทราบค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา $Q^{(k)}$ ซึ่งไม่สามารถวัดได้จึงต้องอาศัยการประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา $Q_{rc}^{(k)}$

โดยอาศัยหลักการประยุกต์ใช้ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีร่วมกับกับการประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์ดังกล่าวไว้ในข้อ 3.2 ข้างต้น โดยจากกระบวนการควบคุมอุณหภูมิของปฏิกิริยาคายความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ จะใช้การควบคุมแบบจีเอ็มซีควบคู่ไปกับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาดังนี้ ค่าเอาต์พุตที่ได้จากกระบวนการคือ ค่าอุณหภูมิของปฏิกรณ์และค่าอุณหภูมิของแจ็กเก็ตที่วัดได้ (T_{rm} และ T_{jm}) จะส่งไปให้กับตัวประมาณค่าความร้อน เพื่อประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา ($Q_{rc}^{(k)}$) ในขณะที่เดียวกันค่าเอาต์พุตเหล่านั้นจะป้อนให้กับตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีด้วย ซึ่งตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีจะใช้ค่า (T_{rm}, T_{jm} และ $Q_{rc}^{(k)}$) เพื่อคำนวณค่า T_{jp} และ $T_j^{sp(k)}$ ได้ เพื่อทำการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ให้อยู่ที่เซ็ทพอยท์ที่ต้องการได้ โดยสามารถแสดงความสัมพันธ์ดังไดอะแกรมต่อไปนี้



รูปที่ 3.2 แสดงการควบคุมอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์โดยใช้การควบคุมแบบจีเอ็มซีควบคู่ไปกับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา

เราสามารถวัดค่า T_j และ T_r ที่ออกจากกระบวนการเพื่อนำมาใช้ในการประมาณค่าความร้อนเพื่อนำไปแทนค่าในสมการของการควบคุมแบบจีเอ็มซี เพื่อกำหนดค่าตัวแปรปรับ T_j และนำตัวแปรปรับที่ทำได้ไปปรับตัวแปรที่ต้องการควบคุม T_r ให้เข้าสู่เซ็ทพอยท์ต่อไป

3.5 การจูนการควบคุมแบบจี้เอ็มซี

การจูนของการควบคุมแบบ จี้เอ็มซี คือการเลือกค่า K_1 และ K_2 ที่เหมาะในสมการการควบคุมแบบจี้เอ็มซี(สมการที่ 5.17) การเลือกค่า K_1 และ K_2 ที่เหมาะสมจะส่งผลให้การควบคุมมีสมรรถนะที่ดีด้วย

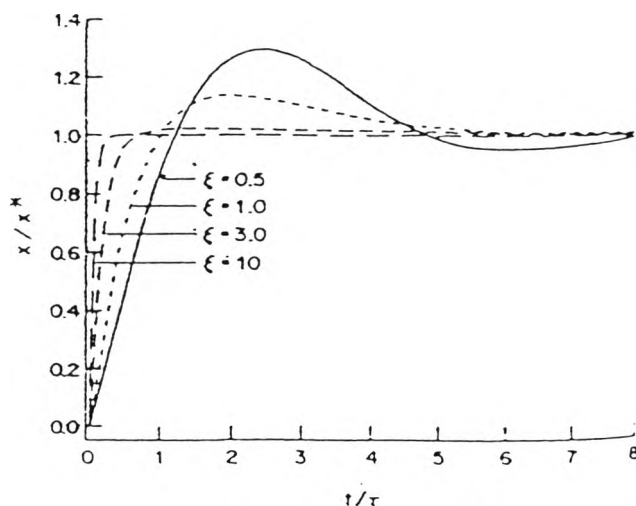
ทำให้มีการกำหนดหลักของการปรับค่า ตัวแปรปรับเพื่อให้ได้ผลการตอบสนองที่ต้องการได้ โดยกำหนดความสัมพันธ์ระหว่างสมการจี้เอ็มซีและค่า K_1 , K_2 ให้อยู่ในรูป ξ และ τ แล้วกำหนดขั้นตอนในการปรับจูนดังนี้

1. เลือก ξ จากรูปเพื่อให้ได้ผลตอบสนองที่ต้องการ
2. เลือก τ จากรูปเพื่อให้ได้จังหวะเวลาที่เหมาะสมที่สอดคล้องกับความเร็ว ของผลตอบสนองของกระบวนการ
3. คำนวณค่า K_1 และ K_2 โดยคำนวณจากสมการ

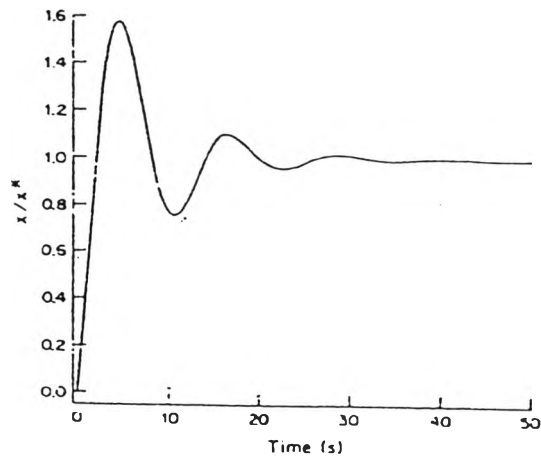
$$K_1 = 2\xi / \tau$$

$$K_2 = 1 / \tau^2$$

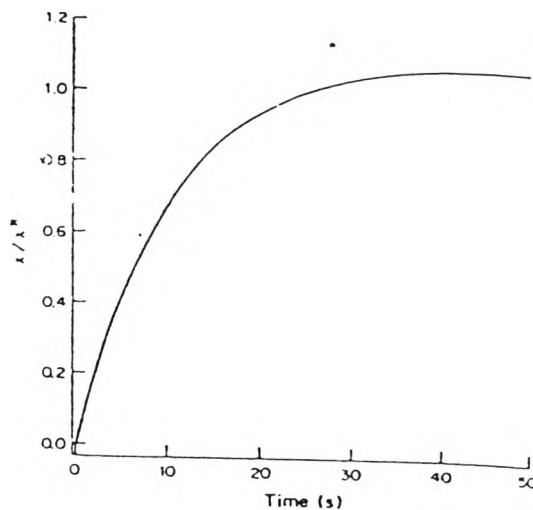
โดยสามารถหาค่า ξ และ τ จากกราฟแสดงความสัมพันธ์ต่อไปนี้



รูปที่ 3.3 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า ξ และ τ



รูป 3.4-ก แสดง จีเอ็มซีโปรไฟล์เมื่อเลือกใช้ ค่า $K_1 = 0.25$ และ $K_2 = 0.25$



รูป 3.4-ข แสดง จีเอ็มซีโปรไฟล์เมื่อเลือกใช้ ค่า $K_1 = 0.1$ และ $K_2 = 0.001$

รูปที่ 3.4 แสดงความแตกต่างของลักษณะจีเอ็มซีโปรไฟล์ เมื่อใช้ค่าในการปรับจูนแตกต่างกัน

จากกราฟรูป 3.4 สังเกตได้ชัดเจนว่ารูป 3.4- ข เข้าสู่เซ็ทพอยท์ได้สวยงามและราบเรียบกว่ารูป 3.4- ก การเลือกค่า K_1 และ K_2 ที่แตกต่างกันจะส่งผลให้สมรรถนะการควบคุมแตกต่างกันไปจากการใช้ค่าเดียวกัน ดังนั้นค่าคงที่ของการจูนจึงเป็นตัวปรับที่สำคัญของการควบคุมแบบจีเอ็มซีโดยแสดงให้เห็นชัดเจนในรูปแบบของโปรไฟล์ของตัวแปรที่ต้องการควบคุมที่เวลาต่างๆ เมื่อทำการเลือกค่า K_1 และ K_2 ต่างกันดังรูป

3.5 การประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา

สำหรับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยามาใช้ควบคู่กับการควบคุมแบบเจนริกโมเดลคอนโทรล (จีเอ็มซี) ในงานวิทยานิพนธ์นี้ จะเลือกใช้วิธีประมาณค่าความร้อนแบบการประมาณค่าความร้อนที่ปล่อยออกมาทุกๆ คาบเวลาที่เกิดปฏิกิริยา(On-Line Estimation of the Heat Released for the GMC Controller)

เนื่องจากความสำเร็จของการออกแบบการควบคุม อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ โดยใช้เทคนิคการควบคุมแบบGMC นั้นขึ้นอยู่กับความสามารถของการวัด การประมาณค่าความร้อนที่ปล่อยออกมาให้ใกล้เคียงกับที่เกิดขึ้นจริงมากที่สุด เทคนิคการประมาณค่าความร้อนที่ปล่อยออกมาทุกๆ คาบเวลา เป็นการประมาณค่าที่มีความน่าเชื่อถือ โดยมีJuba และ Hamar (1986) ได้สรุปและอธิบายเทคนิคที่สำคัญในการประมาณค่าความร้อนดังนี้

1. มีการใช้รายละเอียดของแบบจำลองทางจลนศาสตร์เคมีโดยตรง
2. สามารถกำหนดคูลพลังงานได้ทุกๆ คาบเวลา
3. ใช้การสังเกต และประสบการณ์ในการประมาณค่าความร้อนที่ปล่อยออกมา

จากระบบของปฏิกิริยาในอุตสาหกรรมที่สนใจส่วนมาก การใช้แบบจำลองทางจลนศาสตร์เคมีในการประมาณค่าความร้อนที่ปล่อยออกมานั้น ผลการประมาณยังมีความเป็นไปได้ไม่สูงนัก เพราะขาดแบบจำลองทางจลนศาสตร์ที่ดี เนื่องจากปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็ว หรือซ้ำกว่าที่จะมีเวลาศึกษาได้ ทำให้การหาแบบจำลองทางจลนศาสตร์ที่ดีนั้นจำเป็นต้องมีค่าใช้จ่ายที่สูง

ส่วนปัญหาที่เกิดขึ้นในการประมาณค่าแบบออนไลน์หรือการกำหนดคูลพลังงานทุกๆ คาบเวลานั้น ปัญหาที่พบบ่อย ๆ เป็นสมมุติฐานที่กำหนดให้ความร้อนที่ผนังของเครื่องปฏิกรณ์มีค่าน้อย แต่ถ้าค่าความจุความร้อนของผนังเครื่องปฏิกรณ์มีค่าน้อยแล้ว จะทำให้จำนวนพารามิเตอร์ของกระบวนการเพิ่มขึ้นทำให้ยากในการประมาณค่าความร้อนทั้งหมดที่ปล่อยออกมาได้

ต่อมาจึงมีการพัฒนา การประมาณค่าความร้อนแบบออนไลน์นี้ ทำให้สามารถหลีกเลี่ยงความว่องไวต่อการผิดพลาดจากการวัดโดยตรงและจากการประมาณค่าจากวิธีอนุพันธ์เชิงตัวเลข โดยใช้สมการแบบสมการความแตกต่างสามเทอม (Tree-Term Difference equation) และตัวกรองเอ็กซ์โปเนนเชียลกับค่าคงที่ของเวลา I นาที โดยตัวกรองจะใช้ในการประมาณค่า Q_r/UA เพียงอย่างเดียว ส่วนสัญญาณการวัดค่า T_r และ T_j จะส่งตรงไปที่สมการการควบคุมแบบจีเอ็มซี โดยสมการที่ใช้ในการพัฒนาค่าเป็นดังนี้

$$T_{rf}^{(k)} = T_{rf}^{(k-1)} + \Delta t [T_{rf}^{(k)} - T_{rf}^{(k-1)}] / \tau_f \quad (3.20)$$

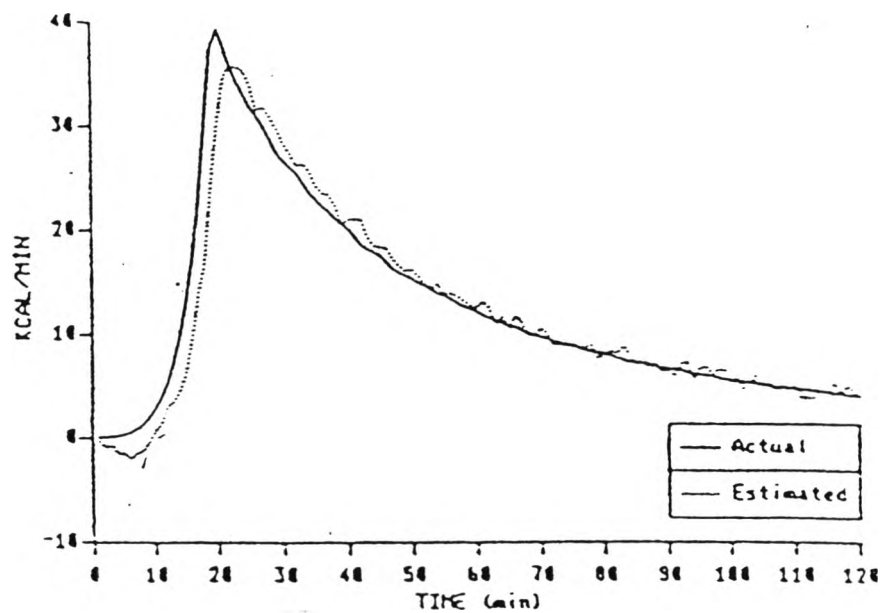
$$T_{jf}^{(k)} = T_{jf}^{(k-1)} + \Delta t [T_{jm}^{(k)} - T_{jf}^{(k-1)}] / \tau_f \quad (3.21)$$

$$\frac{\Delta T_{rf}^{(k)}}{\Delta t_{rf}} = \frac{3T_{rf}^{(k)} + 4T_{rf}^{(k-1)} + T_{rf}^{(k-2)}}{2\Delta t} \quad (3.22)$$

$$Q_{re}^{(k)} = C_{p,r} W_r \Delta T_r^{(k)} + U A (T_{jf}^{(k)} - T_{rf}^{(k)}) \quad (3.23)$$

$$Q_{ref}^{(k)} = Q_{ref}^{(k-1)} + \Delta t [Q_{ref}^{(k)} - Q_{ref}^{(k-1)}] / \tau_f \quad (3.24)$$

ต่อมาได้มีการทดสอบประสิทธิภาพ ของการประมาณค่าความร้อนนี้โดยนำมาพลอตกราฟในรูปของความร้อนซึ่งได้จากการของการประมาณค่าโดยวิธีออนไลน์ เทียบกับ ค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจริง โดยค่าความร้อนที่ออกมา นั้นใกล้เคียงกันมากเนื่องจากไม่มีผลกระทบจากสัญญาณรบกวนเกิดขึ้นด้วย



รูปที่ 3.5 กราฟแสดงผลการประมาณค่าความร้อนโดยวิธีออนไลน์เทียบกับความร้อนที่เกิดขึ้นจริง

3.5.1 งานวิจัยที่มีการนำเอาวิธีการควบคุมแบบจีเอ็มซีมาใช้ในการควบคุมอุณหภูมิควบคู่กับการประมาณความร้อน

P.Kittisupakorn (1994) ได้เสนอวิธีการประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา โดยอาศัยตัวกรองคาลมาน (Kaman filter) ตามเอกสารงานวิจัยดังกล่าวแสดงให้เห็นว่าการประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยานั้นดีมาก สามารถประมาณได้ใกล้เคียงกับความร้อนที่เกิดขึ้นจริง ซึ่งแสดงให้เห็นว่าการควบคุมแบบเจเนริกโมเดลที่ใช้ร่วมกับการประมาณค่าความร้อนสามารถควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เคมีได้เป็นอย่างดีมีความทนทานสูงสามารถประยุกต์ใช้กับกระบวนการจริงได้ดีกว่าการควบคุมแบบพีไอดีการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์โดยใช้ตัวควบคุมแบบเจเนริกได้ประสบความสำเร็จในการประยุกต์ใช้ทั้งในระดับของโรงงานคั่นแบบ (pilot plant scale) และในระดับอุตสาหกรรมจำนวนมาก ให้ผลเปรียบเทียบกับหลายเทคนิคที่เป็นแบบตัวแปรอินพุทเอาต์พุทหลายตัวแปรที่อาศัยการประเมินเชิงเส้น

P.Kittisupakorn ได้ใช้แบบจำลองง่าย ๆ โดยตั้งอยู่บนพื้นฐานทางกลศาสตร์เคมีในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ในการประมาณค่า โดยสมมติให้ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาขั้นตอนเดียว (Single Chemical reaction) ซึ่งเรียกการประมาณค่านี้ว่าวิธีคาลมานฟิลเตอร์ (Extended Kalman filter) เพื่อประเมินค่าความร้อนที่เกิดขึ้น อัตราการเปลี่ยนแปลงของมันจะเปลี่ยนตาม ความเข้มข้นของสารตั้งต้น (M_r) และอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์ (T_m) ซึ่งให้ความสัมพันธ์แบบไบลิเนียร์ โดยสองตัวแปร T_m, T_{jm} สามารถวัดได้โดยตรงแล้วใส่เข้าไปใน (Extended Kalman filter) เพื่อประเมินค่าความร้อนที่เกิดขึ้น โดยสามารถคำนวณหาค่าการประมาณค่าความร้อนในรูปแบบของ คาลมานฟิลเตอร์ ได้โดยตรงและให้ผลการประมาณค่าความร้อนที่ดีมาก แต่การคำนวณยุ่งยากซับซ้อน และมีตัวแปรเข้ามาเกี่ยวข้องมากมาย ในทางประยุกต์ใช้งานกับอุตสาหกรรมจึงยังเป็นวิธีที่ไม่เหมาะสม

ดังนั้นวิธีการประมาณค่าความร้อนแบบการกำหนดคุณลักษณะแบบออนไลน์(On-line)จะสะดวกในการประยุกต์ใช้ในงานอุตสาหกรรมมากกว่า

3.6 การทดสอบความทนทานของการควบคุม (Robustness Test)

การควบคุมจีเอ็มซีที่มีการประมาณค่าสเตตและพารามิเตอร์สามารถรับประกันเสถียรภาพของระบบที่มีความไม่เป็นเชิงเส้นสูงได้และสามารถใช้ได้ในช่วงที่กว้าง รวมถึงสามารถจัดการกับระบบที่มีความผิดพลาดของกระบวนการหรือแบบจำลองได้ โดยสามารถทำการทดสอบสมรรถนะความทนทาน

ของการควบคุมแบบจีเอ็มซีควบคุมคู่ไปกับการประมาณค่าความร้อนนี้ด้วยการ ทดสอบสมรรถนะการควบคุมในสภาวะที่พารามิเตอร์ของเครื่องปฏิกรณ์มีความไม่แน่นอนเกิดขึ้นดังนี้

1. การเปลี่ยนแปลงของน้ำหนักวัสดุดิบ โดยการทดสอบนี้จะทำให้เห็นสภาวะการควบคุมในกรณีที่มีการผิดพลาดมาจากการทำงานหรือความผิดปกติของเครื่องมือ
2. การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน โดยจะช่วยให้เราคาดการณ์ถึงการเกิดการรวมตัวและมีผลทำให้พื้นที่ผิวการถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลง
3. การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยา เนื่องจากความว่องไวของการควบคุมต่อการเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีมีความสำคัญมากต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์
4. การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนและการเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยา เนื่องจากการเปลี่ยนแปลงนี้ จะผลักดันให้ระบบเข้าสู่สภาวะไม่คงตัวเป็นอย่างมากจึงต้องทดสอบ ที่สภาวะนี้เพื่อยืนยันสมรรถนะความทนทานของการควบคุม

3.6.1 งานวิจัยที่มีการนำเอาวิธีการควบคุมแบบจีเอ็มซีมาใช้ในการควบคุมอุณหภูมิและมีการทดสอบสมรรถนะของการควบคุมที่สภาวะต่างๆ

Juba และ Hamer (1986) ได้ทำการประเมินความทนทานของการควบคุม โดยการทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุมแบบจีเอ็มซี(GMC) เปรียบเทียบกับแบบ ตัว โหมด (Dual mode, DM) โดยแบ่งการทดสอบออกเป็น 5 แบบ ซึ่งมีการเปลี่ยนพารามิเตอร์บางตัวที่อาจเกิดขึ้นได้ในเงื่อนไขสภาวะการทำงานที่ผิดปกติ

แบบที่ 1 ทำการทดสอบการควบคุมทั้งสองแบบโดยมีการเปลี่ยนแปลงน้ำหนักสารตั้งต้นจากปกติ 1560 กิโลกรัม ไปเป็น 1300 กิโลกรัม โดยให้ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีขณะเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ที่ราบเรียบ แตกต่างไปจากการควบคุมแบบ ตัว โหมด (DM) ซึ่งการควบคุมเกิดการแกว่งขณะเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์

แบบที่ 2 ทำการทดสอบการควบคุมทั้งสองแบบในกรณีที่ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลงโดยกำหนดให้มีค่าลดลงจากปกติ 25% ซึ่งการควบคุมแบบจีเอ็มซีให้สมรรถนะการควบคุมที่ดีกว่าการควบคุมแบบ ตัว โหมด (DM)

แบบที่ 3 ทำการทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุมที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลง โดยกำหนดให้มีค่าความว่องไวขึ้นจากปกติ ถึง 1.5 เท่า ทำให้การควบคุมแบบ ตัว โหมด (DM) เกิดการแกว่งออกจากจุดเซ็ทพอยท์มากแตกต่างไปจากการควบคุมแบบจีเอ็มซีที่เข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์อย่างราบเรียบ

แบบที่ 4 ศึกษาสิ่งที่ยับยั้งการเจริญเติบโตของพืชทั้งสองสภาวะรวมกันคือทดสอบในสภาวะที่สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลงและอัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น โดยผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีออกมาในเกณฑ์ที่ดีมาก และการเปลี่ยนแปลงส่งผลกระทบต่อกระบวนการควบคุมแบบ คิวโมล (DM) มากจนเสียการควบคุม

แบบที่ 5 นำตัวควบคุมทั้งสองแบบที่ออกแบบไว้สำหรับปฏิกิริยาคายความร้อน มาใช้ในการควบคุมแบบจำลองของปฏิกิริยาคูดความร้อน เพื่อเป็นการทดสอบสมรรถนะการควบคุมในกรณีที่เป็นแบบจำลองของปฏิกิริยามีความผิดพลาดเกิดขึ้น โดยผลของการควบคุมแบบจีเอ็มซี ยังคงเป็นปกติสามารถควบคุมอุณหภูมิไว้ที่จุดเซ็ทพอยท์ได้แต่การควบคุมแบบ คิวโมล(DM) เกิดการแกว่งอย่างรุนแรงในกรณีที่แบบจำลองผิดพลาดลักษณะเช่นนี้

จากผลงานวิจัยของ Juba และ Hamer (1986) สามารถสรุปได้ว่าการควบคุมจีเอ็มซีที่มีการประมาณค่าสเททและพารามิเตอร์สามารถรับประกันความมีเสถียรภาพของระบบที่มีความไม่เป็นเชิงเส้นสูงได้และสามารถใช้ได้ในช่วงที่กว้าง รวมถึงสามารถจัดการกับระบบที่มีความผิดพลาดของกระบวนการหรือแบบจำลองได้จริง ด้วยการ ทดสอบสมรรถนะการควบคุมในสภาวะที่พารามิเตอร์ของเครื่องปฏิกรณ์มีความไม่แน่นอนเกิดขึ้นการควบคุมแบบจีเอ็มซีให้สมรรถนะการควบคุมที่ดีกว่าการควบคุมแบบคิวโมล

กระบวนการของปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์

4.1 ประวัติความเป็นมา

โพลีไวนิล คลอไรด์ (พีวีซี) ได้ถูกเตรียมขึ้นสำเร็จในห้องปฏิบัติการตั้งแต่ปี ค.ศ.1872 แต่ไม่อาจนำพอลิเมอร์นี้ไปพัฒนาเป็นผลิตภัณฑ์ในเชิงการค้าเป็นเวลามากกว่า 50 ปีหลังจากนั้น ทั้งนี้เนื่องจากการแปรรูปโดยการหลอมตัวเกิดการสลายตัวของพอลิเมอร์ก่อนถึงอุณหภูมิหลอมตัว จนกระทั่งประมาณปี ค.ศ.1928 พบว่าโคพอลิเมอร์ที่เตรียมจากไวนิลคลอไรด์โดยผสมไวนิลอะซิเตดลงไปเล็กน้อย สามารถนำไปผ่านกระบวนการ การแปรรูปที่อุณหภูมิสูงได้โดยไม่เกิดการสลายตัวมากนัก อีกทั้งการค้นพบพลาสติกไซเซออร์ที่เหมาะสม ก็มีส่วนช่วยกระตุ้นให้โพลีไวนิล คลอไรด์กลายเป็นพลาสติกที่สำคัญในเชิงการค้า การผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์ในเชิงการค้าเริ่มที่ประเทศเยอรมันและสหรัฐอเมริกาในปี ค.ศ.1933 พิจารณาจากปริมาณการผลิต โพลีไวนิล คลอไรด์เป็นพอลิเมอร์ที่สำคัญที่สุดอย่างหนึ่งในโลก นอกเหนือจากพอลิเมอร์อีกสองชนิด คือ โพลีเอทิลีนและโพลีสไตรีน

ในปี ค.ศ.1985 ปริมาณการผลิตเทอร์โมพลาสติกเพิ่มขึ้นเป็น 2 เท่าทั่วโลก โพลีไวนิล คลอไรด์ได้ถูกนำมาใช้ประโยชน์อย่างกว้างขวาง แต่โพลีไวนิล คลอไรด์่วงไวต่อสิ่งแวดล้อม จึงได้มีการเร่งวิจัยพัฒนาเพื่อลดผลกระทบจากรังสีอัลตราไวโอเลต แม้จะมีอุปสรรคแต่เพื่อการค้าจึงมีการเร่งวิจัย และพัฒนาอย่างต่อเนื่อง ภายใต้หนทางการเข้าใจปฏิกิริยาโพลิเมอไรเซชัน และคุณสมบัติของโพลีไวนิล คลอไรด์ ความพยายามเหล่านั้นได้แก่ กลนศาสตร์ของพอลิเมอร์ เทคโนโลยีการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ให้ใหญ่ขึ้น ลักษณะของอนุภาค และโครงสร้าง ของพอลิเมอร์

4.2 กระบวนการที่เกี่ยวข้อง

โดยการผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์ใช้กลไกแบบฟรีเรดิคัล เทคนิคที่ใช้เตรียมมีหลายวิธี เช่นแบบบัลค์ (Bulk)หรือแบบอิมัลชัน (Emulsion) แต่วิธีที่ใช้กันมากที่สุดในอุตสาหกรรมได้แก่ กระบวนการ โพลิเมอไรเซชันแบบแขวนลอย(Suspension) ซึ่งมีการผลิตในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์โดยมีการเตรียมได้ดังนี้

4.2.1 วัตถุดิบหลักที่ใช้ในการผลิต

ไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ (Vinylchloride monomer , VCM)

4.2.2 เทคนิคทั่วไปที่ใช้เตรียมโพลิไวนิล คลอไรด์

โพลิเมอไรเซชันแบบแขวนลอย (Suspension polymerization) อาจเรียกว่าแบบกระจาย (dispersion) ก็ได้ หรือบางครั้งเรียกว่าโพลิเมอไรเซชันแบบไข่มุกหรือแบบเม็ด (pearl or bead polymerization) เทคนิคโพลิเมอไรเซชันแบบนี้กระจายโมโนเมอร์เป็นหยดเล็ก ๆ ที่มีขนาดเส้นผ่าศูนย์กลาง 0.01-0.05 cm ในตัวกลางที่โมโนเมอร์ไม่ละลายซึ่งโดยทั่วไปเป็นน้ำ การกระจายโมโนเมอร์เป็นหยดเล็ก ๆ ใช้วิธีการกวนอย่างววดเร็วหรือการปั่นโดยเครื่องปั่น (blender) ควบคู่ไปกับการเติมตัวดิสเพอร์สแซนต์ (dispersant) หรือตัวเสถียรไลเซอร์ (stabilizer) หรือตัวโปรเตคตีฟคอลลอยด์ (protective colloids) ซึ่งโดยทั่วไปเป็นสารพอลิเมอร์ที่ละลายในน้ำได้ เช่น โพลิไวนิล แอลกอฮอล์ [poly(vinyl alcohol)], เมทิลเซลลูโลส (methyl cellulose) หรือ โซเดียมโพลิอะคริเลต (sodium polyacrylate) ซึ่งทำหน้าที่ป้องกันมิให้หยดโมโนเมอร์ต่าง ๆ ที่กำลังโพลิเมอไรซ์อยู่มีโอกาสรวมตัวเป็นหยดใหญ่ ส่วนตัวริเริ่มที่ใช้เป็นสารที่สามารถละลายในโมโนเมอร์ได้ซึ่งทั่วไปได้แก่สารเปอร์ออกไซด์อินทรีย์ เช่น เบนโซอิลเปอร์ออกไซด์ (benzoyl peroxide) อุณหภูมิที่ใช้ทั่วไปตั้งแต่อุณหภูมิห้องถึง 60 องศาเซลเซียสตัวอย่างองค์ประกอบของสารต่าง ๆ ที่ใช้ในโพลิเมอไรเซชันแบบแขวนลอยนี้แสดงไว้ในตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 สูตรสำเร็จรูปสำหรับโพลิเมอไรเซชันแบบแขวนลอยทั่วไป

องค์ประกอบ	ส่วนต่อ 100 ส่วนของโมโนเมอร์ ไวนิลคลอไรด์
เปอร์ออกไซด์	0.1-0.5
น้ำ	150-350
ตัวเสถียรไลเซอร์แขวนลอย*	0.01-1
(suspension stabilizer)	

*เสถียรไลเซอร์แขวนลอย ที่ใช้ทั่วไปได้แก่ methyl cellulose, gelatin, poly(vinyl alcohol), หรือ sodiumpolyacrylate

จะเห็นได้ว่าองค์ประกอบหลักของโพลิเมอร์เซชันแบบแวนลอยนี้ได้แก่ โมโนเมอร์ ตัวริเริ่มตัวกลาง และตัวที่ทำหน้าที่ช่วยรักษาหยด โมโนเมอร์ให้อยู่ในรูปการกระจาย

ตามความเป็นจริงแล้วโพลิเมอร์เซชันแบบแวนลอยนี้มีลักษณะคล้ายคลึงกับโพลิเมอร์เซชันแบบบัลค์มาก เพราะประกอบด้วยตัวริเริ่มละลายในโมโนเมอร์ แตกต่างกันเพียงว่าโมโนเมอร์ถูกแยกออกจากกันในรูปแบบของหยดเล็กแวนลอยอยู่ในตัวกลางเท่านั้น แต่วิธีนี้มีข้อดีที่ว่าตัวกลางคอยทำหน้าที่รับและกระจายความร้อนของปฏิกิริยา จึงช่วยขจัดปัญหาการควบคุมอุณหภูมิและความหนืด

ข้อดีอีกหนึ่งของโพลิเมอร์เซชันวิธีนี้ได้แก่การได้พอลิเมอร์ออกมาเป็นเม็ดตามขนาดของหยดโมโนเมอร์ ซึ่งสามารถแยกออกได้ง่ายโดยวิธีการกรองธรรมดา ตามด้วยการล้างด้วยน้ำมาก ๆ แล้วทำให้แห้ง พอลิเมอร์ที่ได้ทั่วไปสามารถนำออกจำหน่ายในรูปนี้หรือในรูปของการอัดเป็นก้อนใหญ่ เพื่อนำไปแปรรูปต่อไป

