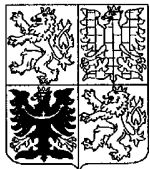


PŘIHLÁŠKA VYNÁLEZU

zveřejněná podle § 31 zákona č. 527/1990 Sb.

(19)
ČESKÁ
REPUBLIKA



ÚŘAD
PRŮMYSLVÉHO
VLASTNICTVÍ

(22) Přihlášeno: **26.06.1998**
(32) Datum podání prioritní přihlášky: **30.06.1997**
(31) Číslo prioritní přihlášky: **1997/885562**
(33) Země priority: **US**
(40) Datum zveřejnění přihlášky vynálezu: **12.07.2000**
(Věstník č. 7/2000)
(86) PCT číslo: **PCT/US98/13232**
(87) PCT číslo zveřejnění: **WO99/00717**

(21) Číslo dokumentu:
1999 - 4775

(13) Druh dokumentu: **A3**

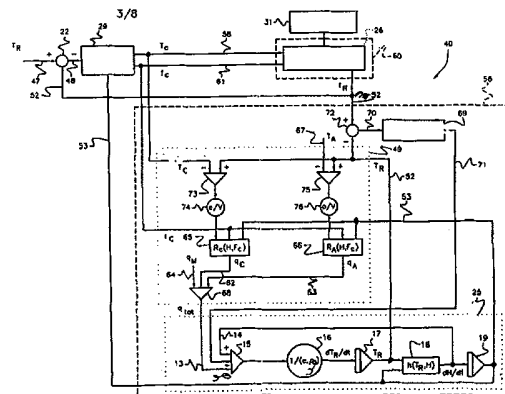
(51) Int. Cl. ⁷:
G 05 D 21/02

- (71) Přihlašovatel:
HONEYWELL INC., Minneapolis, MN, US;
(72) Původce:
Jelinek Jan, Plymouth, MN, US;
Havlena Vladimír, Praha, CZ;
Horák Josef, Praha, CZ;
(74) Zástupce:
Korejzová Zdeňka JUDr., Spálená 29, Praha 1, 11000;

(54) Název přihlášky vynálezu:
Řídicí zařízení dávkového polymeračního procesu

(57) Anotace:

Zařízení pro řízení dávkového procesu v reaktoru (60) zahrnuje regulátor (29), spojený s reaktorem (60) pro přijímání zpětnovazebního signálu teploty procesu z uvedeného reaktoru (60) a pro zajištění řídicích signálů ochlazování reaktoru pro uvedený reaktor, deduktivní snímač (56), spojený s uvedeným reaktorem (60) a s uvedeným regulátorem (29) pro přijetí signálů parametrů z uvedeného reaktoru (60), zajištění signálu (53) tepla modelu (25) reakce do uvedeného regulátoru (29) a pro přijetí řídicích signálů ochlazování reaktoru z uvedeného regulátoru (29). Uvedený regulátor (29) zahrnuje sčítačku (22) pro přijímání zpětnovazebního signálu (52) teploty procesu a signálu (47) požadované teploty procesu, a pro vydávání signálu (48) indukujícího rozdíl mezi teplotou procesu a požadovanou teplotou procesu. Deduktivní snímač (56) zahrnuje model (49) reaktoru, který přijímá některé signály parametrů z uvedeného reaktoru (60) a řídicí signály ochlazování reaktoru z uvedeného regulátoru (29) a vydává signál indukující celkové teplo odebrané z uvedeného reaktoru. dále zahrnuje model (25) reakce pro přijímání signálu indukujícího celkové teplo odebrané z uvedeného reaktoru, přičemž tento model (25) reakce poskytuje signál (53) tepla do uvedeného regulátoru (29) a do uvedeného modelu (49) reaktoru.



Řídicí zařízení dávkového polymeračního procesu

Oblast techniky

Předkládaný vynález se týká polymeračních reakcí, zejména monitorování a řízení rychlosti a rozsahu konverze v takovýchto reakcích. Vynález se přitom zejména týká přesného určování rychlosti a rozsahu konverze v určitém okamžiku v polymerační reakci za účelem řízení rychlosti konverze a optimalizace chladících zdrojů.

Dosavadní stav techniky

Většina polymeračních reakcí v současnosti je provozována v otevřené (rozpojené) smyčce, pokud se týká kvalitativních vlastností (koncového) produktu. Rovněž operace prováděné během výrobního procesu jsou obvykle plánovány jednoduchým časovačem bez ohledu na skutečný postup reakce.

V posledním období možnosti výkonných počítačů konečně umožňují využít pokročilé řídicí koncepty, které byly vyvíjeny teoretiky průmyslového řízení od šedesátých let tohoto století. V důsledku toho bylo řízení kontinuálních procesů, jako jsou procesy rafinačních destilačních kolon nebo jednotek na výrobu energie, svědkem rychlého vývoje od jednosmyčkových proporcionálních, integračních a diferenčních (PID) regulátorů k předvídajícím (inteligentním) regulátorům s mnoha proměnnými, které mají vestavěnou podmínkovou optimalizaci, jejichž výkon nemůže být srovnáván s řešeními starých PID regulátorů.

Z mnoha důvodů se tento vývoj doposud vyhnul dávkovým procesům. Z hlediska řízení je většina dávkových procesů

stále ještě provozována způsobem, kterým pracovaly před třiceti nebo dokonce více lety. Pokud zde došlo k nějaké změně, obvykle ovlivnila řídicí hardwarové vybavení, ale ne řídicí algoritmus. Dávkový proces stále předepisuje časové profily teplot nebo tlaků, které je třeba sledovat dávkovým reaktorem, aby byl vyroben produkt. Zpětnovazební regulátory, obvykle PID regulátory, jsou běžně užívány pro dávkové sledování procesu na přítomnost změn v koncentraci a čistotě přiváděného materiálu, aktivity katalyzátoru, čistoty reaktoru a podobně.

Udržování teplot a tlaků dávkového procesu je důležité, ale nemělo by být cílem řízení. Nakonec tyto teploty nebo tlaky dávkového procesu nejsou zdrojem zisku výrobce, ale jsou pouze parametry procesu a samy o sobě nejsou postačujícími parametry. Je obecně známo a pro příklad polymeračních procesů doloženo níže příklady, že dvě dávky s dokonale shodnými profily teplot a tlaků mohou stále ještě mít odlišné rychlosti, se kterými je monomer konvertován na polymer, a tudíž poskytují produkty s nekonzistentní kvalitou. Pokud se týká konečných parametrů skutečného produktu, které určují jeho kvalitu na trhu, pracuje většina dávkových procesů stále ještě v otevřené smyčce se všemi negativními důsledky, které s sebou takové řízení procesu v otevřené smyčce nese.

Podle předkládaného vynálezu je tento přístup nahrazen zpětnovazebním regulátorem (řídicím zařízením) pro polymerační procesy, které uzavírá smyčku s použitím měření přímo spojeného kvalitou produktu na trhu a tudíž využívá zpětnou vazbu pro eliminaci kvalitativních změn a

nekonzistencí v důsledku výchylek ve vstupních proměnných procesu a v provozních stavech.

Dokument autora Huafang Ni a kol., o názvu "Fuzzy Logic Supervised ANN Feedforward Control for a Batch Polymerization Reactor", popisuje dopřednou PI zpětnovazební řídicí strategii umělé nervové sítě ovládané přibližným logickým modelem (FL-ANN/PI), ve které je FL-ANN dopředný výstup použit pro kompenzaci účinku tepla reakce. ANN část má vratnou nervovou síť, která je použita pro odhad účinku tepla reakce na reakční teplotu, a inverzní zpětnovazební nervovou síť, která vypočítává dopředný signál. Přibližný logický model ovládá finální dopředný výstup.

Podstata vynálezu

Předkládaným vynálezem je řízení polymerace, které umožňuje uživateli specifikovat nezávisle profily teploty reakční směsi a stupně konverze monomeru jako funkce času a vykonat tyto profily pod zpětnovazebním řízením. To obojí zlepšuje konzistenci produktu v jednotlivých dávkách a snižuje nejistotu v reakční době a spotřebě chladicího média v jakémkoliv daném okamžiku. Protože dostupnost chladicího média je často omezujícím faktorem kapacity výroby, zlepšená odhadnutelnost jednotlivých průběhů dávkových procesů nabízí možnost zlepšit plánování a časování dávek a tudíž zvýšit výtěžnost výrobního zařízení bez nákladných přizpůsobení celého zařízení.

Předkládaný vynález umožňuje řídicímu zařízení (regulátoru), aby použilo zpětnou vazbu pro řízení vlastností produktu bez nutnosti použití speciálních snímačů pro měření vlastností a pro provádění polymeračního procesu na základě

jeho vnitřního času reflektujícího jeho aktuální postup. V
důsledku tedy předkládaný vynález umožňuje za prvé vyrábět
polymery s konzistentní kvalitou a za druhé zlepšit výtěžnost
procesu umožněním lepšího využití dostupné chladicí kapacity
5 bez nepříznivého ovlivnění bezpečnosti procesu.

Předkládaný vynález zahrnuje deduktivní snímač, jehož
koncept je založen na zjištění, že pro polymerační procesy,
ve kterých je teplo uvolňováno jednou reakcí, je množství
uvolněného tepla úměrné, třebaže nelineárním způsobem, stupni
10 konverze monomeru. Tudíž prostřednictvím přímého pečlivého
vypočítávání tepelné bilance reaktoru je možné kontinuálně
vyvozovat stupeň konverze a použít tuto hodnotu pro řízení.
Jakmile může být určován a nakonec také řízen skutečný stupeň
konverze, je možné rovněž řídit chladicí výkon reaktoru a
15 tudíž přizpůsobit jej chladicí kapacitě, která je mu
přidělena časovačem (plánovačem) celého výrobního zařízení.

Při povrchním pohledu zlepšený dávkový řídicí systém
využívající deduktivního snímače vypadá velmi podobně jako
běžný systém. V obou případech budou měření teplot a průtoků
20 chladicího média reaktoru, jak vstupuje do a opouští plášť
reaktoru nebo chladicího hada, tvořit objem vstupních dat.
Kromě těchto dat může deduktivní snímač vyžadovat přídatná
data týkající se teplot v určitých dalších místech reaktoru a
množství a teplot přiváděných materiálů a katalyzátorů. Pokud
25 jsou některá data o jejich složení dostupná, pak mohou být
rovněž použita s výhodou přesnější dedukce.

Podstatným rozdílem je to, co řídicí zařízení vlastně
s daty provádí. V běžném dávkovém řídicím zařízení jsou data
30 použita přímo pro řízení teploty reakční směsi
prostřednictvím manipulace s tokem a teplotou příchozího

chladicího média. Ve zlepšeném řídicím zařízení podle vynálezu jsou data namísto toho vedena do deduktivního snímače, kde jsou použita pro odvození aktuální hodnoty stupně konverze monomeru. Tato hodnota je potom předána do

5 řídicí části zlepšeného dávkového řídicího zařízení.

Ačkoliv by deduktivní snímač mohl být realizován jako samostatné zařízení a tudíž by se mohl podobat fyzickým snímačům, tato možnost je nepravděpodobná. Důvodem je to, že snímač zahrnuje nelineární dynamický model jak procesu tak i

10 reaktoru, jehož stav musí být udržován v synchronu nebo koordinaci s realitou s použitím algoritmu odhadujícího stav, který je řízen měřenými teplotami a průtoky. Jakmile je takový model dostupný, je sdílen s výhodou řídicího zařízení na bázi modelu (nelineárního).

15 Polymerační reakce jsou exotermické (to jest chemické změny, při kterých dochází k uvolňování tepla, jako je například spalování). Celkové množství tepla uvolněného reakcí od jejího začátku až do daného okamžiku závisí na tom, jak mnoho monomeru (monomerů) již bylo konvertováno na

20 polymer. Tato hodnota uvolněného tepla, indikující stupeň konverze monomeru je mnohem spolehlivějším indikátorem postupu reakce, než fyzická doba, protože stejná reakce může probíhat pomaleji nebo rychleji v závislosti na aktivitě iniciátoru (to jest katalyzátoru), čistotě reakčních činidel

25 a dalších vlivů, které může být velmi obtížné přímo měřit. Navíc je u mnoha polymeračních reakcí stupeň konverze spojen s kvalitou produktu a tudíž může být použit pro uzavření smyčky pro zpětnovazební řízení kvality produktu namísto speciálních snímačů.

30

Stupeň konverze není měřen přímo, ale předkládaný vynález zahrnuje dedukci jeho probíhající hodnoty prostřednictvím dynamického vyhodnocování tepelné bilance reaktoru. Předkládaný vynález zahrnuje čtyři koncepty. Za
5 prvé, je zde způsob dedukování stupně konverze z dynamického vyhodnocování tepelné bilance reaktoru. Za druhé, použití stupně konverze nahrazuje speciální snímače pro zpětnovazební řízení, pokud se týká kvalitativních vlastností (koncového) produktu. Za třetí, použití stupně konverze nahrazuje fyzický
10 čas pro časování operací vztažených na proces, jako je otevírání a uzavírání ventilů, řízení přívodu/odbírání tepla, dávkování reakčních činidel a podobně. Za čtvrté, deduktivní snímač umožňuje přesný odhad vývoje dávky a tudíž umožňuje přesně odhadovat potřebný ochlazovací profil od aktuálního
15 okamžiku do ukončení dávkového procesu.

V předkládaném vynálezu jsou teplota reakční směsi a integrální bilance (spotřeba a tvorba) tepla využívány jako dvě nezávislé proměnné procesu. Tento přístup poskytuje
20 uživateli volnost při specifikování dávkového procesu tím způsobem, že definuje vývoje kterékoliv proměnné během postupu dávkového procesu a vykoná je pod přísným, vysoce výkonným řízením. Protože stupeň konverze monomeru je úměrný integrální bilanci (spotřebě a tvorbě) tepla pro mnoho
25 důležitých polymerů včetně PVC, řízení těchto dvou proměnných poskytuje uživateli nezávislou kontrolu dvou základních determinantů kvality produktů. Dokonce ještě důležitější je, že takové řízení plně definuje uvolňování tepla v každém okamžiku postupu dávkového procesu, což umožňuje lepší
30 využití dostupné chladicí kapacity prostřednictvím spolehlivějšího plánování a časování. Pro řízení teploty a

integrální bilance tepla nezávisle, navržený postup podle vynálezu manipuluje s množstvím tepla přidávaného do nebo odebíraného z reakce a s množstvími iniciátoru (iniciátorů) a inhibitoru, přidávaných během postupu dávkového procesu.

