

Program pro simulaci statických a dynamických charakteristik průtočného chemického reaktoru

Simulation program for static and dynamic analyses of CSTR

Bc. Monika Sámková

Diplomová práce
2011



Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky
akademický rok: 2010/2011

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Bc. Monika SÁMKOVÁ**
Osobní číslo: **A07353**
Studijní program: **N 3902 Inženýrská informatika**
Studijní obor: **Automatické řízení a informatika**

Téma práce: **Program pro simulaci statických a dynamických charakteristik průtočného chemického reaktoru**

Zásady pro vypracování:

1. Najděte matematický model průtočného chemického reaktoru vhodný jako simulační příklad.
2. Provedte statickou analýzu systému pro různé vstupní veličiny.
3. Provedte dynamickou analýzu pro různé skoky vstupních veličin.
4. Sestavte simulační program v Matlabu pomocí GUI, který umožní provádět statickou a dynamickou analýzu pro různé vstupní veličiny bez nutnosti znalosti programování.
5. Vytvořte dokumentaci k ovládní programu.

Rozsah diplomové práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování diplomové práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

1. FAUSETT, L. V. **Numerical Methods: Algorithms and Applications**. Prentice Hall; 2002, ISBN 0130314005.
2. BOHÁČ, Z., ČASTOVÁ, N.: **Základní numerické metody**. Skriptum VŠB-TUO, Ostrava 1997. ISBN 80-7078-975-1.
3. INGHAM, J., DUNN, I. J., HEINZLE, E., PŘENOSIL, J. E.: **Chemical Engineering Dynamics. An Introduction to Modeling and Computer Simulation**. Second, Completely Revised Edition, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 2000. ISBN 9783527307593.
4. LUYBEN, W.L.: **Process modelling, simulation and control for chemical engineers**. McGraw-Hill, New York, 1989. ISBN 0-07-039159-9.
5. GAO, R., O'DYWER, A., COYLE, E. 2002. **A Non-linear PID Controller for CSTR Using Local Model Networks**. Proc. of 4th World Congress on Intelligent Control and Automation, Shanghai, P. R. China, 3278-3282

Vedoucí diplomové práce:

Ing. Jiří Vojtěšek, Ph.D.

Ústav řízení procesů

Datum zadání diplomové práce:

25. února 2011

Termín odevzdání diplomové práce:

3. června 2011

Ve Zlíně dne 25. února 2011



prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
děkan



prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
ředitel ústavu

ABSTRAKT

Tato diplomová práce se zabývá modelováním a simulací statických a dynamických charakteristik průtočného chemického reaktoru (anglicky Continuous Stirred Tank Reactor – CSTR) s chlazením v plášti. Modelování a simulace jsou důležité nástroje, které nám pomáhají při studiu chování systému. Matematický model vybraného reaktoru je popsán soustavou nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic (ODR), které jsou řešeny numericky pomocí metody prosté iterace a Runge-Kuttových metod k numerickému řešení ODR. Simulační výsledky dokazují nelineární chování systému a mohou napomoci např. při volbě vhodného řídicího algoritmu. Nejvýznamnějším výstupem z praktické části je simulační program v MATLABU, vytvořený pomocí nástroje GUIde, který dovoluje provádět různé statické a dynamické analýzy reaktoru bez nutnosti změny programového kódu.

Klíčová slova:

Chemický reaktor, CSTR, statická analýza, dynamická analýza, MATLAB

ABSTRACT

This Master's thesis is focused on modelling and simulation static and dynamic behaviour of Continuous Stirred Tank Reactor (CSTR) with jacket cooling. Modelling and simulation are important tools, which helps to study system behaviour. Mathematical model of the given reactor is described by the set of ordinary differential equations, which is solved using simple iterative method and Runge-Kutta methods. Simulation results prove nonlinear system behaviour. These results for example can help with choice of suitable control algorithm. One of the most important outputs of this Thesis practical part is the simulation program in MATLAB. This program, which is developed by the GUIde tool, enables to perform various simulations of static and dynamic behaviour of the given reactor without changes of the source code.

Keywords:

chemical reactor, CSTR, static analysis, dynamic analysis, MATLAB

Chtěla bych velmi poděkovat vedoucímu své diplomové práce panu Ing. Jiřímu Vojtěškovi, Ph.D. za jeho podnětné připomínky, odborné vedení, spolupráci, velkou trpělivost a neocenitelnou pomoc, kterou mi poskytl během řešení mé diplomové práce.

Prohlašuji, že

- beru na vědomí, že odevzdáním diplomové/bakalářské práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb. o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších právních předpisů, bez ohledu na výsledek obhajoby;
- beru na vědomí, že diplomová/bakalářská práce bude uložena v elektronické podobě v univerzitním informačním systému dostupná k prezenčnímu nahlédnutí, že jeden výtisk diplomové/bakalářské práce bude uložen v příruční knihovně Fakulty aplikované informatiky Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně a jeden výtisk bude uložen u vedoucího práce;
- byl/a jsem seznámen/a s tím, že na moji diplomovou/bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších právních předpisů, zejm. § 35 odst. 3;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 1 autorského zákona má UTB ve Zlíně právo na uzavření licenční smlouvy o užití školního díla v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 2 a 3 autorského zákona mohu užít své dílo – diplomovou/bakalářskou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití jen s předchozím písemným souhlasem Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, která je oprávněna v takovém případě ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které byly Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše);
- beru na vědomí, že pokud bylo k vypracování diplomové/bakalářské práce využito softwaru poskytnutého Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně nebo jinými subjekty pouze ke studijním a výzkumným účelům (tedy pouze k nekomerčnímu využití), nelze výsledky diplomové/bakalářské práce využít ke komerčním účelům;
- beru na vědomí, že pokud je výstupem diplomové/bakalářské práce jakýkoliv softwarový produkt, považují se za součást práce rovněž i zdrojové kódy, popř. soubory, ze kterých se projekt skládá. Neodevzdání této součásti může být důvodem k neobhájení práce.

Prohlašuji,

- že jsem na diplomové práci pracovala samostatně a použitou literaturu jsem citovala. V případě publikace výsledků budu uvedena jako spoluautor.
- že odevzdaná verze diplomové práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou totožné.

Ve Zlíně

.....
podpis diplomanta

OBSAH

ÚVOD	8
I TEORETICKÁ ČÁST	9
1 CHEMICKÉ REAKTORY, ZÁKLADNÍ TERMINOLOGIE A DĚLENÍ	10
1.1 DĚLENÍ REAKTORŮ	10
1.1.1 Podle typu operace	10
1.1.2 Podle počtu fází.....	12
1.1.3 Podle typu reakce	13
1.1.4 Podle teplotního režimu	14
2 PRŮTOČNÉ MÍCHANÉ CHEMICKÉ REAKTORY	16
3 MODELOVÁNÍ A SIMULACE	18
3.1 TYPY SYSTÉMŮ.....	18
3.2 MODELOVÁNÍ.....	19
3.2.1 Obecný postup vytváření deterministických matematických modelů	20
3.3 VYTVÁŘENÍ MATEMATICKÝCH MODELŮ NA ZÁKLADĚ BILANCÍ.....	22
4 SIMULACE	25
4.1 METODA PROSTÉ ITERACE	25
4.2 NUMERICKÉ ŘEŠENÍ DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC	26
4.2.1 Metody jednokrokové	27
4.2.2 Runge-Kuttovy metody	27
II PRAKTICKÁ ČÁST	29
5 CÍLE DIPLOMOVÉ PRÁCE	30
6 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR	31
7 STATICKÁ ANALÝZA	34
8 DYNAMICKÁ ANALÝZA	40
9 SIMULAČNÍ PROGRAM V MATLABU POMOCÍ GUI	45
ZÁVĚR	52
ZÁVĚR V ANGLIČTINĚ	53
SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	54
SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK	56
SEZNAM OBRÁZKŮ	58
SEZNAM PŘÍLOH	60

ÚVOD

V této diplomové práci bylo úkolem nalézt matematický model průtočného chemického reaktoru vhodného jako simulační příklad. Byl použit průtočný reaktor s dokonale promíchávaným obsahem (CSTR), který bývá široce používán v chemickém průmyslu. Jedná se o model nelineárního systému se soustředěnými parametry. Po nalezení matematického modelu se za použití jednoduché iterační metody provede statická analýza systému pro různé vstupní veličiny. A následně za pomoci metody Runge-Kutta se provede dynamická analýza systému pro různé skoky vstupních veličin.

Teoretická část se zabývá popisem chemických reaktorů a jejich dělením. Dále se v teoretické části píše o modelování a simulaci systémů, jaké jsou typy systémů, vytváření matematických modelů a jejich numerické řešení.

Pro vyřešení daného problému se v první řadě musí určit jeho podstata a souvislost se soustavou, ve které se problém objevil. To vede k analýze problému. Je několik způsobů, jak problém analyzovat. Nejpoužívanějšími je experimentální analýza a simulační analýza.

Experimenty na reálném zařízení dosáhneme dosti přesných vlastností zkoumané soustavy. Při dostatečném počtu provedených měření lze dojít také k určení vlastností soustavy. Nevýhodou těchto reálných zařízení je rozsáhlost soustavy, vyšší náklady a pořizovací cena.

V tom případě se jeví jednodušší provést statickou a dynamickou analýzu procesu pomocí simulační analýzy. Simulační analýzy mají oproti experimentům na reálném zařízení mnoho výhod - menší časové nároky, nižší náklady, bezpečnost a hlavně neomezený počet simulací. Prvním krokem je vytvoření matematického modelu systému, který popisuje původní proces.

Statická analýza zobrazuje chování systému v ustáleném stavu. Výsledek slouží jako výchozí bod pro volbu optimálního pracovního bodu. Po statické analýze následuje dynamická analýza, která zobrazuje chování systému po změně vstupních veličin. Výsledky nám například poslouží pro správnou volbu externího lineárního modelu pro adaptivní řízení.

Cílem této práce bylo sestavení simulačního programu v MATLABU pomocí grafického rozhraní GUI (Graphical User Interface), který umožní provádět simulaci statické a dynamické analýzy pro různé vstupní veličiny.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1 CHEMICKÉ REAKTORY, ZÁKLADNÍ TERMINOLOGIE A DĚLENÍ

Jako chemický reaktor [1] lze označit v podstatě jakýkoliv typ nádoby, v níž dochází k přeměně suroviny na požadovaný produkt pomocí chemické reakce. Vlastní nádobou může být třeba jen promíchávaná nádrž ale stejně tak i složitý průtočný reaktor. Ve všech případech však reaktor musí poskytovat dostatečný čas pro proběhnutí vlastní chemické reakce.

Návrh chemických reaktorů zahrnuje nejméně tři oblasti chemického inženýrství: termodynamiku, kinetiku a přenos tepla. Například pokud reakce probíhá v typickém dávkovém reaktoru, jednoduché promíchávané nádobě, jakou maximální konverzi lze očekávat? V tomto případě se jedná o termodynamický problém související s chemickou rovnováhou. Také si lze položit otázku, jak dlouho by měla trvat reakce, aby bylo dosaženo daného stupně přeměny. Tato otázka se týká kinetiky a pro její zodpovězení je třeba znát nejen stechiometrii reakce ale také rychlostní konstanty dopředné i zpětné reakce. Dále si lze položit otázku, kolik tepla musí být z reaktoru odvedeno, aby byly dodrženy izotermické podmínky. Taková otázka je z oblasti teplotních přenosů a termodynamiky. Též je třeba vědět, zda je probíhající reakce endotermní, či exotermní.

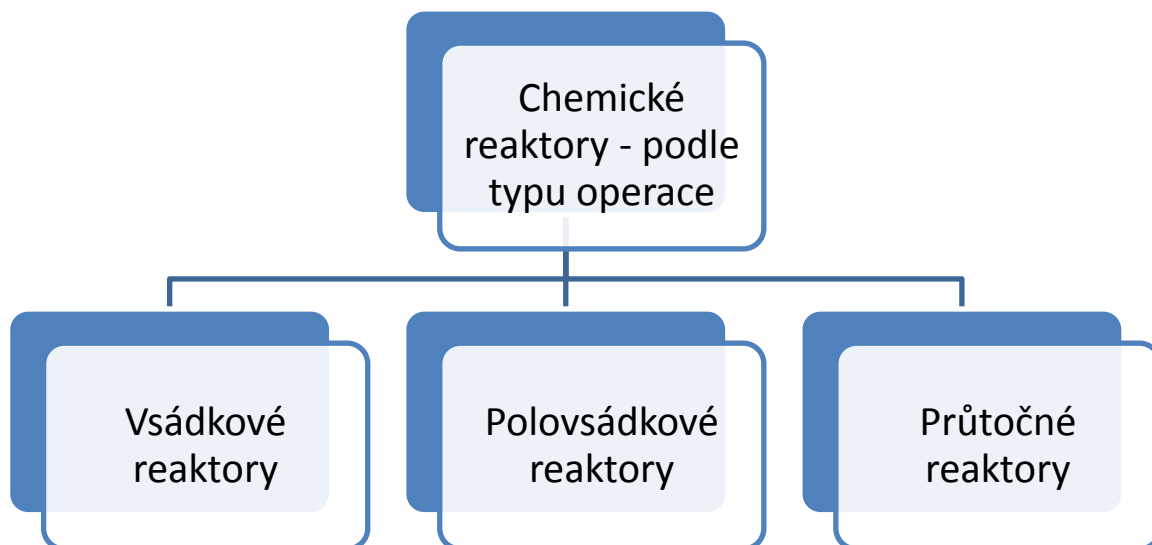
Množství zpracovávaného materiálu je klíčovým faktorem při rozhodování, jaký typ reaktoru by měl být použit. Pro malá zpracovávaná množství se v průmyslu běžně používají dávkové reaktory. Naopak pro velkoobjemové reakce jako např. v petrochemickém průmyslu jsou běžné průtočné reaktory [1].

1.1 Dělení reaktorů

Reaktory mohou být děleny podle rozličných kritérií v závislosti na tom, který způsob je v dané situaci vhodnější. Z toho důvodu jsou v této kapitole uvedeny jen ty nejčastěji používané způsoby dělení.

1.1.1 Podle typu operace

Nejzákladnější způsob klasifikace chemických reaktorů vychází z toho, jak reaktory pracují v čase a z toho jakou mají konstrukci [2].



Obr. 1. Dělení chemických reaktorů podle typu operace a konstrukce

Vsádkové reaktory

Do vsádkových reaktorů je veškerý materiál umístěn před jednorázovým započítím reakce a po jejím ukončení je výsledný produkt kompletně odebrán. Žádný materiál není během reakce přidáván ani odebírán [1]. Systém je uzavřený. Tlak, teplota a složení směsi v reaktoru jsou funkcí času [3].

Polovsádkové reaktory

Polovsádkové reaktory kombinují vlastnosti dávkových a průtočných reaktorů. Tyto reaktory jsou v podstatě vsádkové, avšak disponují buď kontinuálním vstupem nebo výstupem [1].

Průtočné reaktory

Průtočné reaktory reprezentují nejširší skupinu reaktorů. Tyto reaktory jsou v průmyslu často využívány. U průtočných reaktorů jsou výchozí složky kontinuálně přidávány a produkty kontinuálně odváděny. Jako přímo měřitelná veličina zde nevystupuje čas, ale proměnné nástřik, objem reaktoru a dosažená přeměna [3]. Mezi průtočné reaktory patří *průtočný míchaný reaktor* [4] a *trubkový reaktor*. Někdy je také rozlišován *průtočný promíchávaný reaktor s uzavřenou smyčkou* [1].

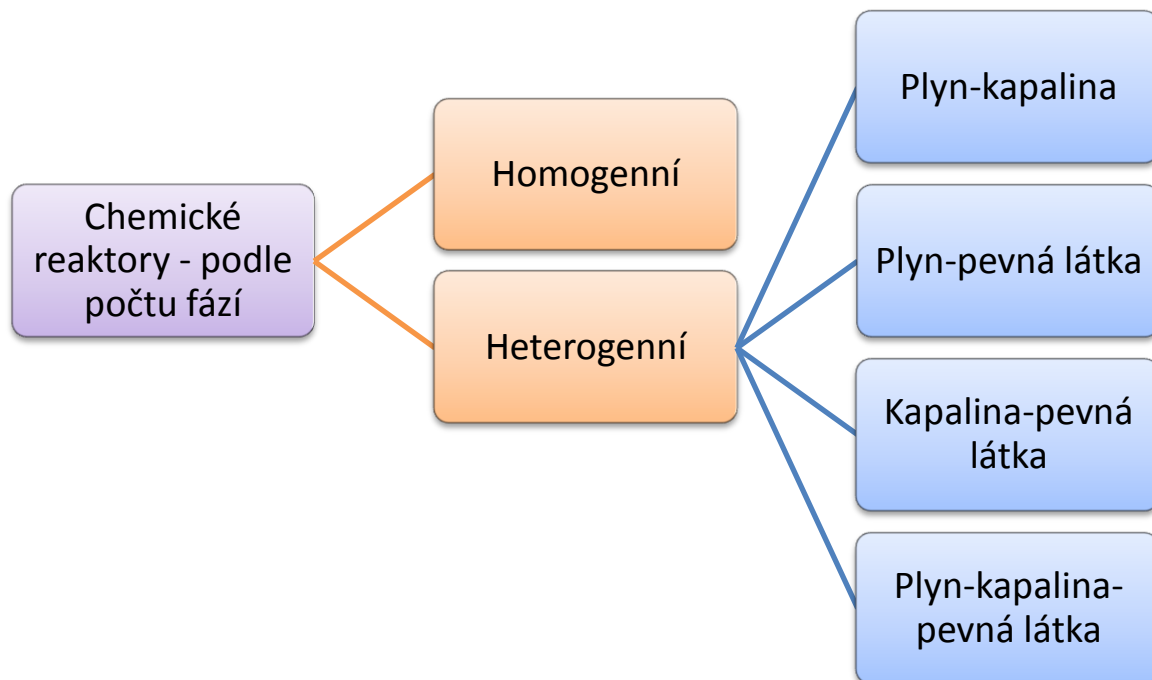
Do průtočných míchaných reaktorů (v dalším textu označované jako CSTR z anglického Continuous Stirred Tank Reactor) jsou reaktanty kontinuálně přidávány do dokonale promíchávané nádoby s reakční směsí, přičemž výsledný produkt je také kontinuálně odváděn [1]. Jedná se tedy o míchanou nádobu, do které konstantní rychlostí natéká výchozí reakční směs. Reaktor pracuje v ustáleném stavu, což znamená, že stejnou rychlostí, jako přitéká reakční směs, musí odtékat výsledný produkt [4]. Tyto reaktory bývají v českojazyčné odborné literatuře také označovány jako průtočné reaktory nebo průtočné reaktory s dokonale promíchávaným obsahem [3].

