

SIMULACE PRŮTOČNÉHO CHEMICKÉHO REAKTORU PRO RŮZNÉ TYPY REAKCÍ

Bc. Marek Dostál

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 DOSTÁL**
Studijní program: **N 2807 Chemické a procesní inženýrství**
Studijní obor: **Automatizace a řídicí technika**

Téma práce: **SIMULACE PRŮTOČNÉHO CHEMICKÉHO REAKTORU
PRO RŮZNÉ TYPY REAKCÍ**

Zásady pro vypracování:

1. Proveďte literární rešerši v oblasti modelování a simulace průtočných chemických reaktorů (CSTR).
2. Uveďte postup při tvorbě matematického modelu.
3. Vytvořte matematické modely CSTR reaktorů pro různé reakce.
4. Simulujte statické a dynamické charakteristiky pro tyto modely.
5. Proveďte zhodnocení dosažených výsledků.

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., Přenosil, 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] Schmidt, L. D.: **The Engineering of Chemical Reactions.** Oxford University Press US, 1997

[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

Obsahem této diplomové práce je zkoumání ustálených stavů a dynamiky procesů chemických průtočných reaktorů s chlazením v plášti pro různé typy reakcí v něm reagujících. Pro zkoumání byla zvolena metoda nepřímého modelování, tzn. určení matematického modelu a simulace jeho chování ve vytvořeném programovém rozhraní. Pro zkoumání ustálených stavů byla popsána a využita metoda prosté iterace a pro zkoumání dynamiky metoda Runge-Kutta čtvrtého řádu. Zkoumání probíhalo s pomocí odchylkových tvarů modelů, vytvořených jejich linearizací v okolí pracovního bodu. Vytvořený program nabízí možnost komplexní simulace statických charakteristik a dynamiky. Dynamiku lze zkoumat jak pro změnu jedné veličiny, tak i pro více změn působících současně. Program byl vytvořen v rozhraní programového balíku MATLAB verze 6.5.

Klíčová slova: CSTR, metoda prosté iterace, Runge – Kutta, linearizace, simulace, odchylkový model

ABSTRACT

The content of my thesis is solving of the steady states and dynamics of processes inside of the Continuous Stirred Tank Reactors with cooling in the jacket for different types of reactions. For the solving was chosen the method of indirect modeling, which means working with general mathematical model and with simulations of this model in the created program. For the solving of steady states was used and described the simple iteration method and for the solving of dynamics part the fourth order Runge – Kutta method. The research was done through difference models that were created in the neighbourhood of optimal working point. Created program offers the possibility of complex simulations of the steady states and dynamics. Dynamics can be computed for only one effecting change of value as well as for more simultaneously effecting changes. Program was written in MATLAB version 6.5.

Keywords: CSTR, Simple Iteration Method, the 4th order Runge – Kutta Method, linearization, simulation, difference model.

Děkuji tímto svému školiteli ing. Jiřímu Vojtěškovi za významnou pomoc při vzniku této práce, za odborné vedení a za příkladnou trpělivost a čas který mě i mé práci věnoval.

Děkuji také svým rodičům, že mi umožnili dojít ve studiu až k tvorbě této práce, jež je završením mého dosavadního vzdělání. Děkuji jim za veškerou nemalou péči a pomoc, kterou mi věnovali.

Ve Zlíně dne 23.5.2006

Bc. Marek Dostál

OBSAH

ÚVOD	8
I TEORETICKÁ ČÁST	9
1 CHEMICKÉ REAKTORY	10
1.1 TYPY REAKTORŮ	10
1.1.1 Obecné rozdělení reaktorů	10
1.2 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR S CHLAZENÍM V PLÁŠTI	11
1.2.1 Počáteční předpoklady	12
1.2.2 Tvorba modelů reaktorů	13
1.3 SIMULACE MODELŮ	15
1.3.1 Výpočet ustálených stavů	15
1.3.2 Metoda prosté iterace	15
1.3.3 Řešení dynamiky systémů	16
1.3.4 Metoda Runge – Kutta čtvrtého řádu	17
1.3.5 Nelineární systém	17
1.3.6 Linearizace nelineárního systému	18
1.3.7 Linearizace za pomoci Taylorova polynomu	18
1.3.8 Určení linearizovaného matematického modelu	19
1.4 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR – OBECNÁ EXOTERMICKÁ REAKCE	22
1.4.1 Odvození modelu	22
1.4.2 Odchylkový tvar modelu	24
1.5 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR – REAKCE TYPU „VAN DER VUSSE“	26
1.5.1 Odvození modelu	26
1.5.2 Odchylkový tvar modelu	29
1.6 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR – IZOTERMICKÁ REAKCE	30
1.6.1 Model reaktoru	30
1.6.2 Odchylkový tvar matematického modelu	32
II PRAKTICKÁ ČÁST	35
2 KONSTANTY A VSTUPNÍ PARAMETRY PROGRAMU	36
2.1 VÝPOČET USTÁLENÝCH STAVŮ A DYNAMIKY SOUSTAVY	36
2.2 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR – OBECNÁ EXOTERMICKÁ REAKCE	37
2.2.1 Zadané hodnoty	37
2.2.2 Zvolené vstupní veličiny	37
2.2.3 Výpočet optimálního pracovního bodu	38
2.2.4 Dynamika soustavy	39
2.3 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR – REAKCE TYPU „VAN DER VUSSE“	45
2.3.1 Zadané hodnoty	45
2.3.2 Zvolené vstupní veličiny	46
2.3.3 Výpočet optimálního pracovního bodu	46
2.3.4 Zkoumání dynamiky soustavy	47
2.4 PRŮTOČNÝ CHEMICKÝ REAKTOR – IZOTERMICKÁ REAKCE	51
2.4.1 Zadané hodnoty	51

2.4.2	Statické charakteristiky	52
2.4.3	Analýza dynamiky soustavy	54
3	ZÁVĚR.....	61
	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	63
	SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK	64
	SEZNAM OBRÁZKŮ	66
	SEZNAM TABULEK.....	67
	SEZNAM PŘÍLOH.....	68

ÚVOD

Rozvoj technologie jde v dnešní době stále kupředu. S ní se rozvíjí spousta více i méně důležitých přidružených vědních oborů. Mezi jiné zde patří i obor, jenž ve své podstatě kombinuje znalosti několika oblastí technologie dohromady, a tím je automatizace. Jejím cílem je analyzovat proces, či děj, jenž je předmětem zkoumání, najít postup řešení, vytvořit prostředky a aplikovat je na proces, jež je potřeba automatizovat a tím tak dosáhnout snížení nákladů např.: na neefektivní řízení, nadbytečný personál, pomalou výrobu, apod.

Abychom mohli vyřešit jakýkoli problém, je třeba nejprve určit jeho podstatu a souvislosti se soustavou, v níž se problém objevil. Je tedy nutné problém analyzovat. Existuje několik různých způsobů, jak můžeme analýzu provést. Mezi nejpoužívanější patří analýza experimentem, nebo analýza simulací.

Experimentální analýza je poměrně přesným prostředkem určení vlastností zkoumané soustavy. Při dostatečném množství provedených měření lze dospět k velmi přesnému určení vlastností soustavy. Výhodou také je, že není potřeba znát hlubší fyzikální podstatu či vnitřní vlastnosti systému a přitom tím není experiment ovlivněn. Mezi hlavní a nezanedbatelné nevýhody však patří nutnost mít k dispozici celou měřenou soustavu a také prostředky pro provedení mnoha experimentů (což mnohdy, např.: u chemických reaktorů zpracovávajících látky, jejichž pořizovací náklady jsou vysoké, není možné).

Na druhé straně stojí simulace. Její provedení je sice mnohdy nepoměrně složitější než prostý experiment, ale její výsledky mohou být téměř stejně přesné jako reálný pokus a náklady na provedení těchto simulací mnohem menší. Je však často obtížné získat matematický model. To je jednou z nevýhod tohoto postupu. Hlavním přínosem však je, že nepotřebujeme mít fyzicky k dispozici zkoumané zařízení. Simulace tedy umožňuje takřka neomezené zkoumání procesů a počet prováděných pokusů.

Moje diplomová práce se bude zabývat zkoumáním vlastností chemického průtočného reaktoru s chlazením v plášti pro různé typy chemických reakcí v něm reagujících. Vzhledem k faktu, že se jedná o chemický reaktor, k němuž bych jen velmi těžko získával přístup k praxi, budu pro zkoumání používat metodu nepřímého modelování a chování simulovat v programu MATLAB pomocí mnou vytvořených programů.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1 CHEMICKÉ REAKTORY

1.1 Typy reaktorů

1.1.1 Obecné rozdělení reaktorů

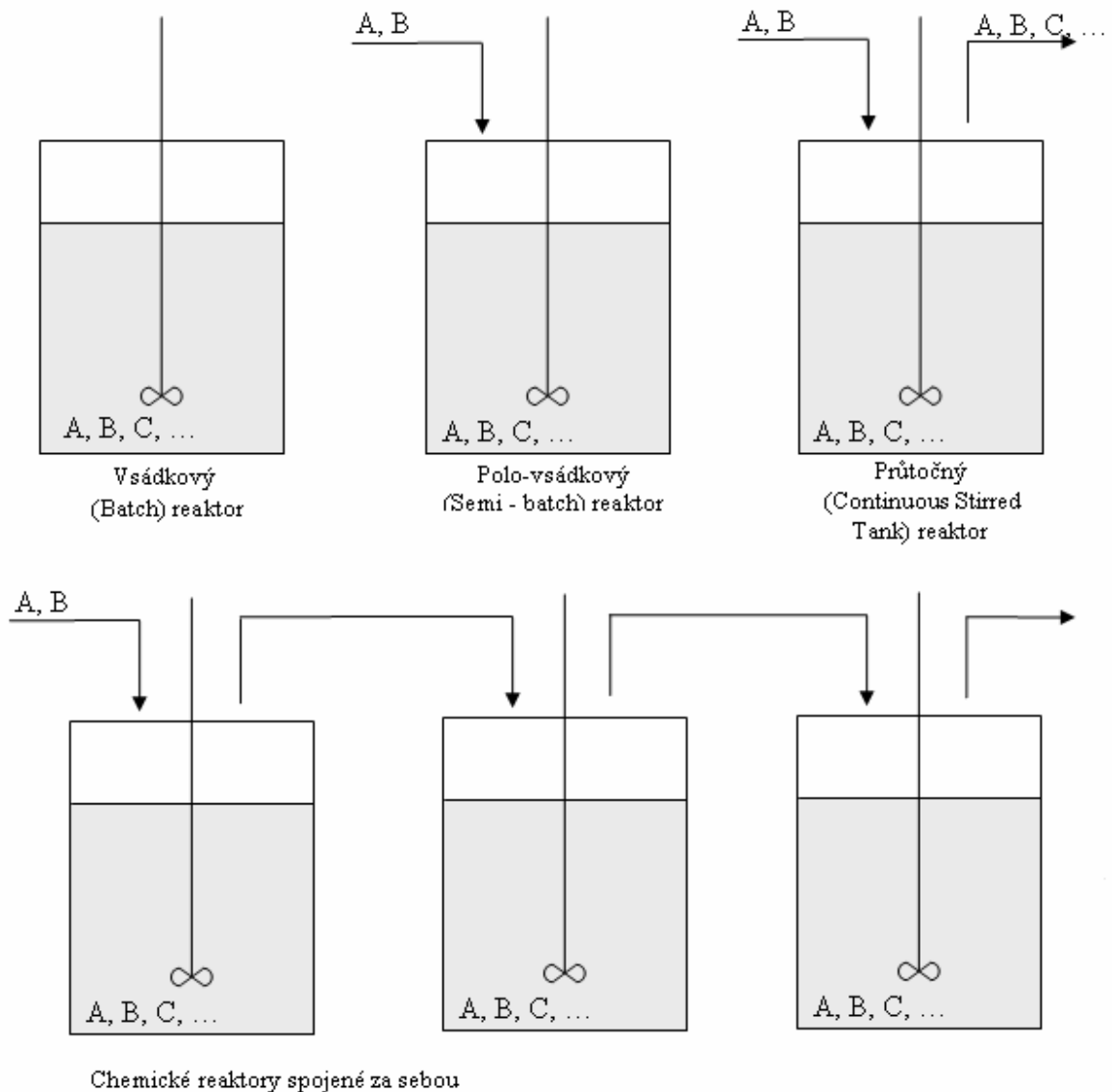
V chemických továrnách se používá několik typů chemických reaktorů v závislosti na tom, v jakých podmínkách pracují a jaké jsou na ně kladeny výrobní podmínky. V závislosti na konstrukci těchto reaktorů by se zjednodušeně daly rozdělit na několik druhů.

Vsádkový reaktor je zástupcem těch nejjednodušších reaktorů. Je to nádoba určitého objemu, nejčastěji z chemicky odolného materiálu, do které se podle požadovaného výsledku vpraví reaktanty, jenž vytvoří požadovaný produkt. Po skončení reakce je pak v reaktoru výsledný produkt a případné vedlejší produkty. Obsah reaktoru je pak vyjmut a podroben případným dalším úpravám. Reaktor je vyčištěn a připraven na další výrobní cyklus, případně však i na úplně odlišnou reakci v něm prováděnou. To je jeho výhodou. Mezi nevýhody patří, jak je zřejmé z popisu viz. výše poměrně velká časová prodleva mezi jednotlivými cykly, která je nutná na přípravu reakční směsi a vyčištění a připravení reaktoru do podmínek vhodných k dalšímu cyklu.