5 Předkládaný vynález zlepšuje výtěžnost PVC nebo polymeračního výrobního zařízení dvěma způsoby. Za prvé, tento přístup poskytuje lepší zpětnovazební řízení jednotlivých reaktorů, což snižuje nejistoty v reakční době a spotřebě chladicího média v jakémkoliv daném okamžiku.

10 Protože výhoda plánování a časování v rozsahu výrobního zařízení je nezávislá na kvalitě odhadů, které byly použity pro vytvoření plánu a časování, je lepší řízení reaktorů technologickým umožněním lepšího plánování a časování. Přesněji tedy spolehlivější odhady spotřeby chladicího média

15 umožní plánovači provozovat výrobní zařízení s menšími rezervami chladicí kapacity aniž by byla nepříznivě ovlivněna bezpečnost výrobního zařízení, což zvyšuje výtěžnost tohoto výrobního zařízení. Řídící zařízení podle předkládaného vynálezu může urychlovat nebo zpomalovat reakci bez změny

20 teploty reakční směsi. Následně tedy předkládaný vynález může snížit dobu reakce bez nepříznivého ovlivnění kvality produktu při vzetí do úvahy výhody jakékoliv dostupné chladicí kapacity. Za druhé, tento přístup zlepšuje konsistenci produktu v jednotlivých dávkách a umožňuje

25 zpřísnit specifikace produktu, což rovněž dále zvyšuje výtěžnost, prostřednictvím omezení výroby produktů mimo specifikaci.

30 Je velmi dobře známo, že určité polymery by mohly být vyráběny reakcemi probíhajícími při větších rychlostech bez jakéhokoliv podstatného snížení jejich kvality, pouze pokud

reaktory mohly zpracovat zvýšený tepelný průtok. Dobrým příkladem je výroba PVC suspenzním procesem. Výrobní zařízení pro PVC v Kanadě používá vody z řeky jako chladicího média pro své reaktory. V zimě, když teplota vody je kolem 0,6 stupňů Celsia (to jest přibližně 33 stupňů Fahrenheita), zabere dokončení dávky přibližně 5 hodin. V létě ale, když teplota vody v řece stoupne na 22 stupňů Celsia (to jest přibližně 72 stupňů Fahrenheita), stejná dávka se srovnatelnou kvalitou produktu zabere 8 až 9 hodin, protože pokles v dostupné chladicí kapacitě nutní provozovatele výrobního zařízení zpomalit reakční rychlost prostřednictvím použití menších množství iniciátoru.

Ve shora uvedeném příkladu je zdroj chladicího média v podstatě neomezený a omezení vzniká z jeho zvýšené teploty a omezené průtoku cirkulující vody skrz plášť reaktoru. Dalším příkladem je výrobní zařízení pro PVC, které používá chlazenou vodu jako chladicí médium pro své plášťové reaktory. Protože chlazená voda je drahá a její zdroj je omezený, je voda opouštějící reaktor částečně recyklována jejím smícháváním s čerstvě chlazenou vodou přicházející přímo z chladících věží. To vytváří proměnlivé výrobní prostředí, ve kterém dostupnost chlazené vody závisí na počtu právě probíhajících dávkových procesů, protože některé reaktory jsou vždy nakládány nebo vykládány, zatímco jiné jsou dočasně mimo provoz z důvodů čištění a údržby. Rovněž teplota chlazené vody může kolísat s počasím a případně s denní dobou.

Před spuštěním dávkového procesu provozovatel musí učinit rozhodnutí o tom, jak rychle tento proces může spustit bez rizika ztráty kontroly nad teplotou, a musí zvolit vhodné

množství iniciátoru (iniciátorů), které je potom přidáno do dávky v reaktoru. Do určité míry je toto rozhodnutí pouhým hádáním, protože operátor musí uvážit účinky postupného vytváření usazenin na stěnách reaktoru při odebírání tepla.

5 Jakmile je reakce spuštěna, může operátor v principu tuto reakci urychlovat nebo zpomalovat ručně prostřednictvím přidávání iniciátoru respektive inhibitoru, ale to se za běžných okolností neprovádí. Jakmile je spuštěn, je dávkový proces provozován v otevřené smyčce bez dalšího ovlivňování
10 operátorem, až do jeho dokončení, které je indikováno poklesem tlaku v reaktoru.

Při dané nejistotě týkající se chladicí kapacity, která bude skutečně dostupná během probíhajícího dávkového procesu, a nemožnosti přesně stanovit dávkování iniciátoru
15 předem a opravit toto dávkování později, musí operátor pracovat bezpečně a provádět rozhodnutí, která v průměru mohou být celkově konzervativní. To znamená podstatný zásah pro celkovou výtěžnost reaktoru. Zjevně by lepší řízení skutečných rychlostí jednotlivých reaktorů ve výrobním
20 zařízení umožnilo snížit současné technologické hranice bez snížení bezpečnosti výrobního zařízení, čímž by se zvýšila možnost použít přísnější optimalizaci v měřítku výrobního zařízení.

Pokud by bylo dosaženo lepšího řízení nad postupem
25 reakce, pak by bylo možné uvažovat o více neobvyklých způsobech pro zvýšení výtěžnosti výrobního zařízení. V současnosti pro každou reakci operátor definuje její rychlost předtím, než začne, prostřednictvím vypuštění určitého množství iniciátoru (iniciátorů) do směsi. Mohl by zde ale
30 existovat určitý prostor pro příležitost, když je dostupné

velké množství chlazené vody, řekněme na dvě hodiny, protože několik jiných reaktorů dokončilo dávkové procesy současně a musí být vyloženy nebo opětovně naplněny. Dávkové řídicí zařízení by potom operátorovi mohlo umožnit dočasně urychlit probíhající reakce na dobu dvou hodin, aby se využila výhoda neočekávaně dostupné chladicí kapacity, a potom je uvést zpět na původní rychlost aplikací vhodného množství inhibitoru bez narušení teploty reakční směsi, což by dále zvýšilo výtěžnost výrobního zařízení.

Tím, že dávkový proces sleduje dané profily teploty a rychlosti konverze, se nejen zlepšuje kvalita a konzistence jednotlivých dávek procesu, ale, což je možná ještě důležitější, je umožněno rovněž provádět přesné odhady o uvolňovaném teplu během dávkového procesu. Důsledkem je, že je možné provádět spolehlivá a ospravedlnitelná opatření pro očekávaný chladicí výkon potřebný pro udržení směsi na požadované teplotě celou dobu až do ukončení reakce, což umožňuje lépe využít dostupné zdroje výrobního zařízení prostřednictvím mnohem spolehlivějšího plánování a časování v měřítku výrobního zařízení.

Zlepšené řízení dávkového procesu podle předkládaného vynálezu spolu s výslednou optimalizací v měřítku výrobního zařízení, kterou umožňuje, může mít zásadní ekonomický dopad na výkon výrobního zařízení. Při uvažování, například, výrobního zařízení s patnácti reaktory pracujícími tak, že rezerva chladicí kapacity je 10 procent, lze vyvodit následující. Protože dostupnost chlazení je omezujícím faktorem, snížení rezervy o čtyři procenta by zvýšilo jeho výstup o šest procent, což je téměř rovnocenné přidání

dalšího reaktoru do výrobního zařízení, bez nákladů na jeho postavení a údržbu.

Předkládaný vynález bude níže poněkud podrobněji popsán prostřednictvím příkladných provedení ve spojení s odkazy na připojené výkresy.

Přehled obrázků na výkresech

Obr.1 znázorňuje schéma běžného řídicího zařízení polymeračního reaktoru pro řízení dávkového procesu;

Obr.2 znázorňuje schéma řídicího zařízení polymeračního reaktoru podle předkládaného vynálezu pro řízení dávkového procesu;

Obr.3 v principu znázorňuje neschopnost existujících přístupů založených na řízení reakční teploty T_r vyloučit poruchové veličiny v procesu, ovlivňující rychlost konverze, přičemž tento obrázek naznačuje polymerační reakci prostřednictvím termokinetických rovnic s přidanou smyčkou řízení teploty;

Obr.4 znázorňuje zlepšené zpětnovazební řízení teploty pro dávkový polymerační proces, ve kterém odvozená informace o integrální bilanci tepla slouží jako dopředný signál pro lepší řízení teploty, přičemž běžné řídicí zařízení reakční teploty podle dosavadního stavu techniky nemá takový dopředný signál;

Obr.5 znázorňuje současné zpětnovazební řízení teploty a integrální bilance tepla pro dávkový polymerační proces;

Obr.6 ilustruje způsob odhadování toku integrální bilance tepla z odebíraného tepelného toku a teploty směsi, přičemž ve skutečnosti teploty mohou být současně měřeny ve více bodech pro lepší vyjádření distribuované povahy chemického procesu;

Obr.7 znázorňuje vnitřní vazby proměnných procesu a jejich dynamických proměnných, jak jsou popsány termokinetickými rovnicemi.

Příklady provedení vynálezu

Obr. 1 znázorňuje běžné řídicí zařízení (regulátor) 8 dávkového procesu. Zlepšené, vysokovýkonné řídicí zařízení (regulátor) 10 je znázorněno na obr. 2. Takové řídicí zařízení potřebuje více informací o řízeném procesu. Je třeba se vyrovnat s nelineární povahou dávek, která si žádá odpovídající, specializovaný regulátor pro každý polymerační proces, s obchodními nároky preferujícími jeden regulátor snadno uzpůsobitelný pro tak velké množství procesů, jak jen je možné. Nejlepším postupem je převést obecnou různost polymeračních procesů na jeden společný jmenovatel.

Je velmi nepravděpodobné, že by někdy mohly existovat speciální snímače pro všechny druhy konečných vlastností různých polymerů. Pokud snad bude existovat obecný regulátor pro dávkové polymerační procesy, pak bude muset spoléhat na deduktivní snímání vlastností, namísto jejich přímého měření, přičemž takový deduktivní snímač bude muset být

neoddělitelnou součástí konstrukce řídicího zařízení (regulátoru). Snímač bude vyvozovat (dedukovat) své hodnoty z měření obecných fyzikálních proměnných, jako jsou teploty, tlaky, průtoky a podobně, které lze snadno získat z běžných snímačů. Nastavení tohoto snímače bude tvořit hlavní součást ladění řídicí jednotky pro určitou aplikaci.

Předkládaný vynález je použitelný pro rozsáhlou třídu polymeračních procesů s praktickým významem. Tento přístup je založen na zjištění, že pro mnoho procesů je stupeň konverze monomeru na polymer úměrný celkovému množství tepla uvolněného reakcí od jejího začátku. Protože rychlost konverze, vynesena jako funkce času, má silný vliv na molekulární vlastnosti výsledných polymerních řetězců a tudíž na vlastnosti koncového polymeru, zajištění opakovatelných časových profilů rychlostí konverze je jedním z klíčových předpokladů konzistentní kvality produktu. Není možné snadno měřit stupeň konverze, ale je možné vyvinout algoritmy, které umožní vypočítat odhady celkového reakčního tepla (tepelné bilance), což může být dále využito jako deduktivní proměnná procesu pro zpětnovazební řízení. Na rozdíl od stupně konverze jsou měřicí postupy potřebné pro monitorování tepelných stavů reakce nezávislé na určitém polymeru, který je vyráběn, což má za následek výhodný obecný přístup.

Za prvé, je zde tedy způsob odhadu integrální bilance tepla polymerační reakce a jejího použití pro řízení. Zpočátku jsou zjevná dvě použití deduktivní integrální bilance tepla. Za prvé, integrální bilance tepla je použita jako další stavová proměnná procesu a je použita pro zlepšené řízení teploty reakční směsi v druhé fázi polymeračního procesu, což je nazýváno jako režim sledování teploty

řídícího zařízení. (první režim je nazýván startovacím režimem, který poskytuje přechod na režim sledování teploty, když řídící zařízení přepíná z ohřívání směsi na její ochlazování.)

5 Obr. 3 znázorňuje běžný řídící systém 30 mající zpětnou vazbu 52 teploty reakční směsi. Z důvodů jasného výkladu je chování procesu charakterizováno termokinetickým modelem, který odráží znalosti o tom, jak proces probíhá. Použití snímače pro řízení polymeračního procesu, jak je
10 znázorněno na obr. 3, je možné pro mnoho polymerů, ale má omezenou hodnotu pro jiné polymery. Pokud má být teplota T_R reakční směsi udržována konstantní během dávkového procesu, jako v případě, například, výroby PVC, pak úloha teplotního řízení je spíše jednoduchá. Jinými slovy, pro případ výroby
15 PVC, po spuštění zde není žádný požadovaný teplotní profil se vzestupnými a sestupnými křivkami, které by měl řídící systém sledovat. Není potom překvapením, že běžné řídící systémy mohou udržovat teplotu v rozmezí $\pm 0,3$ stupně Celsia ($0,5$ stupně Fahrenheita) a experti na výrobu PVC neočekávají od
20 přesnějšího teplotního řízení jakákoliv zlepšení kvality výrobku.

 Obr. 4 znázorňuje systém 40 mající zlepšení podle vynálezu. Toto zlepšení spočívá ve zpětné vazbě 53 k řídícímu
25 zařízení 29, která informuje toto řídící zařízení 29 o očekávaných změnách v integrální bilanci tepla, způsobených poruchovými veličinami v procesu předtím, než tyto poruchové veličiny nepříznivě ovlivní teplotu reakční směsi. Tato
 informace je získána z modelu 25 procesu, který je součástí deduktivního snímače. Za druhé, integrální bilance tepla
30 složí jako "vnitřní čas" reakce, který lépe odráží skutečný

postup, než běžný fyzikální čas, a který je použit v této souvislosti pro lepší časování operací, které mají být vykonány během dávkového procesu. Například časování míchání nebo přimíchávání příměsí není odvozeno od běžného fyzikálního času daného hodinami, ale od integrální bilance tepla a je tudíž implicitně nebo samozřejmě spojeno se stupněm konverze monomeru.

