

DOI: <https://doi.org/10.33216/1998-7927-2025-288-2-56-60>

УДК 662.7 (075.8)

ЗАСТОСУВАННЯ ФІЛЬТРА КАЛМАНА ДЛЯ МОНІТОРИНГУ ГАЗОВОЇ ФАЗИ ТА УПРАВЛІННЯ КАТАЛІТИЧНИМИ ПРОЦЕСАМИ У ВИРОБНИЦТВІ АМІАКУ

Водяник Б.Р., Лорія М.Г., Дуришев О.А.

APPLICATION OF THE KALMAN FILTER FOR GAS PHASE MONITORING AND CONTROL OF CATALYTIC PROCESSES IN AMMONIA PRODUCTION

Vodianyuk B.R., Loria M.G., Duryshch O.A.

У статті висвітлено теоретичні та практичні аспекти застосування фільтра Калмана, включно з його нелінійними модифікаціями, для підвищення ефективності та точності контролю в процесі синтезу аміаку. Розглянуто математичні основи фільтрації стану, описано можливості моніторингу концентрації газів у режимі реального часу та оптимізації каталітичних реакцій. Продемонстровано, що впровадження фільтра Калмана дозволяє зменшити вплив вимірювального шуму та затримок, забезпечуючи стабільнішу роботу реактора, вищий вихід аміаку та оптимальні умови роботи каталізатора. Аналіз новітніх досліджень і прикладів практичних реалізацій засвідчує, що інтеграція фільтра Калмана з цифровими двійниками та методами машинного навчання дає змогу автоматизувати й адаптувати процеси виробництва аміаку, зберігаючи високу продуктивність і гнучкість в умовах змінного навантаження та збурень.

Проаналізовано, що застосування фільтра Калмана та споріднених алгоритмів у виробництві аміаку відкриває широкі можливості для підвищення точності та стабільності контролю. За допомогою цих методів стає можливим відстежувати нелінійні процеси синтезу в режимі реального часу, коригувати покази шумних або датчиків із затримкою і оперативно реагувати на будь-які відхилення в складі синтез-газу чи роботі каталізатора. З'ясоване, що впровадження фільтрів стану дає змогу мінімізувати енергетичні та сировинні витрати, виявляти потенційні збої на ранніх стадіях, а також виводити установки на оптимальні режими з урахуванням динаміки навантаження та різноманітних збурень. У перспективі зростатиме значення методів самоадаптації фільтра, що ще більше спростить конфігурування і підтримку систем керування.

Таким чином, фільтр Калмана стає одним із ключових інструментів сучасної індустрії аміаку, яка переходить до цифрової парадигми та прагне відповідати вимогам енергоефективності, екологічної безпеки й безперервного покращення якості продукції. Таким чином, застосування фільтра Калмана та споріднених алгоритмів у виробництві аміаку відкриває широкі можливості для підвищення точності та стабільності контролю.

Ключові слова: синтез аміаку, фільтр Калмана, моніторинг концентрації, каталітичні процеси, оптимізація процесу, цифрові двійники, машинне навчання, нелінійна фільтрація.

Вступ. Виробництво аміаку є одним із найважливіших і водночас найскладніших процесів у хімічній промисловості. Його комерційне освоєння втілено в класичному процесі Габера-Боша, який передбачає високотемпературну і високотискову реакцію азоту з воднем на твердому каталізаторі [1]. Структура цього процесу передбачає низку апаратних елементів, зокрема реактор, теплообмінники, компресори та систему очищення і регенерації газових потоків. Ефективна робота такої складної системи вимагає не лише надійного обладнання, а й передових методів керування та оптимізації, які здатні підтримувати критичні параметри (температуру, тиск, співвідношення реагентів) на оптимальному рівні.