Tento reaktor je však obtížně říditelný a ne vždy je vhodný pro přípravu látek s konkrétními konečnými vlastnostmi. Proto se používá vylepšená verze vsádkového reaktoru, a to vsádkový reaktor s řízeným dávkováním jedné složky. Jak je vidět z názvu, je princip nasnadě. Jedna, či více látek je umístěno do reaktoru a další chemikálie, jsou dávkovány do reaktoru podle aktuální potřeby vevnitř probíhající reakce. Po dokončení plnicího cyklu je však opět nutné reaktor vyprázdnit, vyčistit a připravit pro další cyklus. Časová náročnost je tedy u tohoto reaktoru stále problémem. Je zde však velkou výhodou dávkování části chemikálií potrubím, čímž je zajištěna např.: požadovaná koncentrace, množství vstupujících látek, apod.

Posledním, ale hojně používaným reaktorem, je průtočný chemický reaktor (z angl. CSTR – Continuous Stirred Tank Reactor). Jak je vidět v názvu, jde o kontinuálně pracující reaktor, kde jsou všechny složky dávkovány podle potřeby. Jednoznačnou výhodou je neustálá práce reaktoru, kdy není potřeba po cyklech reaktor vyprazdňovat. To je obstaráno odtokem z reaktoru, kde koncentrace směsi dosahuje požadovaných hodnot.

Jednou z mála nevýhod je ale poměrně složitý proces přechodu reaktoru na tvorbu jiného výsledného produktu. Tyto reaktory se úspěšně taky zapojují do série, kde výstupní látky z jednoho reaktoru jsou vstupními do druhého.



Obr. 1: Schéma různých typů chemických reaktorů

1.2 Průtočný chemický reaktor s chlazením v plášti

V dnešní době jsou chemické reaktory (viz.[2]) součástí mnoha technologií v průmyslu. Je obecným faktem, že řízení těchto reaktorů je, vzhledem k nelinearitám reakcí v nich probíhajících a faktu, že většina z nich je silně exotermních, poměrně náročné.

Při simulacích toho reaktoru nelze do modelu zahrnout všechny vlivy, jenž ovlivňují chování uvnitř reaktoru, tak, aby byl model ještě přijatelně složitý, proto jsem při výpočtech a simulacích pracoval s matematickým modelem, do jehož tvorby byly zahrnuty následující zjednodušující předpoklady (viz.[2]).

1.2.1 Počáteční předpoklady

- Při řešení uvažuji průtočný chemický reaktor s chlazením v plášti dle obrázku (obrázek reaktoru)
- Směs reagujících látek v reaktoru i chladicí kapalina v plášti jsou dokonale promíchávány
- Zanedbávám tepelnou kapacitu stěny oddělující vnitřní prostor reaktoru a prostor s chladicím médiem
- Za konstantní veličiny považuji: objem reakční směsi v reaktoru, měrná tepla a hustoty reakční směsi a chladicí kapaliny a koeficient přechodu tepla v reaktoru
- Všechny simulované reakce uvažuji s obecnou exotermickou reakcí, kde reaguje i_0 složek v j_0 reakcích (příčemž jednotlivá složka nemusí, ale může reagovat ve všech reakcích současně)

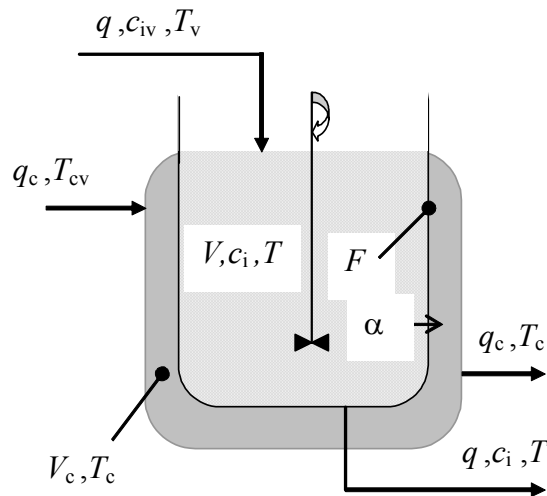
Vstupní veličiny:

- Koncentrace složek ve vstupním proudu $c_{iv}(t)$, $i = 1, \dots, i_0$
- Vstupní teplota reakční směsi $T_v(t)$
- Vstupní teplota chladiva $T_{cv}(t)$
- Oba průtoky $q(t)$ a $q_c(t)$

Stavové veličiny:

- Koncentrace složek v reaktoru $c_i(t)$, $i = 1, \dots, i_0$
- Teplota reakční směsi v reaktoru $T(t)$
- Teplota chladiva v plášti $T_c(t)$

Schéma:



Obr. 2: Obecné schéma chemického průtočného reaktoru s chlazením v plášti

kde jednotlivé veličiny jsou:

$q \rightarrow$ průtok [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$]

$c \rightarrow$ koncentrace [$\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}$]

$T \rightarrow$ teplota [K]

$F \rightarrow$ plocha přestupu [m^2]

$\alpha \rightarrow$ koeficient přestupu tepla [$\text{kJ} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]

INDEXY:

$(\cdot)_v \rightarrow$ vstupní veličina

$(\cdot) \rightarrow$ reakční směs

$(\cdot)_c \rightarrow$ chladicí směs

1.2.2 Tvorba modelů reaktorů

Při tvorbě modelů se vychází z (teplotních a hmotových) bilančních rovnic jednotlivých složek. Obecně pak tyto rovnice vypadají následovně:

Bilanční rovnice pro jednotlivé reagující složky:

$$\begin{array}{ccccccc} \boxed{\text{Množství složky}} & = & \boxed{\text{Množství složky}} & + & \boxed{\text{Množství složky}} & + & \\ \boxed{\text{vstupující do}} & & \boxed{\text{vystupující z}} & & \boxed{\text{zreagované v}} & & \\ \boxed{\text{reaktoru}} & & \boxed{\text{reaktoru}} & & \boxed{\text{reaktoru}} & & \\ & & & & & & \\ & & & & \boxed{\text{Množství složky}} & & \\ & & & & \boxed{\text{akumulované v objemu}} & & \\ & & & & \boxed{\text{V}} & & \end{array}$$

Tepelná bilance reakční směsi:

$$\begin{array}{ccccccc} \boxed{\text{Teplo vstupující}} & + & \boxed{\text{Teplo vznikající}} & = & \boxed{\text{Teplo odcházející}} & + & \\ \boxed{\text{v proudu reakční}} & & \boxed{\text{v průběhu}} & & \boxed{\text{v proudu reakční}} & & \\ \boxed{\text{směsi}} & & \boxed{\text{reakcí}} & & \boxed{\text{směsi}} & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & \boxed{\text{Teplo}} & + & \boxed{\text{Teplo}} & & \\ & & \boxed{\text{přestupující do}} & & \boxed{\text{akumulované}} & & \\ & & \boxed{\text{chladiwa}} & & \boxed{\text{v objemu V}} & & \end{array}$$

Bilance pro chladicí médium:

$$\begin{array}{ccccccc} \boxed{\text{Teplo vstupující}} & + & \boxed{\text{Teplo přestupující}} & = & \boxed{\text{Teplo odcházející}} & + & \\ \boxed{\text{do pláště v}} & & \boxed{\text{do pláště z reakční}} & & \boxed{\text{z pláště v proudu}} & & \\ \boxed{\text{proudu}} & & \boxed{\text{směsi}} & & \boxed{\text{chladicí směsi}} & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & \boxed{\text{Teplo}} & & \\ & & & & \boxed{\text{akumulované}} & & \\ & & & & \boxed{\text{v objemu } V_c} & & \end{array}$$

1.3 Simulace modelů

1.3.1 Výpočet ustálených stavů

Ustálený stav znamená, že v uvažujeme a počítáme v čase $t \rightarrow \infty$, kdy už nedochází k časovým změnám jednotlivých veličin, nebo jsou tyto změny minimální. To znamená, že při výpočtech v rovnicích, kde se vyskytují derivace podle času položíme tyto derivace rovny nule.

$$\frac{\partial(\cdot)}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

Jak takový stav bude vypadat nelze nikdy vypočítat bezchybně. Proto se používají metody, jež jsou cyklické a s jejich pomocí se můžeme požadovanému řešení přiblížit s požadovanou přesností. Existuje více iteračních metod, mezi kterými jsem mohl volit, ať už pro řešení jedné rovnice o jedné neznámé, kde se nabízí například Metoda prosté iterace, či Newtonova metoda, nebo také metody pro řešení soustav lineárních algebraických rovnic, jako jsou například Jacobiova metoda, Gauss-Seidlova metoda, apod. Pro mé účely jsem zvolil pro její jednoduchost a poměrně snadné naprogramování při zachování dostatečné přesnosti výpočtu Metodu prosté iterace (viz.[1]).

1.3.2 Metoda prosté iterace

Nelineární systémy jsou popsány obecnou rovnicí:

$$\dot{x} = f(x, n) \quad (2)$$

Počáteční podmínky jsou dány řešením rovnic v ustáleném stavu, tedy obecně:

$$f(x^S, n^S) = 0 \quad (3)$$

Úlohou je řešení nelineární soustavy $f(x) = 0$,

kde $\mathbf{f}^T = (f_1, f_2, \dots, f_n)$.

Z původní soustavy $f(x) = 0$ vytvoříme ekvivalentní soustavu

$$x = \varphi(x) \quad (4)$$

kde φ je nelineární vektor funkce $\varphi^T = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$.

Pak vytvořím iterační rovnici:

$$x^{k+1} = \varphi(x^k) \quad (5)$$

a definujeme $x^{(0)}$ → počáteční podmínky

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

Podmínka konvergence iteračního procesu - ať vektorová funkce φ je definovaná v uzavřené konvexní oblasti D , platí pro $x \in D$ také $\varphi \in D$. Ať funkce φ mají v D spojitě parciální derivace prvního řádu podle všech proměnných $x_1 \div x_n$. Ať je dále splněno $\|\varphi'(x)\| < 1$ pro každé $x \in D$.

1. Pak existuje jediné řešení $x^* \in D$ soustavy (4)
2. Iterační metoda konverguje, tzn. $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$ pro libovolné $x^{(0)} \in D$.

Tímto postupem jsem tedy dospěl k vypočtení ustálených stavů, jenž jsou použity při zkoumání dynamiky soustavy při změně vstupních parametrů.

1.3.3 Řešení dynamiky systémů

Řešení dynamických systémů (viz.[5]) je poměrně složitý proces. Za dobu, jež jsou tyto systémy řešeny bylo vyvinuto mnoho metod, jak dynamiku soustav vyšetřovat. Tyto metody by se daly rozdělit podle jistých kritérií do několika kategorií. Například na jednokrokové metody a vícekové.

Mezi jednokrokové, jež jsou svou podstatou jednodušší než metody vícekové, patří například jedna z nejjednodušších a to je Eulerova metoda [11] Mnohdy však tato metoda neposkytuje dostatečně přesné výsledky, proto byly vyvinuty metody další, například metoda Prediktor – korektor. Já jsem však pro vyšetření dynamiky zadaných úloh použil metodu Runge – Kutta čtvrtého řádu.

1.3.4 Metoda Runge – Kutta čtvrtého řádu

Důležitou metodou implicitních a explicitních iterativních metod aproximace řešení obyčejných diferenciálních rovnic je metoda Runge – Kutta čtvrtého řádu [9]. Vyvinuli kolem roku 1900 matematik Carle David Tolmé Runge a Martin Wilhem Kutta.

Nechť počáteční podmínkou úlohy je:

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0 \quad (7)$$

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

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (8)$$

kde k_i jsou konstanty dle vztahů

$$k_1 = f(t_n, y_n) \quad (9)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right) \quad (10)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right) \quad (11)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3) \quad (12)$$

1.3.5 Nelineární systém

Spojité mnohazměrový systém je popsán stavovou rovnicí

$$\frac{dx(t)}{dt} = \mathbf{f}[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)] \quad (13)$$

S počáteční podmínkou $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}^s$ a výstupní rovnicí

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{g}[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)] \quad (14)$$

kde $\mathbf{x}^T = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ je vektor stavových veličin, $\dim x = n$,

$\mathbf{u}^T = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ je vektor vstupních veličin, $\dim u = m$,

$\mathbf{y}^T = (y_1, y_2, \dots, y_r)$ je vektor výstupních veličin, $\dim y = r$,

a $\mathbf{f}^T = (f_1, f_2, \dots, f_n)$, $\mathbf{g}^T = (g_1, g_2, \dots, g_r)$ jsou nelineární vektorové funkce.

Rovnice (13) a (14) popisují nelineární ***t*-variantní** systém. Jestliže funkce ***f*** a ***g*** nezávisí explicitně na času ***t***, dostaneme popis systému ***t*-invariantního** ve tvaru

$$\frac{dx(t)}{dt} = \mathbf{f}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)] \quad (15)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{g}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)] \quad (16)$$

1.3.6 Linearizace nelineárního systému

Vzhledem k faktu, že většina systémů, jež se objevují v technologické praxi je nelineárních, nabízí se k v podstatě dvě řešení, aniž bychom museli pracovat s komplikovaným nelineárním modelem.

První možností, jak model nelineární zjednodušit, je zanedbat složky modelu, jež nelinearity způsobuje. To však lze udělat pouze a jen v případě, že tyto nelineární složky nemají esenciální vliv na chování modelu při simulaci.

Druhou možností, jak se práci s nelineárním modelem vyhnout, je linearizace modelu. Většinou se provádí v okolí pracovního bodu. Pracovním bodem označujeme podmínky, pro něž chceme simulovat chování systému, např.: podmínky, v nichž soustava pracuje optimálně, nebo podmínky, jež jsou vyžadovány normou, apod. Touto linearizací samozřejmě dochází také k jistému zkreslení modelu a znepečsnění výsledků, ale pokud se zvolí správná metoda linearizace, pak bývají výsledky velmi uspokojivé.

Pro linearizaci se nabízí několik možných metod (viz.[1]), např.: Linearizace metodou minimálních kvadratických odchylek, nebo linearizace tečnou rovinou (s pomocí Taylorova polynomu).

