

# Matematický model trubkového chemického reaktoru

Bc. Marek Koňářík

---

Diplomová práce  
2006



Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně  
Fakulta aplikované informatiky

---

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně  
Fakulta aplikované informatiky  
Ústav řízení procesů  
akademický rok: 2005/2006

## ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE (PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Bc. Marek KOŇAŘÍK**  
Studijní program: **N 2807 Chemické a procesní inženýrství**  
Studijní obor: **Automatizace a řídicí technika**  
  
Téma práce: **MATEMATICKÝ MODEL TRUBKOVÉHO CHEMICKÉHO REAKTORU**

### Zásady pro vypracování:

1. Pomocí bilancí sestavte matematický model trubkového chemického reaktoru, definujte počáteční a okrajové podmínky.
2. Navrhněte metody pro numerické řešení ustáleného stavu a dynamiky systému včetně podmínek řešení.
3. Sestavte program pro simulaci statických a dynamických vlastností reaktoru, následně proveďte řešení pro různé vstupní hodnoty.
4. Proveďte analýzu vlivu některých vstupních veličin na statické a dynamické charakteristiky.
5. Porovnejte vliv souproudeho a protiproudeho chlazení v plášti reaktoru.

Rozsah práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování diplomové práce: tištěná/elektronická

Seznam odborné literatury:

[1] Mikleš, J. a M. Fikar: Modelovanie, identifikácia a riadenie procesov I. Vydavateľstvo STU, Bratislava, 1999.

[2] Ingham, J., Dunn, I. J., Heinzle, E., Pfenosil, J. E.: Chemical Engineering Dynamics. An Introduction to Modeling and Computer Simulation. Second, Completely Revised Edition, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 2000.

[3] Luyben, W.L.: Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers. McGraw-Hill, New York, 1989.

[4] Dostál, P., Prokop, R., Prokopová, Z., Fikar, M.: Control Design Analysis of Tubular Chemical Reactors. Chem. Papers, 50, 1996, 195–198


[5] Missen, R. W., Mims, Ch. A., Saville, B. A.: Chemical Reaction Engineering and Kinetics. John Wiley & Sons Inc., 1998

Vedoucí diplomové práce: Ing. Jiří Vojtěšek  
Ústav řízení procesů  
Datum zadání diplomové práce: 14. února 2006  
Termín odevzdání diplomové práce: 26. května 2006

Ve Zlíně dne 25. února 2006

  
prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.  
*pověřený děkan*



  
prof. Ing. Petr Dostál, CSc.  
*ředitel ústavu*

## **ABSTRAKT**

Diplomová práce se zabývá podrobně simulacemi reakcí v trubkovém chemickém reaktoru. V našem případě se jedná o reprezentaci následnou reakcí, vyjádřenou obecně:  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Z hlediska klasifikování systémů se jedná o nelineární systém se spojitě rozloženými parametry. Systém je popsán šesti parciálními diferenciálními rovnicemi. Podstatou práce je vytvoření programu, který řeší tyto rovnice a poskytuje nám tak informace o ustáleném stavu a dynamice uvedeného reaktoru. Dokáže simulovat a porovnávat různé vlivy vstupních veličin, nabídne přehledné grafické prostředí a dobrou vizuální interpretaci. K těmto účelům se nejlépe hodí programové prostředí MATLAB, ve kterém je také programová část diplomové práce vyhotovena.

Klíčová slova: reaktor, trubkový reaktor, MATLAB, nelineární systém

## **ABSTRACT**

My final thesis tackles in details with a simulation of reactions in a tubular chemical reactor. In our case it is represented by consecutive reaction, expressed generally:  $A \rightarrow B \rightarrow C$ .

In light of systems classification, we discuss a non-linear system with continuously staggered parameters. The system is described with 6 partial differential equations. The essential point of this thesis is to create a program, which tries to resolve these equations and provide us with information about steady-state condition and dynamics of the reactor. The program should imitate and compare various effects of inputs along with offering well-arranged graphic presentation and sufficient visual interpretation. The program part of the thesis is made up with program media MATLAB, which best suits for these purposes.

Keywords: reactor, tubular reactor, MATLAB, a non-linear system

Na tomto místě bych rád poděkoval svým rodičům za podporu během vysokoškolského studia a vedoucímu své diplomové práce ing. Jiřímu Vojtěškovi za odborné poznámky a věcné připomínky, které věnoval při tvorbě této diplomové práce.

# OBSAH

<b>ÚVOD</b> .....	<b>7</b>
<b>I TEORETICKÁ ČÁST</b> .....	<b>9</b>
<b>1 BILANCE</b> .....	<b>10</b>
1.1    DEFINICE BILANCE .....	10
1.1.1    Bilance za diferenciální časové období.....	12
1.1.2    Bilance pro ustálený stav .....	14
1.2    ODVOZENÍ MATEMATICKÉHO MODELU PRO TRUBKOVÝ CHEMICKÝ REAKTOR .....	14
1.2.1    Zjednodušující předpoklady .....	15
1.2.2    Rozdělení veličin.....	15
1.2.3    Vyjádření elementů potřebných pro výpočet .....	18
1.2.4    Odvození matematického modelu.....	20
1.3    METODY ŘEŠENÍ USTÁLENÉHO STAVU A DYNAMIKY .....	27
1.3.1    Převod spojitého modelu na diskretizovaný .....	28
1.3.2    Iterační metoda.....	29
1.3.3    Metody Runge – Kutta .....	30
<b>II PRAKTICKÁ ČÁST</b> .....	<b>32</b>
<b>2 ŘEŠENÍ USTÁLENÉHO STAVU A DYNAMICKÝCH VLASTNOSTÍ</b> .....	<b>33</b>
2.1    ŘEŠENÍ USTÁLENÉHO STAVU .....	33
2.2    ŘEŠENÍ DYNAMIKY .....	36
2.2.1    Úpravy rovnic do výpočetních vztahů .....	37
<b>3 SIMULACE</b> .....	<b>41</b>
3.1    HODNOTY PRO SIMULACI.....	41
3.2    SIMULACE USTÁLENÉHO STAVU .....	43
3.3    SIMULACE DYNAMICKÝCH CHARAKTERISTIK .....	56
<b>ZÁVĚR</b> .....	<b>66</b>
<b>SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY</b> .....	<b>68</b>
<b>SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK</b> .....	<b>69</b>
<b>SEZNAM OBRÁZKŮ</b> .....	<b>72</b>
<b>SEZNAM PŘÍLOH</b> .....	<b>75</b>

## ÚVOD

Matematické modelování představuje účinnou metodu umožňující poznávat vlastnosti zkoumaného objektu. Dnes je realizováno na počítačích ve vhodném programovém prostředí (v našem případě MATLAB). Pomocí počítačové simulace můžeme s matematickým modelem experimentovat jako s reálným objektem, avšak bez rizika havarijních stavů, bez potřeby reálného objektu a samozřejmě s mnohem menšími náklady.

Modelování představuje experimentální proces (viz [1] nebo [2]), při němž se zkoumanému originálu – reálnému objektu, jednoznačně podle určitých kritérií přiřazuje fyzický nebo abstraktní model – matematický model. V našem případě se jedná o matematický (tedy abstraktní) model reprezentovaný parciálními diferenciálními rovnicemi. Tento model již neumožňuje provádět experimenty stejné fyzikální podstaty, ale umožňuje nám zkoumat jevy probíhající na originále pomocí matematického popisu jejich průběhu.

Samostatný matematický model nám nedává ještě informaci v podobě, kterou potřebujeme pro vyhodnocení zkoumaného děje. Tu získáme teprve řešením matematického modelu.

Řešení zpravidla provádíme s využitím numerických metod řešení (v našem případě iterační metodu a jednokrokovou metodu řešení diferenciálních rovnic: metodu Runge-Kutta-Fehlberg na počítači v programu MATLAB). V tomto programu vytvoříme simulační model, který představuje odvozený matematický model formulovaný pomocí prostředků použitých v MATLABu.

Při tvorbě matematického modelu postupujeme tak, že na zkoumaném objektu definujeme systém, který bude postihovat námi zkoumané jevy. Sledované příznaky budou odpovídat výstupním, případně stavovým proměnným systému. Při definici systému je důležité zajistit separabilitu definovaného systému. Systém je separabilní, jestliže svými výstupy neovlivňuje přes okolí své vstupy.

Změnou parametrů (vstupních veličin) modelu můžeme analyzovat odezvy a získávat tak poznatky o optimálních průbězích stavových (resp. výstupních) veličin v systému a formulovat doporučení pro reálný provoz, aniž bychom experimentovali s reálným objektem.

Ověření správnosti modelu a jeho realizace (verifikace modelu), analýzu získaných výsledků a jejich následné využití nazýváme simulací. Simulací nerozumíme pouze výpočet řešení modelu. Výpočet představuje pouze sled výpočetních operací a nezahrnuje vztah k řešenému procesu.

Produktem je simulační program, který umožňuje porovnávat dva technologické postupy chlazení - protiproudé a souproudé a simulovat vlivy všech podstatných vstupních veličin. Tedy hlavní význam této práce spočívá v tom, že bez reálného modelu dokážeme tyto vlivy – tj. volba typu chlazení a nastavení hodnot vstupních veličin pozorovat, porovnávat a z toho vyvodit doporučení pro reálný provoz.



## **I. TEORETICKÁ ČÁST**

## 1 BILANCE

### 1.1 Definice bilance

Bilance se rovná aplikace zákonů o zachování, např. energie, hmoty. Využívá se při vytváření matematických modelů. Budeme-li citovat [3], můžeme základní bilanční rovnice pro bilancovanou veličinu  $X$  zapsat ve tvaru:

$$\begin{array}{ccccccc}
 \text{počáteční} & + & \text{součet} & + & \text{součet} & = & \text{konečné} & + & \text{součet} & + & \text{součet} \\
 \text{množství} & & \text{vstupů} & & \text{zdrojů} & & \text{množství} & & \text{výstupů} & & \text{propadů} \\
 \\ 
 X_{poc} & + & \sum_j^{vstupy} X_j & + & \sum_j^{zdroje} X_j & = & X_{kon} & + & \sum_j^{výstupy} X_j & + & \sum_j^{propady} X_j
 \end{array} \quad (1)$$

nebo

$$\begin{array}{ccccccc}
 \text{VSTUP} & + & \text{ZDROJ} & = & \text{VÝSTUP} & + & \text{AKUMULACE} \\
 \\ 
 \sum_j^{vstupy} X_j & + & \left( \sum_j^{zdroje} X_j - \sum_j^{propady} X_j \right) & = & \sum_j^{výstupy} X_j & + & (X_{kon} - X_{poc})
 \end{array} \quad (2)$$

nebo

$$\begin{array}{ccccccc}
 \text{AKUMULUCE} & = & \text{VSTUP} & + & \text{ZDROJ} \\
 \\ 
 (X_{kon} - X_{poc}) & = & \left( \sum_j^{vstupy} X_j - \sum_j^{výstupy} X_j \right) & + & \left( \sum_j^{zdroje} X_j - \sum_j^{propady} X_j \right)
 \end{array} \quad (3)$$

Tyto obecné ekvivalentní úpravy jsou jen formální a pro praktické použití si musíme odpovédět na následující otázky:

1. Co bilancujeme?
2. Za jak dlouho bilancujeme?
3. Co je to počáteční množství?
4. Co je to konečné množství?
5. Co je to akumulace?
6. Co je to vstup?
7. Co je to výstup?
8. Co je to zdroj?
9. Co je propad?

## 10. Proč bilancujeme?

Odpovíme na tyto otázky z obecného hlediska a zakomponujeme do některých odpovědí náš zkoumaný systém (tj. trubkový chemický reaktor - nelineární systém se spojitě rozloženými parametry):

1. Bilancujeme veličiny, které podstatnou měrou ovlivňují pochody v reaktoru a z našeho pohledu jsou pro chování systému podstatné. Jedná se o:
  - koncentraci látky A, B, C -  $c_A, c_B, c_C$
  - teplotu reakční směsi, stěn chladiwa -  $T_r, T_s, T_c$
2. Bilancujeme za definované bilanční období vymezené dvěma časovými údaji, které definují počátek bilance  $t_0$  a konec bilančního období  $t_f$ .
3. Počáteční množství je množství bilancované veličiny, která se nachází v bilančním systému v okamžiku začátku bilančního období tedy v čase  $t_0$ .
4. Konečné množství je množství bilancované veličiny, které se nachází v bilančním systému v okamžiku konce bilančního období tedy v čase  $t_f$ .
5. Akumulací veličiny v systému rozumíme změnu množství veličiny v systému, tedy rozdíl mezi množstvím veličiny v systému na konci bilančního období a množstvím veličiny v systému na začátku bilančního období.

$$\text{akumulace} = \frac{\text{konečné}}{\text{množství}} - \frac{\text{počáteční}}{\text{množství}} = X_{\text{kon}} - X_{\text{poč}} \quad (4)$$

V případě, že se stav systému nemění v čase, je systém v ustáleném stavu a akumulace je nulová.

6. Vstup je množství veličiny, které se během bilančního období přemístí z okolí bilančního systému přes hranice bilančního systému do bilančního systému. V našem případě se jedná o tyto veličiny (vstupní veličiny označujeme indexem  $v$ ):  $c_{Av}, T_{rv}, T_{cv}, q_r, q_c$  ( $q_c, q_r$  bez indexu, protože jsou vždy konstantní a není třeba je rozlišovat).

7. Výstup je množství bilancované veličiny, které se během bilančního období přemístí z bilančního systému přes hranice bilančního systému do okolí. V našem případě se jedná o hodnoty stavových veličin na konci reaktoru (označujeme je indexem  $n$ , z  $n$ -tého dílku reaktoru, což bude zřejmé dále).
- koncentraci látky A, B, C -  $c_{An}, c_{Bn}, c_{cn}$
  - teplotu reakční směsi, stěn a chladiwa -  $T_{rn}, T_{sn}, T_{cn}$
8. Zdroj je množství bilancované veličiny, které v bilančním systému během bilančního období vznikne, např. koncentrace nějaké veličiny vzniklé chemickou reakcí. V našem případě:
- koncentrace látky B, C -  $c_B, c_C$
9. Propad je množství bilancované veličiny, které v bilančním systému během bilančního období zanikne, např. koncentrace nějaké sloučeniny zaniká v důsledku chemické reakce. V našem případě se jedná o:
- koncentraci látky A, B -  $c_A, c_B$
10. Právě odpovědí na tuto otázku vybíráme ze systému pro nás podstatné veličiny, které bilancujeme. V našem případě šest veličin:
- koncentraci látky A, B, C -  $c_A, c_B, c_C$
  - teplotu reakční směsi, stěn a chladiwa -  $T_r, T_s, T_c$

### 1.1.1 Bilance za diferenciální časové období

Důležitým typem bilančního období je velmi (infinitezimálně) krátké období  $t$  až  $t + dt$ . Všechny členy bilanční rovnice jsou pak velmi malé. Vydělíme-li však všechny tyto členy velmi krátkou délkou bilančního období  $dt$ , získáme bilanci vztaženou na jednotku času lokalizovanou v čase. Budeme-li opět citovat [3]:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{vstup za} & & \text{zdroj za} & = & \text{výstup za} & + & \text{akumulace za} \\ \text{jednotku času} & + & \text{jednotku času} & & \text{jednotku času} & & \text{jednotku času} \end{array} \quad (5)$$

Zavedeme pojmy rozsah a rychlost procesu. Rozsah (velikost) procesu, který probíhá po nějakou dobu  $\Delta t$ , můžeme kvantitativně charakterizovat pomocí změny množství nějaké veličiny  $\Delta X$ , která je tímto procesem jednoznačně způsobena. Rychlost procesu je pak de-

finována jako rozsah procesu za jednotku času. Pokud pro výpočet rychlosti použijeme konečné bilanční období  $\Delta t = t_{kon} - t_{poč}$ , jedná se průměrnou hodnotu rychlosti za toto období:

$$\begin{array}{l} \text{průměrná} \\ \text{rychlost procesu} \end{array} = \begin{array}{l} \text{rozsah procesu} \\ \text{za jednotku času} \end{array} = \frac{\Delta X}{\Delta t} \quad (6)$$

Pokud pro výpočet rychlosti použijeme diferenciální časové období  $t$  až  $t + dt$ , jedná se o okamžitou hodnotu rychlosti v čase:

$$\begin{array}{l} \text{okamžitá} \\ \text{rychlost procesu} \end{array} = \begin{array}{l} \text{rozsah procesu} \\ \text{za jednotku času} \end{array} = \frac{dX}{dt} \quad (7)$$

Akumulaci můžeme vyjádřit za jednotku času:

$$\begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{akumulace} \end{array} = \begin{array}{l} \text{akumulace za} \\ \text{jednotku času} \end{array} = \frac{\text{konečné množství} - \text{počáteční množství}}{\text{konečný čas} - \text{počáteční čas}} = \frac{\Delta X}{\Delta t} \quad (8)$$

Pro diferenciální bilanční období  $dt$  je pravá strana této rovnice totožná s matematickou definicí derivace množství veličiny podle času.

Vstup, výstup, zdroj a propad můžeme také vyjádřit za jednotku času:

$$\begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{vstupu} \end{array} = \begin{array}{l} \text{vstup za} \\ \text{jednotku času} \end{array} = \begin{array}{l} \text{přítok} \\ \text{veličiny} \end{array} = \sum_j^{\text{vstupy}} \dot{X}_j \quad (9)$$

$$\begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{výstupu} \end{array} = \begin{array}{l} \text{výstup za} \\ \text{jednotku času} \end{array} = \begin{array}{l} \text{odtok} \\ \text{veličiny} \end{array} = \sum_j^{\text{výstupy}} \dot{X}_j \quad (10)$$

$$\begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{zdroje} \end{array} = \begin{array}{l} \text{zdroj za} \\ \text{jednotku času} \end{array} = \begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{vzniku veličiny} \end{array} = \sum_j^{\text{zdroje}} \dot{X}_j \quad (11)$$

$$\begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{propadu} \end{array} = \begin{array}{l} \text{propad za} \\ \text{jednotku času} \end{array} = \begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{zániku veličiny} \end{array} = \sum_j^{\text{propady}} \dot{X}_j \quad (12)$$

Pokud není ve formálním zápisu bilancí explicitně uvedena rychlost zániku, předpokládáme, že je zahrnuta se záporným znaménkem do rychlosti vzniku:

$$\begin{array}{l} \text{rychlost} \\ \text{vzniku} \\ \text{veličiny} \end{array} = \sum_j^{\text{zdroje}} \dot{X}_j - \sum_j^{\text{propady}} \dot{X}_j \quad (13)$$

Bilanční rovnici pro diferenciální bilanční období  $dt$  pak můžeme vyjádřit ve tvaru:

$$\begin{array}{rcccl}
 \text{přítok} & + & \text{rychlost} & = & \text{odtok} & + & \text{rychlost} \\
 & & \text{vzniku} & & & & \text{akumulace} \\
 \\ 
 \sum_j^{\text{vstupy}} X_j & + & \left( \sum_j^{\text{zdroje}} X_j - \sum_j^{\text{propady}} X_j \right) & = & \sum_j^{\text{výstupy}} X_j & + & \frac{dX}{dt}
 \end{array} \tag{14}$$

### 1.1.2 Bilance pro ustálený stav

Ustálený stav v této souvislosti znamená, že je akumulace nulová. Pro bilanci za diferenciální bilanční období to znamená, že stav systému se v čase nemění.

$$\text{vstup} + \text{zdroj} = \text{výstup} \quad \text{přítok} + \text{rychlost vzniku} = \text{odtok}$$

## 1.2 Odvození matematického modelu pro trubkový chemický reaktor

Odvodíme si celkem šest diferenciálních rovnic, které budou popisovat daný systém.

Rozdělíme si veličiny podle klasifikace:

- konstrukční a technologické parametry

Jedná se o veličiny, které jsou konstantní, souvisí s materiály, ze kterého je reaktor vyroben a s vlastnostmi médií, které do reaktoru vstupují (např. hustota, měrné teplo apod.). Tedy je nelze přímo měnit.

- vstupní veličiny

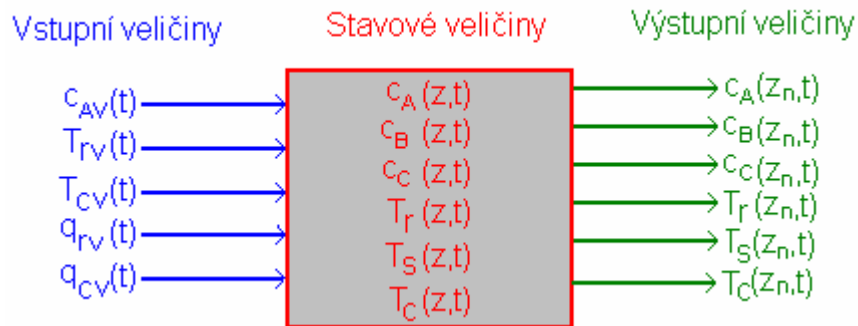
Veličiny, které do reaktoru vstupují a které během simulace můžeme přímo měnit, tedy jejich ovlivňováním řídíme děje probíhající v reaktoru.

- stavové veličiny

Veličiny, které nám poskytují informaci o stavech daného procesu. Na těchto veličinách zkoumáme změny vstupních veličin.

- výstupní veličiny

Za výstupní veličiny budeme brát stavové veličiny vystupující z reaktoru (označíme si je indexem  $n$  u prostorové proměnné  $z$  v diskretizovaném modelu, viz. kapitola 1.3.1).



Obr. 1. Grafické schéma rozdělení veličin

### 1.2.1 Zjednodušující předpoklady

- V trubkách i plášti reaktoru předpokládáme ideální pístový tok kapalin
- Zanedbáváme vedení tepla v kapalinách i stěnách trubek reaktoru
- Přestup tepla probíhá jen ve směru kolmém na směr proudění
- Technologické parametry pokládáme za konstantní
- Plášť reaktoru je dokonale tepelně izolovaný

### 1.2.2 Rozdělení veličin

**Konstrukční veličiny** (parametry, konstantní)

- Počet trubek v reaktoru  $n_1 [-]$
- Délka trubek a pláště  $L [m]$
- Vnitřní průměr trubky  $d_1 [m]$
- Vnější průměr trubky  $d_2 [m]$
- Vnitřní průměr pláště  $d_3 [m]$

**Technologické veličiny** (parametry, konstantní)

- Hustoty reakční směsi, materiálu stěny a chladiwa  
 $\rho_r, \rho_s, \rho_c$   $[kg.m^{-3}]$
- Měrná tepla reakční směsi, materiálu stěny a chladiwa  
 $c_{pr}, c_{ps}, c_{pc}$   $[kJ.kg^{-1}.K^{-1}]$
- Koeficienty přestupu tepla (reakční směs – stěna – chladiwo)  
 $\alpha_1, \alpha_2$   $[kJ.m^{-2}.K^{-1}.s^{-1}]$

**Vstupní veličiny**

- Koncentrace látky A  
 $c_{Av}(t)$   $[kmol.m^{-3}]$
- Teplota reakční směsi, chladiwa  
 $T_{rv}(t), T_{cv}(t)$   $[K]$
- Průtok reakční směsi, chladiwa  
 $q_{rv}(t), q_{cv}(t)$   $[m^3.s^{-1}]$

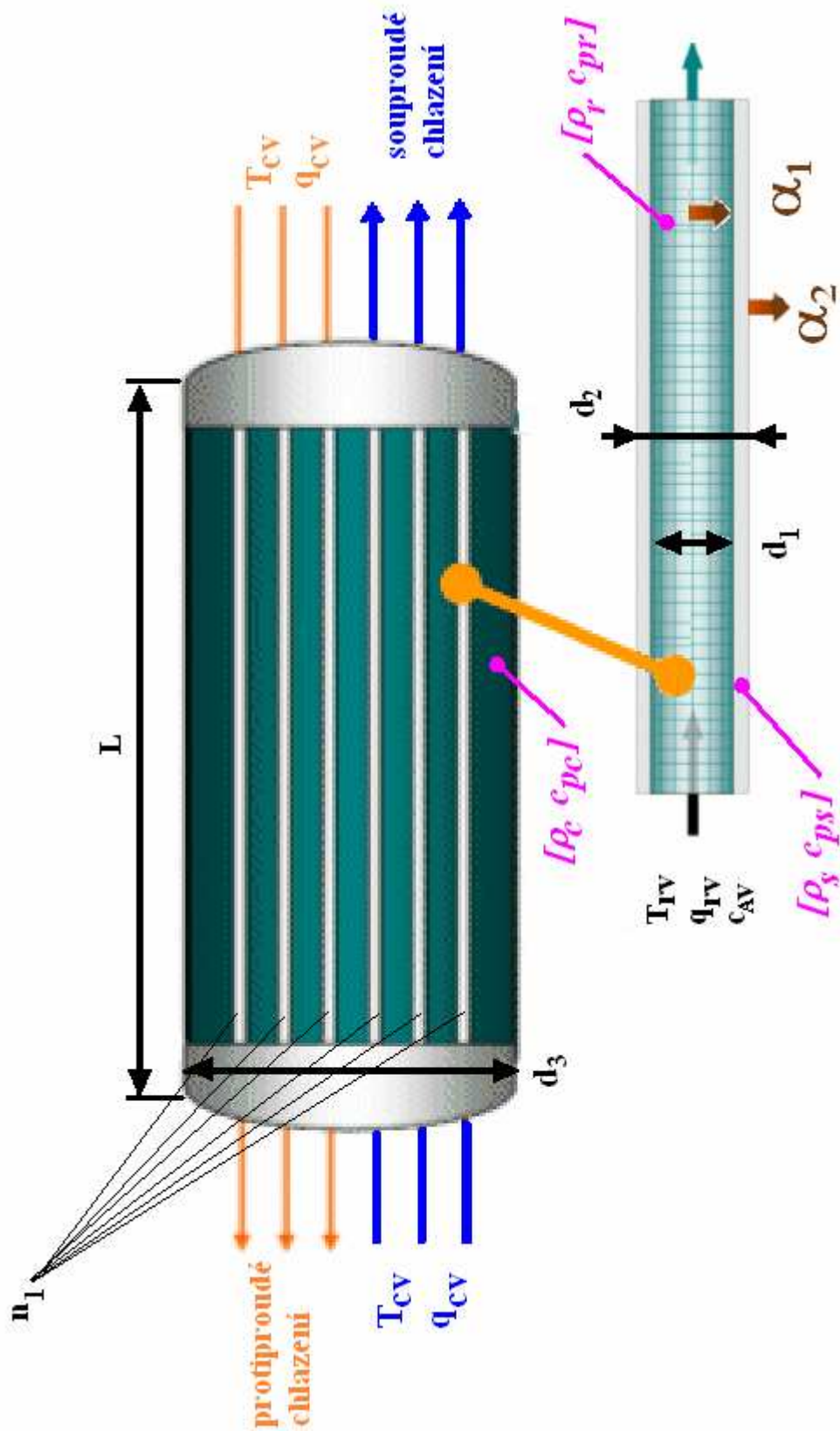
**Stavové veličiny**

- Koncentrace látky A, B, C  
 $c_A(z,t), c_B(z,t), c_C(z,t)$   $[kmol.m^{-3}]$
- Teplota reakční směsi, stěn a chladiwa  
 $T_r(z,t), T_s(z,t), T_c(z,t)$   $[K]$

**Výstupní veličiny** (stavové veličiny na výstupu reaktoru)

- Koncentrace látky A, B, C  
 $c_A(z_n,t), c_B(z_n,t), c_C(z_n,t)$   $[kmol.m^{-3}]$
- Teplota reakční směsi, stěn a chladiwa  
 $T_r(z_n,t), T_s(z_n,t), T_c(z_n,t)$   $[K]$





Obr. 2. Grafický model trubkového chemického reaktoru se znázorněním konstrukčních technologických a vstupních veličin

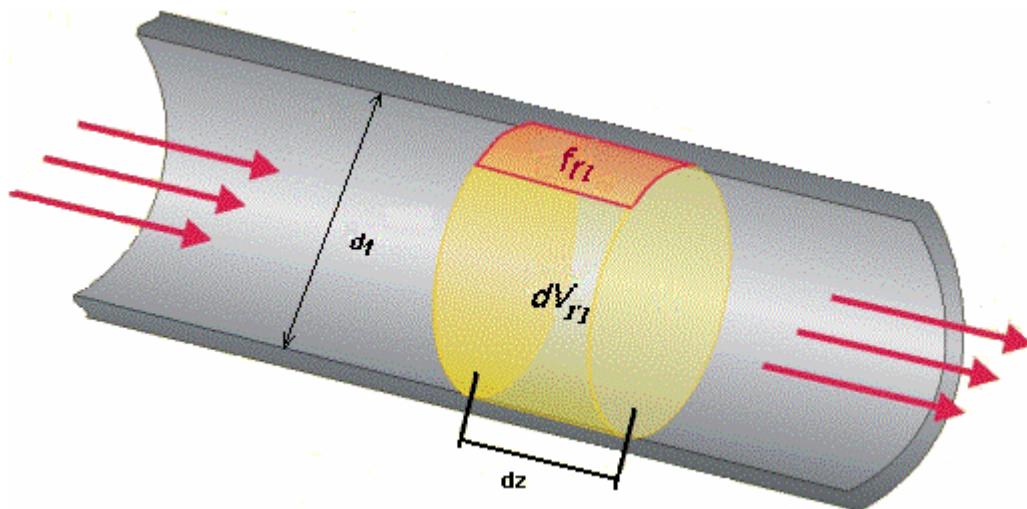
### 1.2.3 Vyjádření elementů potřebných pro výpočet