Відомо, що відхилення в складі синтез-газу чи коливання температури можуть знижувати вихід аміаку й пришвидшувати деградацію

каталізатора. Тому актуальним є застосування сучасних алгоритмів контролю, здатних оперативно компенсувати вплив шумів вимірювань, збурень і неточностей моделей [2]. Одним із таких інструментів є фільтр Калмана – математичний апарат, що дозволяє об'єднати інформацію від фізичних датчиків із прогнозами моделі, поступово уточнюючи оцінки стану процесу й підвищуючи точність управлінських рішень [3]. У цій статті розглянуто наукові підходи та практичні результати застосування фільтра Калмана й пов'язаних методів для моніторингу газової фази та управління каталітичними процесами в синтезі аміаку, а також окреслено перспективи подальшого розвитку цих технологій, зокрема у контексті цифрових двійників і методів машинного навчання.

Мета та завдання. Мета даного дослідження полягає в узагальненні сучасних теоретичних і практичних напрацювань щодо застосування фільтра Калмана в процесі виробництва аміаку для точного моніторингу реагентів та управління каталітичною реакцією. Для досягнення цієї мети у статті розглянуто ключові аспекти фільтрації стану, приділено увагу особливостям нелінійних модифікацій методу Калмана, проаналізовано можливості інтеграції з іншими сучасними підходами (цифрові двійники, машинне навчання) та узагальнено перспективи впровадження у масштабі промислової експлуатації. Завданням є показати, яким чином фільтр Калмана здатний підвищити стабільність, безпеку й ефективність синтезу аміаку, а також розкрити потенціал цього алгоритму в умовах складної та динамічно змінюваної технологічної обстановки.

Аналіз досліджень і публікацій. Наукові дослідження останніх десятиліть підтверджують високу ефективність спостерігачів стану, побудованих на основі фільтра Калмана, для оцінювання важливих технологічних параметрів. У процесі виробництва аміаку такі параметри включають концентрації азоту, водню та аміаку, а також локальні значення температури й ступінь активності каталізатора. Частина публікацій зосереджується на розширеному фільтрі Калмана (EKF) [4], що дає змогу лінеаризувати нелінійну кінетику у невеликих околах поточних оцінок стану, підвищуючи точність моделювання. Деякі автори демонструють потенціал використання unscented фільтра Калмана (UKF) [5] та ансамблевого фільтра Калмана (EnKF) [6], які краще відображають

складні ймовірнісні розподіли за рахунок статистичного підходу до ідентифікації нелінійностей.

Публікації вказують також на важливість цілодобового онлайн-моніторингу концентрації газової фази та диференційованої оцінки внутрішнього стану каталітичного шару, яка неможлива звичайними методами через технічні обмеження вимірювальної апаратури. В низці праць наголошується на перспективності поєднання фільтра Калмана з цифровими двійниками: це дає змогу синхронізувати інформацію з реального процесу та високоточних комп'ютерних моделей, одержуючи в режимі реального часу прогнози та оптимізаційні рішення [7-9]. Додатково зазначено, що розробка самоадаптивних схем фільтрації з методами машинного навчання дозволяє компенсувати неузгодженості й динамічні збурення, що є надзвичайно важливим у технологіях «зеленої» хімії та при роботі від відновлюваних джерел енергії [10].

Виклад основного матеріалу. Фільтр Калмана є рекурсивним алгоритмом, що базується на байєсовому підході. На кожному кроці він спочатку виконує прогноз стану на основі математичної моделі технологічного процесу (крок передбачення), а потім оновлює цей прогноз з урахуванням поточних вимірювань (крок корекції). Це дозволяє поступово зменшувати невизначеність за рахунок поєднання інформації з моделі та даних від наявних датчиків. Для лінійних систем розв'язок вважається оптимальним у середньоквадратичному сенсі, але у більшості випадків виробництва аміаку моделі є виражено нелінійними, зокрема через кінетику реакції та складні теплові явища у каталізаторі. Тому доцільним є використання розширеного або інших нелінійних варіантів фільтра Калмана, які виконують лінеаризацію моделі чи статистичну апроксимацію.