1.3.7 Linearizace za pomoci Taylorova polynomu

Veličiny v nelineárních modelech procesů zpravidla popisují konkrétní fyzikální veličiny a jejich hodnoty odpovídají hodnotám těchto veličin. Uvažujme mnohazměřový nelineární model nějakého procesu, popsáný stavovou rovnicí (pro zkrácení zápisu je časový argument vynechán)

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}', \mathbf{u}') \quad (17)$$

S počáteční podmínkou

$$\dot{x}(t_0) = x^{1s} \quad (18)$$

kde vektory stavu a vstupu jsou označeny čárkou v zájmu rozlišení mezi stavem a vstupem v linearizovaném modelu, který bude mít poněkud jiný význam. Rozměry vektorů odpovídající rozměrům v rovnici (13). Budeme dále předpokládat, že vazby mezi stavovými a výstupními veličinami jsou lineární a rovnice výstupu je tedy lineární.

Při vyšetřování dynamických vlastností systému i při úvahách o budoucím řízení vycházíme z předpokladu, že ke změnám veličin bude docházet v okolí nějakého pracovního bodu, odpovídajícího základnímu ustálenému (rovnovážnému) stavu danému ustálenými hodnotami prvků vektoru stavu $\mathbf{x}^{1s} = (x_1^{1s}, x_2^{1s}, \dots, x_n^{1s})$. Ustálené hodnoty stavu získáme řešením nelineární vektorové rovnice

$$f(\mathbf{x}^{1s}, \mathbf{u}^{1s}) = 0 \quad (19)$$

Kterou získáme anulování derivace podle času v rovnici (17) a kde \mathbf{u}^{1s} představuje vektor zadaných ustálených (konstantních) hodnot vstupních veličin. Rovnice (19) může mít jediné, ale i větší počet řešení, pro daný systém může tedy existovat i více různých ustálených stavů. Dále můžeme bez újmy na obecnosti v počáteční podmínce (18) položit $t_0 = 0$.

1.3.8 Určení linearizovaného matematického modelu

Zavedeme nové stavové i vstupní veličiny jako odchylky od jejich ustáleného stavu. Pro prvky vektoru stavu a vstupu dostaneme

$$\mathbf{x}_i(t) = \Delta x_i'(t) = x_i'(t) - x_i^{1s}, \text{ kde } i = 1, \dots, n \quad (20)$$

$$\mathbf{u}_j(t) = \Delta u_j'(t) = u_j'(t) - u_j^{1s}, \text{ kde } j = 1, \dots, m \quad (21)$$

A tím získáme nové vektory odchylek stavu a vstupu jako

$$\mathbf{x}(t) = \Delta \mathbf{x}'(t) = \mathbf{x}'(t) - \mathbf{x}^{1s} \quad (22)$$

$$\mathbf{u}(t) = \Delta \mathbf{u}'(t) = \mathbf{u}'(t) - \mathbf{u}^{1s} \quad (23)$$

Nyní nahradíme funkci f prvními dvěma členy jejího Taylorova rozvoje (jako funkce více proměnných) v okolí ustáleného stavu (pracovního bodu)

$$f(x'(t), u'(t)) \approx f(x^{1s}, u^{1s}) + \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right)^s (x'(t) - x^{1s}) + \left(\frac{\partial f}{\partial u'} \right)^s (u'(t) - u^{1s}) \quad (24)$$

Kde označení $(\cdot)^s$ vždy představuje hodnotu výrazu v pracovním bodě a parciální derivace na pravé straně (24) jsou Jacobiho matice

$$\frac{\partial f}{\partial x'} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j'} \right), \quad i, j = 1, \dots, n, \quad \frac{\partial f}{\partial u'} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial u_j'} \right), \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, m \quad (25)$$

Protože pro odchylku funkce f platí $\Delta f(x', u') = f(x', u') - f(x^{1s}, u^{1s})$, dostaneme po dosazení (22) a (23) do rovnice (24) vztah pro odchylku funkce f ve tvaru

$$\Delta f(\mathbf{x}'(t), \mathbf{u}'(t)) = \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right)^s x(t) + \left(\frac{\partial f}{\partial u'} \right)^s u'(t) \quad (26)$$

Prvky matic v rovnici (26) jsou funkce prvků vektorů \mathbf{x}^s a \mathbf{u}^s , které jsou v daném pracovním bodu konstantní. To znamená, že pro daný pracovní bod jsou konstantní i prvky matic (25). Označíme-li je jako

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j'} \right)^s = a_{ij}^s, \quad \left(\frac{\partial f_i}{\partial u_j'} \right)^s = b_{ij}^s \quad (27)$$

Můžeme definovat matice

$$\mathbf{A}^s = (a_{ij}^s), \quad \dim \mathbf{A}^s = n \times n, \quad \mathbf{B}^s = (b_{ij}^s), \quad \dim \mathbf{B}^s = n \times m \quad (28)$$

Kterých prvky jsou sice pro daný pracovní bod konstantní, avšak mění se s přechodem do jiného ustáleného stavu.

Nahradíme-li nyní levou i pravou stranu rovnice (17) diferencemi

$$\Delta \dot{\mathbf{x}} = \Delta f(x', u') \quad (29)$$

A dosadíme odchylkové stavové a vstupní veličiny (22), (23) spolu s rovnicí (26) a maticemi (28), získáme stavovou rovnici linearizovaného modelu ve tvaru

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A}^s x(t) + \mathbf{B}^s u(t) \quad (30)$$

Důsledkem zavedení odchylkových veličin (22), (23) je skutečnost, že počáteční podmínky pro stavové veličiny jsou nulové, tzn. platí $x(0) = 0$, což může později

zjednodušit některé postupy spojené s Laplaceovou transformací linearizované stavové rovnice.

Pokud by i výstupní rovnice byla nelineární, použili bychom při její linearizaci stejný postup. Za předpokladu diferencovatelnosti nelineární vektorové funkce \mathbf{g} a existence prvních parciálních derivací jejích prvků vektorů stavu a vstupu bychom mohli odvodit linearizovanou (a současně odchylkovou) výstupní rovnici

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}^s \mathbf{x}(t) + \mathbf{D}^s u(t) \quad (31)$$

S prvky matic \mathbf{C}^s a \mathbf{D}^s opět závislími na poloze pracovního bodu. Jestliže ovšem je závislost mezi výstupem, stavem a vstupem a priori lineární, jsou matice \mathbf{C} a \mathbf{D} maticemi konstant a jsou na poloze pracovního bodu nezávislé.

Dále, u celé řady technologických procesů existují nelineární vazby pouze mezi stavovými veličinami, zatímco závislosti derivací stavových veličin na veličinách vstupních jsou lineární. Dynamika těchto systémů je pak popsána stavovou rovnicí ve tvaru

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}') + \mathbf{B}u' \quad (32)$$

Funkce \mathbf{f} je pak linearizována pouze k prvkům vektoru \mathbf{x}' a v důsledku toho v linearizované stavové rovnici (30) je na poloze pracovního bodu závislá jen matice \mathbf{A}^s a matice \mathbf{B}^s je konstantní.

Postup při linearizaci jsme uvedli pro okolí daného pracovního bodu. Je ale zřejmé, že linearizace nelineárního modelu systému je možné uskutečnit nejen v okolí ustáleného stavu, ale i v okolí libovolného momentálního stavu, daného okamžitými hodnotami stavových a vstupních veličin. Prvky matic \mathbf{A} , \mathbf{B} nebo i \mathbf{C} , \mathbf{D} budou pak závislé na tomto momentálním stavu. Protože tento stav se s časem mění, lze nelineární model systému nahradit lineárním modelem t -variantního systému, kterého parametry se časem mění. Tato skutečnost má velký význam v souvislosti s těmi metodami adaptivního řízení nelineárních procesů, které jsou založeny na volbě lineárního modelu řízeného objektu a průběžné identifikaci jeho parametrů.

Předpokladem pro sestavení linearizovaného modelu původně nelineárního systému byla spojitá diferencovatelnost a existence prvních parciálních derivací nelineárních vektorových funkcí podle prvků vektoru stavu nebo i vstupu. Dodejme, že nelinearity,

kteřé se vyskytují v popisech technologických procesů, se kterými uvažujeme jako s objekty řízení, tomuto předpokladu plně vyhovují. Z neznámějších typů můžeme uvést alespoň nelinearity ve tvaru odmocnin u průtočných procesů, racionálních funkcí u procesů přestupu látky, exponenciálních funkcí u procesů s chemickou reakcí, což je případ mé diplomové práce, kde ve dvou případech se tyto exponenciální funkce objevují.

1.4 Průtočný chemický reaktor – obecná exotermická reakce

1.4.1 Odvození modelu

V tomto případě jsem vzal model, jenž nám ukazuje chování reaktoru, když v něm probíhají dvě po sobě jdoucí exotermické chemické reakce, dle vzorce $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$. A které jsou chlazeny dokonale promíchávanou chladicí směsí v objemu pláště (viz. počáteční předpoklady pro sestavení modelu).

Z bilancí byly odvozeny čtyři obyčejné diferenciální rovnice (viz.[7]), jež popisují model a vztahy mezi jednotlivým veličinami v popisu reaktoru vystupujícími. Analýzou tepelné bilance do systému vstupující reakční směsi a úpravami jsem došel k rovnici vyjadřující závislost teploty reakční směsi na čase.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{q}{V} T_v + \frac{h_r}{\rho c_p} - \frac{q}{V} T - \frac{F\alpha}{V\rho c_p} (T - T_c) \quad (33)$$

kde počáteční podmínkou této rovnice je $T(0) = T^s$.

Další závislostí, jež byla zkoumána byla závislost teploty chladicího média, jímž nejčastěji bývá voda, na čase. Výsledkem úpravy bilanční rovnice jsem dospěl k následujícímu vztahu.

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{q_c}{V_c} T_{cv} + \frac{F\alpha}{V_c \rho_c c_{pc}} (T - T_c) - \frac{q_c}{V_c} T_c \quad (34)$$

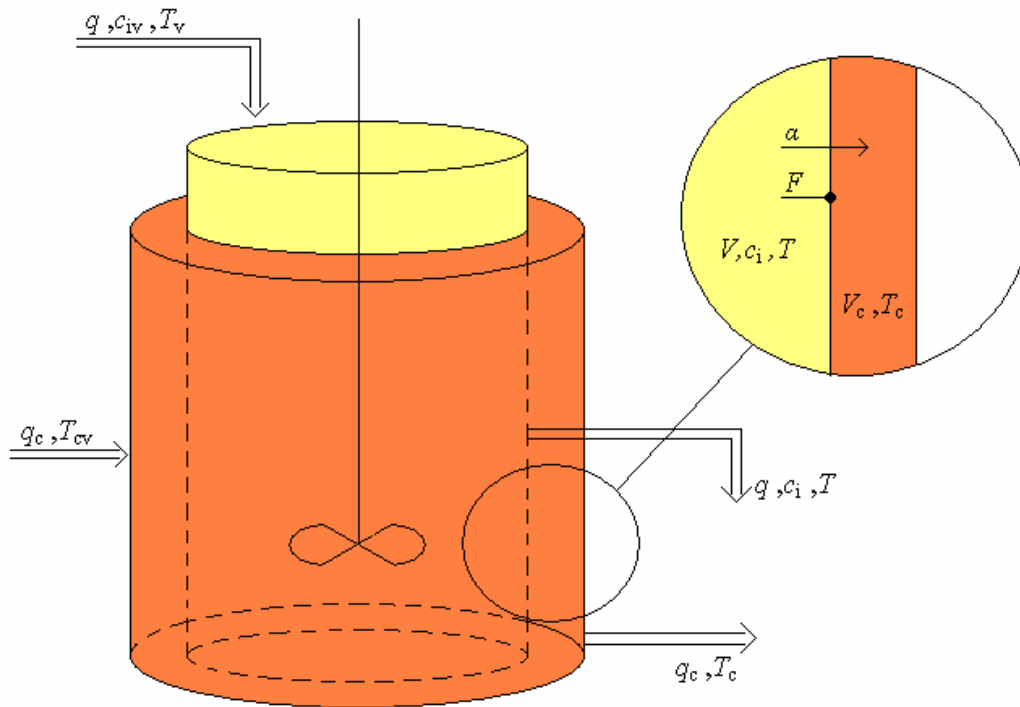
taktéž zde je třeba zadat počáteční podmínku, jež je $T_c(0) = T_c^s$.

Dále pak, jak je z uvedené reakce probíhající v systému vidět, je možné bilancovat vstupní a vznikající složku. Konkrétně tedy koncentrace c_A a c_B . Bilancemi těchto složek dostáváme následující vztahy, jež nám doplní celkový model reaktoru.

$$\frac{dc_A}{dt} = - \left(\frac{q}{V} + k_1 \right) c_A + \frac{q}{V} c_{AV} \quad (35)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -\left(\frac{q}{V} + k_2\right)c_B + k_1c_A + \frac{q}{V}c_{BV} \quad (36)$$

kde počáteční podmínky jsou $c_A(0) = c_A^s$; $c_B(0) = c_B^s$; $T_r(0) = T_r^s$ and $T_c(0) = T_c^s$



Obr. 3: Schéma modelu CSTR pro obecnou exotermickou reakci

kde jednotlivé veličiny jsou:

$q \rightarrow$ průtok [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$]

$c \rightarrow$ koncentrace [$\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}$]

$k \rightarrow$ rychlostní konstanty jednotlivých reakcí [$\text{m}^3/\text{kmol} \cdot \text{s}$]

$V \rightarrow$ objem reaktoru [m^3]

$T \rightarrow$ teplota [K]

$\alpha \rightarrow$ koeficient přestupu tepla [$\text{kJ}/\text{m}^2 \cdot \text{min} \cdot \text{K}$]

$F \rightarrow$ přestupná plocha [m^2]

$\rho \rightarrow$ hustota kapaliny [kg/m^3]

$c_p \rightarrow$ měrné teplo [$\text{kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}$]

INDEXY:

$(\cdot)_{A,B} \rightarrow$ index jednotlivých komponent

$(\cdot)_{1,2} \rightarrow$ indexy jednotlivých kroků reakce

$(\cdot)_c \rightarrow$ index označující chladivo, veličina bez indexu se vztahuje k reakční směsi

Reakční rychlosti, k_j [$\text{m}^3/\text{kmol}\cdot\text{s}$], jsou pak dány závislostmi popsánymi Arrheniovými zákony a mají tvar

$$k_j(T_r) = k_{0j} \cdot \exp\left(\frac{-E_j}{RT_r}\right), \text{ pro } j = 1,2 \quad (37)$$

kde $j = 1, 2, 3$, E_j jsou aktivační energie a R je plynová konstanta a h_r je reakční teplo, jež můžeme vypočítat ze vztahu:

$$h_r = h_1 \cdot k_1 \cdot c_A + h_2 \cdot k_2 \cdot c_B \quad (38)$$

kde h_i jsou reakční entalpie.