**Objemový element  $n_1$  trubek:**

$$dV_r = n_1 \cdot \frac{\pi \cdot d_1^2}{4} \cdot dz = f_r \cdot dz \quad (15)$$

pro jednu trubku:

$$dV_{r1} = \frac{\pi \cdot d_1^2}{4} \cdot dz = f_{r1} \cdot dz \quad (16)$$



Obr. 3. Objemový element  $dV_{r1}$

**Objemový element stěn trubek:**

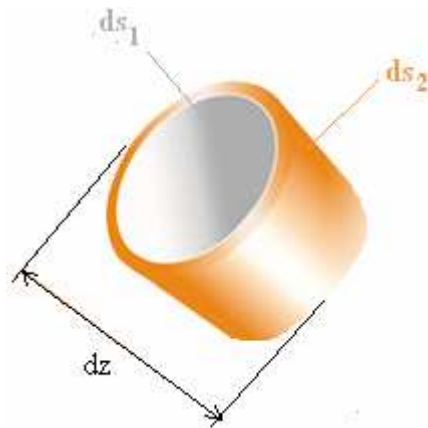
vnitřní plocha pro  $n_1$  trubek:

$$ds_1 = n_1 \cdot \pi \cdot d_1 \cdot dz \quad (17)$$

vnější plocha pro  $n_1$  trubek:

$$ds_2 = n_1 \cdot \pi \cdot d_2 \cdot dz \quad (18)$$

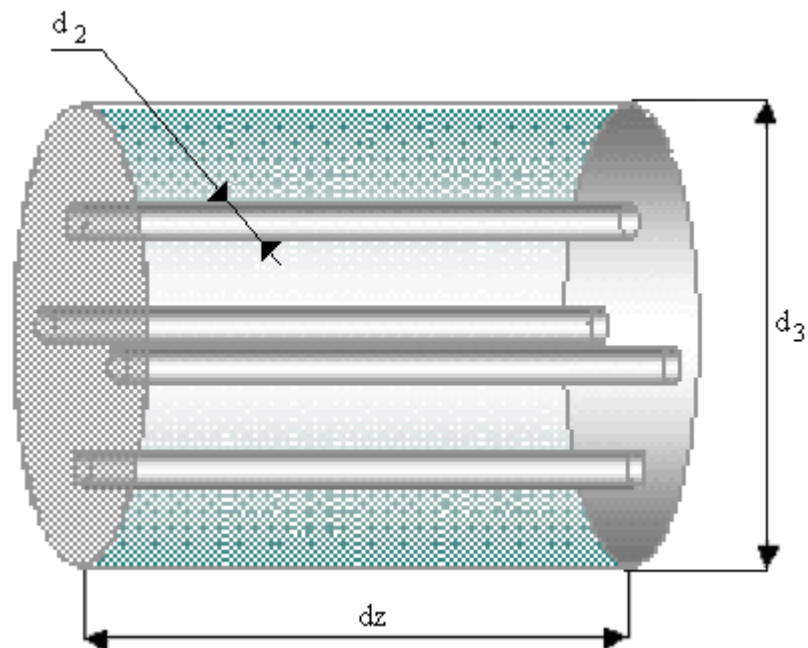
$$dV_s = n_1 \cdot \left( \frac{\pi \cdot d_2^2}{4} \cdot dz - \frac{\pi \cdot d_1^2}{4} \cdot dz \right) = n_1 \cdot \pi \cdot \frac{d_2^2 - d_1^2}{4} \cdot dz \quad (19)$$



Obr. 4. Objemový element  
pro stěnu trubky  $dV_s$

#### Objemový element chladiva

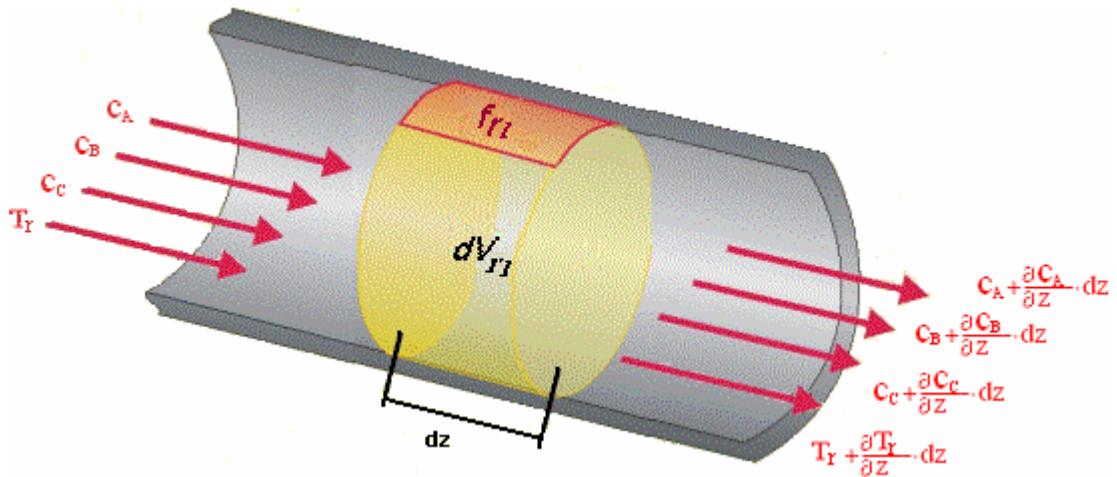
$$dV_c = \left( \pi \cdot \frac{d_3^2}{4} - n_1 \cdot \pi \cdot \frac{d_2^2}{4} \right) dz = \frac{\pi}{4} \cdot (d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) dz = f_c \cdot dz \quad (20)$$



Obr. 5. Objemový element chladiva  $dV_c$

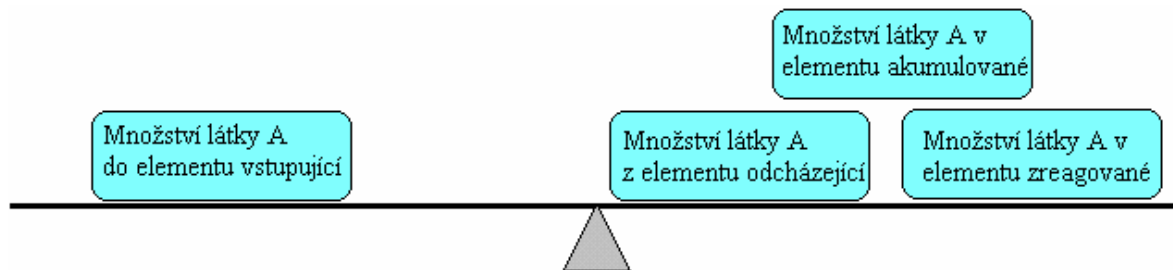
### 1.2.4 Odvození matematického modelu

Pro látky A, B, C a teplotu reakční směsi se jedná o vyjádření v elementu  $dV_r$ , pro teplotu stěn v elementu  $dV_s$  a pro teplotu chladicí směsi v elementu  $dV_c$ .



Obr. 6. Bilancované veličiny objemového elementu jedné trubky  $dV_{r1}$

#### Odvození materiálové bilance látky A



Obr. 7. Znárodnění materiálové bilance látky A

$$q_r \cdot c_A = q_r \cdot \left( c_A + \frac{\partial c_A}{\partial z} \cdot dz \right) + dV_r \cdot k_1 \cdot c_A + dV_r \cdot \frac{\partial c_A}{\partial t} \quad (21)$$

Po roznásobení, odečtení členu  $q_r \cdot c_A$ , dosazením za  $dV_r$  výraz (15) a podělením rovnice tímto výrazem, dostáváme:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \frac{q_r}{f_r} \cdot \frac{\partial c_A}{\partial z} \cdot dz = -k_1 \cdot c_A \quad (22)$$

vykrátíme  $dz$  a protože pro rychlost proudění platí:

$$v_r = \frac{q_r}{f_r} \quad (23)$$

získáváme tak konečný tvar rovnice:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial c_A}{\partial z} = -k_1 \cdot c_A \quad (24)$$

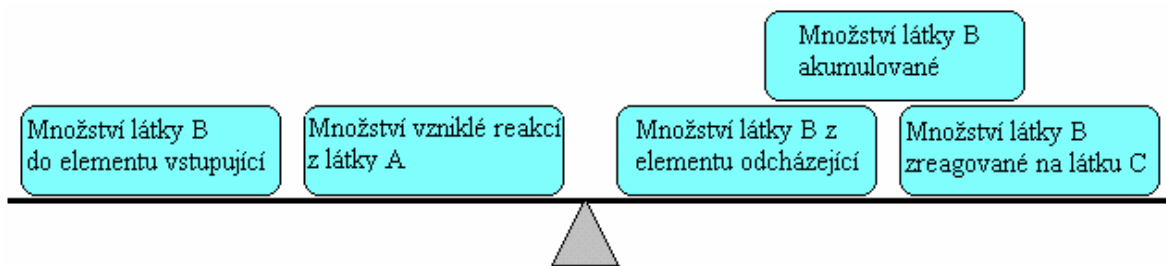
s počáteční podmínkou:

$$c_A(z, 0) = c_A^S(z) \quad (25)$$

a okrajovou podmínkou:

$$c_A(0, t) = c_{AV}(t) \quad (26)$$

### *Materiálová bilance pro látku B*



Obr. 8. Znázornění materiálové bilance látky B

$$q_r \cdot c_B + dV_r \cdot k_1 \cdot c_A = q_r \cdot \left( c_B + \frac{\partial c_B}{\partial z} \cdot dz \right) + dV_r \cdot k_2 \cdot c_B + dV_r \cdot \frac{\partial c_B}{\partial t} \quad (27)$$

Po roznásobení, odečtení členu  $q_r \cdot c_B$ , dosazením za  $dV_r$  výraz (15) a podělením

rovnice (27) tímto výrazem, dostáváme:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + \frac{q_r}{f_r} \cdot \frac{\partial c_B}{\partial z} \cdot dz = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B \quad (28)$$

$dz$  opět vykrátíme a dosadíme za  $v_r$  výraz (23), dostáváme tak konečný tvar:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial c_B}{\partial z} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B \quad (29)$$

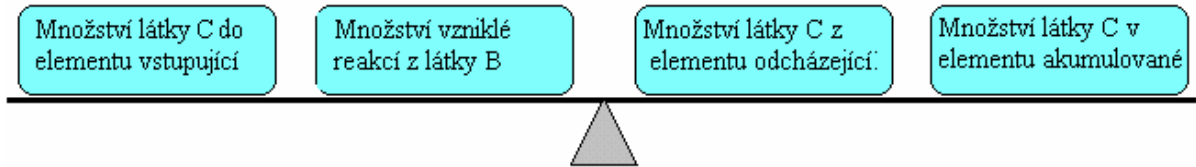
s počáteční podmínkou:

$$c_B(z, 0) = c_B^S(z) \quad (30)$$

a okrajovou podmínkou

$$c_B(0, t) = c_{BV}(t) \quad (31)$$

**Materiálová bilance pro látku C:**



Obr. 9. Znárodnění materiálové bilance látky C

$$q_r \cdot c_C + dV_r \cdot k_2 \cdot c_B = q_r \cdot \left( c_C + \frac{\partial c_C}{\partial z} \cdot dz \right) + dV_r \cdot \frac{\partial c_C}{\partial t} \quad (32)$$

odečteme výraz  $q_r \cdot c_C$  a vydělíme celou rovnicí členem  $dV_r$ :

$$k_2 \cdot c_B = \frac{q_r}{dV_r} \cdot \frac{\partial c_C}{\partial z} \cdot dz + \frac{\partial c_C}{\partial t} \quad (33)$$

dosadíme výraz za  $dV_r$  (15), pokrátíme  $dz$  a za  $\frac{q_r}{f_r}$  dosadíme (23), dostaneme tak konečný

tvar:

$$\frac{\partial c_C}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial c_C}{\partial z} = k_2 \cdot c_B \quad (34)$$

s počáteční podmínkou:

$$c_C(z, 0) = c_C^S(z) \quad (35)$$

a okrajovou podmínkou:

$$c_C(0, t) = c_{CV}(t) \quad (36)$$

## Tepelná bilance reakční směsi



Obr. 10. Znázornění tepelné bilance reakční směsi

$$q_r \cdot \rho_r \cdot c_{pr} \cdot T_r + dV_r \cdot Q_r = q_r \cdot \rho_r \cdot c_{pr} \cdot \left( T_r + \frac{\partial T_r}{\partial z} \cdot dz \right) + ds_1 \cdot \alpha_1 (T_r - T_s) + dV_r \cdot \rho_r \cdot c_{pr} \cdot \frac{\partial T_r}{\partial t} \quad (37)$$

kde  $Q_r$  je reakční teplo a platí:

$$Q_r = h_{r1} \cdot k_1 \cdot c_A + h_{r2} \cdot k_2 \cdot c_B \quad (38)$$

a  $h_{r1}$ ,  $h_{r2}$  jsou reakční entalpie reakcí:  $A \rightarrow B$ ,  $B \rightarrow C$  [ $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ]

členy  $q_r \cdot \rho_r \cdot c_{pr} \cdot T_r$  se nám po roznásobení vykrátí a podělením celé rovnice výrazem  $dV_r \cdot \rho_r \cdot c_{pr}$  dostáváme:

$$\frac{Q_r}{\rho_r \cdot c_{pr}} = \frac{q_r}{dV_r} \cdot \frac{\partial T_r}{\partial z} \cdot dz + \frac{ds_1 \cdot \alpha_1}{dV_r \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot (T_r - T_s) + \frac{\partial T_r}{\partial t} \quad (39)$$

dosadíme za  $dV_r$  (15) a za  $ds_1$  (17):

$$\frac{\partial T_r}{\partial t} + \frac{q_r}{f_r \cdot dz} \cdot \frac{\partial T_r}{\partial z} \cdot dz = \frac{Q_r}{\rho_r \cdot c_{pr}} - \frac{n_1 \cdot \pi \cdot d_1 \cdot dz \cdot \alpha_1}{f_r \cdot dz \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot (T_r - T_s) \quad (40)$$

vykrátíme  $dz$  a za  $f_r \cdot dz$  dosadíme ekvivalent z (15):

$$\frac{\partial T_r}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial T_r}{\partial z} = \frac{Q_r}{\rho_r \cdot c_{pr}} - \frac{n_1 \cdot \pi \cdot d_1 \cdot \alpha_1}{n_1 \cdot \frac{\pi \cdot d_1^2}{4} \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot (T_r - T_s) \quad (41)$$

$n_1$ ,  $d_1$  a  $\pi$  vykrátíme, 4 přesuneme do čitatele a dostáváme konečný tvar:

$$\frac{\partial T_r}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial T_r}{\partial z} = \frac{Q_r}{\rho_r \cdot c_{pr}} - \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot (T_r - T_s) \quad (42)$$

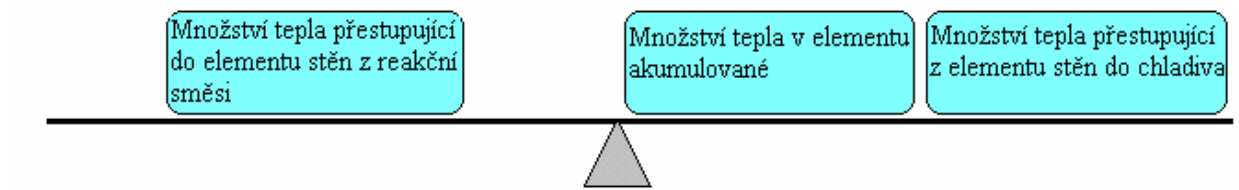
s počáteční podmínkou:

$$T_r(z,0) = T_r^S(z) \quad (43)$$

a okrajovou podmínkou:

$$T_r(0,t) = T_{rv}(t) \quad (44)$$

### Tepelná bilance elementu stěn trubek



Obr. 11. Znárodnění tepelné bilance elementu stěn trubek

$$ds_1 \cdot \alpha_1 \cdot (T_r - T_s) = ds_2 \cdot \alpha_2 \cdot (T_s - T_c) + dV_s \cdot \rho_s \cdot c_{ps} \cdot \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (45)$$

Dosadíme za  $dV_r$ ,  $ds_1$  a  $ds_2$  výrazy (15), (17) a (18):

$$n_1 \cdot \pi \cdot d_1 \cdot dz \cdot \alpha_1 \cdot (T_r - T_s) = n_1 \cdot \pi \cdot d_2 \cdot dz \cdot \alpha_2 \cdot (T_s - T_c) + n_1 \cdot \pi \cdot \frac{d_2^2 - d_1^2}{4} \cdot dz \cdot \rho_s \cdot c_{ps} \cdot \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (46)$$

celou rovnicí vykrátíme výrazem  $n_1 \cdot \pi \cdot dz$  a vydělíme výrazem  $\frac{d_2^2 - d_1^2}{4} \cdot \rho_s \cdot c_{ps}$  a po úpravě

dostaneme konečný tvar rovnice:

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{4[d_1 \cdot \alpha_1 \cdot (T_r - T_s) + d_2 \cdot \alpha_2 \cdot (T_c - T_s)]}{(d_2^2 - d_1^2) \rho_s \cdot c_{ps}} \quad (47)$$

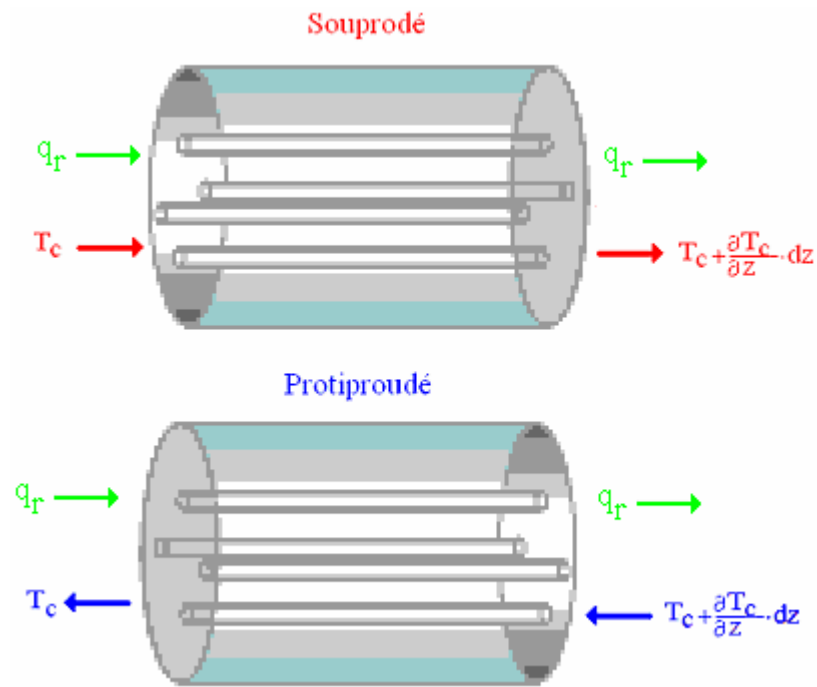
s počáteční podmínkou:

$$T_s(z,0) = T_s^S(z) \quad (48)$$

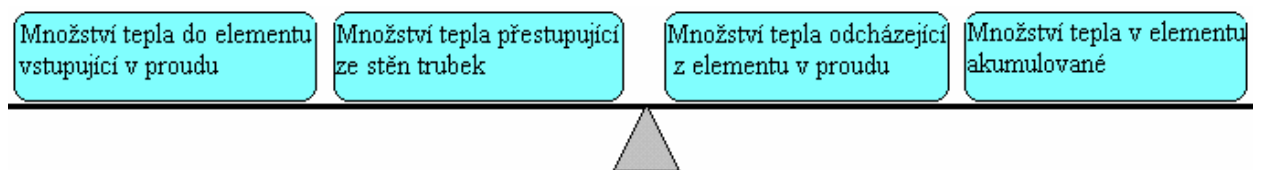


**Tepelná bilance elementu objemu pláště reaktoru**

Proud chladicí kapaliny může být buď ve směru proudění reakční směsi, mluvíme pak o souproutém chlazení nebo proti směru proudění reakční směsi. Pak se jedná o protiproudé chlazení (obr. 12).



Obr. 12. Znázornění souproutého a protiproudého chlazení v elementu  $dV_c$



Obr. 13. Znázornění tepelné bilance chladiva

*Souprouté:*

$$q_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc} \cdot T_c + ds_2 \cdot \alpha_2 \cdot (T_s - T_c) = q_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc} \cdot \left( T_c + \frac{\partial T_c}{\partial z} \cdot dz \right) + dV_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc} \cdot \frac{\partial T_c}{\partial t} \quad (49)$$

členy  $q_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc} \cdot T_c$  se odečtou za  $ds_2$  dosadíme (18) a podělíme celou rovnicí výrazem

$q_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc}$ :

$$\frac{n_1 \cdot \pi \cdot d_2 \cdot dz \cdot \alpha_2}{\frac{\pi}{4} \cdot (d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot dz} \cdot (T_s - T_c) - \frac{q_c}{f_c \cdot dz} \cdot \frac{\partial T_c}{\partial z} \cdot dz = \frac{\partial T_c}{\partial t} \quad (50)$$

vykrátíme  $dz$  a  $\pi$  a dosadíme  $v_c$ , pro které platí

$$v_c = \frac{q_c}{f_c} \quad (51)$$

a dostáváme konečný tvar:

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} + v_c \cdot \frac{\partial T_c}{\partial z} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot q_c \cdot c_{pc}} (T_s - T_c) \quad (52)$$

s počáteční podmínkou:

$$T_c(z, 0) = T_c^s(z) \quad (53)$$

a okrajovou podmínkou:

$$T_c(0, t) = T_{cv}(t) \quad (54)$$

*Protiproudé:*

$$q_c \cdot \rho_c \cdot \left( T_c + \frac{\partial T_c}{\partial z} \cdot dz \right) + ds_2 \cdot \alpha_2 \cdot (T_s - T_c) = q_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc} \cdot T_c + dV_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc} \cdot \frac{\partial T_c}{\partial t} \quad (55)$$

členy  $q_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc} \cdot T_c$  se odečtou za  $ds_2$  dosadíme (18) a podělíme celou rovnicí výrazem

$q_c \cdot \rho_c \cdot c_{pc}$ :

$$\frac{q_c}{f_c \cdot dz} \cdot \frac{\partial T_c}{\partial z} \cdot dz + \frac{n_1 \cdot \pi \cdot d_2 \cdot dz \cdot \alpha_2}{\frac{\pi}{4} \cdot (d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot dz} \cdot (T_s - T_c) = \frac{\partial T_c}{\partial t} \quad (56)$$

vykrátíme  $dz$  a  $\pi$  a dosadíme  $v_c$  (51), čímž dostaneme konečný tvar:

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} - v_c \cdot \frac{\partial T_c}{\partial z} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot q_c \cdot c_{pc}} (T_s - T_c) \quad (57)$$

s počáteční podmínkou:

$$T_c(z, 0) = T_c^s(z) \quad (58)$$

a okrajovou podmínkou:

$$T_c(L, t) = T_{cv}(t) \quad (59)$$

V rovnicích jsou  $k_{1,2}$  rychlostní konstanty popsány Arrheniovými vztahy reakce  $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ ; jedná se tedy o nelineární funkce teploty:

$$k_1 = k_{10} \cdot \exp\left(-\frac{E_1}{R.T}\right) \quad (60)$$

$$k_2 = k_{20} \cdot \exp\left(-\frac{E_2}{R.T}\right) \quad (61)$$

kde  $k_{10}$  a  $k_{20}$  jsou frekvenční faktory (konstanty, vyjadřující složenou pravděpodobnost srážky molekul za takové jejich vzájemné orientace, aby srážka byla efektivní a aby došlo k reakční změně),  $R$  univerzální plynová konstanta a  $E_{1,2}$  aktivační energie reakční změny.

### 1.3 Metody řešení ustáleného stavu a dynamiky

Z výše odvozených rovnic vyplývá, že ustálený stav pro konkrétní stavovou veličinu je popsán obyčejnou diferenciální rovnicí, kterou lze obecně napsat ve tvaru (62) a dynamika pro konkrétní stavovou veličinu je popsána parciální diferenciální rovnicí, která má obecný tvar (64). Z metod pro řešení diferenciálních rovnic vybereme pro řešení ustáleného stavu metodu iterační a pro řešení dynamiky jednokrokovou metodu Runge–Kutta–Fehlberg.

Obecná rovnice pro ustálený stav:

$$v \cdot \frac{dx^s}{dz} = k \cdot (u^s - x^s) \quad (62)$$

s okrajovou podmínkou

$$x^s(0) = u_0^s \quad (63)$$

Obecná rovnice pro dynamiku:

$$\frac{\partial x}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial x}{\partial z} = k \cdot (u - x) + f(x) \quad (64)$$

s počáteční podmínkou:

$$x(z,0) = x^s(z) \quad (65)$$

a okrajovou podmínkou:

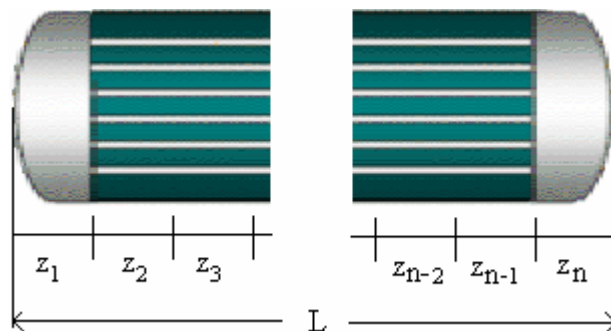
$$x(0,t) = u_0(t) \quad (66)$$

### 1.3.1 Převod spojitého modelu na diskretizovaný

Jelikož budeme ustálený stav a dynamiku řešit numericky, tj. na ustálený stav budeme aplikovat iterační metodu a na dynamiku metodu Runge-Kutta-Fehlberg. Musíme si spojitou délku reaktoru  $L$  rozdělit na  $n$  dílků a diferenciály podle prostorové proměnné  $z$  si převést na difference.

Pro diskretizační krok pak bude platit:

$$h = \frac{L}{n} \quad (67)$$



Obr. 14. Rozděl. spojité délky reaktoru na  $n$  dílků

a pro diferenciály převedením na difference (použitím zpětné difference):

$$\frac{dX}{dz} \approx \frac{X(i) - X(i-1)}{h}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (68)$$

Pro protiproudé chlazení musíme použít dopřednou diferenci, protože okrajová podmínka je definována pro  $z = L$ , vztah bude vypadat následovně:

$$\frac{dX}{dz} \approx \frac{X(j+1) - X(j)}{h}, \quad j = n, n-1, \dots, 1 \quad (69)$$

### 1.3.2 Iterační metoda

Podstatou této metody je, že se vychází z přibližných hodnot neznámých veličin a poměrně malým počtem operací se získávají nové přesnější výsledky těchto neznámých hodnot. V našem případě budeme provádět výpočty až rozdíl mezi skutečnou a námi vypočítanou hodnotou bude v řádu  $10^{-3}$ , což pro přesnost řešení zcela vystačuje.

Převedením rovnice (62) do diferenční rovnice podle (68) a rozdělením reaktoru na  $n$  dílků dostaneme pro vyjádření  $i$ -té hodnoty stavové veličiny v ustáleném stavu tvar:

$$x_i^S = \frac{1}{\frac{v}{h} + k} \left[ \frac{v}{h} x_{i-1}^S + f(x_i^S) + k u_i^S \right], i = 1, 2, \dots, n \quad (70)$$

Pro řešení použijeme Seidlovu modifikaci prosté iterace, která má obecně tvar:

$$x_i^{S(k+1)} = \varphi[x_{i-1}^{S(k+1)}, x_i^{S(k)}] + v_i, i = 1, \dots, n; k = 0, 1, \dots \quad (71)$$

kde  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  je vektor známých,  $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$  nelineární vektorová funkce a

$\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  vektor konstant.

Rovnice bude konvergovat viz [14] (blížit se k přesnému řešení dle rovnice (74)), jestliže na oblasti řešení  $D$  platí:

$$\left\| \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}} \right\|_D < 1 \quad (72)$$

Použijeme-li řádkovou normu, pak získáme postačující podmínku konvergence ve tvaru:

$$\sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} \right| < 1, \text{ pro } i = 1, \dots, n \quad (73)$$

Splněním podmínky (72) nebo (73) existuje jediné řešení  $\mathbf{x}^* \in D$  soustavy  $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{x})$  a konvergenci můžeme vyjádřit limitou:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^* \quad (74)$$

Iterační proces ukončíme jestliže:

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| < \varepsilon, \text{ pro } k = 1, 2, \dots \quad (75)$$

kde  $\varepsilon$  je námi vhodně zvolené číslo.

### 1.3.3 Metody Runge–Kutta

Metody Runge-Kutta se používají pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic.

Vlastností těchto metod je, že k určení následující hodnoty se používá pouze předcházející hodnota. Jsou založeny na postupném zpřesňování hodnot.

Výpočetní vzorec má obecný tvar:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \phi(x_n, y_n, h) \quad (76)$$

kde

$$h \cdot \phi(x_n, y_n, h) = w_1 \cdot k_1(h) + \dots + w_{ss} \cdot k_s(h) \quad (77)$$

a pro  $k$ :

$$\begin{aligned} k_1(h) &= f(x_n, y_n) \\ k_2(h) &= f(x_n + \alpha_2 h, y_n + h\beta_{21}k_1) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ k_s(h) &= f(x_n + \alpha_s h, y_n + h(\beta_{s1}k_1 + \beta_{s2} + \dots + \beta_{s,s-1}k_{s-1})) \end{aligned} \quad (78)$$

Pomocné hodnoty  $k_i$  představují derivace stavu (rychlosti) systému ve speciálních bodech na začátku, konci a uprostřed intervalu  $\langle x_n, x_{n+1} \rangle$ .

Výhodou těchto metod je, že jsou samostartující (nepotřebují výpočet počátečních hodnot jinou metodou). Krok integrace lze libovolně měnit a jejich programování je snadné a jsou velmi robustní. Pro výpočty volíme modifikaci Runge–Kutta–Fehlberg, která byla odvozena v 70. letech 20. století a dnes patří mezi populární modifikaci Runge-Kuttových metod.

Má tvar:

$$y(k+1) = y(k) + \frac{25}{216} \cdot k_1 + \frac{1408}{2565} \cdot k_3 + \frac{2197}{4104} \cdot k_4 - \frac{1}{5} \cdot k_5 \quad (79)$$

kde

$$\begin{aligned} k_1 &= h \cdot f(y(t)) \\ k_2 &= h \cdot f\left(y(t) + \frac{1}{4} \cdot k_1\right) \end{aligned}$$

$$k_3 = h.f\left(y(t) + \frac{3}{32}.k_1 + \frac{9}{32}.k_2\right) \quad (80)$$

$$k_4 = h.f\left(y(t) + \frac{1932}{2197}.k_1 - \frac{7200}{2197}.k_2 + \frac{7296}{2197}.k_3\right)$$

$$k_5 = h.f\left(y(t) + \frac{439}{216}.k_1 - 8.k_2 + \frac{3680}{213}.k_3 - \frac{845}{4104}.k_4\right)$$

Tato metoda řeší obyčejné diferenciální rovnice (ODR), proto si rovnici (64) musíme převést na ODR. Provedeme diskretizaci derivace podle prostorové proměnné dle formule (68) a časovou derivaci necháme ve spojitě formě. Rovnice (64) pak přejde na tvar:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{v}{h}.x_{i-1} - \left(\frac{v}{h} + k\right).x_i + f(x_i) + k.u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (81)$$

Dostaneme tak soustavu  $n$  obyčejných diferenciálních rovnic, na které již můžeme aplikovat výše uvedenou metodu.

## **II. PRAKTICKÁ ČÁST**



## 2 ŘEŠENÍ USTÁLENÉHO STAVU A DYNAMICKÝCH VLASTNOSTÍ

Budeme řešit ustálený stav iterativní metodou. Dynamické vlastnosti budeme řešit metodami pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic a to tak, že převedeme parciální diferenciálních rovnice na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic pomocí diskretizace prostorové proměnné.