У практичних установках синтезу аміаку фільтр Калмана забезпечує можливість онлайн-моніторингу газового складу з підвищеною точністю. Зокрема, виконується оцінка концентрації NH_3 , рівномірності розподілу H_2 і N_2 , виявлення присутності побічних газів. Це дозволяє тримати стехіометричне співвідношення реагентів у вузьких діапазонах, максимально наближених до теоретично обчисленого оптимуму [8]. Важливим завданням є компенсація затримок і шумів, притаманних хроматографам чи мас-спектрометрам. Завдяки фільтру Калмана

програмний датчик може виправляти ці похибки та більш оперативно керувати подачею сировини, швидкістю обертання компресорів і режимами охолодження, аби запобігти утворенню надмірних побічних продуктів і деградації каталізатора.

Управління каталітичним процесом, що є другим ключовим напрямком застосування фільтра Калмана, охоплює підтримання заданої температури та вчасне реагування на зміну кінетичних параметрів каталізатора. Відомо, що каталізатор може поступово «старіти» або тимчасово втрачати активність при відхиленнях у режимах роботи. Фільтр Калмана дозволяє «відстежувати» стан каталізатора, включно з моніторингом внутрішніх температурних і концентраційних профілів, які неможливо виміряти безпосередньо [7, 8]. На основі цих оцінок сучасні системи керування (наприклад, модельно-прогнозні регулятори) можуть своєчасно коригувати витрати реагентів і температуру, уникаючи перегріву та збільшуючи термін служби каталізатора. Відповідно, вихід аміаку залишається стабільним навіть у складних режимах експлуатації, а динамічне керування процесом стає суттєво гнучкішим.

Практичні реалізації підтверджують, що фільтр Калмана може слугувати базовим інструментом як для стабілізації параметрів, так і для інтеграції з інтелектуальними технологіями: цифровими двійниками та методами машинного навчання [9]. Цифрові двійники створюють детальні моделі

виробництва, до яких надходять дані від установки, кориговані фільтром Калмана. Зі свого боку, методи машинного навчання (нейронні мережі, методи екстремального пошуку) допомагають оновлювати статистичні параметри моделі в реальному часі, роблячи систему керування ще більш адаптивною [11]. Така взаємодія дає змогу точніше прогнозувати технологічні ризики, проводити превентивне обслуговування і досягати більшої енергоефективності та екологічної безпеки.

Для аналізу можливостей застосування фільтра Калмана в контролі процесу синтезу аміаку була проведена симуляція реакторної системи з урахуванням основних кінетичних залежностей. Динамічна модель описує зміну концентрацій азоту (N_2), водню (H_2) та аміаку (NH_3) відповідно до спрощених кінетичних рівнянь реакції Габера-Боша. Оскільки реальні вимірювання зазнають впливу шумів і затримок, у моделюванні враховані випадкові похибки у вигляді процесного та вимірювального шуму.

В алгоритмі симуляції спочатку задаються початкові концентрації компонентів газової суміші, після чого для кожного кроку моделюється їхня еволюція згідно з рівняннями реакційної кінетики. До істинних значень додається випадковий шум, що імітує обмеження реальної вимірювальної апаратури. З отриманих шумних даних фільтр Калмана виконує рекурсивну оцінку стану системи, комбінуючи модельні передбачення з виміряними величинами.