1.4.2 Odchylkový tvar modelu

Pro simulace jsem užíval odchylkového tvaru modelu, jak je popsáno v kapitole o linearizaci. Abych tohoto odchylkového tvaru mohl použít, bylo zapotřebí vypočítat ustálené stavy celého systému. V rovnicích (33), (34), (35) a (36) jsem tedy položil derivace v čase rovny nule a osamostatnil proměnné na jednu stranu rovnice. Tím jsem následující vztahy pro výpočet ustálených hodnot:

Vztah pro výpočet ustálené teploty reakční směsi:

$$T^s = \frac{\frac{h_r}{\rho \cdot c_p} + \frac{q}{V} T_v + \frac{F \cdot \alpha}{V \cdot \rho \cdot c_p} T_c}{\frac{q}{V} + \frac{F \cdot \alpha}{V \cdot \rho \cdot c_p}} \quad (39)$$

Pro výpočet ustálené teploty chladicího média:

$$T_c^s = \frac{\frac{F\alpha}{V_c \rho_c c_{pc}} T + \frac{q_c}{V_c} T_{cv}}{\frac{F\alpha}{V_c \rho_c c_{pc}} + \frac{q_c}{V_c}} \quad (40)$$

A vztahy pro výpočet ustálených hodnot koncentrací

$$c_A^s = \frac{\frac{q}{V} c_{AV}}{\frac{q}{V} + k_1} \quad (41)$$

$$c_B^s = \frac{k_1 c_A + \frac{q}{V} c_{BV}}{\frac{q}{V} + k_2} \quad (42)$$

kde c_{AV} , c_{BV} jsou vstupní koncentrace látek A a B. (V tomto případě je vstupní koncentrace $c_{BV} = 0$). Po spočtení ustálených stavů se tyto dosadí do rovnic pro výpočet prvků matic **A** a **B**.

Výpočet prvků matice **A** spočívá ve derivování každé ze čtyř rovnic modelu vždy podle jednotlivých ustálených hodnot (rovnice jsou to samozřejmě ty, v nichž jsou derivace v čase rovny nule). Tedy derivace diferenciální rovnice podle c_A , c_B , T a T_c . Výsledkem je první řádek matice **A**, tj. prvky a_{11} až a_{14} atp. Výsledkem derivací mi byla matice **A**:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\frac{q_V}{V} - k_1 & 0 & -\frac{k_1 E_{1R} e^{\left(\frac{E_{1R}}{T_s}\right)}}{\rho c_p} & 0 \\ k_1 & -\frac{q_V}{V} - k_2 & \frac{-k_{20} E_{2R} e^{\left(\frac{-E_{2R}}{T_s}\right)} c_{BS} + k_{10} E_{1R} e^{\left(\frac{E_{1R}}{T_s}\right)} c_{AS}}{T_s^2} & 0 \\ \frac{h_1 k_{10} e^{\left(\frac{-E_{1R}}{T_s}\right)}}{\rho c_p} & \frac{h_2 k_{20} e^{\left(\frac{-E_{2R}}{T_s}\right)}}{\rho c_p} & \frac{k_{10} E_{1R} e^{\left(\frac{E_{1R}}{T_s}\right)} c_{AS} + k_{20} E_{2R} e^{\left(\frac{E_{2R}}{T_s}\right)} c_{BS}}{T^2 \rho c_p} & \frac{q_V}{V} - \frac{F\alpha}{V \rho c_p} \\ 0 & 0 & \frac{F\alpha}{V_c \rho_c c_{pc}} & \frac{F\alpha}{V_c \rho_c c_{pc}} - \frac{q_{cv}}{V_c} \end{pmatrix} \quad (43)$$

Matice **B** se získá obdobným způsobem, ale derivujeme jednotlivé rovnice podle vstupních proměnných. V mém případě to byly následující: q , q_c , c_{Av} , T_v a T_{cv} .

Celá matice \mathbf{B} pak měla následující tvar a členy:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{c_{Av} - c_{AS}}{V} & \frac{q_V}{V} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{c_{Bv} - c_{BS}}{V} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{T_v - T_s}{V} & 0 & \frac{q_V}{V} & 0 \\ \frac{T_{cv} - T_{eS}}{V_c} & 0 & 0 & 0 & \frac{q_{cv}}{V_c} \end{pmatrix} \quad (44)$$

Tyto matice, respektive jejich prvky potom použijeme při výpočtu odchylkového modelu, jenž má obecně tvar:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A}^s \mathbf{x}(t) + \mathbf{B}^s \mathbf{u}(t) \quad (45)$$

A pro tento konkrétní případ jsou to následující rovnice:

$$\frac{dx_1}{dt} = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + b_{11}u_1 + b_{12}u_2 + b_{13}u_3 + b_{14}u_4 + b_{15}u_5 \quad (46)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + b_{21}u_1 + b_{22}u_2 + b_{23}u_3 + b_{24}u_4 + b_{25}u_5 \quad (47)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + b_{31}u_1 + b_{32}u_2 + b_{33}u_3 + b_{34}u_4 + b_{35}u_5 \quad (48)$$

$$\dots \frac{dx_4}{dt} = a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + b_{41}u_1 + b_{42}u_2 + b_{43}u_3 + b_{44}u_4 + b_{45}u_5 \quad (49)$$

Výsledky simulací pak prezentuji v experimentální části této diplomové práce.

1.5 Průtočný chemický reaktor – reakce typu „van der Vusse“

1.5.1 Odvození modelu

Tento případ je taktéž případem exotermické chemické reakce, jež probíhá v reaktoru s chlazením v plášti, kde chladicím médiem je nejčastěji voda. Této reakci se také říká reakce typu *van der Vusse* a má tvar $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C; 2A \xrightarrow{k_3} D$ (viz.[6], [8]). Tyto dvě chemické rovnice popisují např.: reakce, jichž se využívá pro průmyslovou

výrobu cyklopentenolu. Pomocí bilancí je možné odvodit následující čtyři obyčejné diferenciální rovnice, jež určují při simulacích chování reaktoru.

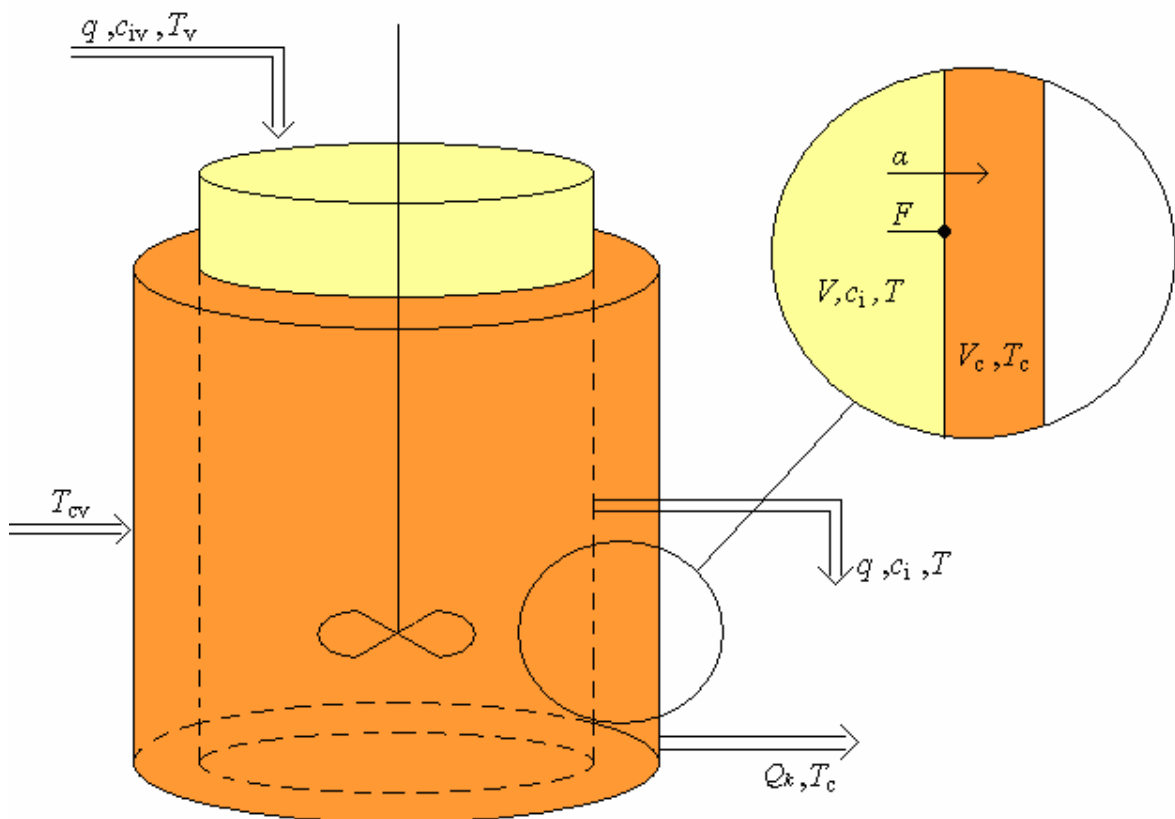
$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{q}{V}(c_{A0} - c_A) - k_1 c_A - k_3 c_A^2 \quad (50)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -\frac{q}{V}c_B + k_1 c_A - k_2 c_B \quad (51)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{q}{V}(T_V - T) - \frac{h_r}{\rho \cdot c_p} + \frac{F \cdot \alpha}{V \cdot \rho \cdot c_p}(T_c - T) \quad (52)$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{m_c c_{pc}}(\dot{q}_c + F \cdot \alpha(T_r - T_c)) \quad (53)$$

pro $c_A \geq 0, c_B \geq 0$.



Obr. 4: Schéma CSTR pro modelování reakce typu „van der Vusse“

kde jednotlivé veličiny jsou:

$q \rightarrow$ průtok [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$]

$Q_k \rightarrow$ předané teplo [kJ.min⁻¹]

$c \rightarrow$ koncentrace [kmol.m⁻³]

$k \rightarrow$ rychlostní konstanty jednotlivých reakcí [m³/kmol.s]

$V \rightarrow$ objem reaktoru [m³]

$T \rightarrow$ teplota [K]

$\alpha \rightarrow$ koeficient přestupu tepla [kJ/m².min.K]

$F \rightarrow$ přestupná plocha [m²]

$\rho \rightarrow$ hustota kapaliny [kg/ m³]

$c_p \rightarrow$ měrné teplo [kJ/kg.K]

$m \rightarrow$ hmotnost [kg]

INDEXY:

$(\cdot)_{A, B} \rightarrow$ index jednotlivých komponent

$(\cdot)_{1, 2, 3} \rightarrow$ indexy jednotlivých kroků reakce

$(\cdot)_c \rightarrow$ index označující chladiivo, veličina bez indexu se vztahuje k reakční směsi

Reakční rychlosti jsou pak počítány z Arrheniových zákonů

$$k_j(T_r) = k_{0j} \cdot \exp\left(\frac{-E_j}{RT_r}\right), \text{ for } j = 1, 2, 3 \quad (54)$$

kde $j = 1, 2, 3$, E_j jsou aktivační energie a R je plynová konstanta

V rovnici (52) je h_r reakční teplo a vypočítá se podle vztahu:

$$h_r = (k_1 \cdot c_A \cdot H_{R_{ab}}) + (k_2 \cdot c_B \cdot H_{R_{bc}}) + (k_3 \cdot c_A^2 \cdot H_{R_{ad}}) \quad (55)$$

kde $H_{R_{ab}}$, $H_{R_{bc}}$, $H_{R_{ad}}$ jsou reakční entalpie [kJ kmol⁻¹].

1.5.2 Odchylkový tvar modelu

V rovnicích (50), (51), (52), (53) matematického modelu jsem anuloval derivace a spočítal ustálené hodnoty jednotlivých proměnných, abych tyto pak mohl použít pro výpočet linearizace a odchylkového tvaru modelu.

Ustálené hodnoty jsem po úpravách dostal následující.

Vztah pro výpočet ustálené koncentrace látky A:

$$c_A^s = \frac{-\left(\frac{V}{Vr} + k_1\right) \pm \sqrt{\left(\frac{V}{Vr} + k_1\right)^2 - \left(4 * (k_3) * \left(-\frac{V}{Vr} c_{A0}\right)\right)}}{2 * k_3} \quad (56)$$

Ustálenou hodnotu koncentrace látky B dostanu dosazením do vztahu:

$$c_B^s = \frac{k_1 c_A^s}{k_2 + \frac{V}{Vr}} \quad (57)$$

Ustálenou teplotu reakční směsi v reaktoru v čase $t \rightarrow \infty$ vypočteme ze vztahu:

$$T^s = \frac{\frac{V}{Vr} T_0 - \frac{hr}{\rho C_p} + \frac{k_w Ar}{\rho C_p Vr} T_c}{\frac{V}{Vr} + \frac{k_w Ar}{\rho C_p Vr}} \quad (58)$$

A ustálenou hodnotu teploty chladicího média jsem dostal úpravou poslední rovnice:

$$T_c^s = \frac{Q_c + k_w Ar T}{k_w Ar} \quad (59)$$

Z těchto vztahů pak můžu vypočítat jednotlivé koeficienty matic **A** a **B** a dosadit je do obecné rovnice pro výpočet odchylkového tvaru matematického modelu pro výpočet dynamiky systému.