### 2.1 Řešení ustáleného stavu

Řešení ustáleného stavu znamená, že položíme v rovnicích derivace podle času rovny nule:

$$\frac{\partial(X)}{\partial t} = 0 \quad (82)$$

Z rovnic (24), (29), (34), (42), (47), (52) a (57) položíme dle rovnice (82) derivace podle času rovny nule a získáme tak matematický model ustáleného stavu:

$$v_r \cdot \frac{dc_A^S}{dz} = -k_1 \cdot c_A^S \quad (83)$$

$$v_r \cdot \frac{dc_B^S}{dz} = k_1 \cdot c_A^S - k_2 \cdot c_B^S \quad (84)$$

$$v_r \cdot \frac{dc_C^S}{dz} = k_2 \cdot c_B^S \quad (85)$$

$$v_r \cdot \frac{dT_r^S}{dz} = \frac{Q_r}{\rho_r \cdot c_{pr}} - \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot (T_r^S - T_s^S) \quad (86)$$

$$0 = \frac{4[d_1 \cdot \alpha_1 \cdot (T_r^S - T_s^S) + d_2 \cdot \alpha_2 \cdot (T_c^S - T_s^S)]}{(d_2^2 - d_1^2) \cdot \rho_s \cdot c_{ps}} \quad (87)$$

*Souproudé chlazení:*

$$v_c \cdot \frac{dT_c^S}{dz} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot q_c \cdot c_{pc}} (T_s^S - T_c^S) \quad (88)$$

*Protiproudé chlazení:*

$$v_c \cdot \frac{dT_c^S}{dz} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \rho_c \cdot c_{pc}} (T_c^S - T_s^S), \quad T_c(L, t) = T_{cv} \quad (89)$$

### *Úprava rovnic do výpočetních vztahů*

Veškeré rovnice popisující vlastnosti reaktoru v ustáleném stavu tj. (83) – (89) upravíme pomocí vztahů (68), (69) a připsíme stavovým veličinám index ( $i$ ) znamenající hodnotu v  $i$ -tém intervalu dělení reaktoru.

Diskretizované vztahy tedy můžeme psát:

$$\frac{v_r}{h} \cdot [c_A(i) - c_A(i-1)] = -k_1(i) \cdot c_A(i) \quad (90)$$

$$\frac{v_r}{h} \cdot [c_B(i) - c_B(i-1)] = k_1 c_A(i) - k_2(i) \cdot c_B(i) \quad (91)$$

$$\frac{v_r}{h} \cdot [c_C(i) - c_C(i-1)] = k_2(i) \cdot c_B(i) \quad (92)$$

$$\frac{v_r}{h} [T_r(i) - T_r(i-1)] = \frac{Q_r}{\rho_r \cdot c_{pr}} - \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} [T_r(i) - T_s(i)] \quad (93)$$

$$T_s(i) = \frac{d_1 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \alpha_1 + d_2 \cdot \alpha_2} \cdot T_r(i) + \left( 1 - \frac{d_1 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \alpha_1 + d_2 \cdot \alpha_2} \right) T_c(i) \quad (94)$$

*Souproudé chlazení:*

$$\frac{v_c}{h} \cdot [T_c(i) - T_c(i-1)] = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \rho_c \cdot c_{pc}} [T_s(i) - T_c(i)] \quad (95)$$

*Protiproudé chlazení:*

$$\frac{v_c}{h} \cdot [T_c(j+1) - T_c(j)] = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \rho_c \cdot c_{pc}} [T_c(j) - T_s(j)] \quad (96)$$

Nelineární funkce  $k_1$ ,  $k_2$  a  $Q_r$  se musí taky počítat v jednotlivých dílcích reaktoru:

$$k_1(i) = k_{10} \exp\left(-\frac{E_1}{RT(i)}\right) \quad (97)$$

$$k_2(i) = k_{20} \exp\left(-\frac{E_2}{RT(i)}\right) \quad (98)$$

$$Q_r(i) = h_{r1} \cdot k_1(i) \cdot c_A(i) + h_{r2} \cdot k_2(i) \cdot c_B(i) \quad (99)$$

kde v rovnicích  $i = 1, 2, \dots, n$  a  $j = n, n-1, \dots, 1$

Jednoduchou ekvivalentní úpravou převedeme rovnice (90) – (96) do výchozích výpočetních vztahů:

$$c_A(i) = \frac{\frac{v_r}{h}}{\frac{v_r}{h} + k_1(i)} \cdot c_A(i-1) \quad (100)$$

$$c_B(i) = \frac{1}{\frac{v_r}{h} + k_2(i)} \cdot \left[ k_1(i) \cdot c_A(i) + \frac{v_r}{h} \cdot c_B(i-1) \right] \quad (101)$$

$$c_C(i) = c_C(i-1) + \frac{h}{v_r} \cdot k_2(i) \cdot c_B(i) \quad (102)$$

$$T_r(i) = \frac{1}{\frac{v_r}{h} + \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}}} \cdot \left[ \frac{1}{\rho_r \cdot c_{pr}} \cdot Q_r(i) + \frac{v_r}{h} \cdot T_r(i-1) + \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot T_s(i) \right] \quad (103)$$

$$T_s(i) = \frac{d_1 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \alpha_1 + d_2 \cdot \alpha_2} \cdot T_r(i) + \left( 1 - \frac{d_1 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \alpha_1 + d_2 \cdot \alpha_2} \right) \cdot T_c(i) \quad (104)$$

*Souproudé chlazení:*

$$T_c(i) = \frac{1}{\frac{v_c}{h} + \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \rho_c \cdot c_{pc}}} \cdot \left[ \frac{v_c}{h} \cdot T_c(i-1) + \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \rho_c \cdot c_{pc}} \cdot T_s(i) \right] \quad (105)$$

*Protiproudé chlazení:*

$$T_c(j) = \frac{1}{\frac{v_c}{h} + \frac{4.n_1.d_2.\alpha_2}{(d_3^2 - n_1.d_2^2)\rho_c.c_{pc}}} \left[ \frac{v_c}{h} T_c(j+1) + \frac{4.n_1.d_2.\alpha_2}{(d_3^2 - n_1.d_2^2)\rho_c.c_{pc}} T_s(j) \right] \quad (106)$$

**Postup při tvorbě programu:**

Soustavu rovnic (100) – (106) musíme řešit iterativně, protože  $k_{1,2}$  jsou nelineární funkcí  $T_r$ . Výpočet bude probíhat ve dvou cyklech. Ve vnitřním cyklu budou počítány hodnoty v jednotlivých děleních reaktoru, ve vnějším cyklu bude prováděna iterace. V každém iteračním cyklu se počítá součet absolutních hodnot rozdílů současné a předcházející průměrné hodnoty teploty reakční směsi s rozdílem současné a předcházející průměrné teploty chladiwa. Tento rozdíl položíme roven chybě:

$$\left| \overline{T_r}^{(k)} - \overline{T_r}^{(k-1)} \right| + \left| \overline{T_c}^{(k)} - \overline{T_c}^{(k-1)} \right| = chyba(i), \quad k = 1, 2 \dots \quad (107)$$

Je-li chyba menší než námi zvolená konstanta, ukončujeme výpočet.

Celý algoritmus a popis výpočtu v programu MATLAB je popsán v příloze P III. Teorie ohledně iterační metody je popsána v kapitole 1.3.2.

## 2.2 Řešení dynamiky

Dynamika systému je popsána šesti parciálními diferenciálními rovnicemi. Tyto rovnice budeme řešit podobně jako řešíme ustálený stav a to tak, že derivaci podle prostorové proměnné zdiskretizujeme podle (68) a (69) a derivace podle času necháme ve spojitě formě.

Tím dostaneme soustavu  $n$  rovnic, ale již jen obyčejných diferenciálních, které pak můžeme řešit numericky. Zde se nám pak nabízí celá řada metod. Literatura na toto téma je velmi bohatá a teorii najdeme třeba zde [4] a [5].

Volím jednokrokovou metodu Runge–Kutta–Fehlberg (viz. [12]). Vztahy pro její algoritmus jsou uvedeny v kapitole 1.3.3.

### 2.2.1 Úpravy rovnic do výpočetních vztahů

#### Úprava bilanční rovnice pro látku A:

Z rovnice (24) získáme konečný tvar pro bilanci látky A v diferenciální podobě:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial c_A}{\partial z} = -k_1 \cdot c_A \quad (108)$$

Upravíme dle vzoru (68):

$$\frac{dc_A(i)}{dt} + v_r \cdot \frac{c_A(i) - c_A(i-1)}{h} = -k_1(i) \cdot c_A(i) \quad (109)$$

ekvivalentní úpravou osamostatníme derivaci a získáme výpočetní tvar:

$$\frac{dc_A(i)}{dt} = - \left[ \frac{v_r}{h} + k_1(i) \right] \cdot c_A(i) + \frac{v_r}{h} \cdot c_A(i-1) \quad (110)$$

#### Úprava bilanční rovnice pro látku B:

Z rovnice (29) získáme konečný tvar pro bilanci látky B v diferenciální podobě:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_B}{\partial z} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_B \quad (111)$$

Zdiskretizujeme dle vzoru (68):

$$\frac{dc_B(i)}{dt} + v_r \frac{c_B(i) - c_B(i-1)}{h} = k_1(i) \cdot c_A(i) - k_2(i) \cdot c_B(i) \quad (112)$$

Osamostatníme derivaci a dostaneme výchozí výpočetní tvar:

$$\frac{dc_B(i)}{dt} = - \left[ \frac{v_r}{h} + k_2(i) \right] \cdot c_B(i) + \frac{v_r}{h} \cdot c_B(i-1) + k_1(i) \cdot c_A(i) \quad (113)$$

#### Úprava bilanční rovnice pro látku C:

Z rovnice (34) získáme konečný tvar pro bilanci látky C v diferenciální podobě:

$$\frac{\partial c_C}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial c_C}{\partial z} = k_2 \cdot c_B \quad (114)$$

Zdiskretizujeme dle vzoru (68):

$$\frac{dc_C(i)}{dt} + v_r \cdot \frac{c_C(i) - c_C(i-1)}{h} = k_2(i) \cdot c_B(i) \quad (115)$$

Osamostatníme derivaci a získáme tak výchozí výpočetní tvar:

$$\frac{dc_C(i)}{dt} = -\frac{v_r}{h} \cdot c_C(i) + \frac{v_r}{h} c_C(i-1) + k_2(i) \cdot c_B(i) \quad (116)$$

### ***Úprava bilanční rovnice pro tepelnou bilanci reakční směsi:***

Z rovnice (42) získáme konečný tvar pro tepelnou bilanci reakční směsi v diferenciální podobě:

$$\frac{\partial T_r}{\partial t} + v_r \cdot \frac{\partial T_r}{\partial z} = \frac{Q_r}{\rho_r \cdot c_{pr}} - \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot (T_r - T_s) \quad (117)$$

Zdiskretizujeme dle vzoru (68):

$$\frac{dT_r(i)}{dt} + v_r \cdot \frac{T_r(i) - T_r(i-1)}{h} = \frac{Q_r(i)}{\rho_r \cdot c_{pr}} - \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \cdot [T_r(i) - T_s(i)] \quad (118)$$

Osamostatníme derivaci a získáme výchozí výpočetní tvar:

$$\frac{dT_r(i)}{dt} = -\left( \frac{v_r}{h} + \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} \right) T_r(i) + \frac{v_r}{h} T_r(i-1) + \frac{Q_r(i)}{\rho_r \cdot c_{pr}} + \frac{4 \cdot \alpha_1}{d_1 \cdot \rho_r \cdot c_{pr}} T_s(i) \quad (119)$$

### ***Úprava bilanční rovnice pro tepelnou bilanci elementu stěn trubek:***

Z rovnice (47) získáme konečný tvar pro tepelnou bilanci elementu stěn v diferenciální podobě:

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{4[d_1 \cdot \alpha_1 \cdot (T_r - T_s) + d_2 \cdot \alpha_2 \cdot (T_c - T_s)]}{(d_2^2 - d_1^2) \cdot \rho_s \cdot c_{ps}} \quad (120)$$

Převědeme na diferenční tvar a dostaneme tak výchozí výpočetní tvar:

$$\frac{dT_s(i)}{dt} = \frac{4}{(d_2^2 - d_1^2) \cdot \rho_s \cdot c_{ps}} \cdot \{d_1 \cdot \alpha_1 \cdot [T_r(i) - T_s(i)] + d_2 \cdot \alpha_2 \cdot [T_c(i) - T_s(i)]\} \quad (121)$$

**Úprava bilanční rovnice pro tepelnou bilanci chladiva:***Souproudé:*

Z rovnice (52) získáme konečný tvar pro tepelnou bilanci chladiva v diferenciální podobě:

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} + v_c \cdot \frac{\partial T_c}{\partial z} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot q_c \cdot c_{pc}} \cdot (T_s - T_c) \quad (122)$$

Zdiskretizujeme dle vzoru (68):

$$\frac{dT_c(i)}{dt} + v_c \cdot \frac{T_c(i) - T_c(i-1)}{h} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot q_c \cdot c_{pc}} \cdot [T_s(i) - T_c(i)] \quad (123)$$

Osamostatníme derivaci a dostaneme výchozí výpočetní tvar:

$$\frac{dT_c(i)}{dt} = - \left( \frac{v_c}{h} + \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot \rho_c \cdot c_{pc}} \right) T_c(i) + \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot \rho_c \cdot c_{pc}} T_s(i) + \frac{v_c}{h} T_c(i-1) \quad (124)$$

*Protiproudé:*

Z rovnice (57) získáme konečný tvar pro tepelnou bilanci chladiva v diferenciální podobě:

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} - v_c \cdot \frac{\partial T_c}{\partial z} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot q_c \cdot c_{pc}} (T_s - T_c) \quad (125)$$

Zdiskretizujeme dle vzoru (69):

$$\frac{dT_c(j)}{dt} - v_c \cdot \frac{T_c(j+1) - T_c(j)}{h} = \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot q_c \cdot c_{pc}} \cdot [T_s(j) - T_c(j)] \quad (126)$$

Osamostatníme derivaci a získáme výchozí výpočetní vztah:

$$\frac{dT_c(j)}{dt} = - \left( \frac{v_c}{h} + \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot \rho_c \cdot c_{pc}} \right) T_c(j) + \frac{4 \cdot n_1 \cdot d_2 \cdot \alpha_2}{(d_3^2 - n_1 \cdot d_2^2) \cdot \rho_c \cdot c_{pc}} T_s(j) + \frac{v_c}{h} T_c(j+1) \quad (127)$$

***Postup při tvorbě programu:***

Stejně jako u ustáleného stavu bude výpočet probíhat ve dvou cyklech. Ve vnitřním cyklu se budou počítat hodnoty v jednotlivých intervalech dělení reaktoru, vnější cyklus bude integrační, ve kterém se budou počítat hodnoty diferenciální rovnice metodou Runge-Kutta–Fehlberg. Jako počáteční hodnoty budeme brát hodnoty v ustáleném stavu a dynamiku tedy budeme prověřovat jako odchylku od ustáleného stavu viz rovnice (129). Program je přiložen v příloze P IV, kde je taky jeho syntaxe podrobně rozepsaná a okomentovaná. Teorie Runge-Kutta-Fehlberg metody je v kapitole 1.3.3.



### 3 SIMULACE

Budeme simulovat ustálený stav a dynamické charakteristiky trubkového chemického reaktoru popsaného šesti parciálními diferenciálními rovnicemi. Pro přehlednou simulaci tohoto systému byl vytvořen program v MATLABu (příloha P I a příložené CD).

Předpokladem pro tuto chemickou reakci, tj. následnou chemickou reakci prvního řádu obecně vyjádřenou  $A \rightarrow B \rightarrow C$  je, že produktem je látka B a látka C vznikající z látky B je odpadem [13]. Z toho plyne, že budeme hledat optimální průtok reakční kapaliny, při kterém je koncentrace látky B maximální na výstupu reaktoru.

Tedy budeme si všímat co se týká stavových veličin koncentrace látky  $c_A$ ,  $c_B$  a  $c_C$  a hodnot teplot reakční směsi  $T_r$  a chladiva  $T_c$ .

Struktura bude vypadat následovně:

1) U ustáleného stavu

2D a 3D grafy závislosti vybraných stavových veličin na délce reaktoru při změně průtoku reakční směsi  $q_r$  pro souproudé a protiproudé chlazení zvlášť a vyhodnocení optimálního průtoku, tj. nalezení průtoku s maximální koncentrací látky B na výstupu reaktoru.

2) U dynamiky

a) 2D grafy závislosti vybraných stavových veličin na čase na výstupu reaktoru při skokových změnách průtoku reakční směsi. Pro vybranou skokovou změnu průtoku reakční směsi  $q_r$ , 3D grafy závislosti stavové veličiny na délce reaktoru a času.

#### 3.1 Hodnoty pro simulaci

Nebude-li uvedeno jinak bude simulace prováděna z následujících hodnot. Tyto hodnoty můžeme rozdělit do tří tříd. První třída jsou konstrukční parametry a technologické konstanty. Tyto veličiny jsou dány materiály reaktoru nebo jsou to konstantní hodnoty parametrů médií, které reaktorem procházejí. Svým charakterem je tedy budeme považovat za pevně dané a ani v simulačním programu (bez zásahu do zdrojového kódu) je nebude možno měnit.

Druhou třídou jsou parametry pro výpočet. Tyto parametry nijak nesouvisejí s probíhajícími ději a vlastnostmi reaktoru, ale jejich nastavení je potřeba při výpočtu dějů probíhají-

cích v reaktoru a jejich správné nastavení v mnoha případech znamená urychlení výpočtu a nalezení správného řešení (u přednastavených hodnot je řešení vždy konvergující).

Třetí třídou jsou vstupní hodnoty. Jedná se buď o vstupní hodnoty stavových veličin nebo hodnoty veličin, které se průběhem reaktoru nemění, ale jejich hodnota má podstatný vliv na průběh stavových veličin.

*Pozn.: Vstupní hodnoty, veškeré technologické parametry a předpoklady jsou použity podle článku z [13].*

### **Konstrukční parametry a konstanty:**

Vnitřní průměr trubky	$d_1 = 0.02 \text{ m}$
Vnější průměr trubky	$d_2 = 0.024 \text{ m}$
Vnitřní průměr reaktoru	$d_3 = 1 \text{ m}$
Počet trubek	$n_1 = 1\,200$
Délka reaktoru	$L = 8 \text{ m}$
Hustota reakční směsi	$\rho_r = 985 \text{ kg.m}^{-3}$
Hustota stěn reaktoru	$\rho_s = 7\,800 \text{ kg.m}^{-3}$
Hustota chladiva	$\rho_c = 998 \text{ kg.m}^{-3}$
Měrná tepelná kapacita reakční směsi	$c_{pr} = 4.05 \text{ kJ.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Měrná tepelná kapacita chladiva	$c_{pc} = 4.18 \text{ kJ.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Měrná tepelná kapacita stěn trubek	$c_{ps} = 0.71 \text{ kJ.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Součinitel přestupu tepla z reakční směsi na stěnu	$\alpha_1 = 2.8 \text{ kJ.m}^{-2}.\text{K}^{-1}.\text{s}^{-1}$
Součinitel přestupu tepla ze stěny do chladiva	$\alpha_2 = 2.56 \text{ kJ.m}^{-2}.\text{K}^{-1}.\text{s}^{-1}$
Frekvenční faktor reakce $A \rightarrow B$	$k_{10} = 5.61 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$
Frekvenční faktor reakce $B \rightarrow C$	$k_{20} = 1.128 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$
Podíl aktivační energie E a plynové konstanty R reakce $A \rightarrow B$	$E_1/R = 13\,477 \text{ K}$
Podíl aktivační energie E a plynové konstanty R reakce $B \rightarrow C$	$E_2/R = 15\,290 \text{ K}$

Reakční entalpie  $A \rightarrow B$   $h_{r1} = 5.8 \cdot 10^4 \text{ J.mol}^{-1}$

Reakční entalpie  $B \rightarrow C$   $h_{r2} = 1.8 \cdot 10^4 \text{ J.mol}^{-1}$

**Parametry pro výpočet:**

Počet dílku dělení reaktoru  $n = 100$

Začátek simulace  $t_0 = 0 \text{ s}$

Konec simulace  $t_f = 100 \text{ s}$

Integrační krok  $h = 0.1 \text{ s}$

**Vstupní hodnoty:**

Vstupní koncentrace látky A  $c_{Av} = 2.85 \text{ kmol. m}^{-3}$

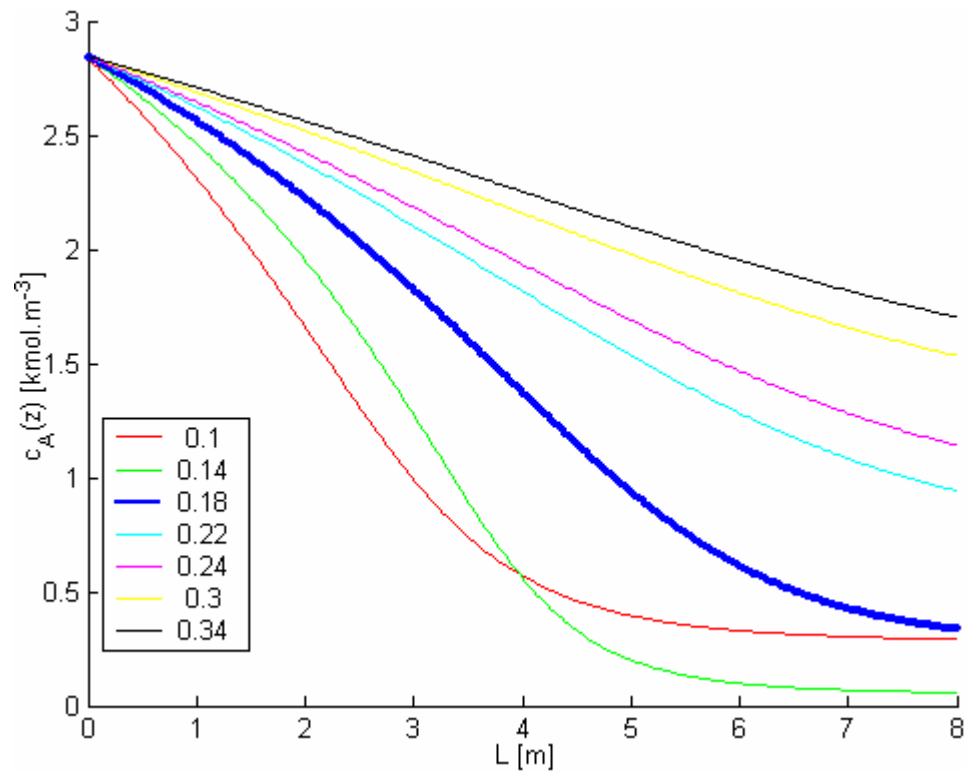
Vstupní teplota reakční směsi  $T_{rv} = 323 \text{ K}$

Vstupní teplota chladiwa  $T_{cv} = 293 \text{ K}$

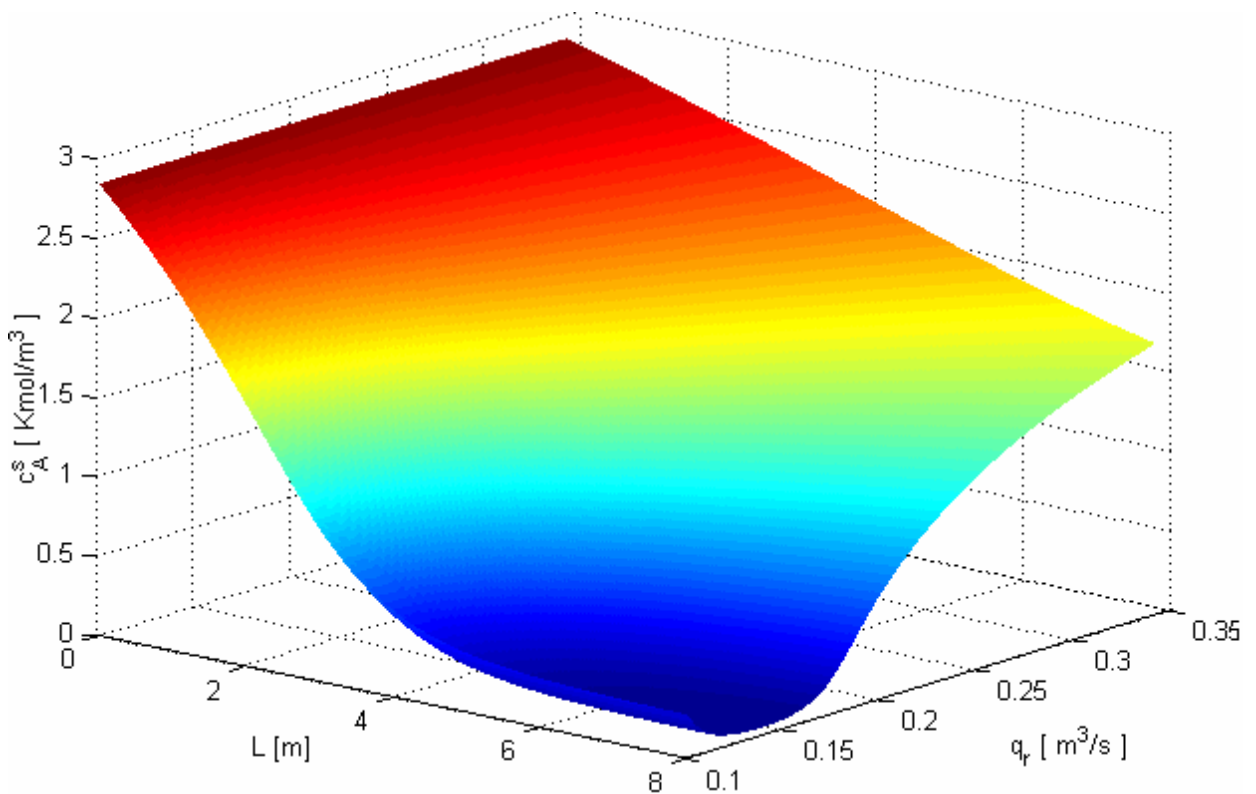
### 3.2 Simulace ustáleného stavu

Budeme vyhodnocovat koncentraci látky A  $c_A$ , B  $c_B$  a C  $c_C$ , teplotu reakční směsi  $T_r$  a chladiwa  $T_c$ . Budeme hledat optimální průtok reakční směsi. Grafy  $T_r$  a  $T_c$  nám poskytnou informaci o změnách teplotních profilů. Nejpodstatnější ukazatel je výsledná koncentrace látky B, která by měla být na konci reaktoru maximální. Zobrazíme si průběhy v následujícím stylu: na jedné straně 2D graf a 3D graf stejné stavové veličiny a stejného typu chlazení. Tím docílíme lepší přehlednosti a názornosti.