Obr. 3 znázorňuje zpětnou vazbu 52 pro vykonání dávkového procesu ve formě teplotního profilu $H(t)$, který nemůže eliminovat vliv poruch procesu na integrální bilanci tepla a tudíž na kvalitu produktu. Ve skutečnosti není pro přímé měření v procesu k dispozici přístupné nic jiného, než teplota T_R reakční směsi. Ve středu zájmu je stupeň konverze δ monomeru a integrální bilance H tepla.

Blok 12 systému 30 je model procesu pro vytváření tepla v reaktoru. Vstup 13 indikuje množství tepla, které má být odebráno z reakce v reaktoru. Vstup 14 indikuje množství tepla vytvořeného reakcí konverze monomeru na polymer, nebo bilanci tepla reakce (která může být považována za zahrnující poruchové veličiny 31). Rozdílový zesilovač 15 vydává rozdíl vstupů 13 a 14. Tento výstup je upraven na vhodné měřítko prostřednictvím modulu $(1/c \cdot \rho)$ 16. c a ρ mohou záviset na H , přičemž c je tepelná kapacita a ρ je měrná hmotnost reakční směsi. Tento na měřítko převedený výstup je rychlostí teplotních změn dT_R/dt . Tato rychlost je zpracovávána integrátorem 17, který na výstupu vydává hodnotu T_R , která je teplotou reakční směsi. T_R je vstupem do bloku 18 určení rychlosti vytváření tepla. Tento blok 18 má integrální funkci h reakce, která je aplikována na reakční teplotu T_R a integrální bilanci tepla H . Vstupem jsou rovněž aktuální

poruchové veličiny 31 procesu pro reaktor, které mohou zahrnovat vlivy inhibitoru nebo iniciátoru, stav reaktoru a další faktory. Výstupem bloku 18 je rychlost vytváření tepla dH/dt v reaktoru. Tento výstup je integrován integrátorem 19 pro vytvoření hodnoty integrální bilance H tepla. Výstup H je veden zpět do bloku 18, aby byl zpracován jako funkce h . Výstup H je rovněž veden do funkčního bloku 20, který mění nebo vypočítává toto určené množství tepla na stupeň konverze δ monomeru na polymer v reaktoru, což je potom výstupem 21.

Systém 30 řídí reakci v souladu s požadovanou teplotou $T_{Rdesired}$, která je přiváděna společně se skutečnou nebo vypočítanou integrální bilancí tepla do sčítačky 22. Výstup sčítačky 22 je rozdíl skutečné a požadované reakční teploty, který je veden do řídicího zařízení (regulátoru) 23, které určuje množství tepla, které by mělo být odebráno, což je vlastně řízení ochlazovací vody nebo teploty reakce. Blok 24 označuje zpětnovazební řízení teploty v řídicím systému 30 polymeračního procesu.

Obr. 4 znázorňuje systém 40, který ukazuje jak je řízení teploty T_R reakční směsi zlepšeno prostřednictvím informování řídicího zařízení 29 o očekávaných změnách v integrální bilanci H tepla - Zde se zpětnovazební řízení teploty provádí prostřednictvím dopředného signálu 53, který je hodnotou integrální bilance H tepla z integrátoru 19 modelu 25 reakce procesu. Pro měření je dostupná pouze reakční teplota T_R . Aby se odhadla hodnota H , deduktivní snímací systém 40 zahrnuje model 25 procesu, který je udržován v synchronu se skutečným polymeračním procesem v bloku 26. Model 25 procesu není vystaven poruchám a ani není modelem reakční teploty T_R procesu, která je využívána jako

zpětnovazební signál pro ovlivňování modelu 25 procesu. Ale podobně jako v bloku 12 znázorněném na obr. 3, je polymerační proces 26 ovlivňován reakční teplotou T_R . Dopředný signál 53 indikující množství reakčního tepla modelu 25 je přiveden do řídicího zařízení 29. Do řídicího zařízení 29 je rovněž přiveden rozdíl 48 mezi požadovanou reakční teplotou 47 a skutečnou reakční teplotou 52 ze sčítačky 22.

V předkládaném vynálezu, znázorněném na obr. 5, má systém 50 zpětnovazební řízení reakční teploty T_R 52 a integrální bilance H 53 tepla (to jest hodnota, která indikuje stupeň konverze). To představuje modifikaci simulace reakce, to jest polymeračního procesu 26 a modelu 25 reakce procesu, takže bude umožněno přímé (on-line) dávkování 32 iniciátorů (a případně rovněž inhibitoru, pokud si to uživatel přeje nebo potřebuje) jako další ovládaná proměnná vedle průtoku chladicího média do reaktoru. To poskytuje další stupeň volnosti, potřebný pro řízení současně a nezávisle jak teploty reakční směsi tak i rychlosti konverze, které jsou nezávislé, přestože jsou vzájemně svázány stavovými proměnnými polymeračního procesu. Požadovaná reakční teplota $T_{R_{desired}}$ 47 je vstupem do sčítačky 22 a je kombinována s reakční teplotou T_R 52 přiváděnou ve zpětné vazbě z výstupu bloku 26 polymeračního procesu. Výstupem sčítačky 22 je rozdíl 48 mezi požadovanou reakční teplotou 47 a skutečnou reakční teplotou T_R 52 a je veden do řídicího zařízení (regulátoru) 35. Požadovaná integrální bilance (spotřeba a tvorba) $H_{desired}$ tepla 54 a skutečná integrální bilance (spotřeba a tvorba) H tepla 53 z výstupu integrátoru 19, jak je indikováno deduktivním snímáním modelu 25 procesu, jsou vedeny do sčítačky 36, která vydává rozdíl 55 požadované

a odhadované skutečné integrální bilance (tvorby) H 54 respektive 53 tepla. Tento rozdíl 55 je přiveden do řídicího zařízení 35. Více-proměnné, prediktivní řídicí zařízení 35 dávkového procesu řídí dvě proměnné podle jejich

5 odpovídajících nastavených bodových profilů nezávislým způsobem s využitím deduktivního snímače 46 podobného snímači, který byl u systému 40 na obr. 4, pro odvození rychlosti 14 vytváření tepla, tedy hodnoty dH/dt . Dva výstupy T_c 58 a f_c 61 řídicí jednotky 35 manipulují s množstvím

10 tepla, q_{tot} , přes vedení 13, odebíraným reakcí prostřednictvím systému ochlazování/ohřívání reaktoru, a s množstvím iniciátoru/inhibitoru, D , přes vedení 32, přidávaného do reaktoru. Řídicí zařízení 35 počítá s různými aktivitami různých iniciátorů nebo inhibitorů, které mohou být použity.

15 Model 25 procesu je součástí deduktivního snímače 56 systému 50.

Měl by být zaznamenáno, že výše je uveden zjednodušený popis řídicího zařízení 35. Jeho skutečná realizace zahrnuje více či méně podstatné proměnné. Například

20 q_{tot} zahrnuje všechny proměnné týkající se odběru tepla v procesu, které umožňují manipulaci, včetně průtoku vody skrz ochlazovací plášť 59 a chladicí hady, a teploty ochlazovací vody na vstupu 38 a výstupu 40, a podobně, reaktoru 60 (viz obr. 6).

25 Je potřebné minimální přístrojové vybavení reaktoru 60. Je třeba převést termokinetické rovnice procesu 26 polymerační reakce do formy modelu 25, který je vhodný pro řízení v reálném čase. Jak model 25 procesu tak i model 49 reaktoru zahrnují parametry, které musí být odhadnuty na

30 skutečném procesu 26, některé z nich nepřímo (off-line),

některé přímo (on-line). Aby to bylo možné provést, je třeba shromažďovat údaje o určitých proměnných procesu. Minimální sada měřených proměnných je schematicky znázorněna na obr. 6. Jsou jimi: T_r - teplota reakční směsi z teplotního snímače 27 v reaktoru 60; p - tlak reakční směsi z tlakového snímače 28 v reaktoru 60; T_{cr} - teplota vstupující ochlazovací vody z teplotního snímače 38 v přívodní trubce 38 pro vodu do reaktoru 60; T_{co} - teplota 58 vystupující ochlazovací vody ze snímače 39 ve výstupní trubce 40 pro vodu z reaktoru 60; f_c - průtoková rychlost 61 ochlazovací vody z průtokového snímače 41 v trubce 38; P_a - míchací výkon požadovaný pro otáčení míchacím listem nebo míchadlem 42 ve směsi 43 v reaktoru 60 při rychlosti n otáček za minutu, ze snímače 44. Ventil 45 zajišťuje vstup ochlazovací vody a výstup vody z pláště 59 reaktoru 60. Čerpadlo 46 zajišťuje průtok ochlazovací vody do a z pláště 59 reaktoru 60. Tyto měřené proměnné jsou přiváděny do modelu 49 reaktoru. Délka indukční periody T_i je zadána do modelu 49 reaktoru. Tato T_i je časovou periodou nebo zpožděním před začátkem polymerační reakce poté, co iniciátor již byl přidán do směsi dávky. Do bloku 25 je přiváděn údaj o množství tepla odebraného z reakce, q_{tot} , přičemž tento blok nebo model 25 procesu pracuje s termokinetickými rovnicemi. Vstupem do bloku 25 je rovněž hodnota T_{ro} , která představuje počáteční teplotu reakce. Z bloku 25 je vydávána hodnota H , která je integrální bilancí (spotřebou a tvorbou) tepla 53. Stupeň konverze δ 21 monomeru směsi dávky je vyvozován z integrální bilance H 53 tepla.

Pro vývoj modelu 49 reaktoru lze doporučit použití plánku reaktoru (nebo alespoň náčrtku jeho fyzického

uspořádání a rozměrů) a rovněž s umístěním a kvalitou snímačů.

5 Teplo, které polymerační reakce vytváří, musí být odebíráno z dávkového rektoru prostřednictvím jeho ochlazovacího systému. Pokud reakce nemá skončit nadměrným stoupáním teploty, musí být její rychlost tvorby tepla (spotřeby tepla) sledována rychlostí, se kterou ochlazovací systém odebírá teplo z reaktoru. Protože rychlost vytváření tepla je úměrná rychlosti, se kterou je monomer konvertován na polymer, je to právě kapacita ochlazovacího systému, která 10 nakonec omezuje výtěžnost reaktoru. Optimální využití dostupné ochlazovací kapacity výrobního zařízení se tudíž stává určujícím ukazatelem jeho výtěžnosti.

15 Přímou výhodou použití řídicího zařízení podle předkládaného vynálezu oproti existujícím řešením je dosažení zpětnovazebního řízení dávkového procesu jak pokud se týká jeho rychlosti reakce tak i teploty směsi a tudíž zpřísnění výrobních specifikací, které jsou konstantně ohrožovány neočekávatelnými změnami v aktivitě iniciátoru a přiváděných 20 nečistot. Postupy, které mají být použity s navrženým řídicím zařízením, jsou mnohem přesnější, protože kromě teplotního profilu rovněž specifikují požadovaný profil stupně konverze monomeru během celého dávkového procesu. Protože pro třídu polymerů specifikovaných v přístupu podle obr. 4 je stupeň konverze δ úměrný integrální bilanci H tepla, mohou být 25 postupy procesu definovány přímo vzhledem k H 53, a ne podle δ , jako funkci času jak je ilustrováno v přístupu podle obr. 5. To zjednodušuje nastavení řídicího zařízení, protože zde není nutnost vyvinout nelineární transformační funkční blok 30 20 pro funkci $f(H)$, který je znázorněn na obr. 3.

Níže jsou uvedeny termokinetické rovnice (4) a (5), modelované prostřednictvím bloku 25, polymerační reakce. Polymerační reakce jsou exotermické. Množství tepla, které je uvolňováno v jakémkoliv daném okamžiku, ovšem není konstantní v průběhu reakce, ale mění se v čase jako funkce teploty reakční směsi a stupňů konverze jednotlivých monomerů aktivních v reakci. Pokud se vyjádří množství tepla vytvořené jedním krychlovým metrem reakční směsi za sekundu jako:

$$(1) \quad h(T_R(t), \delta_1(t), \dots, \delta_N(t))$$

kde $\delta_1(t), \dots, \delta_N(t)$ jsou stupně konverze různých monomerů v čase t , a $T_R(t)$ je teplota reakční směsi, a toto množství bude nazváno rychlost tvorby (spotřeby) tepla. Rozměr této hodnoty je $[J/m^3.s]$.

Lze celkové množství tepla, $H(t)$, vytvořené (spotřebované) od začátku reakce v okamžiku $t = 0$, získat integrováním diferenciální rovnice:

$$(2) \quad dH(t)/dt = h(T_R(t), \delta_1(t), \dots, \delta_N(t))$$

přičemž tato veličina bude nazvána integrální bilance (spotřeba a tvorba) tepla reakce a její rozměr je $[J/m^3]$.

Existuje rozsáhlá třída polymeračních reakcí s praktickým významem, které zahrnují buď pouze jeden monomer nebo více monomerů reagujících se stejnou kinetickou rychlostí. Nebo, pro definování takové třídy v nejobecnějším smyslu, lze říci, že její prvky jsou odlišeny tím, že mají jednu reakci vytvářející teplo, která může být řetězením

jednoho nebo více monomerů (jako je případ, například, výroby nylonu). Pro takové reakce je jejich jediný stupeň konverze $\delta(t)$ vyjádřen následujícím jednoprvkovým vztahem:

$$(3) \quad \delta(t) = f(H(t))$$

s integrální bilancí tepla $H(t)$, přičemž rovnice (2) může být napsána následovně:

$$(4) \quad dH(t)/dt = h(T_R(t), H(t))$$

Funkce $h(T_R(t), H(t))$ je nazvána bilance (spotřeba a tvorba) tepla a je specifická pro určitý proces. Integrální uvolněné (spotřebované) teplo $H(t)$ společně s teplem odebraným z reakční směsi 43, $q_{tot}(t)$, definuje teplotu směsi, $T_R(t)$:

$$(5) \quad c(t) \cdot p(t) \cdot dT_R(t)/dt = h(T_R(t), H(t)) - q_{tot}(t)$$

Zde $c(t)$ a $p(t)$ označují tepelnou kapacitu respektive měrnou hmotnost. Obě tyto hodnoty se obecně mění v čase, jak reakce postupuje. Jejich rozměry jsou $[J/kg \cdot ^\circ K]$ respektive $[kg/m^3]$.