Trubkové reaktory (anglicky plug-flow reactor – PFR) se skládají z dlouhé trubky, kterou protéká reakční směs konstantní rychlostí [4]. Reakční směs se pohybuje v této trubce jedním směrem, což má za následek měnící se koncentraci po délce reaktoru [1].

V průtočném promíchávaném reaktoru s uzavřenou smyčkou (anglicky recycle reactor [1], nebo také CSTR with recycle [5], či loop reactor [6]) je část nebo celé množství výstupní směsi vracena na vstup do reaktoru. Tento typ chemického reaktoru umožňuje kontinuální produkci za podmínek, které jsou na hranici mezi CSTR a PFR.

1.1.2 Podle počtu fází

Reaktory lze rozdělit podle počtu fází, které se v jakémkoliv čase nachází v reakční směsi na homogenní a heterogenní. Homogenní reaktory obsahují v celém svém objemu pouze jedinou fázi, zatímco heterogenní reaktory obsahují více skupenských fází. Jak je vidět z (Obr. 2.) existuje několik možných kombinací fází [1].



Obr. 2. Dělení chemických reaktorů podle počtu fází

1.1.3 Podle typu reakce

Chemické reaktory se také často rozlišují podle typu chemické reakce, která v nich probíhá. Nejčastěji se tak lze v odborné literatuře setkat s následujícími typy reaktorů.

Katalytické reaktory

Aby bylo dosaženo pro probíhající reakci nezbytných reakčních podmínek, na něž je chemický reaktor konstruován, je vyžadována přítomnost katalyzátoru či katalyzátorů [1].

Nekatalytické reaktory

Probíhající reakce nezahrnuje přítomnost katalyzátoru [1].

Autokatalytické reaktory

Jedná se o takové reaktory, kde zvýšená koncentrace jednoho z reakčních produktů zvyšuje rychlost reakce [1].

Biologické reaktory

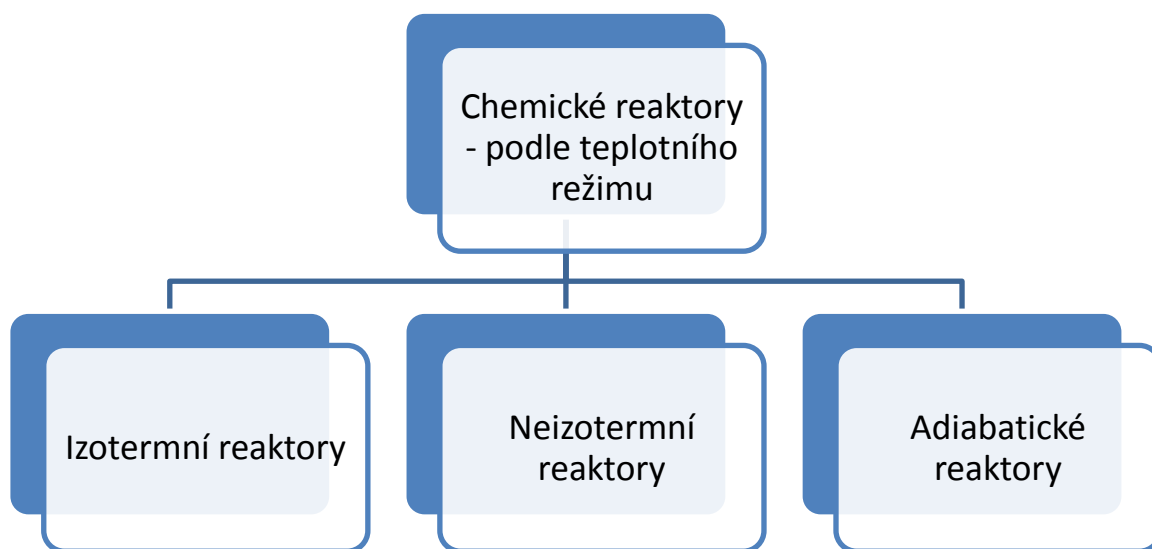
Biologické reaktory zahrnují chemické reakce, kde se vyskytují živé buněčné organismy (enzymy, bakterie, kvasinky), části buněk, popřípadě výstupy z buněčných organismů, které jsou nezbytné pro běh reakce [1].

Polymerizační reaktory

V těchto reaktorech dochází k formování molekulových řetězců, buď na pevném základu, nebo v roztoku [1].

1.1.4 Podle teplotního režimu

Podle toho v jakém teplotním režimu chemický reaktor pracuje, rozlišují se tři teplotní režimy (*Obr. 3.*).



Obr. 3. Dělení chemických reaktorů podle teplotního režimu

Izotermní vedení reakce znamená, že v reaktoru během reakce udržujeme konstantní teplotu. U vsádkových a průtočných míchaných reaktorů se izotermní režim technicky zabezpečuje ohřevem či chlazením pláště (tzv. duplikátor), vestavěnými hady, nebo přečerpáváním reakční směsi přes výměník tepla. U trubkových reaktorů se výměna tepla technicky zabezpečuje opět dvojitým pláštěm (soproudý či protiproudý princip) nebo uložením trubek do chladicího či ohřevného prostoru (media). Energetická bilance říká, že kolik tepla se během reakce v reaktoru vyvine, či spotřebuje, tolik se jej musí vyměnit na povrchu výměnného zařízení [4].

Neizotermní průběh znamená, že během reakce dochází ke změně teploty [4]. V energetické bilanci pak přibude třetí člen značící teplo dodané či odvedené z reaktoru.

Adiabatický reaktor je takový, který je izolovaný. To znamená, že během reakce nedochází k výměně tepla s okolím. Teplo vyvinuté při reakci se spotřebuje na ohřev reakční směsi [4].

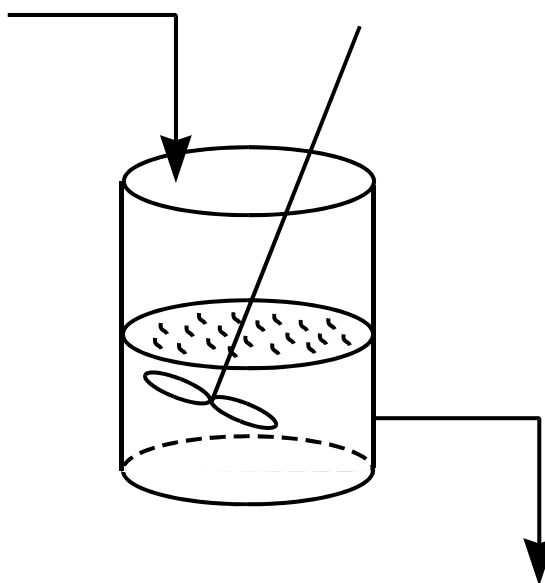
2 PRŮTOČNÉ MÍCHANÉ CHEMICKÉ REAKTORY

Průtočné míchané chemické reaktory (CSTR), (viz [1]) patří mezi nejčastěji používané typy chemických reaktorů. Tyto reaktory pracují v rovnovážném stavu a nejčastěji pracují s reaktanty v kapalném skupenství, ačkoli jsou schopny pracovat i s plyny či pevnými látkami.

CSTR mají kontinuální vstup reaktantů a současný kontinuální výstup produktů. U CSTR se předpokládá ideální promíchávání bez mrtvých zón a obtoků. Tyto reaktory mohou, ale nemusí, obsahovat příčky pro zvýšení víření kapaliny. Předpoklady pro ideální CSTR jsou následující:

1. Složení a teplota jsou stejné v celém objemu nádrže.
2. Odtok je stejný jako přítok.
3. Reaktor pracuje v ustáleném stavu.

Tradičně bývá CSTR představován jako nádrž s míchadlem (*Obr. 4.*), toto však nemusí být ve všech případech úplně správné. Výše zmíněné podmínky a vlastnosti mohou být splněny dokonce i například v trubkovém reaktoru, jestliže v něm bude dosaženo dostatečného promíchávání, což bývá částečně splněno v heterogenních reaktorech plyn-kapalina, kde je reakční směs v koloně míchána probubláváním plynu.



Obr. 4. Zjednodušené schéma CSTR

CSTR bývá obzvláště užitečný pro reakce, které vyžadují nízké koncentrace. Tyto reaktory bývají také nasazovány pro heterogenní systémy, u kterého intenzivní míchání zaručuje dobrý kontakt mezi fázemi. Reaktory CSTR s fázemi kapalina-kapalina jsou používány pro saponifikaci tuků a emulzní polymerace. Reaktory CSTR s fázemi plyn-kapalina jsou využívány např. při oxidaci cyklohexanu. Homogenní reaktory CSTR pro plynnou fázi jsou velice vzácné.

Mezi výhody CSTR patří jeho fungování v rovnovážném stavu, zpětné vmíchávání tepla vznikajícího exotermní reakcí do reakční směsi (což zvyšuje reakční rychlost a následně i účinnost reaktoru), dále pak zamezení vzniku „hot spotů“ pro silně exotermní reakce (což má za následek snadnější regulaci teploty), výhodnost pro reakce nižších řádů v paralelních reakčních schématech, vysoká ekonomičnost u velkoobjemových reakcí vyžadujících delší čas a v neposlední řadě také zlepšování přestupu tepla mícháním.

Díky tomu, že se s rostoucím stupněm konverze snižuje rychlost reakce, mají izotermní CSTR nižší koncentraci produktu ve výstupní reakční směsi než trubkové reaktory. Další nevýhodou CSTR reaktorů je obvykle větší objem (rozměry) reaktoru než u jiných typů chemických reaktorů. Mezi nevýhody také patří fakt, že energie spotřebovaná na míchání zvyšuje výrobní náklady.

3 MODELOVÁNÍ A SIMULACE

Pro studium složitých jevů ve vědě a technice bývá často využíváno modelů těchto jevů. Model musí vyjadřovat ty stránky daného jevu, které jsou z hlediska studia zkoumání důležité. Využívá se přitom vzájemné analogie: Je-li vytvořen umělý systém, jehož chování bude podobné chování původního systému, potom umělý systém je modelem původního systému. Proces tvorby modelu se nazývá modelování, při tvorbě modelu dochází z hlediska přesnosti k redukci vzhledem k původnímu systému [11].

Je-li k dispozici matematický model systému, potom lze experimentování se systémem nahradit experimentováním s jeho matematickým modelem. Při experimentování s modelem je napodobována nějaká situace nebo jsou vytvářeny podmínky, které mohou nastat u skutečného systému během normálních, resp. havarijních pracovních podmínek. Tyto činnosti jsou nazývány simulací. Při interpretaci výsledků je pak využívána zpětná podobnost:

matematický model \rightarrow systém [11]

Velmi často jsou průmyslové procesy považovány za jakési „černé skříňky“ (angl. black-box), což znamená, že není známa vnitřní struktura systému a k dispozici jsou pouze vstupně-výstupní data. Simulace může být jedním ze způsobů jak se vypořádat s touto vnitřní neurčitostí. Ze získaných vstupních a výstupních dat lze pak odvodit vlastnosti systému pomocí matematických nástrojů, jako jsou diferenciální rovnice, přenosové funkce, přechodová funkce, impulzová funkce apod. [2].

3.1 Typy systémů

Než začneme s vysvětlováním pojmů z oblasti modelování a simulace tak si nejprve uvedeme základní typy systémů, s jejichž modelováním se v průmyslové praxi lze setkat.

Nejčastěji se systémy dělí:

- lineární
- nelineární

U lineárních systémů mohou být veškeré vztahy mezi proměnnými popsány pomocí lineárních závislostí. U nelineárních systémů se vyskytují i nelineární rovnice.

- se soustředěnými parametry
- s rozloženými parametry

Systémy se soustředěnými parametry jsou takové, ve kterých jsou stavové proměnné nezávislé na poloze (souřadnicích). Systémy s rozloženými parametry nazýváme takové, u nichž jsou stavové proměnné funkcí polohy a času.

- spojité
- diskrétní

Spojité systémy zde se všechny veličiny mění v čase spojitě. V diskrétních systémech se parametry mění v čase nespojitě.

- deterministické
- stochastické

Systémy deterministické se vyznačují jednoznačně přiřazenými příčinami a jejich následky. U stochastických systémů buď sám zkoumaný problém, nebo metoda řešení, mají náhodný charakter [12].

- stacionární (t-invariantní)
- nestacionární (t-variantní)

Systémy stacionární (t-invariantní) jsou proměnné nezávislé na čase. Systémy nestacionární (t-variantní) jsou proměnné na čase závislé.

Dále rozlišujeme systémy dle počtu vstupních a výstupních proměnných:

- SISO (Single input single output)
- SIMO (Single input multiple output)
- MISO (Multiple input single output)
- MIMO (Multiple input multiple output)

Systémy SISO mají jeden vstupní signál a jeden signál výstupní. Systémy SIMO, jsou s jedním vstupem a více výstupy. Systémy MISO mají více vstupů a jeden výstup. Systémy MIMO, jsou s více vstupy a více výstupy [2].

3.2 Modelování

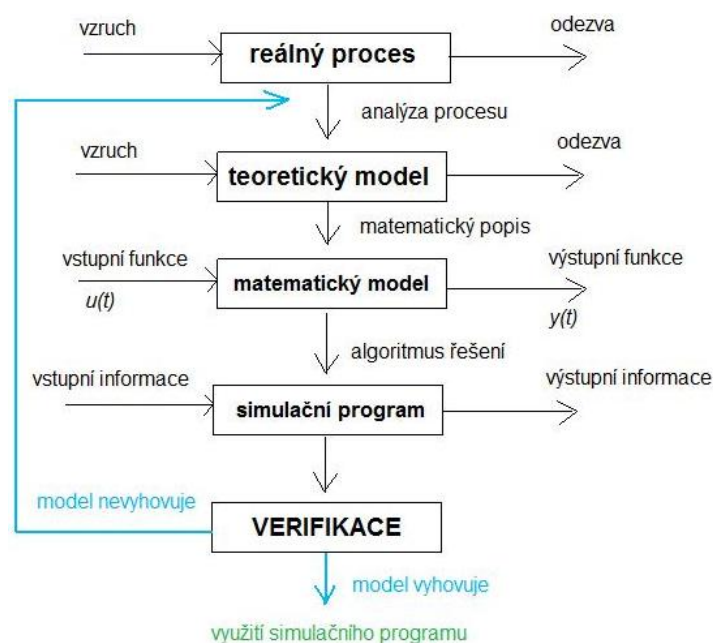
Ačkoli do oblasti modelování (a simulací) patří i tvorba fyzických (reálných) modelů, v následujícím textu se omezíme na matematické modelování, jehož výsledkem jsou modely abstraktní [11].

Při modelování mohou být použity dva přístupy. Prvním z nich je sběr naměřených dat vstupních a výstupních proměnných. Výsledný model pak bývá nazýván vstupně výstupní model a popsána metoda jako empirický přístup. Nevýhoda těchto modelů tkví v tom, že popisují pouze vztahy mezi vstupními a výstupními proměnnými a neposkytují žádné informace o struktuře systému [2].

System bývá obvykle popsán různými typy veličin, jako jsou teplota, tlak, průtok, koncentrace apod., které popisují proces z matematického hlediska. Tyto veličiny bývají nazývány stavovými proměnnými a vztahy mezi nimi se používají při druhém přístupu – analytické metodě. Výsledný analytický (resp. matematický) model tedy popisuje vnitřní proměnné, vztahy mezi nimi a může být v podobě soustavy lineárních či nelineárních, obyčejných či parciálních diferenciálních rovnic [2].

3.2.1 Obecný postup vytváření deterministických matematických modelů

Matematický model je pouze abstrakcí skutečného systému, který je příliš složitý a částečně neznámý. Tudíž model nepopisuje přesně všechny vlastnosti a vztahy uvnitř systému, avšak pouze vybírá nejvíce důležité rysy a zavádí konstanty a zjednodušení. Je požadováno, aby matematický model popisoval skutečný systém co nejpřesněji a současně pokud možno co nejjednodušším způsobem. Nalezení vhodného kompromisu mezi těmito dvěma protichůdnými požadavky je jednou z nejtěžších otázek modelování [2].



Obr. 5. Obecný postup tvorby matematických modelů

Na (Obr. 5.) [13] jsou schematicky znázorněny jednotlivé fáze vytváření deterministického matematického modelu (viz [14]).