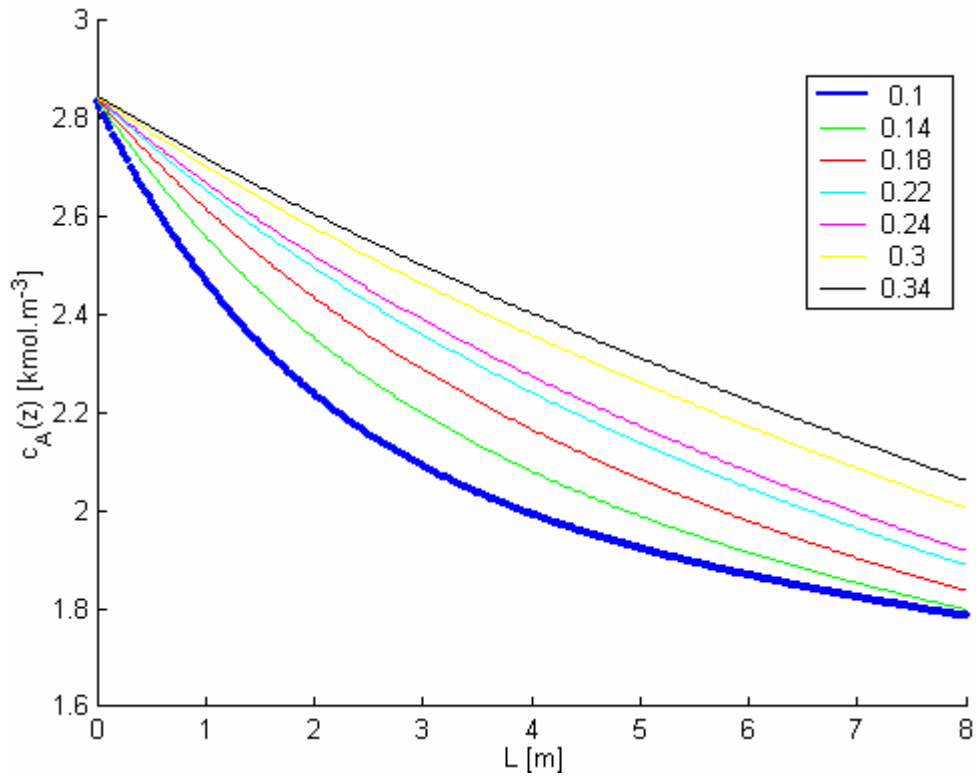
Simulace ustál. stavu koncentrace látky A, B, C v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r^s$



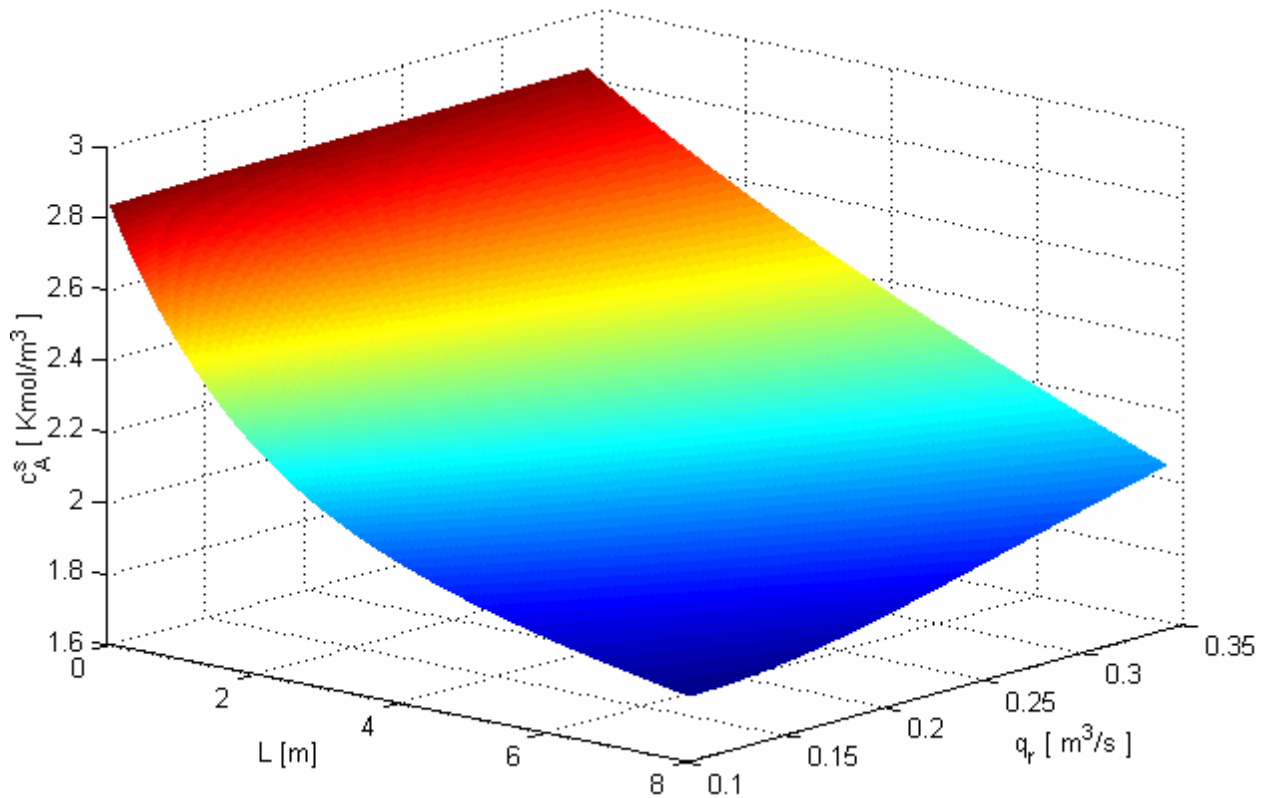
Obr: 15. Závislost koncentrace látky A na délce reaktoru při změnách průtoku reakční směsi  $q_r$  a při protiproudém chlazení



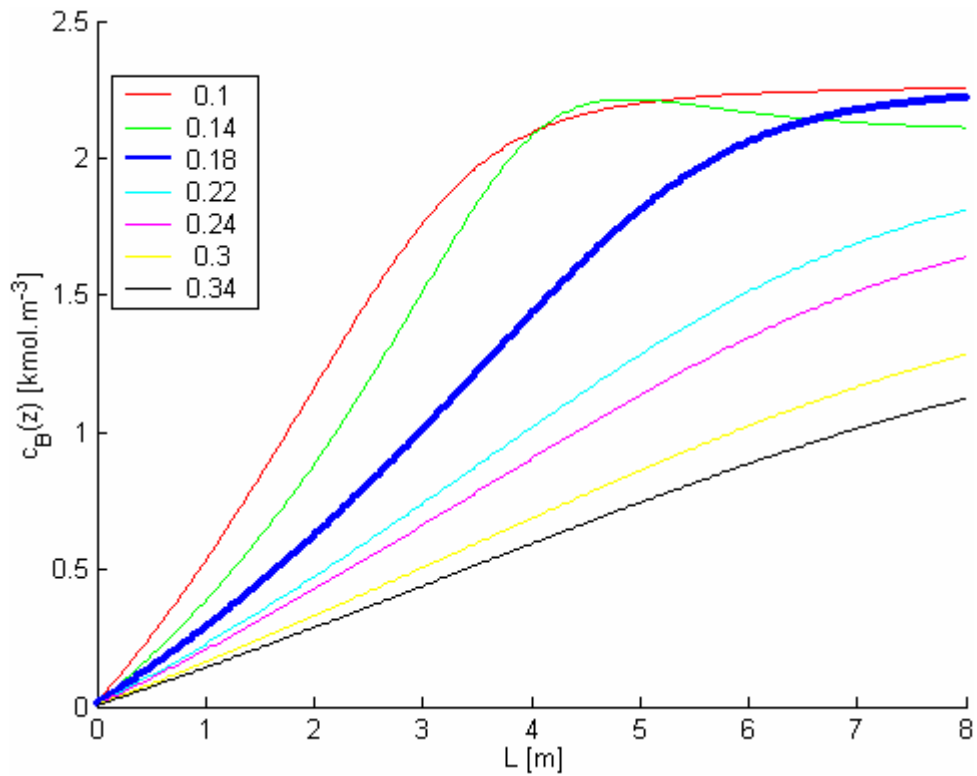
Obr: 16. 3D graf koncentrace látky A v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití protiproudého chlazení



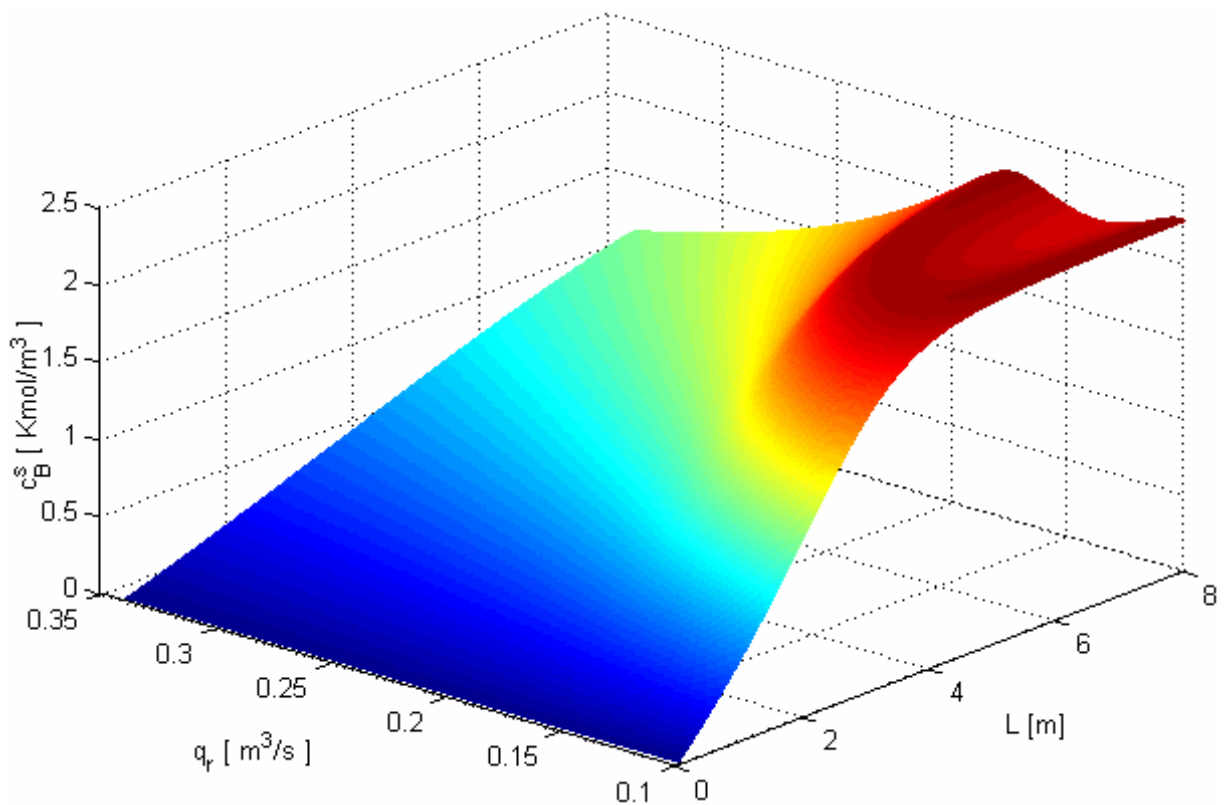
Obr: 17. Závislost koncentrace látky A na délce reaktoru při změnách průtoku reakční směsi  $q_r$  a při souproudém chlazení



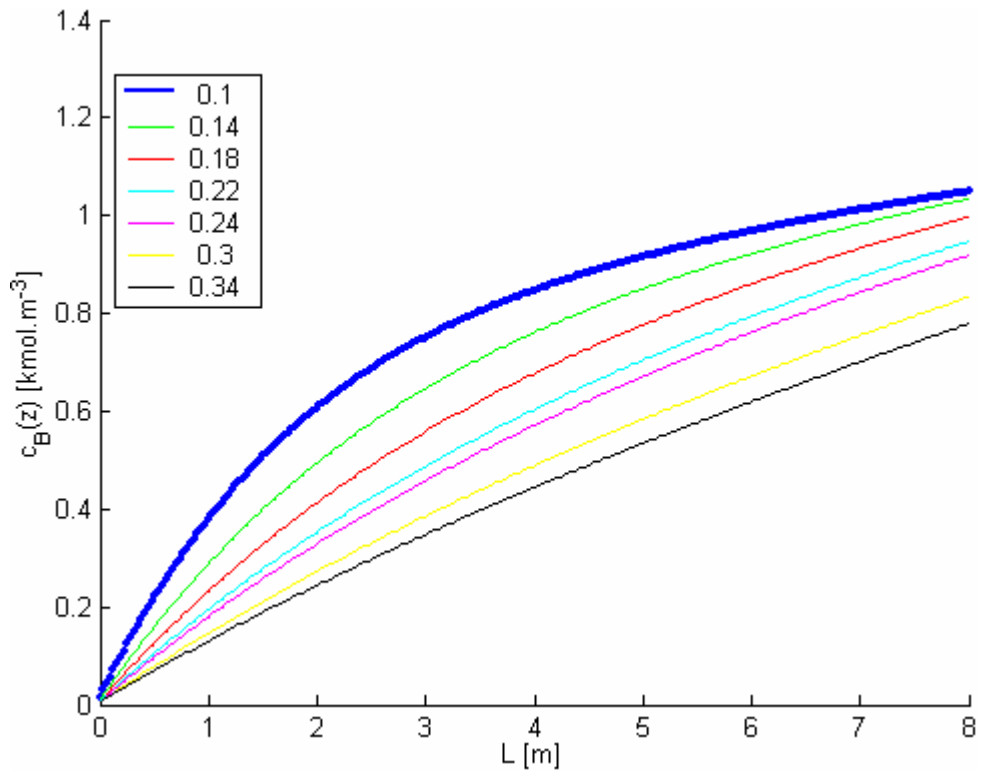
Obr: 18. 3D graf koncentrace látky A v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití souproudého chlazení



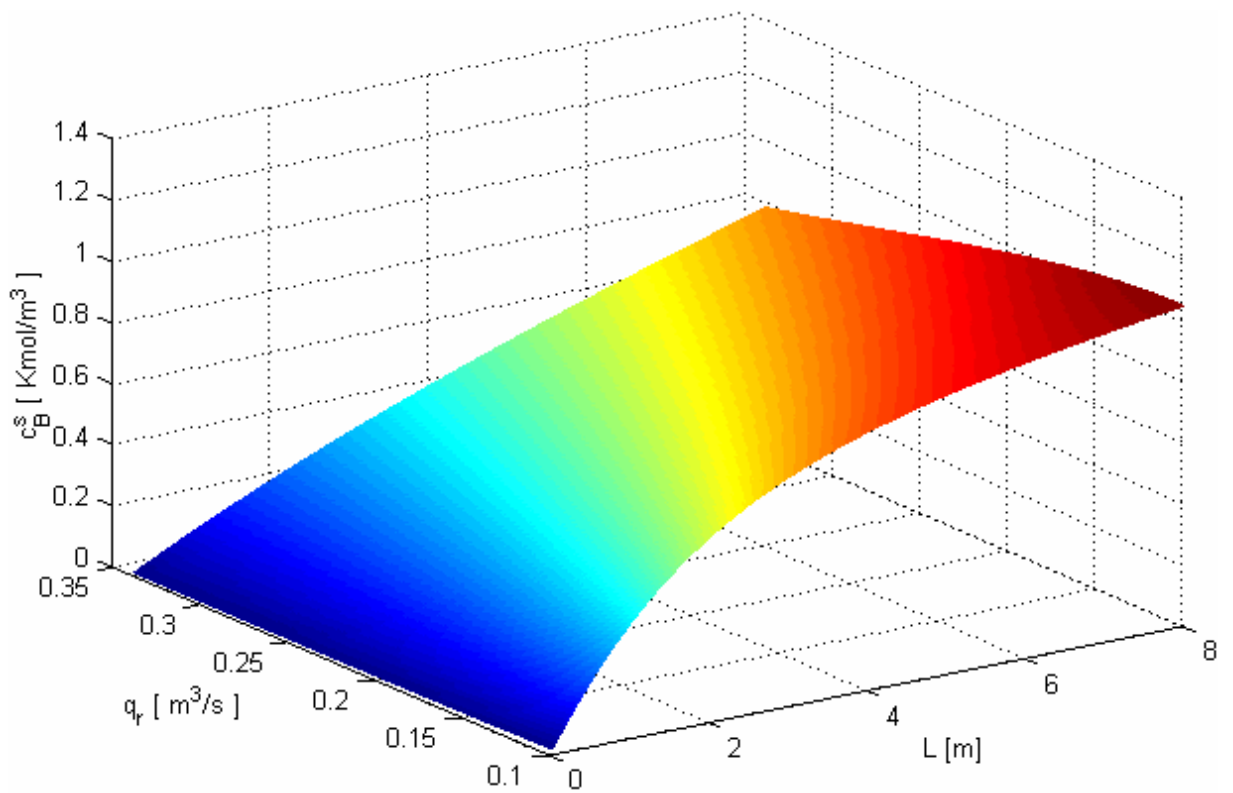
Obr. 19. Závislost koncentrace látky B na délce reaktoru při změnách průtoků reakční směsi  $q_r$  a při protiproudém chlazení



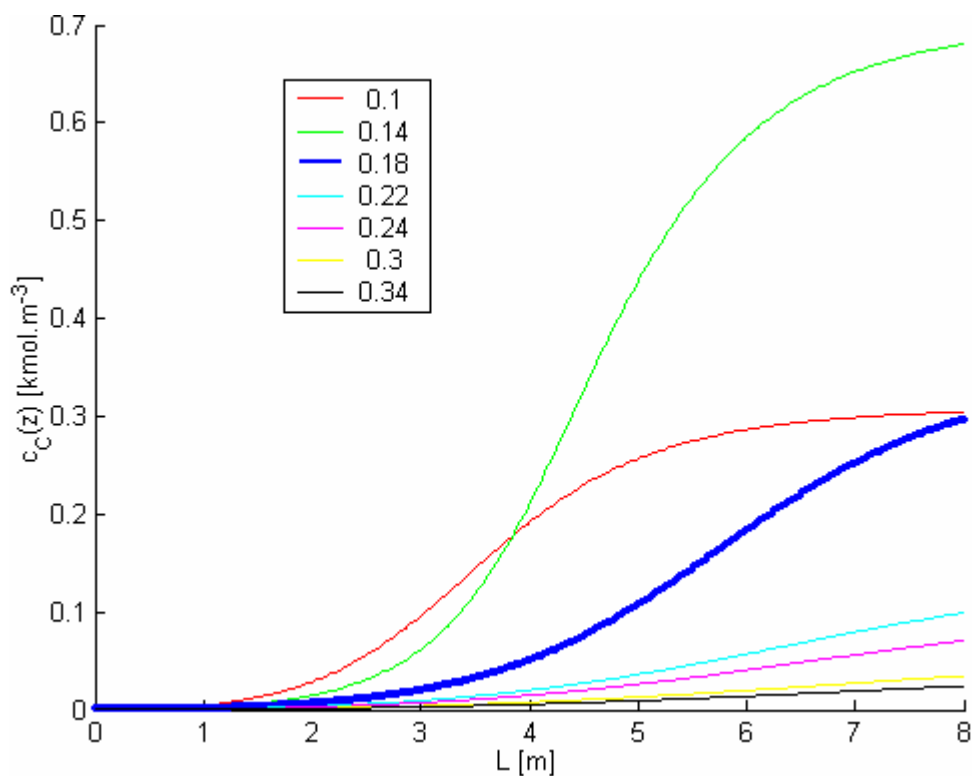
Obr. 20. 3D graf koncentrace látky B v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití protiproudého chlazení



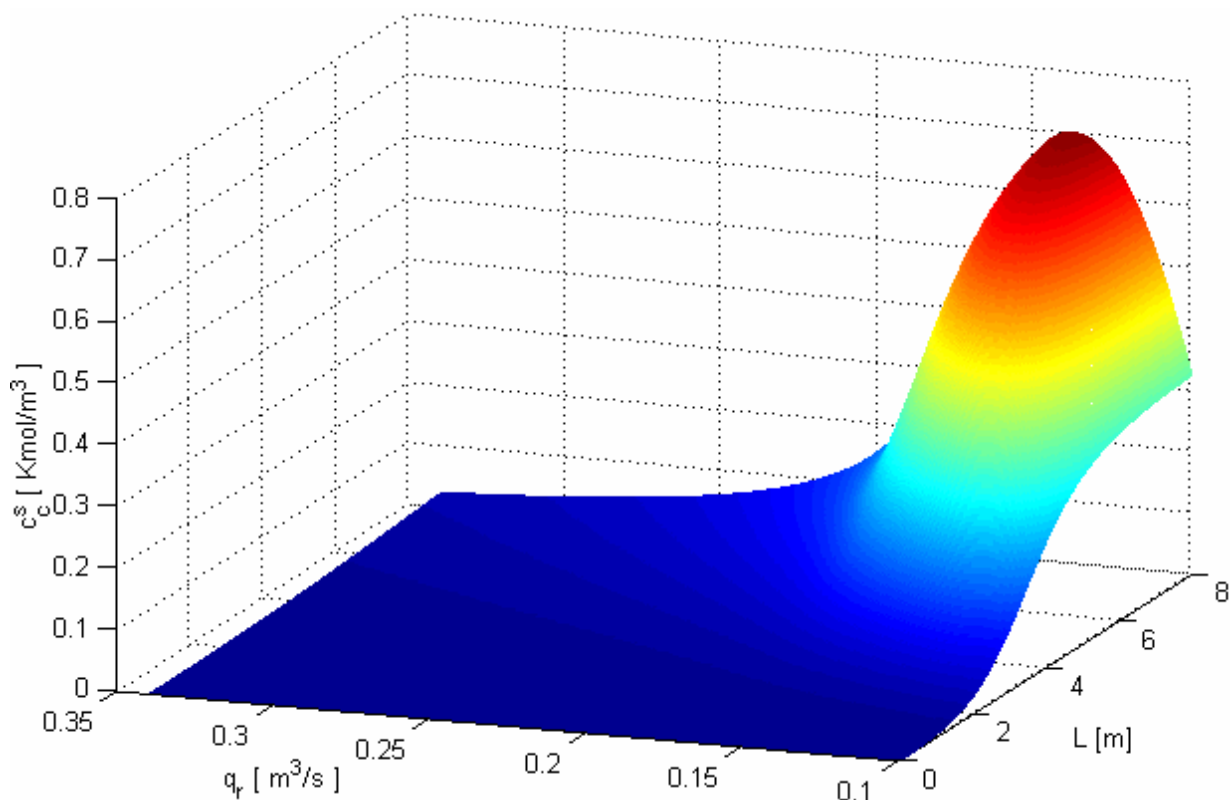
Obr. 21. Závislost koncentrace látky B na délce reaktoru při změnách průtoku reakční směsi  $q_r$  a při souproudém chlazení



Obr. 22. 3D graf koncentrace látky B v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití souproudého chlazení

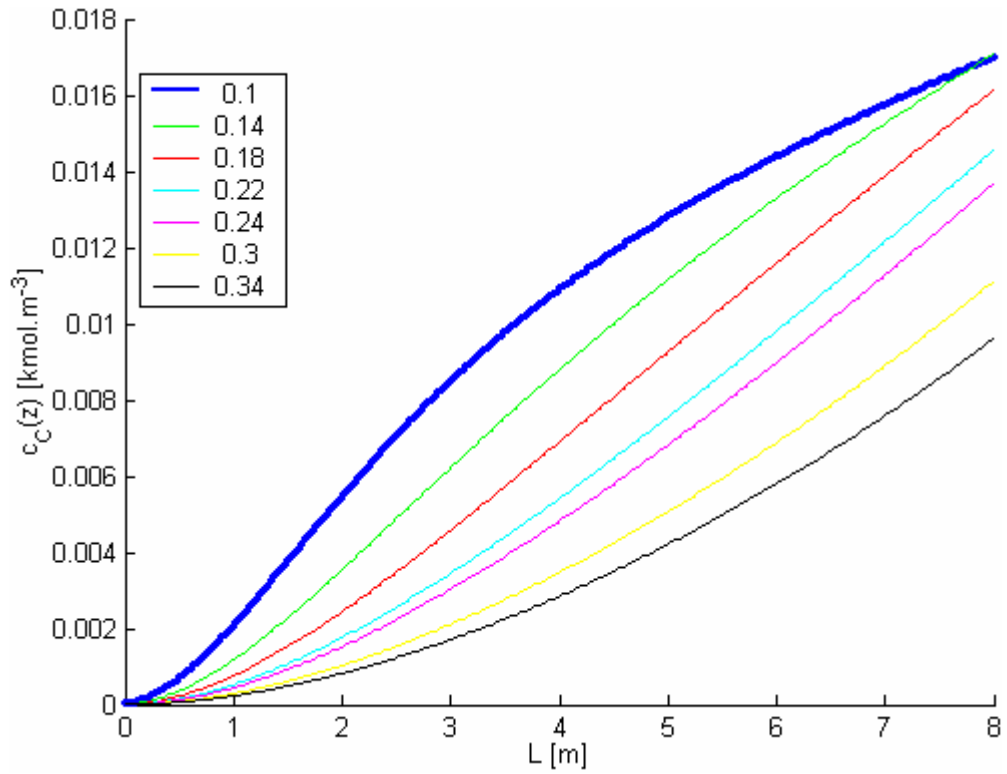


Obr. 23. Závislost koncentrace látky  $C$  na délce reaktoru při změnách průtoků reakční směsi  $q_r$  a protiproudém chlazení

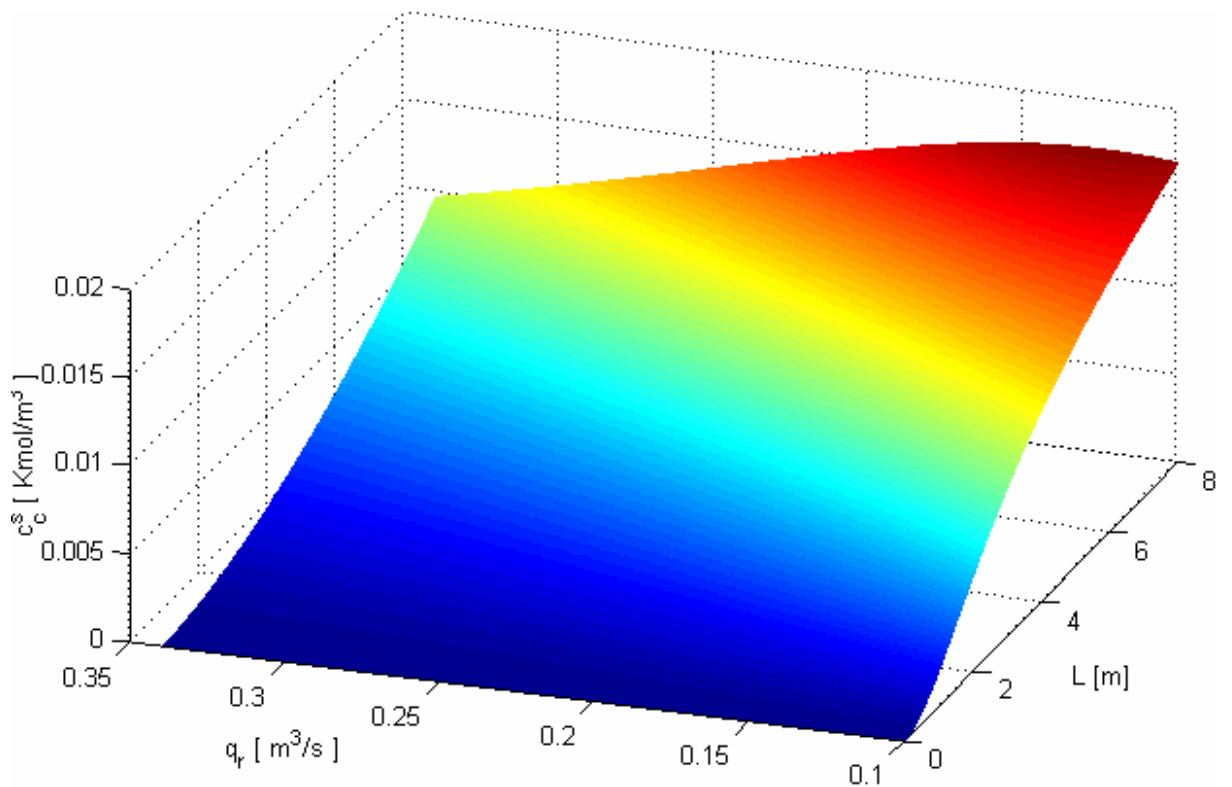


Obr. 24. 3D graf koncentrace látky  $C$  v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití protiproudého chlazení





Obr. 25. Závislost koncentrace látky  $C$  na délce reaktoru při změnách průtoků reakční směsi  $q_r$  a souproutém chlazení



Obr. 26. 3D graf koncentrace látky  $C$  v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití souproutého chlazení

V uvedených 2D grafech koncentrací látek A, B, C je tmavě modře (zvýrazněně) znázorněn průběh, při kterém je získána největší koncentrace látky B na výstupu reaktoru, pro protiproudé chlazení je to  $q_r = 0,18 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  a odpovídající koncentrace látky B  $c_B = 2,25 \text{ kmol/m}^3$ , pro souproudé chlazení je to  $q_r = 0,1 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  a odpovídající koncentrace látky B  $c_B = 1,05 \text{ kmol/m}^3$ .

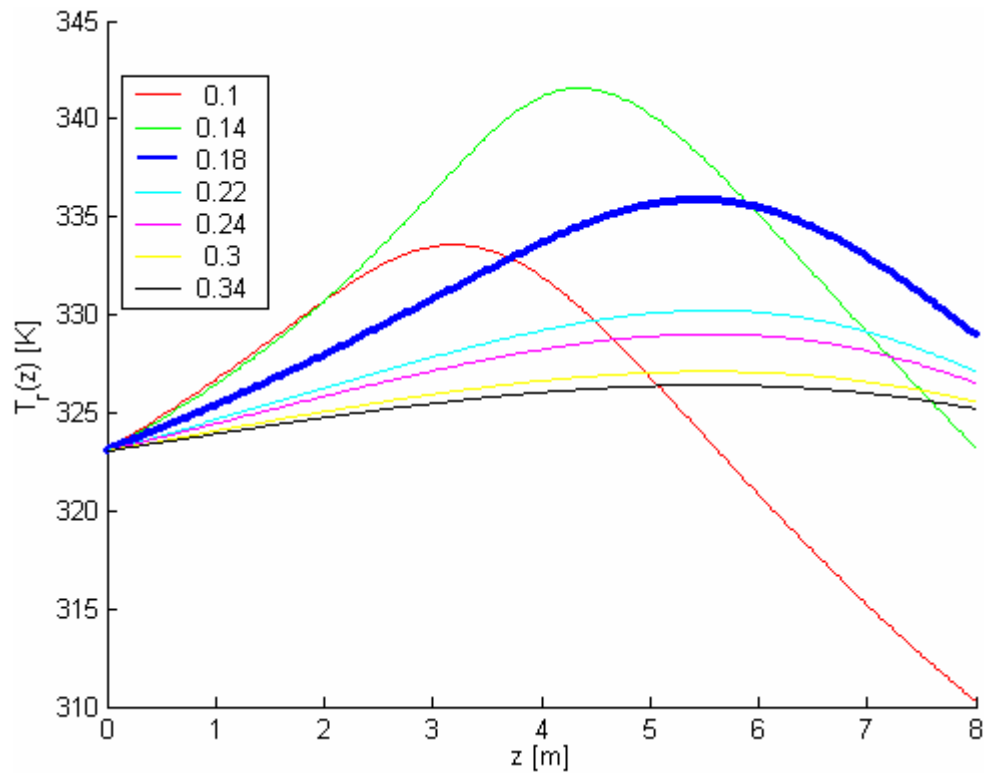
Z toho plyne, že protiproudé chlazení dává lepší výsledky než souproudé. Při stejných hodnotách parametrů získáme vždy větší množství produktu. Protiproudé chlazení je tedy efektivnější.

U koncentrace látky B se zvyšujícím průtokem průběhy blíží lineární závislosti. Což se dá vysvětlit tím, že všechny průběhy se zhruba do 90% svého maxima blíží lineárnímu průběhu a s rostoucím průtokem reakční směsi klesá reakční rychlost. Tím se maximum koncentrace látky B posunuje v reaktoru směrem k výstupu. Jakmile nedosáhne 90% svého maxima ani na konci reaktoru, uvedená charakteristika bude mít lineární průběh. Toto tvrzení platí i pro koncentraci látky A a C. U 3D grafů je to názornější. Obzvlášť u souproudého chlazení, u kterého je reakce se stejnými parametry pomalejší a koncentrace látky B nedosahuje maxima ani u jednoho z průtoků.