พอลิเมอร์ที่มีความสำคัญในเชิงการค้าที่เตรียมโดยวิธีนี้ได้แก่โพลิสไตรีน (PS) โพลิเมทิลเมทาไครเลต (PMMA) โพลีไวนิล คลอไรด์ (PVC) โพลีไวนิลคลอไรด์และโพลิอะคริโลไนไตรด์ (polyacrylonitrile, PAN) ในประเทศไทยเราก็มียังมีโรงงานผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์ โดยกระบวนการโพลิเมอร์เซชันแบบแวนลอยนี้

4.2.3 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาการเกิดโพลิเมอร์เซชันของโพลีไวนิล คลอไรด์

จากงานวิจัยของ H.G. YUAN G. KALFAS and W.H. RAY ได้ศึกษาถึงกลไกการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ซึ่งสามารถเขียนขั้นตอนการเกิดไว้ดังนี้

ภาพรวมของปฏิกิริยาพอลิเมอร์ไรเซชัน

โมโนเมอร์ของไวนิลคลอไรด์ เกิดพอลิเมอร์ไรเซชันโดยผ่านกลไกของการแตกตัวเป็นอนุมูลอิสระฟรี-แรดิคัล (Free-Radical) พอลิเมอร์ที่เกิดจากโมโนเมอร์จะเกิดปฏิกิริยาผันกลับเพียง 0.1% การแยกชั้นระหว่างพอลิเมอร์และโมโนเมอร์พบในอะคริโลไนไตรด์ และไวนิลคลอไรด์ ปรากฏการณ์แยกชั้นนี้ Flory และ Huggins ได้อธิบายโดยใช้การวิเคราะห์ทางเทอร์โมไดนามิกส์ ของปฏิกิริยาระหว่างตัวทำลาย - ตัวถูกทำลาย การแยกชั้นของพอลิเมอร์ ออกจากโมโนเมอร์มีผลต่อจลนศาสตร์ของพอลิเมอร์และลักษณะอนุภาคของโพลีไวนิล คลอไรด์เรซิน การหาค่าตอบของกลไกทางจลนศาสตร์ของ ฟรี-แรดิคัล ได้ถูกพัฒนาโดย Talamini และ Hamielec ในการหาค่าตอบของการแยกชั้นพอลิเมอร์และโมโนเมอร์

4.2.3.1 กลไกปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันของฟรี-แรดิคัล

กลไกการเกิดปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันของฟรี-แรดิคัล ประกอบด้วยขั้นตอนหลัก คือ ขั้นริเริ่ม (Initiator) , ขั้นแผ่ขยาย (Propagation), ขั้นตอนสุดท้าย(Termination) และขั้นตอนการแผ่ขยาย (Chain Transfer) ซึ่งสามารถอธิบายได้ดังนี้

กลไกขั้นริเริ่ม (Initiator)

ปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชัน เริ่มต้นจากโมเลกุล ที่มีพลังงานสูง ที่สามารถทำปฏิกิริยากับพันธะคู่ของไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ โมเลกุลที่มีพลังงานสูงนี้เรียกว่าตัวริเริ่มแสดงในรูป



ในที่นี้จะให้ตัวริเริ่ม แทนด้วย I , ความเข้มข้นของตัวริเริ่มแทนด้วย $[I]$ โดยตัวริเริ่มจะแยกพันธะแบบโฮโมไลติก (homolytic) ผลที่ได้คือ ประเภทของ ตัวริเริ่มinitiator ซึ่งจะใช้ประโยชน์ในทางการค้าในการเกิดพอลิเมอไรเซชันของไวนิลคลอไรด์ ดังตัวอย่าง



รูปแบบทั่วไปของการแยกพันธะโฮโมไลติก (homolytic) ของตัวริเริ่มโดยอุณหภูมิจึงได้ดังนี้



โดยที่

1. $I \cdot$ และ $I' \cdot$ ไม่สามารถแยกได้ ซึ่งกลไกทางจลนศาสตร์อธิบายได้
2. k_d คือ ค่าคงที่ของการแตกตัวแบบโฮโมไลติก (homolytic) ของปฏิกิริยาที่ (4.4)

อัตราการเกิดสปีชีส์ของฟรี-แรดิคัลเท่ากับอัตราการแยกสลายของ $I-I'$. แสดงอัตราการเกิดของสปีชีส์ฟรี-แรดิคัลได้ดังนี้

$$-\frac{d[I]}{dt} = \frac{d}{dt}[I \cdot] = R_i \quad (4.5)$$

$$R_i = 2K_d [M][R \cdot] \quad (4.6)$$

จำนวน 2 ที่ปรากฏใน R_i จะแสดงภายหลังใน R_d และ R_t ตามรูปแบบของ Flory และคนอื่น ๆ ที่แสดงสปีชีส์ที่เกิดขึ้นใหม่ และที่ถูกแยกสลาย จัดเรียงสมการที่ 4.5 และ 4.6 ใหม่จะได้ว่า

$$-\frac{d[I]}{[I]} = 2K_d dt \quad (4.7)$$

จากสมการที่ (4.4) ที่ได้ สปีชีส์ของฟรี-เรดิคัลที่ว่องไว 2 ตัวที่แต่ละตัวเป็น ตัวเริ่มการเกิดโพลิเมอไรเซชันแต่ในความจริงเกิดปฏิกิริยาข้างเคียงมากมาย ที่จะเกิดกับฟรี-เรดิคัล ผลจากการเกิดปฏิกิริยาข้างเคียงจะลดปริมาณของ initiator ซึ่งอธิบายได้โดยใช้คณิตศาสตร์โดยการรวม f ประสิทธิภาพของตัวริเริ่ม โดย ค่าของ f จะเปลี่ยนแปลงตามระบบของตัวริเริ่มไวชนิดลอร์ด แต่ปกติจะอยู่ในช่วง $0.5 < f < 1.0$ ดังนั้นสมการสุดท้ายของอัตราการเกิดฟรี-เรดิคัลแบบ ไอโซเทอร์มอล คือ

$$R_d = 2k_d f [I] \quad (4.8)$$

กลไกขั้นการแผ่ขยาย (Propagation)

ปฏิกิริยาขั้นการแผ่ขยายในฟรี-เรดิคัลโพลิเมอไรเซชันจะเป็นอนุกรมของการเพิ่มโมโนเมอร์จากมากไปน้อยแสดงปฏิกิริยาการแผ่ขยายแต่ละขั้นจะมีค่าคงที่ 1 ค่า k_{p1} การเพิ่มโมโนเมอร์ครั้งที่ 1, k_{p2} การเพิ่มโมโนเมอร์ครั้งที่ 2 และ k_{pi} เป็นการเพิ่มโมโนเมอร์ครั้งที่ i ขั้นตอน แต่การพิจารณาแบบนี้ยุ่งยาก Flory จึงได้ประมาณความยาวของโซ่สำหรับอัตราการคงที่เกิดโพลิเมอไรเซชันจากมากไปน้อย i ลำดับเป็นเท่ากับ $i+1$ ลำดับ โดยวิธีนี้ค่าสำหรับ K_{pi} พอเพียงสำหรับการอนุกรมทั้งหมด ผลของความยาวของโซ่ต่อค่า K_p มีค่าที่ความยาวโซ่ที่ซ้ำกันประมาณ 10 หน่วย แต่สามารถตัดทิ้งได้เมื่อพิจารณาปฏิกิริยาขั้นการแผ่ขยายรวมทั้งหมด จลนศาสตร์ปฏิกิริยาขั้นการแผ่ขยาย ในรูปแบบง่าย ๆ คือ



$$R_p = K_p [M] [M_n \cdot] \quad (4.10)$$

เมื่อ $[M_n \cdot]$ คือ ความเข้มข้นของสายโซ่พอลิเมอร์ที่ว่องไว, $[M]$ คือ ความเข้มข้นของโมโนเมอร์ k_{pi} คือ ค่าคงที่อัตราเฉลี่ยสำหรับโพลิเมอไรเซชัน และ R_p คือ อัตราของโพลิเมอไรเซชัน

สมการโพลิเมอไรเซชันที่ (4.10) พัฒนาสำหรับสภาวะที่อุณหภูมิคงที่ผลของการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิต่อปฏิกิริยาขั้นการแผ่ขยาย สามารถหาได้โดยใช้ความสัมพันธ์ของ Arrhenius

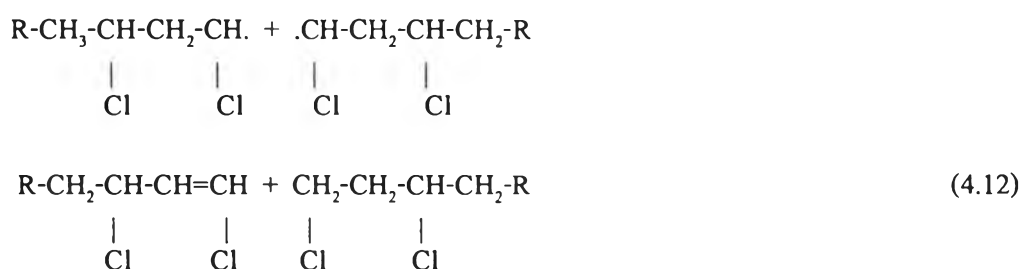
$$K_{pi} = A e^{-E_{pi}/RT} \quad (4.11)$$

เมื่อ A คือค่าคงที่, Epi คือ พลังงานกระตุ้นของโพลิเมอไรเซชัน, R คือ ค่าคงที่ของก๊าซ และ T คือ อุณหภูมิสัมบูรณ์ การเพิ่มอุณหภูมิจะเพิ่มค่า Kpi พร้อมกับการเพิ่มค่า Rp ค่าคงที่ของอัตราปฏิกิริยา ขั้นตอนการแผ่ขยาย (propagation) สำหรับสายโซ่ที่ยาวมากกว่า 10 หน่วย จะหาในรูปของ Kp.

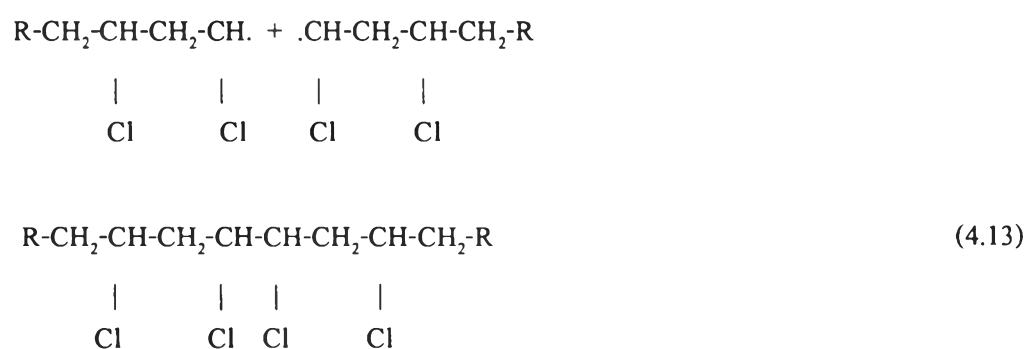
กลไกขั้นตอนสุดท้าย (Termination):

ปฏิกิริยาขั้นสุดท้าย (termination steps) ในฟรี-เรดิคัลโพลิเมอไรเซชันเป็นปฏิกิริยาที่แสดงผลรวมของการสูญเสียสายโซ่ที่ว่องไวซึ่งปฏิกิริยานี้สามารถทำให้เกิดได้ง่ายขึ้นโดยเกิดปฏิกิริยาทั้ง 2 อย่าง ปฏิกิริยาขั้นสุดท้ายสามารถเกิดได้ 2 แบบ คือปฏิกิริยาแบบ disproportionation และปฏิกิริยาแบบ combination

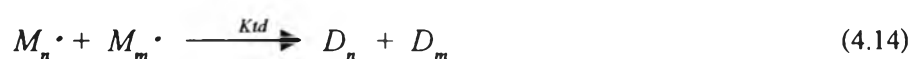
ในแบบการสิ้นสุดการแผ่ขยาย (disproportionation) สายโซ่ที่ว่องไวทำปฏิกิริยากันดังสมการที่ (4.12)



ในแบบการรวมตัว (combination) สายโซ่ที่ว่องไวจะรวมกันอยู่ในรูป



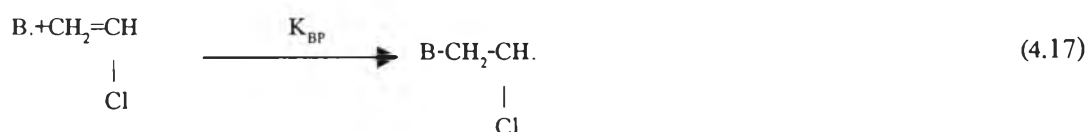
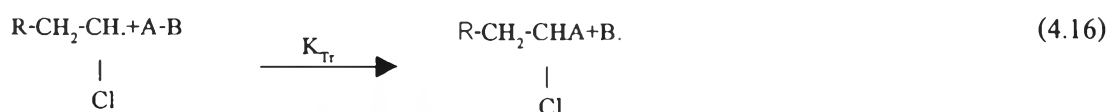
ในทั้ง 2 กรณีอัตราการเกิด termination อยู่ในรูปสมการดังนี้



$$R_{td} = K_{td} [M_n \cdot][M_m \cdot] \quad (4.15)$$

กลไกขั้นการย้ายสายโซ่ (Chain Transfer) :

จากขั้นตอนของการแผ่ขยาย (propagation step) นำมาซึ่งกลไกซึ่งจะเกิดสายโซ่ยาวต่อไปเรื่อย ๆ ในความเป็นจริงสปีชีส์ที่ว่องไวสามารถส่งผ่านจากสายโซ่ที่กำลังยาวขึ้นไปยังโมเลกุลอื่น ดังแสดงในสมการที่ (4.16) และ (4.17)



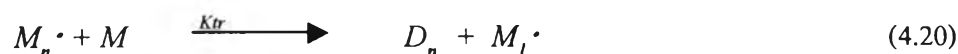
สาย A-B แทนสปีชีส์ของโมเลกุลที่มีการแยกพันธะระหว่าง A และ B คล้ายแบบ homolytic ผลลัพธ์ในขั้นตอนสุดท้ายของสายโซ่โพลิเมอร์ แสดงดังสมการที่ (4.17) และสายโซ่ใหม่ เกิดขึ้นเริ่มต้น ในโพลิเมอร์เชนของไวนิลคลอไรด์ในรูปของ A-B

จะเกิดปฏิกิริยาแข่งขันกัน 2 ปฏิกิริยาแสดงดังสมการที่ (4.18) และ (4.19)

$$R_p = K_p [M_r][M] \quad (4.18)$$

$$R_{Tr} = K_{Tr}[M_r][A-B] \quad (4.19)$$

สามารถเขียนอัตราการส่งผ่านของสายโซ่เหล่านี้ได้ในรูป



$$R_{tr} = K_{tr}[M][M_n\cdot] \quad (4.21)$$

4.2.3.2 ภาพรวมของอัตราการเกิดปฏิกิริยา (Overall Rate Expressions)

ในเรื่องการเกิดโพลิเมอร์เชนเบื้องต้นของฟรี-แรดิคัลแสดงให้เห็นจลนศาสตร์ของการเกิด ขั้นตอนเริ่ม (initiation) ขั้นการแผ่ขยาย (propagation) ขั้นตอนสุดท้าย (termination) และขั้นของการแผ่

ขยาย (transfer) พบว่าความเข้มข้นของสายโซ่พอลิเมอร์ที่ว่องไว $[M_i]$ ปรากฏในความสัมพันธ์ของทั้ง 4 ขั้นตอนข้างต้น

การหาอัตราการเกิด $[M_i]$ สามารถทำได้โดยใช้การประมาณของ Flory ที่สภาวะคงตัว (steady-state) การประมาณที่สภาวะคงตัวถือว่าอัตราการเกิดสายโซ่ที่ว่องไวเท่ากับอัตราการสูญหายของสายโซ่ที่ว่องไว

$$R_i = R_t \quad (4.22)$$

$$2k_t f [I] = 2k_i [M_i]^2 \quad (4.23)$$

เพราะฉะนั้น ความเข้มข้นของสายโซ่ที่ว่องไว $[M_i]$ เท่ากับ

$$[M_i] = \left[\frac{k_d}{k_t} f [I] \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.24)$$

จากความเข้มของสายโซ่ที่ว่องไวทำให้สามารถคำนวณหาปริมาณที่สำคัญของโพลิเมอร์เซชันได้

1. ความเร็วในการก่อตัวของพอลิเมอร์
2. น้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์

อัตราการแผ่ขยาย (Propagation Rate):

แทนสมการที่ (4.23) ลงในสมการแสดงอัตราการเกิดขั้นแผ่ขยาย (4.10) จะได้ว่า

$$R_p = K_p \left(\frac{k_d}{k_t} f \right)^{\frac{1}{2}} [M][I]^{\frac{1}{2}} \quad (4.25)$$

ขั้นตอนการแผ่ขยายจะพิจารณาเพียงปฏิกิริยาของสายโซ่ที่ว่องไวกับโมโนเมอร์ จากปฏิกิริยาการส่งผ่านของสายโซ่ แสดงให้เห็นว่า ความเข้มข้นของสายโซ่ที่ว่องไว $[M_i]$ สามารถเกิดปฏิกิริยากับสายอื่น ๆ ในปฏิกิริยาของการส่งผ่านสายโซ่ ปฏิกิริยาการส่งผ่านสายโซ่จะไม่มีผลต่ออัตราการแผ่ขยายทั้งหมดทำให้ความเข้มข้นของสปีชีส์การส่งผ่านสายโซ่มีผลน้อยต่อโมโนเมอร์ และค่าคงที่การส่งผ่านสายโซ่ (k_p) มีค่าเท่ากับ ค่าคงที่ของขั้นตอนการแผ่ขยาย (K_p)

ความสัมพันธ์ทางจลนศาสตร์สำหรับโพลิเมอไรเซชันของฟรีเรดิคัลแบบเดิม ได้ถูกพัฒนาจากหัวข้อที่ผ่านมา ผลรวมของจลนศาสตร์แบบเดิมถูกใช้ประโยชน์ในการพัฒนาค่าคงที่อัตราที่ไม่ขึ้นกับการแผ่ขยายกระจายและเป็นเฟสเดียวสำหรับการเกิดปฏิกิริยา

รูปของจลนศาสตร์แบบเดิมสายโซ่เรดิคัลที่กำลังยาวขึ้นซึ่งด้านหน้ามีความว่องไวและเปิดออกสู่สิ่งแวดล้อม สามารถทำปฏิกิริยากับเรดิคัลโมโนเมอร์ หรือสายโซ่เรดิคัลที่ว่องไวอื่น ๆ ที่ความสัมพันธ์นี้จะเกิดการผันกลับสูง สายโซ่ที่มีความว่องไวจะถูกจำกัดบริเวณโดยมีสายโซ่พอลิเมอร์ล้อมรอบ ขนาดของการจำกัดบริเวณขึ้นกับจำนวนหน่วยของโมโนเมอร์ ที่เพิ่มเข้าที่ด้านที่ว่องไว และความแตกต่างของแรงกระทำระหว่างช่วงของพอลิเมอร์-พอลิเมอร์ และหน่วยของพอลิเมอร์-โมโนเมอร์ ในกรณีช่วงของสายโซ่สั้น (นั่นคือ น้ำหนักโมเลกุลต่ำ) หรือแรงกระทำระหว่าง พอลิเมอร์-โมโนเมอร์สูงสายโซ่ที่มีความว่องไวและเปิดออกและเป็นทางเข้าของสิ่งแวดล้อม โดยการเปรียบเทียบถ้าจำนวนช่วงของสายโซ่ยาว (นั่นคือ น้ำหนักโมเลกุลสูง) หรือแรงกระทำระหว่างพอลิเมอร์ -โมโนเมอร์ต่ำ สายโซ่ที่มีความว่องไวจะถูกจำกัดในการเปิดออกสู่สิ่งแวดล้อม

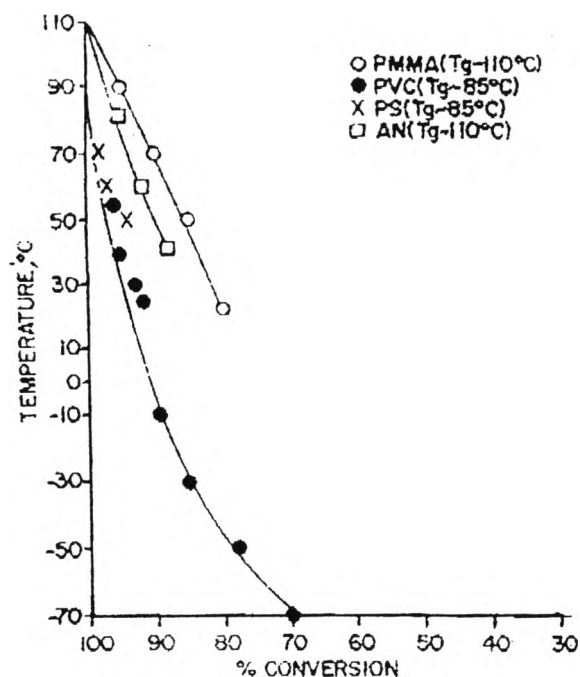
ในการเกิดโพลิเมอไรเซชัน แบบโซโม่ของไวนิลคลอไรด์มีผลกระทบจากการแผ่ขยายกระจายซึ่งมีผลต่อค่าคงที่ของอัตราและระบบที่มีหลายวัฏภาค (multiphase) มีผลต่อสัดส่วนของการเกิดโพลิเมอไรเซชัน

4.3 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการศึกษาอัตราการเกิดปฏิกิริยาโพลิไวนิล คลอไรด์

Hayden และ Melville ศึกษาการเกิดโพลิเมอไรเซชันของเมธิล เมธาไคลเรต ในระบบใหญ่ ผลการทดลองชี้ให้เห็นว่าทั้งค่า K_t และ K_p ลดลง ตามการผันกลับของพอลิเมอร์และขีดจำกัดของการผันกลับอยู่ที่ประมาณ 81 เปอร์เซ็นต์ ซึ่งเป็นการผันกลับที่มากที่สุดที่การสิ้นสุดของปฏิกิริยา Hamielec และผู้ร่วมงานได้ศึกษาปรากฏการณ์ต่างๆจากโพลิเมธิล เมธาไคลเรต, โพลิสไตรีน, โพลีอะโครโลไนไตร์และโพลิไวนิลคลอไรด์ผลงานของพวกเขาแสดงให้เห็นว่าโมโนเมอร์ที่แสดงขีดจำกัดของการผันกลับขึ้นกับอุณหภูมิของการเกิดโพลิเมอไรเซชัน ดังแสดงดังรูปที่ 4.1 ปรากฏการณ์ของกิมิวิทยา ของการผันกลับปรากฏทั้งในการเกิดโพลิเมอไรเซชันแบบ วัฏภาคเดียว (โพลิเมธิล เมธาไคลเรต, โพลิสไตรีน) และในโพลิเมอไรเซชันแบบหลายวัฏภาค (โพลิไวนิล คลอไรด์ และโพลีอะโครโลไนไตร์) ถ้าอุณหภูมิของการเกิดโพลิเมอไรเซชันต่ำกว่าอุณหภูมิของสถานะแก้วของสารผสม โมโนเมอร์/พอลิเมอร์ การกระจายของโมโนเมอร์ไปยังส่วนที่ว่องไวจะเข้าใกล้ศูนย์และอัตราการเกิดโพลิเมอไรเซชันจะตกลงสู่ระดับที่ต่ำมาก ผลที่แสดงในรูปที่ 4.1 ชี้ให้เห็นสำหรับโพลิเมอไรเซชันของโพลิไวนิล คลอไรด์ ที่ประมาณ 55 องศาเซลเซียส คือขีดจำกัดของการผันกลับจากการควบคุมจากผลการกระจายมีผล 96 เปอร์เซ็นต์

เมื่อไม่กี่ปีที่ผ่านมา Soong และผู้ร่วมงานได้อธิบายผลทางจลนศาสตร์ของการควบคุมจากการแผ่ขยายกระจาย สำหรับโพลิเมอไรเซชันฟรี-เรดิคัลแบบวิฏภาคเดียวของโพลิเมธิล เมธาไครเลต

รูปแบบพิเศษของพวกเขาสามารถอธิบายการกระจายของน้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์ได้ดีเท่า ๆ กับอัตราการเกิดพอลิเมอร์



รูปที่ 4.1 ความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิกับขีดจำกัดของค่าคอนเวอร์ชันในโมโนเมอร์ต่างชนิด

ในการเกิดโพลิเมอไรเซชันของไวนิลคลอไรด์วิฏภาคมองโพลิเบอร์คีเลียม แยกออกจากโมโนเบเลียมที่การผันกลับ 0.1% และการเกิดโพลิเมอไรเซชันในเวลาเดียวกันของทั้งวิฏภาคโพลิเมอแรง และวิฏภาค โมโนเบเลียม การแยกวิฏภาคเป็นปัจจัย ที่สำคัญในการแยกรูปแบบของจลนศาสตร์ของโพลิไวนิลคลอไรด์ออกจากรูปแบบจลนศาสตร์วิฏภาคเดียวทั้งหมด เมื่อมากกว่า 15 ปีที่ผ่านมาได้มีการพยายามอธิบายโดย Talamini, Ugelsted, Kuchawov และ Olaj ลักษณะสำคัญ ทั่ว ๆ ไปในรูปแบบทั้งหมดคือการรวมการเกิดพอลิเมอร์ ในทั้งวิฏภาคของโมโนเมอร์และโพลิเมอร์รูปแบบของ Talamini

สมมติให้กระบวนการโพลิเมอไรเซชัน ทั้งวิฏภาคโมโนเมอร์ และพอลิเมอร์เป็นอิสระจาก

วิภาคอื่น แรดิคัลและพอลิเมอร์จัดรูปในแต่ละวิภาคและเกิดและสิ้นสุดในวิภาคอื่น และส่งผ่านแรดิคัลที่ว่องไวระหว่างวิภาค โดยการเปรียบเทียบกับรูปแบบของ Ugelstad ที่อธิบายการส่งผ่านสปีชีส์ แรดิคัลระหว่าง 2 วิภาคคณูการดูดซับ/คาย

รูปแบบของ Talamini และ Ugelstad พิสูจน์ให้เห็นอัตราที่การผันกลับต่ำ มาก ๆ Olaj ได้ดัดแปลงรูปแบบของ Talamini โดยสมมติให้เกิดแรดิคัลในวิภาคโมโนเมอร์ ที่สามารถต่อสายโดยการเพิ่มของโมโนเมอร์เป็นโครงสร้างม้วนเป็นวงที่แน่นโครงสร้างเป็นวงที่แน่นกับแรดิคัลที่ว่องไวของมันจะถูกดูดซับอย่างรวดเร็วโดยพอลิเมอร์ รูปแบบต่าง ๆ ที่เกิดขึ้น มีผลกระทบต่อรูปแบบกลศาสตร์ของกระบวนการโพลิเมโรเซชันแบบแขวนลอยที่การผันกลับต่าง ๆ Abdel-Alim และ Hamielec ดัดแปลงรูปแบบของ Talamini โดยรวมการเปลี่ยนแปลงของปริมาตรในรูปการผันกลับ ของฟังก์ชันและการเปลี่ยนตัวเริ่ม (initiator) ในรูปฟังก์ชันของการผันกลับ รูปแบบนี้ได้ประสบผลในการอธิบายอัตราการเกิดโพลิเมโรเซชันของไวนิลคลอไรด์และเป็นที่ยอมรับในการนำไปประยุกต์ใช้ในภาคอุตสาหกรรม

4.4 กระบวนการผลิตโพลิไวนิล คลอไรด์ในอุตสาหกรรม

1. ขั้นตอนการทำให้ไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ (VCM) บริสุทธิ์ โดยการกลั่นในหอกกลั่น แล้วส่งไปเก็บในถังเก็บเพื่อรอเข้ากระบวนการผลิตต่อไป
2. ขั้นตอนโพลิเมโรเซชัน ขั้นตอนนี้ทำโดย เติมน้ำบริสุทธิ์ที่แยกเอาแร่ธาตุต่างๆ ที่เจือปนอยู่ออกให้หมดก่อนนำเข้าสู่ถังทำปฏิกิริยา เติมสารช่วยในการกระจายตัว (Suspending agent) ต่อจากนั้นเติมไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ และสารริเริ่ม (Initiator) เข้าถึงทำปฏิกิริยาพร้อมกันและสุดท้ายจะใส่สารตัวเติม (additive) เข้าไป แล้วกวนให้เข้ากันในถังปฏิกิริยา และเพิ่มความร้อนจนอุณหภูมิถึงจุดที่ทำให้เกิดปฏิกิริยาที่ 70 องศาเซลเซียส และควบคุมอุณหภูมิไว้ให้คงที่จนกระทั่งไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ เปลี่ยนสภาพกลายเป็นผงเรซินโพลิไวนิล คลอไรด์ (PVC resin)
3. ขั้นตอนการนำกลับมาใช้อีก (Recovery) เมื่อทำปฏิกิริยาสมบูรณ์แล้ว ถังปฏิกรณ์จะถูกทำให้ร้อนขึ้นอีกเพื่อไล่ไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ ส่วนที่เหลือเพื่อนำกลับมาใช้ในกระบวนการผลิตอีก
4. ขั้นตอนการทำผงเรซินโพลิไวนิล คลอไรด์ให้แห้งและการบรรจุถุงเม็ดโพลิไวนิล คลอไรด์ที่แขวนลอยในน้ำ ในถังที่ทำปฏิกิริยาซึ่งมีลักษณะคล้ายน้ำแข็งจะถูกถ่ายมาสู่ถังพัก (slurry tank) และถูกส่งเข้าเครื่อง Decanter เพื่อแยกเอาน้ำออกและส่งต่อเข้าเครื่องอบแห้งเพื่ออบโพลิไวนิล คลอไรด์ให้แห้ง ผงเรซินโพลิไวนิล คลอไรด์จะถูกคัดขนาดและจัดเก็บไว้ในไซโลเพื่อการบรรจุถุงจำหน่าย

4.5 ลักษณะของการนำไปใช้งานผลิตภัณฑ์

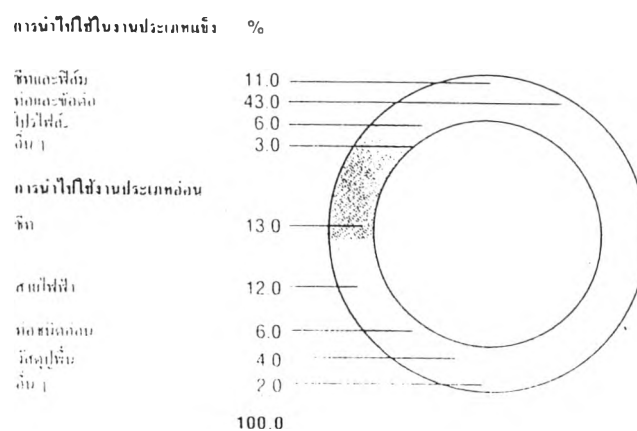
โพลีไวนิล คลอไรด์เป็นพลาสติกที่มีการใช้กันมากเป็น อันดับสองของโลก ซึ่งมีปริมาณการใช้ในปี 2539 ถึง 22.6 ล้านตัน