Pro matici **A** jsem tedy dospěl k následujícím členům:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\frac{q}{V} - k_1 & 0 & \frac{E_1 \cdot k_1 \cdot c_{AS}}{T^{s^2}} & 0 \\ k_1 & -\frac{q}{V} & \frac{E_1 \cdot k_1 \cdot c_{AS}}{T^{s^2}} & 0 \\ \frac{h_1 \cdot k_1 + 2 \cdot h_3 \cdot k_3 \cdot c_{AS}}{\rho \cdot c_p} & \frac{h_2 \cdot k_2}{\rho \cdot c_p} & \frac{q}{V} - \frac{h_1 \cdot E_1 \cdot k_1 \cdot c_{AS} + h_2 \cdot E_2 \cdot k_2 \cdot c_{BS} + h_3 \cdot E_3 \cdot k_3 \cdot c_{AS}^2}{T^{s^2} \cdot \rho \cdot c_p} - \frac{F \cdot \alpha}{V \cdot \rho \cdot c_p} & \frac{F \cdot \alpha}{V \cdot \rho \cdot c_p} \\ 0 & 0 & \frac{F \cdot \alpha}{m_c \cdot c_{pc}} & -\frac{F \cdot \alpha}{m_c \cdot c_{pc}} \end{pmatrix} \quad (60)$$

Matice **B** je pak tvořena následujícími prvky:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -\frac{c_{A0} + c_{AS}}{V} & 0 & 0 & 0 & -\frac{q}{V} \\ -\frac{c_{BS} + c_{B0}}{V} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{T - T^s}{V} & 0 & \frac{q}{V} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_c \cdot c_{pc}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (61)$$

Tyto vypočtené členy pak dosadím do rovnice (45) a dostávám následující rovnice obsahující prvky matic (60) a (61) prvky matic:

$$\frac{dx_1}{dt} = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + b_{11}u_1 + b_{12}u_2 + b_{13}u_3 + b_{14}u_4 + b_{15}u_5 \quad (62)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + b_{21}u_1 + b_{22}u_2 + b_{23}u_3 + b_{24}u_4 + b_{25}u_5 \quad (63)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + b_{31}u_1 + b_{32}u_2 + b_{33}u_3 + b_{34}u_4 + b_{35}u_5 \quad (64)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + b_{41}u_1 + b_{42}u_2 + b_{43}u_3 + b_{44}u_4 + b_{45}u_5 \quad (65)$$

1.6 Průtočný chemický reaktor – izotermická reakce

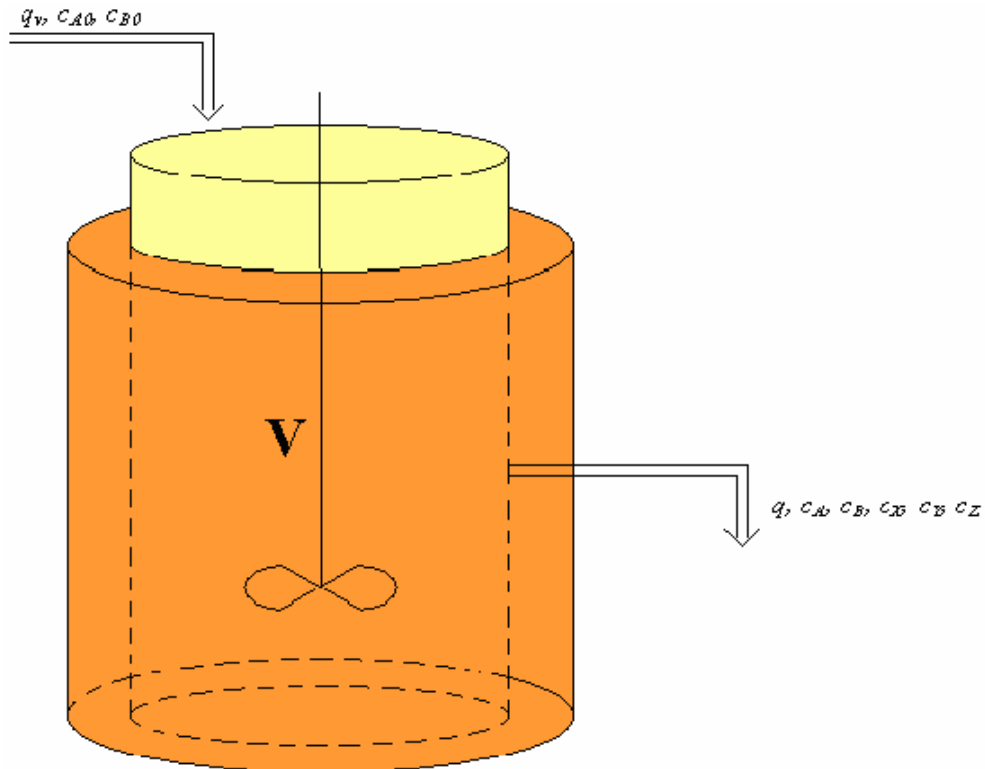
1.6.1 Model reaktoru

Prvním případem, kterým jsem se v práci zabýval byl reaktor s označením CSTRCOM, z angl. Isothermal Reactor With Complex Reactions, což se překládá jako Izotermální reaktor se složenými reakcemi (viz.[2]).

Tento druh reakcí se velmi pohodlně vyšetřuje právě pomocí simulací. V tomto případě z roku 1972 se vyšetřují následující složené reakce:



Tato následně-paralelní reakce je následná ve směru $A \rightarrow X \rightarrow Y \rightarrow Z$, stejně jako má i paralelní charakteristiky ve tvaru $B \rightarrow X, B \rightarrow Y, B \rightarrow Z$.



Obr. 5: Schéma CSTR pro izotermickou reakci

Jelikož se jedná o reaktor izotermický, týkalo se řešení bilančních rovnic pouze bilancí hmoty vstupujících a vznikajících látek. Výsledkem bilance bylo pět následujících rovnic:

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{q}{V}(c_{A0} - c_A) - k_1 c_A c_B \quad (69)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = \frac{q}{V}(c_{B0} - c_B) - k_1 c_A c_B - k_2 c_B c_X - k_3 c_B c_Y \quad (70)$$

$$\frac{dc_X}{dt} = \frac{q}{V}(c_{X0} - c_X) + k_1 c_A c_B - k_2 c_B c_X \quad (71)$$

$$\frac{dc_Y}{dt} = \frac{q}{V}(c_{Y0} - c_Y) + k_2 c_B c_X - k_3 c_B c_Y \quad (72)$$

$$\frac{dc_Z}{dt} = \frac{q}{V}(c_{Z0} - c_Z) + k_3 c_B c_Y \quad (73)$$

kde jednotlivé veličiny jsou:

$q \rightarrow$ průtok [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$]

$c \rightarrow$ koncentrace [$\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}$]

$k \rightarrow$ rychlostní konstanty jednotlivých reakcí [$\text{m}^3/\text{kmol} \cdot \text{s}$]

$V \rightarrow$ objem reaktoru [m^3]

INDEXY:

$(\cdot)_{A, B, X, Y, Z} \rightarrow$ index jednotlivých komponent

$(\cdot)_{1, 2, 3} \rightarrow$ indexy jednotlivých kroků reakce

1.6.2 Odchylový tvar matematického modelu

Taktéž zde jsem pro výpočet dynamiky změny jednotlivých vstupujících veličin použil odchylového tvaru matematického modelu. Bylo tedy zapotřebí vypočtení ustálených stavů. Odvození je stejné jako u prvních dvou případů. Položil jsem tedy derivace podle času rovny nule a osamostatnil proměnné na jednu stranu rovnice.

Tím jsem dospěl ke vztahům pro výpočet jednotlivých koncentrací:

Ustálená hodnota vstupní koncentrace c_A se tedy vypočte jako:

$$c_A^s = \frac{q \cdot c_{A0}}{q + k_1 \cdot c_B^s} \quad (74)$$

Rovnice pro výpočet ustálené hodnoty koncentrace c_B :

$$c_B^s = \frac{q \cdot c_{B0}}{q + V \cdot k_1 \cdot c_A^s + V \cdot k_2 \cdot c_X^s + V \cdot k_3 \cdot c_Y^s} \quad (75)$$

A dále pak tři rovnice pro výpočet koncentrací vznikajících produktů:

$$c_X^s = \frac{q \cdot c_{X0} + V \cdot k_1 \cdot c_A^s \cdot c_B^s}{q + V \cdot k_1 \cdot c_B^s} \quad (76)$$

$$c_Y^s = \frac{q \cdot c_{Y0} + V \cdot k_2 \cdot c_B^s \cdot c_X^s}{q + V \cdot k_3 \cdot c_B^s} \quad (77)$$

$$c_Z^s = \frac{q \cdot c_{Z0} + V \cdot k_3 \cdot c_B^s \cdot c_Y^s}{q} \quad (78)$$

Pro získání matice **A** odchylkového tvaru matematického modelu jsem derivoval rovnice (69), (70), (71), (72) a (73) podle stavových veličin v pořadí c_A , c_B , c_X , c_Y , c_Z a dostal jsem následující členy matice **A**:

$$\mathbf{A} = \begin{vmatrix} -\frac{q}{V} - k_1 \cdot c_{BS} & -k_1 \cdot c_{BS} & 0 & 0 & 0 \\ -k_1 \cdot c_{BS} & -\frac{q}{V} - k_1 \cdot c_{AS} - k_2 \cdot c_{XS} - k_3 \cdot c_{YS} & -k_2 \cdot c_{BS} & -k_3 \cdot c_{BS} & 0 \\ k_1 \cdot c_{BS} & k_1 \cdot c_{AS} - k_2 \cdot c_{XS} & -\frac{q}{V} - k_2 \cdot c_{BS} & 0 & 0 \\ 0 & k_2 \cdot c_{XS} - k_3 \cdot c_{YS} & k_2 \cdot c_{BS} & -\frac{q}{V} - k_3 \cdot c_{BS} & 0 \\ 0 & k_3 \cdot c_{YS} & 0 & k_3 \cdot c_{BS} & -\frac{q}{V} \end{vmatrix} \quad (79)$$

Derivováním rovnic podle vstupních veličin získám matici **B**:

$$\mathbf{B} = \begin{vmatrix} \frac{c_{A0} - c_{AS}}{V} & \frac{q}{V} & 0 \\ \frac{c_{B0} - c_{BS}}{V} & 0 & \frac{q}{V} \\ \frac{c_{X0} - c_{XS}}{V} & 0 & 0 \\ \frac{c_{Y0} - c_{YS}}{V} & 0 & 0 \\ \frac{c_{Z0} - c_{ZS}}{V} & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (80)$$

Takto získané matice (79) a (80) můžu dosadit do (45) a vypočítat dynamiku celého systému dle rovnic:

$$\frac{dx_1}{dt} = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + b_{11}u_1 + b_{12}u_2 + b_{13}u_3 \quad (81)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + b_{21}u_1 + b_{22}u_2 + b_{23}u_3 \quad (82)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + b_{31}u_1 + b_{32}u_2 + b_{33}u_3 \quad (83)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + b_{41}u_1 + b_{42}u_2 + b_{43}u_3 \quad (84)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = a_{51}x_1 + a_{52}x_2 + a_{53}x_3 + a_{54}x_4 + b_{51}u_1 + b_{52}u_2 + b_{53}u_3 \quad (85)$$

II. PRAKTICKÁ ČÁST

2 KONSTANTY A VSTUPNÍ PARAMETRY PROGRAMU

2.1 Výpočet ustálených stavů a dynamiky soustavy

V programu je jak pro výpočet statických charakteristik, tak i pro výpočet dynamiky soustav použit iterační výpočet, jenž je cyklický. Proto zde uvádím jednotlivé kroky, jež jsou při výpočtu provedeny a s jejichž pomocí se dojde požadovaným výsledkům.

Před cyklem je zvolena požadovaná přesnost (v programu nastavena na hodnotu v intervalu $\varepsilon \in \langle 0,0001; 0,001 \rangle$) a načtou se vstupní hodnoty konstant, které se nemění a hodnoty počátečních odhadů výsledných ustálených stavů, jež jsou nezbytně nutné pro první cyklus iterace.

Dále se načtou hodnoty uživatelem zadané, tj. rozsah počítané statické charakteristiky, případně, při výpočtu dynamiky, změny jednotlivých parametrů.

V cyklu samotném se pak vypočítají ustálené hodnoty jednotlivých počítaných veličin (koncentrací, teplot, apod.) a porovnají se s hodnotami spočtenými v předchozím cyklu. V případě, že se jedná o cyklus první, tak se vypočtené hodnoty porovnávají s hodnotami výsledků odhadnutých. Jestliže po porovnání je rozdíl hodnot spočtených ve dvou po sobě jdoucích cyklech menší než žádaná přesnost, je cyklus ukončen a hodnoty ustálených stavů se uloží do vektoru výsledku. Tento pak slouží k výpočtu jednotlivých koeficientů matic **A** a **B** pro výpočet dynamiky soustav.

Tento výpočet pak probíhá následovně: Vypočtou se jednotlivé prvky matic **A** a **B**. Jednotlivé koeficienty se pak dosadí do rovnic v m-filech pro definici diferenciálních rovnic (cstrX_dynamika). Tyto rovnice s koeficienty jsou pak použity jako vstupní parametry do funkce „ode45“ programu MATLAB. Jde o funkci, jež se používá k řešení nelineárních diferenciálních rovnic a jež má v sobě zakomponovaný výpočet těchto rovnic s pomocí kombinace metod Runge – Kutta čtvrtého a pátého řádu.