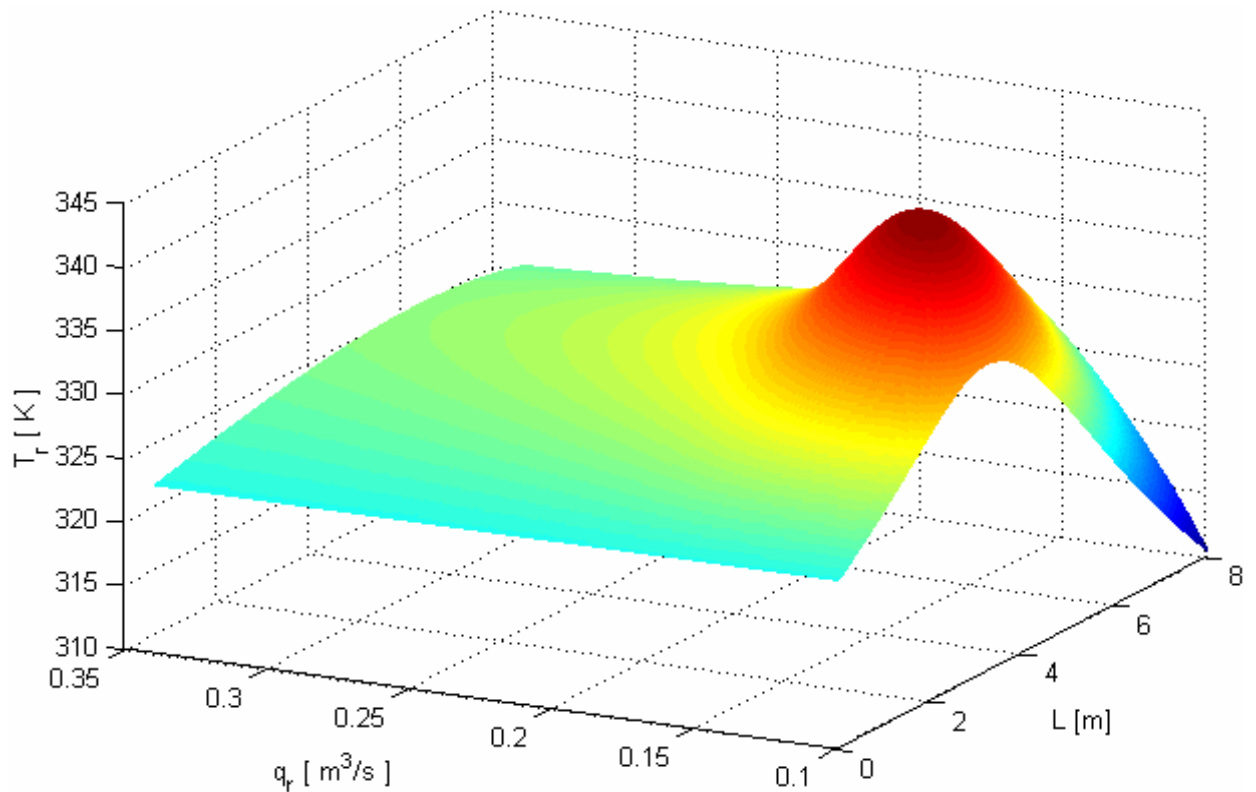
Z průběhu koncentrace látky C, která je odpadem lze vypožorovat, že u protiproudého chlazení v rozpětí průtoků  $q_r = 0,1 - 0,2 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  prudce narůstá její koncentrace s maximem při průtoku reakční směsi  $0,14 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ . Nad toto rozmezí je již hodnota koncentrace látky C v profilu reaktoru minimální s velmi malým nárůstem.

U souproudého chlazení je nárůst v rozmezí průtoků reakční směsi vymezený osou x povolný a se vzrůstajícím průtokem mírně klesá.

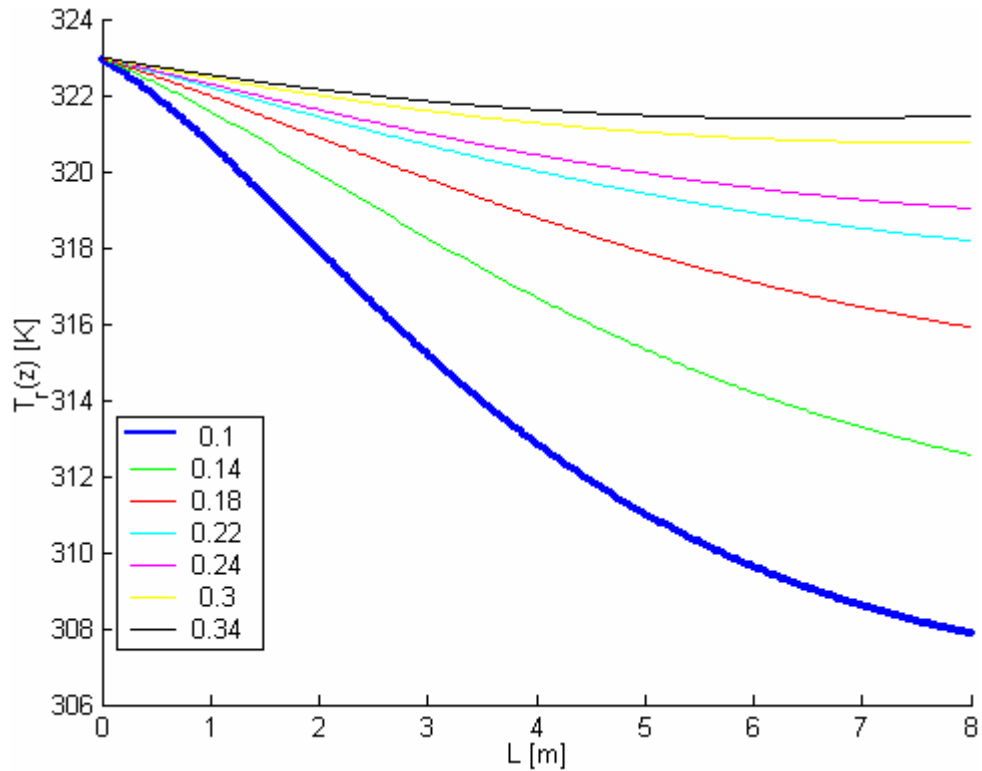
Simulace ustáleného stavu teploty  $T_r$  a teploty  $T_c$  v závislosti na průtoku  $q_r^s$



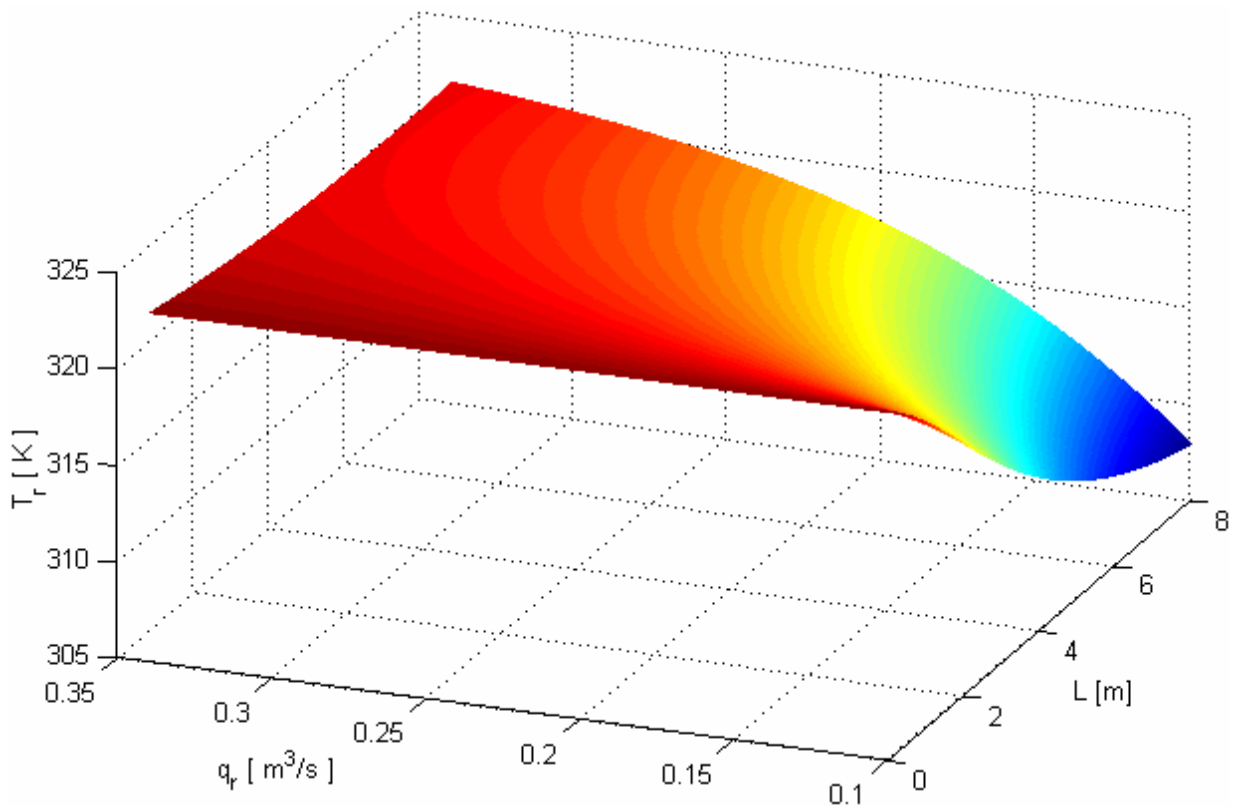
Obr. 27. Závislost teploty reakční směsi na délce reaktoru při změnách průtoků reakční směsi  $q_r$  a protiproudém chlazení



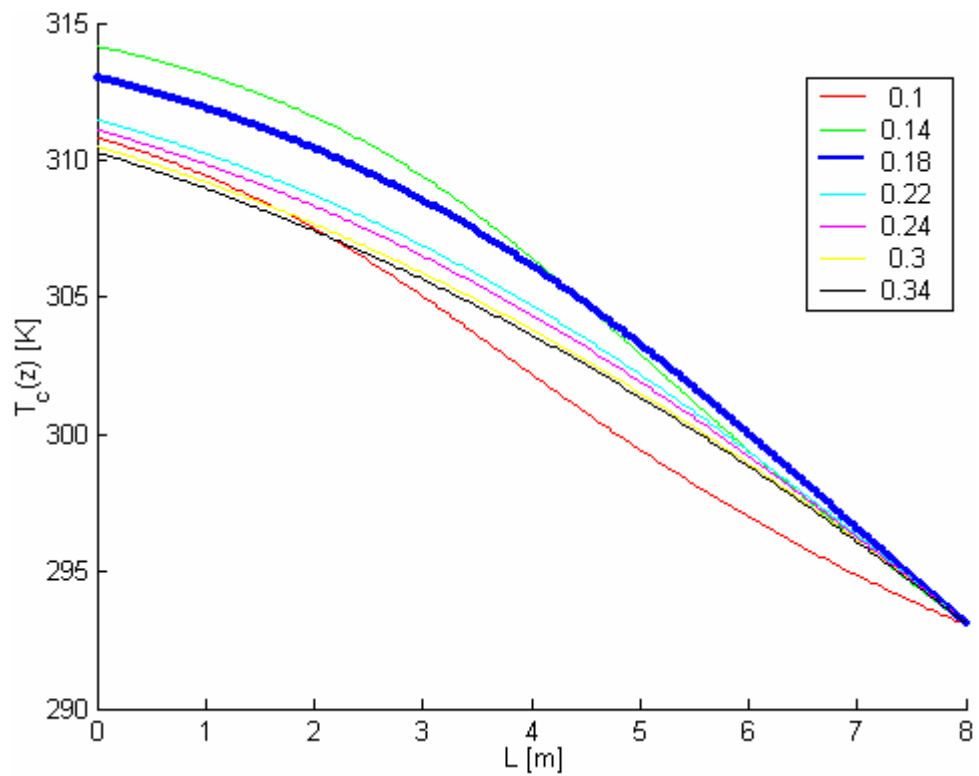
Obr. 28. 3D graf teploty reakční směsi v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití protiproudého chlazení



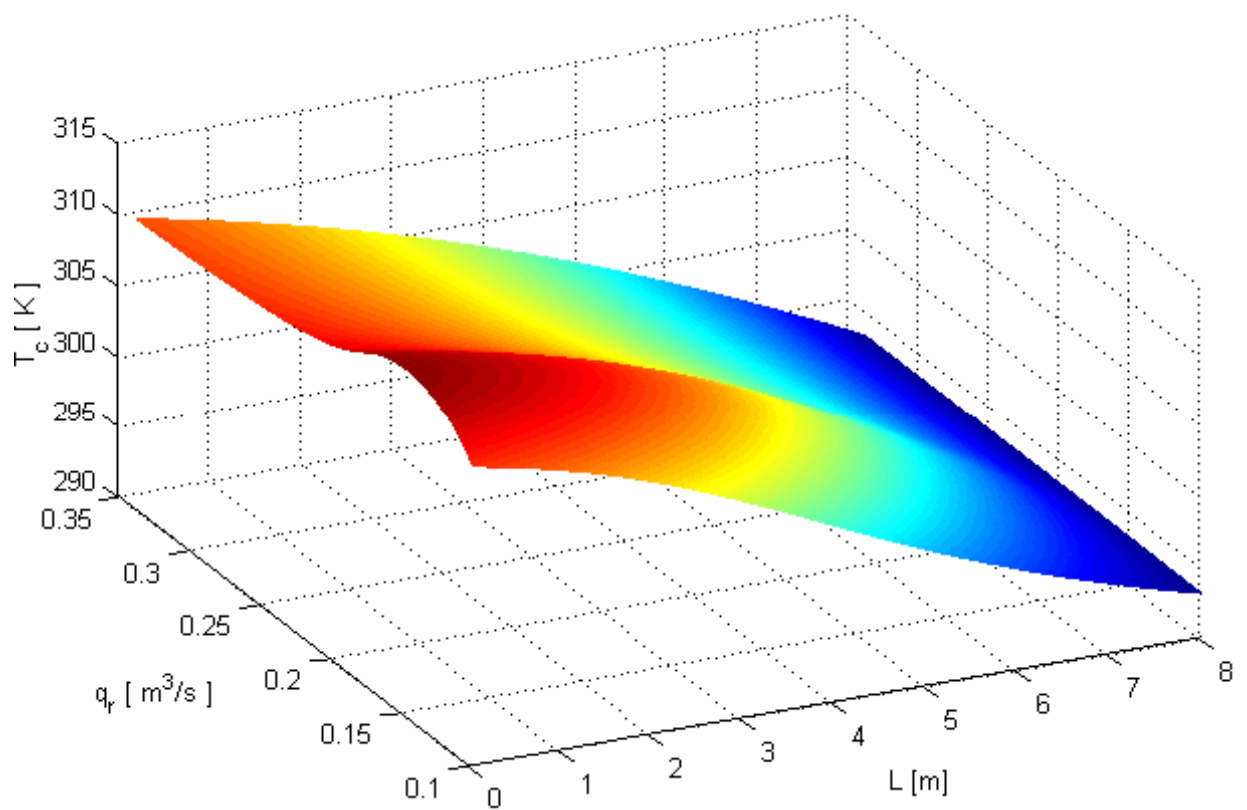
Obr. 29. Závislost teploty reakční směsi na délce reaktoru při změnách průtoků reakční směsi  $q_r$  a souproudém chlazení



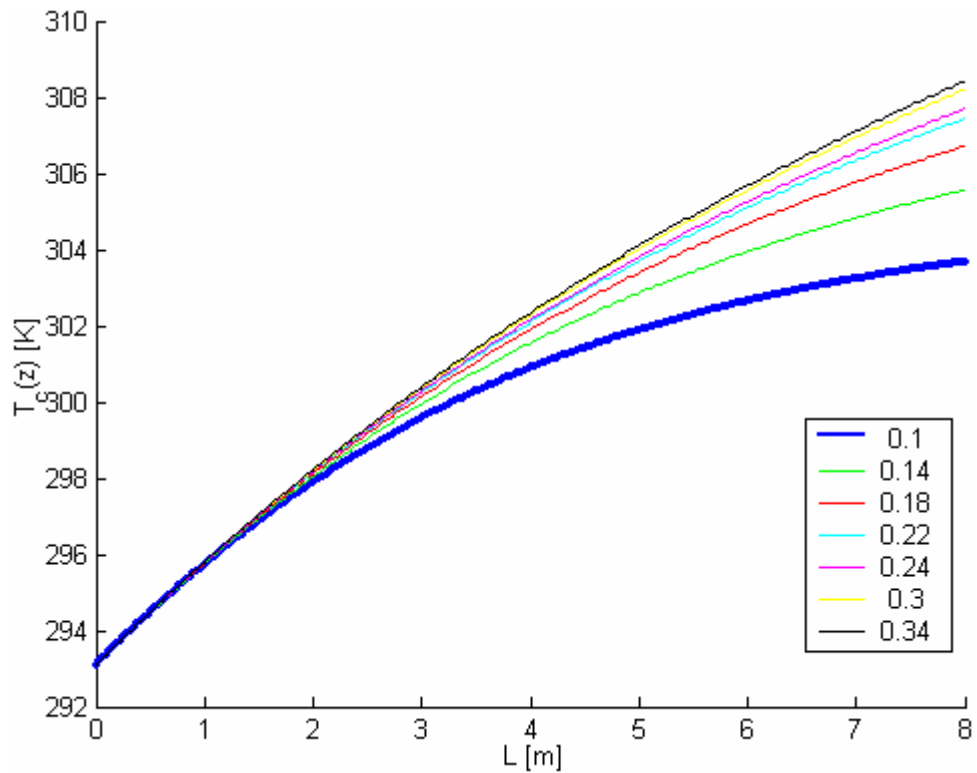
Obr. 30. 3D graf teploty reakční směsi v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití souproudého chlazení



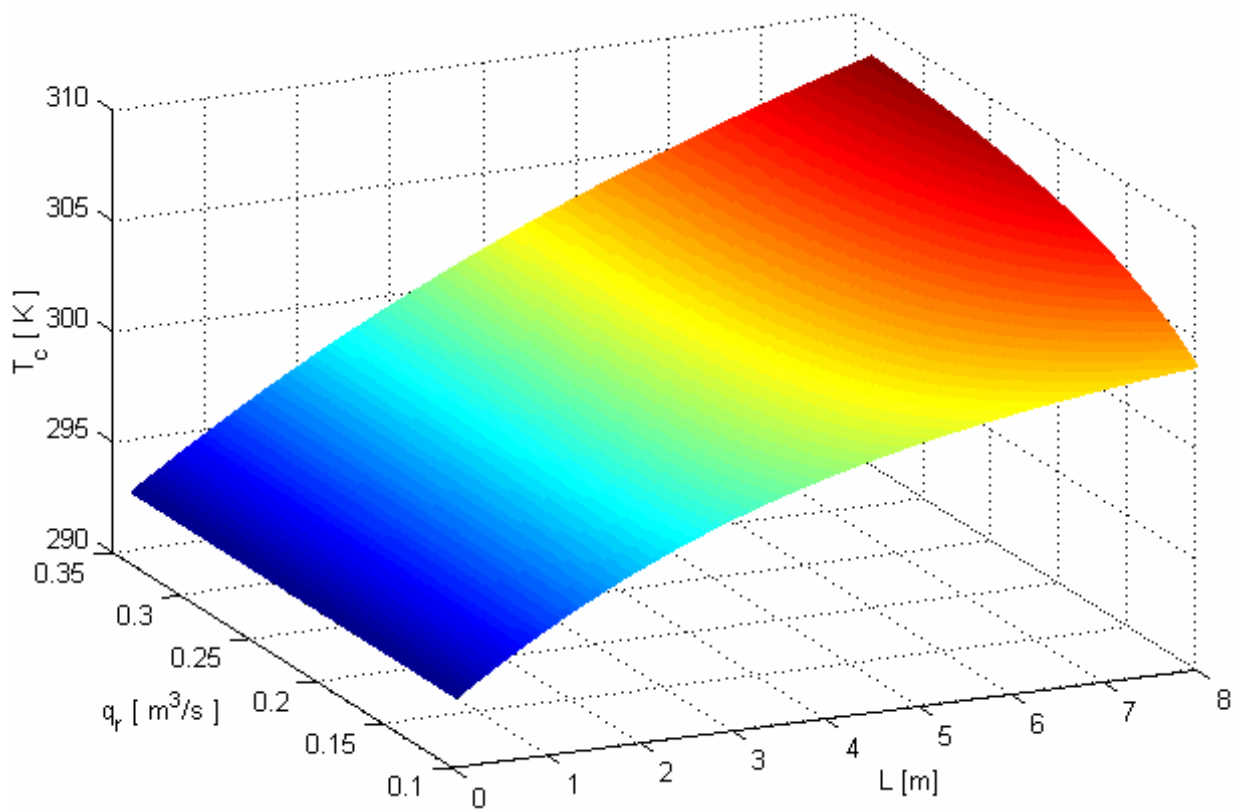
Obr. 31. Závislost teploty chladiva na délce reaktoru při změnách průtoků reakční směsi  $q_r$  a protiproudém chlazení



Obr. 32. 3D graf teploty chladiva v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a použití protiproudého chlazení



Obr. 33. Závislost teploty chladiva na délce reaktoru při změnách průtoků reakční směsi  $q_r$  a souproudém chlazení



Obr. 34. 3D graf teploty chladiva v závislosti na průtoku reakční směsi  $q_r$  a souproudém chlazení

Se zvyšující se změnou průtoku reakční směsi  $q_r$  klesá rozpětí hodnot teplot reakční směsi na vstupu a výstupu reaktoru a přibližují se konstantní hodnotě po celé délce reaktoru. Např. pro průtok  $q_r = 0,1 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  u protiproudého chlazení je rozdíl hodnoty teploty na vstupu a výstupu (absolutní hodnota) roven 13 K, pro průtok  $q_r = 0,18 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  je to 6 K a pro průtok  $q_r = 0,34 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  je to 1 K. Patrně je to i ze 3D grafu teploty reakční směsi protiproudého chlazení, na kterém můžeme i vidět teplotní maximum v profilu reaktoru (což u 2D grafů lze určit jen s obtížemi).

Profily teplot chladící směsi jsou logicky opačné, pro souproudé chlazení mají lineárnější charakter v rozpětí průtoků  $q_r$ . Výstupy z reaktorů se pohybují v rozpětí 5 K u obou metod chlazení s vyššími teplotami na výstupu u protiproudého chlazení (reakce zde probíhá rychleji, důsledkem je větší vývin tepla).

*Poznámka k vykreslování 3D grafů: Je volen velmi malý krok výpočtu, proto jsou grafy kompaktní (bez mezer), typ vykreslení mesh, počet dílku 200, krok  $q_r$  0,0001. Přibližná doba vykreslení jednoho grafu 5 minut. U přednastavených hodnot doba vykreslení v řádu několika sekund.*

### 3.3 Simulace dynamických charakteristik

Dynamické vlastnosti jsou charakterizovány přechodovou funkcí. Přechodová funkce v časové oblasti se označuje jako  $h(t)$ , její grafická reprezentace se nazývá přechodová charakteristika, je definována jako odezva dynamického systému na skokovou změnu vstupního signálu - Heavisideův skok (128) při nulových počátečních podmínkách.

$$\eta(t) = \begin{cases} 1 & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad (128)$$

Pro ověření dynamických vlastností lze vybrat z těchto vstupních veličin (jejich skokové změny):  $q_r$ ,  $q_c$ ,  $T_r$ ,  $T_c$ ,  $c_A$ . Volíme pro technologický proces nejdůležitější: skokovou změnu  $\Delta q_r$ . Ostatní veličiny je možno simulovat na přiloženém programu.

Jako počáteční hodnoty stavových veličin, budeme brát jejich ustálenou hodnotu a dále je budeme počítat jako odchylky od ustáleného stavu (tzn., že se jedná o rozdíl stavové veličiny v  $i$ -tém dělení reaktoru při probíhající dynamickém ději a hodnotě v  $i$ -tém intervalu dělení v ustáleném stavu):

$$\begin{aligned} c_A(j) &= c_A(i) - c_A^S(i) \\ c_B(j) &= c_B(i) - c_B^S(i) \\ c_C(j) &= c_C(i) - c_C^S(i) \\ T_r(j) &= T_r(i) - T_r^S(i) \\ T_s(j) &= T_s(i) - T_s^S(i) \\ T_c(j) &= T_c(i) - T_c^S(i) \end{aligned} \quad (129)$$

pro  $j = 1, 2, \dots, n$

Z toho plyne, že grafy budou vždy vycházet z počátku souřadnic osového systému.

2D grafy nám umožní sledovat průběhy stavových veličin na výstupu reaktoru. U 3D grafů si můžeme prohlédnout jak působí skokové změny v celém profilu potrubí reaktoru.

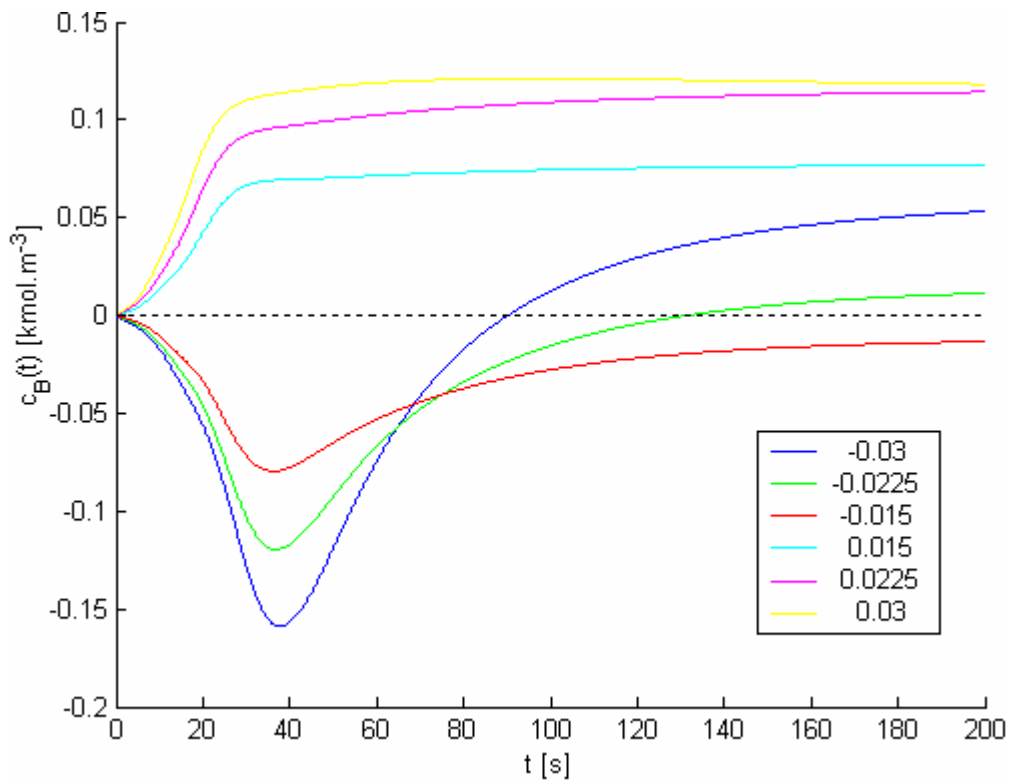
U 3D grafů budeme uvažovat skokovou změnu rychlosti reakční směsi  $0,03 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  (20% ustálené hodnoty). Zobrazíme si nejpodstatnější stavové veličiny, tedy koncentraci látky B, teplotu reakční směsi  $T_r$  a teplotu chladiva  $T_c$ .



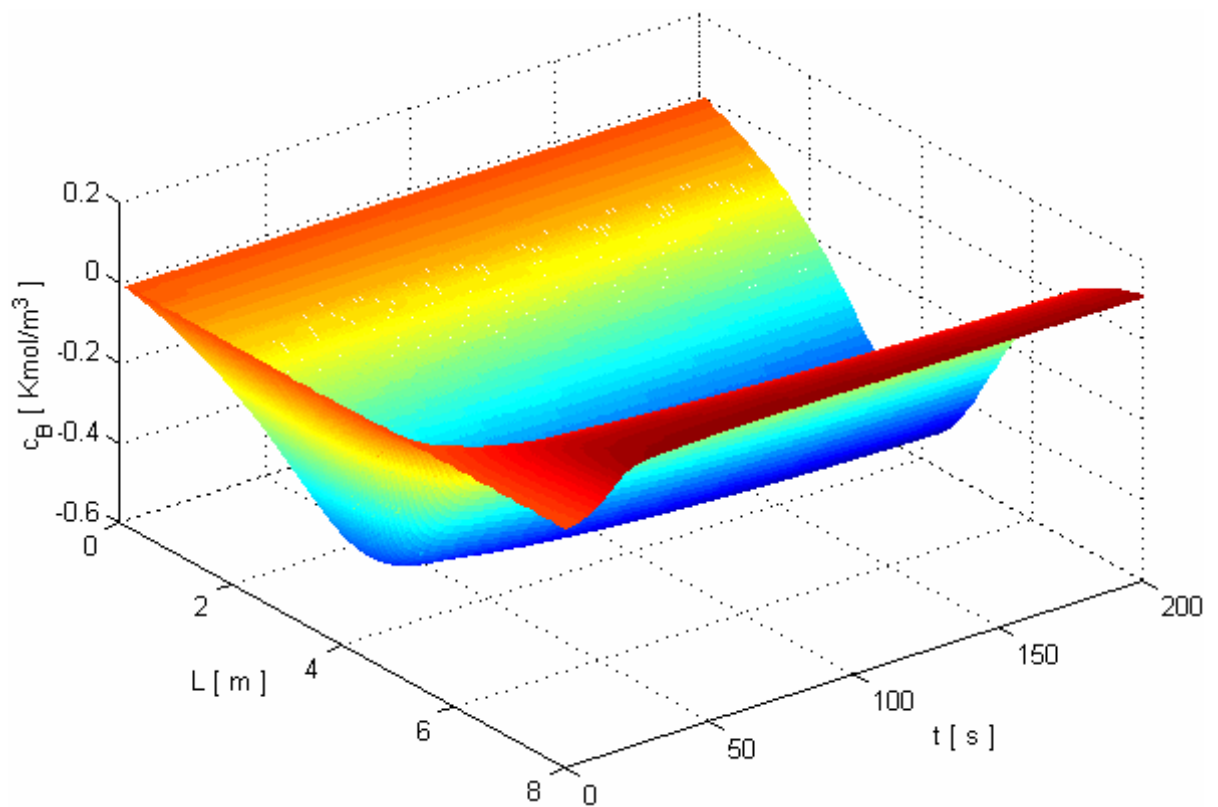
Ostatní průběhy všech stavových veličin je možno si prohlédnout na přiloženém CD, kde je možno měnit skokové změny koncentrace látky A, průtok reakční a chladící směsi, teplotu reakční a chladící směsi v kombinaci s různými hodnotami vstupních veličin.