โพลีไวนิล คลอไรด์ถูกนำไปใช้ประโยชน์ได้หลายทาง เช่นการพัฒนาสาธารณูปโภค ผลิตภัณฑ์ก่อสร้าง สินค้าที่ต้องใช้ความทนทาน และใช้ในด้านอุตสาหกรรมเกษตรและบริโภคพลาสติกโพลีไวนิล คลอไรด์แบ่งออกได้เป็นสองชนิดชนิดที่สำคัญที่สุดคือ โพลีไวนิล คลอไรด์ชั้นพื้นซึ่งใช้กันถึง 92% ของปริมาณโพลีไวนิล คลอไรด์ที่ผลิตทั้งหมด และโพลีไวนิล คลอไรด์อิมัลชันที่ใช้กันประมาณ 8% ของปริมาณโพลีไวนิล คลอไรด์ที่ผลิตทั้งหมด

โพลีไวนิล คลอไรด์ชั้นพื้นถูกนำไปใช้ผลิตท่อและข้อต่อ, ฟิล์ม และซีทชนิดแข็งและอ่อน, กรอบประตูหน้าต่าง, ฉนวนหุ้มสายไฟฟ้า, ท่อชนิดอ่อน, โปรไฟล์ และวัสดุปูพื้น

ประเทศไทย : โพลีไวนิล คลอไรด์ชั้นพื้นแบ่งตามชนิดสินค้าแปรรูป

ตลาดของปี 2539	กิโลตัน	%
รวมปริมาณที่ใช้ในงานประเภทแข็ง	223.0	63.0
รวมปริมาณที่ใช้ในงานประเภทอ่อน	130.7	37.0
รวมปริมาณการใช้โพลีไวนิล คลอไรด์ชั้นพื้นทั้งหมด	353.7	100.0



รูปที่ 4.2 สัดส่วนของผลิตภัณฑ์โพลีไวนิล คลอไรด์ชั้นพื้น

4.6 คุณสมบัติที่สำคัญ

1. โพลีไวนิล คลอไรด์ไม่ติดไฟที่อุณหภูมิสูงแต่จะหลอมตัวเป็นก้อนแข็งไม่ติดไฟ คว้นมักมีกลิ่นหอมเล็กน้อยแต่มีฤทธิ์กัดกร่อน
2. ทนต่อก๊าซทั้งหลาย กรด ต่าง และเคมีภัณฑ์อื่นๆ นอกจากนี้ยังทนต่อน้ำและน้ำมันได้ดีแต่ไม่ทนต่อคลอรีนและ Nitrous gas
3. โพลีไวนิล คลอไรด์จะทนต่อการขูด เป็นฉนวนไฟฟ้าที่ดีและเป็น O₂ - barrier ที่ดีด้วย

4.7 งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการจำลองกระบวนการเกิดปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์

4.7.1 ผลงานการวิจัยการออกแบบจำลองทางพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ของการเกิดปฏิกิริยาโพลีเมอไรเซชันแบบแขวนลอยของโพลีไวนิลคลอไรด์ในเชิงอุตสาหกรรม (Dynamic Simulation of Industrial Polyvinyl Chloride Batch Suspension Polymerization Reactors)

ผลงานวิจัยของ C. Kiparissides, * G. Daskalakis, D.S. Achillas, and E. Sidiropoulou

สนับสนุนทฤษฎีของอัตราการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ (พีวีซี) ข้างต้นกล่าวคือ หยคไวนิล คลอไรด์ โมโนเมอร์ (VCM) ซึ่งจะประกอบด้วย ตัวริเริ่มที่ละลายในน้ำมันซึ่งกระจายในวัฏภาคที่มีน้ำเป็นตัวทำละลายอย่างต่อเนื่อง โดยอาศัยการกวนอย่างรุนแรงและการใช้สารช่วยแขวนลอยประกอบกัน ปฏิกิริยาจะเกิดขึ้นในหยดของสารแขวนลอย สำหรับแบบจำลองที่นำมาเสนอนี้ แต่ละหยดของโมโนเมอร์นั้นจะสามารถเกิดปฏิกิริยา ได้เหมือนการเกิดโพลีเมอไรเซชันแบบบัลค์ในเครื่องปฏิกรณ์เล็กๆแบบเบตซ์ ไวนิลคลอไรด์ โมโนเมอร์ (VCM)ซึ่งเดือดที่อุณหภูมิ -134°C ปกติจะเกิดปฏิกิริยาโพลีเมอไรเซชันในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ โดยโมโนเมอร์เหลว จะกระจายตัวเข้าไปในน้ำภายใต้ความดันในเครื่องปฏิกรณ์ที่มีแจ็กเกตและมีการกวนอย่างรุนแรง เครื่องปฏิกรณ์จะถูกทำให้ร้อนขึ้นจนถึงจุดที่ตัวริเริ่มแตกตัวและเริ่มเกิดปฏิกิริยา ความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา จะถูกถ่ายเทจากหยดโมโนเมอร์ไปสู่ น้ำ และเกิดถ่ายเทความร้อนให้กับผนังเครื่องปฏิกรณ์ ซึ่งจะถูกล้อเย็นโดยน้ำเย็นภายในแจ็กเกตของเครื่องปฏิกรณ์ เมื่อโมโนเมอร์อิสระถูกใช้ไปจนหมด ความดันในเครื่องปฏิกรณ์จะเริ่มลดลงซึ่งเป็นผลมาจากการที่โมเลกุลของโมโนเมอร์เปลี่ยนสถานะจากไอไปเป็นสถานะของพอลิเมอร์เนื่องจากสภาวะกึ่งอิ่มตัว ในอุตสาหกรรมการผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์ โดยปกติปฏิกิริยาจะถูกยุติเมื่อความดันตกลงถึงจุดที่ได้บันทึกไว้ เนื่องจากโพลีไวนิล คลอไรด์ไม่ละลายในโมโนเมอร์ของมันเอง ดังนั้นเมื่อสายโซ่ของพอลิเมอร์เริ่มจะก่อเกิดขึ้น จะตกตะกอนทันทีเพื่อแยกตัวเป็น 2

วิทยาการในหอยที่เกิดการโพลิเมอไรเซชัน จากงานศาสตร์ตรงจุดนี้ ทำให้มองการเกิดโพลิเมอไรเซชันของ ไวนิลคลอไรด์ โมโนเมอร์ (VCM) โดยพิจารณาได้เป็น 3 ขั้นตอนดังนี้

ขั้นตอนที่ 1 ระหว่างขั้นตอนแรกนี้ แรดิคัลตัวแรกจะเริ่มเกิดขึ้น เนื่องจากกระจายความร้อน ของ ตัวริเริ่มที่ทำปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วกับโมเลกุลของโมโนเมอร์ เพื่อจะเกิดโมเลกุลขนาดใหญ่ของโพลิไวนิล คลอไรด์ โดยโพลิไวนิล คลอไรด์ที่ได้จะไม่ละลายในวิทยาการของโมโนเมอร์ เพราะว่าความเข้มข้นของพอลิเมอร์ มีค่าน้อยกว่าขีดความสามารถในการละลายของโมโนเมอร์ (คอนเวอร์ชัน ≤ 0.1)

ขั้นตอนที่ 2 ขั้นตอนนี้อธิบายถึงช่วงที่มีการแยกตัวของวิทยาการพอลิเมอร์เกิดขึ้นตลอดไปจนถึงจุด ที่ไม่มีวิทยาการของโมโนเมอร์เหลืออยู่ คือจุดที่มีค่า คอนเวอร์ชัน = X_c ส่วนผสมของปฏิกิริยาจะประกอบด้วยวิทยาการของโมโนเมอร์, วิทยาการของพอลิเมอร์, วิทยาการของน้ำเป็นส่วนผสม และวิทยาการของก๊าซ ปฏิกิริยาจะเกิดขึ้นในวิทยาการของโมโนเมอร์ และโพลิเมอร์จะเกิดที่อัตราแตกต่างกัน และถูกรวมเข้าด้วยกัน โดยการถ่ายเทของโมโนเมอร์ จากวิทยาการโมโนเมอร์ ไปยังวิทยาการของพอลิเมอร์ ซึ่งหลังจากนั้นจะถูกทำให้ อิ่มตัวกับโมโนเมอร์ การสูญหายไปของวิทยาการโมโนเมอร์นั้นจะทำให้เกิดความดันสูญเสีย (Pressure drop) ขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์

ขั้นตอนที่ 3 เป็นขั้นตอนสุดท้ายที่ค่า คอนเวอร์ชัน สูง ๆ ($X_c < X < 1.0$) เศษส่วนมวลของโมโนเมอร์ในวิทยาการพอลิเมอร์จะลดลงจนเท่ากับปริมาณของการเกิด คอนเวอร์ชัน ของโมโนเมอร์ที่เข้าสู่ค่าขีด จำกัดสุดท้าย

จุดประสงค์ของการดำเนินการในกระบวนการโพลิเมอไรเซชันแบบแขวนลอยของโพลิไวนิล คลอไรด์ในเชิงอุตสาหกรรม คือ การผลิตเรซินตามโมเลกุลที่ต้องการ และมีคุณสมบัติปลอดภัย มีประสิทธิภาพ ดี ซึ่งสามารถสัมผัสได้ และมีวิธีการผลิตง่าย คล้ายกับว่าพอลิเมอร์ ที่ออกมาจะต้องมีคุณสมบัติเป็นไปตามผลิตภัณฑ์ที่ต้องการ เพราะฉะนั้นจึงมีการพัฒนาและศึกษาในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ เพื่อที่จะสามารถใช้ในการทำนายพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ได้อย่างดี เทียบเท่ากับการพัฒนาคุณสมบัติของโมเลกุล ระหว่างช่วงการเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอไรเซชัน

ในอดีตมีแบบจำลองทางคณิตศาสตร์มากมายได้ถูกพัฒนางานสามารถอธิบายได้ถึงการเกิดปฏิกิริยา โพลิเมอไรเซชันใน 2 วิทยาการแบบแขวนลอยของไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ ซึ่งถูกนำมาพัฒนาต่อโดย Sidiropoulon และ Kiparissides (1990) และ Yaan et al. (1991) อย่างไรก็ตามมีการนำสภาวะเชิงซ้อนทาง กายภาพ และเคมีมาใช้ในเครื่องปฏิกรณ์ โดยแต่ละวิธีการของการผลิตแยกแยะไปแต่ละชนิดตามลักษณะ พิเศษ (เช่น ปฏิกิริยา, กลศาสตร์, ความจุของวิทยาการ) ตามความจริง ค่าต่าง ๆ เหล่านี้ เป็นตัวกำหนด

จำนวนของข้อมูลที่ใช้ในการพัฒนาความเข้าใจอย่างกว้างขวาง, ปริมาณของแบบจำลองที่อธิบาย พลวัตของเครื่องปฏิกรณ์ในรูปแบบของสถานะในการผลิต

เพราะฉะนั้นจุดมุ่งหมายของการศึกษาในปัจจุบัน คือการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้เพื่อใช้ในการทำนายพลวัตแบบพฤติกรรมทางพลวัต ของ เครื่องปฏิกรณ์แบบเบสท์ ของการเกิดโพลิเมอร์ เซชันแบบแวนลอยของ โพลิไวนิล คลอไรด์ ในทางอุตสาหกรรมได้

ในส่วนที่สามของเอกสารนี้ แสดงรายละเอียดของสมการคุณมวลสารซึ่งได้เรียบเรียงไว้เพื่อทำนายเวลาของตัวริเริ่ม, โมโนเมอร์ และตัวยับยั้งตลอดช่วงของปฏิกิริยาคุณพลังงานสำหรับของผสมของปฏิกิริยา และของเหลวที่ใช้ในการเพิ่มความร้อน และการหล่อเย็น ก็จะถูกอนุมานเพื่อใช้คำนวณอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ พร้อมกับอุณหภูมิ ของเหลวที่เข้าแจ็กเกต และออกจากแจ็กเกต และอุณหภูมิของผนังโลหะจะเป็นฟังก์ชันกับเวลาในการเกิดปฏิกิริยาอย่างไร

คุณวิภาคเป็นส่วนที่เราศึกษาถัดไป สมการพื้นฐานทางเทอร์โมไดนามิก ได้อนุมานสำหรับเพื่อคำนวณหาความเข้มข้นของโมโนเมอร์ในวิภาคต่าง ๆ และ การทำนายความดันภายในเครื่องปฏิกรณ์ทั้งภายใต้สภาวะความดันคงที่ และไม่คงที่ การกำหนดปริมาณของการแผ่ขยายซึ่งจะควบคุมปฏิกิริยาในขั้นตอน การแผ่ขยายและ ขั้นตอนสุดท้าย(โดยถูกทดสอบในเวลาต่อมา) ผลของการเกิด Glass effect และ การเจล จะถูกควบคุมโดยใช้แบบจำลองพื้นฐานซึ่งเสนอโดย Achilias และ Kiparissides ปี (1992)

ผลการทดลองของเครื่องปฏิกรณ์โพลิเมอร์เซชันแบบแวนลอย (Voutetakis, 1992) ได้ถูกเสนอแนะไว้ในเอกสารฉบับสุดท้าย, ท้ายสุดมีการเปรียบเทียบผลของการทำนายแบบจำลองกับผลข้อมูลจากการทดลอง มันแสดงผลการทดลองตามช่วงเวลา อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ และความดันตลอดจนค่า คอนเวอร์ชัน ค่าสุดท้าย และน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยซึ่งมีค่าเป็นไปในทางเดียวกันกับทฤษฎีที่ได้ทำนายไว้ นอกเหนือจากนั้น ความสามารถในการทำนายของแบบจำลองในปัจจุบัน คือการสาธิต โดยการเปรียบเทียบการทำนายแบบจำลองกับผลการทดลองที่มีความแน่นอน ในช่วงเวลาหนึ่งซึ่งให้ผลไม่แตกต่างกัน, โดยสามารถสรุปได้ว่า ใจความสำคัญของเครื่องปฏิกรณ์การผลิตโพลิไวนิล คลอไรด์มีดังต่อไปนี้

แบบจำลองของระบบรวมกลศาสตร์ของปฏิกิริยาเข้ากับรายละเอียดของวัสดุ, คุณมวลสาร และพลังงาน เพื่อที่จะทำนายพฤติกรรมทางพลวัต ของ เครื่องปฏิกรณ์ การเกิดโพลิเมอร์เซชันแบบแวนลอยของ โพลิไวนิล คลอไรด์ ผลกำไรของแบบจำลอง คือ สามารถนำความรู้มาปรับจูน และประยุกต์ใช้ในทางอุตสาหกรรมได้ต่อไป

4.7.2 จลนศาสตร์ของปฏิกิริยา

กลไกการเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอไรเซชัน แบบแวนดลอย ของฟรีเรดิคัลไวนิลคลอไรด์, VCM ถูกรวบรวมไป ดังสมการต่อไปนี้

ขั้นการริเริ่ม (Initiation)



$$R_d = 2K_d f [I] \quad (4.27)$$

กรณีที่ว่องไว



$$R_i = 2K_i [M] [R^\bullet] \quad (4.29)$$

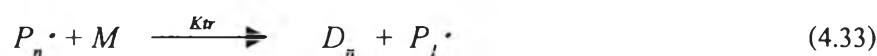
ขั้นการแผ่ขยาย (Propagation)



$$R_p = K_p [M] [P_n^\bullet] \quad (4.31)$$

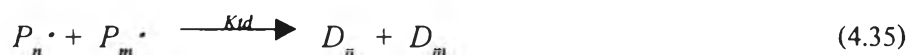
$$K_{pi} = A C^{-E_{pi}/RT} \quad (4.32)$$

ขั้นการย้ายสายโซ่ (Chain Transfer to monomer)



$$R_{tr} = K_{tr} [M] [P_n^\bullet] \quad (4.34)$$

ขั้นตอนสุดท้าย (Termination)



$$R_{td} = K_{td} [P_m^\bullet] [P_n^\bullet] \quad (4.36)$$

จากสมการข้างต้น แสดงสัญลักษณ์ดังนี้ I คือ ตัวริเริ่ม, Z คือ ตัวยับยั้ง และ M คือ โมเลกุลของ โมโนเมอร์ รูปแบบของ แรดิคัล เกิดขึ้นโดยการแตกตัวของตัวริเริ่ม (I) และตัวยับยั้ง (Z) โดยเขียนให้ Nd คือ จำนวนของตัวริเริ่มที่ใช้ในการเกิดโพลิเมอร์ไรเซชัน, $R_x\cdot$ คือ จำนวนของแรดิคัลที่ยังมีการแตกตัว (live macroradicals) และ $P_x\cdot$ คือ จำนวนของสายโซ่โพลิเมอร์ที่หยุดการแผ่ขยาย (Dead Polymer) และ X คือ ปริมาณของโมโนเมอร์

ในการอนุพัทธ์ง่าย ๆ ของสมการคูลอมบาส อธิบายถึงการรักษาสภาพของแรดิคัลที่ยังมีการแตกตัวและ สายโซ่โพลิเมอร์ที่หยุดการแผ่ขยาย โดยมีข้อสันนิษฐานดังต่อไปนี้

1. โพลิเมอร์ไรเซชันของไวนิลคลอไรด์ โมโนเมอร์ในน้ำ และวัฏภาคของไอออนมีค่าน้อยมากจนตัดทิ้งได้
2. เมื่อค่า คอนเวอร์ชัน $< 0.1\%$ การเกิดโพลิเมอร์ไรเซชัน ของไวนิลคลอไรด์ โมโนเมอร์จะดำเนินในวัฏภาคเดียว คือ วัฏภาคโมโนเมอร์-ริชและเมื่อค่า คอนเวอร์ชัน อยู่ในช่วง $0.1 < X < X_c$ จะดำเนินใน 2 วัฏภาค คือ วัฏภาคโมโนเมอร์-ริช และ พอลิเมอร์-ริชเมื่อค่า คอนเวอร์ชัน $> X_c$ จะดำเนินใน 1 วัฏภาค คือ พอลิเมอร์-ริช
3. ไม่มีการถ่ายเทของ แรดิคัลระหว่าง 2 วัฏภาค
4. มีผลการแบ่งแยกส่วนของ โมโนเมอร์, ตัวริเริ่ม และตัวยับยั้ง ระหว่างวัฏภาคโมโนเมอร์ และพอลิเมอร์ ตลอดเวลา
5. ค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาทางจลนศาสตร์ ขึ้นอยู่กับความยาวของสายโซ่โพลิเมอร์
6. การประมาณความใกล้เคียงของสภาวะคงที่ ถูกนำมาประยุกต์ใช้กับ แรดิคัลเริ่มต้นเพียงอย่างเดียว
7. ไม่มีปฏิกิริยาขั้นการแยกสลายของการแผ่ขยาย (Depropagation) เกิดขึ้น

ตามหลักการพื้นฐานทางจลนศาสตร์ และข้อสมมุติฐานดังที่กล่าวมาสามารถจะเขียน

$$R_p = K_p \left(\frac{k_d}{k_t} f \right)^{\frac{1}{2}} [M][I]^{\frac{1}{2}} \quad (4.37)$$

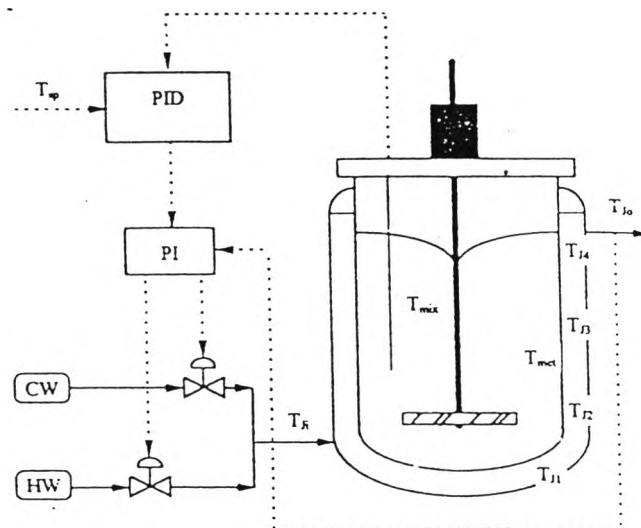
สมการที่ (4.37) อัตราการแผ่ขยายจะขึ้นกับเวลา และลดลงตามความเข้มข้นของตัวริเริ่มมีค่าคงที่ของขั้นตอนการแผ่ขยาย และขั้นตอนสุดท้ายอยู่ในรูป k_p^2/k_t ซึ่งใช้ประโยชน์ในการอธิบายทางจลนศาสตร์

4.7.3 คุณภาพพลังงานและรายละเอียดของวัสดุ

อ้างอิงพื้นฐานทางกลไกที่พิจารณาในก่อนหน้านี้ สมการอนุพันธ์ที่ได้บรรยายการเปลี่ยนแปลงตามการเวลาของตัวริเริ่ม, ตัวยับยั้ง และโมโนเมอร์ทั้งหมด

คุณพลังงาน

เครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ของ การเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอไรเซชัน แบบแวนดอยได้พิจารณาศึกษาในปัจจุบันถูกกำหนดขึ้นดังรูปที่ (4.3)



รูปที่ 4.3 เครื่องปฏิกรณ์ในระบบทดลอง

อันประกอบด้วยภาชนะแจ็กเก็ต, การกวนโดยใบพัดแบบแผ่นเรียบ 4 ใบ พร้อม แผ่นครีป 4 ชั้น ซึ่งถอดได้ อุณหภูมิของปฏิกิริยาจะถูกควบคุมโดยตัวควบคุมแบบคาสเคด ซึ่งจะจัดการและควบคุมกับการไหลของน้ำร้อนและน้ำเย็นได้อย่างเหมาะสม โดยเราจะคุณพลังงานของระบบนี้ออกเป็น 3 ส่วนคือ สำหรับปฏิกิริยาของของผสม, ผงโลหะ และของไหลที่ในแจ็กเก็ต โดยถูกกำหนดโดย Kipariscides และ Shoh, 1983

ดุลพลังงานของของผสมในปฏิกิริยา ดังสมการ

$$C_{pmet} V_{met} \rho_{met} \frac{dT_r}{dt} = \frac{(-\Delta H_r) M_0 dX}{dt} - h_r A_i (T - T_j) - U_a A_i (T - T_a) \quad (4.38)$$

เมื่อ F_w แทนค่าอัตราไหลของน้ำซึ่งเดิมเข้าไปในของผสมของปฏิกิริยา เพื่อรักษาระดับของเหลวภายในเครื่องปฏิกรณ์ให้คงที่ เนื่องจากเมื่อโมโนเมอร์ VCM ถูกทำให้กลายเป็น โพลีไวนิล คลอไรด์ แล้วจะทำให้ปริมาตรลดลง ความหนืดของของผสมภายในเครื่องปฏิกรณ์จะมากขึ้น น้ำจึงมีส่วนสำคัญในการรักษาระดับการถ่ายเทความร้อนของของผสมสู่ผนังเครื่องเอาไว้ให้คงที่ที่ระดับหนึ่ง

อุณหภูมิ T_0 คือ อุณหภูมิตัวอ้างอิง โดย $T_0 = 0$ ส่วนพจน์ของสมการ $U_a A_i (T - T_a)$ ให้สำหรับการประมาณค่าความร้อนที่สูญเสียจากเครื่องปฏิกรณ์

ดุลพลังงานของผนังโลหะ

ผนังโลหะของเครื่องปฏิกรณ์สามารถเขียนได้โดยแสดงดังสมการ

$$C_{pmet} V_{met} \rho_{met} \frac{dT_{met}}{dt} = h_r A_i (T - T_{met}) - \frac{1}{4} A_0 \sum_{i=1} h_{0,i} (T_{met} - T_{j,i}) \quad (4.39)$$

โดยในงานวิจัยนี้จะอนุโลมให้ไม่มีความร้อนที่ถ่ายเทบริเวณผนังโลหะเนื่องจาก $dT_{met} = 0$

ดุลพลังงานของภาชนะแจ็กเก็ต แบ่งออกเป็น 4 ส่วนดังสมการ

$$C_{pj} \frac{V_j \rho_j}{dt} dT_j = U_a A_a (T_a - T_r) + F_j C_{pj} \rho_j (T_j - T_r) \quad (4.40)$$

4.7.4 การจำลองเครื่องปฏิกรณ์ของงานวิจัยที่อ้างอิง

ปัจจุบันซอฟต์แวร์ แพคเกจเป็นที่นิยมใช้กันอย่างแพร่หลาย โดยเป็นเครื่องมืออำนวยความสะดวกอย่างหนึ่ง ในทางด้านวิศวกรรมของกระบวนการผลิตในการจำลองกระบวนการผลิตการของโรงงานผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์แบบแขวนลอยโดยทำการแสดงให้เห็นความสัมพันธ์ของตัวแปร และฟังก์ชันตัวแปรขาเข้าและขาออกที่สำคัญของแบบจำลอง

โดยมีข้อมูล 4 หมวดหมู่หลักที่ต้องการในการออกแบบจำลองกล่าวคือ

1. พารามิเตอร์ทางจลนศาสตร์ เช่นค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาขั้นการริเริ่ม, ค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาขั้นการแผ่ขยาย, ค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาขั้นการย้ายสายโซ่ เป็นต้น
2. สภาพะในการดำเนินการ เช่น ค่าความเข้มข้นของโมโนเมอร์, สารริเริ่ม, อุณหภูมิของการเกิดปฏิกิริยา เป็นต้น
3. รูปทรงทางเรขาคณิตของเครื่องปฏิกรณ์ และพารามิเตอร์ของตัวควบคุม
4. หลักทางจลนศาสตร์สำคัญในการออกแบบจำลองของกระบวนการ เช่น คุณสมบัติสารและคุณภาพงาน ความสมดุลภาคของวิภาคในเครื่องปฏิกรณ์ และการควบคุมปฏิกิริยาในขั้นการแผ่ขยายกระจาย เป็นต้น

โดยการจำลองกระบวนการนี้ให้ค่าเอาต์พุตของกระบวนการซึ่งมีความสำคัญกับแบบจำลองได้มากมายโดยสามารถแบ่งออกเป็น 2 กลุ่มดังนี้

1. การดำเนินการของกระบวนการเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอไรเซชัน เช่นค่าคอนเวอร์ชัน, อัตราการเกิดปฏิกิริยา, อัตราส่วนระหว่างค่าน้ำหนักเฉลี่ยของมวลโมเลกุลต่อจำนวนเฉลี่ยของมวลโมเลกุล (MWD) เป็นต้น
2. ค่าตัวแปรเอาต์พุตต่างๆ ของเครื่องปฏิกรณ์ เช่น อุณหภูมิ, ความดัน, อุณหภูมิแจ็กเก็ตขาเข้าและขาออก เป็นต้น

โดยสามารถแสดงได้ในรูปแบบของตารางหรือกราฟอย่างใดอย่างหนึ่งค่าพารามิเตอร์ต่างๆทางจลนศาสตร์, ทรานสปอร์ต, และเทอร์โมไดนามิกทั้งหมดที่จะใช้ในแบบจำลองนี้แสดงไว้ในตารางที่ 4.2 ถึง 4.3

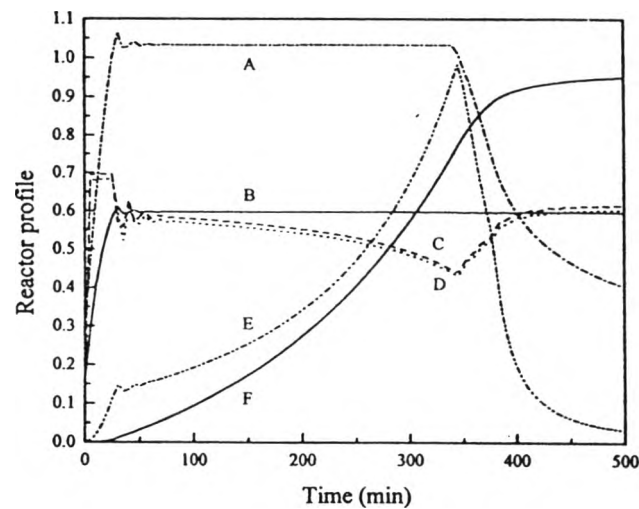
ตารางที่ 4.2 ค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ของการเกิดปฏิกิริยาโพลิไวนิล คลอไรด์

สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
Z_d	$2.31e+15$	$m^3.Kmol^{-1}.s^{-1}$	E_d	291000	$kJ.kmol^{-1}$
Z_{pi}	$50e+7$	$m^3.Kmol^{-1}.s^{-1}$	E_p	27602.48	$kJ.kmol^{-1}$
Z_{tr}	$1.3e+12$	$m^3.Kmol^{-1}.s^{-1}$	E_{tr}	4200	$kJ.kmol^{-1}$
Z_{td}	$9.2e-3$	$m^3.Kmol^{-1}.s^{-1}$	E_{td}	7400	$kJ.kmol^{-1}$
R	8.314	$kJ.kmol^{-1}.K^{-1}$	$-\Delta H$	106/4.184	$kCal.kmol^{-1}$
f	0.8	-			

ตารางที่ 4.3 แสดงค่าสมบัติทางกายภาพของวัตถุดิบที่ใช้ในการทำปฏิกิริยาโพลีเมอไรเซชันของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์

รายละเอียดของคุณสมบัติทางกายภาพ	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
น้ำหนักโมเลกุลของไวนิล คลอไรด์โมโนเมอร์	MW_m	62.5	$kg.kmol^{-1}$
น้ำหนักโมเลกุลของตัวริเริ่ม	MW_I	398	$kg.kmol^{-1}$
น้ำหนักโมเลกุลของน้ำ	MW_w	18	$kg.kmol^{-1}$
น้ำหนักโมเลกุลของโพลีไวนิล คลอไรด์	MW_p	160	$kg.kmol^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของไวนิล คลอไรด์โมโนเมอร์	Cp_m	0.3709	$kCal.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของน้ำ	Cp_w	1.0000	$kCal.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของโพลีไวนิล คลอไรด์	Cp_p	0.2232	$kCal.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของPVA	Cp_{PVA}	0.3883	$kCal.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
ค่าความหนาแน่นของไวนิล คลอไรด์โมโนเมอร์	ρ_m	830.68	$kg.m^{-3}$
ค่าความหนาแน่นของน้ำ	ρ_w	1000.00	$kg.m^{-3}$
ค่าความหนาแน่นของโพลีไวนิล คลอไรด์	ρ_p	1393.80	$kg.m^{-3}$
ค่าความหนาแน่นของสเทบิลไลเซอร์ (PVA)	ρ_{PVA}	12393.00	$kg.m^{-3}$

จากการวิจัยสามารถแยกประเภทในการจำลองโปรไฟล์ของปฏิกิริยาได้ในเทอมของการเปลี่ยนแปลงของคอนเวอร์ชัน , อัตราการเกิดโพลีเมอไรเซชันตามเวลา, อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์ และความดันโดยแสดงดังในรูปที่ 4.4