$q_{tot}(t)$ je tok odebraného tepla, to jest celkové množství tepla odebraného z $1 m^3$ směsi 43 za sekundu z vnějších zdrojů prostřednictvím všech prostředků, to jest prostřednictvím chlazení, tepelných ztrát a podobně. Pokud je teplo přidáváno, například prostřednictvím míchání míchadlem

42, $q_{\text{tot}}(t)$ může být záporné. Rozměr této veličiny je $[\text{J}/\text{m}^3 \cdot \text{s}]$.

Rovnice (4) a (5) jsou označovány jako termokinetické rovnice dané polymerační reakce. Obr. 7 v bloku pojmenovaném "model 25 reakce" znázorňuje schéma aplikace těchto rovnic a jejich dynamických proměnných. Toto schéma znázorňuje jejich vnitřní strukturu a vzájemné vazby proměnných procesu. Na obr. 7 jsou rovněž znázorněny rovnice charakterizující teplo odebrané z reaktoru 60, které jsou vysvětleny níže.

Aby termokinetické rovnice byly platné ve výše uvedené formě, musí být reakční směs 43 dokonale promíchána tak, že její teplota $T_R(t)$ je jednotná v celém objemu dávky v reaktoru. Pro některé procesy může být obtížné tento předpoklad dodržet, zejména ke konci reakce, když směs může gelovat nebo dokonce skelnatět. V takových případech musí být model se soustředěnými parametry rovnic (4) a (5) nahrazen modelem s distribuovanými parametry. Pro PVC vyráběné s použitím suspenzního procesu udržuje velký objem vody v reaktoru 60 viskozitu směsi na nízké hodnotě a umožňuje dobré míchání, což opravňuje k použití soustředěného modelu. To do značné míry rovněž potlačuje účinky postupující polymerace na měrné teplo a měrnou hmotnost směsi 43. Tudíž lze předpokládat, že $c(t)$ a $p(t)$ budou konstantní v celé dávce. Navíc pro zjednodušení značení je možné vypustit čas t z určitých symbolů v rovnicích a na výkresech.

Podobné předpoklady jsou rovněž aplikovatelné pro mnoho dalších polymeračních procesů. Pokud některé z těchto předpokladů aplikovatelné nejsou, potom je možné modifikovat matematický tvar exotermických rovnic pro splnění formálních

náležitostí, přičemž je zachována celková myšlenka jejich užití.

Aby byly termokinetické rovnice aplikovatelné pro deduktivní snímání a řízení, je třeba určit bilanci (spotřebu a tvorbu) tepla $h(T_R(t), H(t))$ a celkové množství q_{tot} tepla odebraného z procesu. Nyní bude odložen výklad prvního problému a bude nejprve vysvětleno jak získat druhou hodnotu.

Teplo je obvykle odebíráno několika způsoby současně, přičemž hlavním způsobem je odběr prostřednictvím ochlazovacího systému. Ostatními způsoby jsou tepelné ztráty do okolí v důsledku nepřítomnosti izolace na reaktoru, tepelné úniky v plynech záměrně uvolňovaných pro udržení tlaku v reaktoru, teplo absorbované přidávanými reakčními činidly pro uvedení těchto činidel na teplotu směsi, a podobně. Mohl by sem patřit rovněž tepelný tok vstupující do reakce, ovšem nejvíce patrně prostřednictvím energie potřebné pro míchání směsi 43. Při uvažování, že celkové teplo bude součtem tří hlavních složek:

$$q_{\text{tot}} = q_C + q_A + q_M$$

kde

q_C je teplo 62 odebírané prostřednictvím ochlazovacího systému reaktoru,

q_A je teplo 63 unikající do okolí skrz izolaci reaktoru (pokud zde vůbec nějaká izolace je, a

q_M je "všeobjímající" termín začleněný pro započítání nejrozličnějších dalších cest úniku tepla, označovaný jako roztěkané teplo 64.

V závislosti na určitém procesu mohou být některé z nich dostatečně významné k tomu, aby byly explicitně modelovány. Součet q_c , q_A a q_M je proveden prostřednictvím součtový zesilovače 68 a je výstupním q_{tot} signálem 13 modelu 25 reakce, který je přiveden do zesilovače 15.

Tepelný tok 62 procházející stěnou reaktoru ze směsi do ochlazovacího média je:

$$q_c = R_c(H, f_c) a_c (T_R - T_c) / V$$

kde

$R_c(H, f_c)$ je součinitel 65 přestupu tepla ze směsi 43 do chladicího média, který obecně závisí na viskozitě směsi, která je dále vztažena na stupeň konverze a tudíž také na integrální bilanci (spotřebu a tvorbu) tepla H a rovněž na průtok 61 f_c chladicího média,

T_R je teplota 52 reakční směsi

T_c je teplota 58 chladicího média

a_c označuje tu oblast stěny, přes kterou probíhá přenos tepla, a

V je objem směsi 43.

Ačkoliv je shora uvedený výraz správný, nemůže být použit tímto jednoduchým způsobem pro vlastní výpočet hodnoty q_c , protože ochlazovací teplota T_c v plášti není jednotná. Nicméně ale ve spojení s termokinetickými rovnicemi tento výraz koncepčně vysvětluje, jak řídicí zařízení 35 ovlivňuje polymerační proces prostřednictvím nastavování ochlazovací teploty 58. Protože skutečná ochlazovací teplota se zvyšuje,

jak ochlazovací médium protéká skrz plášť, může být průměrná teplota také snížena prostřednictvím zvýšení průtoku 61 f_c ochlazovacího média a obráceně.

Podobná rovnice platí pro tepelný tok 63 unikající do okolí:

$$q_A = R_A(H, f_c) a_A (T_R - T_A) / V$$

$R_A(H, f_c)$ je součinitel 66 funkce tepelného přenosu ze směsi 43 do okolí. Samozřejmě, že neexistuje žádný způsob manipulace s teplotou T_A okolí, ale její měření je použito jako dopředný signál 67 pro lepší odhad těchto tepelných ztrát 63. Pro vysoce viskózní směsi 43, výkon 44 potřebný pro jejich promíchávání může být dostatečně velký k tomu, aby vyžadoval vlastní explicitní vyjádření a začlenění do rovnice jako tepelný zdroj.

Model 25 reakce procesu je synchronizován se skutečným polymeračním procesem 26 prostřednictvím koordinátoru 69 stavu modelu. Synchronizace nebo koordinace je odvozována od porovnávacího signálu 70 z diferenční sčítačky 72, jejímiž vstupy jsou teploty T_R 52 z polymeračního procesu 26 a modelu 25 reakce, prostřednictvím koordinátoru 69, který vydává synchronizační nebo koordinační signál 71 do zesilovače 15 modelu 25 reakce procesu pro udržení stavu tohoto modelu 25 tak, aby byl stejný, jako je stav procesu 26.

Signál 58 ochlazovací teploty T_c a signál 52 reakční teploty T_R jsou sčítány zesilovačem 73. Výstup zesilovače 73 je násoben součinitelem a/V 74, kde a je povrchová oblast

reaktoru 60, ve které probíhá tepelná výměna. Výstup z tohoto bloku součinitele 74 společně se signálem 61 f_c a signálem 53 H vstupuje do bloku součinitele 65 přestupu tepla, který vydává signál 62 q_c .

5 Signál 67 teploty T_A okolí a signál 52 reakční teploty T_R jsou sčítány zesilovačem 75. Výstup zesilovače 75 je násoben součinitelem a/V 76, kde a je povrchová oblast reaktoru 60, ve které probíhá tepelná výměna. Výstup z tohoto bloku součinitele 76 společně se signálem 61 f_c a signálem 53 H vstupuje do bloku součinitele 66 přestupu tepla, který
10 vydává signál 63 q_A . Zesilovač 68 přijímá signál 62 q_c , signál 63 q_A a signál 64 roztěkaného tepla q_M a sčítá tyto signály dohromady na výstupní signál 13 q_{tot} přiváděný do zesilovače 15.

15 Běžné dávkové řízení nemůže zaručit konzistenci produktu. Lze předpokládat, že postup specifikuje požadovaný teplotní profil 47 dávkového procesu, $T_{Rdesired}(t)$, a běžný řídicí systém teploty zajišťuje, že tento profil je dokonale
20 dodržován a sledován skutečnou reakční teplotou T_R 52, to jest:

$$T_R(t) = T_{Rdesired}(t)$$

25 Nyní uvažujme dvě dávky, ve kterých bylo použito různých množství iniciátoru (katalyzátoru, jak je předepsáno signálem 32. Odlišná koncentrace iniciátoru způsobí, že tyto dvě reakce probíhají s různými rychlostmi a důsledkem je, že jejich bilance (spotřeba a tvorba) tepla a rovněž tedy
30 integrální bilance tepla se budou lišit:

$$h^{(1)}(T_R, H^{(1)}) \neq h^{(2)}(T_R, H^{(2)})$$

Jejich teplotní profily $T_R(t)$, ale stále mohou být udržovány dokonale shodné prostřednictvím řídicího systému teploty, který správně manipuluje s množstvími tepla $q^{(1)}_{\text{tot}}$ a $q^{(2)}_{\text{tot}}$, odebíraných ze směsi ochlazováním reaktoru, takže rovnice (5) odpovídající každé dávce udržují přes změny v $H^{(1)}(t)$, $H^{(2)}(t)$:

$$c.p.dT_R/dt = h^{(1)}(T_R, H^{(1)}) - q^{(1)}_{\text{tot}}$$

$$c.p.dT_R/dt = h^{(1)}(T_R, H^{(1)}) - q^{(1)}_{\text{tot}}$$

Zjevně, pokud systém nesleduje to, jak mnoho tepla bylo přidáno do nebo odebráno ze směsi v důsledku jeho řídicích akcí, pak dokonce není možné zjistit, že dva zdánlivě shodné dávkové procesy ve skutečnosti probíhají při odlišných rychlostech konverze.

Současným rozporem je to, že zpětnovazební řízení teploty dávkového procesu stále probíhá v otevřené smyčce dávkového procesu, pokud se týká integrální bilance $H(t)$ 14 tepla a rovněž pokud se týká stupně konverze $\delta(t)$ 21, jak je znázorněno na obr. 3. Poruchové veličiny 31 procesu, ovlivňující bilanci tepla $h(T_R, H)$, která dále rovněž ovlivňuje teplotu 52 směsi jsou vnímány řídicím zařízením 23 jako vnější poruchové veličiny 31 a jejich tepelné účinky jsou vyloučeny, zatímco volně mohou nechat kolísat $H(t)$ 53 a následně δ 21 bez jakékoliv korekce. Zpětnovazební provádění postupu dávkového procesu ve formě teplotního profilu nemůže

eliminovat vliv poruchových veličin procesu na $H(t)$ a tudíž na kvalitu produktu.

Konceptem zlepšeného řízení polymerace je hlavní myšlenka spočívající v uzavření smyčky s využitím integrální bilance 53 tepla, $H(t)$, která je výstupem z integrátoru 19, jako zástupce za požadovaný stupeň konverze $\delta(t)$, který by bylo možné jen velmi obtížně měřit přímo, což by vyžadovalo speciální snímače pro různé polymery. Integrální bilance tepla $H(t)$ se přímo vztahuje na kvalitu produktu. Pokud poruchové veličiny 31 nevstupují do nelineární funkce $f(H)$ 20, pak toto zjednodušení umožňuje přeskočení modelování bez degradace výkonu řízení. Například míchání reakční směsi 43 tak mohutné, že ovlivňuje rozložení délek polymerních řetězců, by mohl být příklad takové (poruchové) rušivé veličiny. Naproti tomu obr. 3 znázorňuje teplotní T_R zpětnou vazbu 52 a ne tepelnou H zpětnou vazbu 53.

Obvyklými poruchovými veličinami budou fluktuace aktivity iniciátoru nebo koncentrace monomeru, účinky nečistot a jiné, což se vše projevuje jako změny bilance tepla $h(T_R, H)$. Protože tepelná kapacita a hmotnost směsi jsou buď známými nebo snadno určitelnými veličinami, je $h(T_R, H)$ jediným neznámým chybějícím dílkem. Tato funkce dvou proměnných reprezentuje matematické vyjádření chemických skutečností o dané reakci a tudíž bude různá pro různé procesy. Některé ze skutečností reprezentují znalosti, které mohou být zjištěny předem (to jest nepřímě, tedy off-line) z příruček nebo starších údajů shromážděných o procesu. Některé jiné skutečnosti, jako je aktivita iniciátoru, závisí na mnoha neměřitelných ovlivňujících faktorech, takže jediným možným způsobem pro jejich zjištění, je buď jejich měření

nebo odhad přímo, tedy on-line, z údajů shromažďovaných, když dávkový proces, který má být řízen, již probíhá.

5 Odhadnout se spolehlivou přesností funkci dvou
proměnných s žádnou předběžnou informací o funkčním průběhu
procesu je nelehká úloha, jejíž vyřešení by vyžadovalo velká
množství údajů, větší než jaká kdy mohou být shromážděna z
jednoho dávkového procesu. Na druhou stranu, protože model je
potřebný pro řízení každé dávky, na které jsou údaje
shromažďovány, je nutno vytvořit $h(T_R, H)$ velmi časně pro
10 dávku, zatímco je dávkový proces v jeho úvodní fázi, bez
toho, aby byly k dispozici údaje z celého procesu. To
představuje dilema. Na jednu stranu je známo, že $h(T_R, H)$ bude
vždy obsahovat něco, co je specifické pro každý dávkový
proces, což implikuje, že $h(T_R, H)$ bude odhadováno nově v
15 každém procesu. Na druhou stranu je zjevné, že údaje
shromážděné na počátku jednoho procesu nebudou nikdy
postačující pro výpočet dobrého funkčního odhadu.