*Pozn: 3D grafy jsou tvořeny příkazem mesh s integračním kroku 0,05 s a rozdělením reaktoru na 200 dílků, za uvedených podmínek probíhá vykreslení kolem 30 minut, při defaultním nastavení trvá výpočet zhruba 1 minutu.*

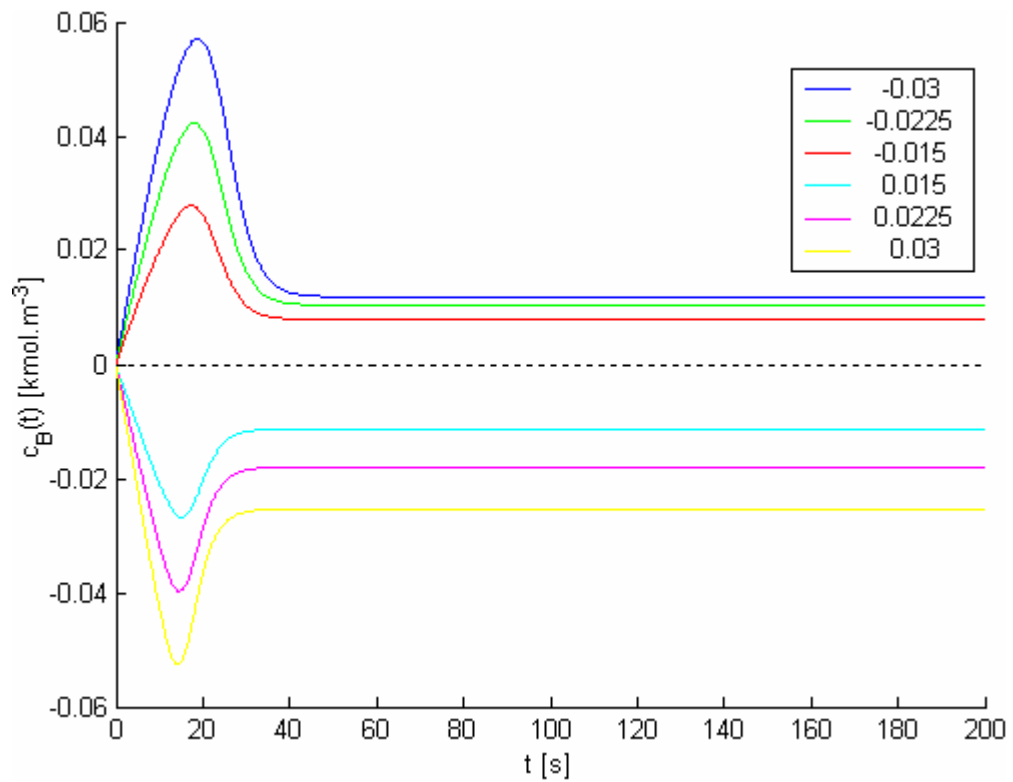
Simulace dynamických char. konc. látky B při změnách průtoku reakční směsi  $\Delta q_r$



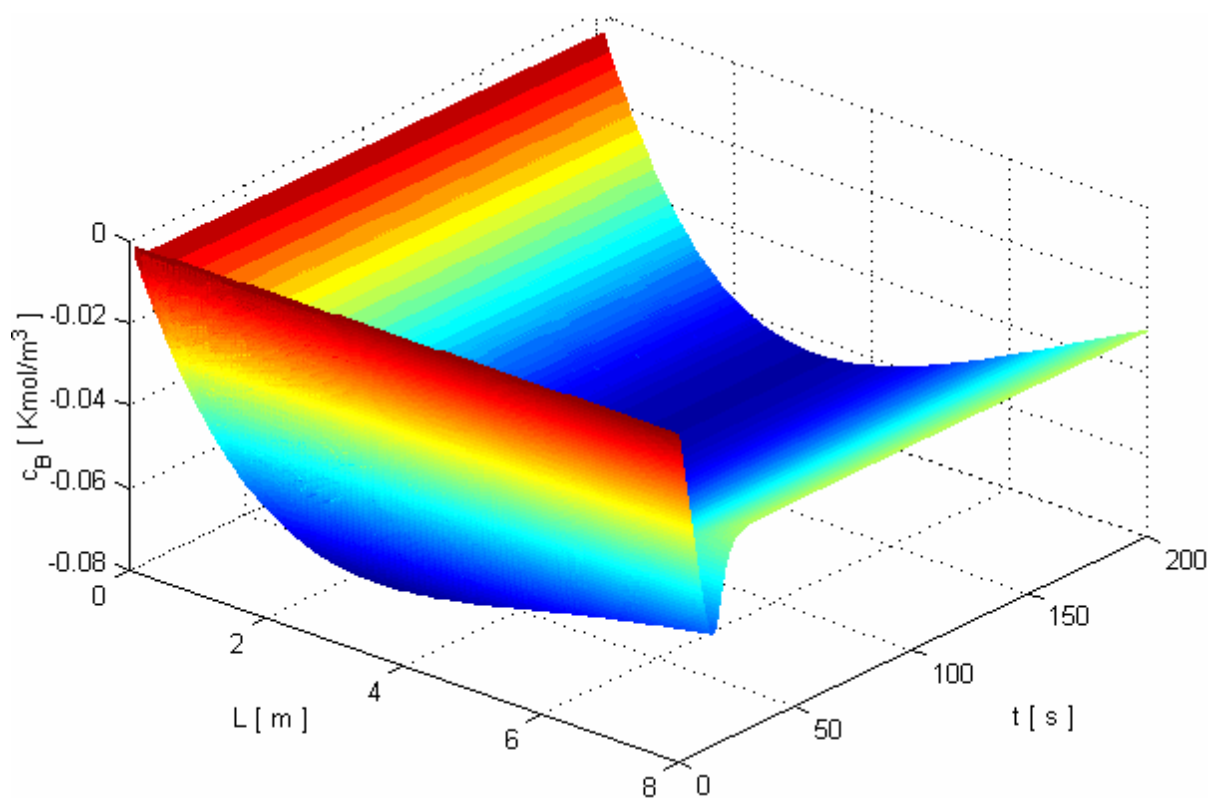
Obr. 35. Časová závislost koncentrace látky B na skokové změně průtoku  $q_r$  při použití protiproudého chlazení



Obr. 36. 3D graf koncentrace látky B při změně průtoku  $q_r$  20%, protiproudé chlazení



Obr. 37. Časová závislost koncentrace látky B na skokové změně průtoku  $q_r$  při použití souproutého chlazení



Obr. 38. 3D graf koncentrace látky B při změně průtoku  $q_r$  20%, souprouté chlazení

Jak vidíme z přechodových charakteristik, kdy jsme volili skoky od +20% do -20% z ustálené hodnoty vstupní veličiny  $q_r$ , hodnoty koncentrace látky B se ustálili před časem 200 sekund. U souproutého chlazení jsou si všechny stejné hodnoty průtoků  $q_r$  s opačným znaménkem téměř souměrné s osou  $x$  a všechny hodnoty se ustálí do času 50 s.

Pokud je u souproutého chlazení skoková změna reakční směsi kladná tak i průběhy koncentrace látky B jsou v kladné oblasti a naopak je-li hodnota změny průtoku  $q_r$  záporná jsou i průběhy koncentrace  $c_B$  záporné.

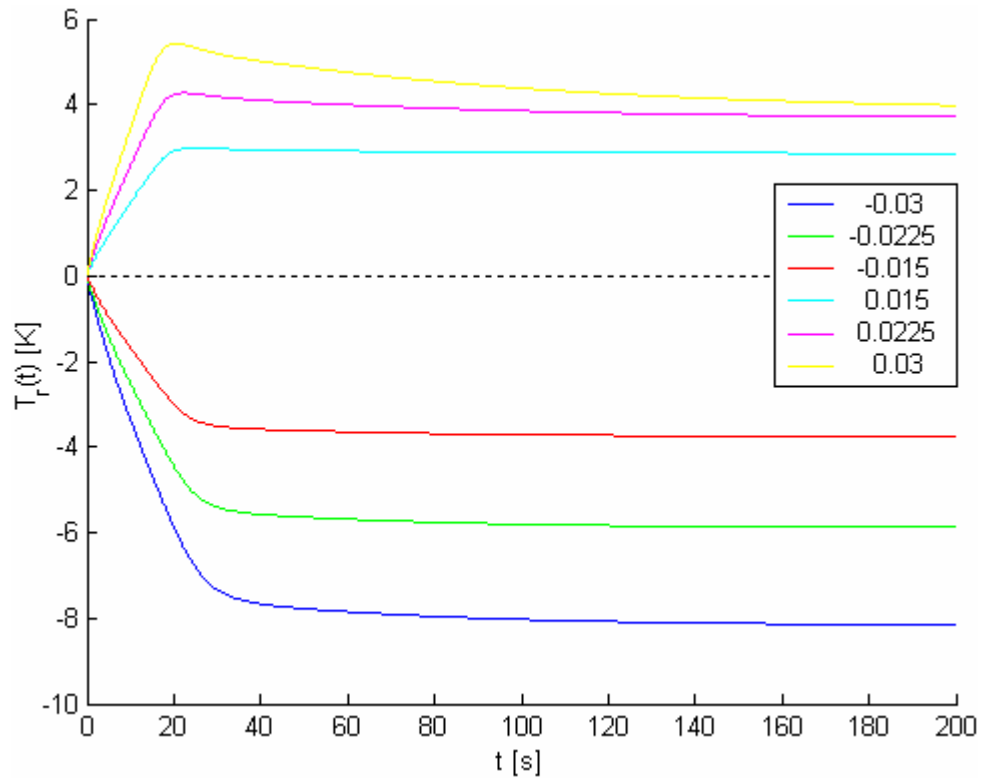
U protiproudého chlazení to platí jen pro kladné změny průtoku reakční směsi. Při záporné změně reakční směsi dostáváme na výstupu záporné hodnoty, které se ale s rostoucím časem blíží k ustálené hodnotě a s větší změnou průtoku reakční směsi je tento průběh rychlejší a dostáváme se dokonce i do kladné oblasti.

Platí, že čím je větší skoková změna, tím je větší hodnota výstupní veličiny.

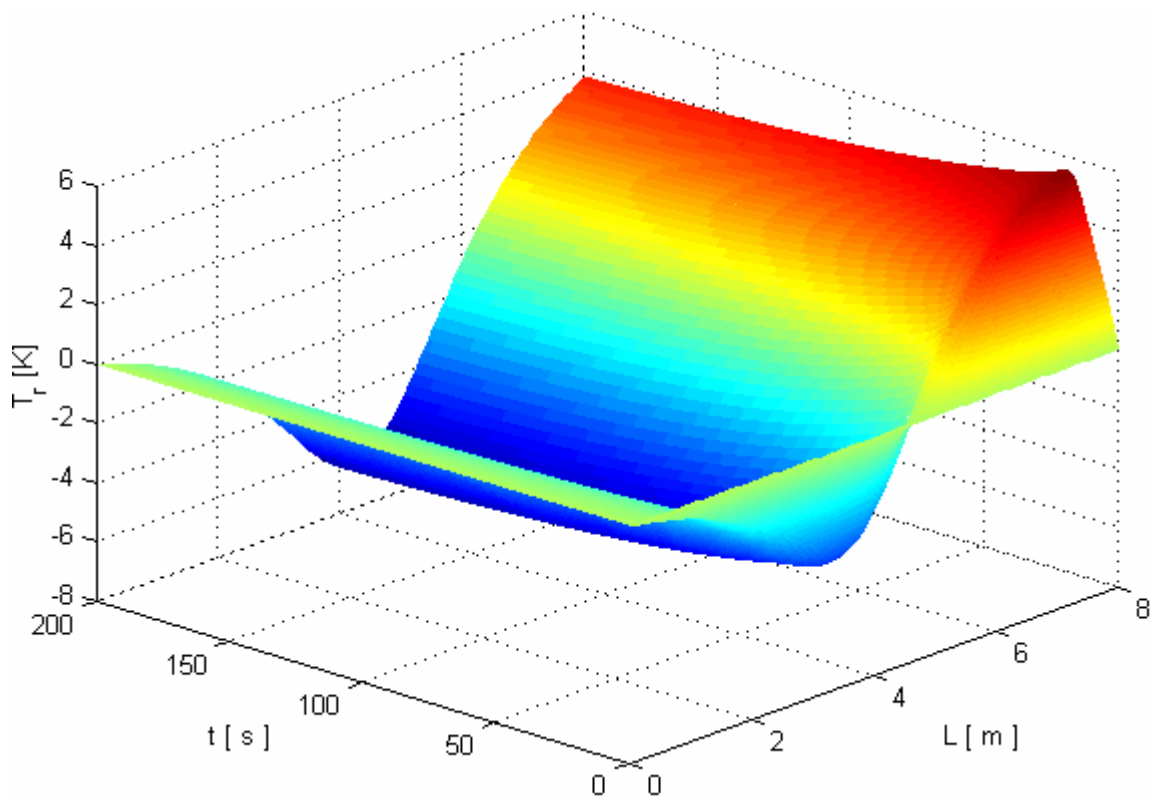
Z 3D grafů lze vyčíst, že časové průběhy koncentrace látky B na konci reaktoru mohou být jiné než v profilu celého reaktoru. Vezněme u protiproudého chlazení profil reaktoru v čase  $t = 200$  s, kdy již jsou dynamické děje ustálené. Nejdříve nastává propad látky oproti ustálené hodnotě, který probíhá do poloviny reaktoru. Pak nastává nárůst, který je větší oproti ustálené hodnotě až na konci reaktoru.

U souproutého chlazení probíhají dynamické změny v prvních 50 sekundách simulace v celém profilu reaktoru. V tomto časovém rozpětí nastává propad koncentrace látky B oproti ustálené hodnotě s následným nárůstem, který se ale ustálí pod hodnotami ustáleného stavu.

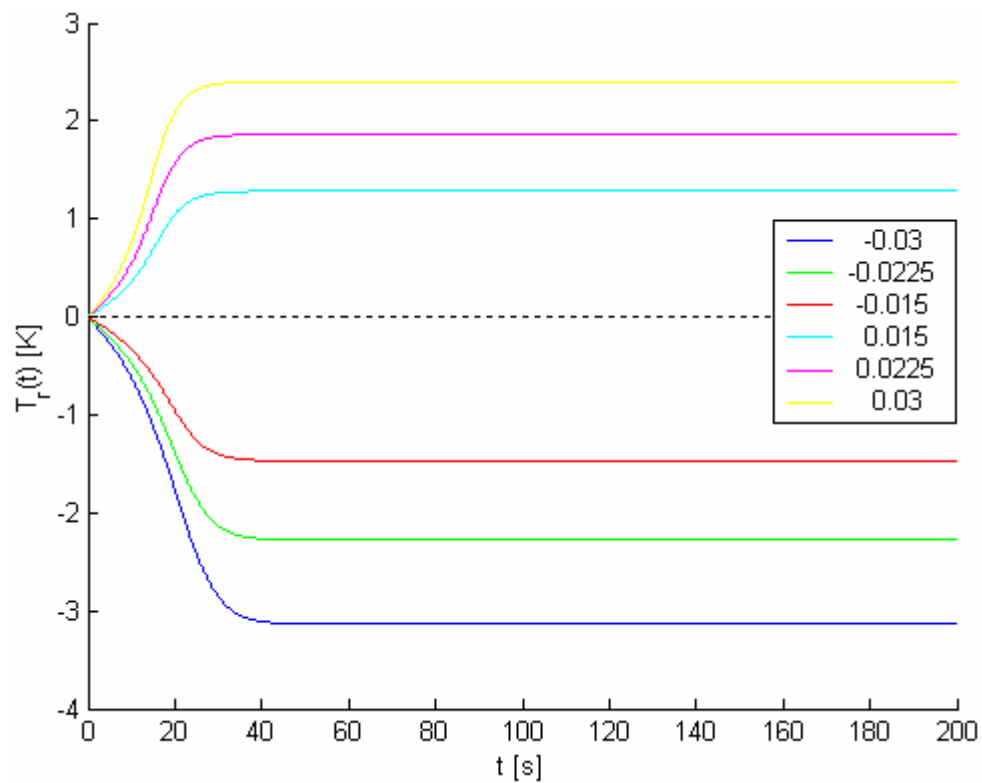
*Simulace dyn. char. teploty reakční směsi a chladiva při změnách průtoku reakční směsi*



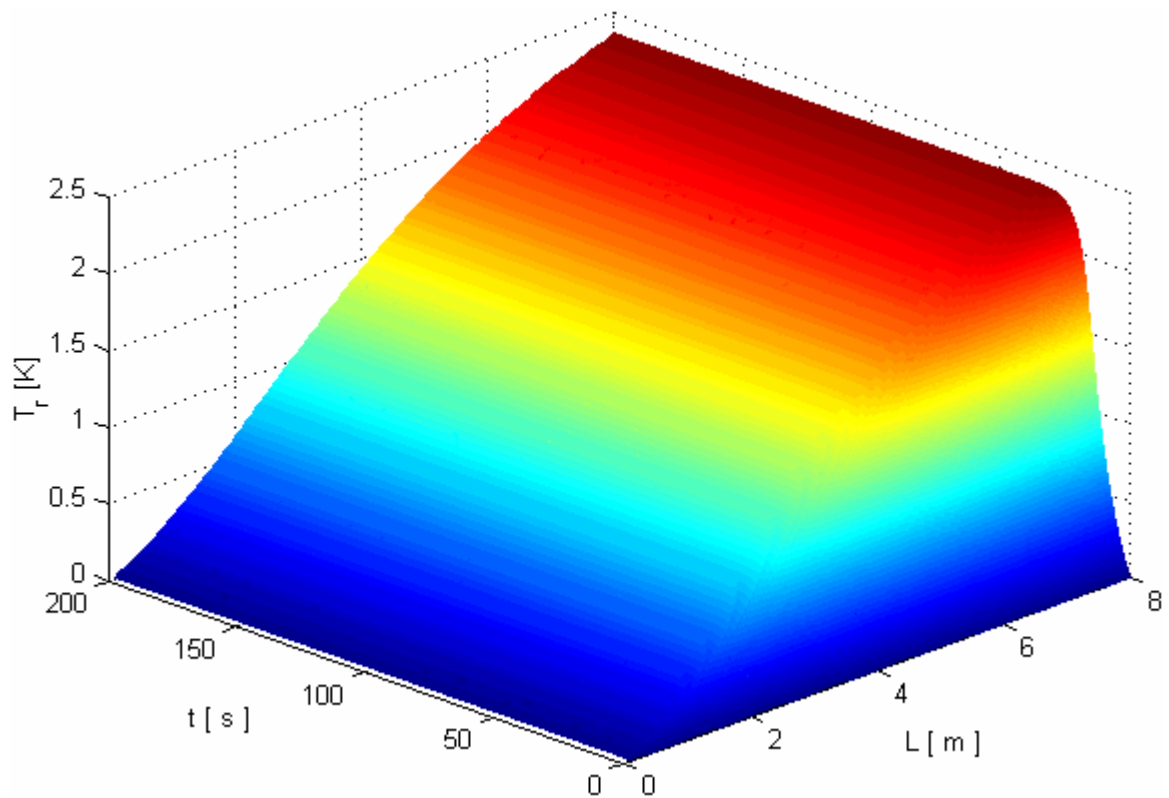
*Obr. 39. Časová závislost teploty reakční směsi na skokové změně průtoku  $q_r$  při použití protiproudého chlazení*



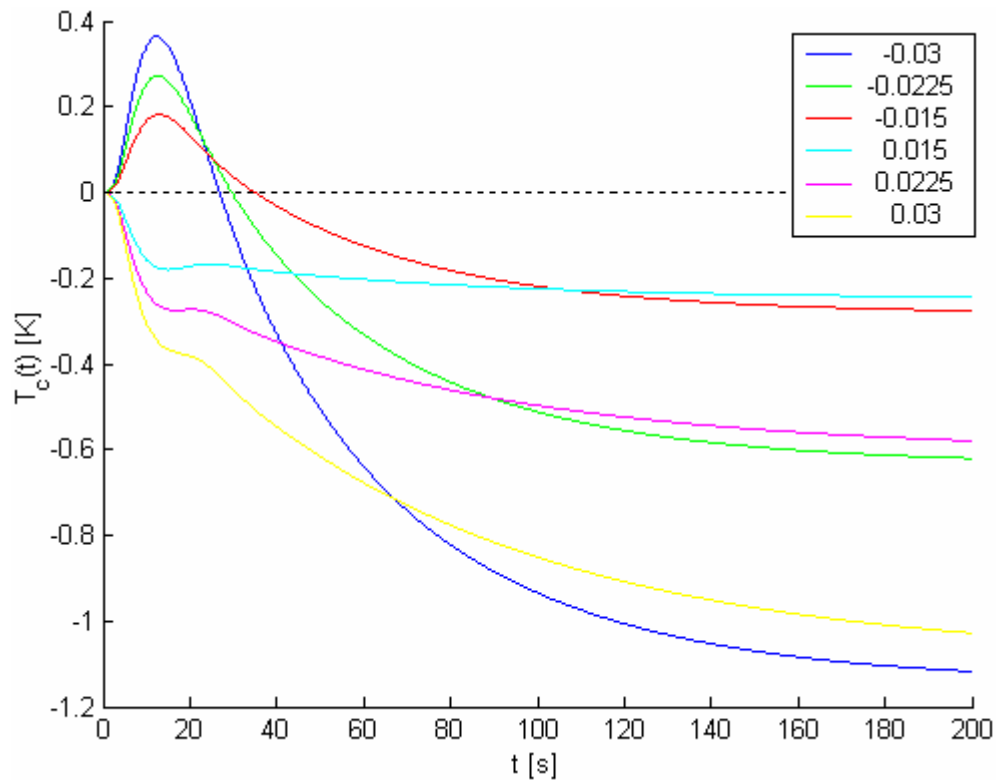
*Obr. 40. 3D graf teploty reakční směsi při změně průtoku  $q_r$  20%, protiproudé chlazení*



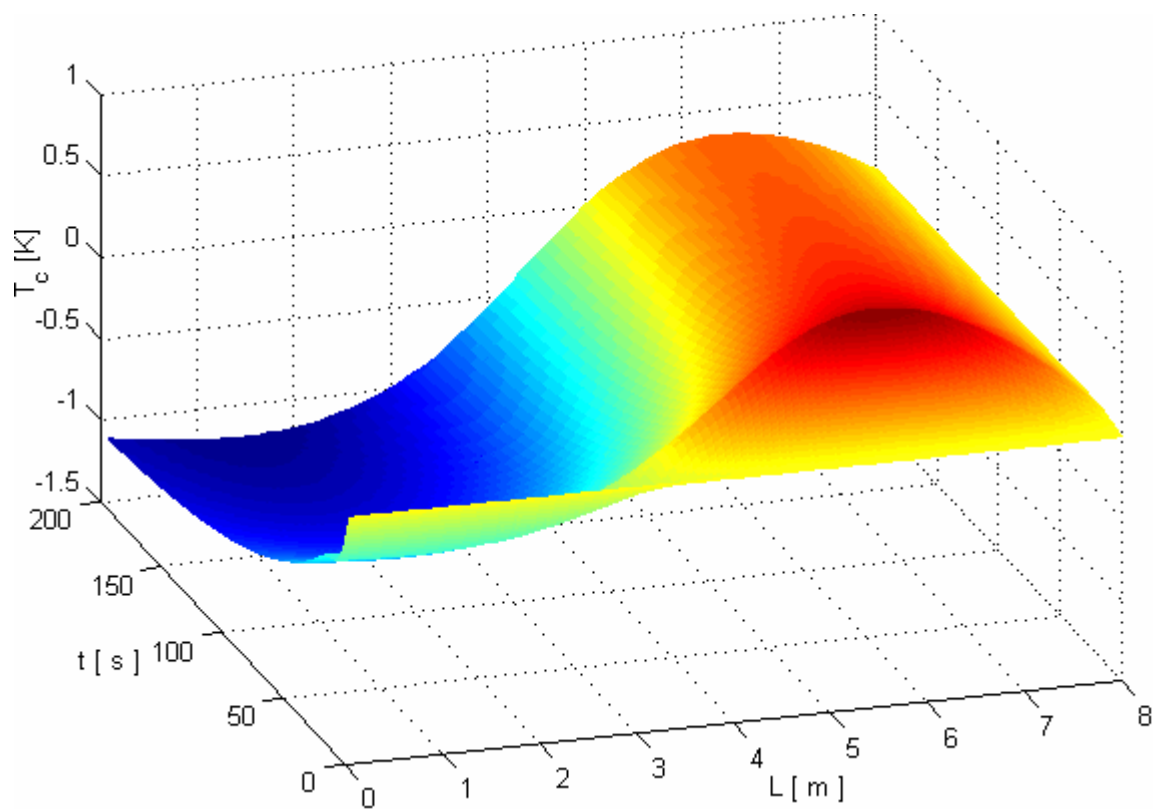
Obr. 41. Časová závislost teploty reakční směsi na skokové změně průtoku  $q_r$  při použití souproutého chlazení



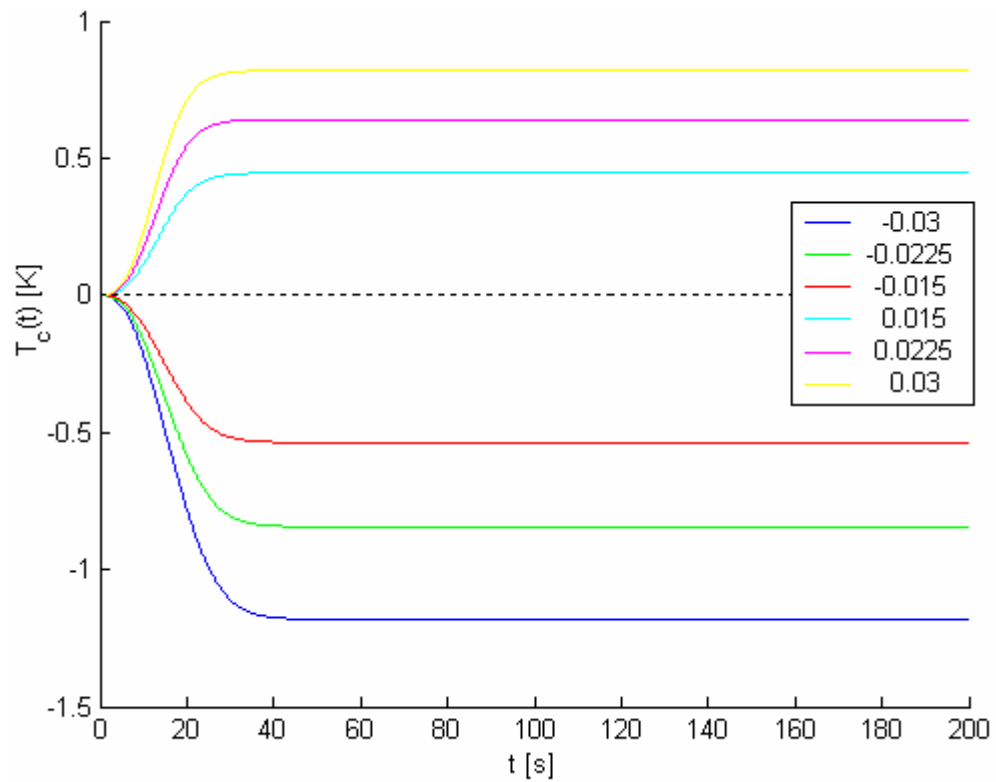
Obr. 42. 3D graf teploty reakční směsi při změně průtoku  $q_r$  20%, souprouté chlazení



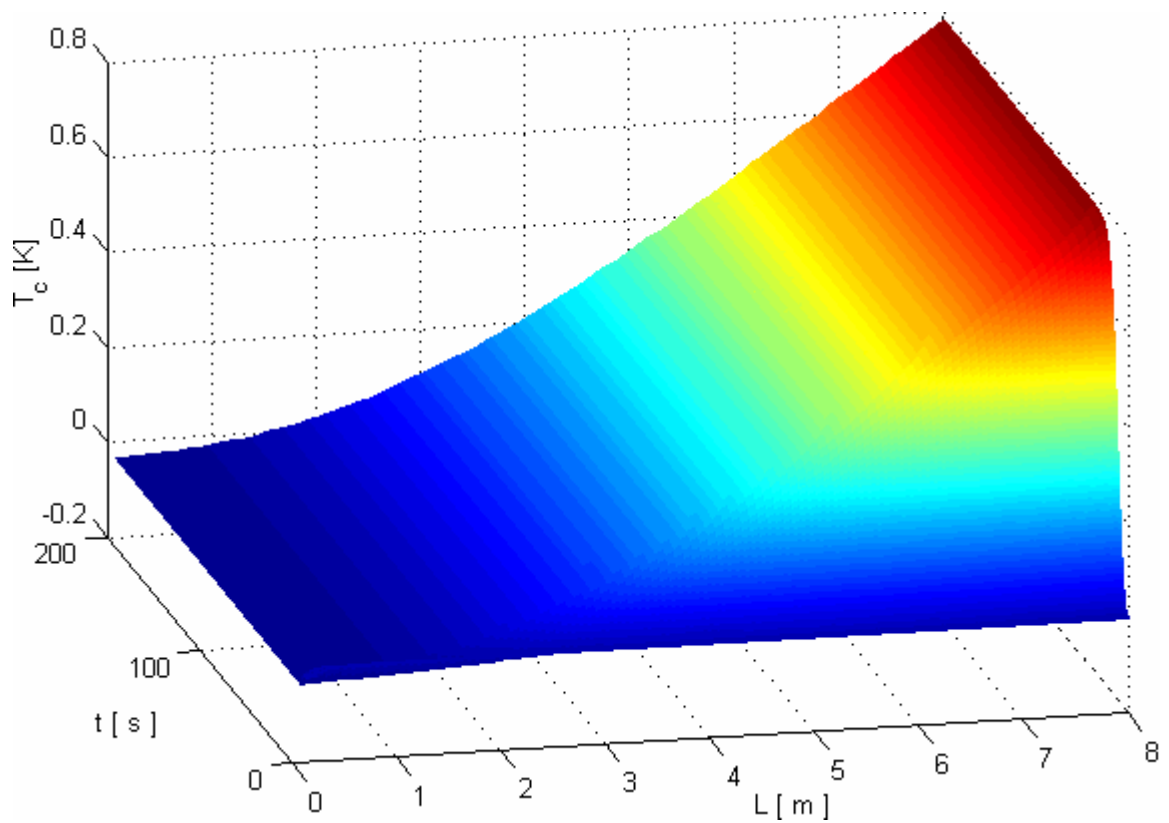
Obr. 43. Časová závislost teploty chladiva na skokové změně průtoku  $q_r$  při použití protiproudého chlazení



Obr. 44. 3D graf teploty chladiva při změně průtoku  $q_r$  20%, protiproudé chlazení



Obr. 45. Časová závislost teploty chladiva na skokové změně průtoku  $q_r$  při použití souproutého chlazení



Obr. 46. 3D graf teploty chladiva při změně průtoku  $q_r$  20%, souprouté chlazení



Můžeme si všimnout u průběhů teplot reakční směsi a chladiwa, že u souproudeho chlazení teplota v profilu potrubí rovnoměrně stoupá, kdežto u protiproudeho do středu reaktoru klesá oproti ustálené hodnotě a pak stoupá nad ustálené hodnoty. U teploty chladiwa ještě před koncem reaktoru následuje pokles. Zaměříme-li se na protiproudé chlazení, tak průběhy teploty reakční směsi a chladiwa korespondují s průběhy koncentrace látky B. Klesá-li teplota reakční směsi a chladiwa klesá koncentrace látky B a naopak. Uvedený výrok si lze lehce vysvětlit tím, že rozpad látky A na látku B je exotermní reakce. Klesá-li tedy koncentrace látky A, roste koncentrace látky B, uvolňuje se teplo a roste teplota reakční směsi a chladiwa.

K 3D grafům dynamických charakteristik lze dodat, že nám řeknou hodně o dynamických dějích probíhajících v reaktoru.