รูปที่ 4.4 โปรไฟล์ตามชนิดของสัญญาณเอาต์พุตจากปฏิกิริยา

- กราฟ(A) แสดงโปรไฟล์ของความดันในหน่วย บาร์/10
- กราฟ(B) แสดงโปรไฟล์ของอุณหภูมิในหน่วย องศาเซลเซียส/100
- กราฟ(C)และ(D) แสดงโปรไฟล์ของน้ำขาเข้าและขาออกจากแจ็กเก็ตตามลำดับในหน่วย องศาเซลเซียส/100
- กราฟ(E) แสดงโปรไฟล์ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาของโพลีไวนิล คลอไรด์ ในหน่วยโมลต่อลิตรต่อ นาที
- กราฟ(F) แสดงโปรไฟล์ของการเกิดคอนเวอร์ชันของโมโนเมอร์

ช่วงเวลาในการเพิ่มความร้อน (ประมาณ 20 นาที) คือ ลักษณะพิเศษจำเพาะของการเกิดปฏิกิริยาทำได้โดยเพิ่มอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ และความดัน เมื่ออุณหภูมิของการเกิดโพลีเมอไรเซชัน มีค่าเพิ่มขึ้นจนถึงจุดเซ็ทพอยท์ (B) คือจุดที่ปฏิกิริยา เริ่มต้นขึ้น และเกิดการคอนเวอร์ชันและอัตราการเกิดปฏิกิริยาโพลีเมอไรเซชันก็จะเพิ่มมากขึ้น ผลของการควบคุมที่มีการแผ่ขยายกระจายหลาย ๆ ทิศทางอย่างทั่วถึง ถูกแสดงได้โดยการเพิ่มขึ้นอย่างคมเฉียบว่องไวของอัตราการเกิดปฏิกิริยาโพลีเมอไรเซชัน (E) ซึ่งเป็นไปตามการเพิ่มขึ้นของคอนเวอร์ชันของปฏิกิริยา (F) ในระดับที่ยังคงรักษาอุณหภูมิของปฏิกิริยาให้คงที่ได้ อุณหภูมิขาเข้าในแจ็กเก็ตถูกพิจารณาให้มีค่าต่ำกว่าอุณหภูมิของปฏิกิริยา (C) ยอดแหลมในเส้นกราฟที่

แสดงอัตราการเกิดปฏิกิริยาสอดคล้องกับยอดแหลมที่พบในปฏิกิริยาคายความร้อน (ในทางอุตสาหกรรม โดยปกติเรียกว่า “จุดร้อน” และเป็นจุดที่เป็นเครื่องหมายในการเริ่มต้นของการเกิดแรงดันสูงเฉียบ หลังจากจุดนี้ไปแล้วอัตราการเกิดปฏิกิริยาโพลีเมอไรเซชันจะลดลงเรื่อย ๆ และการเกิดคอนเวอร์ชันก็จะช้าลงจนถึงค่าสุดท้ายของมัน

4.7.5 วิธีการจำลองปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ในห้องทดลองของงานวิจัยที่อ้างอิง

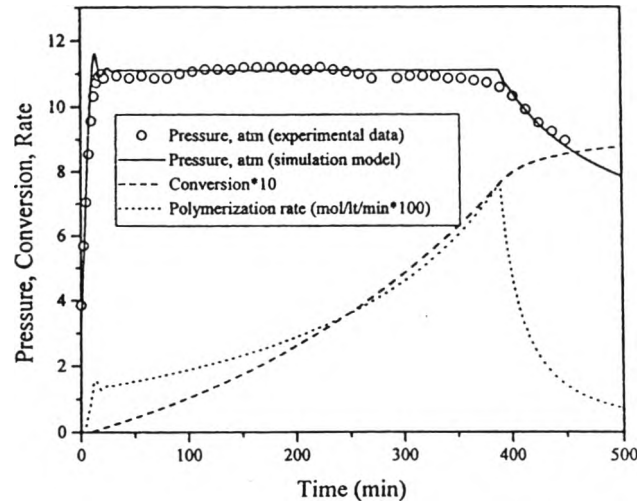
1. เตรียมอุปกรณ์ตามไดอะแกรมรูปที่ 4.2 ข้างต้น โดยการทดลองนี้ใช้ชุดควบคุมอุณหภูมิแบบพีไอดี
2. ใส่น้ำกลั่นและน้ำที่ปราศจากอ็อกซิเจนซึ่งมีสารแขวนลอยละลายอยู่ จากนั้นเติมตัวริเริ่มตามโดยปริมาณที่ได้ชี้ไว้
3. ลดความดันภายในเครื่องปฏิกรณ์ลงโดยใช้ปั๊มสุญญากาศ จนเหลือประมาณ -10 psi จากนั้นใช้ปั๊มดูดเติมโวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์เข้าไปในเครื่องปฏิกรณ์
4. เพิ่มอุณหภูมิจนกระทั่งถึงจุดเซ็ทพอยท์ โดยใช้ตัวควบคุมแบบพีไอดี ซึ่งจะใช้คอมพิวเตอร์เก็บค่าอุณหภูมิและความดันของเครื่องปฏิกรณ์ ปริมาณอัตราการไหลและอุณหภูมิของน้ำขาเข้าและขาออกจากแจ็กเก็ต
5. นำผลิตภัณฑ์ที่ได้สุดท้ายมาวัดค่าคุณสมบัติทางการกระจายตัวและโครงสร้างทางเคมี

ตารางที่ 4.4 ปริมาณส่วนผสมของสารตั้งต้นที่ใช้ในการทดลองปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์

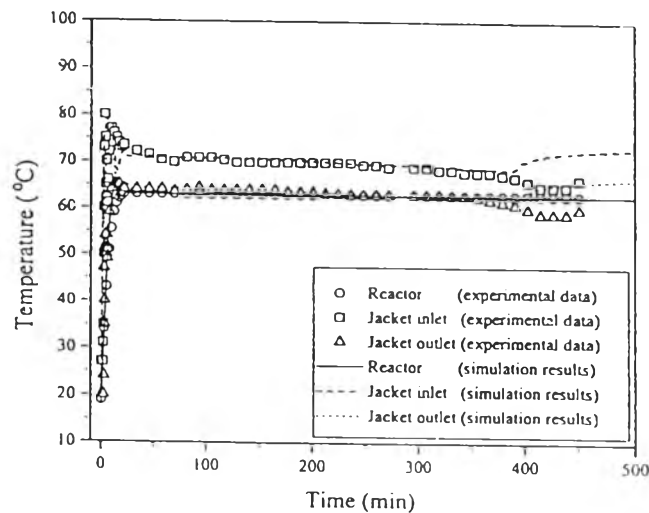
โวนิล คลอไรด์ โมโนเมอร์(เกรดการค้า)		1116 กรัม
น้ำ		2232 กรัม
ตัวเสถียรโพลีเมอร์แขวนลอย	0.08% ของน้ำหนักน้ำ	1.786 กรัม
(suspension stabilizer)		
ตัวริเริ่ม	1.57 กรัม/กิโลกรัมของโมโนเมอร์	1.752 กรัม

4.7.6 ผลการจำลองของงานวิจัยที่นำมาอ้างอิง

ผลการทดลองสามารถสรุปได้ว่าการทำนายแบบจำลองของ C. Kiparissides, * G. Daskalakis, D.S. Achilias, and E. Sidiropoulou มีความน่าเชื่อถือ โดยเมื่อทำการเปรียบเทียบระหว่างการทำนายแบบจำลอง กับผลข้อมูลจากการทดลอง แสดงโปรไฟล์ของปฏิกิริยาไว้ดังรูปที่ 4.5 และรูปที่ 4.6



รูปที่ 4.5 การเปรียบเทียบผลของการทำนายกับผลจากการทดลองของความดัน ค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาและค่าการเกิดคอนเวอร์ชันของโมโนเมอร์

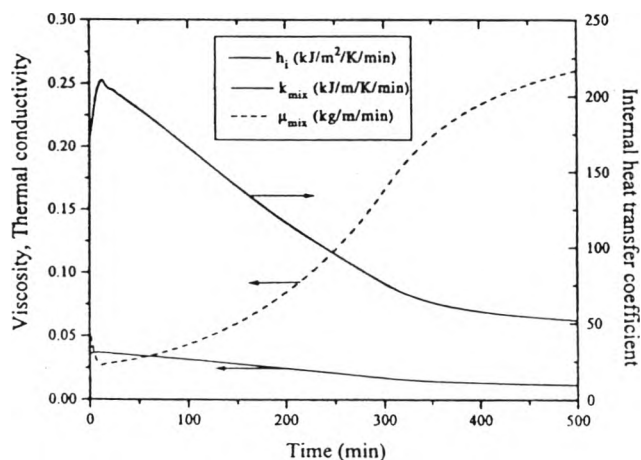


รูปที่ 4.6 การเปรียบเทียบผลของการทำนายกับผลจากการทดลองในห้องทดลองของ อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์รวมถึงอุณหภูมิขาเข้าและขาออกจากแจ็กเก็ต

ความดันภายในเครื่องปฏิกรณ์ และ อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์รวมถึงอุณหภูมิขาเข้าและขาออกจากแจ็กเก็ต โดยได้ค่ามาจากการทำนายแบบจำลองทางทฤษฎี และถูกนำมาทำการเปรียบเทียบเทียบกับผลข้อมูลจากการทดลองจากรูปที่ 4.5 และ 4.6 สามารถแสดงให้เห็นว่าการทำนายแบบจำลองให้ผลที่ดีมีแนวโน้มไปในทางเดียวกันกับผลข้อมูลจากการทดลองจริงในห้องทดลองพบว่าค่าการเกิดคอนเวอร์ชันของโมโนเมอร์ และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเป็นไปตามทฤษฎีที่อ้างถึงตามข้างต้นคือเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์จะมีการเกิดปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วเมื่ออุณหภูมิถึงจุดที่เกิดปฏิกิริยาในช่วงต้นและค่อยๆลดลงจนสิ้นสุดปฏิกิริยา

สามารถนำแบบจำลองมาศึกษาถึงคุณสมบัติทางโครงสร้างทางเคมีของผลิตภัณฑ์โดยรายละเอียดของความสัมพันธ์ระหว่างเวลา กับน้ำหนักเฉลี่ยของโมเลกุล และลักษณะโครงสร้างทางเคมีของโพลิไวนิลคลอไรด์ถูกทำนายโดยแบบจำลอง เปรียบเทียบกับค่าสุดท้ายที่วัดได้การทดลองในห้องทดลองแสดงค่าสุดท้ายของจำนวนโมเลกุล (M_n) และน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยของน้ำหนักโมเลกุล (M_w) ที่ได้จากการทดลอง พบว่าผลการทำนายแบบจำลองตามทฤษฎีมีแนวโน้มเป็นไปตามค่าที่ได้จากการทดลองจริงในห้องทดลองดังนั้นเป็นการสนับสนุนได้ว่าแบบจำลองนี้มีความน่าเชื่อถือ

จากมุมมองของหลักในการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ เราสนใจที่จะติดตามผลการเปลี่ยนแปลงของคุณสมบัติในทางการถ่ายเทของของผสม ระหว่างการเกิดปฏิกิริยาเพื่อใช้เป็นประโยชน์ในการศึกษาการเกิดปฏิกิริยาของโพลิไวนิล คลอไรด์ต่อไป

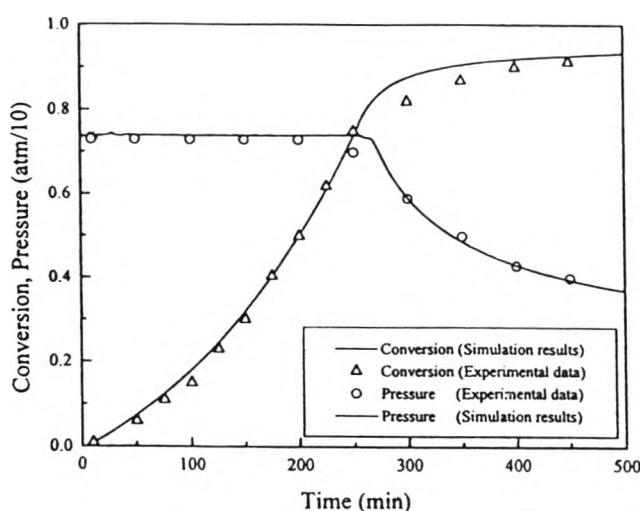


รูปที่ 4.7 คุณสมบัติทางด้านกายภาพและการถ่ายโอนของ ของผสมในปฏิกิริยาและเวลา

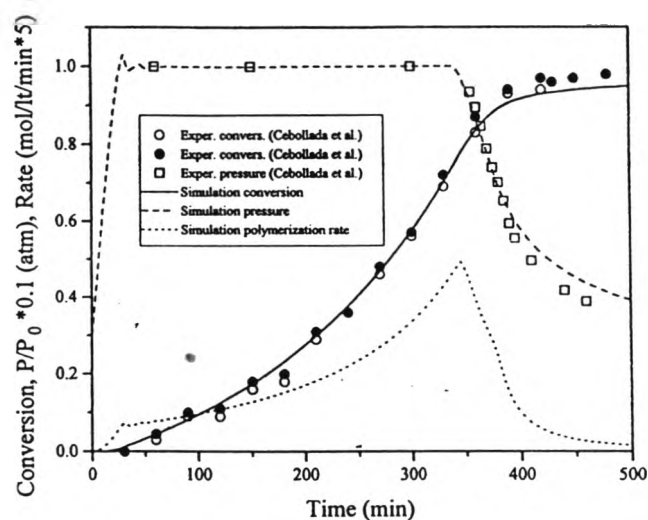
จากรูปที่ 4.7 ซึ่งสามารถแสดงให้เห็นว่า ความหนืดของของผสมในปฏิกิริยามีค่าเพิ่มขึ้น ตามเวลาอย่างรวดเร็ว ส่วนผลของค่าสัมประสิทธิ์การนำความร้อนของฟิล์มภายในของผนังโลหะ จะมีค่าลดลง

เมื่อเวลาเพิ่มขึ้น และค่าการนำความร้อนของของผสมจะลดลงตาม ช่วงเวลาของการเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอไรเซชันซึ่งเป็นไปตามความจริงของพฤติกรรมของกระบวนการเกิดปฏิกิริยาแบบเบทซ์

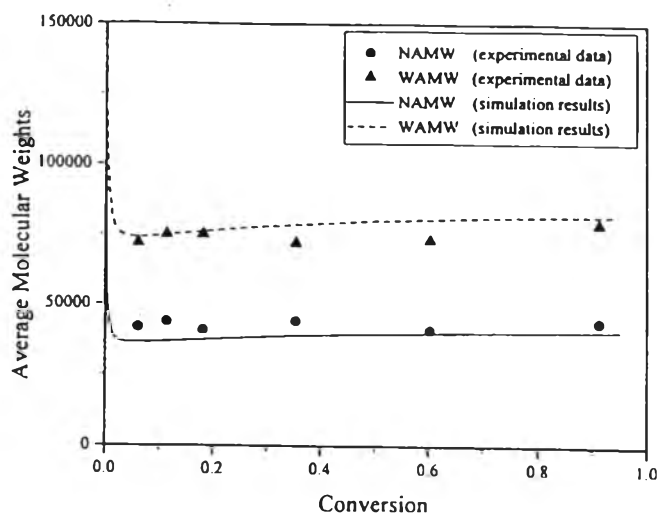
ประสิทธิภาพของการทำนายแบบจำลอง ได้แสดงอย่างชัดเจนในเอกสารนี้คือ การทดสอบโดยการเปรียบเทียบระหว่างการทำนายโดยตรง กับผลข้อมูลจากการทดลองที่ได้รับจากเอกสารตีพิมพ์ โดยแหล่งของข้อมูลจากการทดลองมาจาก 2 แหล่ง คือ Xie et al. 1991 และ Cebollada et al. 1989 ซึ่งแสดงให้เห็นได้ว่า มีความสอดคล้องเป็นอย่างดีระหว่าง การทำนายแบบจำลอง และผลการทดลองในรูปของความดันของเครื่องปฏิกรณ์ และค่าคอนเวอร์ชันของโมโนเมอร์ ดังรูปที่ 4.8 และ 4.9



รูปที่ 4.8 การเปรียบเทียบผลการทำนายกับผลการทดลองจากห้องทดลองของ Xie et.al., 1991 ของค่าความดัน และค่าการเกิดคอนเวอร์ชันของโมโนเมอร์



รูปที่ 4.9 การเปรียบเทียบผลของการทำนายกับผลจากการทดลองของ Cebollada et al., 1989 อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์รวมถึงอุณหภูมิขาเข้าและขาออกจกแจ็กเก็ต



รูปที่ 4.10 การเปรียบเทียบผลจากการทำนายแบบจำลอง กับผลข้อมูลจากการทดลองของ Mr. Ceballada et al (1983) ของการเปลี่ยนแปลงน้ำหนักโมเลกุลเฉลี่ยกับค่าคอนเวอร์ชันของโมโนเมอร์

จากรูปที่ 4.8, 4.9 และ 4.10 สามารถสนับสนุนการจำลองของกระบวนการของ C. Kiparissides และหมุดคณะว่ามีความน่าเชื่อถือมากเพราะจากผลการทำนายเปรียบเทียบกับผลการทดลองจากห้องทดลองจริงของ Xie et.al., 1991 และ Cebollada et al., 1989 ให้ผลใกล้เคียงกันกับแบบจำลอง

บนพื้นฐานของผลการทดลองที่แสดงสามารถยืนยันได้ถึงประสิทธิภาพความน่าเชื่อถือของแบบจำลองสำหรับเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ ของการเกิดโพลิเมอร์ไรเซชัน แบบแวนลอยของโพลิไวนิลคลอไรด์ ขั้นตอนต่อไป คือ การใช้แบบจำลองนี้ในระดับขั้นตอนการออกแบบของกระบวนการผลิตโพลิไวนิล คลอไรด์เกี่ยวกับผลเริ่มต้นบางตัว สำหรับการออกแบบของเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลิไวนิล คลอไรด์ในเชิงอุตสาหกรรมจะถูกแสดงต่อไป

จากผลที่แสดงในรูปที่ 4.5 สรุปได้ว่า ประเภทของปฏิกิริยาโพลิเมอร์ไรเซชันแบบแวนลอยของโพลิไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ จะให้กราฟอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่มียอด ที่แหลมมากเกิดขึ้นที่จุดวิกฤติของการเกิด คอนเวอร์ชัน, X_c ขนาดของเครื่องปฏิกรณ์ในเชิงอุตสาหกรรม ถูกออกแบบให้เครื่องปฏิกรณ์มีความจุของน้ำหล่อเย็นมากที่สุด เพื่อให้สอดคล้องกับอัตราของการปลดปล่อยความร้อนให้มากที่สุดเพื่อที่จะให้ความจุของน้ำหล่อเย็นเครื่องปฏิกรณ์มีข้อดีมากที่สุด อัตราการเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอร์ไรเซชัน จะต้องถูกรักษาไว้ที่ค่าคงที่ระดับหนึ่ง ซึ่งให้อัตราการเกิดความร้อนมีค่าเท่า ๆ กัน ความจุการหล่อเย็นมากที่สุดของระบบ ซึ่งแนวทางแก้ปัญหานี้โดยปกติเราจะใช้การผสมระหว่างตัวริเริ่มแบบเร็วและช้าเข้า

แนวทางอื่น ๆ สำหรับการประหยัดในกระบวนการผลิต โพลิไวนิล คลอไรด์ รวมถึงขั้นตอนการเกิดตัวริเริ่ม การใช้ตัวหน่วง (inhibitor) ให้เป็นประโยชน์ ชี้คจำกัดของการเปลี่ยนอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ระหว่างการเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอร์ไรเซชัน เป็นต้น

4.7.7 สรุปผลการจำลองของงานวิจัยที่นำมาอ้างอิง

จากผลการจำลองของงานวิจัยสรุปได้ว่า การสำรวจในปัจจุบันของงานที่ครอบคลุมทางหลักคณิตศาสตร์ถูกแสดงไว้สำหรับแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ของการเกิดปฏิกิริยาโพลิเมอร์ไรเซชันของ โพลิไวนิล คลอไรด์

รายละเอียดของกลไกทางจลนศาสตร์ถูกนำมาพิจารณา และฟังก์ชันของอัตราการเกิดปฏิกิริยาโดยทั่วไป สำหรับการผลิตของสายโซ่พอลิเมอร์ ถูกนำมาพัฒนาโดยวิธีการในขณะนี้มีการนำโมเลกุลหลากหลายชนิดและลักษณะโครงสร้างทาง ของมหภาคโมเลกุล (เช่นจำนวนและน้ำหนักโมเลกุลและ น้ำหนักเฉลี่ยโมเลกุล) มาใช้ในการคำนวณด้วย

นอกเหนือจากนั้น รายละเอียดทางด้านคุณมวลสารถูกนำมา พัฒนาสำหรับการกระจายตัวของ โมโนเมอร์ระหว่าง 4 ภูมิภาค คือภูมิภาคโมโนเมอร์, ภูมิภาคพอลิเมอร์, ก๊าซ และ น้ำ ที่ปรากฏอยู่ในเครื่อง ปฏิกรณ์

สำหรับการพิจารณาความต้องการของพลังงานความร้อนของเครื่องปฏิกรณ์ คุณพลังงานแสดง ออกมาในรูปสูตรสำหรับปฏิกิริยา, แจ็กเก็ต และอุณหภูมิของผนังโลหะของเครื่องปฏิกรณ์ ความดันของ เครื่องปฏิกรณ์ถูกนำมาคำนวณระหว่างสัดส่วนของการเกิดปฏิกิริยาบนพื้นฐานของการพิจารณาข้อมูลทาง เทอร์โมไดนามิกสูตรสำหรับค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาขั้นสุดท้าย(Termination)และขั้นการแผ่ขยาย (Propagation) ถูกพัฒนาขึ้นมาบนพื้นฐานแบบจำลองข้อมูล การสำรวจในส่วนของการทดลองรวมกับการ ทำนายของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ แบบมีการทำงานตามอัตโนมัติเต็มรูปแบบ ซึ่งแสดงได้ว่าข้อมูลที่ได้ จากการทดลอง อุณหภูมิ และความดัน ตลอดจนอุณหภูมิขาเข้าแจ็กเก็ต และขาออก มีความเห็นไปในทาง เดียวกันอย่างดีกับการทำนายแบบจำลองจนทางทฤษฎี

นอกจากนั้น ความสามารถของการทำนายแบบจำลองที่อ้างอิงนี้ได้ถูกทดสอบโดยการเปรียบเทียบ ผลการทำนายแบบจำลองกับผลการทดลองของ Xie et al., 1991 และ Cebollada et al., 1989 ซึ่งทำให้ แบบจำลองที่นำมาอ้างอิงนี้มีความน่าเชื่อถือมาก สุดท้ายนี้ยังมีผลบางตัวสามารถเป็นประโยชน์ในการลด ต้นทุนในการผลิตในเชิงอุตสาหกรรมได้อีกด้วย

บทที่ 5

การจำลองกระบวนการผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์ของโรงงานจริงและประยุกต์ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซี มาใช้ในการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์

5.1 กระบวนการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์

โดยการวิจัยนี้เราพิจารณาถึงกระบวนการผลิตโพลีไวนิล คลอไรด์ซึ่งมีการผลิตในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ซึ่งมีชื่อทางการค้า "พีวีซี" โดยเกิดปฏิกิริยาแบบแขวนลอยอาจเรียกว่าเป็นการกระจายตัวโดยโมโนเมอร์จะกระจายตัวในตัวกลางโดยทั่วไปที่เป็นน้ำ การกระจายตัวของโมโนเมอร์มีลักษณะเป็นหยดเล็กๆ โดยใช้การกวนอย่างรวดเร็วหรือปั่นโดยเครื่องปั่นควบคู่กันไป ประกอบกับมีตัว สเตบิไลเซอร์หรือตัวแพร่กระจาย ซึ่งทำหน้าที่ป้องกันมิให้หยดโมโนเมอร์ต่างๆที่กำลังเกิดปฏิกิริยาอยู่มีโอกาสรวมตัวกันเป็นหยดใหญ่ ส่วนตัวริเริ่ม (Initiator) ที่ใช้เป็นสารที่สามารถละลายในโมโนเมอร์ได้ ซึ่งทั่วไปได้แก่สารที่สามารถละลายเปอร์ออกไซด์อินทรีย์ จากนั้นค่อยๆให้ความร้อนกับเครื่องปฏิกรณ์จนถึงอุณหภูมิที่กำหนดและควบคุมอุณหภูมิที่จุดนี้จนกระทั่งปฏิกิริยาเกิดสมบูรณ์

5.2 การวิเคราะห์กระบวนการของเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์

สำหรับกระบวนการนี้ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นแบบคายความร้อนซึ่งจะมีผลทำให้อุณหภูมิสูงขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ ดังนั้นจึงมีการลดอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์โดยการหล่อเย็นด้วยน้ำในแจ็กเก็ตจากทฤษฎีที่กล่าวมาข้างต้น ในการทำวิจัยเรื่องการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ จึงมีข้อสมมติฐานของงานวิจัยดังต่อไปนี้

- 1.) แบบจำลองทางจลศาสตร์เคมีของกระบวนการการเกิดพอลิเมอร์ส่วนใหญ่จะเป็นแบบไม่เป็นเชิงเส้น และสามารถทำให้เกิดผลของการเกิดเจล (Gel Effect) ได้แต่ในงานวิจัยนี้จะไม่คำนึงถึงอิทธิพลจากการเกิด
- 2.) การวิจัยคำนึงถึงผลของการที่คุณสมบัติของสารภายในเครื่องปฏิกรณ์เปลี่ยนแปลงตามเวลาความหนืดและความหนาแน่นของรีแอกชันมิกเจอร์เพิ่มขึ้นเมื่อเวลาเปลี่ยนไป มีผลทำให้เกิดความไม่แน่นอนของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนในระบบ

- 3.) การวิจัยจะประมาณค่าความร้อนที่คายออกมาจากปฏิกิริยาควบคู่ไปกับการควบคุม ด้วยเพื่อให้ได้ อุณหภูมิของแจ็กเก็ตที่ใช้เป็นตัวแปรปรับอุณหภูมิในเครื่องปฏิกิริยามีค่าน่าเชื่อถือ
- 4.) โครงสร้างทางเคมีของผลิตภัณฑ์ จะถูกกำหนดโดยอุณหภูมิของรีแอกชันมิกเจอร์ โดยที่อุณหภูมิ જેพ พอยท์ไม่เกิดปฏิกิริยาข้างเคียง
- 5.) ปฏิกิริยาเกิดการผสมเกิดขึ้นอย่างสมบูรณ์
- 6.) พอลิเมอร์ไรเซชันของไวนิลคลอไรด์ (VCM) โมโนเมอร์ในน้ำ และวิฏภาคของไว้นั้นมีค่าน้อยมากจน คัดทิ้งได้
- 7.) การเกิดปฏิกิริยาโพลีไวนิล คลอไรด์แบบแขวนลอยนี้ต้องใช้ ตัวสเตรปีไลเซอร์ควบคู่ไปด้วย ซึ่งระบบที่ เรากำลังศึกษาใช้ โพลีไวนิล แอลกอฮอล์เป็นตัวสเตรปีไลเซอร์

ขั้นตอนการเกิดปฏิกิริยาจะถูกพิจารณาได้เป็น 3 ขั้นตอนดังนี้

ขั้นตอนที่ 1 ระหว่างขั้นตอนแรกนี้ แรดิคัลตัวแรกจะเริ่มเกิดขึ้น เนื่องจากกระจายความร้อน ของ ตัวริเริ่มที่ทำให้ปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วกับโมเลกุลของโมโนเมอร์ เพื่อจะเกิดโมเลกุลขนาดใหญ่ของโพลีไวนิล คลอไรด์ โดยโพลีไวนิล คลอไรด์ที่ได้จะไม่ละลายในวิฏภาคของโมโนเมอร์ เพราะว่าความเข้มข้นของพอลิ เมอร์ มีค่าน้อยกว่าขีดความสามารถในการละลายของโมโนเมอร์ (คอนเวอร์ชัน ≤ 0.1)

ขั้นตอนที่ 2 ขั้นตอนนี้อธิบายถึงช่วงที่มีการแยกตัวของวิฏภาคพอลิเมอร์เกิดขึ้นตลอดไปจนถึงจุด ที่ไม่มีวิฏภาคของโมโนเมอร์เหลืออยู่ คือค่าณ.จุดที่มีค่า คอนเวอร์ชัน = X_c ส่วนผสมของปฏิกิริยาจะ ประกอบด้วยวิฏภาคของโมโนเมอร์, วิฏภาคของพอลิเมอร์, วิฏภาคของน้ำเป็นส่วนผสม และวิฏภาคของ ก๊าซ ปฏิกิริยาจะเกิดขึ้นในวิฏภาคของโมโนเมอร์ และโพลีเมอร์จะเกิดที่อัตราแตกต่างกัน และถูกรวมเข้า ด้วยกันโดยการถ่ายเทของโมโนเมอร์ จากวิฏภาคโมโนเมอร์ ไปยังวิฏภาคของพอลิเมอร์ ซึ่งหลังจากนั้นจะ ถูกทำให้อิมตัวกับโมโนเมอร์การสูญหายไปของวิฏภาคโมโนเมอร์นั้นจะทำให้เกิดความดันสูญเสีย (Pressure drop) ขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์

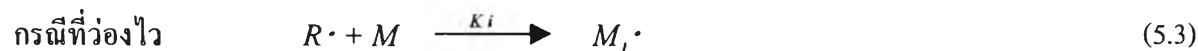
ขั้นตอนที่ 3 เป็นขั้นตอนสุดท้ายที่ค่า คอนเวอร์ชัน สูง ๆ ($X_c < X < 1.0$) เศษส่วนมวลของโมโน เมอร์ในวิฏภาคพอลิเมอร์จะลดลงจนเท่ากับปริมาณของการเกิด คอนเวอร์ชัน ของโมโนเมอร์ที่เข้าสู่ค่าขีด จำกัดสุดท้าย

สามารถอธิบายได้ ดังสมการต่อไปนี้

ขั้นการริเริ่ม (Initiation)



$$R_d = 2K_d f [I] \quad (5.2)$$



$$R_i = 2K_i [M] [R^\cdot] \quad (5.4)$$

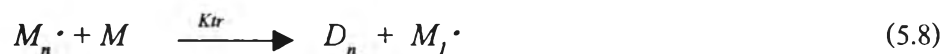
ขั้นการแผ่ขยาย (Propagation)



$$R_p = K_p [M] [M_n^\cdot] \quad (5.6)$$

$$K_{pi} = A_c^{-E_{pi}/RT} \quad (5.7)$$

ขั้นการย้ายสายโซ่ (Chain Transfer to monomer)



$$R_{tr} = K_{tr} [M] [M_n^\cdot] \quad (5.9)$$

ขั้นตอนสุดท้าย (Termination)



$$R_{td} = K_{td} [M_m^\cdot] [M_n^\cdot] \quad (5.11)$$

แสดงสัญลักษณ์ดังนี้ I คือ ตัวริเริ่ม, Z คือ ตัวเหนี่ยวรั้ง และ M คือ โมเลกุลของโมโนเมอร์