Odpověď pro vyřešení tohoto problému spočívá v
20 rozložení $h(T_R, H)$ do dvou složek. Jedna složka bude obsahovat
pouze znalost, která je trvalá a nezávislá na určitém
procesu. Tato složka může být zjištěna a vytvořena předem s
použitím jak chemických teorií tak i starších údajů o
procesu. Protože její výpočet je prováděn off-line, je možné
25 použít taková množství údajů, jaká si kdo přeje, a je možné
využít složitých, ale časově značně náročných výpočetních
algoritmů pro provedení těchto výpočtů. Druhá složka bude
obsahovat pouze znalost, která je platná pouze pro určitý
proces a dávku a tudíž musí být zjišťována on-line. Protože
30 množství dostupných výpočetních údajů je malé, musí být
množství této znalosti udržováno na absolutním minimu. Lze s

jistotou říci, že schopnost správného provedení rozložení $h(T_R, H)$ je klíčem k úspěchu pro navržený přístup. To je okamžik, ve kterém je potřebná expertiza v polymerační chemii pro vypořádání se s tímto rozložením, což potom představuje
 5 možnost jak reflektovat na chemickou realitu tak i přizpůsobit se využití omezených množství dat.

Bilance (spotřeba a tvorba) tepla $h(T_R, H)$ je rozložena. Z důvodů jasnějšího výkladu považujeme odhad $h(T_R, H)$ jako dvoukrokový problém. Prvním krokem je odhad toku
 10 integrálního tepla reakce, $dH(t)/dt$, při znalosti toku odebíraného tepla, $q(t)$, a teploty $T_R(t)$ směsi. Předpokládá se, že měrné teplo c a měrná hmotnost ρ směsi jsou známé.

Tento odhad je triviálním problémem, jakmile je znám $q(t)$. Protože teplot je integrální veličinou, nemůže být
 15 přímo sledováno a musí být vypočítáno z měření teploty a průtoku. Výpočet $q(t)$ pro daný reaktor je reálnou výzvou v tomto kroku. Tento výpočet je diskutován níže.

Druhým krokem je odhad $h(T_R, H)$ při znalosti toku integrálního tepla reakce, $dH(t)/dt$, z prvního kroku a
 20 teploty $T_R(t)$ směsi.

Nelehkou úlohou je funkční odhad zmiňovaný výše, který v předkládané aplikaci nemůže být vyřešen bez vhodného rozkladu. Zde je navrženo rozložit $h(T_R, H)$ jako výsledek dvou
 25 funkcí o jedné proměnné, $s_T(T_R)$ a $h_H(H)$, a konstanty s_0 měřítka:

$$(6) \quad h(T_R, H) = s_0 \cdot s_T(T_R) \cdot h_H(H).$$

30 přičemž $s_T(T_R)$ je navrženo v následující formě:

$$(7) \quad s_T(T_R) = e^{\frac{E \cdot (T_R - T_0)}{R_G \cdot T_R \cdot T_0}}$$

5 která může být podle Arrhenia oprávněna předpokladem,
že rychlost reakce se urychluje s teplotou reakce, přičemž
zde:

E je aktivační energie polymerační reakce,

R_G je univerzální plynová konstanta,

10 $T_R(t)$ je aktuální teplotní profil reakční směsi,

T_0 je konstantní referenční teplota,

$h_H(H)$ je jmenovitá rychlost tvorby tepla sledovaná
při referenční teplotě,

15 $s_T(T_R)$ je teplotní faktor v důsledku teplotních
rozdílů,

s_0 je "všeobjímající" faktor měřítka, nazývaný
reaktivita, pro započtení všech dalších změn.

20 Hodnota rovnic (6) a (7) spočívá v umožnění
transformovat údaje shromážděné během dávkových procesů,
jejichž teplotní profily se liší od jmenovitého profilu,
pokud byly shromažďovány za jmenovitých podmínek. Jakmile je
známo jak vyloučit účinky teplotních změn, mohou být použity
údaje z mnoha dávkových procesů pro odhad jmenovité rychlosti
25 tvorby tepla $h_H(H)$. Ovšem předtím, než je možné tyto účinky
vyloučit, je potřebná znalost o tom, jak eliminovat účinky
aktivity iniciátoru.

30 Za prvé je tedy potřebný výpočet účinků aktivity
iniciátoru. Mnoho polymeračních reakcí nebude pracovat vůbec
nebo pouze s velmi malými rychlostmi konverze, pokud nebude

použito iniciátoru (katalyzátoru). Protože aktivita iniciátoru definuje rychlost reakce, musí být její účinky poněkud zakódovány do $h_H(H)$. Aktivita iniciátoru je ale velmi nestálý faktor, který se může měnit od dávky k dávce a způsobovat velké fluktuace v chování dávky. Pokud nebudou explicitně vyloučeny účinky aktivity iniciátoru z historických údajů a tudíž ve skutečnosti nebudou tyto údaje převedeny na "standardní profil aktivity iniciátoru", mohl by být odhad $h_H(H)$ snadno pouhým jednoduchým průměrem, který není obzvláště vhodný pro jakýkoliv skutečný dávkový proces. Rovněž, pokud odhad $h_H(H)$ má být jakkoliv použit pro řízení, je nutno znát to, jak jej přizpůsobit pro každý budoucí dávkový proces s použitím jeho vlastního profilu aktivity iniciátoru.

Před začleněním účinků iniciátoru do $h_H(H)$ je třeba, aby bylo známých několik skutečností o tom, co se děje s iniciátorem v průběhu polymerační reakce. Přestože polymerační reakce nespotebouvají iniciátor, jeho koncentrace nicméně stále klesá během reakce, převážně ze dvou důvodů. Prvním důvodem je to, že bezprostředně po přidání iniciátoru do směsi se polymerační reakce nespustí okamžitě. Zdá se, že aktivita iniciátoru je dočasně zakryta nečistotami přítomnými ve vložených materiálech. Mezi chemickými inženýry je toto zpoždění (označované T_i) známé jako indukční perioda. Protože množství nečistot v dávce je v podstatě nemožné určit předem, jak indukční perioda tak i skutečná koncentrace iniciátoru při opravdovém začátku reakce dávkového procesu jsou neznámé, které musí být odhadovány přímo, to jest on-line.

Druhým důvodem je to, že mnoho iniciátorů je vysokoenergetickými sloučeninami a jako takové mají sklon k tomu být chemicky nestabilními. Během dávkového procesu iniciátor obvykle prochází spontánním rozpadem, který exponenciálně (nebo dokonce rychleji) snižuje jeho koncentraci ve směsi. Rovněž dlouhodobé skladování sloučenin iniciátorů má sklon k jejich degradaci, přičemž pokud není aktivita iniciátoru změřena před jeho použitím, bude tato degradace zavádět nezměřenou poruchovou veličinu do dávkového procesu.

Pro započítání těchto jevů se předpokládají následující tři skutečnosti.

Za první, jmenovitá rychlost tvorby tepla je úměrná koncentraci $[I]$ iniciátoru:

$$(8) \quad h_H(H) = [I] \cdot h_I(H)$$

kde $h_I(H)$ je rovněž nazvána jmenovitou rychlostí tvorby tepla, ale je normalizována v čase vzhledem jak k reakční teplotě tak i ke koncentraci iniciátoru.

Za druhé, polymerační reakce začíná pouze po indukční periodě. Z hlediska modelování je tato perioda čistým zpožděním.

Za třetí spontánní rozpad iniciátoru probíhá jako rovnice prvního řádu:

$$(9) \quad d[I](t) = -k_I(T_R(t)) \cdot [I](t)$$

Pokud je iniciátor přidáván během reakce, musí být rovnice upravena prostřednictvím vhodného hybného členu.

Jak implikuje rozklad (8), aby bylo možné vytvořit odhad $h_H(H)$, je třeba znát obě řešení $[I](t)$ rovnice (9) a odhad $h_I(H)$. Zatímco druhá veličina je vždy odhadována nepřímo, to jest off-line, a tudíž volba vhodného výpočetního postupu není omezena ani dostupností údajů ani požadavky reálného času; neplatí toto konstatování pro veličinu $[I](t)$. Jak bylo diskutováno výše, může se koncentrace iniciátoru měnit od dávky k dávce a tudíž musí být odhadována přímo, to jest on-line, pro dávkový proces ze skromných údajů v reálném čase, shromážděných v úvodu procesu. To značně omezuje současné možnosti pro volbu postupu.

Rovnice (9) je lineární, ale s časově proměnným koeficientem, protože kinetická rychlost $k_I(T_R(t))$ závisí na reakční teplotě $T_R(t)$. Její řešení:

$$[I](t) = [I](T_I) \cdot e^{-\int_{T_I}^t k_I(T_R(\tau)) d\tau} \quad (10)$$

ukazuje, že rozpad je exponenciální v čase a obecně se zrychluje s rostoucí teplotou. Pro úplné zjištění řešení je třeba určit počáteční koncentraci $[I](T_I)$ na konci indukční periody (to jest na začátku polymerační reakce), délku T_I indukční periody a proměnnou kinetickou rychlost $k_I(T_R(t))$. První dvě veličiny jsou skalární číselné hodnoty, které je možné snadno odhadnout, zatímco třetí je funkcí o jedné proměnné T_R .

Pokud o odhadované funkci není nic známo, pak je třeba sestavit její odhad prostřednictvím neparametrického způsobu odhadu. Pro zajištění spolehlivých výsledků takový způsob ale obecně vyžaduje tak mnoho dat, že za daných
 5 okolností je možné tento přístup vyloučit. Jediným smysluplným přístupem se jeví nahrazení neparametrického odhadu funkce parametrickým odhadem prostřednictvím využití určitých znalostí z chemie, které se týkají pravděpodobného tvaru funkce $k_I(T_R(t))$. Protože jakýkoliv odhad založený na
 10 omezeném množství dat je vždy složitou záležitostí, každý díl znalosti, který je možné použít pro výslednou funkci bez nutnosti ji odhadovat, značně zvyšuje hodnotu dostupných dat, protože je tím do značné míry sníženo množství znalostí, které musí být přesně zjištěny. Níže je uvedena možnost,
 15 která poskytuje určitou chemickou oporu:

Předpokládejme, že kinetika rozpadu bude Arrheniova typu. Potom je možné vyjádřit k_I jako:

$$20 \quad (11) \quad k_I(T_R) = k_{I0} \cdot e^{\frac{E_I \cdot (T_R - T_0)}{R \cdot T_R \cdot T_0}}$$

kde

25 k_{I0} je konstanta kinetické rychlosti při jmenovité teplotě T_0 , a

E_I je aktivační energie.

Protože lze předpokládat, že E_I je známá, původní problém odhadu funkce $k_I(T_R)$ se zužuje na odhad jedné numerické konstanty k_{I0} .

Koncentrace iniciátoru klesá s časem od okamžiku, ve kterém byl iniciátor přidán do reakční směsi v čase 0.

Přestože koncentrace $[I](0)$ v tomto okamžiku může snad být vypočítána z množství vstupních materiálů a potom promítnuta do budoucí hodnoty $[I](T_I)$ s použitím rovnice 10, může být skutečné množství iniciátoru v okamžiku T_I značně vzdáleno od takového průmětu v důsledku dalších nemodelovaných účinků probíhajících během indukční periody. Tyto účinky mohou být vzaty do úvahy prostřednictvím vyjádření skutečné hodnoty $[I](T_I)$ jako funkce hodnoty $[I](0)$ následovně:

$$(12) \quad [I_0] = [I](T_I) = s \cdot [I](0) \cdot e^{-\int_0^{T_I} k_I(T_R(\tau)) d\tau}$$

Konstanta měřítko s reprezentuje nejistotu způsobenou nemodelovanými účinky a jako další multiplikativní konstanta by případně mohla být začleněna do reaktivity s_0 zavedené výše v rovnici (6).

Může být odhadnuto jmenovité specifické reakční teplo $h_I(H)$. Nakonec je možné navrhnout úplný přístup pro odhadnutí jmenovité rychlosti tvorby tepla, $h_H(H)$. Připomeňme, že bylo započato explicitním zavedením účinků koncentrace iniciátoru $[I]$ ve tvaru:

$$h_H(H) = [I] \cdot h_I(H)$$

načež následovaly předpoklady týkající se rozkladu iniciátoru a zpožděného začátku polymerační reakce:

$$h_H(H) = [I_0] \cdot e^{-\int_0^H k_I(T_R(\tau)) d\tau} \cdot h_I(H)$$

5 ve kterých byl proveden ještě jeden předpoklad pro
změnu odhadu z funkčního na parametrický, aby problém byl
řešitelný s použitím malých souborů dat:

$$10 \quad (13) \quad h_H(H) = [I_0] \cdot e^{-\int_0^H k_{I0} \cdot e^{\frac{E_I(T_R(\tau) - T_0(\tau))}{R_G T_R(\tau) T_0(\tau)}} d\tau} \cdot h_I(H)$$

15 Navržené rozložení rychlosti tvorby tepla by mělo být
považováno za pracovní hypotézu, která může vyžadovat úpravy
pro započítání určitých specifík jakéhokoliv určitého
polymeračního procesu. Ověření její platnosti je tudíž prvním
krokem, který je třeba provést při aplikaci výše uvedeného
přístupu na nový proces.

20 Nyní uvažujme dva problémy odhadu, jejichž cílem je
získat faktory z experimentálních údajů. V obou je funkce
 $h_H(H)$ známá z prvního kroku (viz diskuse výše při rozložení
rychlosti tvorby tepla) alespoň pro $H(t)$, pro t v rozsahu od
 $t=0$ až do současného okamžiku t , nebo v případě archivovaných
údajů až do konce dávkového procesu, T_g . Předpokládejme
25 rovněž, že teplotní profily $T_R(t)$ a $T_0(t)$ jsou dostupné a že
je známá aktivační konstanta E_I . (Pokud není, pak může být
buď zjištěna nezávisle nebo odhadnuta podobně, jako jakýkoliv
jiný parametr).

Prvním problémem je odhad $h_I(H)$ z archivovaných údajů. To je nepřímá, tedy off-line, procedura. Ze souboru N záznamů o dávkových procesech, lze nejprve získat jmenovité rychlosti tvorby tepla $h_H(H)^{(n)}$, kde $n = 1, \dots, N$. Ačkoliv tyto rychlosti jsou všechny výsledkem toho, co by mělo být stejnou polymerickou reakcí, budou se obecně lišit v důsledku různých rychlostí poklesu koncentrace iniciátoru a jiných poruchových veličin. Zatímco stejné požadované teplo (Tepelná bilance) $h_I(H)$ musí být univerzálně platné pro všechny dávkové procesy, konstanty $T_I^{(n)}$, $[I_0]^{(n)}$, $k_{I0}^{(n)}$ nejsou. Tato skutečnost je zvýrazněna jejich označením horním indexem uvádějícím jejich číslo dávky. I kdyby tyto konstanty nebyly použity, je třeba je odhadnout pro každou dávku, aby byla správně získána hodnota $h_I(H)$, a potom jsou jednoduše vyloučeny.