## ZÁVĚR

Cílem diplomové práce bylo vytvořit matematický model trubkového chemického reaktoru, navrhnout metodu řešení tohoto modelu (tj. řešení ustáleného stavu a dynamiky), tuto metodu naprogramovat v programu MATLAB, vytvořit přehledné grafické prostředí a vytvořit možnost prověřovat vlastnosti zkoumaných stavových veličin, které charakterizují děje probíhající v reaktoru z většího množství vstupních parametrů.

Produktem je program (viz příloha P I a příložené CD), který výše zmíněné umožňuje. Nabízí možnost jak 2D grafů tak i 3D grafů, které umocňují ještě lepší grafickou názornost. Umožňuje porovnávat protiproudé a souprroudé chlazení a simulovat změny jednoho parametru v jednom grafu.

Práce je rozdělena do dvou částí: teoretická a praktická.

Teoretická část nás seznamuje s metodou bilancování a pojmenovává nám základní pojmy, které jsou pak využity pro sestavení matematického modelu trubkového chemického reaktoru. Tento reaktor se skládá z  $n_1$  trubek (volíme 1200) a jedná se tedy o „více“ trubkový reaktor.

Model lze popsat šesti parciálními diferenciálními rovnicemi. Jedná se o nelineární systém s rozloženými parametry. Nelineární proto, že závislost rychlostních koeficientů  $k_{1,2}$  jsou dány Arrheniovými vztahy, které jsou vyjádřeny jako nelineární funkce teploty a s rozloženými parametry proto, že hodnoty stavových veličin nejsou jen funkcí času a vstupních veličin, ale i polohou v reaktoru. Odvozením těchto rovnic a úpravou do základního tvaru končí teoretická část.

V praktické části je navrhováno řešení těchto rovnic. Pro ustálený stav odpadá derivace podle času, získá se tak pro jednotlivou stavovou veličinu obyčejná diferenciální rovnice. Lze je řešit ve spojitě časové oblasti separací, ale tímto řešením se nezabýváme, je možno ho najít zde [10] nebo [11]. Nebo použít MATLAB funkce ode (např. ode45), kterou jsem vyzkoušel, ale nedávala optimální výsledky, jako nejlepší metoda se nabídla metoda iterace, respektive její Seidlova modifikace, která ještě urychluje výpočet. Pro její aplikaci bylo nutné derivaci podle prostorové proměnné nahradit diferencemi viz kapitola 1.3.1 a převést tak na rovnice diferenční.

Pro řešení dynamiky jsem použil Runge–Kutta–Fehlberg metodu, která je pátého řádu. Jedná se o moderní metodu, která umožňuje přesnější řešení (chyba  $O(h^5)$ ). Tato metoda řeší

řeší obyčejné diferenciální rovnice, proto jsem si musel převést parciální na obyčejné. Což bylo provedeno diskretizací derivace podle prostorové proměnné a derivace podle času byla ponechána ve spojité oblasti. Získal jsem tak soustavu obyčejných diferenciálních rovnic.

Byl odsimulován ustálený stav a dynamika, přičemž měnícím parametrem byla změna rychlosti reakční směsi  $q_r$  jako vstupní veličina. Došel jsem k závěru, že protiproudé chlazení dává lepší výsledky.

Příložený program umožňuje simulovat všechny stavové veličiny a pozorovat vlivy všech podstatných vstupních veličin. Čímž vznikne velká kombinace možností a nabízí tak dobrý nástroj k prověření systému. Z grafické stránky nabízí i 3D grafy, které ještě navíc umocňují názornost probíhajících dějů.

Jako nejdůležitější poznatek ze simulace (což se dá i úvahou vyvodit) je, že protiproudé chlazení je mnohonásobně efektivnější než souproudé.

**SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY**

- [1] Petr Noskievič - Modelování a identifikace systémů, MONTANEX a.s., 1999
- [2] J. Kuneš - Základy modelování, SNTL, 1989
- [3] Šnita D.: Chemické inženýrství I. 1. vyd. Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Praha 2006. ISBN 80-7080-589-7
- [4] R. Černá - Základy numerické matematiky a programování, SNTL 1987
- [5] M. Holodniok - Metody analýzy nelineárních dynamických modelů, ACADEMIA PRAHA, 1986
- [6] Perůtka Karel: MATLAB - Základy pro studenty automatizace a informačních technologií, UTB ve Zlíně, 2005
- [7] Humusoft: Matlab 6 - školení MATLAB I,II, skriptum firmy Humusoft, 2002
- [8] Oficiální stránka MATLABu. Dostupné z www: <http://www.mathworks.com/>
- [9] Programming in GUIDE. Dostupné z:  
[http://www.system.nada.kth.se/unix/software/matlab/Release\\_14.1/techdoc/](http://www.system.nada.kth.se/unix/software/matlab/Release_14.1/techdoc/)
- [10] Lanny D. Schmidt: The engineering of chemical reactions, Oxford University Press
- [11] Ronald W. Missen, Charles A Mims, Bradley A. Saville: Chemical reaction engineering and kinetics, University of Toronto
- [12] E. Vitásek: Základy teorie numerických metod pro řešení diferenciálních rovnic, Academia
- [13] Dostál P., Prokop R., Prokopová Z., Fikar M.: Kontrol design analysis of tubular chemical reactors, Chem. Papers, 1996
- [14] Petr Tobola: Numerické metody. Dostupné z www:  
[www.fi.muni.cz/~ptx/PA010/Slides/PA010\\_11.pdf](http://www.fi.muni.cz/~ptx/PA010/Slides/PA010_11.pdf)

## SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

$X_i$	Zjednodušující konstanta	$[-]$
$c_{pr}$	měrné reakční teplo	$[kJ.kg^{-1}.K^{-1}]$
$c_{ps}$	měrné teplo materiálu stěn trubek	$[kJ.kg^{-1}.K^{-1}]$
$c_{pc}$	měrné teplo chladiva	$[kJ.kg^{-1}.K^{-1}]$
$c_A$	koncentrace látky A	$[kmol.m^{-3}]$
$c_B$	koncentrace látky B	$[kmol.m^{-3}]$
$c_C$	koncentrace látky C	$[kmol.m^{-3}]$
$d_1$	vnitřní průměr trubky	$[m]$
$d_2$	vnější průměr trubky	$[m]$
$d_3$	vnitřní průměr reaktoru	$[m]$
$dV_r$	objemový element reakční směsi	$[m^3]$
$dV_c$	objemový element chladiva	$[m^3]$
$dV_s$	objemový element stěn trubek	$[m^3]$
$ds_1$	vnitřní plocha trubky	$[m^2]$
$ds_2$	vnější plocha trubky	$[m^2]$
$E_1, E_2$	aktivační energie	$[J]$
$f_r, f_c$	zjednodušující konstanty, reakční směsi, chladiva	$[m^2]$
$f(v, i)$	označení levých stran rovnic, v – veličina, i - hodnota	$[-]$
$f_d(m, i)$	pomocná matice	$[-]$
$k_{1-5}$	koeficienty Runge–Kuttovi rovnice	$[-]$
$h$	diskretizační krok	$[m]$
$h_{r1} h_{r2}$	reakční entalpie	$[Kj.mol^{-1}]$
$h_i$	integrační krok	$[s]$
$k_1, k_2$	rychlostní koeficienty	$[s^{-1}]$

$k_{10}, k_{20}$	frekvenční faktory	$[s^{-1}]$
$L$	délka reaktoru	$[m]$
$n_1$	počet trubek v reaktoru	$[-]$
$n$	počet dělení reaktoru	$[-]$
$p_1, p_2$	pomocné proměnné v iteračním cyklu	$[K]$
$q_r$	objemový průtok reakční směsi	$[m^3 \cdot s^{-1}]$
$q_c$	objemový průtok chladiva	$[m^3 \cdot s^{-1}]$
$Q_r$	reakční teplo	$[W]$
$R$	plynová konstanta	$[J \cdot K^{-1}]$
$v_r$	rychlost proudění reakční směsi	$[m \cdot s^{-1}]$
$v_c$	rychlost proudění chladiva	$[m \cdot s^{-1}]$
$t$	spojitý čas	$[s]$
$u(z, t)$	vstupní veličina	$[-]$
$X$	vektor obecně proměnné	$[-]$
$x(z, t)$	stavová veličina	$[-]$
$z$	prostorová proměnná	$[m]$
$\Delta q_r$	skoková změna objemového průtoku reakční směsi	$[m^3 \cdot s^{-1}]$
$\Delta q_c$	skoková změna objemového průtoku chladiva	$[m^3 \cdot s^{-1}]$
$\Delta c_A$	skoková změna koncentrace látky A	$[kmol \cdot m^{-3}]$
$\Delta T_r$	skoková změna teploty reakční směsi	$[K]$
$\Delta T_c$	skoková změna teploty chladiva	$[K]$
$\rho_r$	hustota reakční směsi	$[kg \cdot m^{-3}]$
$\rho_s$	hustota materiálu stěny	$[kg \cdot m^{-3}]$
$\rho_c$	hustota chladiva	$[kg \cdot m^{-3}]$

---

$\alpha_1$	koeficient přestupu tepla z reakční směsi do stěny trubky	$[kJ.m^{-2}.K^{-1}.s^{-1}]$
$\alpha_2$	koeficient přestupu tepla ze stěny do chladící kapaliny	$[kJ.m^{-2}.K^{-1}.s^{-1}]$
$\varepsilon$	přesnost	$[-]$

## SEZNAM OBRÁZKŮ

Obr. 1. Grafické schéma rozdělení veličin .....	15
Obr. 2. Grafický model trubkového chemického reaktoru se znázorněním .....	17
konstrukčních technologických a vstupních veličin.....	17
Obr. 3. Objemový element $dV_{r1}$ .....	18
Obr. 4. Objemový element.....	19
pro stěnu trubky $dV_s$ .....	19
Obr. 5. Objemový element chladiwa $dV_c$ .....	19
Obr. 6. Bilancované veličiny objemového elementu jedné trubky $dV_{r1}$ .....	20
Obr. 7. Znázornění materiálové bilance látky A.....	20
Obr. 8. Znázornění materiálové bilance látky B.....	21
Obr. 9. Znázornění materiálové bilance látky C.....	22
Obr. 10. Znázornění tepelné bilance reakční směsi .....	23
Obr. 11. Znázornění tepelné bilance elementu stěn trubek .....	24
Obr. 12. Znázornění souproutého a protiproutého chlazení .....	25
v elementu $dV_c$ .....	25
Obr. 13. Znázornění tepelné bilance chladiwa .....	25
Obr. 14. Rozděl. spojité délky reaktoru na n dílků.....	28
Obr: 15. Závislost koncentrace látky A na délce reaktoru při změnách.....	44
průtoku reakční směsi $q_r$ a při protiproutém chlazení.....	44
Obr: 16. 3D graf koncentrace látky A v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	44
a použití protiproutého chlazení.....	44
Obr: 17. Závislost koncentrace látky A na délce reaktoru při změnách.....	45
průtoku reakční směsi $q_r$ a při souproutém chlazení.....	45
Obr: 18. 3D graf koncentrace látky A v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	45
a použití souproutého chlazení.....	45
Obr. 19. Závislost koncentrace látky B na délce reaktoru při změnách .....	46
průtoků reakční směsi $q_r$ a při protiproutém chlazení .....	46
Obr. 20. 3D graf koncentrace látky B v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	46
a použití protiproutého chlazení.....	46
Obr. 21. Závislost koncentrace látky B na délce reaktoru při změnách .....	47
průtoku reakční směsi $q_r$ a při souproutém chlazení .....	47



Obr. 22. 3D graf koncentrace látky B v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	47
a použití souproudého chlazení.....	47
Obr. 23. Závislost koncentrace látky C na délce reaktoru při změnách.....	48
průtoků reakční směsi $q_r$ a protiproudém chlazení.....	48
Obr. 24. 3D graf koncentrace látky C v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	48
a použití protiproudého chlazení.....	48
Obr. 25. Závislost koncentrace látky C na délce reaktoru při změnách.....	49
průtoků reakční směsi $q_r$ a souproudém chlazení.....	49
Obr. 26. 3D graf koncentrace látky C v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	49
a použití souproudého chlazení.....	49
Obr. 27. Závislost teploty reakční směsi na délce reaktoru při změnách.....	51
průtoků reakční směsi $q_r$ a protiproudém chlazení.....	51
Obr. 28. 3D graf teploty reakční směsi v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	51
a použití protiproudého chlazení.....	51
Obr. 29. Závislost teploty reakční směsi na délce reaktoru při změnách.....	52
průtoků reakční směsi $q_r$ a souproudém chlazení.....	52
Obr. 30. 3D graf teploty reakční směsi v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	52
a použití souproudého chlazení.....	52
Obr. 31. Závislost teploty chladiva na délce reaktoru při změnách.....	53
průtoků reakční směsi $q_r$ a protiproudém chlazení.....	53
Obr. 32. 3D graf teploty chladiva v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	53
a použití protiproudého chlazení.....	53
Obr. 33. Závislost teploty chladiva na délce reaktoru při změnách.....	54
průtoků reakční směsi $q_r$ a souproudém chlazení.....	54
Obr. 34. 3D graf teploty chladiva v závislosti na průtoku reakční směsi $q_r$ .....	54
a souproudém chlazení.....	54
Obr. 35. Časová závislost koncentrace látky B na skokové změně průtoku.....	58
$q_r$ při použití protiproudého chlazení.....	58
Obr. 36. 3D graf koncentrace látky B při změně průtoku $q_r$ 20%, protiproudé chlazení.....	58
Obr. 37. Časová závislost koncentrace látky B na skokové změně průtoku $q_r$ .....	59
při použití souproudého chlazení.....	59
Obr. 38. 3D graf koncentrace látky B při změně průtoku $q_r$ 20%, souproudé chlazení.....	59

Obr. 39. Časová závislost teploty reakční směsi na skokové změně průtoku $q_r$ .....	61
při použití protiproudého chlazení .....	61
Obr. 40. 3D graf teploty reakční směsi při změně průtoku $q_r$ 20%, protiproudé chlazení.....	61
Obr. 41. Časová závislost teploty reakční směsi na skokové změně průtoku $q_r$ .....	62
při použití souproudého chlazení .....	62
Obr. 42. 3D graf teploty reakční směsi při změně průtoku $q_r$ 20%, souproudé chlazení.....	62
Obr. 43. Časová závislost teploty chladiva na skokové změně průtoku $q_r$ .....	63
při použití protiproudého chlazení .....	63
Obr. 44. 3D graf teploty chladiva při změně průtoku $q_r$ 20%, protiproudé chlazení.....	63
Obr. 45. Časová závislost teploty chladiva na skokové změně průtoku $q_r$ .....	64
při použití souproudého chlazení .....	64
Obr. 46. 3D graf teploty chladiva při změně průtoku $q_r$ 20%, souproudé chlazení.....	64

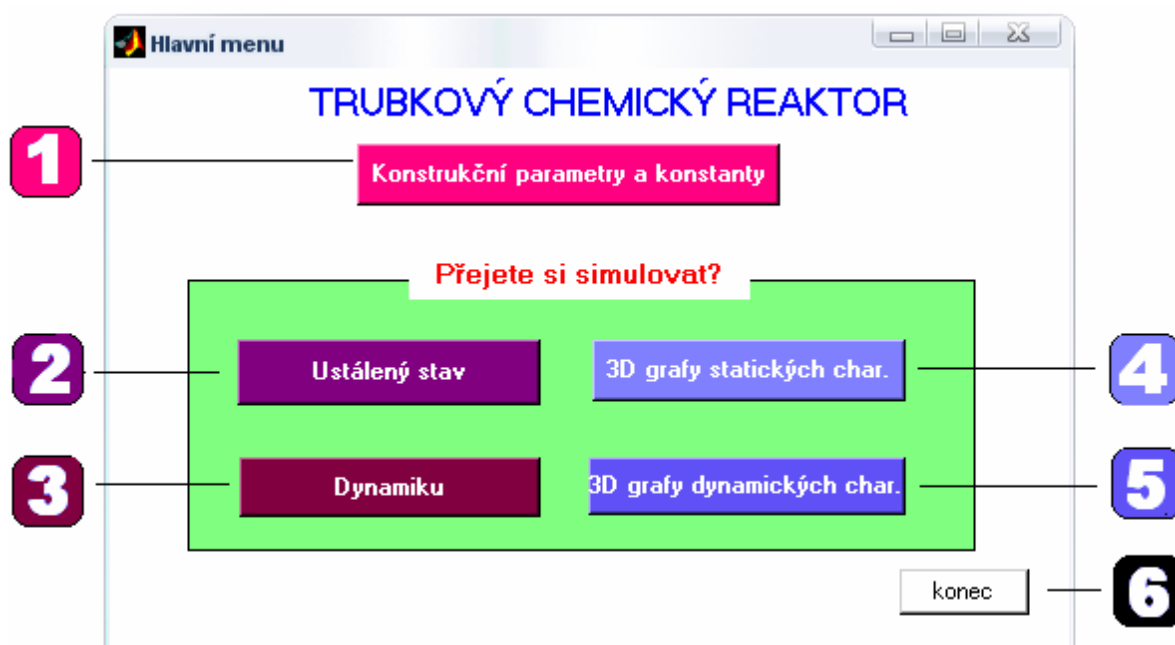
## SEZNAM PŘÍLOH

- P I: POPIS PROGRAMU V PROGRAMOVÉM PROSTŘEDÍ MATLAB A NÁVOD NA JEHO POUŽITÍ
- P II: STRUKTURA PROGRAMU
- P III: ZDROJOVÝ KÓD PRO SIMULACI USTÁLENÉHO STAVU
- P IV: ZDROJOVÝ KÓD PRO SIMULACI DYNAMICKÝCH CHARAKTERISTIK

## PŘÍLOHA P I: POPIS PROGRAMU V PROGRAMOVÉM PROSTŘEDÍ MATLAB A NÁVOD NA JEHO POUŽITÍ

Program je vytvořen ve verzi: MATLAB Version 6.5.0.180913a (R13). Zde je taky zaručena správná funkčnost. Program je vytvořen pomocí grafického uživatelského rozhraní v MATLABu pod označením GUIDE (toto rozhraní se také spouští tímto příkazem v příkazovém řádku). Tato součást usnadňuje práci při tvorbě programu, zpřehledňuje zadávání vstupních dat nebo zpracování grafických výstupů. Více informací, jak se pracuje s tímto rozhraním lze nalézt zde: [6]-[9].

Úvodní okno programu diplomové práce (*obr. 1*) se spouští příkazem „**start**“ v příkazovém řádku MATLABu.



*Obr. 1. Hlavní menu programu*

Program obsahuje celkem šest podoken (submenu) a okno konstrukční parametry, které se spouštějí kliknutím na patřičný panel s nabídkou (popisem). Celá struktura programu je graficky znázorněná v příloze P II. V každém submenu jsou orámovány pole, které jsou označeny jinou barvou a mají následující funkce:

*Bledě modré pole:* zde můžeme volit různé hodnoty vstupních veličin (každé submenu obsahuje jiné volby):

**Vstupní hodnoty:**

Počet dílků $n =$	<input type="text" value="50"/>	Teplota reakční směsi $T_{ro} =$	<input type="text" value="323"/>	K
Koncentrace látky A $c_a =$	<input type="text" value="2.85"/>	Teplota chladicí směsi $T_{co} =$	<input type="text" value="293"/>	K
Objemový průtok reakční směsi $q_r =$	<input type="text" value="0.15"/>	Objemový průtok chladicí směsi $q_c =$	<input type="text" value="0.275"/>	m <sup>3</sup> /s

Obr.II. Orámované pole pro vstupní veličiny

Žluté pole: zde vybíráme typ chlazení:

**Typ chlazení:**

- protiproudé
- souprodé
- obojí

Obr. III. Orámované pole pro  
volbu typu chlazení

protiproudé – vykreslí se v grafu simulace s protiproudým chlazením

souprodé - vykreslí se v grafu simulace se souprodým chlazením

obojí – vykreslí se v jednom grafu simulace se souprodým a protiproudým chlazením

Bílé pole: zde vybíráme jednu ze šesti stavových veličin, kterou chceme vykreslit:

**Vykresli:**

- cA
- cB
- cC
- T<sub>r</sub>
- T<sub>s</sub>
- T<sub>c</sub>

Obr.IV. Orámované pole  
pro volbu veličiny

$c_A$  – koncentrace látky A

$c_B$  – koncentrace látky B

$c_C$  – koncentrace látky C

$T_r$  – teplota reakční směsi

$T_s$  – teplota stěn

$T_c$  – teplota chladiva

*Zelené pole:* zde zadáváme více hodnot pro jednu vstupní veličinu, množství hodnot je libovolné a hodnoty oddělujeme čárkou, např.:



Průtoky chladící směsi:

0.225,0.25,0.275,0.3,0.325 m<sup>3</sup>/s OK

*Obr. V. Pole pro zadání hodnot jednoho parametru - libovolného počtu*

*Tmavě modré pole:* najdeme je jen u submenu, které vykreslují 3D grafy, najdeme zde tři tlačítka:



Způsob vykreslení:

Mesh

Surf

Waterfall

Kontura

*Obr. VI. Volba typu vykreslení 3D grafů*

Mesh – vykreslí síť 3D grafu bez výplně

Surf – vykreslí síť 3D grafu s výplní

Waterfall – vykreslí 3D graf ve tvaru vodopádu

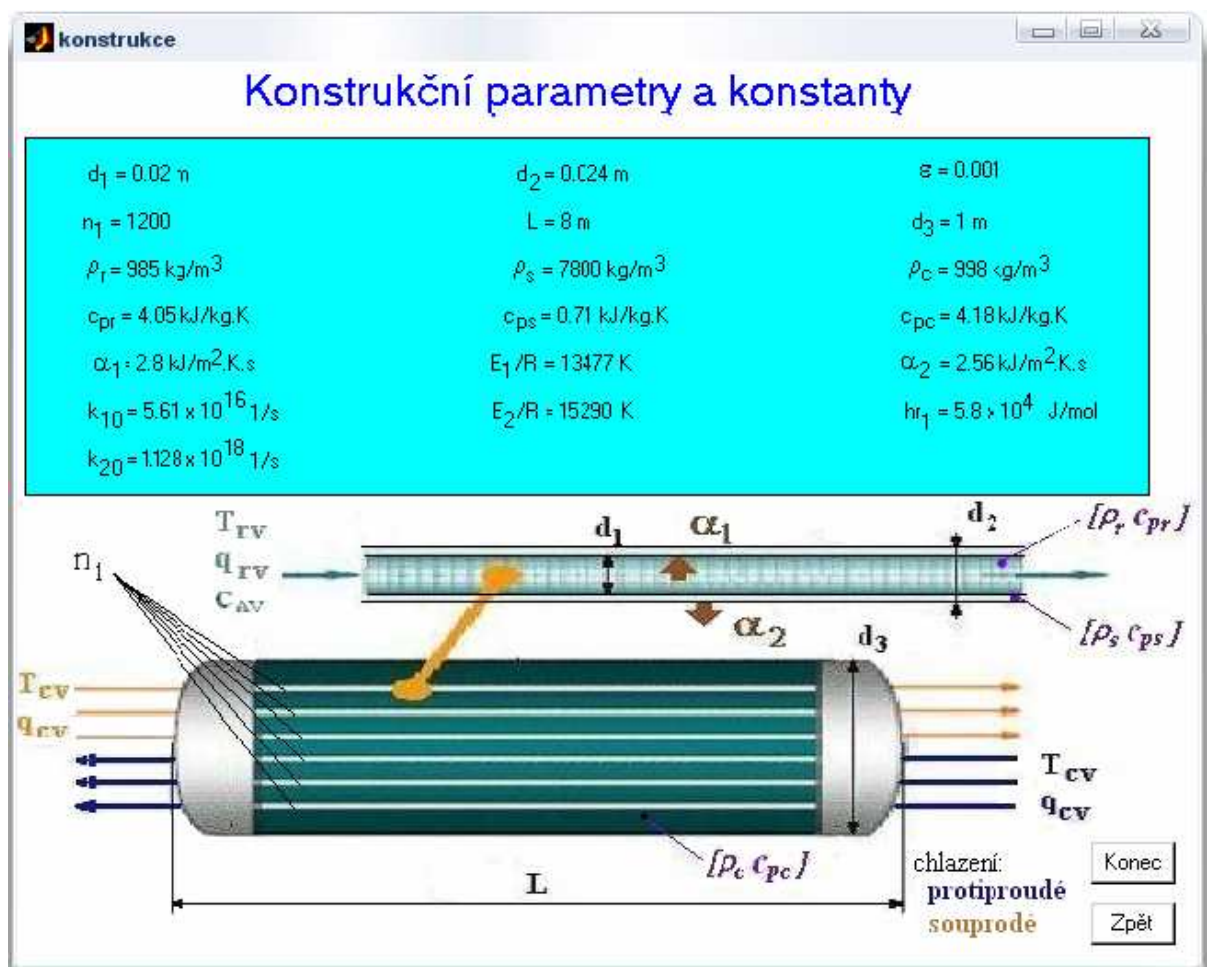
Kontura – k jednotlivým volbám přikreslí vrstevnice

*Pozn.: Chceme-li velmi jemnou síť (dlouhá doba vykreslení), je třeba zvolit typ vykreslení mesh, zvolíme-li surf vytvoří se tmavá plocha. Naopak chceme-li „řádkou síť“ a tím pádem rychlejší výpočet je lepší volba surf a prázdné pole se vyplní barvou.*

**1**

### Konstrukční parametry a konstanty

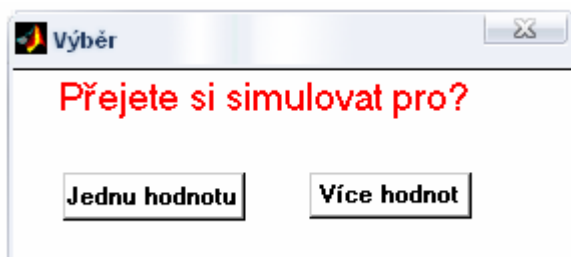
Zde nalezneme pevné hodnoty konstrukčních parametrů reaktoru a technologických vlastností médií procházející reaktorem a konstanty nutné pro výpočet. Vše znázorněné na (obr. VII):



Obr. VII. Submenu konstrukce

**2***Ustálený stav*

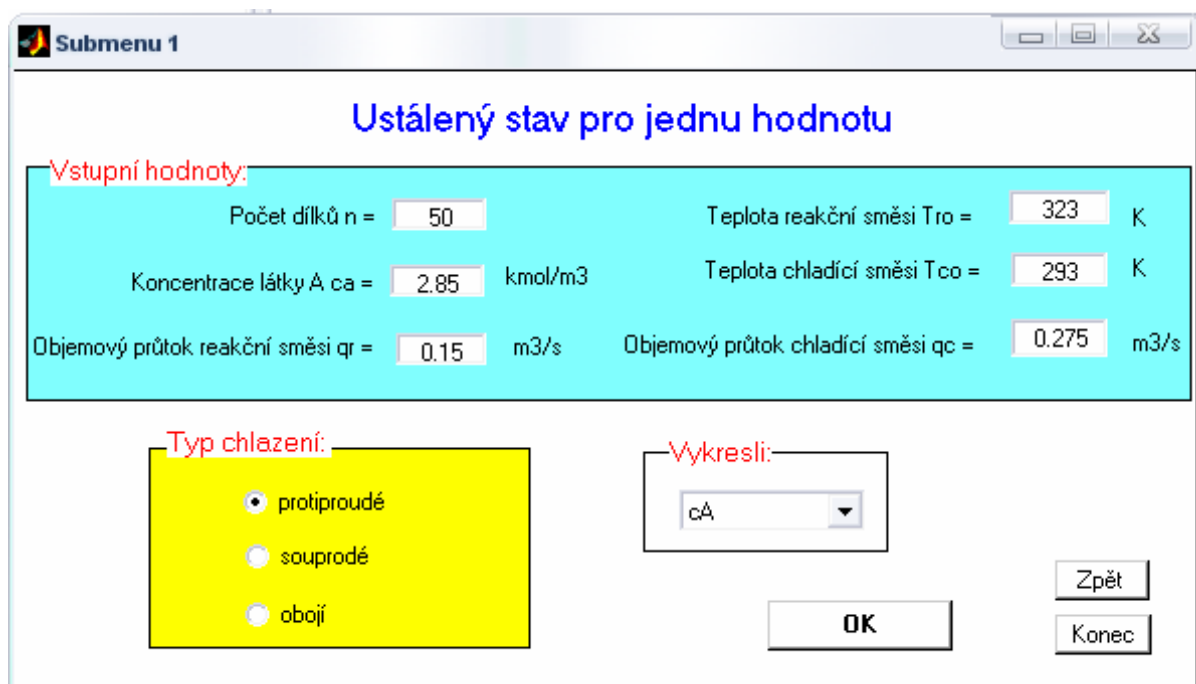
Kliknutím se zobrazí nabídka simulace pro jednu nebo více hodnot:



*Obr. VIII. Nabídka simulace pro jednu nebo více hodnot*

*Jednu hodnotu (submenu 1):*

V tomto submenu můžeme simulovat ustálený stav reaktoru pro jednu hodnotu s možností porovnávat souproudé a protiproudé chlazení:



*Obr. IX. Submenu pro simulaci ustáleného stavu pro jednu hodnotu*



Více hodnot (submenu 2):

V tomto submenu můžeme porovnávat vliv více hodnot vstupních veličin průtoku reakční směsi  $q_r$  a průtoku chladicí směsi  $q_c$  na hodnoty ustálených stavů stavových veličin. Množství vstupních hodnot je libovolné.

**Submenu 2**

### Ustálený stav pro více hodnot

**Vstupní hodnoty:**

Počet dílků  $n =$        Teplota reakční směsi  $T_{ro} =$   K

Koncentrace látky A  $c_a =$   kmol/m<sup>3</sup>      Teplota chladicí směsi  $T_{co} =$   K

Objemový průtok reakční směsi  $q_r =$   m<sup>3</sup>/s      Objemový průtok chladicí směsi  $q_c =$   m<sup>3</sup>/s

**Průtoky chladicí směsi:**

m<sup>3</sup>/s

**Průtoky reakční směsi:**

m<sup>3</sup>/s

**Typ chlazení:**

protiproudé

souprodé

**Vykreslit:**

Obr. X. Submenu pro simulaci ustáleného stavu pro libovolný počet vstupních hodnot

### 3 Dynamika

Kliknutím se zobrazí nabídka simulace pro jednu nebo více hodnot (Obr. VIII).

Jednu hodnotu (submenu 5):

Toto submenu řeší dynamické charakteristiky stavových veličin pro jednu hodnotu změny vstupní veličiny. Součástí je i porovnání protiproudého a souproudého chlazení.