První fází je důkladná analýza procesu, při níž je nutno provést následující kroky – a) specifikace dějů, které probíhají v procesu a určení jejich podstaty, b) vymezení vlivů, které působí na proces a jeho průběh, c) určení veličin, které daný proces popisují, d) o každém z výše uvedených prvků je třeba rozhodnout, zda bude považován za podstatný a do modelu se bude zahrnovat, či nikoliv, e) o každém z výše uvedených prvků které jsou do modelu zahrnuty rozhodnout, zda bude brán v úvahu v celé šíři a ve všech souvislostech, nebo zda se použijí nějaká zjednodušení.

Výsledkem popsaného postupu je tzv. teoretický model. Nepopisuje zcela přesně skutečnost, ale jeho výhoda spočívá v jednoduchosti, přehlednosti a následně i ve snazším řešení výsledných rovnic.

V bodu e) se hovoří o zjednodušování některých vztahů při tvorbě teoretického modelu. Toto je to velmi důležitý krok, který je nutno vždy provádět a navíc má podstatný vliv na kvalitu výsledného modelu. Z toho důvodu je třeba uvést výčet nejpoužívanějších zjednodušujících předpokladů – rozdělování složitého systému na jednodušší subsystémy a jejich oddělené zpracování, přitom se dává zřetel na jejich vzájemné souvislosti, zavedení neexistující formy, např. ideální plyn, ideální kapalina, předpoklad, že materiál je homogenní a isotropní, předpoklad nezávislosti látkových vlastností na teplotě, u systémů, kde současně probíhají děje pomalé a rychlé, lze předpokládat, že rychlý děj již dosáhl rovnovážného stavu, linearizace nelineární závislosti, zanedbání ztrát, zavádění různých korekčních (obvykle empirických) koeficientů, použití empiricky zjištěných vztahů a závislostí mezi veličinami, zjednodušování geometrické proporce a volba vhodné souřadnicové soustavy, aby geometrie systému byla co nejjednodušeji popsána, zaváděním některých předpokladů se odstraňuje závislost sledovaných veličin na souřadnicích – získávají se tak tzv. modely se soustředěnými parametry.

Ve druhé fázi postupu je třeba sestavit na základě teoretického modelu matematický popis procesu. To znamená provedení následujících kroků – výběr matematického popisu zákonitostí použitých v teoretickém modelu, vytvoření modelových rovnic, tj. doplnění vybraných vztahů o zjednodušující předpoklady a potřebné matematické úpravy, určení podmínek řešení (obvykle počáteční a okrajové podmínky pro řešení diferenciálních rovnic). V této fázi se obvykle využívá matematických rovnic vyjadřujících známé zákony

a vztahy z fyziky, fyzikální chemie, chemie atd. Výsledkem tohoto postupu je obecný matematický model procesu. Také se může stát, že daný teoretický model matematicky popsat nelze; potom je nutno buď změnit teoretický model (zavést jiné nebo další předpoklady), nebo v krajním případě použít vhodných experimentálních postupů a jejich vyhodnocením získat náhradní popis děje (např. stochastický model).

Třetí fází celého postupu je řešení modelu, to znamená vytvoření simulačního programu. Provádí se následující kroky – volba metody řešení modelových rovnic, zpracování modelových rovnic pro řešení na počítači, tj. nalezení vhodného algoritmu řešení, sestavení výpočetního programu, nejlépe za použití vhodného simulačního jazyka.

Čtvrtou fází je vytvoření tzv. simulačního modelu. Jejím výsledkem je počítačový program vhodný pro používání v praxi. V této fázi jsou zahrnuty následující kroky – identifikace modelu, tj. nalezení neznámých hodnot parametrů modelu (např. porovnáním získaných výsledků řešení s údaji z literatury, s experimentálními hodnotami apod.), verifikace modelu, tj. řešení kontrolních úloh a analýza jejich výsledků za účelem ověření správnosti modelu v celé předpokládané oblasti použití, posouzení přesnosti a vhodnosti modelu pro daný účel.

Pokud model vyhovuje, může se začít s používáním. Jestliže nevyhovuje, je třeba zjistit, kde vznikla chyba, který z předpokladů byl neoprávněný, které zjednodušení je nepřijatelné, který vliv byl opominut nebo neoprávněně zanedbán. V tom případě je nutno zformulovat nový teoretický model a celý postup znovu zopakovat.

3.3 Vytváření matematických modelů na základě bilancí

Bilancemi se rozumí aplikace zákonů o zachování na daný systém. Jejich využití při vytváření matematických modelů je velice časté - odhaduje se, že je to 70 až 80 % případů. Bilancovat lze jen tzv. extenzivní veličiny. V praxi se jedná nejčastěji o zákony o zachování hmoty a energie - hovoříme pak o látkových a energetických bilancích (viz [14]).

Chceme-li se zabývat bilancováním, tak si musíme nejprve vyjasnit některé základní pojmy. Je to především bilancovaný systém - rozumíme jím nějakou (nejčastěji prostorovou) oblast, která má definované hranice (rozhraní) s okolím. Okolí je tedy to, co systém obklopuje. Další pojem je bilanční časový interval – je to časový úsek, během kterého bilancované veličiny sledujeme. Základní bilanční rovnice má tvar:

$$\text{VSTUP} + \text{VZNIK} = \text{VÝSTUP} + \text{AKUMULACE} \quad (1)$$

kde VSTUP je množství bilancované veličiny, které za bilanční časový interval vstoupí z okolí přes rozhraní do systému. VÝSTUP je množství bilancované veličiny, které za bilanční časový interval vystoupí ze systému přes rozhraní do okolí. VZNIK je množství bilancované veličiny, které za bilanční časový interval uvnitř systému vznikne nebo zanikne (rozumí se vznik z jiné, nebilancované veličiny, nebo změna na jinou, nebilancovanou veličinu). AKUMULACE je změna množství (zádrže) bilancované veličiny uvnitř systému za bilanční časový interval.

Při bilancování musíme nejprve zvolit velikost bilančního časového intervalu. Volba je dána jednoduchým pravidlem – pokud se bilance týká ustáleného stavu systému (tj. hodnoty veličin se s časem nemění), pak se může volit časový interval zcela libovolný, nejčastěji jednotkový, pokud chceme modelovat systém jako proměnný v čase (tzv. dynamický model), pak se musí volit bilanční časový interval infinitesimálně malý.

Dalším důležitým krokem je volba hranic systému. Vychází se při ní jednak ze skutečného (konstrukčního) tvaru systému, jednak z toho, zda chceme vytvořit model systému se soustředěnými parametry (v matematickém popisu nefigurují souřadnice jako nezávisle proměnné), nebo s rozloženými parametry (alespoň jedna souřadnice je v matematickém popisu použita jako nezávisle proměnná). Pravidlo pro volbu velikosti bilancovaného systému je opět (podobně jako u časového intervalu) jednoduché – jedná-li se o model se soustředěnými parametry, pak se volí rozměry bilancovaného systému libovolně (např. podle konstrukčního tvaru aparátu), jedná-li se o model s rozloženými parametry, pak rozměr bilancovaného systému ve směru té souřadnice, na níž problém závisí (figuruje v popisu jako nezávisle proměnná), musí být infinitesimálně malý.

S volbou rozhraní úzce souvisí volba vhodné souřadnicové soustavy. Tu se snažíme volit vždy tak, aby získaný matematický model byl co nejjednodušší. Základní souřadnicové soustavy jsou kartézská (pravoúhlá), cylindrická (válcová) a sférická (kulová). Jejich popis je dostupný v matematické literatuře. Při volbě je třeba se řídit následujícími zásadami – nejčastěji se používají kartézské souřadnice (jako nejobecnější), pro problémy souměrné kolem osy se používají cylindrické souřadnice, pro středově souměrné problémy se používají sférické souřadnice.

Důležitá je tzv. volba kladných směrů ve vybrané souřadnicové soustavě. Jestliže se důsledně neprovádí a nedodrží, vznikají neřešitelné znaménkové problémy vedoucí k nesprávným výsledkům. Pokud jsme v jejich dodržování důslední, nemusíme se o znaménka vstupu, výstupu a akumulace vůbec starat - vycházejí automaticky. Fyzikální zákony už totiž ve svém matematickém vyjádření správné znaménko zahrnují. Znaménko musíme úvahou určit jedině pro zdrojový člen: jedná-li se o vznik veličiny, je jeho znaménko kladné, jedná-li se o zánik, je záporné.

4 SIMULACE

Simulací (pro účely matematického modelování) rozumíme řešení rovnic matematického modelu, přičemž měníme podle potřeby hodnoty vstupních signálů a parametrů a sledujeme jejich vliv na hodnoty výstupních signálů. U modelů dynamických systémů to znamená řešit diferenciální rovnice nebo jejich soustavy. Postupů analytického řešení známých z matematiky lze zde také použít, ale spíše v jednodušších případech. Většinou volíme řešení numerické. Navíc jsou k dispozici simulační jazyky, jejichž používání je většinou snadné a nevyžaduje příliš hluboké znalosti z programování a práce s počítačem [14].

Výpočet ustálených stavů

Ustálený stav značí, že se počítá v čase $t \rightarrow \infty$, kdy už nedochází k časovým změnám jednotlivých veličin (nebo jen minimálně). To znamená, že při výpočtu rovnic, kde se vyskytují derivace podle času, se položí tyto derivace rovny nule:

$$\frac{\partial(\cdot)}{\partial t} = 0 \quad (2)$$

Nikdy nelze určit, jak takový stav bude vypadat. Při simulaci se používají metody, které jsou cyklické a pomocí nichž se lze k požadovanému řešení přiblížit s danou přesností. Existuje více iteračních metod, ať už pro řešení jedné rovnice o jedné neznámé, kde se nabízí například Metoda prosté iterace, Newtonova metoda, nebo také metody pro řešení soustav lineárních algebraických rovnic, jako jsou například Jacobiova metoda, Gauss-Seidlova metoda, apod. Pro statickou analýzu jsem zvolila Metodu prosté iterace (viz [16]). Je to pro její jednoduchost a snadné naprogramování a nepotřebuje speciální úpravy.

4.1 Metoda prosté iterace

Nelineární systémy bývají popsány rovnicí:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)] \quad (3)$$

s počáteční podmínkou $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^s$

Kde $\mathbf{x}(t)$ je vektor stavových veličin, $\mathbf{u}(t)$ je vektor vstupních veličin, \mathbf{x}^s je vektor vstupních proměnných.

Počáteční podmínky jsou řešením rovnic v ustáleném stavu, obecně:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}^s, \mathbf{u}^s) = 0 \quad (4)$$

Kde \mathbf{u}^s je vektor vstupní proměnné.

Úlohou je řešení nelineární soustavy $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$, kde $\mathbf{f}^T = (f_1, f_2, \dots, f_n)$ je nelineární vektorová funkce.

Soustavu rovnic $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$ nahradíme ekvivalentní soustavou rovnic $\mathbf{x} = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$

kde $\boldsymbol{\varphi}$ je nelineární vektor funkce $\boldsymbol{\varphi}^T = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$ a to vede k vytvoření iterační rovnice:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}^k) \text{ pro } k = 0, 1, \dots \quad (5)$$

Podmínka konvergence iteračního procesu zní, ať vektorová funkce $\boldsymbol{\varphi}$ je definovaná v uzavřené konvexní oblasti D , platí pro $\mathbf{x} \in D$ také $\boldsymbol{\varphi} \in D$. Ať funkce $\boldsymbol{\varphi}$ mají v D spojitě parciální derivace prvního řádu podle všech proměnných $x_1 \div x_n$. Potom existuje matice:

$$\boldsymbol{\varphi}' = \frac{d\boldsymbol{\varphi}}{d\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{d\varphi_1}{dx_1} & \frac{d\varphi_1}{dx_2} & \dots & \frac{d\varphi_1}{dx_n} \\ \frac{d\varphi_2}{dx_1} & \frac{d\varphi_2}{dx_2} & \dots & \frac{d\varphi_2}{dx_n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{d\varphi_n}{dx_1} & \frac{d\varphi_n}{dx_2} & \dots & \frac{d\varphi_n}{dx_n} \end{pmatrix} \quad (6)$$

A dále ať je splněno $\|\boldsymbol{\varphi}'(\mathbf{x})\| < 1$ pro každé $\mathbf{x} \in D$, kde a) existuje pouze jedno řešení $\mathbf{x}^* \in D$ soustavy $\mathbf{x} = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ b) iterační metoda konverguje, tzn. $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*$ pro libovolné $\mathbf{x}^{(0)} \in D$.

4.2 Numerické řešení diferenciálních rovnic

Při simulaci dynamických systémů reprezentovaných soustavou diferenciálních rovnic se používá řada numerických metod [10]. Metody lze rozčlenit podle mnoha kritérií do různých tříd: *Metody jednokrokové* (Eulerova metoda, Heunova metoda, Runge-Kuttovy metody), které počítají funkční hodnotu v daném bodě $y_i + 1$ z jedné předcházející funkční hodnoty y_i . *Metody vícečrokové* (Adams-Bashforthova) počítají funkční hodnotu v daném

bodě $y_i + 1$ z více předcházejících funkčních hodnot $y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-k+1}$. *Metody explicitní* (Eulerova metoda, Heunova metoda), *Metody implicitní* (Adamsova-Moultonova metoda) [8].

4.2.1 Metody jednokrokové

Eulerova metoda [8] je nejjednodušší metodou numerického řešení obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu ve tvaru:

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (7)$$

s danými počátečními podmínkami:

$$y(0) = y_0 \quad (8)$$

Eulerova metoda pro řešení jednoho kroku úlohy má obecný tvar:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

kde veličina h je integrační krok.

4.2.2 Runge-Kuttovy metody

Runge-Kuttovy metody jsou zdaleka nejčastěji užívané obecné jednokrokové metody. Vynikají svou jednoduchostí a v případě vyšších řádů (nejpoužívanější 4. řád) i relativně vysokou přesností [8]. Klasická Runge-Kuttova metoda (běžně označovaná RK4) byla velmi populární především v době, kdy se ještě nepoužívaly samočinné počítače a kdy proto velmi významným kritériem byla jednoduchost metody [7].

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(0) = y_0 \quad (10)$$

Potom řešení úlohy (jednoho kroku řešení) pomocí metody Runge – Kutta je dán rovnicí:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (11)$$

Kde k_i jsou konstanty dle vztahů:

$$k_1 = f(x_n, y_n) \quad (12)$$

$$k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} k_1\right) \quad (13)$$

$$k_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} k_2\right) \quad (14)$$

$$k_4 = f(x_n + h, y_n + h k_3) \quad (15)$$

Pro tuto práci byla použita *Dormand-Princeova metoda* (viz praktická část strana 40), která patří do skupiny Runge-Kuttových metod. Je jako primární algoritmus využívána pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic v softwarových balících MATLAB (ode45). Použití funkce ode45 v MATLABU je velmi jednoduché.

PRAKTICKÁ ČÁST

5 CÍLE DIPLOMOVÉ PRÁCE

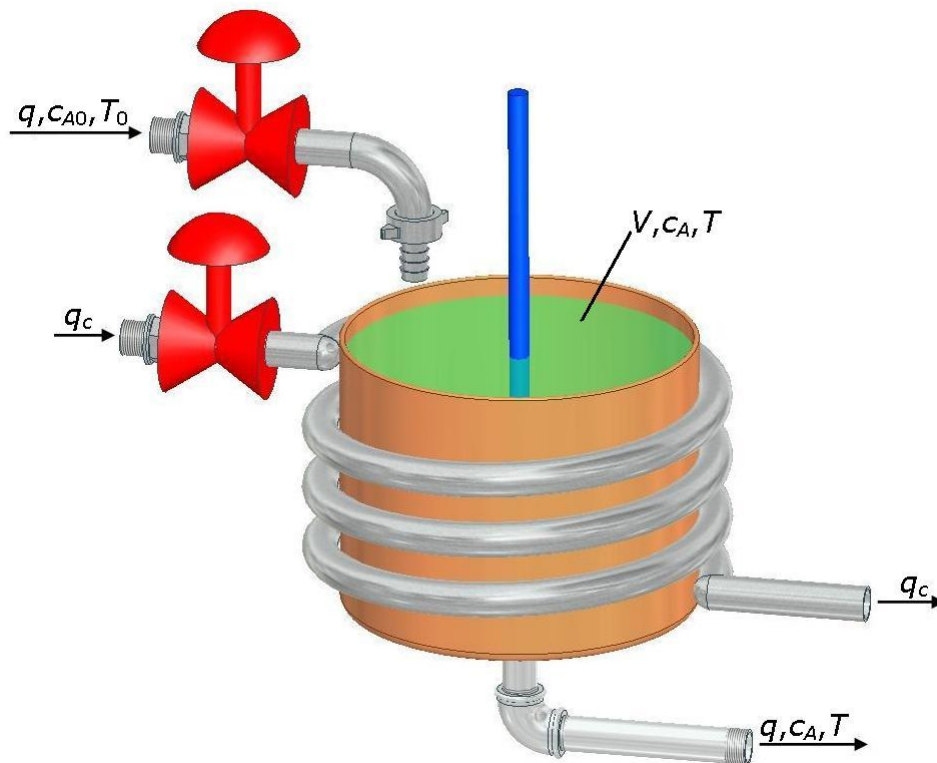
Praktická část řeší těchto pět bodů:

- 1) Nalezení matematického modelu průtočného chemického reaktoru vhodného jako simulační příklad.
- 2) Provedení statické analýzy systému pro různé vstupní veličiny.
- 3) Provedení dynamické analýzy pro různé skoky vstupních veličin.
- 4) Sestavení simulačního programu v MATLABU pomocí GUI, který umožní provádět statickou a dynamickou analýzu pro různé vstupní veličiny bez nutnosti znalosti programování.
- 5) Vytvoření dokumentace k ovládání programu.