รูปแบบของ แรดิคัล เกิดขึ้นโดยการแตกตัวของตัวริเริ่ม (I) จำนวนของตัวริเริ่มที่ใช้ในการเกิดโพลิเมอร์

ชั้น $[M_n^\cdot]$ คือ ความเข้มข้นของฟรีแรดิคัล

ภาพรวมของอัตราการเกิดปฏิกิริยาได้ดังนี้

จากกลไกของปฏิกิริยาข้างต้นเพื่อการพัฒนากฎอัตราการเกิดปฏิกิริยา จึงจำเป็นต้องกำหนดข้อ
อนุโลมขั้นดังนี้

1. อนุโลมให้อัตราการแผ่ขยายเป็นอิสระต่อความยาวของโซ่เรดิคัล ดังนั้นทุกขั้นตอนของการแผ่ขยายจะมีค่า k_p เดียวกัน คือ

$$k_p = k_{p1} = k_{p2} = k_{p3} = k_{p4} \dots\dots\dots$$

2. อนุโลมให้อัตราขั้นสุดท้ายเป็นอิสระต่อความยาวของโซ่เรดิคัลเช่นกัน

3. สำหรับกระบวนการเกิดพอลิเมอร์ที่มีน้ำหนักโมเลกุลสูง อนุโลมให้

$$k_i[M][R\cdot] \ll k_p[M][M_n\cdot] \quad (5.12)$$

เพราะขั้นตอนริเริ่มมีเพียงขั้นเดียวต่อโซ่พอลิเมอร์ 1 โซ่ เปรียบเทียบกับขั้นตอนการแผ่ขยาย ซึ่งจำนวนขั้นเป็นร้อยเป็นพันขั้น

4. ให้ความเข้มข้นของฟรีเรดิคัล $[M_n\cdot]$ มีค่าคงที่เสมอตลอดการเกิดปฏิกิริยาดังนั้น

$$\frac{d[M_n\cdot]}{dt} = 0 \quad (5.13)$$

$$\text{ดังนั้น} \quad R_i = R_t \quad (5.14)$$

$$\text{จากสมมติฐานได้} \quad R_i = 2K_d f[I] \quad (5.15)$$

$$R_p = -d[M]/dt = k_i[M][R\cdot] + k_p[M][M_n\cdot] \quad (5.16)$$

แต่ตามอนุโลมข้อ 3 ข้างต้น

$$R_p = -d[M]/dt = k_p[M][M_n\cdot] \quad (5.17)$$

สมการที่ 5.17 ยังนำไปใช้งานไม่ได้ในทางปฏิบัติเพราะมีความเข้มข้นของฟรีเรดิคัล $[M_n\cdot]$ รวมอยู่ด้วยซึ่งโดยปกติการวัดความเข้มข้นของฟรีเรดิคัลยุ่งยากมาก จึงทำการขจัด $[M_n\cdot]$ จากสมการได้โดยใช้ข้ออนุโลมที่ 4 ดังนี้

$$\text{จาก} \quad R_i = R_t \quad (5.18)$$

$$2k_d f[I] = 2k_t [M_n \cdot]^2 \quad (5.19)$$

$$[M_n \cdot]^2 = \left(\frac{k_d f [I]}{k_t} \right)^2 \quad (5.20)$$

$$[M_n \cdot] = \left(\frac{2k_d f}{k_t} \right)^{\frac{1}{2}} [I]^{\frac{1}{2}} \quad (5.21)$$

แทนค่า $[M_n \cdot]$ ลงในสมการที่ (5.17)

$$R_p = K_p \left(\frac{k_d f}{k_t} \right)^{\frac{1}{2}} [M][I]^{\frac{1}{2}} \quad (5.22)$$

และคอนเวอร์ชันของปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์สามารถหาได้โดยเปรียบเทียบกับจำนวนโมลของโมโนเมอร์ที่เกิดปฏิกิริยาทั้งหมด $[M \cdot] = I - [P]$ หรือ $I - X$ เมื่อ $X =$ การคอนเวอร์ชัน

$$X = [P] = I - [M \cdot] \quad (5.23)$$

ขั้นตอนการแผ่ขยายจะพิจารณาเพียงปฏิกิริยาของสายโซ่ที่ว่องไวกับโมโนเมอร์ จากปฏิกิริยาการส่งผ่านของสายโซ่ แสดงให้เห็นว่า ความเข้มข้นของสายโซ่ที่ว่องไว $[M \cdot]$ สามารถเกิดปฏิกิริยากับสายอื่น ๆ ในปฏิกิริยาของการส่งผ่านสายโซ่ ปฏิกิริยาการส่งผ่านสายโซ่จะไม่มีผลต่อขั้นตอนการแผ่ขยายทั้งหมด ทำให้ความเข้มข้นของสปีชีส์การส่งผ่านสายโซ่มีผลน้อยต่อโมโนเมอร์ และค่าคงที่การส่งผ่านสายโซ่ (k_p) มีค่าเท่ากับ ค่าคงที่ของขั้นตอนการแผ่ขยาย (K_p)

เมื่อ $[M] =$ ความเข้มข้นของ โมโนเมอร์ในเครื่องปฏิกรณ์ (กิโลโมล/ลูกบาศก์เมตร)

$[P] =$ ความเข้มข้นของ โพลีเมอร์ (กิโลโมล/ลูกบาศก์เมตร)

$[I] =$ ความเข้มข้นของ ตัวเริ่มต้น (กิโลโมล/ลูกบาศก์เมตร)

โดยที่ ค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยาเป็นดังนี้

พลังงานกระตุ้นและแฟคเตอร์ของการชนกัน

ความสัมพันธ์ระหว่างค่าคงที่เฉพาะของอัตรา, k และอุณหภูมิเป็นไปตามสมการของอาร์เรเนียส ดังนี้

$$k = Ae^{-E_a/RT} \quad (5.24)$$

- A = แฟกเตอร์ของการชนกัน
 E_a = พลังงานกระตุ้น
 T = อุณหภูมิเคลวิน ($^{\circ}\text{K}$)
 R = ค่าคงที่ของแก๊สสมมติ

$$k_d = Z_d \exp \left[\frac{-E_d}{RT} \right] \quad (5.25)$$

$$k_{pi} = Z_{pi} \exp \left[\frac{-E_{pi}}{RT} \right] \quad (5.26)$$

$$k_{tr} = Z_{tr} \exp \left[\frac{-E_{tr}}{RT} \right] \quad (5.27)$$

$$\frac{k_p}{k_{tr}} = \frac{Z_{id} \exp \left[\frac{-E_{id}}{RT} \right]}{RT} \quad (5.28)$$

โดยค่าพารามิเตอร์ทางจลนศาสตร์ของปฏิกิริยาโพลีไวนิล คลอไรด์ได้นำค่าจากการทดลองศึกษา กลไกของปฏิกิริยา จลนศาสตร์ และแบบจำลองของกระบวนการ ของ T.Y.Xie, A.E. Hamielec, P.E. Wood และ D.R. Woods (1991) โดยมีค่าจากผลการศึกษาดังนี้

ตารางที่ 5.1 ค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ของการเกิดปฏิกิริยาโพลีไวนิล คลอไรด์

สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
Z_d	$2.31e+15$	$m^3 \cdot Kmol^{-1} \cdot s^{-1}$	E_d	291000	$kJ \cdot kmol^{-1}$
Z_{pi}	$50e+7$	$m^3 \cdot Kmol^{-1} \cdot s^{-1}$	E_p	27602.48	$kJ \cdot kmol^{-1}$
Z_{tr}	$1.3e+12$	$m^3 \cdot Kmol^{-1} \cdot s^{-1}$	E_{tr}	4200	$kJ \cdot kmol^{-1}$
Z_{id}	$9.2e-3$	$m^3 \cdot Kmol^{-1} \cdot s^{-1}$	E_{id}	7400	$kJ \cdot kmol^{-1}$
R	8.314	$kJ \cdot kmol^{-1} \cdot ^{\circ}K^{-1}$	$-\Delta H$	1180465	$kCal \cdot kmol^{-1}$
f	0.8	-			

5.2.1 สมการดุลมวลสาร

อัตราการสะสมมวลสาร = มวลที่เข้าระบบ - มวลที่ออกจากระบบ + มวลที่เกิดขึ้น - มวลที่หายไป

$$\frac{dM_m}{RT} = -R_p \quad (5.29)$$

5.2.1.1 ไดนามิกส์ของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์

- 1.) โครงสร้างทางเคมีของผลิตภัณฑ์ จะถูกกำหนดโดยอุณหภูมิของรีแอกชันมิกเจอร์ โดยที่อุณหภูมิเข้าพอยท์ไม่เกิดปฏิกิริยาข้างเคียง
- 2.) ปฏิกิริยาเกิดการผสมเกิดขึ้นอย่างสมบูรณ์
- 3.) พอลิเมอร์ไรเซชันของไวนิลคลอไรด์ (VCM) โมโนเมอร์ในน้ำ และวัฏภาคของไอน้ำมีค่าน้อยมากจนตัดทิ้งได้

เนื่องจากกลไกของการเกิดปฏิกิริยาเป็นแบบฟรี-แรดิคัลซึ่งประกอบด้วยขั้นตอนหลักดังที่กล่าวข้างต้นประกอบกับปฏิกิริยามีปริมาณคงที่ดังนั้นเราจึงสามารถหาสมการดุลมวลสารของแต่ละตัวที่อยู่ในเครื่องปฏิกรณ์ได้ดังนี้

$$\frac{dM_m}{dt} = \frac{W_m}{MW_m} - R_p \quad (5.30)$$

$$\frac{dM_i}{dt} = \frac{W_i}{MW_i} - R_d \quad (5.31)$$

$$\frac{dM_p}{dt} = -R_p \quad (5.32)$$

M_m = จำนวนโมลของโมโนเมอร์, M_i = จำนวนโมลของตัวริเริ่ม,

M_p = จำนวนโมลของพอลิเมอร์ในเครื่องปฏิกรณ์ (kmol)

W_m = น้ำหนักของโมโนเมอร์, W_i = น้ำหนักของตัวริเริ่ม,

W_p = น้ำหนักของพอลิเมอร์ในเครื่องปฏิกรณ์ (kg)

MW_m = น้ำหนักโมเลกุลของโมโนเมอร์, MW_i = น้ำหนักโมเลกุลของตัวริเริ่ม,
 MW_p = น้ำหนักโมเลกุลของพอลิเมอร์ ($kg \cdot kmol^{-1}$)
 V = ปริมาตรของส่วนผสมของปฏิกิริยา (m^3)

$$V = \frac{W_m}{\rho_m} + \frac{W_i}{\rho_i} + \frac{W_p}{\rho_p} + \frac{W_w}{\rho_w} + \frac{W_{PVA}}{\rho_{PVA}} \quad (5.33)$$

$$Cp_r = \frac{(Cp_m W_m + Cp_i W_i + Cp_p W_p + Cp_w W_w + Cp_{PVA} W_{PVA})}{W_r} \quad (5.34)$$

$$M_r = M_m + M_i + M_p + M_w + M_{PVA} \quad (5.35)$$

เมื่อ ρ_m = ความหนาแน่นความหนาแน่นของของโมโนเมอร์, ρ_i = ความหนาแน่นของตัวริเริ่ม,
 ρ_p = ความหนาแน่นของพอลิเมอร์ในเครื่องปฏิกรณ์ ρ_w = ความหนาแน่นของน้ำ,
 ρ_{PVA} = ความหนาแน่นของโพลีไวนิลแอลกอฮอล์ ($kg \cdot m^{-3}$)
 Cp_r = ความจุความร้อนจำเพาะของส่วนผสมของปฏิกิริยา Cp_w = ความจุความร้อนจำเพาะของน้ำ
 Cp_m = ความจุความร้อนจำเพาะของโมโนเมอร์, Cp_i = ความจุความร้อนจำเพาะของตัวริเริ่ม,
 Cp_p = ความจุความร้อนจำเพาะของพอลิเมอร์ในเครื่องปฏิกรณ์
 Cp_{PVA} = ความจุความร้อนจำเพาะของโพลีไวนิลแอลกอฮอล์ ($kCal \cdot kg^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}$)

5.2.2 ความร้อนของของผสมในปฏิกิริยารอบเครื่องปฏิกรณ์ดังสมการ

$$Cp_r W_r \frac{dT_r}{dt} = Q_r + UA(T_j - T_r) \quad (5.36)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{Q_r}{W_r Cp_r} + \frac{U A (T_j - T_r)}{W_r Cp_r} \quad (5.37)$$

เมื่อ T_r = อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ ($^\circ C$)

- T_j = อุณหภูมิของแจ็กเก็ต ($^{\circ}\text{C}$)
 U = สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวม ($\text{kCal.ft}^{-2}\text{hr}^{-1}.^{\circ}\text{C}$)
 A = พื้นที่การถ่ายเทความร้อน (m^2)
 Q_r = ความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา (kCal hr^{-1})
 r = รัศมีของเครื่องปฏิกรณ์ (m)

โดยเทอมความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาสามารถหาได้จาก

$$Q_r = -\Delta H.R_p \quad (5.38)$$

5.2.3 ดุลความร้อนของของผสมรอบแจ็กเก็ตดังสมการ

$$C_{p_j} W_j \frac{dT_j}{dt} = F_j \rho_j C_{p_j} (T_{j,ip} - T_j) - U A (T_j - T_r) \quad (5.39)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{[F_j \rho_j C_{p_j} (T_{j,ip} - T_j) - U A (T_j - T_r)]}{C_{p_j} W_j} \quad (5.40)$$

- เมื่อ
- $T_{j,ip}$ = อุณหภูมิของแจ็กเก็ตที่จุดเข้าพอยท์ ($^{\circ}\text{C}$)
 T_j = อุณหภูมิของแจ็กเก็ต ($^{\circ}\text{C}$)
 F_j = อัตราการไหลเข้าของน้ำในแจ็กเก็ต ($\text{m}^3. \text{hr}^{-1}$)
 ρ_j = ความหนาแน่นของน้ำในแจ็กเก็ต (kg.m^{-3})
 C_{p_j} = ความจุความร้อนจำเพาะของน้ำในแจ็กเก็ต มีค่าคงที่ = 1.0 ($\text{kCal.kg}^{-1}.^{\circ}\text{C}^{-1}$)
 A = พื้นที่การถ่ายเทความร้อนของเครื่องปฏิกรณ์ (m^2)

ตารางที่ 5.2 ค่าสมบัติทางกายภาพของวัตถุดิบที่ใช้ในการทำปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์

รายละเอียดของคุณสมบัติทางกายภาพ	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
น้ำหนักโมเลกุลของไวนิล คลอไรด์โมโนเมอร์	MW_m	62.5	$kg. Kmol^{-1}$
น้ำหนักโมเลกุลของตัวริเริ่ม	MW_i	398	$kg. Kmol^{-1}$
น้ำหนักโมเลกุลของน้ำ	MW_w	18	$kg. Kmol^{-1}$
น้ำหนักโมเลกุลของโพลีไวนิล คลอไรด์	MW_p	160	$kg. Kmol^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของไวนิล คลอไรด์โมโนเมอร์	Cp_m	0.3709	$kCal.kg^{-1}. ^\circ C^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของน้ำ	Cp_w	1.0000	$kCal.kg^{-1}. ^\circ C^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของโพลีไวนิล คลอไรด์	Cp_p	0.2232	$kCal.kg^{-1}. ^\circ C^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะของPVA	Cp_{PVA}	0.3883	$kCal.kg^{-1}. ^\circ C^{-1}$
ค่าความจุความร้อนจำเพาะเฉลี่ยของผสมเริ่มต้น	Cp_r	0.9458	$kCal.kg^{-1}. ^\circ C^{-1}$
ค่าความหนาแน่นของไวนิล คลอไรด์โมโนเมอร์	ρ_m	830.68	$kg.m^{-3}$
ค่าความหนาแน่นของน้ำ	ρ_w	1000.00	$kg.m^{-3}$
ค่าความหนาแน่นของโพลีไวนิล คลอไรด์	ρ_p	1393.80	$kg.m^{-3}$
ค่าความหนาแน่นของสเทปีไลเซอร์ (PVA)	ρ_{PVA}	12393.00	$kg.m^{-3}$

ตารางที่ 5.3 รายละเอียดของปริมาณสารที่ใช้ในเครื่องปฏิกรณ์

รายละเอียด	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
น้ำหนักของไวนิล คลอไรด์โมโนเมอร์เริ่มต้น	W_m	52,000	Kg
น้ำหนักของตัวริเริ่มเริ่มต้น	W_i	4.68	Kg.
น้ำหนักของน้ำเริ่มต้น	W_w	60,002	Kg.
น้ำหนักของโพลีไวนิล คลอไรด์เริ่มต้น	W_p	-	Kg.
น้ำหนักของสเทปีไลเซอร์ (PVA) เริ่มต้น	W_{PVA}	48,000	Kg.
น้ำหนักของผสมรวมทั้งหมดเริ่มต้น	W_r	116,800	Kg.
จำนวนโมลของโมโนเมอร์เริ่มต้นทั้งหมด	M_{mo}	832	Kmol

ตารางที่ 5.4 ค่าพารามิเตอร์ของระบบน้ำหล่อเย็นและขนาดของเครื่องปฏิกรณ์

รายละเอียด	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
อัตราการไหลเข้าของน้ำภายในแจ็กเก็ต	F_j	284.1	$M^3 \cdot \text{min}^{-1}$
ความจุความร้อนจำเพาะของน้ำภายในแจ็กเก็ต	C_{p_j}	1.0	$KCal \cdot kg^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}$
ปริมาตรของแจ็กเก็ต	V_j	6.927	m^3
อุณหภูมิสูงสุดของน้ำภายใน แจ็กเก็ต	$T_{j \max}$	70	$^\circ C$
อุณหภูมิต่ำสุดของน้ำภายใน แจ็กเก็ต	$T_{j \min}$	30	$^\circ C$
ปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์	V	148	m^3
รัศมีของเครื่องปฏิกรณ์	r	4.8	m
ความสูงของเครื่องปฏิกรณ์	h	6.9	m
พื้นที่ถ่ายเทความร้อนของเครื่องปฏิกรณ์	A	118	m^2
อุณหภูมิเชื้อเพลิงภายในเครื่องปฏิกรณ์	T_{rp}	58	$^\circ C$
อุณหภูมิเริ่มต้น ภายในเครื่องปฏิกรณ์	$T_{r(0)}$	30	$^\circ C$

ในการจำลองครั้งนี้ ได้กำหนดให้ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวมลดลงเป็นสมการฟังก์ชันของคอนเวอร์ชันดังนี้

$$U = 1 / [1/h + 1/h_f] \quad (5.41)$$

$$U = U_o * [1 - 0.80 \exp(1 - (1 / X))] \quad (5.42)$$

เป็นที่รู้จักกันดีแล้วว่าจลศาสตร์ของปฏิกิริยาการเกิดพอลิเมอร์มีผลของการเกิดเงรระหว่างที่มีข้อจำกัดของการแผ่ขยายที่ความหนืดสูงๆ และคอนเวอร์ชันสูงๆ ทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วจึงเป็นเหตุให้ค่าคุณสมบัติทางกายภาพและไดนามิกของของผสมเปลี่ยนไปดังกล่าว

5.3 ขั้นตอนการผลิตโพลิเอไธเซนของโพลีไวนิล คลอไรด์

1. ขั้นตอนการทำให้ ไวนิลคลอไรด์ โมโนเมอร์บริสุทธิ์ โดยการกลั่นในหอกกลั่น แล้วส่งไปเก็บในถังเก็บเพื่อรอเข้ากระบวนการผลิตต่อไป
2. ขั้นตอนโพลิเอไธเซน ขั้นตอนนี้ทำโดย
 - 2.1 เติมน้ำบริสุทธิ์ที่แยกเอาแร่ธาตุต่างๆ ที่เจือปนอยู่ออกไปให้หมดก่อนนำเข้าสู่ถังทำปฏิกิริยา
 - 2.2 เติมน้ำช่วยในการกระจายตัว (โพลีไวนิล อะซีเตต) ต่อจากนั้นเติมไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ และสารริเริ่ม(Initiator) เข้าถังทำปฏิกิริยาพร้อมกันและสุดท้ายจะใส่สารตัวเติม(additive) เข้าไป
 - 2.3 แล้วควนให้เข้ากันในถังปฏิกิริยา และเพิ่มความจนอุณหภูมิถึงจุดที่ทำให้เกิดปฏิกิริยาที่ 58 องศาเซลเซียส
 - 2.4 ควบคุมอุณหภูมิไว้ให้คงที่จนกระทั่งไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์(VCM) ทำปฏิกิริยาหมดภายในเวลา 5 ชั่วโมง โดยไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ เปลี่ยนสภาพกลายเป็นเม็ดโพลีไวนิล คลอไรด์
3. ขั้นตอนการนำกลับมาใช้อีก (Recovery) เมื่อทำปฏิกิริยาสมบูรณ์แล้ว ถังปฏิกรณ์จะถูกทำให้ร้อนขึ้นอีกเพื่อไล่ ไวนิลคลอไรด์ โมโนเมอร์ ส่วนที่เหลือเพื่อนำกลับมาใช้ในกระบวนการผลิตอีก
4. ขั้นตอนการทำเม็ดโพลีไวนิล คลอไรด์ให้แห้งและการบรรจุถุงเม็ดโพลีไวนิล คลอไรด์ที่แขวนลอยในน้ำในถังที่ทำปฏิกิริยาซึ่งมีลักษณะคล้ายน้ำแป้งจะถูกถ่ายมาสู่ถังพักและถูกส่งเข้าเครื่อง Decanter เพื่อแยกเอาน้ำออกและส่งต่อเข้าเครื่องอบแห้งเพื่ออบโพลีไวนิล คลอไรด์ให้แห้ง เม็ดโพลีไวนิล คลอไรด์จะถูกเก็บไว้ในไซโลเพื่อรอการบรรจุจำหน่าย

5.4 การประยุกต์รูปแบบของสมการเจเนริกโมเดล (จีเอ็มซี) อัลกอริธึมมาใช้ในการควบคุมอุณหภูมิของการปฏิกิริยาคายความร้อนในเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์

อ้างอิงแบบจำลองของปฏิกิริยาคายความร้อนโพลีไวนิล คลอไรด์และทฤษฎีเกี่ยวกับการจำลองกระบวนการของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบตช์ตามที่กล่าวในบทที่ 2 และ 4

พิจารณาสมการดุลพลังงานรอบเครื่องปฏิกรณ์

อัตราการสะสมพลังงาน = พลังงานที่เข้า - พลังงานที่ออก + พลังงานที่เกิดขึ้น - พลังงานที่หายไป

$$C_p W_r \frac{dT_r}{dt} = Q_r + UA(T_j - T_r) \quad (5.43)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{Q_r}{W_r C_p} + \frac{U A (T_j - T_r)}{W_r C_p} \quad (5.44)$$

รูปแบบการควบคุมแบบเจเนริก โมเดลซึ่งใช้งานร่วมกับการจูนมีลักษณะดังนี้

$$Y^* = K_1(Y^* - Y) + K_2 \int_0^t (Y^* - Y) dt \quad (5.45)$$

$$dx/dt = F(x, u, t) = K_1(t)(Y^* - Y) + K_2(t) \int_0^t (Y^* - Y) dt \quad (5.46)$$

ในสมการ 5.46 เป็นอัลกอริทึมแบบต่อเนื่อง ซึ่งสามารถทำให้อยู่ในรูปดิสคริต (Discrete Form) โดยใช้วิธีเชิงตัวเลข (Numerical Method) ได้ดังนี้

$$F(x, u, t)^{(k)} = K_1(t)(Y^* - Y^{(k)}) + K_2(t) \sum_0^k (Y^* - Y^{(k)}) \Delta t \quad (5.47)$$

นำความสัมพันธ์นี้มาประยุกต์ใช้ในสมการจีเอ็มซีอัลกอริทึม สมการที่ 5.45 โดยแทนค่า x ด้วย T_r สมการในการควบคุมอุณหภูมิในรูปสมการจีเอ็มซีอัลกอริทึมดังนี้

$$\frac{dT_r}{dt} = K_1(T_r^{sp} - T_r) + K_2 \int_0^t (T_r^{sp} - T_r) dt \quad (5.48)$$

$$K_1(T_r^{sp} - T_r) + K_2 \int_0^t (T_r^{sp} - T_r) dt = \left[\frac{UA(T_j - T_r) + Q_r}{C_p W_r} \right] \quad (5.49)$$

โดยเราสามารถหาสมการความสัมพันธ์ของตัวแปรปรับ (T_j) กับตัวแปรที่ต้องการควบคุม (T_r) ในรูปของสมการจีเอ็มซีอัลกอริธึมได้ดังนี้

$$T_j^{(k)} = T_r^{(k)} - \frac{Q^{(k)}}{UA} + \frac{W_r C_{pr}}{UA} \left[K_1 (T_r^{sp} - T_r^{(k)}) + K_2 \sum_0^k (T_r^{sp} - T_r^{(k)}) \Delta t \right] \quad (5.50)$$

5.5 โดยนำมาประยุกต์ในรูปการหาคำตอบของสมการ ให้ง่ายขึ้นโดยให้อยู่ในรูปแบบดิคริตของจีเอ็มซีอัลกอริธึมสามารถเขียนได้ดังนี้

$$T_j^{(k)} = T_r^{(k)} - \frac{Q^{(k)}}{UA} + \frac{W_r C_{pr}}{UA} \left[K_1 (T_r^{sp} - T_r^{(k)}) + K_2 \sum_0^k (T_r^{sp} - T_r^{(k)}) \Delta t \right] \quad (5.51)$$

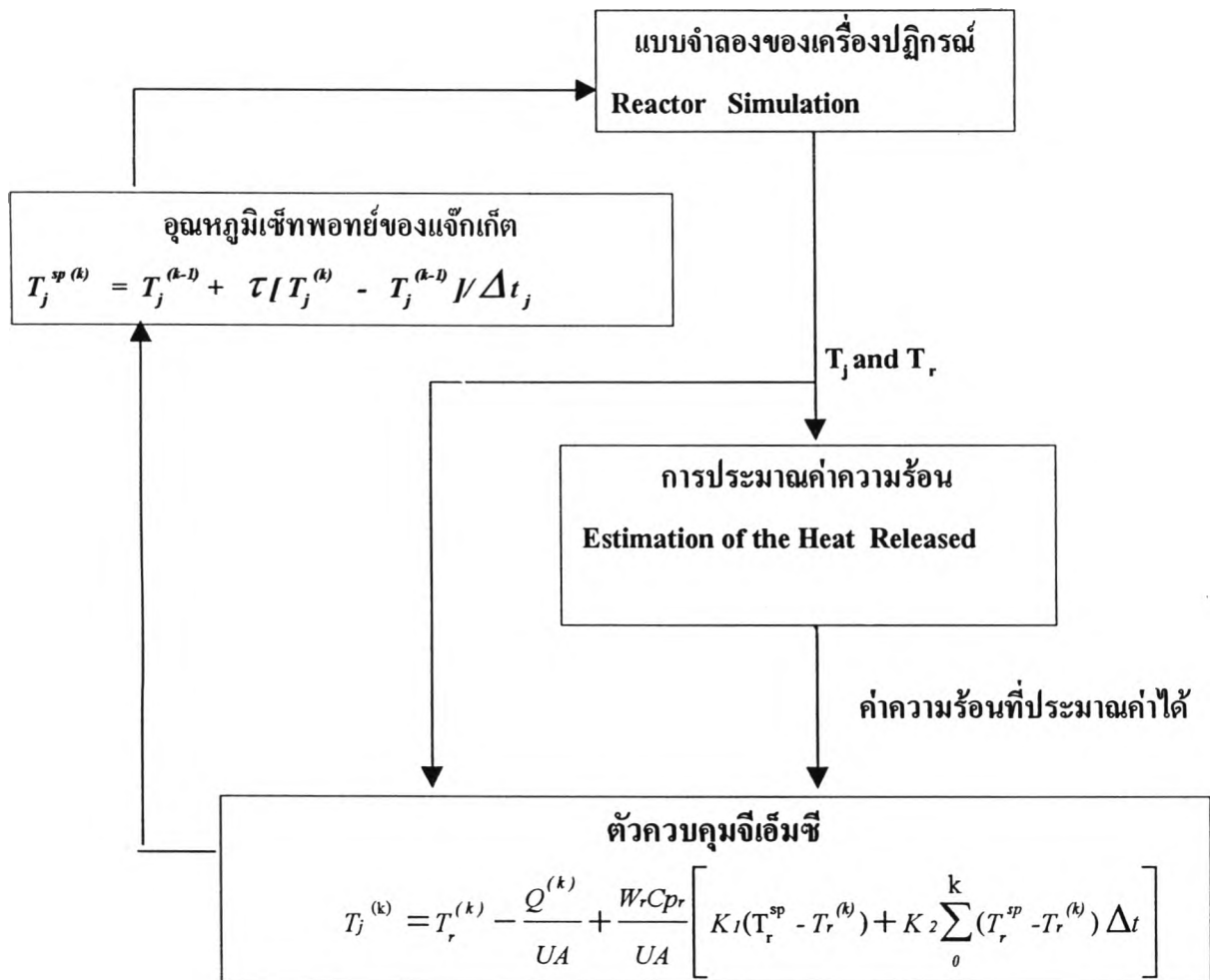
ผลลัพธ์จากสมการนี้ จะให้อุณหภูมิทั่วไปของแจ็กเก็ต ($T_j^{(k)}$) ไม่ใช่อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ของแจ็กเก็ต ($T_j^{sp(k)}$) ที่ทำให้อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์เข้าสู่อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ ($T_r^{(k)}$) ถ้าใช้ค่า $T_j^{(k)}$ ในการควบคุมโดยตรงจะส่งผลทำให้การเข้าสู่เซ็ทพอยต์ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ช้าลง หรือไม่เข้าหาจุดเซ็ทพอยต์เลย

จากสมมติฐานปี 1986 ของ Liptak อุณหภูมิเซ็ทพอยต์ของแจ็กเก็ต สามารถหาได้โดย สมมติแบบจำลองพลวัตของแจ็กเก็ตเป็นแบบจำลองอันดับหนึ่ง และกำหนดให้ τ_j เป็นค่าคงที่เวลาของแจ็กเก็ตที่ถูกประมาณขึ้น โดยให้เหตุผลว่าแจ็กเก็ตของเครื่องปฏิกรณ์มีไดนามิกส์คอมเพนเซชัน (dynamic compensation)

$$T_j^{(k)} = T_j^{(k-1)} + \Delta t [T_j^{sp(k)} - T_j^{(k-1)}] / \tau_j \quad (5.52)$$

$$T_j^{sp(k)} = T_j^{(k-1)} + \tau [T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}] / \Delta t_j \quad (5.53)$$

เมื่อเราหาค่า $T_j^{sp(k)}$ ได้ ก็สามารถมาควบคุมอุณหภูมิของภายในเครื่องปฏิกรณ์เข้าสู่เซ็ทพอยต์ได้ T_r^{sp} , $T_j^{(k)}$ ต้องทราบค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา $Q^{(k)}$ ซึ่งไม่สามารถวัดได้จึงต้องอาศัยการประมาณค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา โดยจะใช้ควบคู่ไปกับควบคู่ไปกับการควบคุมแบบจีเอ็มซี โดยจะแสดงการใช้ดังไดอะแกรมต่อไปนี้