Možná formulace problému je následující. Odhad $h_I(H)$ můžeme vyjádřit ve formě konečné řady:

$$(14) \quad \hat{h}_I(H) = w_0 + \sum_{m=1}^M w_m \cdot \Phi_m(H)$$

kde $\Phi_m(H)$, $m = 1, \dots, M$, je vhodný soubor základních funkcí a $w_0, \dots, w_M$ mají neznámou váhu.

Protože tvar $h_I(H)$ je v zásadě dán řádem kinetiky reakce, musí být základní soubor definován tak, že jeho členové odrážejí řád reakce a rovněž účinky, které nejsou pokryté kinetikou (například želatinací).

Nalezneme $w_0, \dots, w_M, T_I^{(1)}, [I_0]^{(1)}, k_{I0}^{(1)}, \dots, T_I^{(N)}, [I_0]^{(N)}, k_{I0}^{(N)}$ tak, že tyto konstanty minimalizují kritérium způsobilosti:

$$(15) \quad \min \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \int_{T_I^{(n)}}^{T_B} \left(h_H(H)^{(n)} - [I_0]^{(n)} \cdot e^{-\int_{T_I^{(n)}}^t k_{I_0}^{(n)} \cdot e^{\frac{E_I(T_R(\tau) - T_0(\tau))}{R_G \cdot T_R(\tau) \cdot T_0(\tau)}} d\tau} \cdot \hat{h}_I(H) \right)^2 dt$$

5

Kromě toho, že je zjevně složitý, je toto koncepčně prostý nelineární _____ (LMSE) problém.

10

Druhým problémem je odhad T_I , $[I_0]$, k_{I_0} z údajů v reálném čase. To je přímá, tedy on-line, procedura použitá během řízení dávkového procesu v reálném čase.

15

Jejím cílem je nalézt pravděpodobné hodnoty T_I , $[I_0]$, k_{I_0} , které charakterizují aktivitu iniciátoru v současném (právě probíhajícím) dávkovém procesu. Nyní je teplo $h_I(H)$ již známé. Možné matematické vyjádření problému pro nalezení T_I , $[I_0]$, k_{I_0} tak, že minimalizují kritérium způsobilosti, je následující:

20

$$(16) \quad \min \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \int_{T_I}^t \left(h_H(H) - [I_0] \cdot e^{-\int_{T_I}^{\mu} k_{I_0} \cdot e^{\frac{E_I(T_R(\tau) - T_0(\tau))}{R_G \cdot T_R(\tau) \cdot T_0(\tau)}} d\tau} \cdot \hat{h}_I(H) \right)^2 d\mu$$

25

Je třeba si všimnout, že integrál nyní pracuje pouze až do současného času t . V ideálním případě bude toto minimum přepočítáváno znovu a znovu, jak dávkový proces postupuje, což umožní kontinuální aktualizace modelu aktivity iniciátoru. Jiný přístup může využít teorie nelineárního rozšířeného Kalmanova filtru.

30

Je možné vytvořit algoritmy pro řešení shora zmiňovaných problémů. Tok q odebíraného tepla je vypočítán v prvním kroku rozložení rychlosti tvorby tepla. Jakmile je tento tok q známý, je odhad tepelného toku (balance) dH/dt jednoduchý. Nyní lze tedy zaměřit pozornost na způsob výpočtu $q(t)$.

Je třeba upozornit na několik skutečností. Za prvé, teplo je integrální vlastnost a tudíž musí být vypočítáváno z nepřetržitých měření, jako jsou měření teplot, tlaků, průtoků a podobně. Za druhé, teplo vytvářené polymerační reakcí může být uchováno v reaktoru množstvím způsobů. Jinými slovy, teplo, které je měřeno jako vystupující ze systému přes ochlazovací médium nebo tepelné ztráty, může být pouze zlomkem tepla, které je skutečně vytvářeno v jakémkoliv daném okamžiku. Pro vytvoření realistického obrázku o všech tepelných tocích, je třeba naprosto přesná analýza výrobního vybavení, zejména pro kontinuální procesy. Za třetí, pokud se týká tepelného přenosu, reaktory nejsou jednotné. Určité části stěn reaktoru nebo ochlazovacích prostředků pracují poněkud lépe než jiné části, přičemž důsledkem je, že by mohlo být třeba popsat reaktory modely konečných prvků, i kdyby jednodušší modely se soustředěnými parametry byly postačující pro mnoho procesů. Modely zahrnují součinitele tepelného přenosu, které musí být experimentálně určeny pro zajištění, že odpovídají fyzikální realitě.

Reaktor poskytuje prostředí, ve kterém je vykonávána polymerační reakce. Spolupracuje s reakcí prostřednictvím tepelného přenosu, čímž mění teplotu T_r reakční směsi a v důsledku toho rychlost konverze monomeru. Tato interakce ale funguje rovněž v obráceném směru. Protože součinitel

tepelného přenosu v hraniční vrstvě mezi směsí a stěnami reaktoru, $R_{RW}(H)$, závisí na viskozitě směsi, bude množství tepla odebraného z reakce záviset na aktuálním stupni konverze a tudíž na integrální tepelné bilanci H reakce, když
5 všechny ostatní parametry budou stejné. Na vnější straně stěny je teplo odebíráno prostřednictvím ochlazovacího média proudícího skrz plášť reaktoru nebo ochlazovací hady. Protože součinitel přenosu tepla mezi stěnou a ochlazovacím médiem, $R_{WC}(f_c)$ se mění s průtokem ochlazovacího média, f_c , který
10 obvykle není konstantní, je rovněž nutné znát vztah $R_{WC}(f_c)$ pro velký rozsah hodnot průtoků.

Součinitel tepelného přenosu $R_{WC}(f_c)$ (nebo spíše funkce součinitele tepelného přenosu) není vztažen na určitý polymerační proces. Podobně, pokud součinitel přenosu tepla
15 mezi směsí a stěnou je vyjádřen jako funkce viskozity, tedy $R_{RW}(\text{viskozita})$, namísto toho, aby byl vyjádřen jako funkce integrální tepelné bilance, tedy $R_{RW}(H)$, pak by byl z větší části rovněž nezávislý na procesu. Může se stát, že oba tyto součinitele byly již stanoveny ve tvarech nezávislých na
20 procesu výrobcem reaktoru a jsou uvedeny v dokumentaci reaktoru, nebo již byly změřeny dříve jako součást nějakého jiného projektu. Pokud ale tento případ nenastal, pak tyto součinitele musí být určeny experimentálně. Samozřejmě, pokud
je dostupný součinitel ve tvaru $R_{RW}(\text{viskozita})$, pak je třeba
25 ještě určit experimentálně vztah mezi integrální tepelnou bilancí reakce a viskozitou pro daný proces:

$$(17) \quad \text{viskozita} = v(H)$$

Někdy je reaktor periodicky čištěn, ale ne po každé dávce, a může docházet k postupnému vytváření usazenin na stěnách reaktoru. Tyto usazené vrstvy potom ovlivňují součinitel $R_{RW}(H)$, který pak vyžaduje přímé, tedy on-line, korekce.

Když reakce právě probíhá, algoritmus zahrnující koncepty popisované výše, ale navíc rozšířený pro zpracování jak rovnic termokinetického modelu tak i modelu reaktoru a rovněž pro aktualizaci stavu vedle pouhého odhadu parametrů, bude udržovat modly v souhlasu s reálným procesem. Vzhledem k jejich kontinuální aktualizaci, modely jsou mnohem přesnější, než jakýkoliv nepřímý, tedy off-line, model vytvořený po sestavení systému. Takové modely nejen že zlepšují výkon řídicích zařízení procesu na bázi modelů, ale mají využití za teoretickou oblastí klasického řízení. Zejména takové řídicí zařízení může sdílet modely se soubory plánování a časování výroby. Tato vertikální integrace je pravděpodobně z ekonomického hlediska nejpritažlivějším znakem předkládaného vynálezu.

Při výrobě PVC (a případně v jiných typech výroby) může být dosaženo srovnatelné kvality produktu při různých rychlostech konverze, pokud je teplota směsi udržována konstantní. To umožňuje urychlit nebo zpomalit reakci, přičemž jediným omezením je schopnost odebírat uvolňované teplo. Chladicí kapacita je ale vždy omezená. V principu plánovač buď ví nebo se může rozhodnout jak mnoho chladicí kapacity může být přiděleno každému reaktoru v jakémkoliv určitém okamžiku několik hodin předem. Optimalizátor potom může na míru vytvářet průběh integrální tepelné bilance (nebo stupně konverze) pro reaktor tak, že při jeho sledování

řídící zařízení bude mít výstup chladicí kapacity odpovídající přidělené chladicí kapacitě a bude dávkovat iniciátor/inhibitor tak, aby udržoval teplotu směsi konstantní. To zaručí nejrychlejší reakci pro požadovanou teplotu, což maximalizuje výkon reaktoru. Současně tyto lepší modely způsobí, že plánování a optimalizace budou spolehlivější, což sníží potřebu velkých bezpečnostních rezerv, aniž by byla snížena bezpečnost výrobního zařízení.

Zastupuje :

10

15

20

25

30

P A T E N T O V É N Á R O K Y

1. Řídicí zařízení dávkového polymeračního procesu pro
řízení dávkového procesu v reaktoru (60), které zahrnuje:

5 regulátor (29) spojený s reaktorem (60) pro přijímání
 zpětnovazebního signálu teploty procesu z
 uvedeného reaktoru (60) a pro zajištění řídicích
 signálů ochlazování reaktoru pro uvedený reaktor;
 a

10 deduktivní snímač (56) spojený s uvedeným reaktorem (60)
 a s uvedeným regulátorem (29) pro přijetí signálů
 parametrů z uvedeného reaktoru (60), zajištění
 dopředného signálu (53) tepla modelu (25) reakce
 do uvedeného regulátoru (29), a přijetí řídicích
15 signálů ochlazování reaktoru z uvedeného
 regulátoru (29); a
 přičemž:

 uvedený regulátor (29) zahrnuje sčítačku (22) pro
 přijímání zpětnovazebního signálu (52) teploty
 procesu a signálu (47) požadované teploty procesu,
20 a pro vydávání signálu (48) indikujícího rozdíl
 mezi teplotou procesu a požadovanou teplotou
 procesu; a

vyznačující se tím, že

 uvedený deduktivní snímač (56) zahrnuje:

25 model (49) reaktoru, přičemž tento model (49)
 reaktoru přijímá některé signály parametrů z
 uvedeného reaktoru (60) a řídicí signály
 ochlazování reaktoru z uvedeného regulátoru
 (29) a vydává signál indikující celkové teplo
30 odebrané z uvedeného reaktoru; a

model (25) reakce pro přijímání signálu
indikujícího celkové teplo odebrané z
uvedeného reaktoru, přičemž tento model (25)
reakce poskytuje dopředný signál (53) tepla
do uvedeného regulátoru (29) a do uvedeného
modelu (49) reaktoru.

2. Řídící zařízení dávkového polymeračního procesu podle
nároku 1, **vyznačující se tím, že** dále zahrnuje koordinátor
pro přijímání signálu teploty modelu reakce z uvedeného
modelu (25) reakce a signálu teploty procesu z uvedeného
reaktoru (60), koordinaci odpovídajících stavů aktivity a
simulované aktivity uvedeného reaktoru (60) respektive
uvedeného modelu (49) reakce, a pro vydávání koordináčního
signálu.

3. Řídící zařízení dávkového polymeračního procesu podle
nároku 2, **vyznačující se tím, že** uvedený model (25) reakce
zahrnuje:

slučovač (15) pro přijímání signálu indikujícího
celkové teplo odebírané z uvedeného reaktoru (60)
a koordináčního signálu, přičemž tento slučovač
má výstup;

upravovač (16) měřítka, mající vstup spojený s výstupem
uvedeného slučovače, a mající výstup;

první integrátor (17) mající vstup spojený s výstupem
uvedeného upravovače (16) měřítka a mající výstup,
který poskytuje signál teploty modelu reakce do
uvedeného modelu (49) reaktoru a do uvedeného
koordinátoru;

první procesor (18) mající vstup spojený s výstupem
uvedeného prvního integrátoru (17) a mající výstup

pro poskytování signálu rychlosti tvorby tepla modelu reakce do uvedeného slučovače (15); a druhý integrátor (19) mající vstup spojený s výstupem uvedeného prvního procesoru (18) a mající výstup pro poskytování dopředného signálu (53) tepla modelu reakce do uvedeného regulátoru (29), do uvedeného modelu (49) reaktoru a do vstupu uvedeného prvního procesoru (18).

4. Řídící zařízení dávkového polymeračního procesu podle nároku 3, **vyznačující se tím, že** uvedený model (25) reakce dále zahrnuje druhý procesor mající vstup spojený s výstupem uvedeného druhého integrátoru (19) uvedeného modelu (25) reakce, a mající výstup, přičemž tento druhý procesor mění dopředný signál (53) tepla modelu (25) reakce na signál indikující stupeň polymeračního procesu pro proces v uvedeném reaktoru (60).

5. Řídící zařízení dávkového polymeračního procesu podle nároku 4, **vyznačující se tím, že** uvedený model (25) reakce pracuje podle souboru termokinetických rovnic:

$$dH(t)/dt = h(T_R(t), H(t)); \text{ a}$$

$$c(t) \cdot \rho(t) \cdot dT_R(t)/dt = h(T_R(t), H(t)) - q_{tot}(t)$$

kde:

$h(T_R(t), H(t))$ je tepelná bilance;

$T_R(t)$ je teplotní profil reakční směsi

$H(t)$ je integrální teplo reakce nebo celkové množství tepla reakční směsi;

$c(t)$ je tepelná kapacita reakční směsi;

$\rho(t)$ je měrná hmotnost reakční směsi;

$dT_R(t)/dt$ je rychlost teplotní změny reaktoru; a

$q_{tot}(t)$ je odebíraný tepelný tok.