Statická analýza systému se provede jednoduchou iterační metodou (viz teorie kapitola 4.1 strana 25). Dynamická analýza se provede pomocí metody Runge-Kutta ode45, která je plně realizována v použitém matematickém softwaru MATLAB. Po sestavení simulačního programu v MATLABU pomocí GUI se umožní provádět statická a dynamická analýza pro různé vstupní veličiny.

6 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR

Pro práci byl zvolený průtočný chemický reaktor s ideálním promícháváním a se spirálovým chlazením (Obr. 6.) [15].



Obr. 6. Průtočný reaktor s dokonale promíchaným obsahem

Matematický model reaktoru vychází z rovnic tepelné a materiálové bilance.

Tepelná bilance:

$$\frac{dT}{dt} = a_1 \cdot (T_0 - T) + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A + a_3 \cdot q_c \cdot \left(1 - e^{\frac{a_4}{q_c}}\right) \cdot (T_{c0} - T) \quad (16)$$

Materiálová bilance:

$$\frac{dc_A}{dt} = a_1 \cdot (c_{A0} - c_A) - k_1 \cdot c_A \quad (17)$$

Kde a_{1-4} jsou konstanty vypočtené:

$$a_1 = \frac{q}{V}; \quad a_2 = \frac{-\Delta H}{\rho \cdot c_p}; \quad a_3 = \frac{\rho_c \cdot c_{pc}}{\rho \cdot c_p \cdot V}; \quad a_4 = \frac{-h_a}{\rho_c \cdot c_{pc}} \quad (18)$$

Proměnné z rovnic uvedených výše: t označuje čas, T označuje teplotu produktu, V označuje objem reaktoru, c_A označuje koncentraci produktu, q a q_c označují objemové průtoky reaktantu a chladicí kapaliny, indexy $(\cdot)_0$ značí vstupní hodnoty proměnných, indexy $(\cdot)_c$ se používají pro proměnné vztahující se k chlazení.

Rychlostní konstanta k_1 je vypočtena z Arrheniova zákona

$$k_1 = k_0 \cdot e^{\frac{-E}{RT}} \quad (19)$$

Kde k_0 označuje konstantní reakční rychlost, E označuje aktivační energii, R označuje plynovou konstantu. Jde o nelineární systém se soustředěnými parametry, kde nelinearita je způsobena tím, že T jako stavová veličina je obsažena ve výpočtu rychlostní konstanty rovnice (19).

Zadané parametry reaktoru jsou uvedeny v *Tab. 1*.

Tab. 1. Zadané parametry reaktoru

Průtok reaktantu	$q = 100 [l \cdot min^{-1}]$
Objem reaktoru	$V = 100 [l]$
Konstantní reakční rychlost	$k_0 = 7.2 \cdot 10^{10} [min^{-1}]$
Aktivační energie vztažená na R	$E/R = 1 \cdot 10^4 [K]$
Přívodní teplota reaktantu	$T_0 = 350 [K]$
Reakční teplo	$\Delta H = -2 \cdot 10^5 [cal \cdot mol^{-1}]$
Měrné teplo reaktantu	$c_p = 1 [cal \cdot g^{-1} \cdot K^{-1}]$
Měrné teplo chlazení	$c_{pc} = 1 [cal \cdot g^{-1} \cdot K^{-1}]$
Hustota reaktantu	$\rho = 1 \cdot 10^3 [g \cdot l^{-1}]$
Hustota chlazení	$\rho_c = 1 \cdot 10^3 [g \cdot l^{-1}]$
Koncentrace reaktantu	$c_{A0} = 1 [mol \cdot l^{-1}]$
Součinitel prostupu tepla	$h_a = 7 \cdot 10^5 [cal \cdot min^{-1} \cdot K^{-1}]$

Zadané parametry pracovního bodu:

$q_c = 80 [l \cdot \text{min}^{-1}]$ Průtok chladicí kapaliny

$q = 100 [l \cdot \text{min}^{-1}]$ Průtok reaktantu

$T_0 = 350 [K]$ Přívodní teplota reaktantu

$T_{c0} = 350 [K]$ Vstupní teplota chladicí kapaliny

$c_{A0} = 1 [mol \cdot l^{-1}]$ Koncentrace reaktantu

7 STATICKÁ ANALÝZA

Statická analýza ukazuje chování systému v ustáleném stavu tj. v $t \rightarrow \infty$ a výsledky v optimálním pracovním bodě ve smyslu maximální efektivity a koncentrace produktu. Matematicky to znamená, že derivace se položí rovno nule $dT/dt = 0$ a $dc_A/dt = 0$. Původní matematický model systému je popsán soustavou nelineárních diferenciálních rovnic a po převodu do ustáleného stavu získáváme soustavu nelineárních algebraických rovnic.

$$0 = a_1 \cdot (T_0 - T^S) + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A^S + a_3 \cdot q_c \cdot \left(1 - e^{\frac{a_4}{q_c}}\right) \cdot (T_{c0} - T^S) \quad (20)$$

$$0 = a_1 \cdot (c_{A0} - c_A^S) - k_1 \cdot c_A^S \quad (21)$$

Z rovnic se vyjádří ustálená hodnota T^S a c_A^S .

Odvození ustálené hodnoty T^S :

$$0 = a_1 \cdot T_0 - a_1 \cdot T^S + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A^S + (a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} - a_3 \cdot q_c \cdot T^S) \cdot \left(1 - e^{\frac{a_4}{q_c}}\right) \quad (22)$$

$$0 = a_1 \cdot T_0 - a_1 \cdot T^S + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A^S + a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} - a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}} - a_3 \cdot q_c \cdot T^S + a_3 \cdot q_c \cdot T^S \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} a_1 \cdot T^S + a_3 \cdot q_c \cdot T^S - a_3 \cdot q_c \cdot T^S \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}} \\ = a_1 \cdot T_0 + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A^S + a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} - a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}} \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} T^S \cdot (a_1 + a_3 \cdot q_c - a_3 \cdot q_c \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}}) \\ = a_1 \cdot T_0 + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A^S + a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} - a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}} \end{aligned} \quad (25)$$

$$T^S = \frac{a_1 \cdot T_0 + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A^S + a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} - a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}}}{a_1 + a_3 \cdot q_c - a_3 \cdot q_c \cdot e^{\frac{a_4}{q_c}}} \quad (26)$$

Výsledný vzorec pro ustálenou teplotu:

$$T^S = \frac{a_1 \cdot T_0 + a_2 \cdot k_1 \cdot c_A^S + a_3 \cdot q_c \cdot T_{c0} \left(1 - e^{\frac{a_4}{q_c}}\right)}{a_1 + a_3 \cdot q_c \cdot \left(1 - e^{\frac{a_4}{q_c}}\right)} \quad (27)$$

Odvození ustálené hodnoty c_A^S :

$$0 = a_1 \cdot (c_{A0} - c_A^S) - k_1 \cdot c_A^S \quad (28)$$

$$0 = a_1 \cdot c_{A0} - a_1 \cdot c_A^S - k_1 \cdot c_A^S \quad (29)$$

$$c_A^S(a_1 + k_1) = a_1 \cdot c_{A0} \quad (30)$$

Výsledný vzorec pro ustálenou koncentraci:

$$c_A^S = \frac{a_1 \cdot c_{A0}}{a_1 + k_1} \quad (31)$$

Statická analýza byla provedena pro ustálené hodnoty stavových proměnných T a c_A se zadaným pracovním bodem:

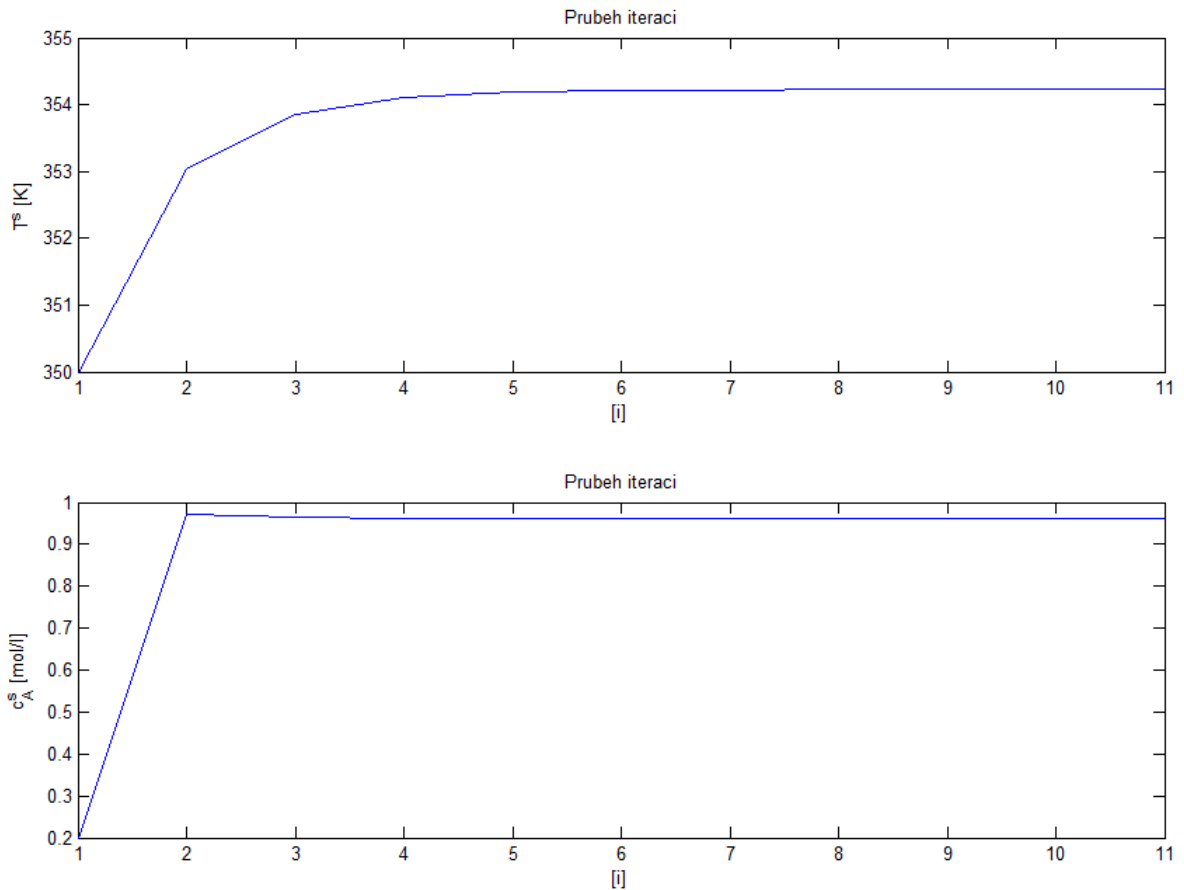
$$q_c = 80 [l \cdot \text{min}^{-1}], \quad q = 100 [l \cdot \text{min}^{-1}] \quad (32)$$

Výpočet statických charakteristik slouží jako výchozí bod pro určení optimálního pracovního bodu reaktoru. Což znamená určit parametry jednotlivých vstupních veličin tak, aby chod reaktoru a jeho výtěžnost byla optimální. Dále jsou ustálené hodnoty stavových veličin použity jako počáteční podmínky pro dynamiku.

Statická charakteristika pro ustálené hodnoty se provádí spuštěním *M-File ustalenystav.m* (Příloha P I).

Výpočet první statické charakteristiky je z upravených rovnic (27), (31) do kterých se zadaly známé parametry z *Tab. 1.*, a zadané parametry pracovního bodu (32), kde pomocí iteračního cyklu se spočítaly ustálené hodnoty. Iterační výpočet se provádí 100x s tou podmínkou, že pokud je rozdíl dvou po sobě jdoucích iterací menší než zadaná přesnost ($\varepsilon = 10^{-4}$), tak se výpočet ukončí. Jak je vidět z (*Obr. 7.*), ustálení hodnot proběhlo celkem brzy, to je do 10 iterace.

Z první statické analýzy (*Obr. 7.*) vyplývá, že ustálené hodnoty stavových veličin pro zadaný pracovní bod (32) jsou: $T^S = 354.2256 [K]$, $c_A^S = 0.9620 [mol \cdot l^{-1}]$.

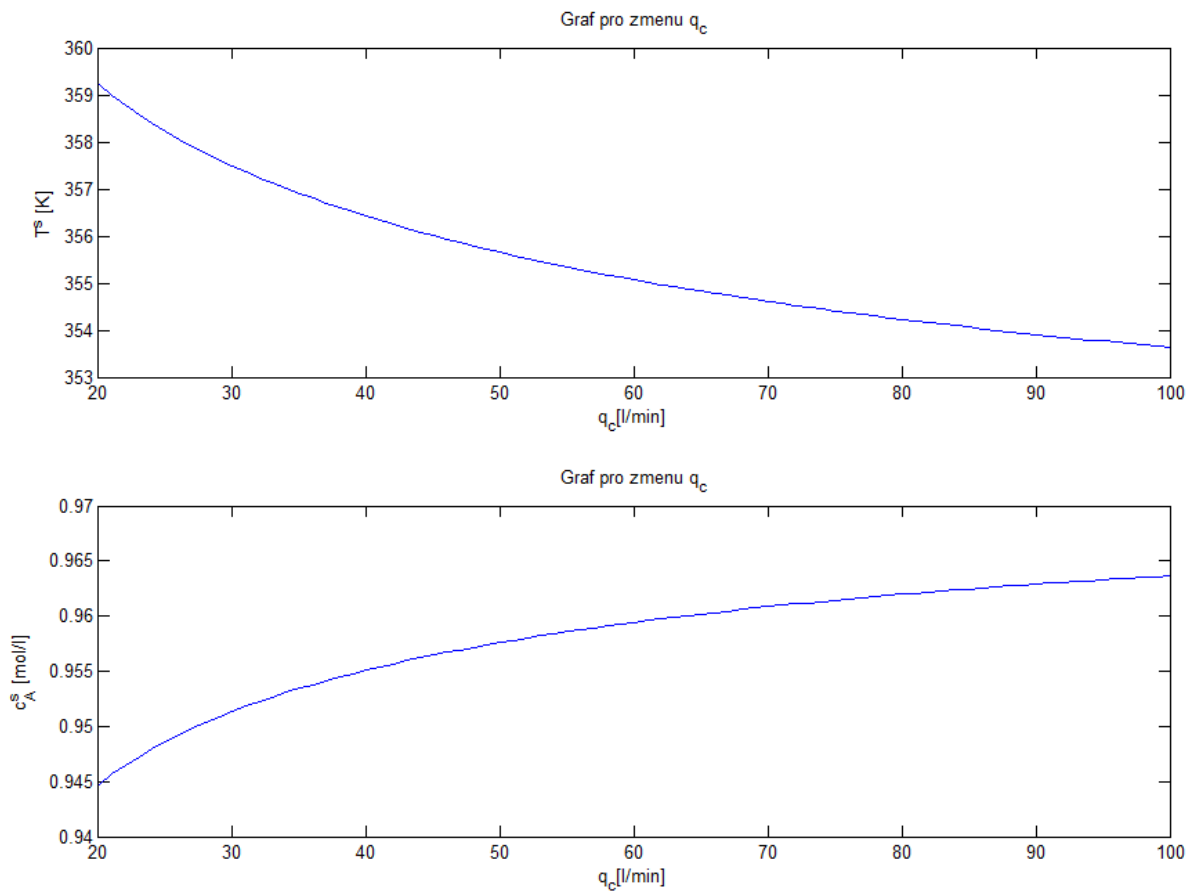


Obr. 7. Průběh iterací při výpočtu ustálené hodnoty teploty T^s a ustálené hodnoty koncentrace c_A^s

Další statické analýzy byly provedeny pro objemové průtoky reaktantu q v rozsahu $q = < 100, 200 > [l \cdot \text{min}^{-1}]$ (*M-File ustalenestavy_zmena_q.m* – Příloha P III) a pro objemové průtoky chladicí kapaliny q_c v rozsahu $q_c = < 20, 100 > [l \cdot \text{min}^{-1}]$ (*M-File ustalenestavy_zmena_qc.m* - Příloha P II).

Programové řešení těchto statických charakteristik znamená řešení dvou cyklů: první, vnitřní, je stejný jak v předchozím bodu, druhý, vnější, počítá ustálené hodnoty T^s a c_A^s pro různé hodnoty vstupního průtoku q_c v rozsahu $q_c = < 20, 100 > [l \cdot \text{min}^{-1}]$ anebo pro různé hodnoty vstupního průtoku q v rozsahu $q = < 100, 200 > [l \cdot \text{min}^{-1}]$.