รูปที่ 5.1 การควบคุมอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์โดยใช้การควบคุมแบบพีอีเอ็มซีควบคู่ไปกับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา

เราสามารถวัดค่า T_j และ T_r ที่ออกจากกระบวนการเพื่อนำมาใช้ในการประมาณค่าความร้อนเพื่อนำไปแทนค่าในสมการของการควบคุมแบบพีอีเอ็มซี เพื่อกำหนดค่าตัวแปรปรับ T_j และนำตัวแปรปรับที่หาได้ไปปรับตัวแปรที่ต้องการควบคุม T_r ให้เข้าสู่เซ็ทพอยท์ต่อไปโดยอาศัยการจูนตัวควบคุม

5.6 การจูนการควบคุมแบบจีเอ็มซี

การจูนของการควบคุมแบบ จีเอ็มซี คือการเลือกค่า K_1 และ K_2 ที่เหมาะในสมการการควบคุมแบบจีเอ็มซีเพื่อกำหนดผลการตอบสนองที่ต้องการ โดยอาศัยกราฟในการคำนวณดังที่กล่าวในบทที่ 3 โดยมีหลักการดังนี้

จากกระบวนการผลิตต้องการให้ช่วงเวลาที่ให้ความร้อนกับเครื่องปฏิกรณ์จนถึงจุดเซ็ทพอยท์มีค่าเท่ากับ 20 นาที ($t = 20$) จากงานวิทยานิพนธ์นี้เราเลือกผลตอบสนองการควบคุม $\xi = 10$ จากรูปที่ 3.2 ในบทที่ 3 หน้า 30 สามารถอ่านค่า $t/\tau = 0.25$ (ไร้หน่วย) ดังนั้น $\tau = 20/0.25 = 80$ นาที

ดังนั้นคำนวณค่า K_1 และ K_2 ที่เหมาะสม

$$K_1 = 2\xi / \tau = 2 \times 10 / 80 = 0.25 \text{ min}^{-1}$$

$$K_2 = 1 / \tau^2 = 1 / (80)^2 = 1.5625 \times 10^{-4} \text{ min}^{-2}$$

โดยสรุปได้ค่าพารามิเตอร์ต่างๆที่ใช้ในการจูนดังนี้

พารามิเตอร์ของการจูนตัวที่ 1	$K_1 =$	0.25 min^{-1}
พารามิเตอร์ของการจูนตัวที่ 2	$K_2 =$	$1.5625 \times 10^{-4} \text{ min}^{-2}$
ค่าคงที่การกรองสัญญาณ	$\tau_f =$	1.00 min
ค่าคงที่ไทม์ของแจ็กเก็ต	$\tau_j =$	1.98 min
เวลาในการสุ่มตัวอย่างการวัด	$\Delta t =$	2 min
สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวม	$U_r =$	$743 \text{ kcal.m}^{-2}.\text{min}^{-1}.\text{C}^{-1}$
พื้นที่การถ่ายเทความร้อน	$A_r =$	13.87 min^2

การเลือกค่าพารามิเตอร์ของการจูนที่ดี จะส่งผลให้การควบคุมมีสมรรถนะที่ดีด้วย

5.7 การประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยา

สำหรับการประมาณค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยามาใช้ควบคู่กับการควบคุมแบบจีเอ็มซีในงานวิทยานิพนธ์นี้ จะเลือกใช้วิธีประมาณค่าความร้อนแบบออนไลน์ (On-line Estimation of the Heat Released for the GMC Controller)

เนื่องจากความสำเร็จของการออกแบบการควบคุม อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ โดยใช้เทคนิคการควบคุมแบบจีเอ็มซี นั้นขึ้นอยู่กับความสามารถของการวัด การประมาณค่าความร้อนที่ปล่อยออกมาให้

ใกล้เคียงกับที่เกิดขึ้นจริงมากที่สุด เทคนิคการประมาณค่าความร้อนแบบออนไลน์ เป็นการประมาณค่าที่มีความน่าเชื่อถือ

การประมาณค่าความร้อนแบบออนไลน์ นี้ มีการพัฒนาให้สามารถหลีกเลี่ยงความว่องไวต่อการผิดพลาดจากการวัดโดยตรง และจากการประมาณค่าจากวิธีอนุพันธ์เชิงตัวเลข โดยใช้สมการความแตกต่างสามเทอม เป็นตัวกรองและวิธีการประมาณค่าอันดับสูงบนเทอมอนุพันธ์เหล่านี้ และตัวกรองเอกซ์โปเนนเชียลกับค่าคงที่ของเวลา 1 นาที โดยตัวกรองจะใช้ในการประมาณค่า Q_{re}/UA เพียงอย่างเดียว ส่วนสัญญาณการวัดค่า T_r และ T_j จะส่งตรงไปที่สมการการควบคุมแบบจีเอ็มซี โดยใช้สมการที่ใช้ในการประมาณค่าเป็นดังนี้

$$T_{rf}^{(k)} = \frac{T_{rf}^{(k-1)} + \Delta t [T_{rf}^{(k)} - T_{rf}^{(k-1)}]}{\tau_j} \quad (5.54)$$

$$T_{jf}^{(k)} = \frac{T_{jf}^{(k-1)} + \Delta t [T_{im}^{(k)} - T_{jf}^{(k-1)}]}{\tau_j} \quad (5.55)$$

$$\frac{\Delta T_{rf}^{(k)}}{\Delta t_{rf}} = \frac{3T_{rf}^{(k)} + 4T_{rf}^{(k-1)} + T_{rf}^{(k-2)}}{2\Delta t} \quad (5.56)$$

พิจารณาสมการดุลพลังงานรอบเครื่องปฏิกรณ์

$$C_{pr}W_r \frac{dT_r}{dt} = Q_{re} + UA(T_j - T_r) \quad (5.57)$$

$$Q_{re} = C_{pr}W_r \frac{dT_{rm}}{dt} - UA(T_{jm} - T_{rm}) \quad (5.58)$$

การประมาณค่าความร้อนแบบออนไลน์ นี้ สามารถประยุกต์ใช้กับการควบคุมแบบจีเอ็มซีได้โดยทำให้อยู่ในรูปดิสคริต โดยใช้สมการ สมการอนุพันธ์เป็นตัวกรองและวิธีการประมาณค่าอันดับสูงบนเทอมอนุพันธ์โดยใช้สมการเหล่านี้

$$Q_{re}^{(k)} = C_{pr} \frac{W_r \Delta T_r^{(k)}}{\Delta t_{rf}} - UA(T_{jf}^{(k)} - T_{rf}^{(k)}) \quad (5.59)$$

$$Q_{re}^{(k)} = \frac{Cp_r W_r [3T_{rf}^{(k)} + 4T_{rf}^{(k-1)} + T_{rf}^{(k-2)}]}{2\Delta t} - UA(T_{jf}^{(k)} - T_{rf}^{(k)}) \quad (5.60)$$

ประยุกต์ผ่านตัวกรองเอกซ์โปเนนเชียลกับค่าคงที่ของเวลา 1 นาที โดยใช้ตัวสคริป f ซึ่งให้เห็นถึงค่าที่ ถูกกรองของ T_{rm} , T_{jm} และ Q_{re}

$$Q_{ref}^{(k)} = \frac{Q_{ref}^{(k-1)} + \Delta t [Q_{ref}^{(k)} - Q_{ref}^{(k-1)}]}{\tau_f} \quad (5.61)$$

การประมาณค่าความร้อนแบบออนไลน์เป็นการประมาณค่าที่ดีและง่ายต่อความเข้าใจพร้อมกับการพัฒนาทอมอนูพันธ์เชิงตัวเลขเพื่อหลีกเลี่ยงปัญหาเรื่องความว่องไวต่อการผิดพลาดจากการวัดโดยตรงได้ด้วย

5.8 การทดสอบความทนทาน และสมรรถนะของตัวควบคุม

ในรายงานวิทยานิพนธ์นี้ จะทำการทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุมแบบจีเอ็มซี ควบคู่ไปกับการประมาณค่าความร้อนนี้ด้วยการ ทดสอบสมรรถนะการควบคุมในสภาวะที่พารามิเตอร์ ของเครื่องปฏิกรณ์มีความ ไม่แน่นอนเกิดขึ้นดังนี้

1. การเปลี่ยนแปลงของน้ำหนักตัวถุดิบเพิ่มขึ้น 30% โดยการทดสอบนี้จะทำให้เห็นสภาวะการควบคุม ในกรณีที่มีการผิดพลาดมาจากการทำงานหรือความผิดปกติของเครื่องมือ
2. การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25% โดยจะช่วยให้เราคาดการณ์ถึงการ เกิดการรวมตัวและมีผลทำให้พื้นที่ผิวการถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลง
3. การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยามากขึ้น 60% เนื่องจากความว่องไวของการควบคุมต่อการ เปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีมีความสำคัญมากต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์
4. การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนและ การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยา เนื่องจากการเปลี่ยนแปลงนี้ จะผลักดันให้ระบบเข้าสู่สภาวะไม่คงตัวเป็นอย่างมากจึงต้องทดสอบ ที่ สภาวะนี้เพื่อยืนยันสมรรถนะความทนทานของการควบคุม

โดยในวิทยานิพนธ์นี้จะทำการเปรียบเทียบผลกับการควบคุมแบบพีไอดีที่อยู่ในรูปแบบเวโลซิตีโดยมี สมการดังนี้

$$T_{j,p}^{(k+1)} = T_j^{(k+1)} + K_C (T_r^{(k)} - T_r^{(k+1)}) - \frac{K_C}{\tau_I} (T_{mp} - T_r^{(k+1)}) \Delta t + - \frac{K_C \tau_D}{\Delta t} (2T_r^{(k)} - T_r^{(k+1)} - T_r^{(k-1)}) \quad (5.62)$$

โดยที่ τ_I = เวลาอินทีกรัล (min)

τ_D = เวลาอนุพันธ์ (min)

K_C = ค่าคงที่เกน ($^{\circ}\text{C}/^{\circ}\text{C}$)

เมื่อ K_C , τ_I และ τ_D เป็นพารามิเตอร์ที่ได้จากการจูน ซึ่งวิธีการจูนตัวควบคุมป้อนกลับแบบพีไอดี ในงานวิทยานิพนธ์ ใช้วิธีลองใส่ค่าเริ่มต้นเข้าไปในโปรแกรมแมทแลบที่ใช้ตัวควบคุมแบบพีไอดี จากนั้นดูค่าผลรวมของความผิดพลาดที่เกิดขึ้นและรวมถึงการพิจารณาลักษณะของการเข้าสู่เซตพอยท์ที่เกิดขึ้นที่สถานะการดำเนินการปกติไม่มีความผิดพลาดจากพารามิเตอร์ และค่าที่ได้จากการจูนดูได้ดังตารางที่ 5.6

ตารางที่ 5.5 ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการจูนตัวควบคุมพีไอดี

อธิบาย	สัญลักษณ์	ค่า	หน่วย
เวลาอินทีกรัล	τ_I	6.5	min
เวลาอนุพันธ์	τ_D	0.30	min
ค่าคงที่เกน	K_C	4.7	$^{\circ}\text{C}/^{\circ}\text{C}$

หมายเหตุ การเลือกค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการจูนนี้ใช้วิธีลองผิดลองถูกโดยสามารถดูรายละเอียดตามภาคผนวก ก

จากนั้นนำทฤษฎีและค่าพารามิเตอร์ต่างๆมาจำลองการควบคุมแบบเจนเนริกโมเดล(จีเอ็มซี)ลงในโปรแกรม MATLAB โดยได้ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีและแบบพีไอดีในการควบคุมแบบจำลอง การเกิดโพลีไวเนล คลอไรด์ โดยจะทำการสรุปและเปรียบเทียบผลของการควบคุมในบทต่อไป

บทที่ 6

ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง

6.1 การวิเคราะห์ความน่าเชื่อถือของแบบจำลองของปฏิกริยา

จากข้อมูลเบื้องต้นของผลงานการวิจัยการออกแบบจำลองทางพลศาสตร์ของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ของการเกิดปฏิกริยาโพลีเมอไรเซชันแบบแขวนลอยของโพลีไวนิล คลอไรด์ในเชิงอุตสาหกรรม (Dynamic Simulation of industrial Polyvinyl Chloride Batch Suspension Polymerization Reactors)

ผลงานวิจัยของ C. Kiparissides, * G. Daskalakis, D.S. Achilias, and E. Sidiropoulou

เราสามารถวิเคราะห์ได้ว่าแบบจำลองที่เราใช้ในการเขียนโปรแกรมมีแนวโน้มที่ถูกต้องตามทฤษฎีและมีความน่าเชื่อถือพอที่จะนำไปวิเคราะห์ในเชิง อุตสาหกรรมหรือไม่ โดยในวิทยานิพนธ์นี้ได้แบ่งขั้นตอนการวิเคราะห์เป็น 3 ขั้นตอนได้ดังนี้

1. ศึกษาผลของการควบคุมในกรณีที่สภาวะการดำเนินการเป็นไปตามผลงานวิจัยของ C. Kiparissides, * G. Daskalakis, D.S. Achilias, and E. Sidiropoulou
2. ศึกษาผลของการควบคุม ในกรณีที่สภาวะการดำเนินการปกติของระบบในโรงงานอุตสาหกรรมที่ศึกษา
3. ศึกษาผลของการควบคุม ในกรณีที่สภาวะการดำเนินการไม่ปกติของระบบในโรงงานอุตสาหกรรมที่ศึกษาคือมีความผิดพลาดของพารามิเตอร์ที่น่าจะเกิดขึ้นจริงในระบบหรือแบบจำลองมีความผิดพลาด

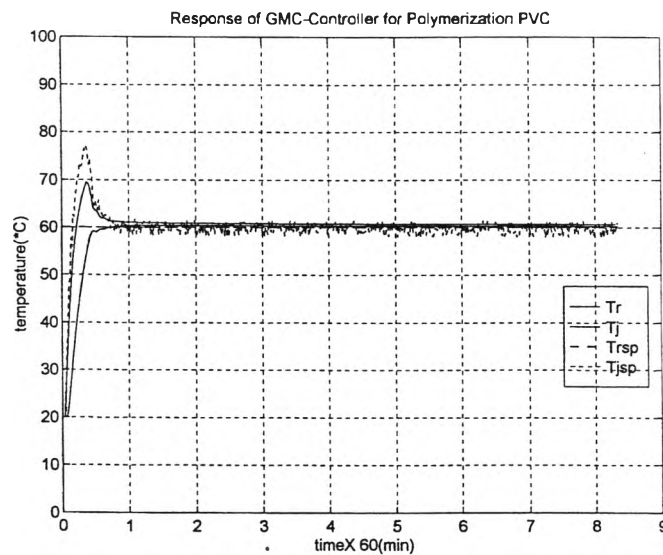
6.1.1 ผลการควบคุมของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ กรณีที่สภาวะการดำเนินการเป็นไปตามผลงานวิจัยของ C. Kiparissides และคณะ(1997)

กรณีนี้ศึกษาโดยใช้ค่าพารามิเตอร์ต่างๆ คุณสมบัติทางกายภาพและปริมาณสารตั้งต้นเท่ากับข้อมูลที่แสดงในวารสารได้ผลการตอบสนองของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีดังรูปที่ 7.1

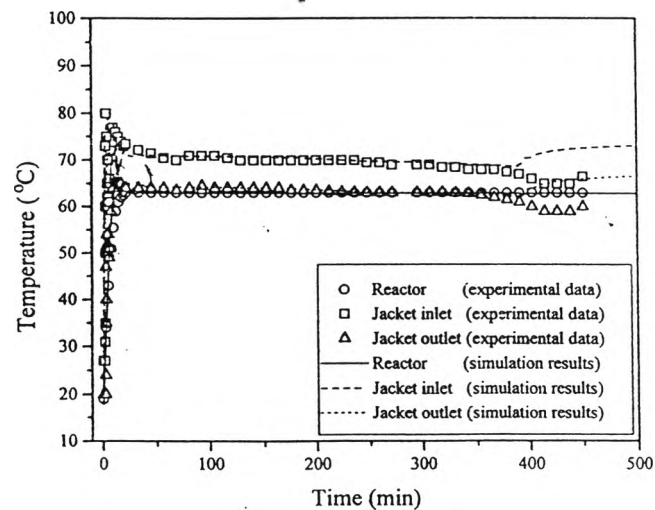
ในงานวิทยานิพนธ์นี้เราสามารถตรวจสอบประสิทธิภาพของการควบคุมได้อีกทางโดยนอกจากการดูโปรไฟล์ของการควบคุมแล้ว เราสามารถวัดค่า อินทิกรัลของกำลังสองของค่าความผิดพลาด (Integral of the Square of the Error (ISE)) หรือค่าไอเอสอี โดย

$$ISE = \int_0^{\infty} e^2(t) dt \quad (6.1)$$

โดยค่าไอเอสอีนี้สามารถแสดงถึงประสิทธิภาพและสมรรถนะของการควบคุมได้
 โดยจากรูปที่ 6.1 ให้ค่าไอเอสอีของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซี ISE-GMC = 78.3016



รูปที่ 6.1 ผลการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์โดยใช้ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีในสภาวะของการดำเนินการเดียวกับระบบของการทดลองในงานวิจัย



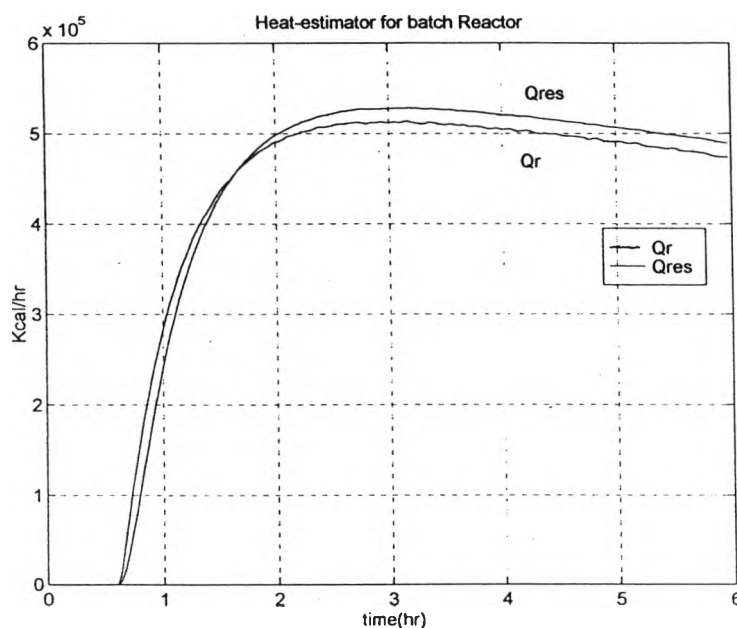
รูปที่ 6.2 ผลการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ของงานวิจัยของ C. Kiparissides * G.

Daskalakis, D.S. Achilias, and E. Sidiropoulou

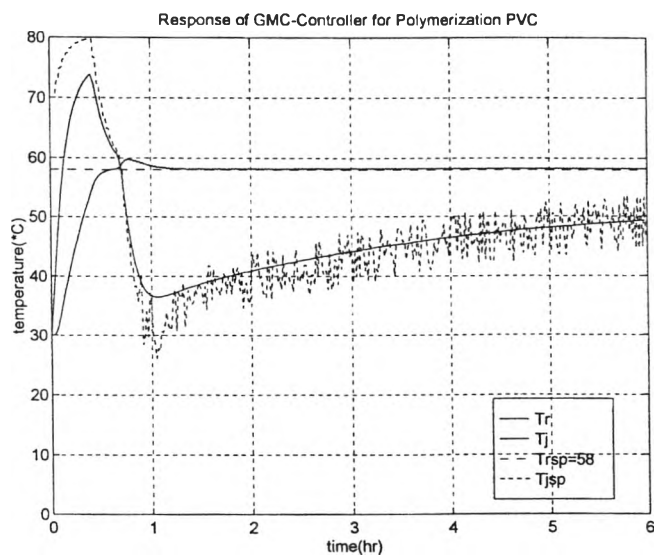
จากรูปที่ 6.1 แสดงผลการควบคุมแบบจี้เอ็มซีโดยใช้สภาวะการดำเนินการทุกอย่างรวมถึงพารามิเตอร์ตัวแปรปรับ เหมือนกับในงานวิจัยตามผลงานวิจัยของ C. Kiparissides และคณะ(1997) โดยรูปที่ 6.1 และ 6.2 ให้โปรไฟล์ของอุณหภูมิเหมือนกันคือไม่มีการโอเวอร์ชูตขณะเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์และปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นไม่รุนแรงมากคือส่งผลให้น้ำในแจ็กเก็ตมีอุณหภูมิอยู่ที่ประมาณ 65 องศาเซลเซียสซึ่งแสดงว่าปฏิกิริยาคายความร้อนไม่รุนแรงมาก ไม่ต้องใช้น้ำหล่อเย็นที่อุณหภูมิต่ำมาก ซึ่งแสดงได้ว่าแบบจำลองที่ออกแบบในวิทยานิพนธ์ชิ้นนี้มีความน่าเชื่อถือเพราะมีโปรไฟล์และให้การควบคุมเหมือนกับผลการทดลองที่วัดได้จากงานวิจัยของ C. Kiparissides และคณะ(1997) สรุปได้ว่าแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์มีความน่าเชื่อถือและสามารถนำไปใช้เป็นหลักในการวิเคราะห์กรณีต่อไป

6.2 การศึกษาการควบคุมแบบจี้เอ็มซีกรณีสภาวะการดำเนินการทุกอย่างเป็นปกติ

ทำการทดลองนำแบบจำลองที่ได้จากข้อ 6.1 มาใช้ในเครื่องปฏิกรณ์และพารามิเตอร์ต่างๆ เท่าของโรงงานที่ศึกษาโดยทำการแสดงผลความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์และน้ำแจ็กเก็ตเทียบกับเวลาโดยใช้ตัวควบคุมแบบจี้เอ็มซีและแบบพีไอดีโดยใช้แบบจำลองเดียวกันและใช้ค่าสารตั้งต้นและพารามิเตอร์ต่างๆ ที่ได้จากข้อมูลในโรงงานเป็นค่าเดียวกันโดยได้ผลการตอบสนองของตัวควบคุมจี้เอ็มซีดังรูปที่ 6.4 และผลการตอบสนองของตัวควบคุมพีไอดีดังที่ 6.5 โดยการควบคุมแบบจี้เอ็มซีมีการนำการประมาณค่าความร้อนเข้ามาใช้ควบคู่กับการควบคุมด้วยดังรูปที่ 6.3

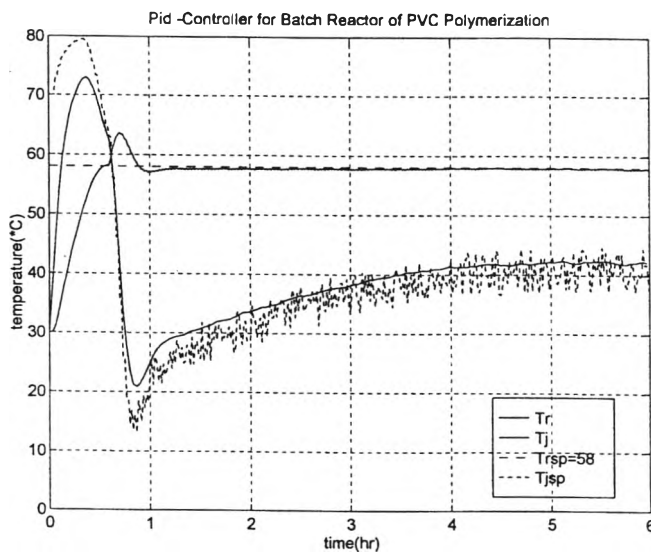


รูปที่ 6.3 ค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจริง (Q_r) เปรียบเทียบกับความร้อนที่ได้จากการประมาณค่าแบบออนไลน์ (Q_{res}) ในสภาวะปกติ



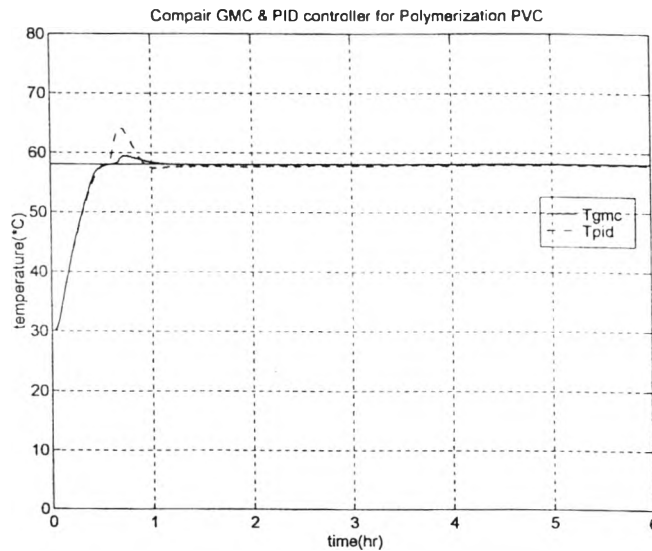
รูปที่ 6.4 ผลการควบคุมที่สภาวะการดำเนินของโรงงานปกติ โดยใช้ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีโดยได้ค่า

$$ISE_{GMC} = 98.8875$$



รูปที่ 6.5 ผลการควบคุมที่สภาวะการดำเนินของโรงงานปกติ โดยใช้ตัวควบคุมแบบพีไอดีโดยได้ค่า

$$ISE_{PID} = 100.3759$$



รูปที่ 6.6 การเปรียบเทียบผลตอบสนองของการควบคุมแบบจีเอ็มซี กับการควบคุมแบบพีไอดีใน

สภาวะการดำเนินการปกติ

โดยได้ค่าความผิดพลาดของจีเอ็มซี $ISE_GMC = 98.8875$

ค่าความผิดพลาดของพีไอดี $ISE_PID = 100.3759$

6.2.1 วิเคราะห์ผลการทดลองศึกษาการควบคุมแบบจีเอ็มซีเปรียบเทียบกับแบบพีไอดีกรณีทีสภาวะการดำเนินการทุกอย่างเป็นปกติ

จากผลการเปรียบเทียบผลตอบสนองของการควบคุมแบบจีเอ็มซี กับการควบคุมแบบพีไอดีในการควบคุมอุณหภูมิของปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ ในเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ที่สภาวะการดำเนินการเป็นปกตินี้ จากค่าไอเอสไอที่คำนวณได้พบว่า การควบคุมแบบจีเอ็มซี ให้ผลค่าไอเอสไอที่น้อยกว่าแบบพีไอดีนั้น แสดงว่าการควบคุมแบบจีเอ็มซี ให้ผลการตอบสนองที่ใกล้เคียงจุดเซ็ทพอยท์มากกว่าแบบพีไอดี โดยสามารถสังเกตจากผลการตอบสนองในรูปที่ 6.6 พบว่าการควบคุมแบบจีเอ็มซี จะควบคุมให้อุณหภูมิของปฏิกิริยาเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์อย่างค่อนข้างราบเรียบ โดยมีการโอเวอร์ชูตเกิดขึ้นเพียงเล็กน้อยในช่วงแรก แต่สำหรับการควบคุมแบบพีไอดีให้ผลการควบคุมโดยมีการโอเวอร์ชูตเกิดขึ้นมากจนเลย 60 องศาเซลเซียส ได้ส่งผลทำให้น้ำหล่อเย็นต้องถูกนำมาใช้มากโดยสังเกตได้จากอุณหภูมิของแจ็กเก็ตในการควบคุมแบบพีไอดีจะมีค่าที่จุดเริ่มเข้าสู่ปฏิกิริยาอยู่ที่ประมาณ 22 องศาเซลเซียส แต่สำหรับจีเอ็มซีจะมีค่าอยู่แค่

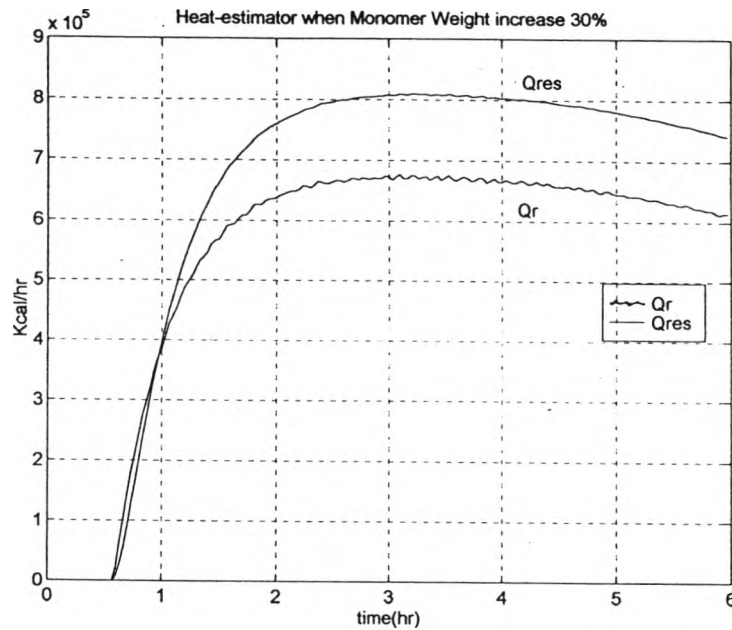
เพียง 35 องศาเซลเซียส นั้นแสดงให้เห็นว่าการควบคุมแบบจีเอ็มซีสามารถควบคุมอุณหภูมิของปฏิกิริยาการเกิดโพลิไวนิล คลอไรด์ที่สภาวะปกติได้โดยไม่ต้องสิ้นเปลืองพลังงานในการผลิตน้ำหล่อเย็นเท่ากับตัวควบคุมแบบพีไอดี

สำหรับการประมาณค่าความร้อนโดยวิธีออนไลน์เมื่อเปรียบเทียบผลกับค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจริงแล้วเห็นว่าค่าความร้อนที่ประมาณได้ใกล้เคียงกับค่าจริงมาก ส่งผลให้การควบคุมอุณหภูมิของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซี มีประสิทธิภาพที่ดีและให้ผลตอบสนองการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์แบบแบทช์ให้เข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ได้ดีกว่าแบบพีไอดีด้วย

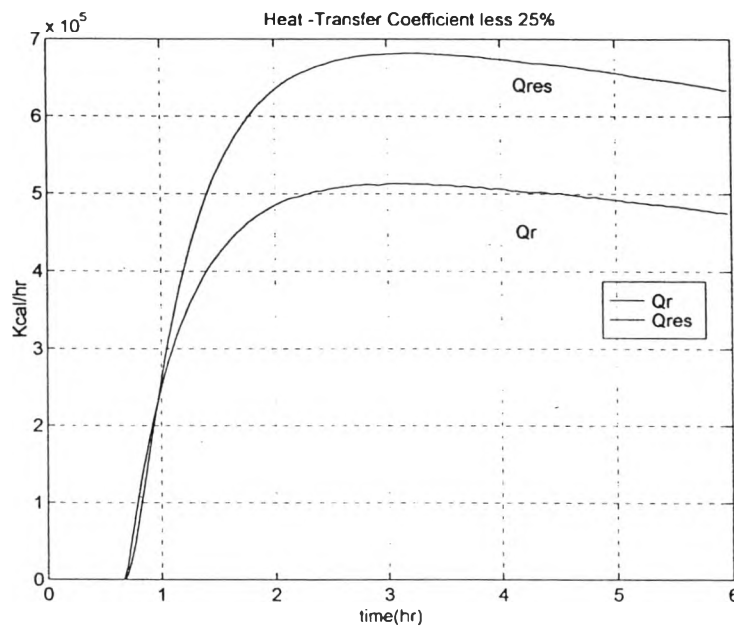
6.3 การศึกษาสมรรถนะการควบคุมแบบจีเอ็มซีกรณีที่สภาวะการดำเนินงานผิดปกติ โดยการศึกษาลักษณะการตอบสนองของการควบคุมโดยมีการเปลี่ยนแปลงของพารามิเตอร์ดังนี้