6. Způsob řízení dávkového polymeračního procesu v reaktoru (60), který zahrnuje:

vložení dávky monomerní substance do reaktoru (60);

měření parametrů reaktoru (60);

5 odvození množství tepla uvolněného z reaktoru z

uvedených parametrů; a

vyznačující se tím, že dále zahrnuje:

odvození stupně polymerace dávky monomerní substance z

množství tepla uvolněného z reaktoru (60);

10 přidávání iniciátoru do monomerní substance pro

urychlení dávkového procesu v reaktoru (60) podle

potřeby; a

přidávání inhibitoru do monomerní substance pro

zpomalení dávkového procesu v reaktoru (60) podle

15 potřeby.

Zastupuje :

20

25

30

1/8

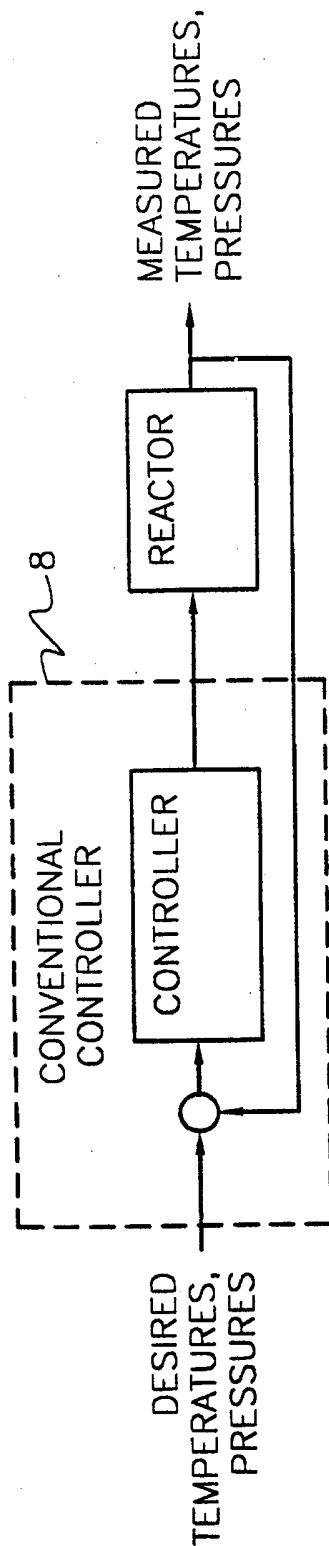


Fig. 1 PRIOR ART

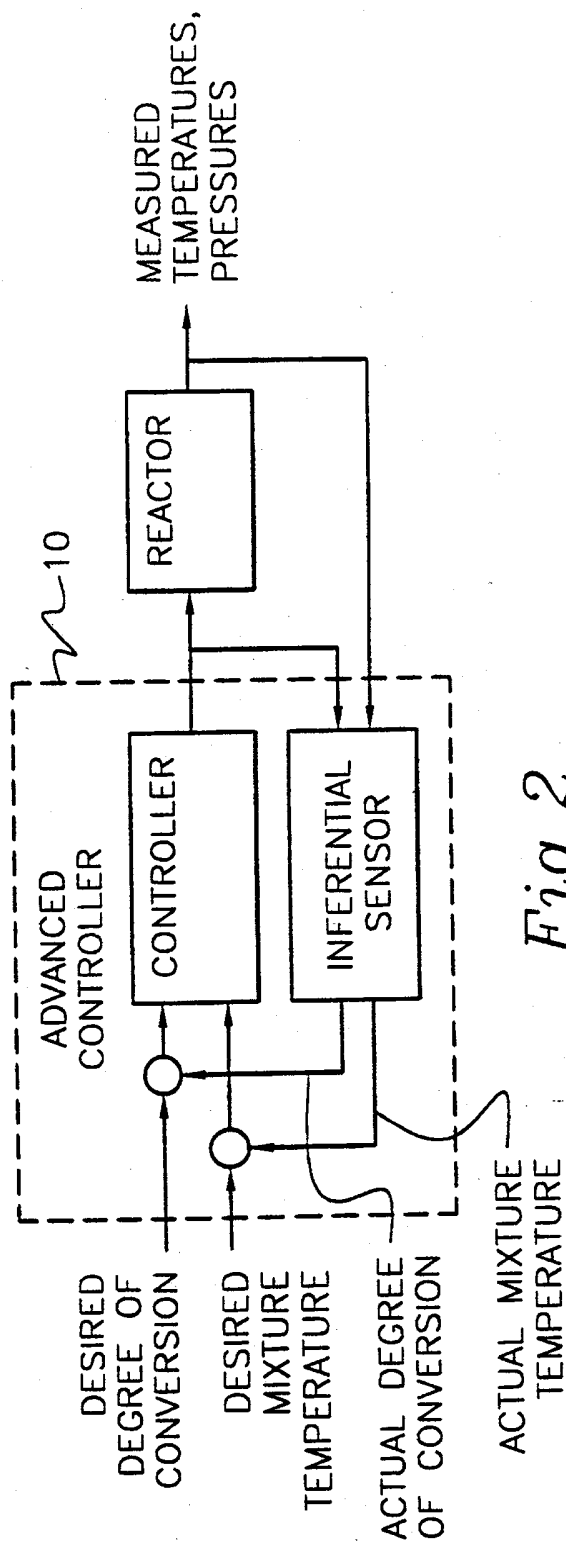


Fig. 2

03.04.00

PV 4775-99

2/8

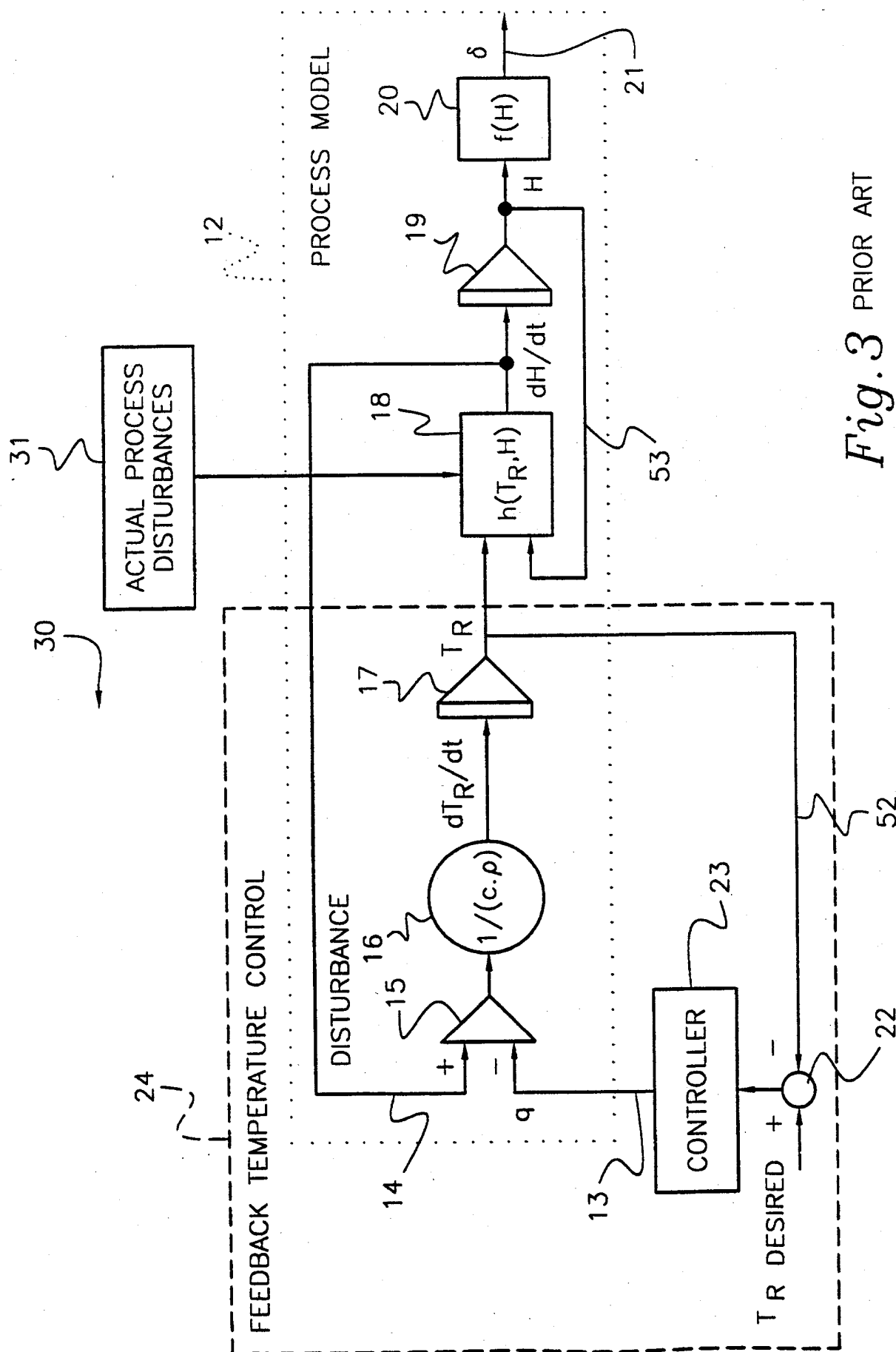


Fig. 3 PRIOR ART

3/8

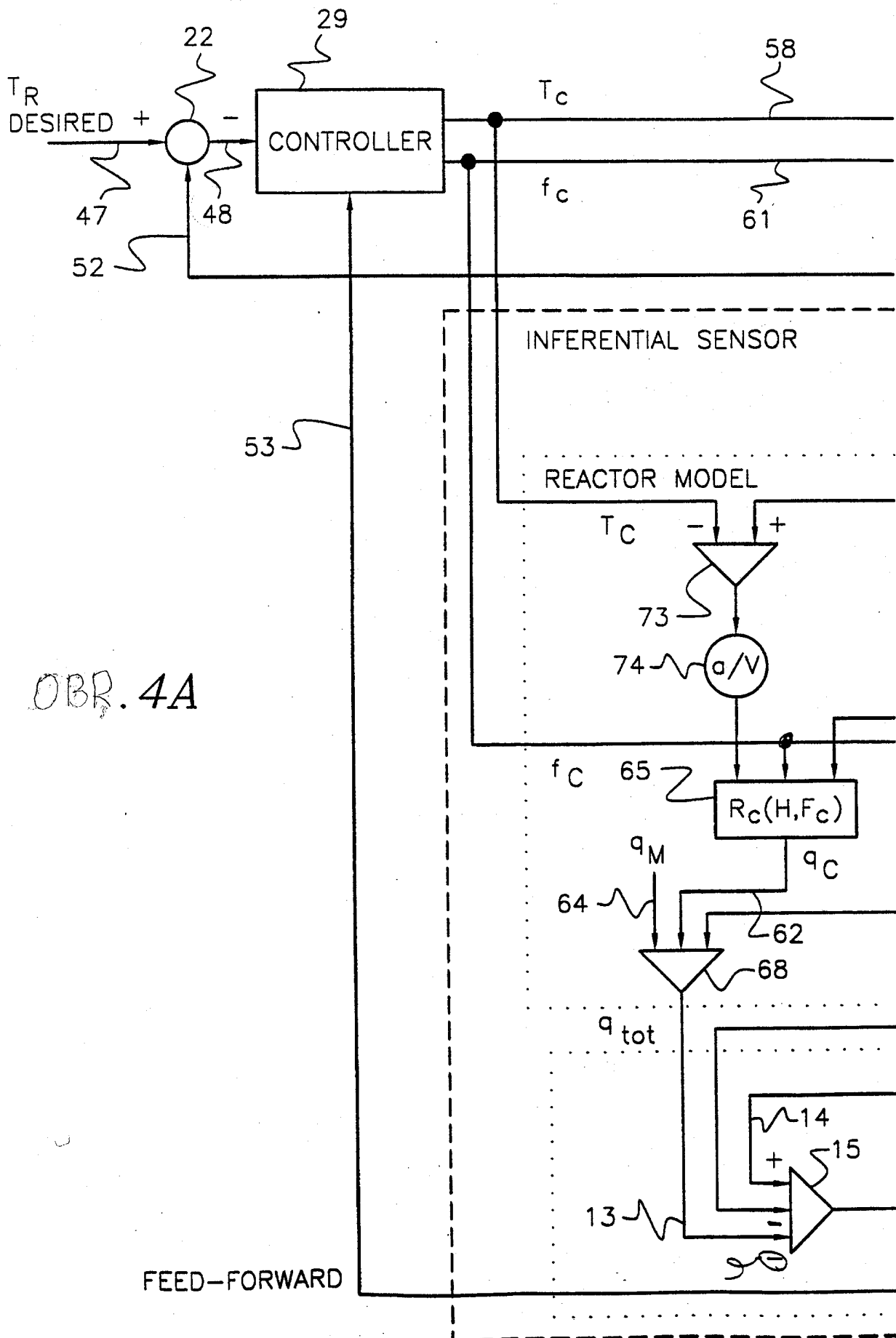
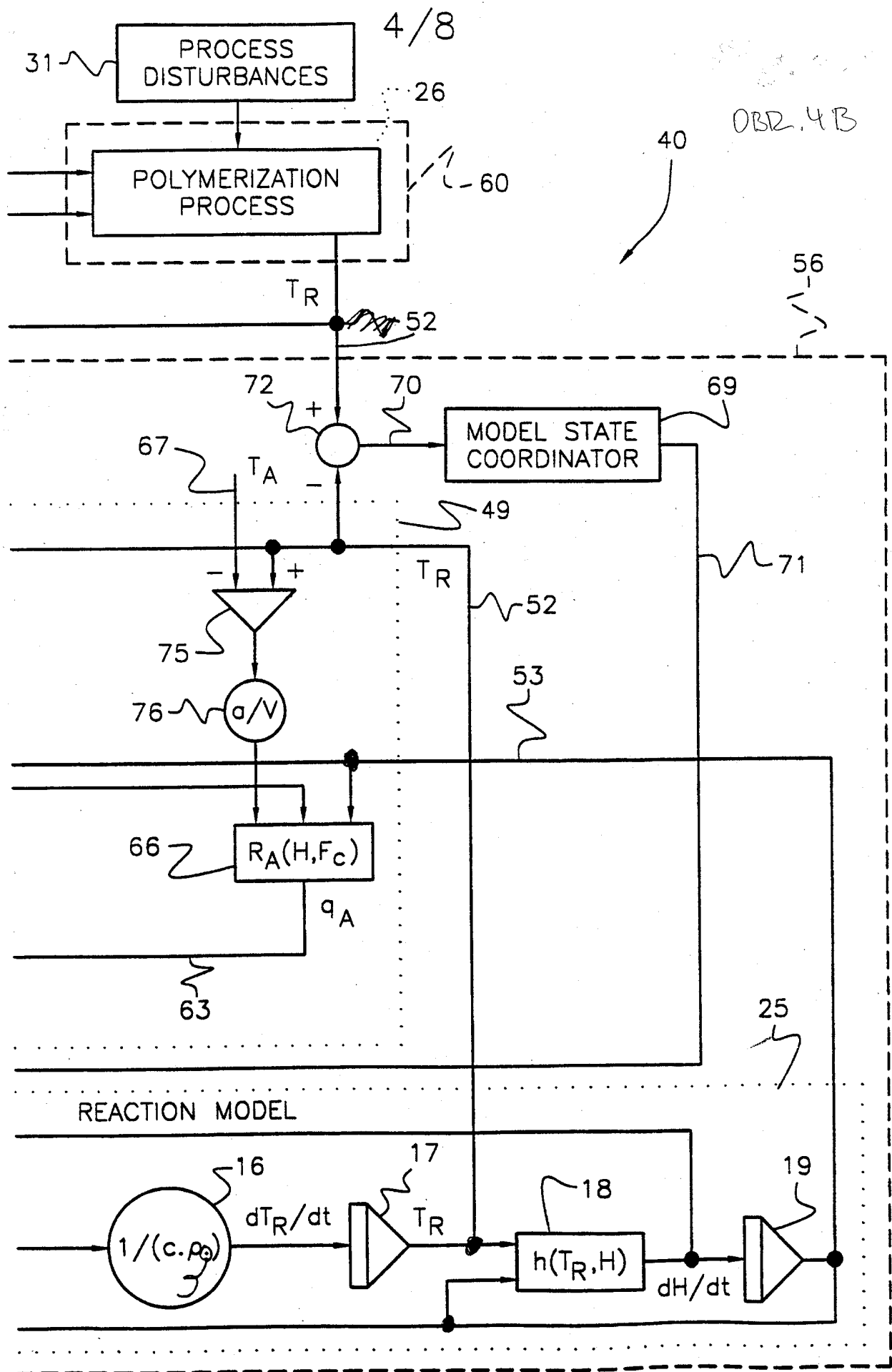