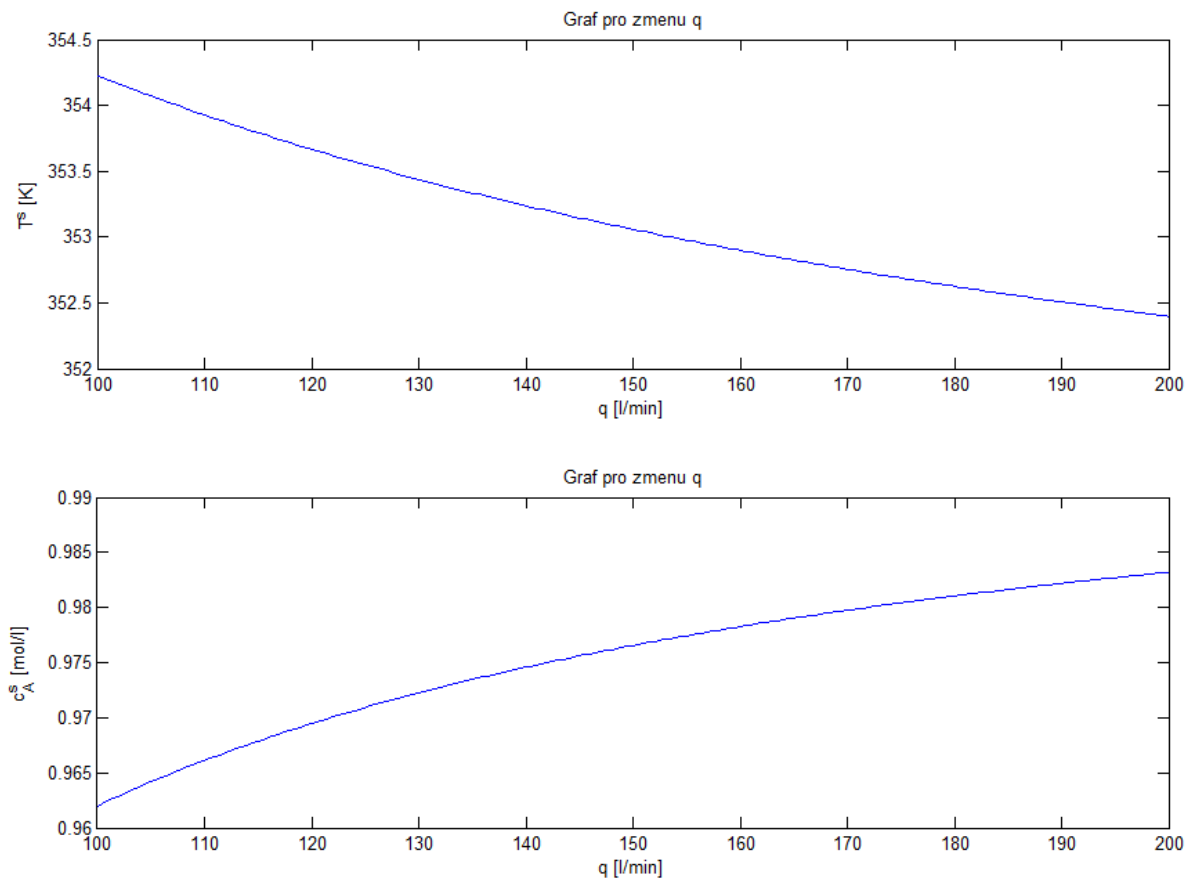
Pro různý průtok q_c je průběh výpočtu ustálených hodnot stavových veličin T^s a c_A^s uveden v (*Obr. 8.*).



Obr. 8. Průběh ustálených hodnot T^s a c_A^s pro různé hodnoty průtoku q_c

Z hodnot (Obr. 8.) vyplývá, že při větším průtoku chladicí kapaliny dochází ke snižování teploty a naopak s větším průtokem chladicí kapaliny koncentrace roste. Jde o nelineární průběh.

A pro různý průtok q je průběh výpočtu ustálených hodnot stavových veličin T^s a c_A^s uveden v (Obr. 9.).



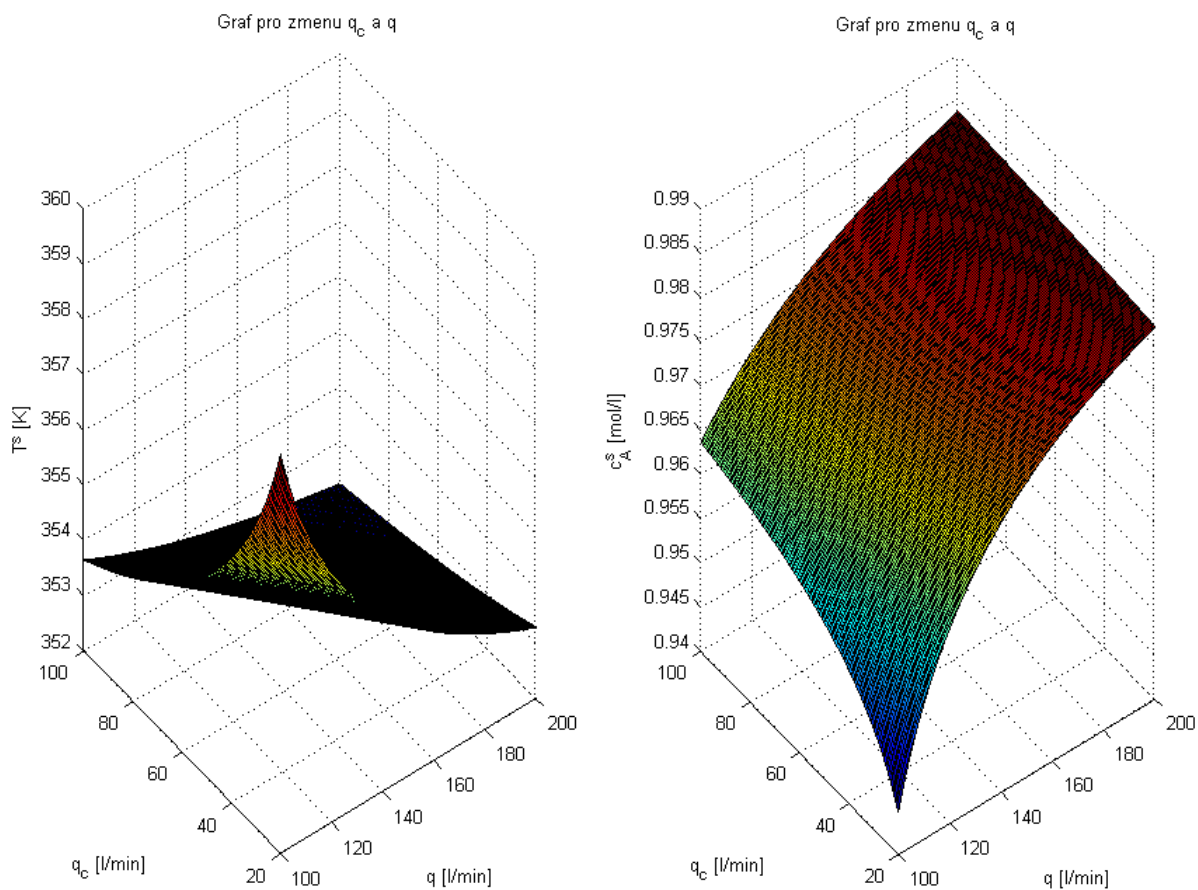
Obr. 9. Průběh ustálených hodnot T^S a c_A^S pro různé hodnoty průtoku q

Z hodnot (Obr. 9.) vyplývá, že při větším průtoku reaktantu dochází ke snižování teploty a naopak s větším průtokem reaktantu koncentrace roste. Jde o nelineární průběh.

Poslední statická charakteristika se provádí pro různé q a q_c spuštěním *M-File* *ustalenestavy_zmena_3D.m* (Příloha P IV) z čehož dostáváme grafy 3D.

Programové řešení této statické charakteristiky znamená řešení tří cyklů: první je stejný jak v předchozím bodu, druhý počítá ustálené hodnoty T^S a c_A^S pro různé hodnoty vstupního průtoku q v rozsahu $q = \langle 100, 200 \rangle [l \cdot \text{min}^{-1}]$ a třetí pro různé hodnoty vstupního průtoku q_c v rozsahu $q_c = \langle 20, 100 \rangle [l \cdot \text{min}^{-1}]$.

Poslední průběh v (Obr. 10.) ukazuje hodnoty ustálených stavových veličin jak pro změnu q tak i q_c .



Obr. 10. Průběh ustálených stavových veličin T^s a c_A^s pro různé hodnoty průtoku q a q_c

8 DYNAMICKÁ ANALÝZA

Dynamická analýza sleduje průběh stavových veličin v čase t [min] po skokové změně některých vstupních proměnných. V tomto případě se týkají skokové změny objemového průtoku q a q_c , tyto jsou vstupními proměnnými.

Dormand-Princeova metoda je jako primární algoritmus využívána pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic v softwarových balících MATLAB (ode45). Zde se tedy bude dynamická analýza počítat dle (ode45). Použití funkce ode45 v MATLABU je velmi jednoduché, viz následující příklad.

Ukázkový příklad (ode45)

Zadané rovnice a počáteční podmínky:

$$y'_1 = y_2 \cdot y_3, \quad y_1(0) = 0 \quad y'_2 = -y_1 \cdot y_3, \quad y_2(0) = 1 \quad y'_3 = -0.51 \cdot y_1 \cdot y_2, \quad y_3(0) = 1$$

Vytvoření funkce rigid soustava nelineárních diferenciálních rovnic se převede na soustavu nelineárních algebraických rovnic.

```
function dy = rigid(t,y)      % t-doba simulace, y-počáteční podmínky
dy = zeros(3,1);           % sloupcový vektor
dy(1) = y(2) * y(3);       % zadávání rovnic
dy(2) = -y(1) * y(3);
dy(3) = -0.51 * y(1) * y(2);
```

Při ukládání se musí název souboru shodovat s názvem funkce. V tomto případě rigid.m.

Výpočet: `[T,Y] = ode45(@rigid,[0 12],[0 1 1],options);`

Parametry [T,Y] určují názvy proměnných, kam se výsledek uloží. Parametr @rigid volá naši vytvořenou funkci. Hodnoty [0 12] určují časový interval. Uvedené hodnoty [0 1 1] jsou počáteční podmínky v čase 0. Parametr 'options' určuje strukturu volitelných parametrů, které mění vlastnosti výchozí integrace.

Pro dynamickou analýzu byl zvolen pracovní bod:

$$q_c = 80 [l \cdot \text{min}^{-1}], \quad q = 100 [l \cdot \text{min}^{-1}] \quad (33)$$

s ustálenými hodnotami T^s a c_A^s , které jsou zároveň počátečními podmínkami pro diferenciální rovnice (16) (17).

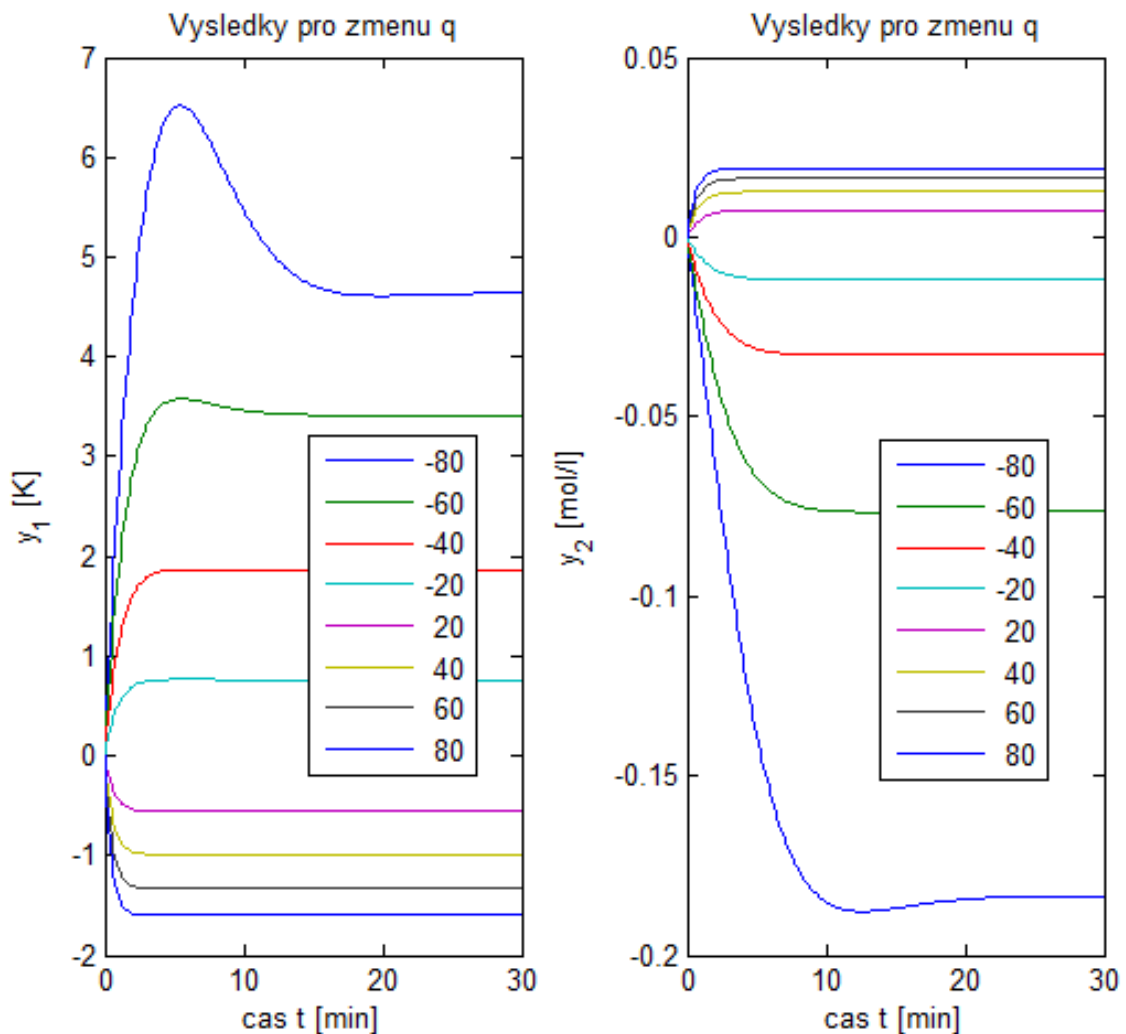
$$T^s = 354.2256 [K], c_A^s = 0.9620 [mol \cdot l^{-1}] \quad (34)$$

Dynamická analýza je řešena v *M-File dynamika.m* (Příloha P V).

Pro první dynamickou analýzu bylo provedeno osm skokových změn vstupního objemového průtoku reaktantu $q = (\pm 80\%, \pm 60\%, \pm 40\%, \pm 20\%)$. Výstupní proměnné v grafu (*Obr. 11.*) y_1 (teplota) a y_2 (koncentrace) představují rozdíl mezi skutečnou hodnotou a ustálenou hodnotou. Kvůli přehlednosti a lepšímu odečítání hodnot byly hodnoty výstupní veličiny sníženy o počáteční podmínku, tj. ustálenou hodnotu dané veličiny. Grafy tedy začínají od nuly, tj. (34).

$$y_1(t) = T(t) - T^s, \quad y_2(t) = c_A(t) - c_A^s \quad (35)$$

Výsledky doby odezvy na výstupu y_1 a y_2 pro různé skokové změny vstupních objemových průtoků reaktantu q jsou zobrazeny v (*Obr. 11.*). Simulace je provedena pro časový interval $[0, 30]$.

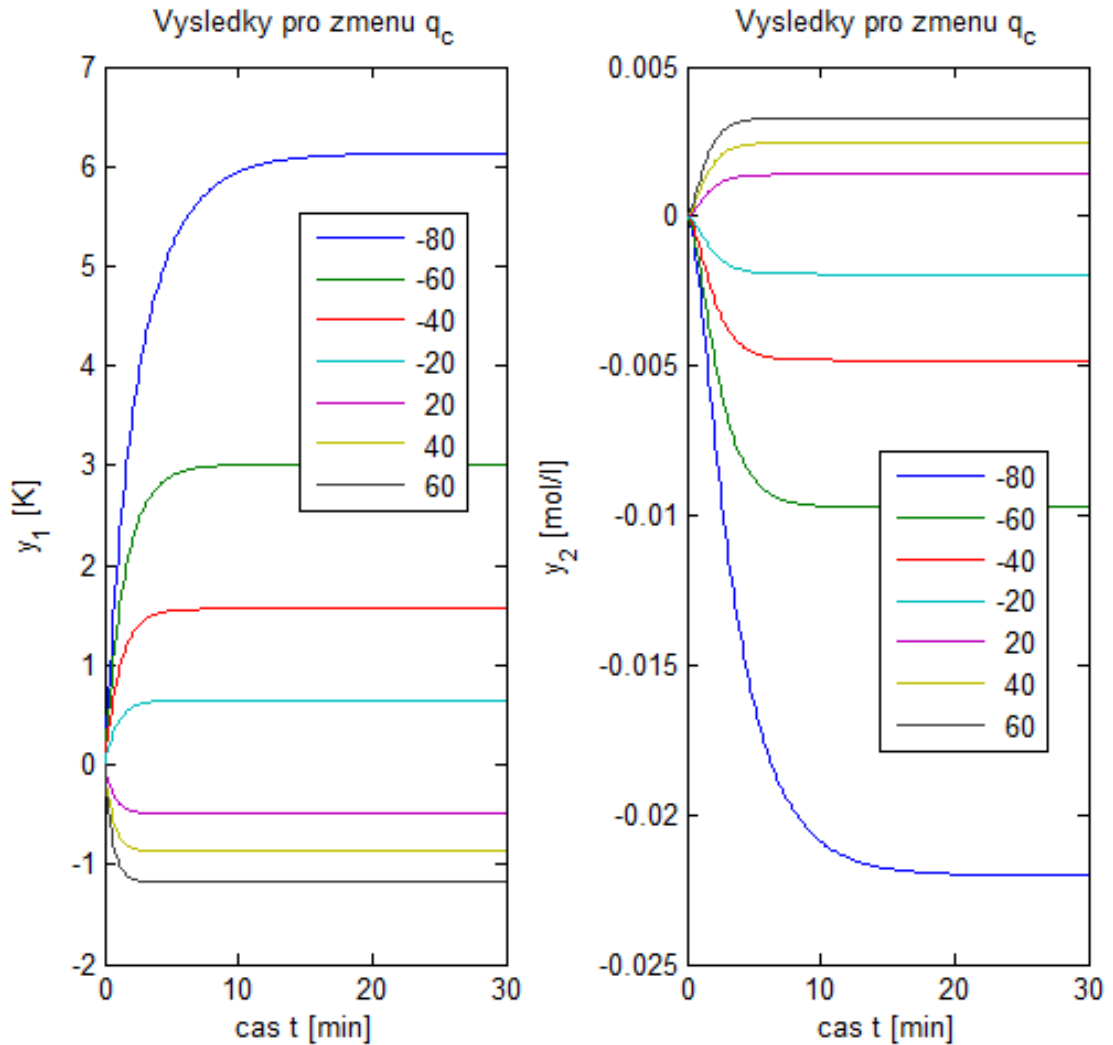


Obr. 11. V levém grafu závislost doby odezvy výstupu y_1 (teplota) na čase t pro různé objemové průtoky q a v pravém grafu závislost doby odezvy výstupu y_2 (koncentrace) na čase t pro různé objemové průtoky q

Grafy v (Obr. 11.) ukazují, že při některých skokových změnách -80%-ních a -60%-ních dochází k překmitu, proto je nutné dávat pozor při výběru regulátoru. Přechodové charakteristiky mohou být popsány přenosovou funkcí 1. popřípadě 2. řádu.