1. การเปลี่ยนแปลงของน้ำหนักวัตถุดิบเพิ่มขึ้น 30% โดยการทดสอบนี้จะทำให้เห็นสภาวะการควบคุมในกรณีที่มีการผิดพลาดมาจากการทำงานหรือความผิดปกติของเครื่องมือ
2. การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25% โดยจะช่วยให้เราคาดการณ์ถึงเกิดการรวมตัวและมีผลทำให้พื้นที่ผิวการถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลง
3. การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยามากขึ้น 60% เนื่องจากความว่องไวของการควบคุมต่อการเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีมีความสำคัญมากต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์
4. การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนและ การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยา เนื่องจากการเปลี่ยนแปลงนี้ จะผลักดันให้ระบบเข้าสู่สภาวะไม่คงตัวเป็นอย่างมากจึงต้องทดสอบ ที่สภาวะนี้เพื่อยืนยันสมรรถนะความทนทานของการควบคุม

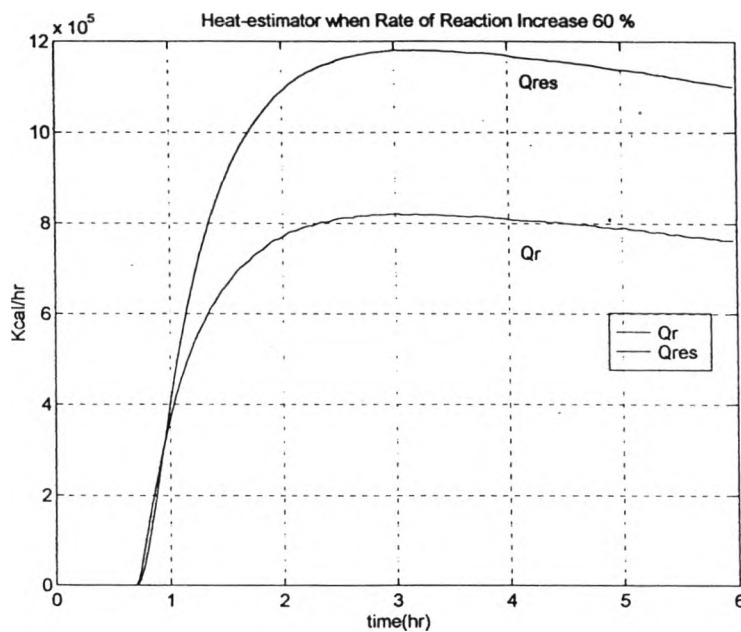
ผลการประมาณค่าความร้อนโดยวิธีออนไลน์เมื่อเปรียบเทียบผลกับค่าความร้อนที่เกิดขึ้นจริงเมื่อเกิดสภาวะการดำเนินผิดปกติคือพารามิเตอร์มีความผิดพลาดตามข้อ 1 ถึง 4 ให้ผลแสดงสมรรถนะของการประมาณค่าความร้อนดังรูปที่ 6.7 ถึง 6.10



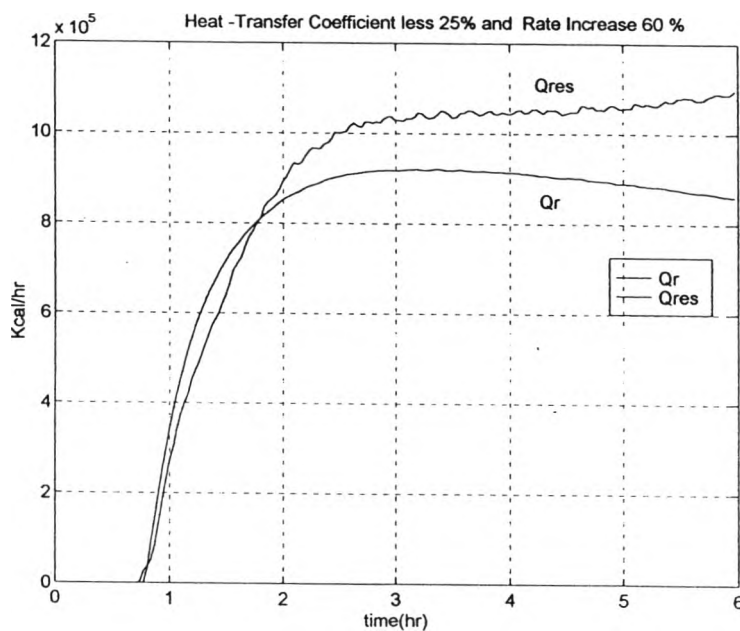
รูปที่ 6.7 ค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาจริง(Q_r)เปรียบเทียบกับความร้อนที่ได้จากการประมาณค่าแบบออนไลน์(Q_{res})ในสถานะที่มีการเปลี่ยนแปลงของน้ำหนักวัตถุดิบเพิ่มขึ้น 30%



รูปที่ 6.8 ค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาจริง(Q_r)เปรียบเทียบกับความร้อนที่ได้จากการประมาณค่าแบบออนไลน์(Q_{res})ในสถานะที่มีการเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25%

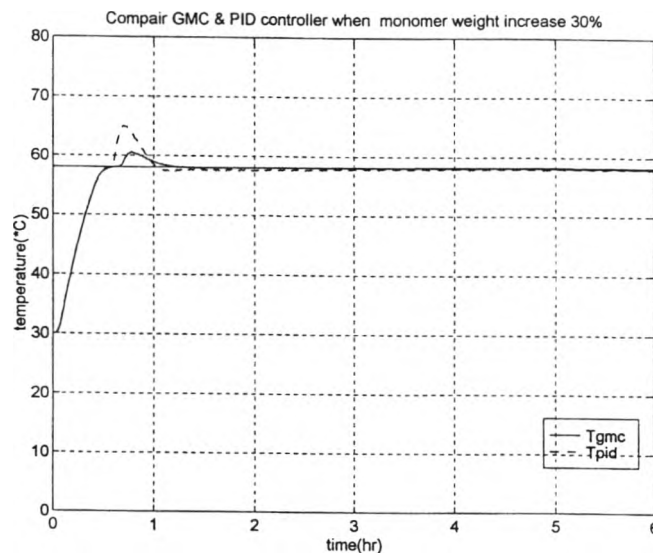


รูปที่ 6.9 ค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาจริง(Q_r)เปรียบเทียบกับความร้อนที่ได้จากการประมาณค่าแบบออนไลน์(Q_{res})ในสถานะที่การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยามากขึ้น 60% มี



รูปที่ 6.10 ค่าความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาจริง(Q_r)เปรียบเทียบกับความร้อนที่ได้จากการประมาณค่าแบบออนไลน์(Q_{res})ในสถานะที่มีการเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25% และอัตราการเกิดปฏิกิริยาไวขึ้น 60%

แบบที่ 1 ทำการทดสอบการควบคุมทั้งสองแบบโดยมีการเปลี่ยนแปลงน้ำหนักสารตั้งต้นจากปกติ 52,000 กิโลกรัม ไปเป็น 67,600 กิโลกรัม โดยให้ผลเปรียบเทียบการควบคุมของจีเอ็มซีและพีไอดีดังกราฟรูปที่ 6.11

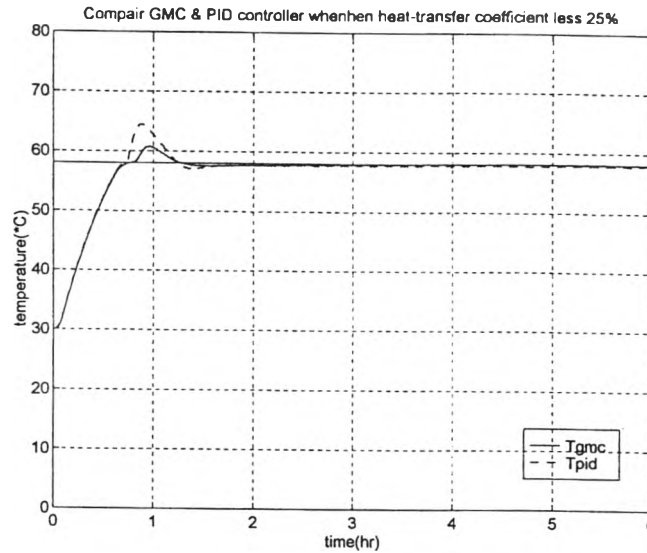


รูปที่ 6.11 เปรียบเทียบผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีกับแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงโดยเพิ่มน้ำหนักของสารตั้งต้น 30%

โดยได้ค่าความผิดพลาดของจีเอ็มซี $ISE_GMC = 99.1638$

ค่าความผิดพลาดของพีไอดี $ISE_PID = 104.4358$

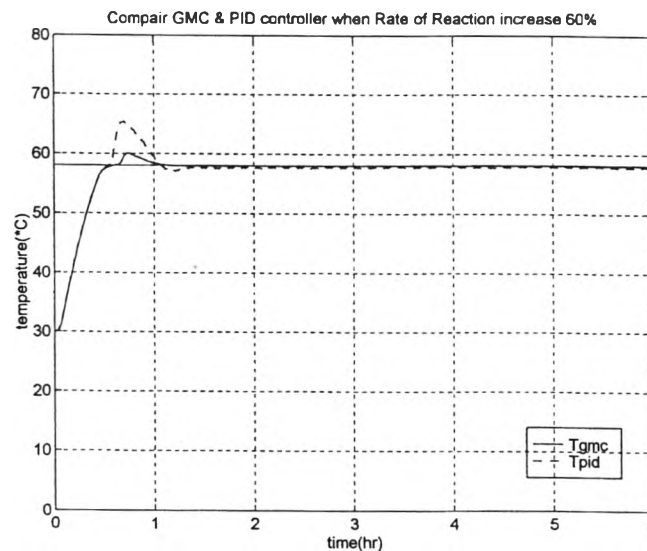
แบบที่ 2 ทำการทดสอบการควบคุมทั้งสองแบบในกรณีที่ว่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลง โดยกำหนดให้มีค่าลดลงจากปกติ 25% ซึ่งแสดงผลดังกราฟรูปที่ 6.12



รูปที่ 6.12 เปรียบเทียบผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีกับแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนโดยกำหนดให้มีค่าลดลงจากปกติ 25%

ค่าความผิดพลาดของจีเอ็มซี $ISE_GMC = 124.8912$ ค่าความผิดพลาดของพีไอดี $ISE_PID = 145.2097$

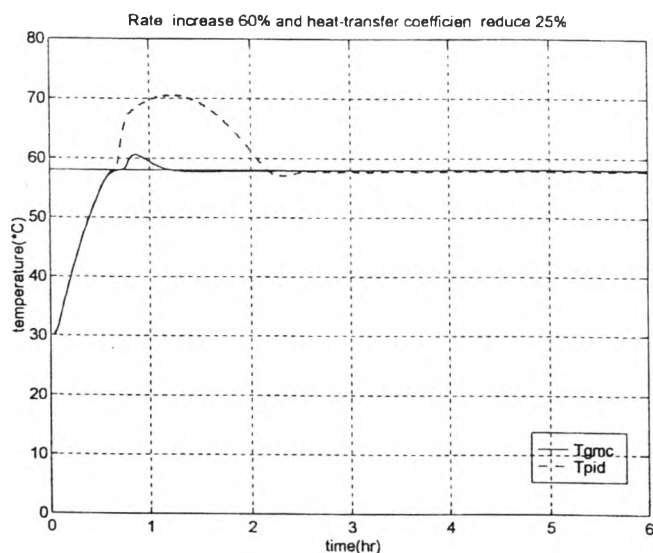
แบบที่ 3 ทำการทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุมที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลง โดยกำหนดให้มีความว่องไวขึ้นจากปกติ ถึง 60 %



รูปที่ 6.13 เปรียบเทียบผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีกับแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลงมีความว่องไวขึ้นจากปกติ ถึง 60 %

ค่าความผิดพลาดของจีเอ็มซี $ISE_GMC = 98.8569$ ค่าความผิดพลาดของพีไอดี $ISE_PID = 106.3834$

แบบที่ 4 การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน 25% และ การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาของไวขึ้น 60%



รูปที่ 6.14 เปรียบเทียบผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีกับแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลงมีความไวขึ้นจากปกติ ถึง 60 % และมีการเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน ลดลง 25%

โดยได้ค่าความผิดพลาดของจีเอ็มซี $ISE_{GMC} = 124.9374$

ค่าความผิดพลาดของพีไอดี $ISE_{PID} = 256.9370$

6.3.1 วิเคราะห์ผลการควบคุมกรณีที่มีค่าพารามิเตอร์ผิดพลาด

สำหรับสมรรถนะการประมาณค่าโดยวิธีออนไลน์ในกรณีที่มีความผิดพลาดของพารามิเตอร์ทั้ง 4 กรณีให้ผลดังรูปที่ 6.6 ถึง 6.9 ค่าความร้อนที่ได้จากการประมาณค่ามีความผิดพลาดเกิดขึ้นทั้ง 4 กรณีโดยค่าที่ได้จากการประมาณมีค่ามากกว่าความร้อนที่เกิดขึ้นจริงทั้งหมดและมีผลต่างกันมากอย่างเห็นได้ชัดเจน ซึ่งเป็นผลทำให้ตัวควบคุมจีเอ็มซีซึ่งไม่สามารถกำจัดการโอเวอร์ชูตก่อนเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ได้หมด แต่อย่างไรก็ตามผลการควบคุมแบบจีเอ็มซีก็ยังสามารถควบคุมอุณหภูมิไม่ให้เกิดการโอเวอร์ชูตจนเกินขอบเขตของช่วงการควบคุมที่ยอมรับได้

โดยได้ผลการตอบสนองของการควบคุมเมื่อมีความผิดพลาดของพารามิเตอร์ต่างๆได้ผลการวิเคราะห์ดังนี้

ความผิดพลาดที่เกิดขึ้น	ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซี ISE_GMC	ตัวควบคุมแบบพีไอดี ISE_PID
1. นำหนักสารตั้งต้นเพิ่มขึ้น 30%	99.1638	104.4358
2. สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25%	124.8912	145.2097
3. อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%	98.8569	106.3834
4. สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25% และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%	124.9374	256.9370

จากผลค่าไอเอสไอข้างต้นวิเคราะห์ได้ว่าการควบคุมแบบจีเอ็มซีให้ผลการควบคุมที่ดีกว่าแบบพีไอดีเมื่อเปรียบเทียบ ค่าไอเอสไอของผลการจำลองทุกกรณีให้ผลการจำลองมีแนวโน้มเดียวกัน คือแบบจีเอ็มซีให้ค่าไอเอสไอน้อยกว่าแบบจีเอ็มซี แสดงให้เห็นว่าการควบคุมแบบจีเอ็มซีมีความเบี่ยงเบนจากจุดเซ็ทพอยท์น้อยกว่า ส่งผลให้การตอบสนองเป็นไปดังรูปที่ 6.11 ถึง 6.14 ซึ่งการควบคุมแบบจีเอ็มซียังสามารถควบคุมอุณหภูมิในช่วงแรกของการเกิดปฏิกิริยาคายความร้อนให้มีการโอเวอร์ชูตที่ยังอยู่ในค่าที่ยอมรับได้ทุกกรณีที่มีการจำลองเพิ่มความผิดพลาดของพารามิเตอร์เข้าไป

แต่สำหรับการควบคุมแบบพีไอดีจะให้ผลการควบคุมที่เบี่ยงเบนจากจุดเซ็ทพอยท์มากจนทำให้ไม่สามารถควบคุมการเกิดการโอเวอร์ชูตขณะเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ โดยเฉพาะกรณีที่ สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนลดลง 25%ประกอบกับอัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น 60%จะส่งผลทำให้การควบคุมแบบพีไอดีเกิดโอเวอร์ชูตอย่างชัดเจนคืออุณหภูมิสูงขึ้นไปถึง 70 องศาเซลเซียสซึ่งส่งผลทำให้ระบบนำหล่อเย็นต้องทำงานอย่างหนักมากจนในกรณีของพีไอดีเกิดการโอเวอร์ชูตรุนแรงมากจนเสียรูปการควบคุมไป จึง

วิเคราะห์ได้ว่าการควบคุมแบบจีเอ็มซีมีสมรรถนะความทนทานที่ดีกว่าการควบคุมแบบพีไอดี เหมาะที่จะใช้งานกับโรงงานมีปฏิกิริยาเป็นแบบคายความร้อนและมีโอกาสเสี่ยงต่อความผิดพลาดหรือเบี่ยงเบนของพารามิเตอร์สูงเช่นในโรงงานที่มีสภาพดังนี้

1. การผิดพลาดมาจากการทำงานของคนซึ่งนำหน้าทาสหรือความผิดปกติของเครื่องมือวัด
2. การเกิดการรวมตัวและมีผลทำให้พื้นที่ผิวการถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลงเช่นเมื่อความหนืดภายในเครื่องปฏิกรณ์สูงขึ้น
3. ความว่องไวของการควบคุมต่อการเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีเพิ่มขึ้นอันเนื่องมาจากผลของตัวริเริ่มหรือสารคะตะลิสต์ ซึ่งมีความสำคัญมากต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์

6.4 การวิเคราะห์ควบคุมแบบจีเอ็มซีเทียบกับผลตอบสนองของการควบคุมแบบพีไอดีที่บันทึกจากระบบจริง

ผลของโปรไฟล์ของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์จากโรงงานจริงตามภาคผนวก ก ซึ่งมีการควบคุมโดยตัวควบคุมแบบพีไอดี จะเห็นได้ว่าการเกิดโอเวอร์ชูดขณะเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ และอุณหภูมิตลอดช่วงของการทำปฏิกิริยามีการแกว่งอยู่บ้าง ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับ การควบคุมแบบจีเอ็มซีแล้ว จีเอ็มซีจะให้การควบคุมที่จุดเซ็ทพอยต์ตลอดการเกิดปฏิกิริยา

แต่โปรไฟล์ของอุณหภูมิแฉกเกิดยังให้ผลที่แตกต่างกันคืออุณหภูมิแฉกเกิดในระดับโรงงานจริงมีค่าคงที่เกือบตลอดเวลาแต่สำหรับผลการจำลอง อุณหภูมิของแฉกเกิดจะมีค่าต่ำในช่วงแรกที่เกิดปฏิกิริยารุนแรงนั่นคือมีการเพิ่มน้ำหล่อเย็นในช่วงแรกและค่อยๆลดลงเรื่อยๆเมื่อปฏิกิริยาดำเนินต่อไป

บทที่ 7

สรุปผลและข้อเสนอแนะ

7.1 สรุปผลการตอบสนองการควบคุมของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีเปรียบเทียบกับแบบพีไอดี

ผลการนำการควบคุมแบบจีเอ็มซีมาประยุกต์ใช้กับเครื่องปฏิกรณ์แบบเบตซ์ของปฏิกิริยาคายความร้อนให้การควบคุมอุณหภูมิที่ดีเมื่อเปรียบเทียบกับการควบคุมแบบ พีไอดี (PID) โดยการควบคุมแบบจีเอ็มซีจะสามารถควบคุมให้อุณหภูมิของปฏิกิริยาเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ได้อย่างราบเรียบจนเกือบจะไม่มีการโอเวอร์ชูตของอุณหภูมิ แต่การควบคุมแบบพีไอดีจะส่งผลให้โปรไฟล์ของอุณหภูมิมีการ โอเวอร์ชูตอยู่บ้าง ในกรณีที่แบบจำลองมีความผิดพลาดจากกระบวนการจริง โดยการผลของการทดลองที่สภาวะมีการคลาดเคลื่อนของพารามิเตอร์พบว่า ตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีให้ผลของการควบคุมที่ดีโดยสามารถควบคุมให้อุณหภูมิของปฏิกิริยาเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ได้อย่างราบเรียบจนเกือบจะไม่มีการโอเวอร์ชูตของอุณหภูมิ แต่การควบคุมแบบพีไอดีจะส่งผลให้โปรไฟล์ของอุณหภูมิมีการ โอเวอร์ชูตจนบางการทดสอบเสียการควบคุม

ดังนั้นการควบคุมแบบจีเอ็มซีจึงเหมาะสมที่จะถูกนำมาใช้กับปฏิกิริยาคายความร้อนที่บางครั้งมีความไม่แน่นอนของพารามิเตอร์เกิดขึ้น จากการทําวิทยานิพนธ์ฉบับนี้พบว่า การควบคุมแบบอาศัยแบบจำลองไม่เป็นเชิงเส้นแบบจีเอ็มซีสามารถถูกนำพัฒนาให้เกิดประโยชน์ 2 ด้านดังนี้

1. ทางด้านการศึกษา โดยผู้วิจัยจะได้รับประโยชน์จากแบบจำลองที่มีความน่าเชื่อถือคือสามารถศึกษาคุณสมบัติทางด้านการคาดคะเนทางกายภาพหรือทางเทอร์โมไดนามิก และจลนศาสตร์ต่อไปได้เพื่อนำข้อมูลมาพัฒนาปรับปรุงผลิตภัณฑ์ต่อไป
2. ทางด้านธุรกิจการควบคุมที่ดีจะส่งผลทำให้ผลิตภัณฑ์ที่ออกมามีคุณภาพที่ดีตามไปด้วยรวมทั้งยังเป็นการประหยัดพลังงานในการหล่อเย็นของระบบแฉักเกิดกรณีที่เกิดการ โอเวอร์ชูต ซึ่งส่งผลโดยตรงต่อการประหยัดค่าพลังงานและวัตถุดิบซึ่งเป็นเหตุผลสำคัญในการทำให้อัตนทุนการผลิตลดลง

7.2 สรุปการวิเคราะห์ความน่าเชื่อถือของแบบจำลองปฏิกิริยาการเกิดโพลิเมอไรเซชันของโพลิไวนิลคลอไรด์

จากการศึกษาการออกแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ การเกิดโพลิเมอไรเซชันของโพลิไวนิลคลอไรด์ในงานวิจัยของ C. Kiparissides และคณะ(1997) โดยใช้ค่าพารามิเตอร์ต่างๆ คุณสมบัติทางกายภาพและปริมาณสารตั้งต้นเท่ากับข้อมูลที่แสดงในวารสารงานวิจัย และอาศัยแบบจำลองที่สนใจศึกษานี้ มาประยุกต์ใช้กับตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีโดยเขียนลงในโปรแกรม MATLAB พบว่าแบบจำลองมีความน่าเชื่อถือในระดับที่น่าพอใจเนื่องจากผลตอบสนองของการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่ได้จากการควบคุมโดยจีเอ็มซีมีความใกล้เคียงกับผลการทดลองของงานวิจัยที่นำมาศึกษามาก

จึงสามารถสร้างความมั่นใจได้ว่าแบบจำลองกระบวนการที่ศึกษานี้สามารถนำไปประยุกต์ใช้กับตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีในการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์การเกิดโพลิเมอไรเซชันของโพลิไวนิลคลอไรด์สำหรับกระบวนการระดับอุตสาหกรรมของโรงงานจริงได้ต่อไป

เมื่อนำแบบจำลองมาประยุกต์กับพารามิเตอร์ต่างๆในระดับโรงงานจริงผลการตอบสนองของตัวควบคุมแบบจีเอ็มซีจะให้ผลที่ดีกว่าผลตอบสนองการควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์จากโรงงานจริงตามภาคผนวก ค ซึ่งมีการควบคุมโดยตัวควบคุมแบบพีไอดี จากข้อมูลจากโรงงานจะเห็นได้ว่าการเกิดโอเวอร์ชูตขณะเข้าสู่จุดเซ็ทพอยท์ และอุณหภูมิตลอดช่วงของการทำปฏิกิริยามีการแกว่งอยู่บ้าง ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับการควบคุมแบบจีเอ็มซีแล้ว จีเอ็มซีจะให้การควบคุมในช่วงเริ่มต้นเกิดการโอเวอร์ชูตเล็กน้อยแต่หลังจากนั้นอุณหภูมิจะอยู่ที่จุดเซ็ทพอยท์ตลอดการเกิดปฏิกิริยา โดยการควบคุมแบบจีเอ็มซีให้อุณหภูมิของแจ็กเก็ตอยู่ที่ประมาณ 35 องศาเซลเซียสและค่อยๆเพิ่มสูงขึ้นจนถึงช่วง 2 ชั่วโมงสุดท้ายที่เนื่องจากเกิดปฏิกิริยาขึ้นทำให้มีการเพิ่มน้ำหล่อเย็นในช่วงแรกและค่อยๆลดปริมาณน้ำหล่อเย็นลงเรื่อยๆเมื่อปฏิกิริยาคำเนินต่อเมื่อปฏิกิริยาคำเนินจนคงที่อุณหภูมิของแจ็กเก็ตจะอยู่ที่ 48 องศาเซลเซียส

โดยผลจากโรงงานจริงให้ค่าอุณหภูมิของแจ็กเก็ตอยู่ที่ 37 องศาเซลเซียส แต่โปรไฟล์ของอุณหภูมิแจ็กเก็ตยังให้ผลที่แตกต่างกันคืออุณหภูมิแจ็กเก็ตในระดับโรงงานจริงมีค่าคงที่เกือบตลอดเวลาแต่สำหรับที่เกิดปฏิกิริยารุนแรงนั้นคือมีการเพิ่มน้ำหล่อเย็นในช่วงแรกและค่อยๆลดลงเรื่อยๆเมื่อปฏิกิริยาคำเนินต่อไป จึงสรุปได้ว่าการออกแบบจำลองในวิทยานิพนธ์นี้ยังมีข้อผิดพลาดอยู่ โดยอาจเนื่องมาจากการเลือกใช้ค่าพารามิเตอร์บางตัวยังไม่สอดคล้องกับระบบของโรงงานจริง

7.3 ข้อเสนอแนะ

จากผลการเปรียบเทียบผลการตอบสนองการควบคุมแบบจีเอ็มซีกับผลการควบคุมของโรงงานจริง พบว่า โพรไฟล์ของอุณหภูมิแฉกเกิดขึ้นให้ผลที่แตกต่างกับผลในระดับโรงงานจริง อันน่าจะมีสาเหตุมาจากความผิดพลาดของตัวแปรหรือพารามิเตอร์บางตัวที่ยังไม่ถูกต้องกับกระบวนการจริง ดังนั้นในการที่จะศึกษาการควบคุมปฏิกิริยาการเกิดโพลีไวนิล คลอไรด์ต่อไปควรพิจารณาดังนี้

1. ควรศึกษาค่าพารามิเตอร์ที่จะมีผลกับความร้อนภายในระบบให้ละเอียดมากขึ้น เช่นค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนรวมควรศึกษาจากข้อมูลจากเอกสารอ้างอิงของโรงงานจริงเพื่อจะได้ค่าที่ใกล้เคียงกับระดับของโรงงานจริงมากที่สุด
2. การประมาณค่าความร้อนให้มีสมรรถนะดีขึ้นเนื่องจากควบคุมแบบจีเอ็มซีที่นำมาใช้ควบคู่กับการประมาณค่าความร้อนด้วยวิธีออนไลน์ยังส่งผลให้เกิดการ โอเวอร์ชูตอยู่บ้างกรณีที่มีการผิดพลาดของพารามิเตอร์สูงทั้งนี้เนื่องมาจากการประมาณค่าแบบออนไลน์ยังมีความคลาดเคลื่อนจนทำให้ไม่สามารถกำจัด การโอเวอร์ชูตได้ส่งผลให้แบบจำลองของตัวควบคุมคำนวณค่าตัวแปรปรับคลาดเคลื่อนจากค่าที่ควรจะเป็นดังนั้นจึงควรหาวิธีการประมาณค่าความร้อนที่มีสมรรถนะมากกว่านี้มาใช้เช่นการประมาณค่าตัวแปรแบบคาลมานฟิลเตอร์ซึ่งอาศัยความรู้ความชำนาญทางด้านคณิตศาสตร์อย่างสูงโดยมีอัลกอริธึมคาลมานฟิลเตอร์เพื่อที่จะใช้ประโยชน์ในการแยกค่าประมาณสเตทและสมการความแปรปรวนการผิดพลาดซึ่งทำให้สมรรถนะของการประมาณค่าสเตทเช่นความร้อนมีค่าที่ดีขึ้น

รายการอ้างอิง

ภาษาไทย

ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์ . 2527. เคมีโพลีเมอร์พื้นฐาน . พิมพ์ครั้งที่ 1 . กรุงเทพมหานคร : สำนักพิมพ์โอเคียน สโตร์ .

ชนากร บุตรถาวร . 2541. การควบคุมอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์พอลิเมอร์แบบเซมิแบทช์โดยใช้ตัวควบคุมจีเอ็มซี . วิทยานิพนธ์มหาบัณฑิต วิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาษาอังกฤษ

B. Wayne Bequette , Review Nonlinear control of chemical Processes : A Review, Ind. Eng. Chem. , Vol 30 , (1991) ,pp. 1391-1413.

Berry J. Cott and Macchitto, Temperature Control of Exothermic Batch Reactor Using Generic Model Control, Ind. Eng. Res., Vol. 28, (1989),pp.1177-1184.

Carlos A. Smith and Armando B. Corripio, (1997), Principle and Practice of Automatic Process Control, 2 nd ed., (n.p.): John Wiley & Soms,Inc, .

D.Bretelle.E.S. Chua and S.Macchietto, Dynamic Simulation of PVC Reactor, Computers chem. Engng. Vol.13 ,(1989),pp.1263-1271.

D.Bretelle.E.S. Chua and S.Macchietto, Simulation and scheduling of a PVC process for operation training, Computers chem. Engng. Vol.18 , (1994),pp.S547-S551.

H.G.Yuan ,G.Kalfas, and W.H.Ray ,Suspension Polymerization ,Rev. Macromol. Chem.Phys., C31(283), (1991),pp. 215-299.

Harpld A. Sarvetnick, Reinhold Plastic Applications Series , New York : Polytechnical Services.

Kiparissides, * G. Daskalakis, D.S. Achilias, and E. Sidiropoulou, Dynamic Simulation of industrial Polyvinyl Chloride Batch Suspension Polymerization Reactors , Ind. Eng.Chem . Res., Vol. 36, (1997),pp.1253-1267.

P. Kittisupakorn and L. Kershenbaum, 1994,Use predictive Control Technigues For the Control of a Reactor With Exothermic Reaction., Centre For Process System Engineering., Imperial College, London.