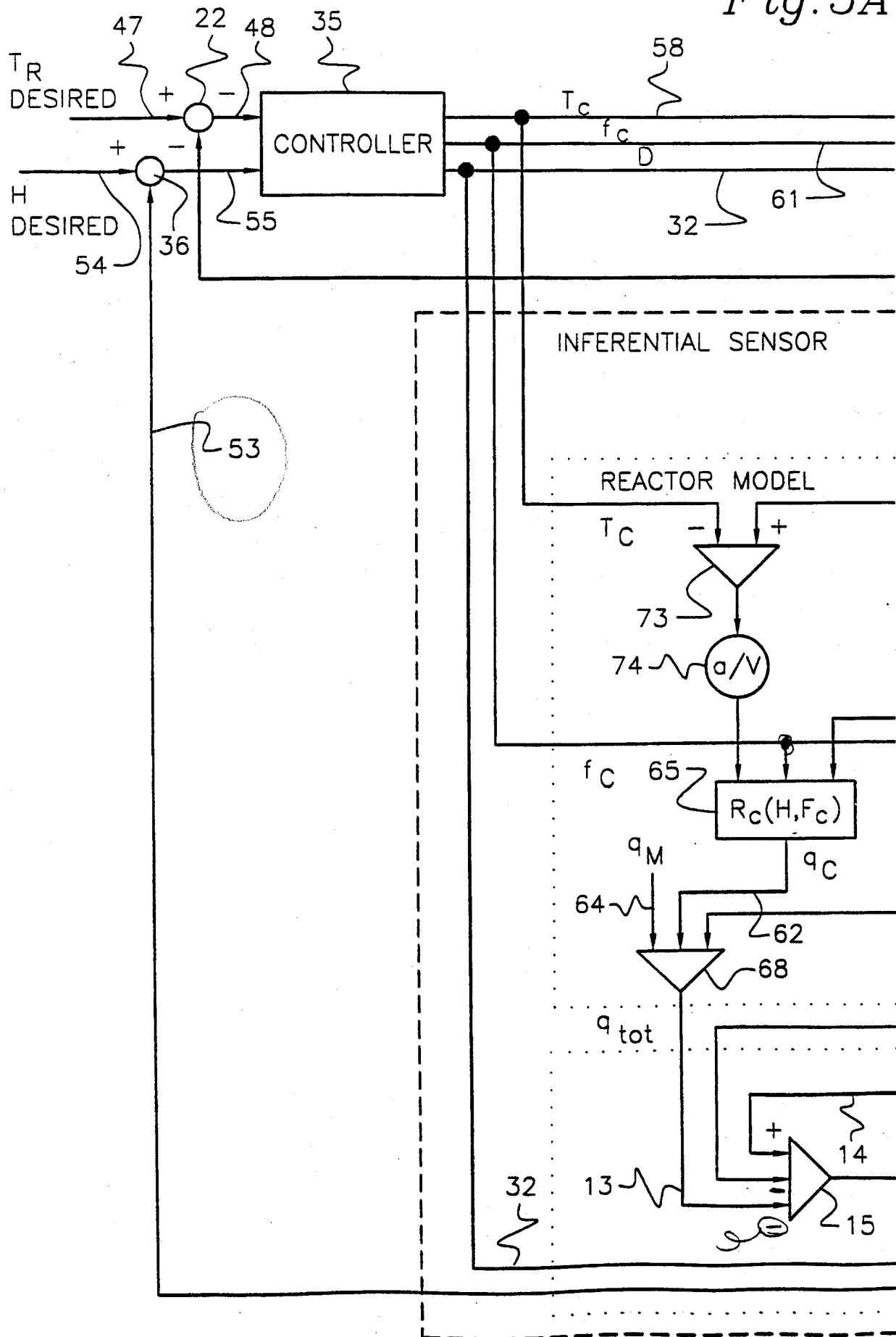
FIG. 4A

FEED-FORWARD



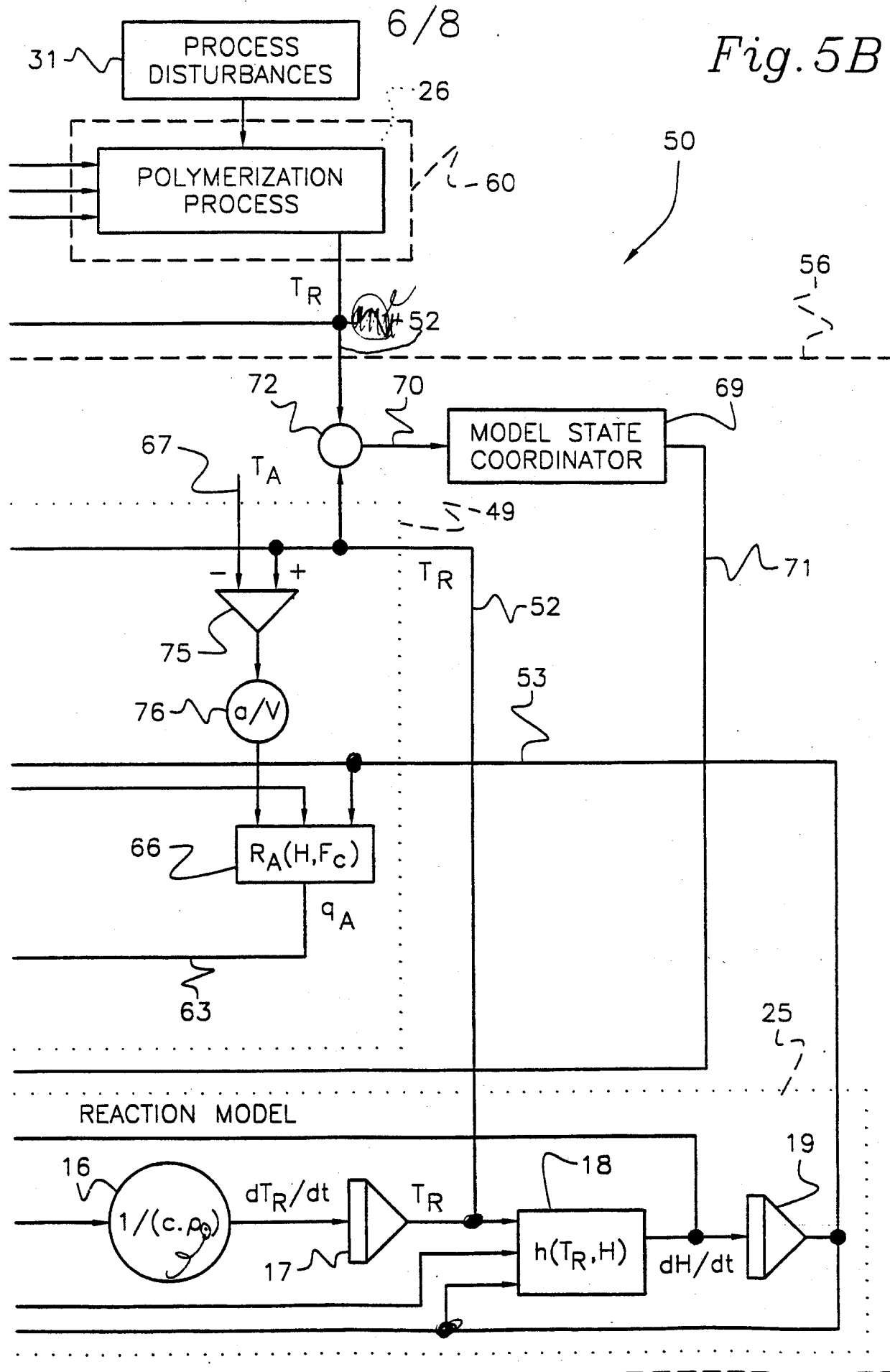
5/8

Fig. 5A



6/8

Fig. 5B



7/8

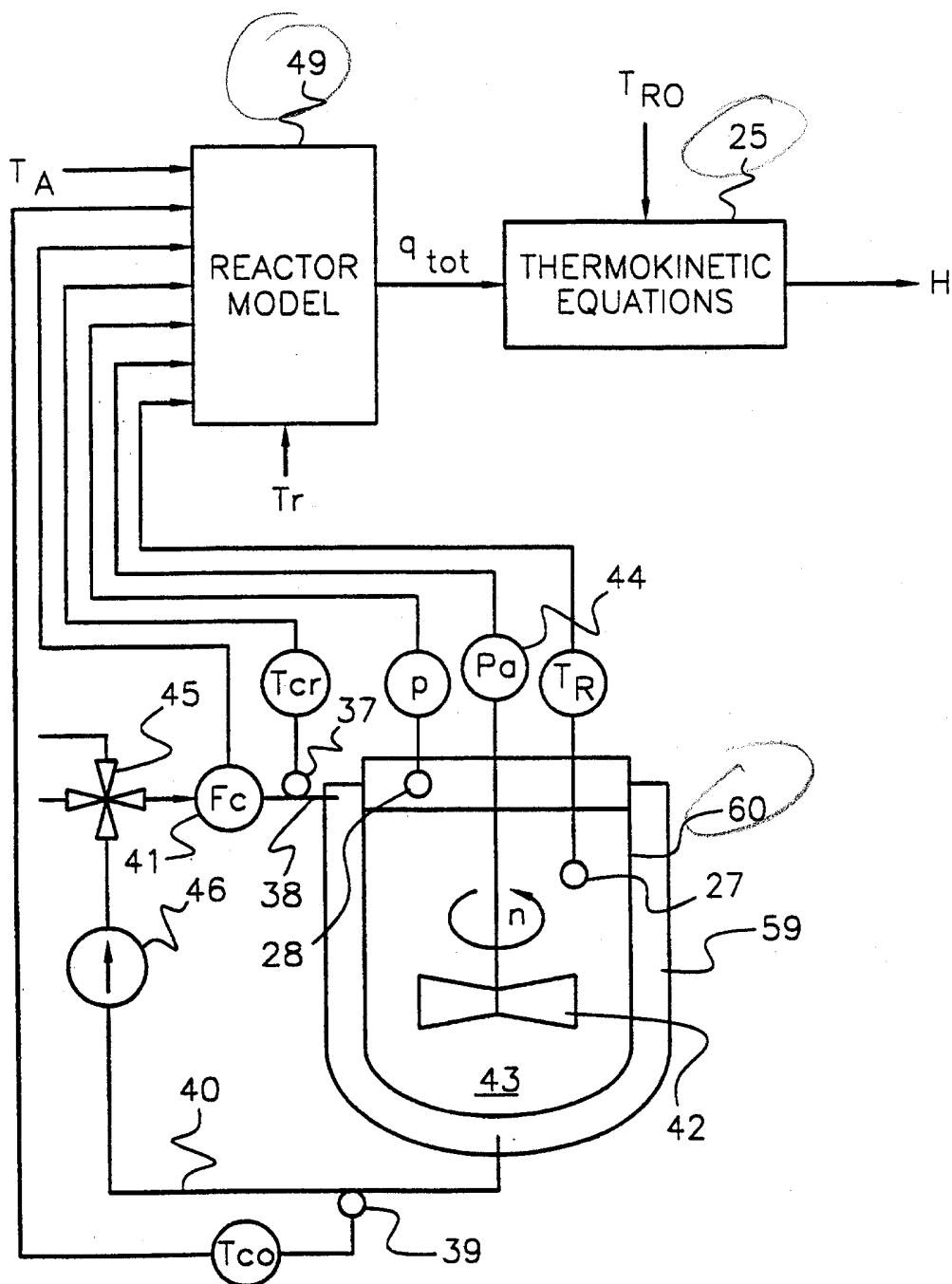


Fig. 6

8/8

Fig. 7