Pro druhou dynamickou analýzu bylo provedeno sedm skokových změn pro vstupní proměnnou objemového průtoku chladicí kapaliny $q_c = (-80\%, \pm 60\%, \pm 40\%, \pm 20\%)$.

Výsledky doby odezvy na výstupu y_1 a y_2 pro různé skokové změny vstupních objemových průtoků chladicí kapaliny q_c jsou zobrazeny v (Obr. 12.). Simulace je provedena opět pro časový interval $[0, 30]$.



Obr. 12. V levém grafu závislost doby odezvy výstupu y_1 (teplota) na čase t pro různé objemové průtoky q_c a v pravém grafu závislost doby odezvy výstupu y_2 (koncentrace) na čase t pro různé objemové průtoky q_c

Z (Obr. 12.) plyne, že snižováním vstupního průtoku chladicí kapaliny q_c dochází k nárůstu teploty, zatímco snižováním vstupního průtoku chladicí kapaliny q_c dochází ke snižování koncentrace. Pro realizované změny q_c překmity nenastaly. U všech těchto změn vychází přechodové charakteristiky 1. řádu.

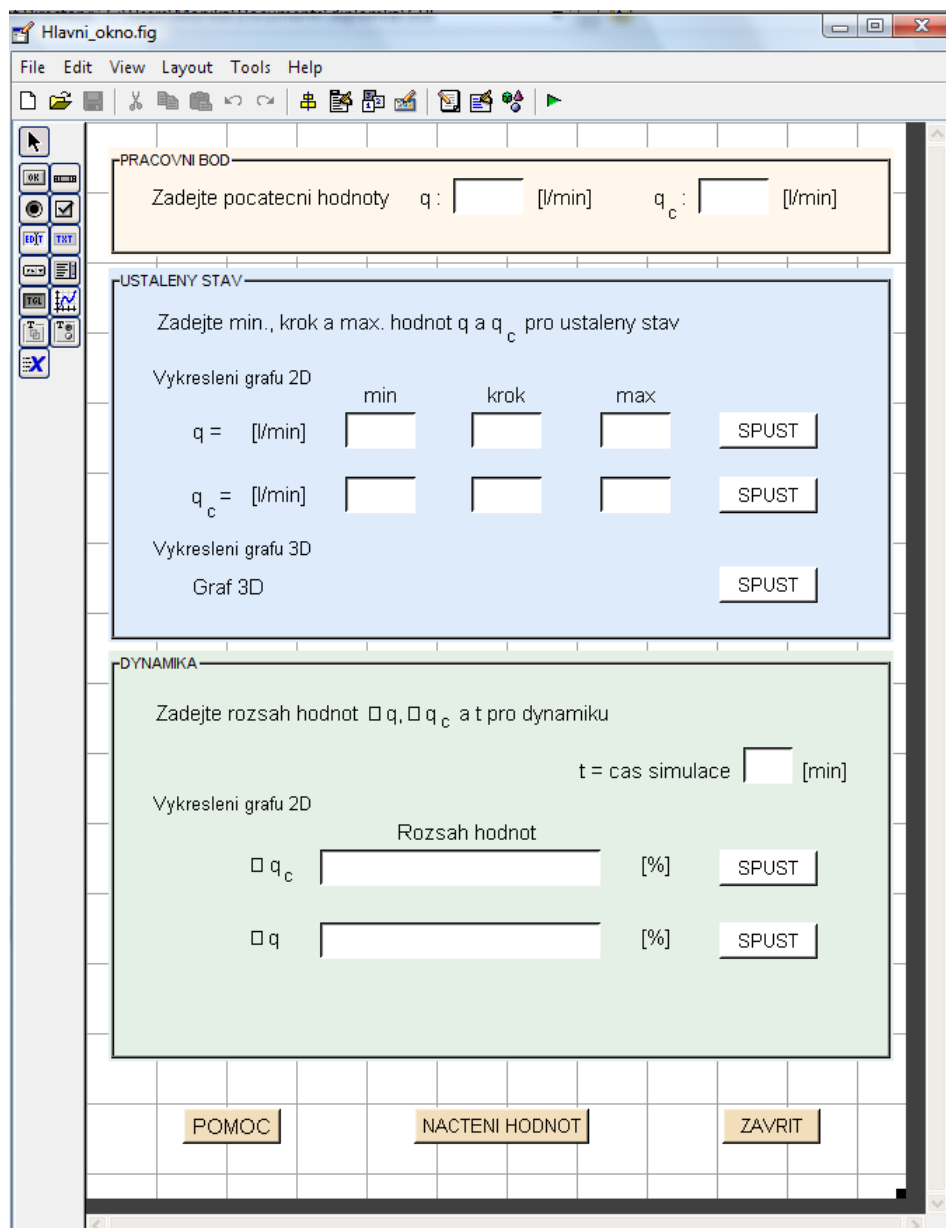
Z uvedených dynamických charakteristik plyne, že pokud bychom volili pro řízení adaptivní přístup s volbou externího lineárního modelu, tento by mohl mít tvar přenosové funkce prvního nebo druhého řádu:

$$G(s) = \frac{b_0}{a_1s + a_0}, G(s) = \frac{b_1s + b_0}{a_2s^2 + a_1s + a_0}, G(s) = \frac{b_0}{a_2s^2 + a_1s + a_0} \quad (36)$$

9 SIMULAČNÍ PROGRAM V MATLABU POMOCÍ GUI

Sestavením simulačního programu pomocí GUI nám umožní provádět statickou a dynamickou analýzu pro různé vstupní veličiny bez nutnosti změny programového kódu.

Tvorba GUI v MATLABU se provádí pomocí příkazu GUIde, který nám vytvoří dva soubory, např. *program.fig* a *program.m*, přičemž v souboru s příponou *.fig* je grafické rozložení jednotlivých prvků a v *M-File* jsou programy, které se mají provádět při spuštění výpočtu. V našem případě jsou to soubory *Hlavni_okno.fig* a *Hlavni_okno.m*. Návrh takto vytvořeného okna je zobrazen na (Obr. 13.).



Obr. 13. Návrh vytvořeného okna

Nyní k popisu ovládání programu. Hlavní_okno pro zadávání hodnot je rozděleno do šesti částí (Obr. 14.).

Hlavní_okno

PRACOVNI BOD

Zadejte počáteční hodnoty q : [l/min] q_c : [l/min] 1

USTALENY STAV

Zadejte min., krok a max. hodnot q a q_c pro ustalený stav

Vykreslení grafu 2D

	min	krok	max	
$q =$ [l/min]	<input type="text" value="100"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="200"/>	<input type="button" value="SPUST"/>
$q_c =$ [l/min]	<input type="text" value="20"/>	<input type="text" value="1"/>	<input type="text" value="100"/>	<input type="button" value="SPUST"/>

Vykreslení grafu 3D

Graf 3D 2

DYNAMIKA

Zadejte rozsah hodnot Δq , Δq_c a t pro dynamiku

$t =$ čas simulace [min]

Vykreslení grafu 2D

Rozsah hodnot

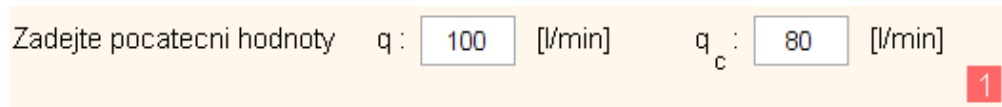
Δq_c	<input type="text" value="-80 -60 -40 -20 20 40 60"/>	[%]	<input type="button" value="SPUST"/>
Δq	<input type="text" value="-80 -60 -40 -20 20 40 60 80"/>	[%]	<input type="button" value="SPUST"/>

3

4 5 6

Obr. 14. Hlavní_okno pro zadávání hodnot

1) **Pracovní bod** zde se zadávají počáteční hodnoty objemových průtoků q a q_c (Obr. 15.), které budou stejné jak pro statickou tak i pro dynamickou analýzu.

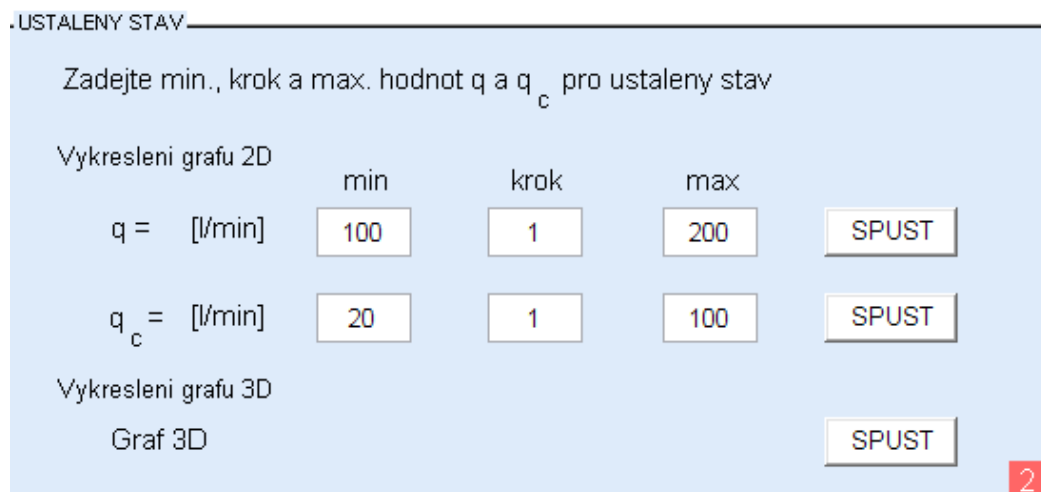


Zadejte počáteční hodnoty q : 100 [l/min] q_c : 80 [l/min] 1

Obr. 15. Pracovní bod

2) **Ustálený stav** v této části se zadává (Obr. 16.)

- rozsah hodnot objemového průtoku q
- rozsah hodnot objemového průtoku q_c



.USTALENÝ STAV

Zadejte min., krok a max. hodnot q a q_c pro ustálený stav

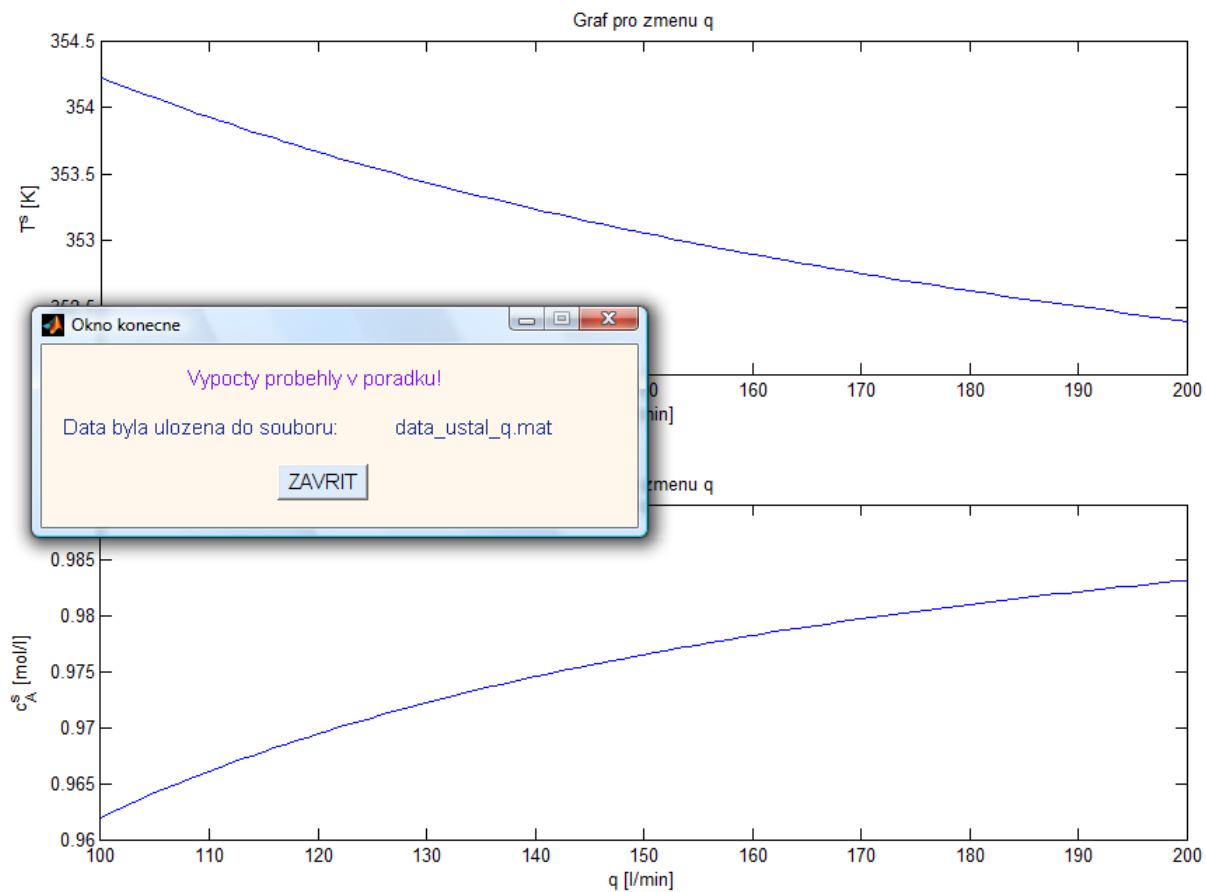
Vykreslení grafu 2D	min	krok	max	
$q =$ [l/min]	100	1	200	SPUST
$q_c =$ [l/min]	20	1	100	SPUST

Vykreslení grafu 3D

Graf 3D SPUST 2

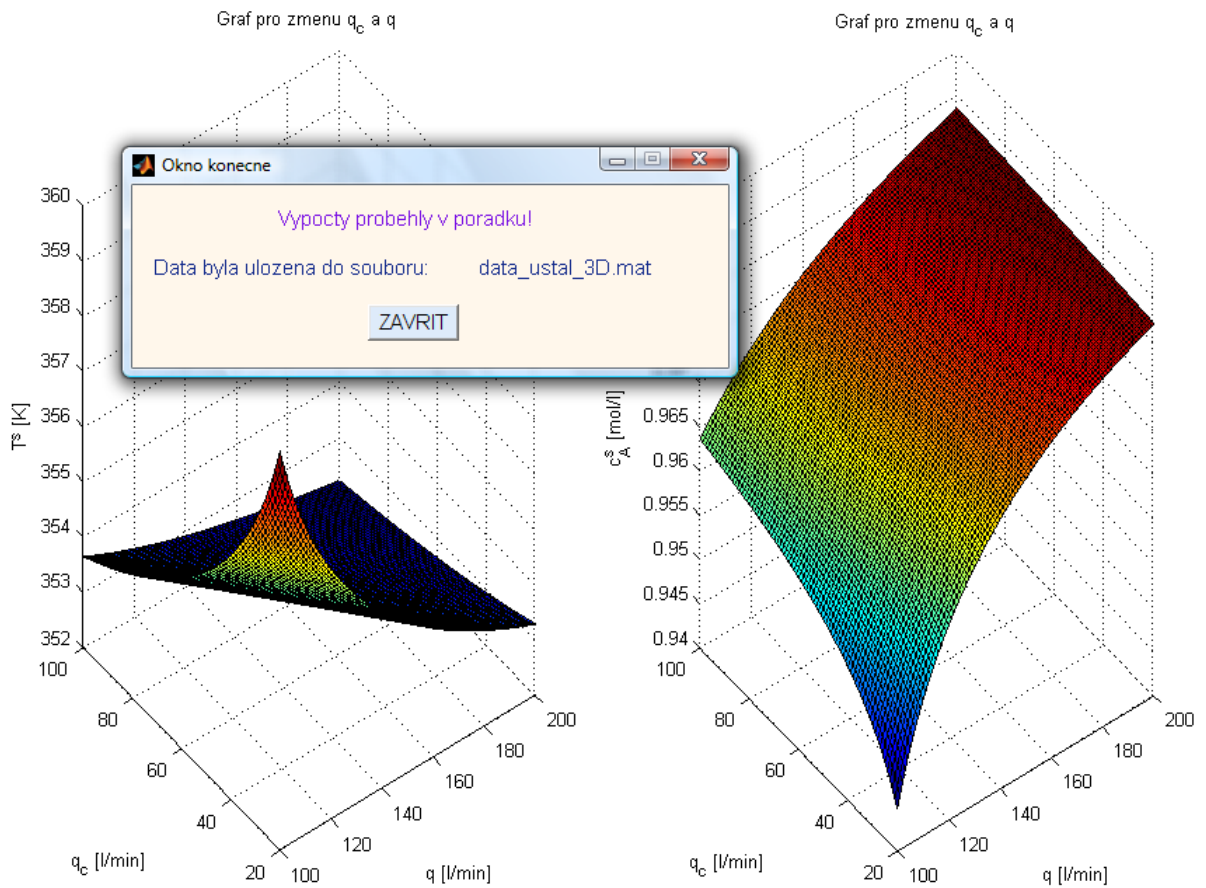
Obr. 16. Zadávání hodnot v ustáleném stavu

Z těchto zadaných hodnot se po stisku tlačítka *Spust'*, u daného objemového průtoku, spočítají a vykreslí 2D grafy. A zároveň se zobrazí okno, ve kterém se vypíše, zda výpočet proběhl v pořádku a do kterého souboru se vypočtené hodnoty uložily. Například (Obr. 17.).