- P. L. Lee and G. R. Sullivan, Generic Model Control (GMC) , Comput. Chem. Engng. Vol. 12 , (1988),pp.573-580.
- P. L. Lee and R. B. Newell and G. R. Sullivan, Generic Model Control—A Case Study., The Canadian Journal of Chemical Engineering. Vol. 67,(1989),pp.478-484.
- T.Y.Xie,A.E. Hamielec ,P.E.Wood and D.R. Woods, Experimental Investigation of Poly Vinyl Chloride polymerization at high conversion mechanism,Kinetic and modelling, Polymer ,Vol.32 , (1991),pp. 537-555.
- T.Y.Xie,A.E. Hamielec ,P.E.Wood and D.R. Woods, Experimental Investigation of Poly Vinyl Chloride polymerization at high conversion molecular – weight development, Polymer ,Vol.32 ,No.6 , (1991),pp. 1098-1111.
- Walter Totsch and Hans Gaensslen, 1992, Polyvinyl Chloride Environmental Aspect of a Common Plastic. Fraunhofer Institute for System Technology and Innovation Research. London and Newyork, Elsevier Applied Science

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก

ผลการตอบสนองของการปรับจูนตัวควบคุมแบบพีไอดี

ผลการตอบสนองที่เกิดขึ้นโดยทั่วไปในระบบที่ถูกควบคุม ถ้าไม่มีการใช้การควบคุมแบบป้อนกลับ ระบบจะเข้าสู่ค่าที่สภาวะคงตัวอย่างช้าๆ การควบคุมแบบพีไอจะเร่งความเร็วของผลการตอบสนองและลดออฟเซต (offset) การเพิ่มอินทิกรัลแอกชั่นจะช่วยกำจัดค่าออฟเซต แต่มีแนวโน้มทำให้ผลการตอบสนองมีแกว่งมากขึ้น สำหรับดีริวาทีฟแอกชั่น จะช่วยลดทั้งเวลาการตอบสนองและการแกว่ง แต่อย่างไรก็ตามลักษณะของผลการตอบสนองจะขึ้นอยู่กับค่า K_c , τ_i และ τ_d ที่ใช้และลักษณะของกระบวนการด้วย

- เพิ่มค่า K_c ทำให้ผลการตอบสนองเร็วขึ้น แต่ถ้าสูงเกินไปอาจทำให้ผลการตอบสนองเกิดการแกว่งหรือไม่เสถียร จึงควรเลือกใช้ค่าที่เหมาะสม
- ค่า τ_i ใดๆจะทำให้กำจัดค่าออฟเซต ได้ แต่ถ้าค่าสูงมากเกินไปจะทำให้ผลการตอบสนองช้าลงมากภายหลังมีโพลครบวงหรือเซ็ทพอยท์เปลี่ยน
- เพิ่มค่า τ_d จะช่วยลดทั้งเวลาการตอบสนองและการแกว่ง แต่ถ้าค่าสูงมากเกินไปจะขยายสัญญาณรบวง (noise) และส่งผลให้ผลการตอบสนองเกิดการแกว่งมากขึ้น

การปรับค่าของตัวควบคุม (Controller Tuning)

หลังจากที่ได้ทำการติดตั้งระบบควบคุมเรียบร้อยแล้ว เราต้องทำการปรับค่าของตัวควบคุมเพื่อให้ระบบควบคุมมีการทำงานเป็นที่น่าพอใจ โดยปกติแล้วการปรับค่าตัวควบคุมทำโดยวิธีลองผิดลองถูก (trial and error) แต่วิธีนี้จะใช้เวลานาน เพื่อที่จะให้การปรับค่าตัวควบคุมใช้เวลาให้น้อยลงจึงต้องมีการประมาณค่าตัวควบคุมที่เหมาะสม ในการประมาณค่าครั้งแรกอาจทำได้จากประสบการณ์ แต่ในปัจจุบันได้มีตัวควบคุมชนิด adaptive controller โดยตัวควบคุมชนิดนี้สามารถหาค่าที่เหมาะสมสำหรับตัวควบคุมได้โดยอัตโนมัติ แต่สำหรับงานวิทยานิพนธ์นี้จะใช้วิธีลองผิดลองถูกในการหาค่าการจูนที่เหมาะสมโดยมีหลักในการปรับค่าดังนี้

การปรับค่าของตัวควบคุมโดยวิธีลองผิดลองถูก (TRIAL AND ERROR TUNING)

ในการตั้งค่าของตัวควบคุมแบบพีไอดีสามารถทำตามขั้นตอนดังต่อไปนี้

ขั้นที่ 1 ทำการกำจัดค่าการควบคุมแบบอินทิกรัลและดีริเวทีฟ (integral and derivative action) โดยการตั้งค่าของ τ_D ที่ค่าน้อยที่สุด และค่าของ τ , ที่ค่ามากที่สุด

ขั้นที่ 2 ตั้งค่าของ K_c ที่ค่าต่ำๆ (ประมาณ 0.5) และให้ตัวควบคุมทำงานแบบอัตโนมัติ

ขั้นที่ 3 เพิ่มค่าของ K_c ทีละน้อยจนเกิดการสั่นอย่างต่อเนื่อง (continuous cycling) ภายหลังจากมีการเปลี่ยนแปลงโหลด หรือค่าที่เรากำหนดไว้เพียงเล็กน้อย การสั่นอย่างต่อเนื่องนี้ หมายความว่า เป็นการสั่นที่มีแอมพลิจูดคงที่

ขั้นที่ 4 ลดค่าของ K_c ไปเรื่อยๆ โดยใช้สองเป็นตัวหาร

ขั้นที่ 5 ลดค่าของ τ , ไปทีละน้อยจนเกิดการสั่นอย่างต่อเนื่องอีกครั้งหนึ่ง ตั้งค่าของ τ , ให้มีค่าเป็นสามเท่าของค่านี้

ขั้นที่ 6 เพิ่มค่าของ τ_D จนกระทั่งเกิดการสั่นอย่างต่อเนื่องขึ้นอีกครั้ง ตั้งค่าของ τ_D ให้มีค่าเป็น 1/3 ของค่านี้

ค่า K_c ที่เราได้ในขั้นตอนที่ 3 นี้เราเรียกว่า ค่าเกณฑ์สุดท้าย (ultimate gain, K_{cu}) ในการทดลอง ค่าที่แสดงออกมาของตัวควบคุมจะไม่มีอาการอึดตัวเกิดขึ้น ถ้ามีอาการอึดตัวเกิดขึ้นจะเกิดการสั่นอย่างต่อเนื่องขึ้น โดยค่าของ $K_c > K_{cu}$

การสั่นที่เกิดขึ้นในรูป d นั้นอาจจะทำให้เกิดการประมาณค่าของ K_{cu} ที่มากเกินไปได้ เช่นสมมุติว่าให้การตอบสนองในรูป d เกิดขึ้นเมื่อค่าเกณฑ์ของตัวควบคุมมีค่าเท่ากับ K_{c1} และผู้ทำการทดลองไม่ได้ระวังว่าตัวควบคุมเกิดการอึดตัวขึ้น ทำให้ผู้ทำการทดลองสรุปว่าค่า $K_{cu} = K_{c1}$ แต่โดยความเป็นจริงแล้วค่าของ $K_{cu} < K_{c1}$ การประมาณค่าที่เกินมานั้นสามารถทำให้เกิดการควบคุมที่ไม่ดีได้

นิยาม ค่าเกณฑ์สุดท้าย (ultimate gain) เป็นค่าที่มากที่สุดของ K_c ที่ยังสามารถทำให้ระบบวงปิดมีเสถียรภาพ เมื่อใช้การควบคุมแบบสัดส่วน

ดังนั้นเราจึงสามารถสรุปหาค่าเกณฑ์สุดท้าย ที่ทำให้ระบบมีเสถียรภาพมากที่สุด นั่นคือค่าคงที่เกณฑ์ที่สามารถทำให้ค่าไอเอสดีมีค่าน้อยที่สุด ส่งผลให้ไม่เกิดการสั่นอย่างต่อเนื่องโดยค่าที่ได้ในการปรับค่าของตัวควบคุม นั่นคือหาค่าคงที่ของเกณฑ์เริ่มต้นที่เหมาะสมได้เท่ากับ $K_c = 4.7$ $\tau_c = 6.5$ และ $\tau_D = 0.31$ เพราะถ้าค่า K_c มากกว่านี้จะส่งผลให้อุณหภูมิเข้าสู่เซ็ทพอยท์ช้าลงนั้น โดยสามารถวิเคราะห์ได้ว่าไอเอสดีมีค่ามากขึ้นซึ่งแสดงว่าผลรวมของความแตกต่างระหว่างอุณหภูมิเซ็ทพอยท์และอุณหภูมิที่วัดได้มีค่ามากขึ้น

ตาราง ก-1 ค่าไอเอสอีที่ได้จากการหาพารามิเตอร์ของตัวควบคุมแบบพีไอดีตอนปรับจูน

ค่าคงที่เกน	เวลาอินทีกรัล	เวลาอนุพันธ์	ค่าไอเอสอี
$K_c (^{\circ}C/^{\circ}C)$	τ_I (min)	τ_D (min)	ISE_PID
4.7	6.5	0.32	101.3580
4.7	6.5	0.31	101.1184
4.5	6.5	0.30	100.8980
4.0	6.5	0.30	110.5690
4.6	6.5	0.30	103.2750
4.7*	6.5*	0.30*	100.3650
4.8	6.5	0.30	100.5680
4.7	5.0	0.30	100.3715
4.7	4.0	0.30	101.3575

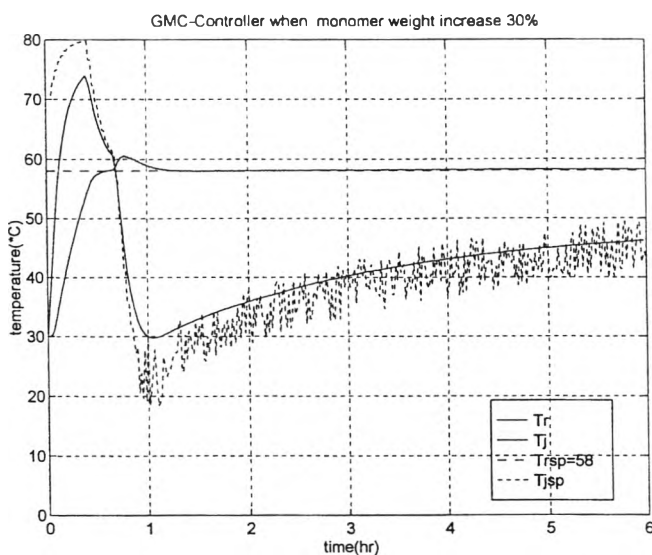
เมื่อ K_c , τ_I และ τ_D เป็นพารามิเตอร์ที่ได้จากการจูน ซึ่งวิธีการจูนตัวควบคุมย้อนกลับแบบพีไอดี โดยเราต้องเลือกตัวพารามิเตอร์ที่มีความเหมาะสมโดยในงานวิทยานิพนธ์ ใช้วิธีลองใส่ค่าเริ่มต้นเข้าไปในโปรแกรมแมทแลบที่ใช้ตัวควบคุมแบบพีไอดี จากนั้นดูค่าผลรวมของความผิดพลาดที่เกิดขึ้นและรวมถึงการพิจารณาลักษณะของการเข้าสู่เซตพอยท์ที่เกิดขึ้น ที่สภาวะการดำเนินการปกติไม่มีความผิดพลาดจากพารามิเตอร์ และค่าที่ได้จากการจูนดูได้ดังนี้

ค่าคงที่เกน	เวลาอินทีกรัล	เวลาอนุพันธ์	ค่าไอเอสอี
$K_c (^{\circ}C/^{\circ}C)$	τ_I (min)	τ_D (min)	ISE_PID
4.7	6.5	0.30	100.3194

ภาคผนวก ข

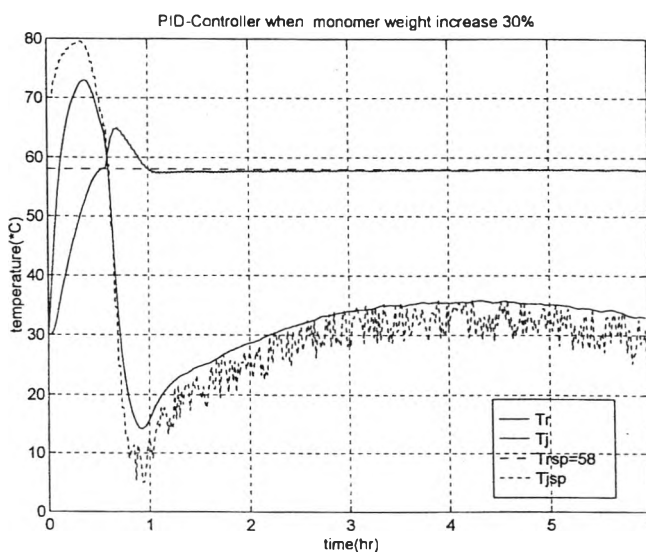
ผลตอบสนองการควบคุมกรณีที่เกิดความผิดพลาดของพารามิเตอร์

แบบที่ 1 ทำการทดสอบการควบคุมทั้งสองแบบโดยมีการเปลี่ยนแปลงน้ำหนักสารตั้งต้นจากปกติ 52,000 กิโลกรัม ไปเป็น 67,600 กิโลกรัม โดยให้ผลการควบคุมดังกราฟรูปที่ 6.5 และ 6.6



รูปที่ ข-1 ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงน้ำหนักสารตั้งต้น 30% โดยได้ค่า

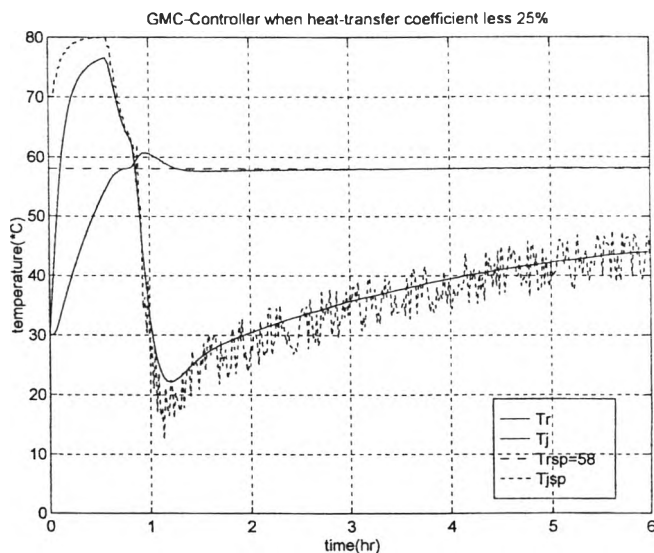
$$ISE_GMC = 99.1638$$



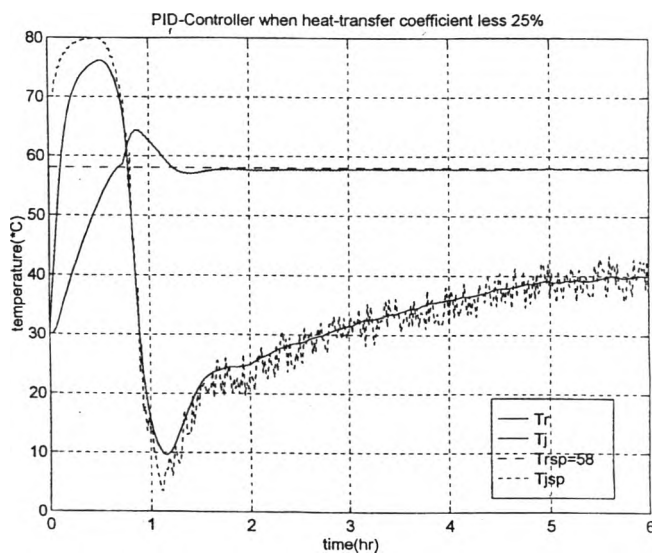
รูปที่ ข-2 ผลการควบคุมแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงน้ำหนักสารตั้งต้น 30%

$$โดยได้ค่า ISE_PID = 104.4358$$

- แบบที่ 2 ทำการทดสอบการควบคุมทั้งสองแบบในกรณีที่มีค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลง โดยกำหนดให้มีค่าลดลงจากปกติ 25% ซึ่งแสดงผลดังกราฟรูปที่ 7

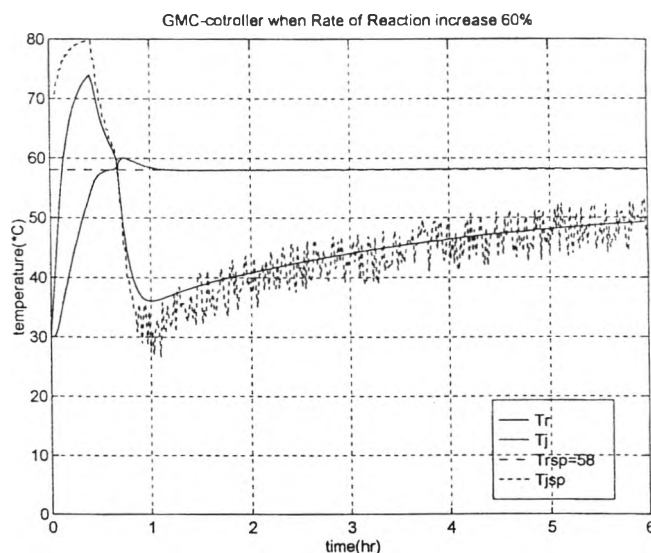


รูปที่ ข-3 ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลงโดยกำหนดให้มีค่าลดลงจากปกติ 25% โดยได้ค่า $ISE_{GMC} = 124.8912$

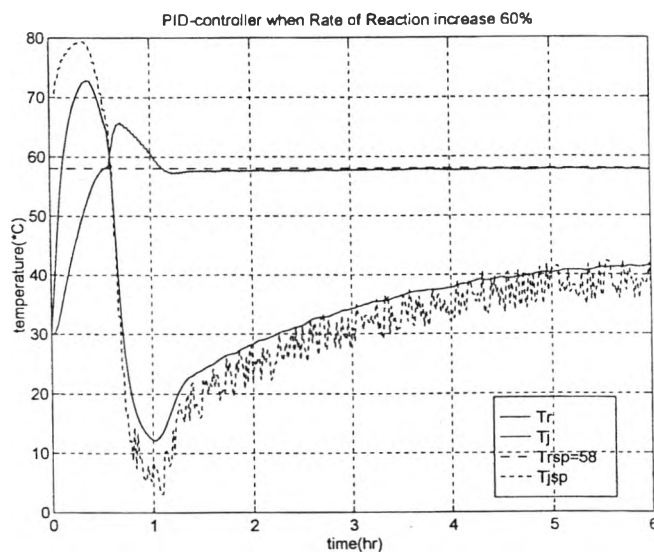


รูปที่ ข-4 ผลการควบคุมแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนเปลี่ยนแปลงโดยกำหนดให้มีค่าลดลงจากปกติ 25% โดยได้ค่า $ISE_{PID} = 145.2097$

แบบที่ 3 ทำการทดสอบสมรรถนะความทนทานของการควบคุมที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลง โดยกำหนดให้มีความว่องไวขึ้นจากปกติ ถึง 60 %

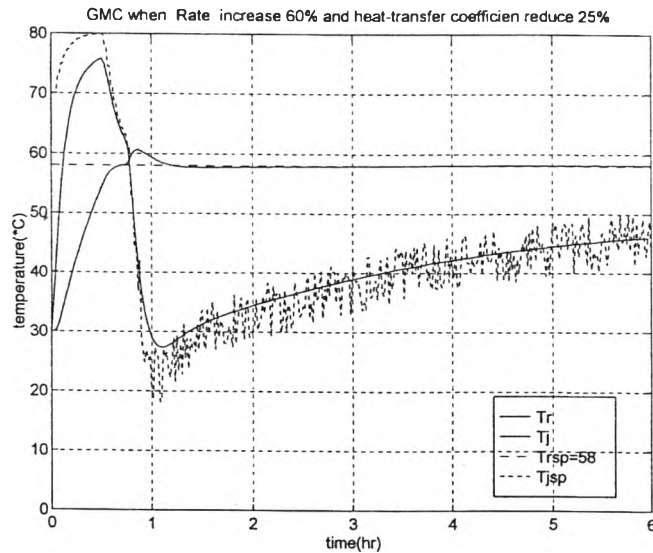


รูปที่ ข-5 ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลง โดยกำหนดให้มีความว่องไวขึ้นจากปกติ ถึง 60% โดยได้ค่า $ISE_{GMC} = 98.8569$

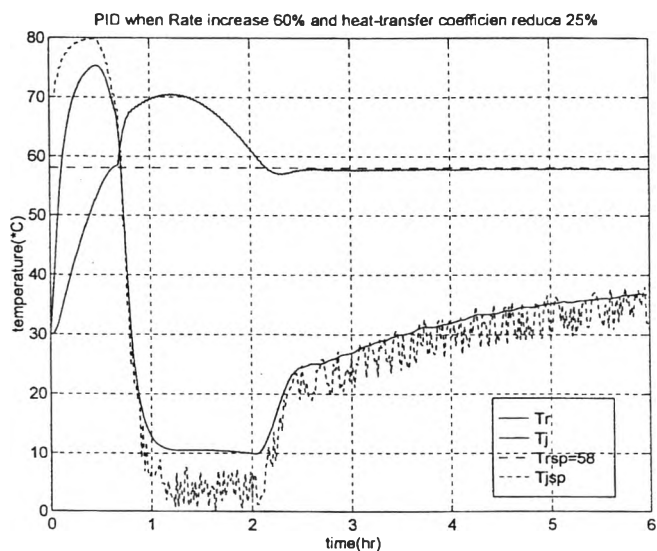


รูปที่ ข-6 ผลการควบคุมแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนแปลง โดยกำหนดให้มีความว่องไวขึ้นจากปกติ ถึง 60 % โดยได้ค่า $ISE_{PID} = 106.3834$

แบบที่ 4 การเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน 25% และ การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาของไวซีน 60%



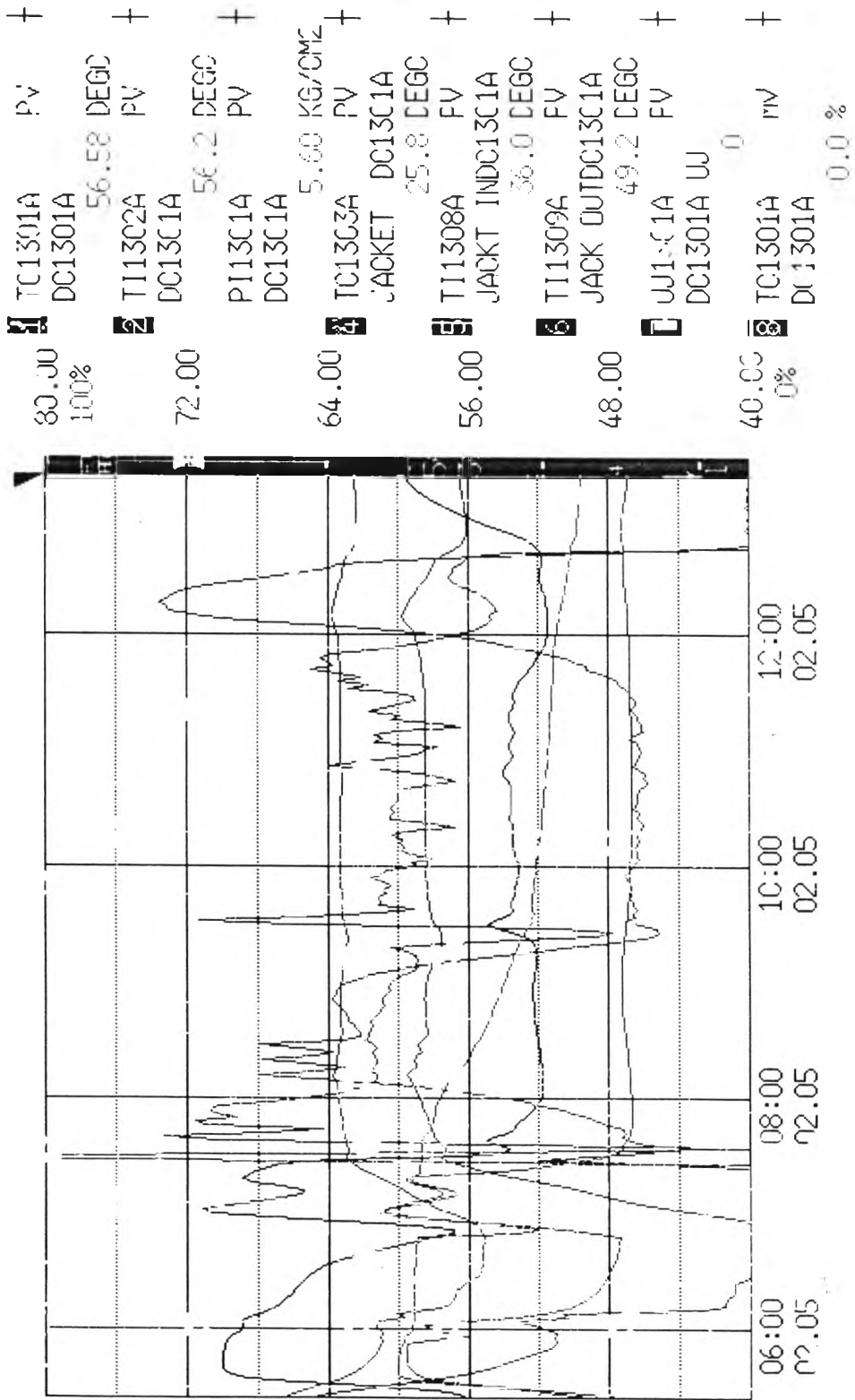
รูปที่ ข-7 ผลการควบคุมแบบจีเอ็มซี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน 25% และ การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาของไวซีน 60% โดยได้ค่า $ISE_GMC = 124.9374$



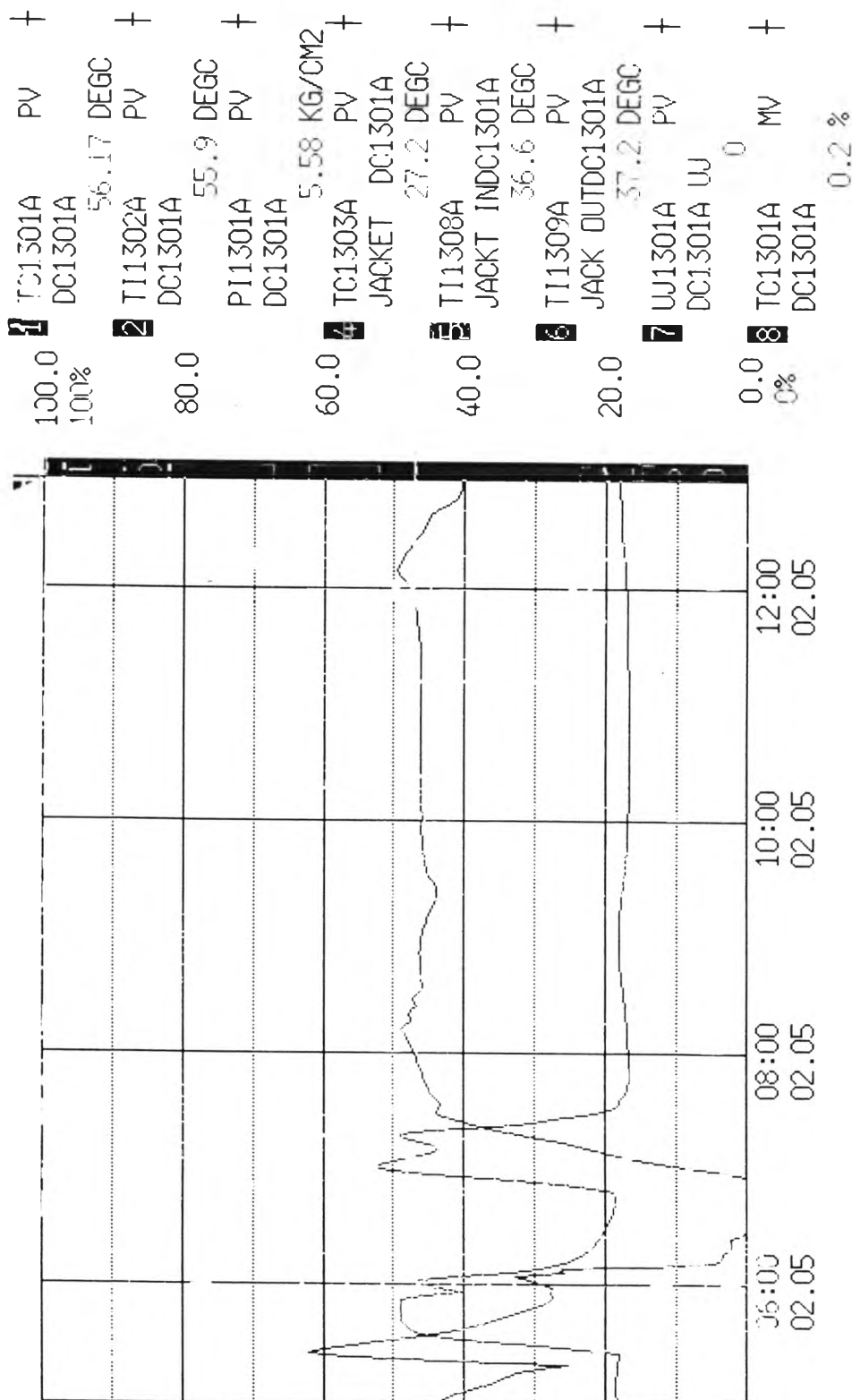
รูปที่ ข-8 ผลการควบคุมแบบพีไอดี เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงของสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน 25% และ การเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาของไวซีน 60% โดยได้ค่า $ISE_PID = 256.9370$

ภาคผนวก ค ผลตอบสนองของการควบคุมแบบพีไอดีที่บันทึกจากระบบจริง

รูป ค-1 ผลการควบคุมแบบพีไอดีของระบบโรงงานจริงระหว่างความดันและอุณหภูมิ



รูป ก-2 ผลการตอบสนองของการควบคุมแบบพีไอดีของระบบโรงงานจริงระหว่างอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์กับอุณหภูมิของแจ็กเก็ต



ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นางสาวนุศรา บุญประเสริฐ เกิดเมื่อวันที่ 30 กรกฎาคม พ.ศ. 2515 อำเภอเมือง จังหวัดชลบุรี สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรีวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาเคมีอุตสาหกรรม จากสถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้า เจ้าคุณทหารลาดกระบัง ในปีการศึกษา พ.ศ. 2537 เข้าทำงานที่บริษัท ไทยยูรีเทนพลาสติกจำกัด เป็นบริษัทแรก จากนั้นจึงเข้าศึกษาต่อในระดับวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิศวกรรมเคมี ในปีการศึกษา พ.ศ. 2539 ปัจจุบันทำงานอยู่ที่ บริษัทเอ็นเจเนียร์ริง โปรดักส์ จำกัด ในตำแหน่งวิศวกรอาวุโสดูแลทางด้านการขายและการติดตั้งอุปกรณ์ปั๊มและระบบสูบน้ำของเหลวในโรงงาน