**Submenu 5**

### Dynamika pro jednu hodnotu

**Vstupní hodnoty:**

Počet dílků $n =$	<input type="text" value="50"/>		Teplota reakční směsi $T_{ro} =$	<input type="text" value="323"/>	K
Koncentrace látky A $c_a =$	<input type="text" value="2.85"/>	kmol/m <sup>3</sup>	Teplota chladicí směsi $T_{co} =$	<input type="text" value="293"/>	K
Objemový průtok reakční směsi $q_r =$	<input type="text" value="0.15"/>	m <sup>3</sup> /s	Konec simulace $t_f =$	<input type="text" value="180"/>	s
Objemový průtok chladicí směsi $q_c =$	<input type="text" value="0.275"/>	m <sup>3</sup> /s	Integrační krok	<input type="text" value="0.1"/>	s
Začátek simulace $t_o =$	<input type="text" value="0"/>	s			

**Skoky vstupních veličin:**

delta $q_c =$	<input type="text" value="0.055"/>	m <sup>3</sup> /s
delta $q_r =$	<input type="text" value="0"/>	m <sup>3</sup> /s
delta $c_a =$	<input type="text" value="0"/>	kmol/m <sup>3</sup>
delta $T_r =$	<input type="text" value="0"/>	K
delta $T_c =$	<input type="text" value="0"/>	K

**Typ chlazení:**

- protiproudé
- souprodé
- obojí

**Vykresli:**

OK  
Zpět  
Konec

Obr. XI. submenu pro simulaci dynamických charakteristik pro jednu hodnotu

Více hodnot (submenu 6):

V tomto submenu můžeme porovnávat vliv různých hodnot vstupních veličin na hodnoty dynamických vlastností stavových veličin pro libovolný počet vstupních hodnot.

**Submenu 6**

### Dynamika pro více hodnot

**Vstupní hodnoty:**

Počet dílků  $n =$        Teplota reakční směsi  $T_{ro} =$   K

Koncentrace látky A  $c_a =$   kmol/m<sup>3</sup>      Teplota chladící směsi  $T_{co} =$   K

Objemový průtok reakční směsi  $q_r =$   m<sup>3</sup>/s      Objemový průtok chladící směsi  $q_c =$   m<sup>3</sup>/s

Začátek simulace  $t_o =$   s      Konec simulace  $t_f =$   s      Integrační krok =  s

**Skoková změny rychlosti chladící kapaliny  $q_c$**

**Skokové změny rychlosti reakční směsi  $q_r$ :**

**Skokové změny koncentrace látky A  $c_A$ :**

**Skokové změny vstupní teploty reakční směsi  $T_{rvs}$**

**Skokové změny vstupní teploty chladící směsi  $T_{cvs}$**

**Typ chlazení:**

protiproudé

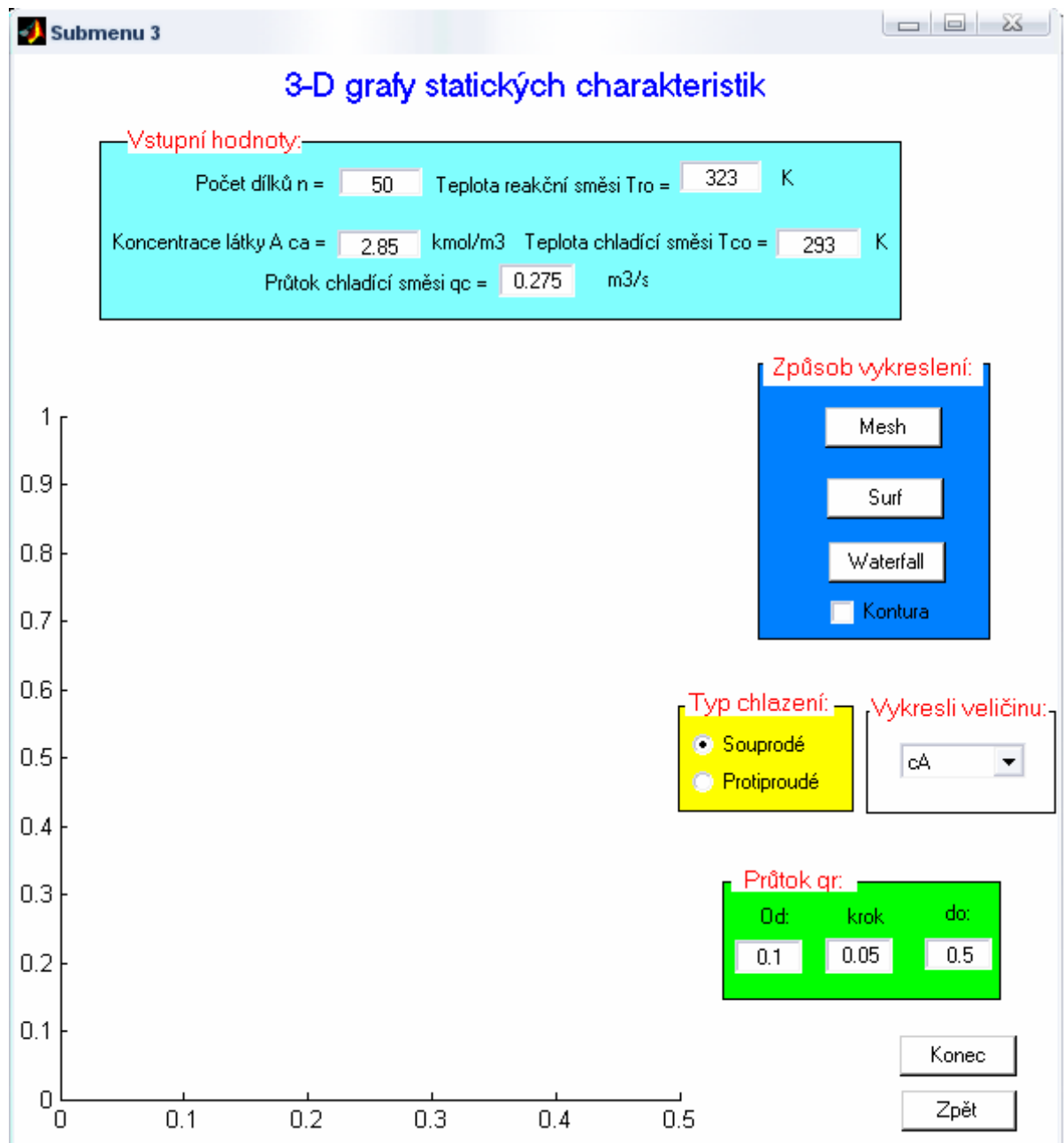
souprodé

**Vykresli:**

Obr. XII. Submenu pro simulaci dynamických hodnot pro libovolný počet vstupních veličin

**4***3D grafy statických charakteristik (submenu 3)*

Toto submenu vykresluje simulace 3D grafů pro různé průtoky reakční směsi v závislosti na délce reaktoru a hodnoty odpovídající stavové veličiny.



Obr. XIII. Submenu pro simulaci 3D grafů statických charakteristik

**5** 3D grafy dynamických charakteristik (submenu 4)

Toto submenu vykresluje 3D grafy dynamických charakteristik, jedná se o závislost stavové veličiny na délce reaktoru a času.

**Submenu 4**

### 3D grafy dynamických charakteristik

**Vstupní hodnoty:**

Průtok chladicí směsi  $q_c = 0.275$  m<sup>3</sup>/s      Teplota reakční směsi  $T_{ro} = 323$  K  
Průtok reakční směsi  $q_r = 0.15$  m<sup>3</sup>/s      Teplota chladicí směsi  $T_{co} = 293$  K  
Koncentrace látky A  $c_a = 2.85$  kmol/m<sup>3</sup>      Začátek simulace  $t_0 = 0$  s  
Integrační krok  $0.2$       Počet dílků  $n = 50$       Konec simulace  $t_f = 80$  s

**Vykresli:**  
cA

**Způsob vykreslení:**  
Mesh  
Surf  
Waterfall

**Skoky vstupních veličin:**  
delta  $q_c = 0.055$  m<sup>3</sup>/s  
delta  $q_r = 0$  m<sup>3</sup>/s  
delta  $c_a = 0$  kmol.m<sup>-3</sup>  
delta  $T_r = 0$  K  
delta  $T_c = 0$  K

**Typ chlazení:**  
 Souprodé      Konec  
 Protiproudé      Zpět

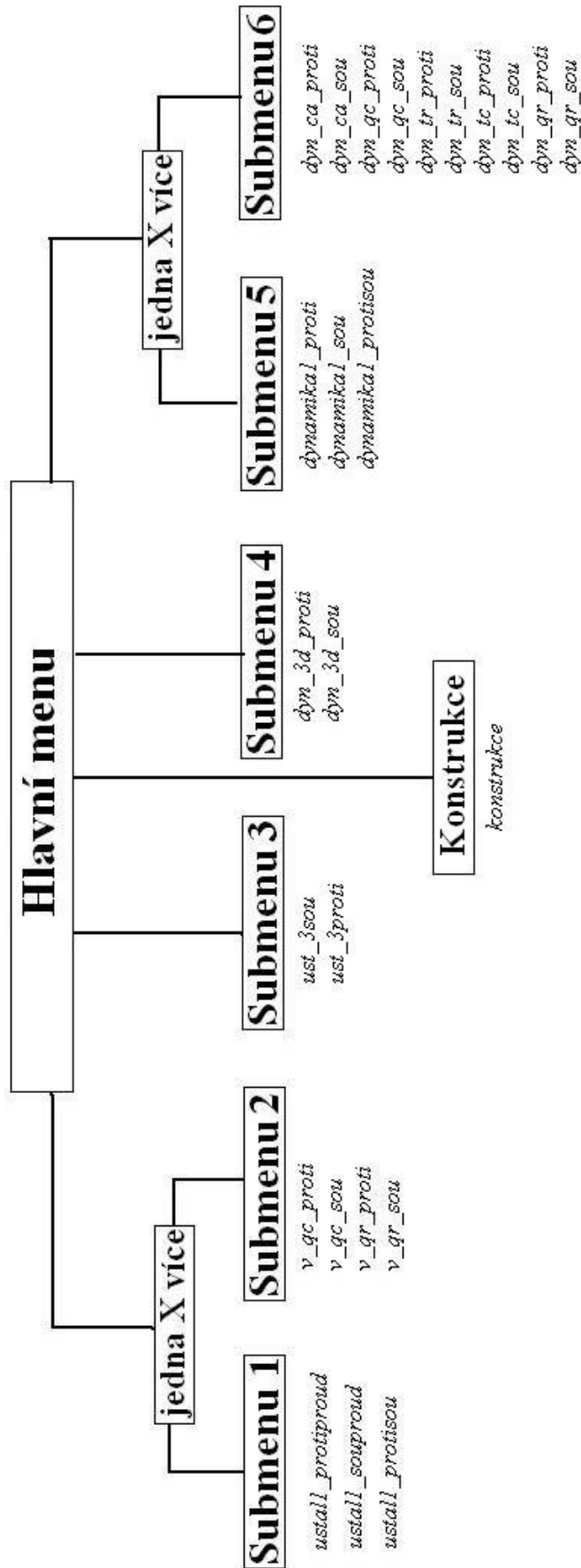
Obr. XIV. Submenu pro simulaci 3D grafů dynamických charakteristik

**6** Konec

Aktivací tlačítka se ukončí a uzavře celý program.

Program je uložen na CD a přiložen k diplomové práci. Obsahuje 24 „m-file“. V příloze P II je zobrazena celá struktura a přiřazení jednotlivých „m-file“ k submenům.

PŘÍLOHA P II: STRUKTURA PROGRAMU



- Submenu 1 - Ustálený stav pro jednu hodnotu
- Submenu 2 - Ustálený stav pro více hodnot
- Submenu 3 - 3D grafy statických charakteristik
- Submenu 4 - 3D grafy dynamických charakteristik
- Submenu 5 - Dynamika pro jednu hodnotu
- Submenu 6 - Dynamika pro více hodnot

## PŘÍLOHA P III: ZDROJOVÝ KÓD PRO SIMULACI USTÁLENÉHO STAVU

```
1 %Zdrojový kód pro výpočet ustáleného stavu
2 d1=0.02; %vnitřní průměr trubky
3 d2=0.024; %vnější průměr trubky
4 d3=1; %vnitřní průměr reaktoru
5 n1=1200; %počet trubek
6 L=8; %délka reaktoru
7 n=50; %počet dílků
8 h=L/n; %délka kroku
9 q_r=0.15; %průtok reakční směsi
10 f_r=(n1*pi*(d1^2))/4; %konstanta objem. elementu reakční směsi
11 v_r=q_r/f_r; %rychlost proudění reakční směsi
12 q_c=0.275; % průtok chladiva
13 f_c=(pi/4)*((d3^2)-(n1*(d2^2)));%konstanta objem. elementu chladiva
14 v_c=q_c/f_c; %rychlost proudění chladiva
15 ro_r=985; %hustota reakční směsi
16 ro_s=7800; %hustota materiálu stěny
17 ro_c=998; %hustota chladiva
18 cp_r=4.05; %měrné teplo reakční směsi
19 cp_s=0.71; %měrné teplo materiálu stěny
20 cp_c=4.18; %měrné teplo chladiva
21 alfa1=2.8; %koef. přestupu tepla z reakční směsi do stěny
22 alfa2=2.56; %koef. přestupu tepla ze stěny do chladicí kap.
23 k10=5.61e16; %frekvenční faktor reakce A -> B
24 k20=1.128e18; %frekvenční faktor reakce B -> C
25 hr1=5.8e4; %reakční entalpie reakce A -> B
26 hr2=1.8e4; %reakční entalpie reakce B -> C
27 er1=13477; %E1/R
28 er2=15290; %E2/R
29 a=1/(ro_r*cp_r); %zjednodušující konstanta
30 cAvs=2.85; %vstupní koncentrace látky A
31 Trv=323; %vstupní teplota reakční směsi
32 Tcv=293; %vstupní teplota chladiva
33 eps=0.001; %přesnost iterace
34 % výpočet konstant
35 X0=v_r/h;
36 X1=(4*alfa1)/(d1*ro_r*cp_r);
37 X2=(d1*alfa1)/((d1*alfa1)+(d2*alfa2));
38 X3=v_c/h;
39 X4=(4*n1*d2*alfa2)/(((d3^2)-(n1*(d2^2)))*ro_c*cp_c);
```



```

40 %naplnění vstupních hodnot
41 for i=1:n                %cyklus od jedna až n hodnot
42 Tr(i)=Trv;              %vstupní aproximace pro  $T_r$ 
43 Tc(i)=Tcv;              %vstupní aproximace pro  $T_c$ 
44 Ts(i)=(Tr(i)-Tc(i))/2;  %vstupní aproximace pro  $T_s$ 
45 end
46 % naplnění průměrných teplot
47 Tr_prum=Trv;
48 Tc_prum=Tcv;
49 % vnější iterační cyklus
50 for o=1:1000            %cyklus pro iterace
51 % parametry pro porovnání následujících iterací
52 L1(o)=Tr_prum;         %parametr pro teplotu reakční směsi
53 L2(o)=Tc_prum;         %parametr pro teplotu chladiva
54 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% část pro protiproudé chlazení
55 %vnitřní cyklus
56 k1(1)=k10*(exp(-er1/Tr(1)));%první hodnota rychlostní konstanty k1
57 k2(1)=k20*(exp(-er2/Tr(2)));%první hodnota rychlostní konstanty k2
58 cA(1)=(X0*cAvs)/(X0+k1(1)); %první hodnota koncentrace látky A
59 cB(1)=(k1(1)*cA(1))/(X0+k2(1));%první hodnota koncentrace látky B
60 cC(1)=k2(1)*cB(1)/X0;    %první hodnota koncentrace látky C
61 Qr(1)=hr1*k1(1)*cA(1)+hr2*k2(1)*cB(1);%první hodnota reakčního tepla
62 Ts(1)=X2*Tr(1)+((1-X2)*Tc(1)); %první hodnota teplota stěn reaktoru
63 Tr(1)=((a*Qr(1))+(X0*Trv)+(X1*Ts(1)))/(X0+X1);%první hodnota  $T_r$ 
64 suma1=Tr(1);           %první hodnota sumy teploty reakční směsi Tr
65 suma2=Tc(n);           %první hodnota sumy teploty chladiva Tc
66 for i=2:n                % cyklus od dvou po n - hodnot
67 k1(i)=k10*(exp(-er1/Tr(i))); %i-tá hodnota rychlostní konstanty k1
68 k2(i)=k20*(exp(-er2/Tr(i))); %i-tá hodnota rychlostní konstanty k2
69 cA(i)=(X0*cA(i-1))/(X0+k1(i)); %i-tá hodnota koncentrace látky A
70 cB(i)=((k1(i)*cA(i))+(X0*cB(i-1)))/(X0+k2(i));%i-tá hodnota kon.l. B
71 cC(i)=cC(i-1)+k2(i)*cB(i)/X0; %i-tá hodnota koncentrace látky C
72 Qr(i)=hr1*k1(i)*cA(i)+(hr2*k2(i)*cB(i));%i-tá hodnota reakčního tep.
73 Ts(i)=X2*Tr(i)+((1-X2)*Tc(i)); %i-tá hodnota teploty stěn
74 Tr(i)=((a*Qr(i))+(X0*Tr(i-1))+(X1*Ts(i)))/(X0+X1);%i-tá hodnota  $T_r$ 
75 suma1=suma1+Tr(i);      %i-tá hodnota sumy reakční teploty
76 j=n-i+1;                %opačné odpočítávání pro hodnoty Tc
77 Tc(j)=((X3*Tc(j+1))+(X4*Ts(j)))/(X3+X4);%j-tá hodnota pro  $T_c$ 
78 suma2=suma2+Tc(j);     %j-tá hodnota pro sumu Tc
79 end                      %konec vnitřního cyklu
80 Tc(n)=((X3*Tcv)+(X4*Ts(n)))/(X3+X4); %poslední hodnota Tc

```

```

81 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%konec části pro protiproudé chlazení
82 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%část pro souproudé chlazení
83 k1(1)=k10*(exp(-er1/Tr(1)));%první hodnota rychlostní konstanty k1
84 k2(1)=k20*(exp(-er2/Tr(2)));%první hodnota rychlostní konstanty k2
85 cA(1)=(X0*cAvs)/(X0+k1(1)); %první hodnota koncentrace látky A
86 cB(1)=(k1(1)*cA(1))/(X0+k2(1));%první hodnota koncentrace látky B
87 cC(1)=k2(1)*cB(1)/X0; %první hodnota koncentrace látky C
88 Qr(1)=hr1*k1(1)*cA(1)+hr2*k2(1)*cB(1);%první hodnota reakčního tepla
89 Ts(1)=X2*Tr(1)+((1-X2)*Tc(1));%první hodnota teplota stěn reaktoru
90 Tr(1)=((a*Qr(1))+(X0*Trv)+(X1*Ts(1)))/(X0+X1);%první hodnota Tr
91 Tc(1)=((X3*Tcv)+(X4*Ts(1)))/(X3+X4);%první hodnota teploty chladiwa
92 suma1=Tr(1); %první hodnota sumy teploty Tr
93 suma2=Tc(1); %první hodnota sumy Tc
94 for i=2:n %cyklus od dvou po n - hodnot
95 k1(i)=k10*(exp(-er1/Tr(i)));%i-tá hodnota rychlostní konstanty k1
96 k2(i)=k20*(exp(-er2/Tr(i)));%první hodnota rychlostní konstanty k2
97 cA(i)=(X0*cA(i-1))/(X0+k1(i));%i-tá hodnota koncentrace látky A
98 cB(i)=((k1(i)*cA(i))+(X0*cB(i-1)))/(X0+k2(i));%i-tá hodnota cB
99 cC(i)=cC(i-1)+k2(i)*cB(i)/X0;%i-tá hodnota koncentrace látky C
100 Qr(i)=hr1*k1(i)*cA(i)+(hr2*k2(i)*cB(i));%i-tá hodnota reak. tepla
101 Ts(i)=X2*Tr(i)+((1-X2)*Tc(i));%první hodnota teplota stěn reaktoru
102 Tr(i)=((a*Qr(i))+(X0*Tr(i-1))+(X1*Ts(i)))/(X0+X1);%i-tá hodnota Tr
103 suma1=suma1+Tr(i); %i-tá hodnota sumy reakční teploty
104 Tc(i)=((X3*Tc(i-1))+(X4*Ts(i)))/(X3+X4);%i-tá hodnota pro tepl. Tc
105 suma2=suma2+Tc(i); %i-tá hodnota pro sumu Tc
106 end %konec vnitřního cyklu
107 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%konec části pro souproudé chlazení
108 Tr_prum=suma1; %průměrná teplota reakční směsi
109 Tc_prum=suma2/n; %průměrná hodnota teploty chladiwa
110 chyba(o)=(abs(Tr_prum-L1(o))+abs(Tc_prum-L2(o)));
%rozdíl předcházející a současné hodnoty
111 if chyba(o)<eps %je-li rozdíl menší než eps
112 break %konec iterace je - li splněno předcházející
113 end %konec podmínky if
114 end %konec vnějšího cyklu
115 y_ust=[cA; cB; cC; Tr; Ts; Tc];%ustálené hodnoty stavových veličin
v matici

```

## PŘÍLOHA P IV: ZDROJOVÝ KÓD PRO SIMULACI DYNAMICKÝCH CHARAKTERISTIK

```

1 y_ust;           %počáteční hodnoty získané vypočítáním ustal. stavu
2 %výpočet konstant
3 X5=(4*d1*alfa1)/((d2^2-d1^2)*ro_s*cp_s);
4 X6=(4*d2*alfa2)/((d2^2-d1^2)*ro_s*cp_s);
5 X7=1/a;
6 krok=0.1;           %integrační krok
7 u_1=0.055;         %skok qc
8 u_2=0;             %skok qr
9 u_3=0;             %skok cA
10 u_4=0;            %skok Tr
11 u_5=0;            %skok Tc
12 t0=0;             %startovací čas
13 tf=200;           %konečný čas
14 ii=1;%pomocná hodn. pro ukládání veličin z posledního dílku reaktoru
15 tt=0;             % čas t0
16 h1=0.1;           %integrační krok
17 fd=y_ust;         %pomocné pole
18 qc= q_c +u_1;     %skok qc
19 vc=qc/f_c;        %přepočtení rychlosti chladiwa
20 X3=vc/h;          %přepis konstanty
21 qr=q_r+u_2;       %skok qr
22 vr=qr/f_r;        %přepočtení rychlosti reak. směsi
23 X0=vr/h;          %přepsání konstanty v důsledku skokové změny
24 cav=cAvs+u_3;     %skok cA
25 tv=Trv+u_4;       %skok Tr
26 tcv=Tcv+u_5;      %skok Tc
27 y=fd;             %uložení do pomocného pole
28 for i=1:n          %cyklus pro počáteční hodnoty k1 a k2
29 k1(i)=k10*(exp(-er1/y(4,i))); %i-tá hodnota z ustálené hodnoty
30 k2(i)=k20*(exp(-er2/y(4,i))); %i-tá hodnota z ustálené hodnoty
31 Qr(i)=(hr1*k1(i)*y(1,i)+(hr2*k2(i)*y(2,i)))/X7;%i-tá hodnota z ust.
32 end                %konec cyklu pro počáteční hodnoty k1 a k2
33 for tt=t0:krok:tf  %cyklus pro čas s konstantním krokem
34 for il=1:5         %cyklus pro výpočet w1,...5 RKF
35 %%%%%%%%%%%%%%část pro protiproudé chlazení
36 %definování pravých stran
37 %první hodnoty
38 f(1,1)=- (X0+k1(1))*y(1,1)+X0*cav;           %cA

```

```

39 f(2,1)=-(X0+k2(1))*y(2,1)+k1(1)*y(1,1); %CB
40 f(3,1)=k2(1)*y(2,1)-X0*y(3,1); %CC
41 f(4,1)=-(X0+X1)*y(4,1)+Qr(1)+X0*tv+X1*y(5,1); %Tr
42 f(5,1)=-(X5+X6)*y(5,1)+X5*y(4,1)+X6*y(6,1); %Ts
43 %další hodnoty
44 for i=2:n
45 f(1,i)=-(X0+k1(i))*y(1,i)+X0*y(1,i-1); %CA
46 f(2,i)=-(X0+k2(i))*y(2,i)+k1(i)*y(1,i)+X0*y(2,i-1); %CB
47 f(3,i)=k2(i)*y(2,i)-X0*y(3,i)+X0*y(3,i-1); %CC
48 f(4,i)=-(X0+X1)*y(4,i)+Qr(i)+X0*y(4,i-1)+X1*y(5,i); %Tr
49 f(5,i)=-(X5+X6)*y(5,i)+X5*y(4,i)+X6*y(6,i); %Ts
50 m=n-i+1;%opačně odpočítávání kvůli protiproudém chlazení
51 f(6,m)=-(X3+X4)*y(6,m)+X3*y(6,m+1)+X4*y(5,m); %Tc
52 end
53 f(6,n)=-(X3+X4)*y(6,n)+X3*tcv+X4*y(5,n);%hodnota Tc v posl. dílku
54 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% konec části pro protiproudé chlazení
55 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%část pro souproudé chlazení
56 %definování pravých stran
57 %první hodnoty
58 f(1,1)=-(X0+k1(1))*y(1,1)+X0*cav; %CA
59 f(2,1)=-(X0+k2(1))*y(2,1)+k1(1)*y(1,1); %CB
60 f(3,1)=k2(1)*y(2,1)-X0*y(3,1); %CC
61 f(4,1)=-(X0+X1)*y(4,1)+Qr(1)+X0*tv+X1*y(5,1); %Tr
62 f(5,1)=-(X5+X6)*y(5,1)+X5*y(4,1)+X6*y(6,1); %Ts
63 f(6,1)=-(X3+X4)*y(6,1)+X3*tcv+X4*y(5,1); %Tc
64 % další hodnoty
65 for i=2:n
66 f(1,i)=-(X0+k1(i))*y(1,i)+X0*y(1,i-1); %CA
67 f(2,i)=-(X0+k2(i))*y(2,i)+k1(i)*y(1,i)+X0*y(2,i-1); %CB
68 f(3,i)=k2(i)*y(2,i)-X0*y(3,i)+X0*y(3,i-1); %CC
69 f(4,i)=-(X0+X1)*y(4,i)+Qr(i)+X0*y(4,i-1)+X1*y(5,i); %Tr
70 f(5,i)=-(X5+X6)*y(5,i)+X5*y(4,i)+X6*y(6,i); %Ts
71 f(6,i)=-(X3+X4)*y(6,i)+X3*y(6,i-1)+X4*y(5,i); %Tc
72 end
73 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% konec části pro souproudé chlazení
74 % výpočet k1...5
75 fh(:, :, i1)=h1*f(:, :, :); %W1
76 if i1==1
77 y(:, :, :)=fd(:, :, :)+(1/4*fh(:, :, i1)); %W2
78 end
79 if i1==2

```

```

80 y(:, :)=fd(:, :)+3/32*fh(:, :, i1-1)+9/32*fh(:, :, i1);           %w3
81 end
82 if i1==3
83 y(:, :)=fd(:, :)+1932/2197*fh(:, :, i1-2)-7200/2197*fh(:, :, ...
84 i1-1)+7296/2197*fh(:, :, i1);                                     %w4
85 end
86 if i1==4
87 y(:, :)=fd(:, :)+439/216*fh(:, :, i1-3)-8*fh(:, :, ...
88 i1-2)+3680/513*fh(:, :, i1-1)-845/4104*fh(:, :, i1);           %w5
89 end
90 end                                     %konec cyklu s i1
91 %výpočet nových hodnot
92 fd=fd+25/216*fh(:, :, 1)+1408/2565*fh(:, :, 3)+2197/4104...
93 *fh(:, :, 4)-1/5*fh(:, :, 5);                                       %y
94 y=fd;
95 %přepočet k1, k2 a Qr do dalšího cyklu
96 for i=1:n
97 k1(i)=k10*(exp(-er1/y(4,i)));
98 k2(i)=k20*(exp(-er2/y(4,i)));
99 Qr(i)=(hr1*k1(i)*y(1,i)+(hr2*k2(i)*y(2,i)))/X7;
100 end
101 yv(1)=y(1,n)-y_ust(1,n);      %odchylka cA od ustáleného stavu
102 yv(2)=y(2,n)-y_ust(2,n);      %odchylka cB od ustáleného stavu
103 yv(3)=y(3,n)-y_ust(3,n);      %odchylka cC od ustáleného stavu
104 yv(4)=y(4,n)-y_ust(4,n);      %odchylka Tr od ustáleného stavu
105 yv(5)=y(5,n)-y_ust(5,n);      %odchylka Ts od ustáleného stavu
106 yv(6)=y(6,1)-y_ust(6,1);      %odchylka Tc od ustáleného stavu(u
    souproudého přepsat místo 1 na n)
107 vys(ii,:)= [tt, yv]; %uchovávání hodnot z posledního dílku reaktoru
108 ii=ii+1;           %Navýšení pro uchování hodnot z dalšího cyklu
109 end                 %konec cyklu pro čas tt
110 vys;               %hodnoty z posledního dílku reaktoru (hodnoty pro simulaci)

```

*Pozn.: Budete-li kopírovat tento zdrojový soubor do editoru MATLABu. Je třeba vždy umazat jednu z částí pro typ chlazení. Pro lepší názornost je protiproudá část označena modře a souproudá část červeně, dále je třeba zrušit číslování (označením zdrojového kódu a kliknutím na ikonku formát číslování). Pro vykreslení ustálených hodnot se použije syntaxe: `plot(1:1:n,V)`, kde místo  $V$  se dosadí stavová veličina, buď  $cA$ ,  $cB$ ,  $cC$ ,  $Tr$ ,  $Ts$ ,  $Tc$  (přesně jak je zde napsáno).*

*Při simulaci dynamických vlastností se nejdříve nakopíruje do editoru MATLABu část pro počítání ustáleného stavu a pod něj nebo do nového "m-file" část pro počítání dynamických vlastností, opět s vymazáním syntaxe pro jeden typ chlazení. Vykreslení se provede syntaxí: `plot(vys(:,1),vys(:,D))`, kde místo  $D$  se napíše číslice 2 – 7.*

*Přiřazení čísel k veličinám:*

*2 – koncentrace látky A*

*3 – koncentrace látky B*

*4 – koncentrace látky C*

*5 – teplota reakční směsi*

*6 – teplota stěn reaktoru*

*7 – teplota chladiva*

*Může se stát, že při kopírování do editoru MATLABu program "nepřečte" tři tečky na konci řádku, který má pokračování na následujícím. Proto je třeba tyto tečky dodělat (tečky se dělají jestliže máme jednu výpočetní operaci a nevejde se nám na řádek a pokračujeme na následujícím).*