Obr. 17. Graf 2D ze zadaných hodnot u objemového průtoku q s upozorněním, kam se dané hodnoty uložily

Také se z těchto hodnot po stisku tlačítka *Spust'*, spočítají a vykreslí i hodnoty pro graf 3D a uloží se do daného souboru např. (Obr. 18.).



Obr. 18. Graf 3D ze zadaných hodnot u objemových průtoků q a q_c s upozorněním, kam se dané hodnoty uložily

3) Dynamika v této části se zadává (Obr. 19.)

a) t čas simulace

b) rozsah skokových změn objemového průtoku q a q_c

DYNAMIKA

Zadejte rozsah hodnot Δq , Δq_c a t pro dynamiku

t = čas simulace [min]

Vykreslení grafu 2D

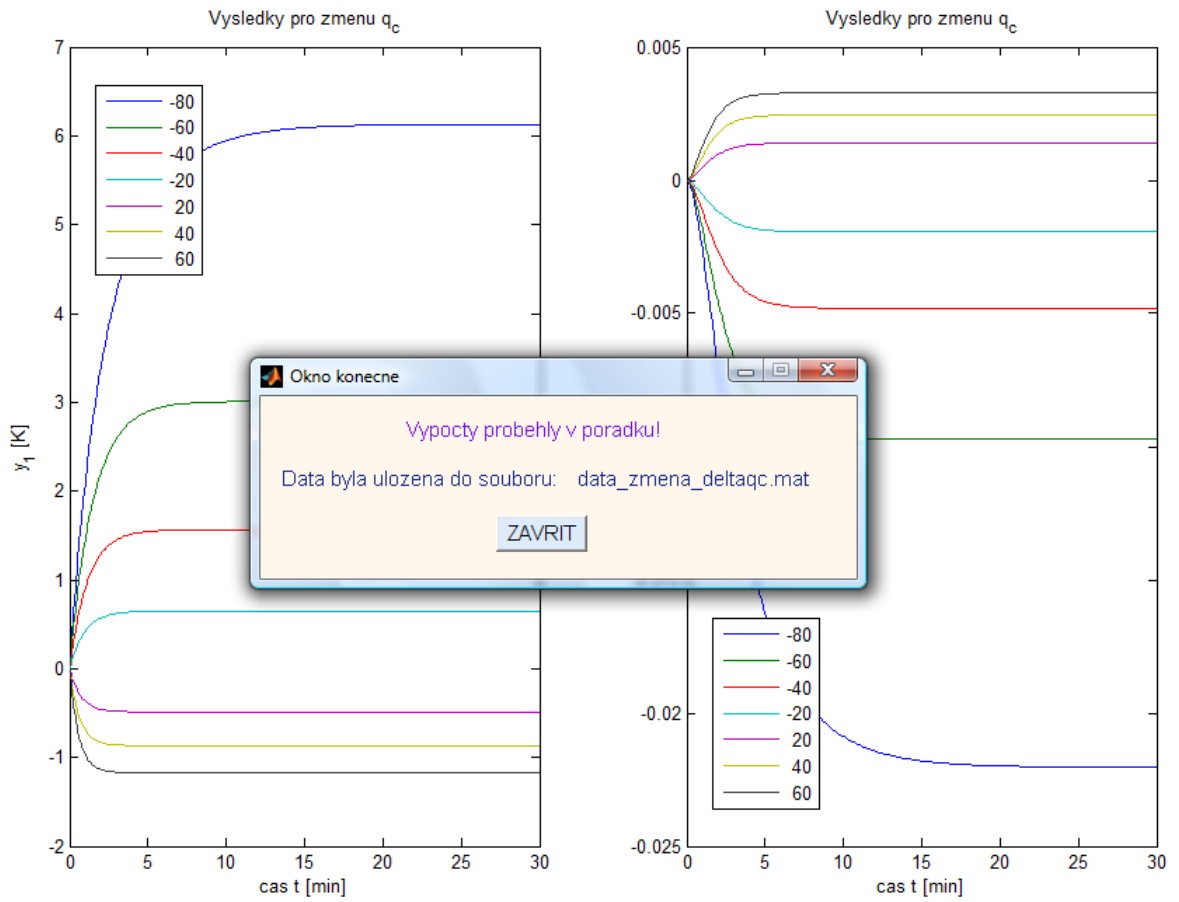
Rozsah hodnot

Δq_c	<input type="text" value="-80 -60 -40 -20 20 40 60"/>	[%]	<input type="button" value="SPUST"/>
Δq	<input type="text" value="-80 -60 -40 -20 20 40 60 80"/>	[%]	<input type="button" value="SPUST"/>

3

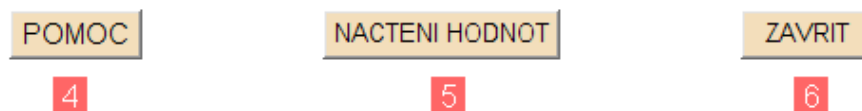
Obr. 19. Zadávání hodnot v dynamickém stavu

Z těchto zadaných hodnot se po stisku tlačítka *Spust'*, spočítají, vykreslí 2D grafy a také se zobrazí okno, ve kterém se vypíše, zda výpočet proběhl v pořádku a do kterého souboru se vypočtené hodnoty uložily například (Obr. 20.).



Obr. 20. Graf 2D ze zadaných hodnot u objemového průtoku Δq_c s upozorněním, kam se dané hodnoty uložily

- 4) **Pomoc** po stisku tlačítka se zobrazí stránka v HTML s nápovědou
- 5) **Načtení hodnot** po stisku tlačítka se načtou do políček původní hodnoty
- 6) **Zavřít** po stisku tlačítka se zavře Hlavní_okno.



Obr. 21. Tlačítka pro Pomoc, Načtení hodnot a Zavřít

ZÁVĚR

Cílem diplomové práce bylo naprogramovat GUI prostředí v MATLABU pro statické a dynamické analýzy pro námi nalezený typ matematického modelu průtočného chemického reaktoru. Do prostředí GUI byla implementována numerická řešení statické analýzy systému pro různé vstupní veličiny jednoduchou iterační metodou a dynamické analýzy systému pro různé skoky vstupních veličin metodou Runge-Kutta. Simulační program je možno ovládat bez nutnosti znalosti programování. Uživatel může provádět simulace pouhým jednoduchým zadáváním veličin do vytvořeného simulačního programu.

Praktická část se zabývá statickou analýzou systému pro různé vstupní veličiny reaktoru tak i dynamickou analýzou pro různé skoky vstupních veličin reaktoru. Tato numerická řešení jsou provedena v programu MATLAB, kde je součástí automatické vyhodnocení dat a zobrazení přehledných grafů.

Ve statické analýze se sleduje chování systému v ustáleném stavu. To obvykle určuje výchozí volbu pro optimální pracovní bod, s jehož pomocí se určí parametry jednotlivých vstupních veličin. Po jejich určení se mění vstupní parametry pracovního bodu (průtok chladicí kapaliny a průtok reaktantu) v daném intervalu. Z výsledků je zřejmé, jak na různé hodnoty vstupních veličin teplota a koncentrace reaguje.

V dynamické analýze je patrná reakce výstupních veličin na skokové změny vstupních veličin. Pro změny průtoku chladicí kapaliny z výsledků vyplývá, že při snižování vstupního průtoku chladicí kapaliny dochází k nárůstu teploty, ale koncentrace klesá. Pro změny průtoku reaktantu z výsledků vyplývá, že při snižování vstupního průtoku reaktantu dochází k nárůstu teploty, zatímco koncentrace klesá. Dále z výsledků plyne, že při snižování vstupního průtoku reaktantu dochází k velkým překmitům jak teploty, tak i koncentrace. Překmity nepůsobí dobře na regulovanou soustavu, to znamená, že průtok reaktantu by se neměl moc snižovat.

Vlastnosti výstupních veličin napomáhají např. k výběru vhodného typu lineárního systému řízení. Simulační program je obecně použitelný pro stejný typ reaktoru s různým nastavením průtoku, pracovního bodu apod.

ZÁVĚR V ANGLIČTINĚ

The goal of the Master's thesis was to develop graphical user interface in MATLAB for static and dynamic analyses of the given mathematical model of the continuous stirred tank reactor. Numerical solutions of system static analysis for various input values using simple iterative method and system dynamic analyses for various steps of the input functions using Runge-Kutta method were implemented into the GUI. Simulation software can be easily used without knowledge of programming. Any user can perform simulations after simple typing of parameters into the simulation program.

Practical part focuses on the system static analysis for various input quantities of the reactor and dynamic analysis for various steps of input quantities of the reactor. These numerical solutions are performed in MATLAB, while automatic data evaluation and figure display is included.

The static analysis studies system behavior in the steady state. It usually defines first choice for optimal working point that is used for determination of parameters for individual input quantities. After that, the input parameters of the working point (coolant flow rate and reactant flow rate) in the given interval. It can be assumed from results that stabilization is faster in case of coolant flow rate change than in the case of reactant flow rate change.

In the dynamic analysis can be seen the output quantities reaction to step changes of input quantities. In the case of coolant flow rate change it can be concluded that the lower coolant flow rate causes that the in-reactor temperature rises up, but the concentration decreases (reaction slows down). In the case of the reactant flow rate change it can be concluded that small decrease of the flow rate causes increase of the in-reactor temperature, while the concentration goes down. Furthermore, we can see that small changes of input flow rate cause temperature and concentration overshoots. These overshoots has negative influence to the system to be controlled, it means to this, that reactant flow rate would not be much reduced.

The properties of output variables such as helping to select the appropriate type of linear control system. Simulation program can be generally used for same reactor type with different flow rate settings, working point, etc.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] FOUTCH, Gary L.; JOHANNES, Arland H. *Encyclopedia of Physical Science and Technology : Chemical Engineering*. 3rd edition. Tarzana (California) : Academic Press, 2001. Reactors in Process Engineering, s. 23-43. ISBN 978-0122274107.
- [2] VOJTĚŠEK, Jiří. *Chemical Reactors: Modern Control Methods*. Zlín, 2007. 167 s. Dizertační práce. Tomas Bata University in Zlín, Faculty of Applied Informatics.
- [3] BARTOVSKÁ, Lidmila. *Chemická kinetika* [online]. 2007 [cit. 2011-04-20]. Chemické reaktory. Dostupné z WWW: <<http://www.vscht.cz/fch/cz/pomucky/bartovska/Kin-teorie/5-Reaktory.pdf>>.
- [4] *Chemické reaktory* [online]. 2009 [cit. 2011-04-20]. Základní typy reaktorů. Dostupné z WWW: <<http://www.jergym.hiedu.cz/~canovm/barva/r/r2.pdf>>.
- [5] HLAVÁČEK, V.; KUBÍČEK, M.; JELÍNEK, J. Modelling of chemical reactors - XVIII Stability and oscillatory behaviour of the CSTR. *Chemical Engineering Science*. 1970, 25, 9, s. 1441-1461.
- [6] DOBLE, Mukesh; KRUTHIVENTI, Anil Kumar. *Green Chemistry and Engineering*. Burlington : Academic Press, 2007. Inherent Safety, s. 193-244. ISBN 978-0-12-372532-5.
- [7] ČERMÁK, Libor. *Numerické metody II : Diferenciální rovnice*. Brno : VUT v Brně, 2010. 136 s.
- [8] REKTORYS, Karel, et al. *Přehled užití matematiky II*. sedmé vydání. Praha : Prometheus, 2000. 874 s. ISBN 80-7196-181-7.
- [9] Dormand-Prince method. In *Wikipedia : the free encyclopedia* [online]. St. Petersburg (Florida) : Wikipedia Foundation, 15 December 2006 , last modified on 18 April 2011 [cit. 2011-05-03]. Dostupné z WWW: <http://en.wikipedia.org/wiki/Dormand%E2%80%93Prince_method>.
- [10] PUČEGL, Pavel. *Řešení úloh dynamiky těles pomocí matematických softwarů*. Brno, 2010. 61 s. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně.
- [11] BALÁTĚ, Jaroslav. *Automatické řízení*. 2. přepracované vydání. Praha : BEN - technická literatura, 2004. 654 s. ISBN 80-7300-148-9.

- [12] RŮŽIČKOVÁ, Kateřina. *Modelování a simulace v geovědách : Obsah přednášek* [online]. 2011 [cit. 2011-05-07]. Rozdělení modelů. Dostupné z WWW: <http://gisak.vsb.cz/~ruz02/msg/prednasky/pr3_rozdeleni_modelu.doc>.
- [13] KADLEC, Karel. *Měřicí a řídicí technika* [online]. 2011 [cit. 2011-05-07]. Modelování. Dostupné z WWW: <http://web.vscht.cz/kadleck/aktual/mrt_fpbt/prednasky/MRT-08-P6-Mgr.pdf>.
- [14] KADLEC, Karel; KMÍNEK, Miloš. *Měřicí a řídicí technika* [online]. Ver. 2.01. Praha : 2000, únor 2005 [cit. 2011-05-07]. Dostupné z WWW: <<http://uprt.vscht.cz/kminekm/mrt/>>.
- [15] GAO, R.; O'DYWER, A.; COYLE, E. A Non-linear PID Controller for CSTR Using Local Model Networks. *In Proc of 4th World Congress on Intelligent Control and Automation. Shanghai, P. R. China : [s.n.], 2002. s. 3278-3282.*
- [16] MIKLEŠ, J. a FIKAR. M.: *Modelovanie, identifikácia a riadenie procesov I* Vydavateľstvo STU, Bratislava, 1999

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

GUI	Graphical User Interface
ODR	Ordinary Differential Equation
CSTR	Continuous Stirred Tank Reactor
PFR	Plug-Flow Reactor
SISO	Single input single output
SIMO	Single input multiple output
MISO	Multiple input single output
MIMO	Multiple input multiple output
h	Integrační krok
φ	Nelineární vektorová funkce
f^T	Nelineární vektorová funkce
y	Výstupní proměnná
x	Nezávisle proměnná
$\mathbf{x}(t)$	Vektor stavových veličin
$\mathbf{u}(t)$	Vektor vstupních veličin
k	Iterační krok
\mathbf{x}^s	Vektor vstupních proměnných
Δ	Diference
RK4	Runge-Kuttova metoda čtvrtého řádu
FSAL	First Same As Last
a_{1-4}	Konstanty vypočtené
T	Teplotu produktu
T_0	Přívodní teplota reaktantu
T_{c0}	Vstupní teplota chladicí kapaliny

T^s	Ustálená teplota
t	Čas
V	Objem reaktoru
q	Průtok reaktantu
q_c	Průtok chladicí kapaliny
k_1	Rychlostní konstanta
k_0	Konstantní reakční rychlost
E	Aktivační energie
R	Plynová konstanta
ΔH	Reakční teplo
c_p	Měrné teplo reaktantu
c_A	Koncentrace produktu
c_{pc}	Měrné teplo chlazení
c_{A0}	Koncentrace reaktantu
c_A^s	Ustálená koncentrace
ρ	Hustota reaktantu
ρ_c	Hustota chlazení
h_a	Součinitel prostupu tepla
f	Funkce
g	Funkce
D	Uzavřená konvexní oblast

SEZNAM OBRÁZKŮ

<i>Obr. 1. Dělení chemických reaktorů podle typu operace a konstrukce</i>	11
<i>Obr. 2. Dělení chemických reaktorů podle počtu fází</i>	13
<i>Obr. 3. Dělení chemických reaktorů podle teplotního režimu</i>	14
<i>Obr. 4. Zjednodušené schéma CSTR</i>	16
<i>Obr. 5. Obecný postup tvorby matematických modelů</i>	20
<i>Obr. 7. Průběh iterací při výpočtu ustálené hodnoty teploty T_s a ustálené hodnoty koncentrace c_{As}</i>	36
<i>Obr. 8. Průběh ustálených hodnot T_s a c_{As} pro různé hodnoty průtoku q_c</i>	37
<i>Obr. 9. Průběh ustálených hodnot T_s a c_{As} pro různé hodnoty průtoku q.....</i>	38
<i>Obr. 11. V levém grafu závislost doby odezvy výstupu y_1 (teplota) na čase t pro různé objemové průtoky q a v pravém grafu závislost doby odezvy výstupu y_2 (koncentrace) na čase t pro různé objemové průtoky q.....</i>	42
<i>Obr. 12. V levém grafu závislost doby odezvy výstupu y_1 (teplota) na čase t pro různé objemové průtoky q_c a v pravém grafu závislost doby odezvy výstupu y_2 (koncentrace) na čase t pro různé objemové průtoky q_c</i>	43
<i>Obr. 13. Návrh vytvořeného okna</i>	45
<i>Obr. 15. Pracovní bod</i>	47
<i>Obr. 16. Zadávání hodnot v ustáleném stavu</i>	47
<i>Obr. 17. Graf 2D ze zadaných hodnot u objemového průtoku q s upozorněním, kam se dané hodnoty uložily</i>	48
<i>Obr. 18. Graf 3D ze zadaných hodnot u objemových průtoků q a q_c s upozorněním, kam se dané hodnoty uložily.....</i>	49
<i>Obr. 19. Zadávání hodnot v dynamickém stavu.....</i>	50
<i>Obr. 20. Graf 2D ze zadaných hodnot u objemového průtoku Δq_c s upozorněním, kam se dané hodnoty uložily.....</i>	51
<i>Obr. 21. Tlačítka pro Pomoc, Načtení hodnot a Zavřít</i>	51

SEZNAM TABULEK

<i>Tab. 1. Zadané parametry reaktoru.....</i>	<i>32</i>
-----------------------------------------------	-----------

SEZNAM PŘÍLOH

P I: STATICKÁ ANALÝZA – PRŮBĚH ITERACÍ

P II: STATICKÁ ANALÝZA – PRO RŮZNÉ q_c

P III: STATICKÁ ANALÝZA – PRO RŮZNÉ q

P IV: STATICKÁ ANALÝZA – PRO RŮZNÉ q A RŮZNÉ q_c GRAF 3D

P V: DYNAMICKÁ ANALÝZA – DYNAMIKA

P VI: OBSAH VLOŽENÉHO DVD – DVD JE SOUČÁSTÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE A OBSAHUJE ČTYŘI ADRESÁŘE S NÍŽE UVEDENÝM OBSAHEM.