V konečné fázi jsou pak výsledky funkce „ode45“ vyneseny automaticky do grafů.

2.2 Průtočný chemický reaktor – obecná exotermická reakce

2.2.1 Zadané hodnoty

Tabulka 1: Konstanty pro výpočet charakteristik první reakce

Název konstanty	Symbol	Hodnota konstanty [-]
Rychlost reakce k_1	k_{01}	$5,616 \cdot 10^{16} \text{ min}^{-1}$
Rychlost reakce k_2	k_{02}	$1,128 \cdot 10^{18} \text{ min}^{-1}$
Podíl aktivační energie reakce k_1 a R	E_1/R	13477 K
Podíl aktivační energie reakce k_2 to R	E_2/R	15290 K
Reakční entalpie k_1	h_1	$4,8 \cdot 10^4 \text{ kJ.kmol}^{-1}$
Reakční entalpie k_2	h_2	$2,2 \cdot 10^4 \text{ kJ.kmol}^{-1}$
Objem reaktoru	V_r	$1,2 \text{ m}^3$
Hustota reakční směsi	ρ_r	985 kg.m^{-3}
Tepelná kapacita reakční směsi	c_{pr}	$4,05 \text{ kJ.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Objemový průtok reakční směsi	q_r	$0,08 \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$
Objem chladicí kapaliny	V_c	$0,64 \text{ m}^3$
Hustota chladicí kapaliny	ρ_c	998 kg.m^{-3}
Tepelná kapacita chladicí kapaliny	c_{pr}	$4,18 \text{ kJ.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Ustálený objemový průtok chladicí kapaliny	q_c^s	$0,03 \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$
Koeficient přechodu tepla přestupné plochy	α	$43,5 \text{ kJ.min}^{-1} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
Povrch chladicího pláště	F	$5,5 \text{ m}^2$

2.2.2 Zvolené vstupní veličiny

Tabulka 2: Vstupní veličiny pro výpočet charakteristik první reakce

Název veličiny	Symbol	Zvolená hodnota [-]
Vstupní koncentrace složky A	c_A	$2,85 \text{ kmol} / \text{m}^3$
Vstupní teplota reakční směsi	T	323 K
Vstupní teplota chladicí směsi	T_c	293 K

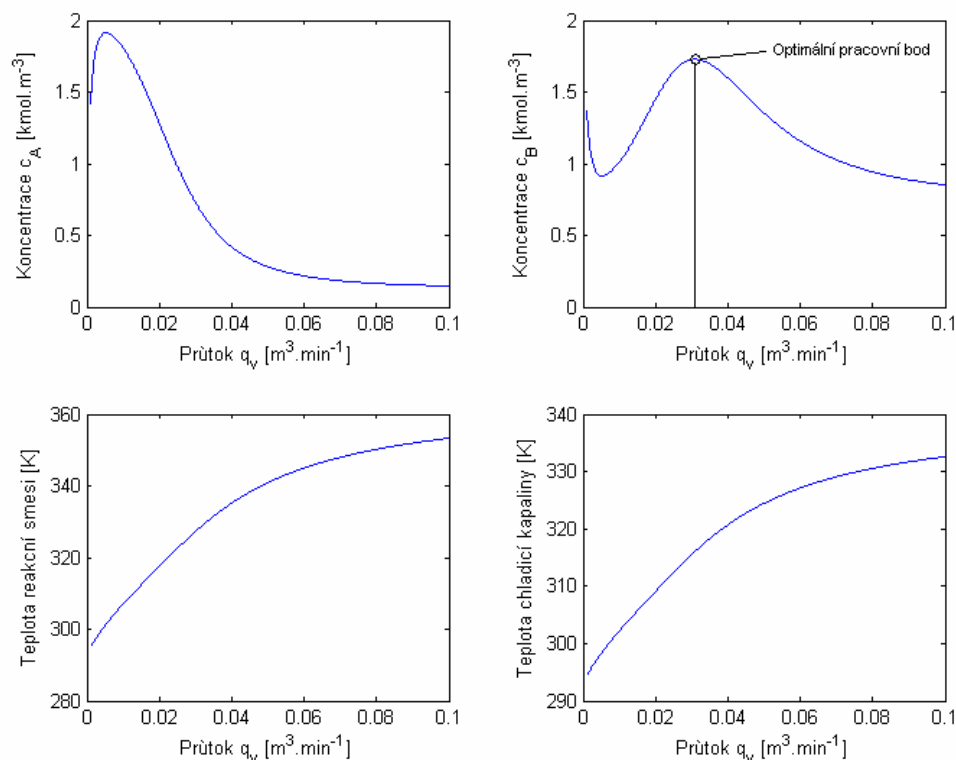
Vstupní průtok reakční směsi	q	$0,08 \text{ m}^3/\text{min}$
Vstupní průtok chladicí směsi	q_c	$0,03 \text{ m}^3/\text{min}$

2.2.3 Výpočet optimálního pracovního bodu

Pro výpočet dynamiky je třeba spočítat také tzv. statické charakteristiky, s pomocí nichž můžeme určit optimální pracovní bod reaktoru. Což znamená, že můžeme určit parametry jednotlivých vstupních veličin tak, aby byl chod reaktoru a jeho výtěžnost optimální.

Výpočet těchto statických charakteristik pro tento typ reakce probíhající v reaktoru, jsem provedl z rovnic (33), (34), (35) a (36), ze kterých jsem výše uvedeným iteračním cyklem spočítal jednotlivé ustálené stavy pro různou hodnotu jednotlivých vstupních veličin, a pak tyto spočtené hodnoty vynesl do grafu (Obr. 6). Nejprve jsem určil statické charakteristiky pro změnu vstupního průtoku reakční směsi v intervalu $q \in \langle 0,001; 0,1 \rangle$.

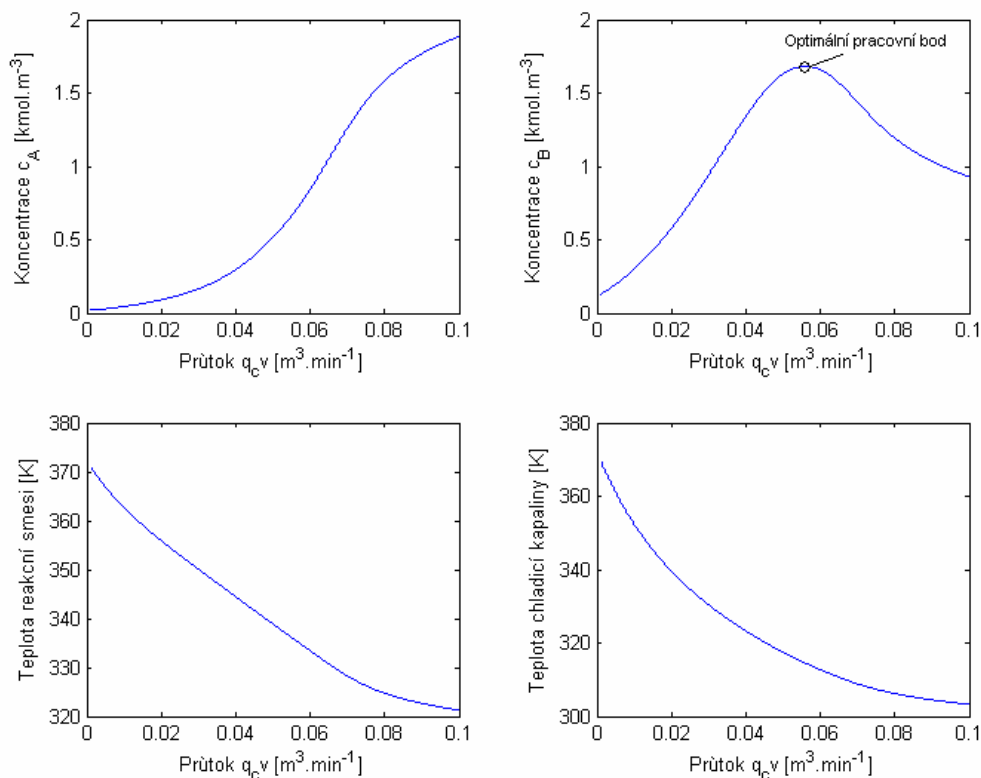
V obrázku jsem pak vyznačil optimální body.



Obr. 6: Určení optimálního pracovního bodu pro proměnný průtok reakční směsi

V tomto případě jsem tedy našel optimální průtok pro zadané vstupní veličiny v hodnotě $q = 0,03 \text{ m}^3/\text{min}$. Dále jsem provedl výpočet statické charakteristiky pro

proměnnou velikost vstupního průtoku chladicího média q_c a to v rozsahu $q_c \in \langle 0,001; 0,1 \rangle$. Tuto charakteristiku jsem opět nechal vykreslit do grafu (Obr. 7) a vyznačil optimální pracovní bod.

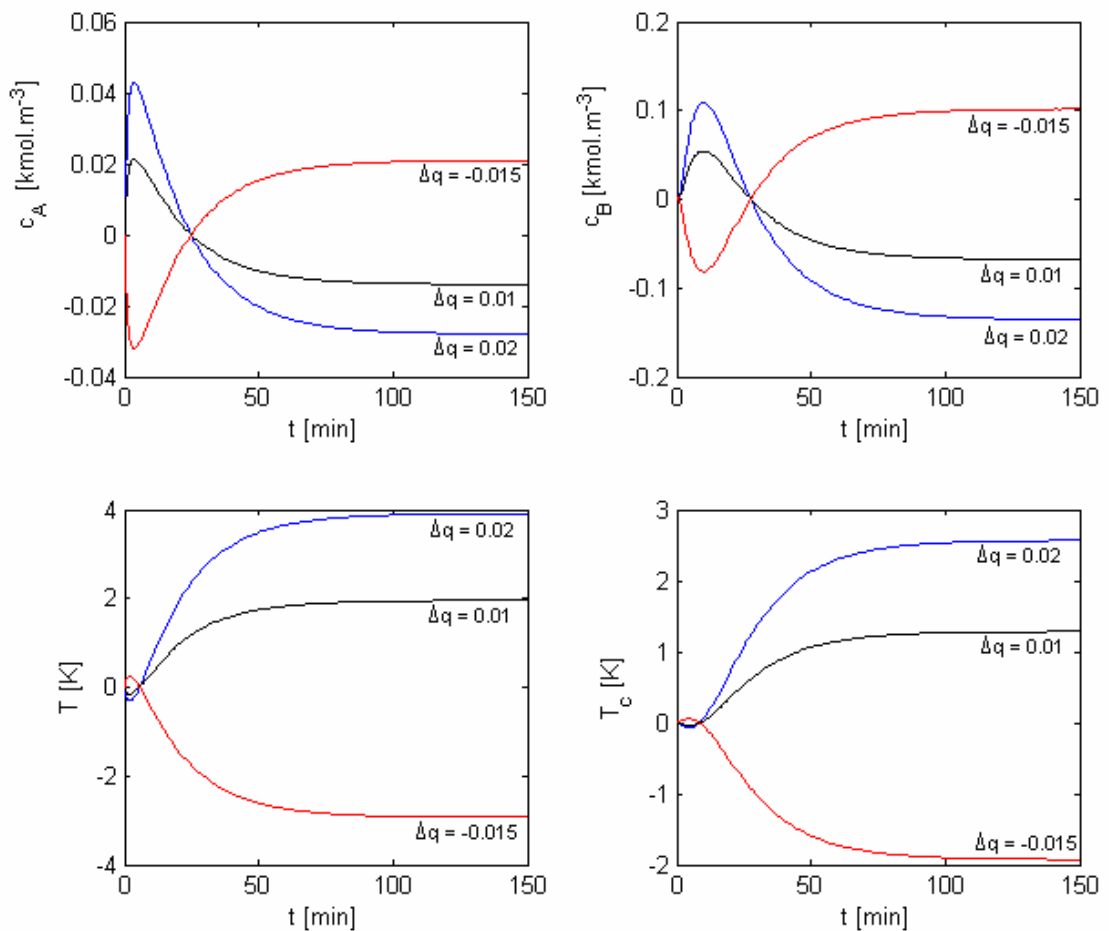


Obr. 7: Statické charakteristiky pro proměnný průtok chladicí směsi

2.2.4 Dynamika soustavy

Po vypočtení statických charakteristik a určení optimálního pracovního bodu jsem zkoumal vliv skokové změny některé ze vstupních veličin na změnu soustavy. Pro tuto reakci je v programu možno zadat změnu vstupního průtoku reakční směsi q_v , změnu průtoku chladicí kapaliny q_c , změnu koncentrace vstupní látky A (přestože se v praxi tato změna příliš neobjevuje vzhledem k technickým potížím při realizaci) c_A , a dále pak jsem zahrnul možnost vypočítat dynamiku soustavy při změně vstupních teplot reakční směsi a chladicí kapaliny T a T_c .