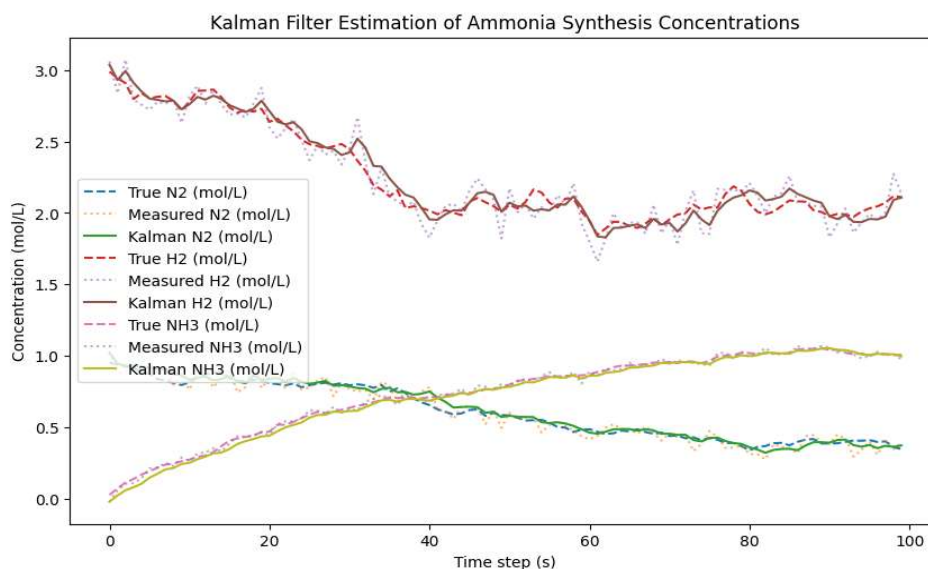


Рис. Комп'ютерна симуляція концентрацій газів у реакторі синтезу аміаку за допомогою фільтра Калмана

На графіку (Рис.) відображені три групи кривих:

- Пунктирні лінії представляють істинні значення концентрацій газів у реакторі, що змінюються внаслідок хімічної реакції.

- Точкові лінії відповідають вимірним значенням, що містять випадкові флуктуації.

- Суцільні лінії позначають оцінені фільтром Калмана концентрації, які є згладженими та скоригованими з урахуванням попередніх станів.

Результати демонструють, що фільтр Калмана ефективно знижує вплив шумів і дає змогу більш точно оцінювати реальний склад газової фази. Це дозволяє стабілізувати контроль параметрів реакції та оперативно компенсувати збурення, які виникають у процесі роботи установки. Отримані дані підтверджують доцільність використання методів фільтрації для підвищення точності онлайн-моніторингу та адаптивного керування технологічним процесом.

Висновки. Застосування фільтра Калмана та споріднених алгоритмів у виробництві аміаку відкриває широкі можливості для підвищення точності та стабільності контролю. За допомогою цих методів стає можливим відстежувати нелінійні процеси синтезу в режимі реального часу, коригувати покази шумних або датчиків із затримкою і оперативно реагувати на будь-які відхилення в складі синтез-газу чи роботі каталізатора. Фільтр Калмана перетворюється на центральну ланку інтелектуальних систем керування, у яких поєднуються дані від фізичних датчиків, математичні моделі (в тому числі цифрові двійники) та технології машинного навчання.

Проведений аналіз свідчить, що впровадження фільтрів стану дає змогу мінімізувати енергетичні та сировинні витрати, виявляти потенційні збої на ранніх стадіях, а також виводити установки на оптимальні режими з урахуванням динаміки навантаження та різноманітних збурень. У перспективі зростатиме значення методів самоадаптації фільтра, що ще більше спростить конфігурування і підтримку систем керування. Таким чином, фільтр Калмана стає одним із ключових інструментів сучасної індустрії аміаку, яка переходить до цифрової парадигми та прагне відповідати вимогам енергоефективності, екологічної безпеки й безперервного покращення якості продукції.