- diplomova_prace – (obsahuje výslednou diplomovou práci ve formátu PDF)
 - *diplomova_prace.pdf*
- dynamika – (obsahuje výsledný *M-File dynamika.m* a k němu potřebné *M-File* pro výpočet dynamických analýz)
 - Spouští se *dynamika.m*
- gui – (obsahuje výsledné *M-File Hlavni_okno* a k němu potřebné *M-File* pro výpočty, ukládání dat, atd...)
 - Spouští se *Hlavni_okno.m*
- statika – (obsahuje výsledné *M-File* pro výpočet statických analýz)
 - Spouští se *ustalenestavy_zmena_3D.m*
 - Spouští se *ustalenestavy_zmena_q.m*
 - Spouští se *ustalenestavy_zmena_qc.m*
 - Spouští se *ustalenystav.m*

PŘÍLOHA P I: STATICKÁ ANALÝZA – průběh iterací

Ukázka z *M-File ustalenystav.m*

```
%Zadané parametry
q=100, qc=80, V=100, k0=7.2e10, T0=350, Tc0=350, H=-2e5, cp=1, cpc=1, ro=1e3, →
→ roc=1e3, cA0=1, ha=7e5, ER=1e4

%Zadané rovnice
a1=q/V, a2=-H/(ro*cp), a3=(roc*cpc)/(ro*cp*V), a4=-ha/(roc*cpc)

cA(1)=0.2;           %Startovací koncentrace
T(1)=350;           %Startovací teplota

fprintf('\nStartovací koncentrace c_A(1)=%.1f[mol/l], a Teplota →
→ T(1)=%.0f\n', cA, T)

for i=2:100

    T(i)=(a1*T0+a2*((a1*cA0)/(a1+(k0*exp(-ER/T(i-1)))))*(k0*exp(-ER/T(i-1)))→
→ +a3*qc*Tc0*(1-exp(a4/qc)))/(a1+a3*qc*(1-exp(a4/qc)));

    cA(i)=((a1*cA0)/(a1+(k0*exp(-ER/T(i-1)))));

    if abs(T(i)-T(i-1))<1e-4

        break

    end

end

fig6=figure(6);set(fig6,'Position',[150 100 1000 700],'color',[1 1 1],→
→ 'name','Prubeh iteraci')

subplot(211)

plot(T),xlabel('[i]'),ylabel('T^s [K]')

title('Prubeh iteraci')

subplot(212)

plot(cA),xlabel('[i]'),ylabel('c_A^s [mol/l]')

title('Prubeh iteraci')

fprintf('\nUstalene hodnoty koncentrace c_A^s=%.4f[mol/l], a teplota T^s→
→=%.4f[K]\npro pracovni bod q=%.0f[l/min] a q_c=%.0f[l/min] \n',cA(11),→
→T(11),q, qc)
```

PŘÍLOHA P II: STATICKÁ ANALÝZA – pro různé q_c

Ukázka z *M-File ustalenestavy_zmena_qc.m*

```
%Zadane parametry

%qc=80

q=100,V=100,k0=7.2e10,T0=350,Tc0=350,H=-2e5,cp=1,cpc=1,ro=1e3,roc=1e3,→
→ cA0=1,ha=7e5,ER=1e4

Zadané rovnice

a1=q/V, a2=-H/(ro*cp), a3=(roc*cpc)/(ro*cp*V), a4=-ha/(roc*cpc)

cA(1)=0.2;          %Startovací koncentrace

T(1)=350;          %Startovací teplota

fprintf('\nStartovací koncentrace c_A(1)=%.1f[mol/l], a TeplotaT(1) = →
→ %.0f[K] \n',cA,T)

NN=81;

qr=linspace(20,100,NN); %Generuje vektor s rovnoměrně rozdělenými prvky

for j=1:length(qr)

qc=qr(j);

clear T cA

for i=2:100

cA(1)=0.2;

T(1)=350;

T(i)=((q/V)*T0+a2*((q/V)*cA0)/((q/V)+(k0*exp(-ER/T(i-1)))))*→
→(k0*exp(-ER/T(i-1))+a3*qc*Tc0*(1-exp(a4/qc)))/((q/V) + a3*qc*(1-exp(a4/qc)));

cA(i)=((q/V*cA0)/(q/V+(k0*exp(-ER/T(i-1)))));

if abs(T(i)-T(i-1))<1e-4

break

end

end

Ts(j)=T(length(T));

cAs(j)=cA(length(cA));

end
```

```
fig8=figure(8);set(fig8,'Position',[150 100 1000 700],'color',[1 1 1],→
→ 'name','Graf pro zmenu q_c')
subplot(211)
plot(qr,Ts),xlabel('q_c[l/min]'),ylabel('T^s [K]')
title('Graf pro zmenu q_c')
subplot(212)
plot(qr,cAs),xlabel('q_c[l/min]'),ylabel('c_A^s [mol/l]')
title('Graf pro zmenu q_c')
fprintf('\nPrubeh vypoctu ustalenyh hodnot stavovych velicin koncentrace
→ c_A^s=%.4f[mol/l], a teplota T^s=%.4f[K]\n pro q=%.0f[l/min] s ruznym →
→ prutokem q_c[l/min]\n', cA(10),T(10),q)
```

PŘÍLOHA P III: STATICKÁ ANALÝZA – pro různé q

Ukázka z *M-File ustalenestavy_zmena_q.m*

```
%Zadane parametry

%q=100;

qc=80,V=100,k0=7.2e10,T0=350,Tc0=350,H=-2e5,cp=1,cpc=1,ro=1e3,roc=1e3,→
→ cA0=1,ha=7e5,ER=1e4

%Zadane rovnice

%a1=q/V, a2=-H/(ro*cp), a3=(roc*cpc)/(ro*cp*V), a4=-ha/(roc*cpc)

cA(1)=0.2;          %Startovaci koncentrace

T(1)=350;          %Startovaci teplota

fprintf('\nStartovaci koncentrace c_A(1)=%.1f[mol/l], a Teplota T(1)=→
%.0f[K] \n',cA,T)

NN=201;

qr=linspace(100,200,NN); %Generuje vektor s rovnomerne rozdelenymi prvky

for j=1:length(qr)

q=qr(j);

    clear T cA

    for i=2:100

        cA(1)=0.2;

        T(1)=350;

        T(i)=((q/V)*T0+a2*((q/V)*cA0)/((q/V)+(k0*exp(-ER/T(i-1)))))*→
→(k0*exp(-ER/T(i-1))+a3*qc*Tc0*(1-exp(a4/qc)))/((q/V) + a3*qc*(1-exp(a4/qc)));

        cA(i)=((q/V*cA0)/(q/V+(k0*exp(-ER/T(i-1)))));

        if abs(T(i)-T(i-1))<1e-4

            break

        end

    end

    end

Ts(j)=T(length(T));

cAs(j)=cA(length(cA));

end
```

```
fig7=figure(7);set(fig7,'Position',[150 100 1000 700],'color',[1 1 1],→
→ 'name','Graf pro zmenu q')
subplot(211)
plot(qr,Ts),xlabel('q [l/min]'),ylabel('T^s [K]')
title('Graf pro zmenu q')
subplot(212)
plot(qr,cAs),xlabel('q [l/min]'),ylabel('c_A^s [mol/l]')
title('Graf pro zmenu q')
fprintf('\nPrubeh vypoctu ustalenych hodnot stavovych velicin koncentrace
→c_A^s=%.4f[mol/l], a teplota T^s=%.4f[K]\npro qc=%.0f[l/min] s ruznym→
→ prutokem q[l/min]\n', cA(8),T(8),qc)
```

PŘÍLOHA P IV: STATICKÁ ANALÝZA – pro různé q a různé q_c graf 3D

Ukázka z *M-File ustalenestavy_zmena_3D.m*

```
%Zadane parametry

%q=100

%qc=80

V=100,k0=7.2e10,T0=350,Tc0=350,H=-2e5,cp=1,cpc=1,ro=1e3,roc=1e3,cA0=1,→
→ ha=7e5,ER=1e4

%Zadane rovnice

a1=q/V

a2=-H/(ro*cp);

a3=(roc*cpc)/(ro*cp*V);

a4=-ha/(roc*cpc);

cA(1)=0.2;      %Startovaci koncentrace

T(1)=350;      %Startovaci teplota

fprintf('\nStartovaci koncentrace c_A(1)=%.1f[mol/l], a Teplota T(1)=→
→%.0f[K]\n',cA,T)

NNqc=81;

qcr=linspace(20,100,NNqc);%Generuje vektor s rovnoměrně rozdělenými prvky

NNq=201;

qr=linspace(100,200,NNq); %Generuje vektor s rovnoměrně rozdělenými prvky

for k=1:length(qr)

    q=qr(k);

    for j=1:length(qcr)

        qc=qcr(j);

        clear T cA

        for i=2:100

            cA(1)=0.2;

            T(1)=350;

            T(i)=((q/V)*T0+a2*((q/V)*cA0)/((q/V)+(k0*exp(-ER/T(i-1)))))* →
            → (k0*exp(-ER/T(i-1))+a3*qc*Tc0*(1-exp(a4/qc)))/((q/V)+a3*qc*(1-exp(a4/qc)));
```

```

cA(i) = ((q/V*cA0) / (q/V + (k0*exp(-ER/T(i-1)))));

    if abs(T(i)-T(i-1)) < 1e-4

        break

    end

    Ts(j,k) = T(length(T));

    cAs(j,k) = cA(length(cA));

end

end

end

fig9 = figure(9); set(fig9, 'Position', [150 100 1000 700], 'color', [1 1 1], →
→ 'name', 'Graf pro zmenu q_c a q')

[X,Y] = meshgrid(100:0.5:200, 20:1:100);

subplot(1,2,1), surf(X,Y,Ts), xlabel('q [l/min]'), ylabel('q_c [l/min]'), →
→ zlabel('T^s [K]')

title('Graf pro zmenu q_c a q')

subplot(1,2,2), surf(X,Y,cAs), xlabel('q [l/min]'), ylabel('q_c [l/min]'), →
zlabel('c_A^s [mol/l]')

title('Graf pro zmenu q_c a q')

fprintf('\nPrubeh vypoctu ustalenyh hodnot stavovych velicin koncentrace
→ a teploty\njak pro zmenu q tak i q_c\n')

```

PŘÍLOHA P V: DYNAMICKÁ ANALÝZA – dynamika

Ukázka z *M-File dynamika.m*.

Zadané parametry

```
q=100;          %pocatecni hodnota q
qPoc=100;      %pocatecni q pro procenta
qc=80;         %pocatecni hodnota qc
qcPoc=80;      %pocatecni qc pro procenta
const_react;  % NACTENI KONSTANT Z M-FILE
t=[0 30];     %doba simulace

%Zadané rovnice
a1=q/V, a2=-H/(ro*cp), a3=(ro_c*cpc)/(ro*cp*V), a4=-ha/(ro_c*cpc)
cA(1)=0.2;    %Startovaci koncentrace
T(1)=350;    %Startovaci teplota

fprintf('\nStartovaci koncentrace c_A(1)=%.1f[mol/l], a Teplota T(1)= →
→%.0f[K]\n',cA,T)

for i=2:100

    T(i)=(a1*T0+a2*((a1*cA0)/(a1+(k0*exp(-ER/T(i-1))))*(k0*exp(-ER/T(i-1))) →
    → +a3*qc*Tc0*(1-exp(a4/qc)))/(a1 + a3*qc*(1-exp(a4/qc)));

    cA(i)=((a1*cA0)/(a1+(k0*exp(-ER/T(i-1)))));

    if abs(T(i)-T(i-1))<1e-4

        break

    end

end

end

Zadávání hodnot q v pracovním bodě qc

%pro zmenu q

Ts=T(length(T));

cAs=cA(length(cA));

options=odeset('MaxStep',0.5);    %maximální velikost kroku řešiče
u2=[-80 -60 -40 -20 20 40 60 80];    %pro procenta u2

textu2 = num2str(u2');
```

```

fprintf('Skokove zmeny kazde vstupni promenne deltaq = (%s)%% jeho →
→ hodnoty v pracovnim bode\n\n',num2str(u2))

vypis2=[];      %promenna potrebna pro vypis q z cyklu nize

for i=1:length(u2)

    q=qPoc+u2(i)*qPoc/100;      %pro procenta

    vypis2(length(vypis2)+1)=q;

    [t2,y2] = ode45(@reaktor3,t,[Ts,cAs],options,q,qc);

    yq1(:,i)=y2(:,1)-Ts;      %ukladani hodnot

    yq2(:,i)=y2(:,2)-cAs;      %ukladani hodnot

end

fprintf('Vypoctene hodnoty q = (%s) \n',num2str(vypis2))

fig10=figure(10);set(fig10,'Position',[30 430 600 500],'color',[1 1 1],→
→'name','Vysledky pro zmenu q')

subplot(121)

plot(t2,yq1),legend(textu2,0),xlabel('cas t [min]'),ylabel('y_1 [K]')

title('Vysledky pro zmenu q')

subplot(122)

plot(t2,yq2),legend(textu2,0),xlabel('cas t [min]'),ylabel('y_2 [mol/l]')

title('Vysledky pro zmenu q')

fprintf('\nPrubehy vypoctu doby odezvy na vystupu y_1(teplota) a→
→ y_2(koncentrace) pro ruzne skokove zmeny vstupnich objemovych prutoku→
→ reaktantu q\n')

```

Zadávání hodnot qc v pracovním bodě q

```

%pro zmenu qc

q=100;

Ts=T(length(T));

cAs=cA(length(cA));

u1=[-80 -60 -40 -20 20 40 60]; %pro procenta u1

textu1 = num2str(u1');

```

```

fprintf('\nSkokove zmeny kazde vstupni promenne deltaqc = (%s)%% jeho →
→ hodnoty v pracovnim bode\n\n',num2str(u1))

vypis=[];          %promenna potrebna pro vypis qc z cyklu nize

for i=1:length(u1)

    qc=qcPoc+u1(i)*qcPoc/100; %pro procenta

    vypis(length(vypis)+1)=qc;

    [t1,y1] = ode45(@reaktor3,t,[Ts,cAs],options,q,qc);

    yqc1(:,i)=y1(:,1)-Ts;      %ukladani hodnot

    yqc2(:,i)=y1(:,2)-cAs;    %ukladani hodnot

end

fprintf('Vypoctene hodnoty q_c = (%s) \n',num2str(vypis))

fig11=figure(11);set(fig11,'Position',[650 50 600 500],'color',[1 1 1],→
→ 'name','Vysledky pro zmenu q_c')

subplot(121)

plot(t1,yqc1),legend(textu1,0),xlabel('cas t [min]'),ylabel('y_1 [K]')

title('Vysledky pro zmenu q_c')

subplot(122)

plot(t1,yqc2), legend(textu1,0), xlabel('cas t [min]'), ylabel('y_2 [mol/l]')

title('Vysledky pro zmenu q_c')

fprintf('\nPrubehy vypoctu doby odezvy na vystupu y_1(teplota) a→
→ y_2(koncentrace) pro ruzne skokove zmeny vstupnich objemovych prutoku→
→ chladici kapaliny q_c\n')

```