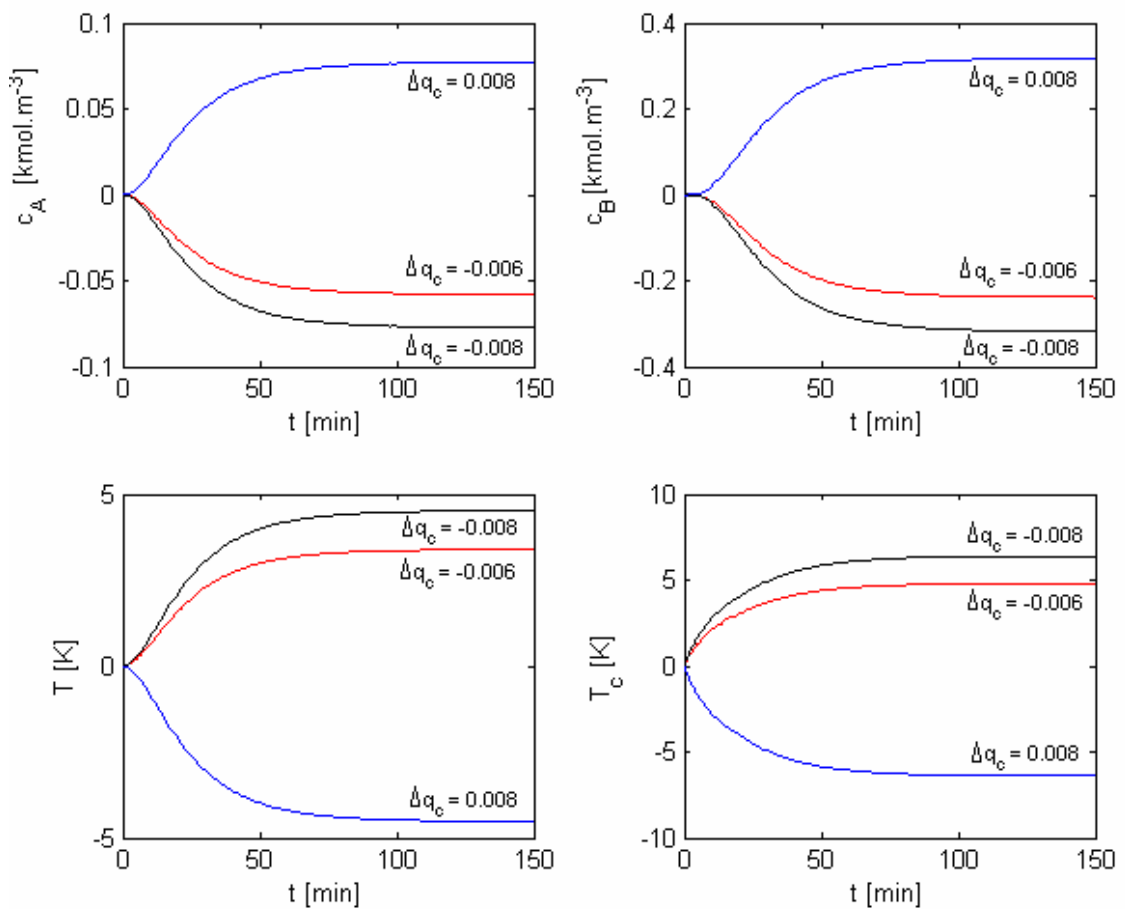
Pro příklad uvádím graf (Obr. 8) změny ustálených stavů při změně vstupního průtoku q_v o $0,02 m^3/min$, o $0,01 m^3/min$ a o $-0,015 m^3/min$.



Obr. 8: Reakce ustálených stavů soustavy na změnu vstupního průtoku reakční směsi

Z grafu (Obr. 8) je vidět, že kladná změna vstupního průtoku reakční směsi q negativně působí na změny koncentrace což v důsledku znamená, že s rostoucím průtokem nedojde ke zreagování takového množství látky A a tím pádem klesá i koncentrace vznikající látky B. Reakce teplot na tuto vstupní změnu je opačná a jak je vidět, tak změny probíhají velmi rychle po zavedení změny do systému.

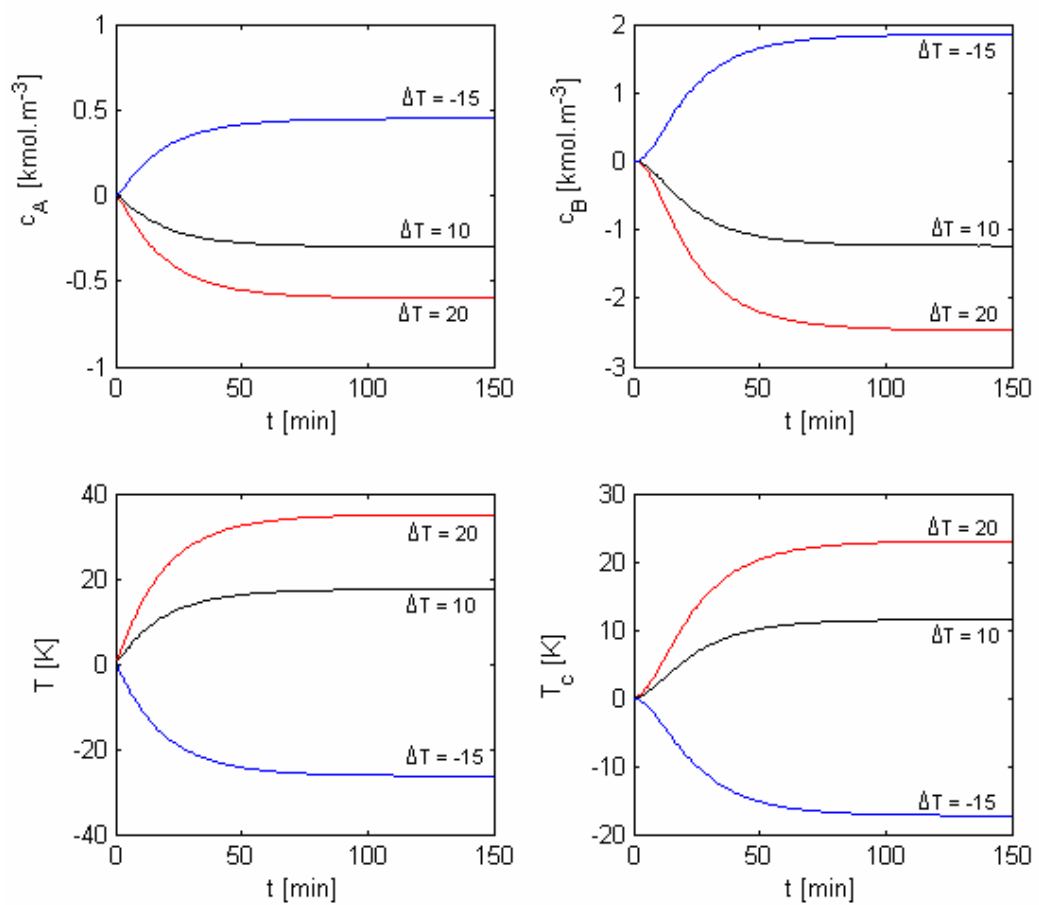
Programem můžeme studovat i reakci soustavy na změnu vstupního průtoku chladicí směsi q_c o $-0,006 \text{ m}^3/\text{min}$, $-0,008 \text{ m}^3/\text{min}$ a $0,012 \text{ m}^3/\text{min}$. Změny jsem vynesl do grafu (Obr. 9).



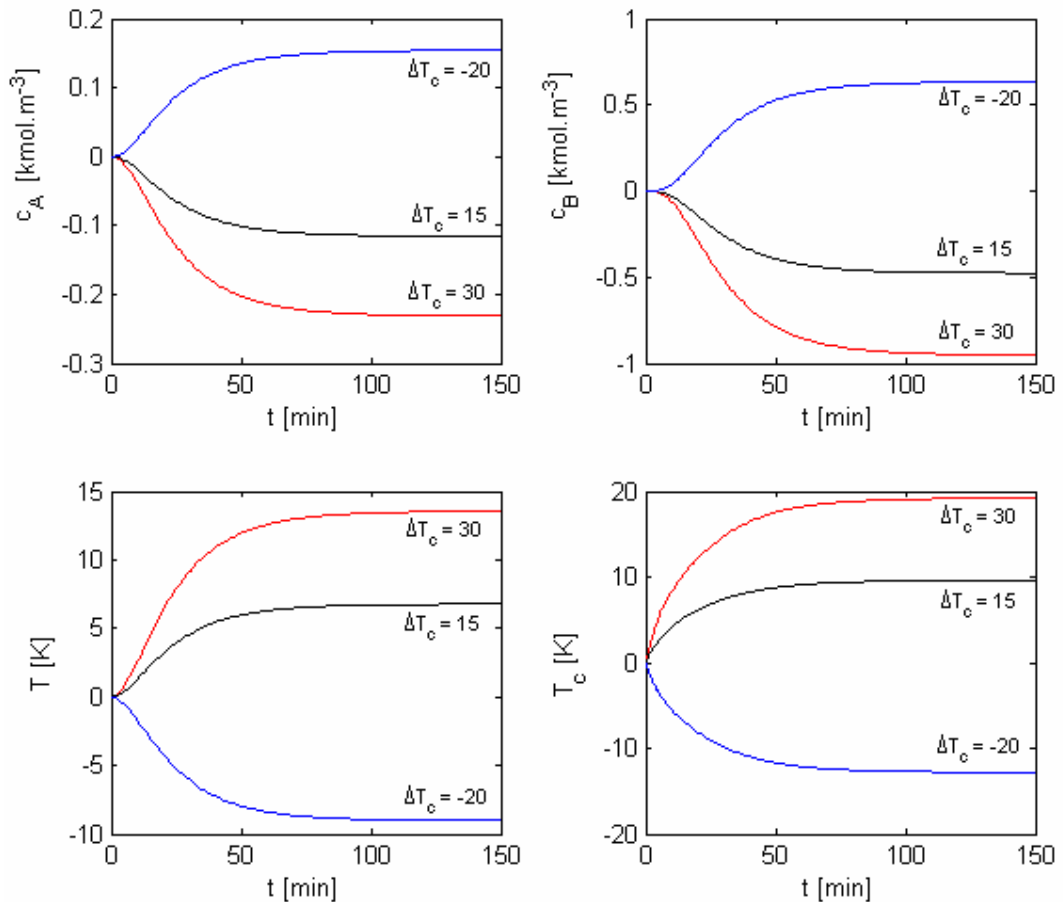
Obr. 9: Změna ustálených stavů veličin při změně vstupního průtoku q_c

Pro zápornou změnu průtoku chladiva q_c je vidět, že reakce soustavy není tak rychlá, jak v předchozím případě, opět je reakce teploty opačná, tzn. s klesajícím průtokem chladiva teplota soustavy roste. Je vidět že při menším množství odvedeného tepla se reakce zpomaluje a klesá množství zreagované látky A a B. V grafu změny koncentrace c_B je také na začátku vidět působící mírné dopravní zpoždění.

Dalším grafem (Obr. 10) je reakce soustavy na změnu teploty T vstupující reakční směsi o 20 K, 10 K a -15 K, a změnu teploty T_c chladicí směsi (Obr. 11) o 15 K, 30 K a -20 K.



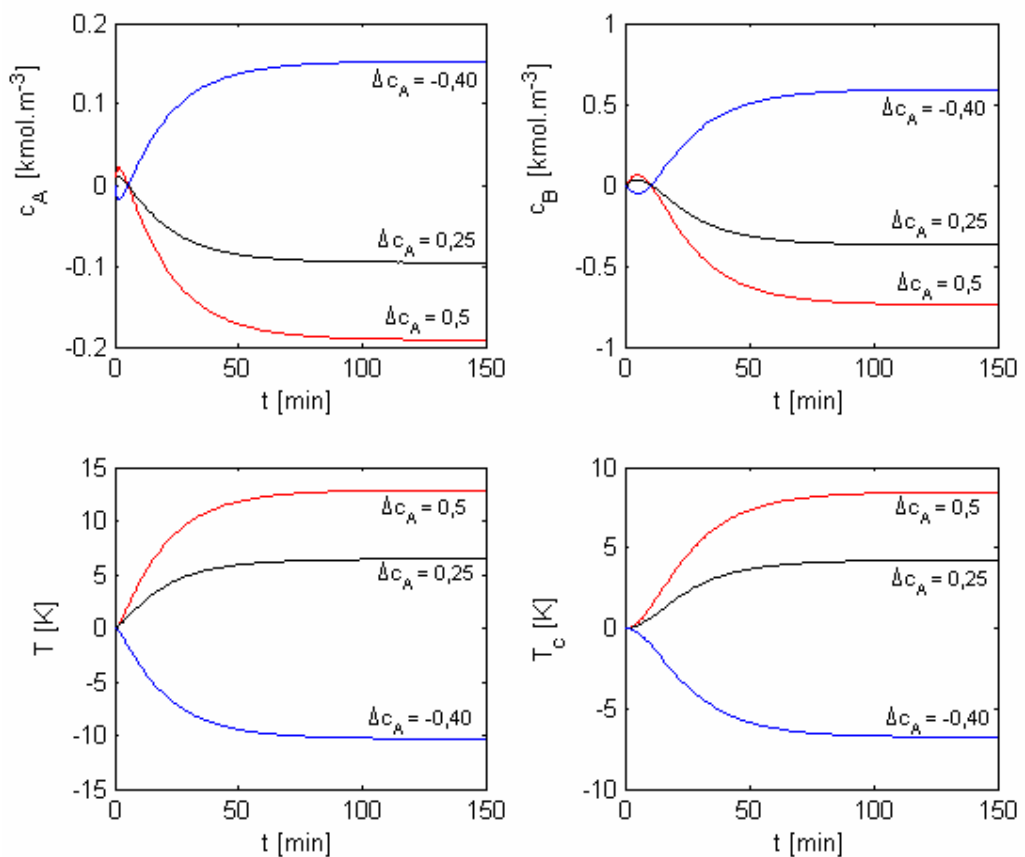
Obr. 10: Změna ustálených stavů při změně teploty vstupující reakční směsi



Obr. 11: Změna ustálených stavů při změně vstupní teploty chladicí kapaliny

Na obrázcích Obr. 10 a Obr. 11 je vidět přímý vliv teploty reakční směsi a chladiva na koncentrace látek A a B. Při poklesu teploty T reakční směsi je vidět nárůst obou koncentrací a při nárůstu teploty chladiva je zřejmé, že reaktor, jenž je méně chlazen nepracuje tak výkonně a obě koncentrace klesly.