Література

1. Humphreys, John, Rong Lan, and Shanwen Tao. "Development and recent progress on ammonia synthesis catalysts for Haber–Bosch process." *Advanced Energy and Sustainability Research* 2.1, 2021: 2000043.
2. Smith, Collin, Alfred K. Hill, and Laura Torrente-Murciano. "Current and future role of Haber–Bosch ammonia in a carbon-free energy landscape." *Energy & Environmental Science* 13.2, 2020: 331–344.
3. Welch, Greg, and Gary Bishop. "An introduction to the Kalman filter.", 1995: 2.
4. Fujii, Keisuke. "Extended kalman filter." *Reference Manual* 14, 2013: 41.
5. Wan, Eric A., and Rudolph Van Der Merwe. "The unscented Kalman filter for nonlinear estimation." *Proceedings of the IEEE 2000 adaptive systems for signal processing, communications, and control symposium* (Cat. No. 00EX373). Ieee, 2000.
6. Houtekamer, Peter L., and Herschel L. Mitchell. "Ensemble kalman filtering." *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography* 131.613, 2005: 3269–3289.
7. Jiang, Kai, Erming Cao, and Lijiang Wei. "NO_x sensor ammonia cross-sensitivity estimation with adaptive unscented Kalman filter for Diesel-engine selective catalytic reduction systems." *Fuel* 165 (2016): 185–192.
8. Surenahalli, Harsha Shankar, Gordon Parker, and John H. Johnson. "Extended Kalman filter estimator for NH₃ storage, NO, NO₂ and NH₃ estimation in a SCR." No. 2013-01-1581. *SAE Technical Paper*, 2013.
9. Jamal, Alaa, Ahmed Nasser, and Jaap van Rijn. "Real-time ammonia estimation in recirculating aquaculture systems: A data assimilation approach." *Aquacultural Engineering* 106, 2024: 102432.
10. Lauro, Ezio, Amélie Têtu, and Hélyette Geman. "Green Ammonia Production in Stochastic Power Markets." *Commodities* 3.1, 2024.
11. Baldassarre, A., et al. "Digital twin with augmented state extended Kalman filters for forecasting electric power consumption of industrial production systems." *Heliyon* 10.6, 2024.

Vodanyk B.R., Loria M.G., Duryshch O.A.
Application of the Kalman filter for gas phase monitoring and control of catalytic processes in ammonia production

The article highlights the theoretical and practical aspects of using the Kalman filter, including its nonlinear modifications, to improve the efficiency and accuracy of control in the ammonia synthesis process. The mathematical foundations of state filtration are considered, the possibilities of real-time monitoring of gas concentrations and optimisation of catalytic reactions are described. It is demonstrated that the

introduction of a Kalman filter reduces the influence of measurement noise and delays, ensuring more stable reactor operation, higher ammonia yield and optimal catalyst conditions. An analysis of the latest research and examples of practical implementations shows that the integration of the Kalman filter with digital twins and machine learning methods makes it possible to automate and adapt ammonia production processes, while maintaining high performance and flexibility under conditions of variable load and disturbances.

It is analysed that the use of the Kalman filter and related algorithms in ammonia production opens up wide opportunities for improving the accuracy and stability of control. With the help of these methods, it becomes possible to monitor nonlinear synthesis processes in real time, correct readings of noisy or delayed sensors, and promptly respond to any deviations in the composition of the synthesis gas or catalyst operation. It has been found that the introduction of state filters makes it possible to minimise energy and raw material costs, detect potential failures at early stages, and bring plants to optimal operating conditions, taking into account load dynamics and various disturbances. In the future, self-adaptive filter methods will become increasingly important, which will further simplify the configuration and maintenance of control systems. Thus, the Kalman filter is becoming one of the key tools for the modern ammonia industry, which is moving to a digital paradigm and striving to meet the requirements of energy efficiency,

environmental safety and continuous improvement of product quality. Thus, the application of the Kalman filter and related algorithms in ammonia production opens up great opportunities for improving the accuracy and stability of control.

Keywords: ammonia synthesis, Kalman filter, concentration monitoring, catalytic processes, process optimisation, digital twins, machine learning, nonlinear filtration.

Водяник Богдан Романович – аспірант, асистент кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, vodianyik@snu.edu.ua

Лорія Марина Геннадіївна – д.т.н., професор, завідувач кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, m_loria@snu.edu.ua

Дуришев Олександр Андрійович – аспірант кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, duryshev@snu.edu.ua

Стаття подана 15.03.2025.