Jako poslední uvádím graf pro změny vstupní koncentrace c_A . Skoky jsem volil o $0,5 \text{ kmol.m}^{-3}$, $0,25 \text{ kmol.m}^{-3}$ a $-0,40 \text{ kmol.m}^{-3}$.



Obr. 12: Dynamické změny při zavedení skokových změn koncentrace c_A

Ze všech předchozích grafů můžeme vyhodnotit vliv jednotlivých vstupů na chování celého systému reaktoru. Z těchto analýz jsem pak vyvodil, že chování reaktoru a velký vliv na výsledné koncentrace má zejména teplota chladicí směsi a teplota reakční směsi. Proto bych se při řízení tohoto reaktoru zaměřil na řízení s pomocí regulace teploty, ale spíše průtoku chladicího média (jež je také v praxi zvykem) nebo regulaci teploty a průtoku reakční směsi. Technologicky je také změna koncentrace poměrně náročně realizovatelná.

2.3 Průtočný chemický reaktor – reakce typu „van der Vusse“

2.3.1 Zadané hodnoty

Tabulka 3: Konstanty pro výpočet charakteristik druhé reakce

Název konstanty	Symbol	Hodnota konstanty [-]
Vstupní rychlost reakce k_1	k_{10}	$2,145 \cdot 10^{10} \text{ min}^{-1}$
Vstupní rychlost reakce k_2	k_{20}	$2,145 \cdot 10^{10} \text{ min}^{-1}$
Vstupní rychlost reakce k_3	k_{30}	$1,507 \cdot 10^8 \text{ min}^{-1}$
Podíl aktivační energie E a plynové konstanty R pro reakci k_1	E_1/R	$-9758,3 \text{ K}$
Podíl aktivační energie E a plynové konstanty R pro reakci k_2	E_2/R	$-9758,3 \text{ K}$
Podíl aktivační energie E a plynové konstanty R pro reakci k_3	E_3/R	-8560 K
Entalpie reakce k_1	H_{Rab}	$4,2 \cdot 10^3 \text{ kJ.kmol}^{-1}$
Entalpie reakce k_2	H_{Rbc}	$-11,0 \cdot 10^3 \text{ kJ.kmol}^{-1}$
Entalpie reakce k_2	H_{Rad}	$-41,85 \cdot 10^3 \text{ kJ.kmol}^{-1}$
Objem reaktoru	V_r	$0,01 \text{ m}^3$
Hustota reakční směsi	ρ_r	$934,2 \text{ kg.m}^{-3}$
Měrná tepelná kapacita reakční směsi	c_{pr}	$3,01 \text{ kJ.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Měrná tepelná kapacita chladicí směsi	c_{pc}	$2,0 \text{ kJ.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Objem chladicí kapaliny	V_c	$0,64 \text{ m}^3$
Hustota chladicí kapaliny	ρ_c	998 kg.m^{-3}
Povrch chladicího pláště	F	$0,215 \text{ m}^2$
Koeficient přestupu tepla chladicího pláště	α	$67,2 \text{ kJ.min}^{-1} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
Povrch chladicího pláště	F	$5,5 \text{ m}^2$

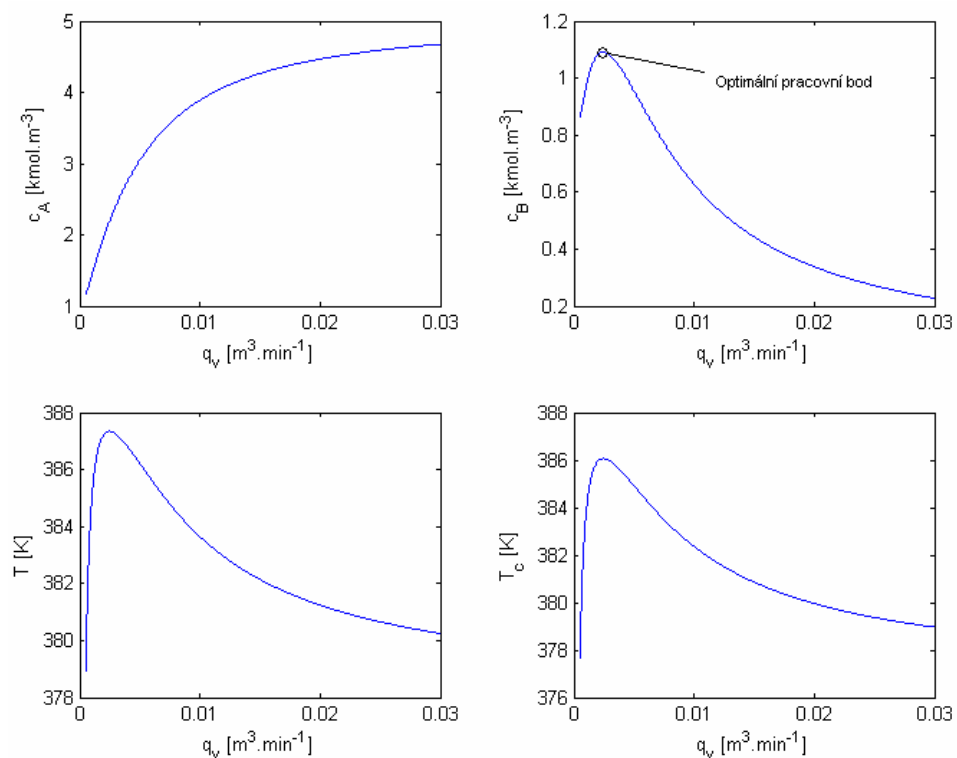
2.3.2 Zvolené vstupní veličiny

Tabulka 4: Vstupní veličiny pro výpočet charakteristik druhé reakce

Název veličiny	Symbol	Zvolená hodnota [-]
Vstupní koncentrace složky A	c_A	$5,1 \text{ kmol}\cdot\text{m}^{-3}$
Vstupní teplota reakční směsi	T	$378,05 \text{ K}$
Vstupní teplota chladicí směsi	T_c	293 K
Vstupní průtok reakční směsi	q	$2,365\cdot 10^{-3} \text{ m}^3\cdot\text{min}^{-1}$
Počáteční přestup tepla	Q_k	$-18,5583 \text{ kJ}\cdot\text{min}^{-1}$

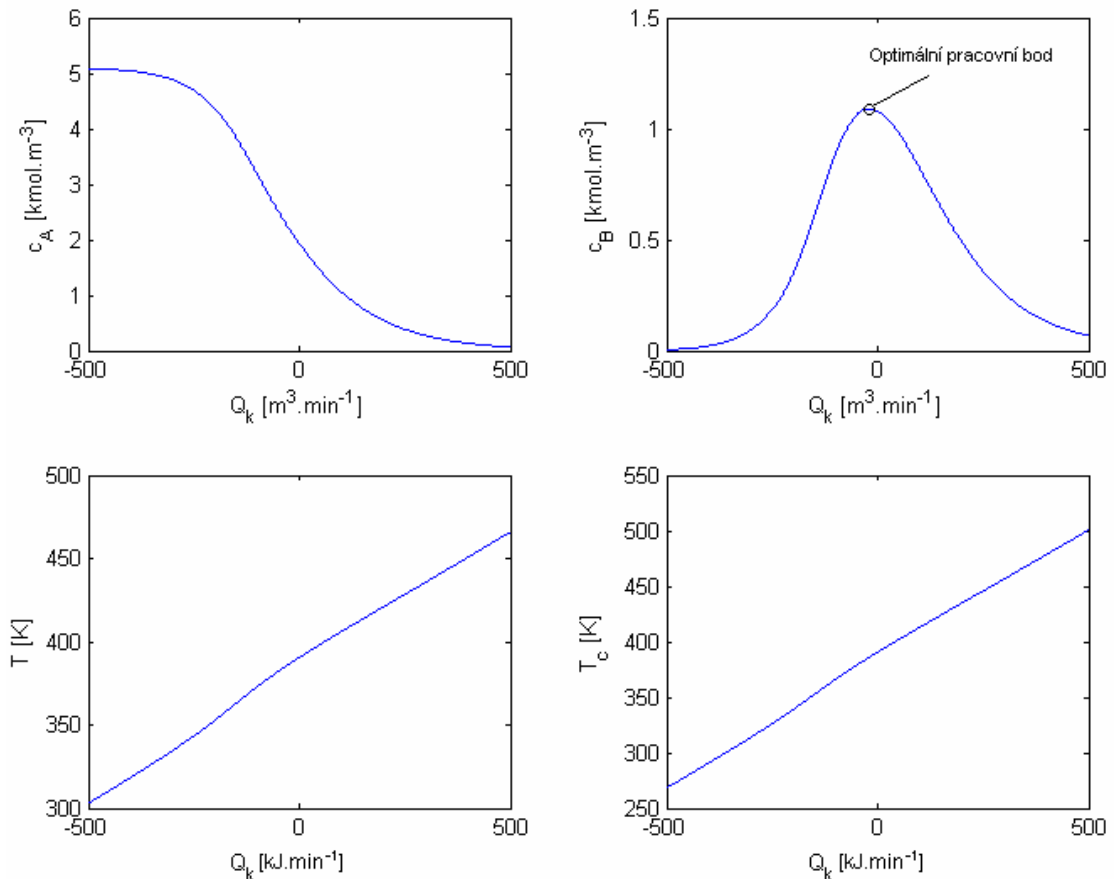
2.3.3 Výpočet optimálního pracovního bodu

Z výše uvedených tabulek jsem použil konstanty a dosadil je do rovnic (56), (57), (58) a (59) pro výpočet statických charakteristik a následné určení pracovního bodu. Pro určení optimálního průtoku jsem postupně do iteračního cyklu dosazoval rostoucí hodnotu vstupujícího průtok reakční směsi q . Tento průtok jsem měnil v intervalu $\langle 0,0005; 0,03 \rangle \text{ m}^3\cdot\text{min}^{-1}$. V grafu (Obr. 13) jsem pak vyznačil hodnotu optimálního pracovního bodu.



Obr. 13: Statické charakteristiky pro proměnný vstupní průtok reakční směsi

Dále jsem zkoumal vývoj statické charakteristiky pro proměnné předané teplo Q_k . Opět jsem iterační cyklus nechal vypočítat ustálené hodnoty pro různou hodnotu předaného tepla Q_k , tentokrát v intervalu $\langle -500; 500 \rangle \text{ kJ}\cdot\text{min}^{-1}$. Výsledkem jsou křivky (Obr. 14) v nichž jsem vyznačil hodnotu optimálního pracovního bodu.

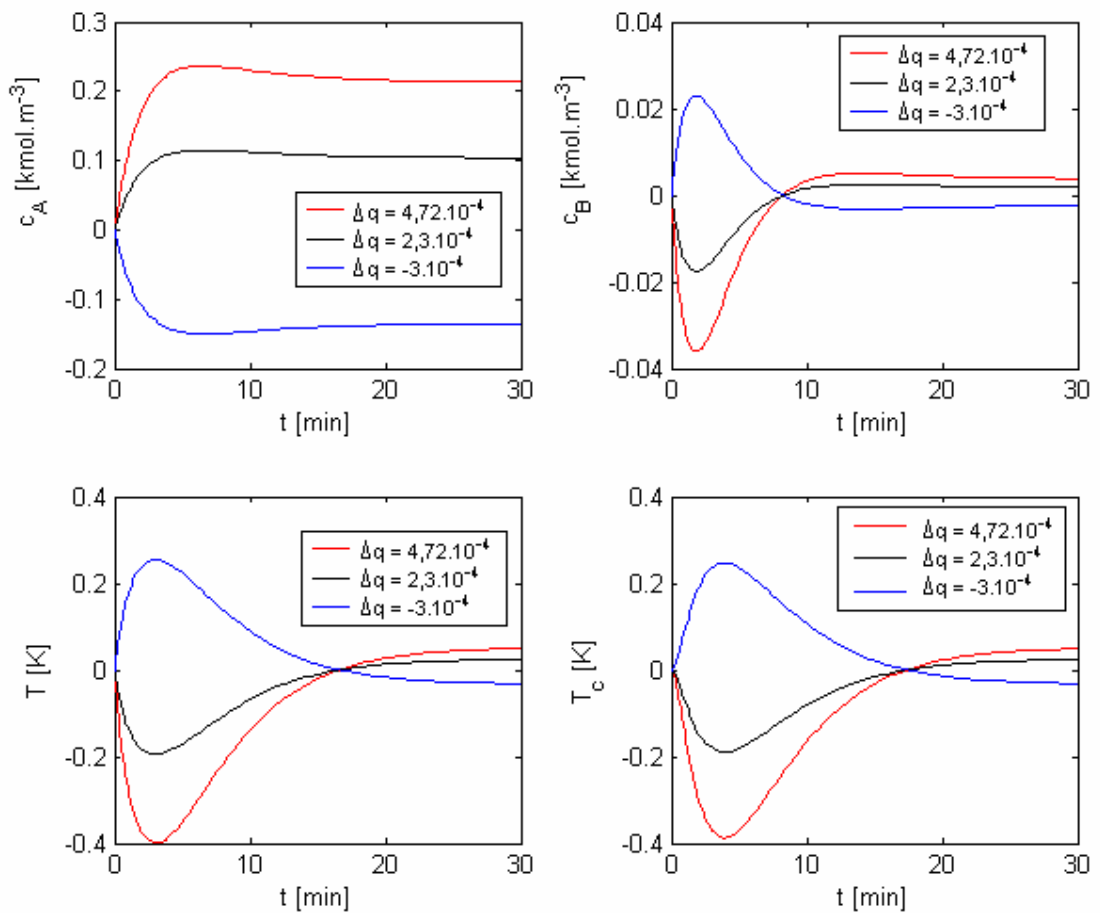


Obr. 14: Určení optimálního pracovního bodu pro různou hodnotu předaného tepla

2.3.4 Zkoumání dynamiky soustavy

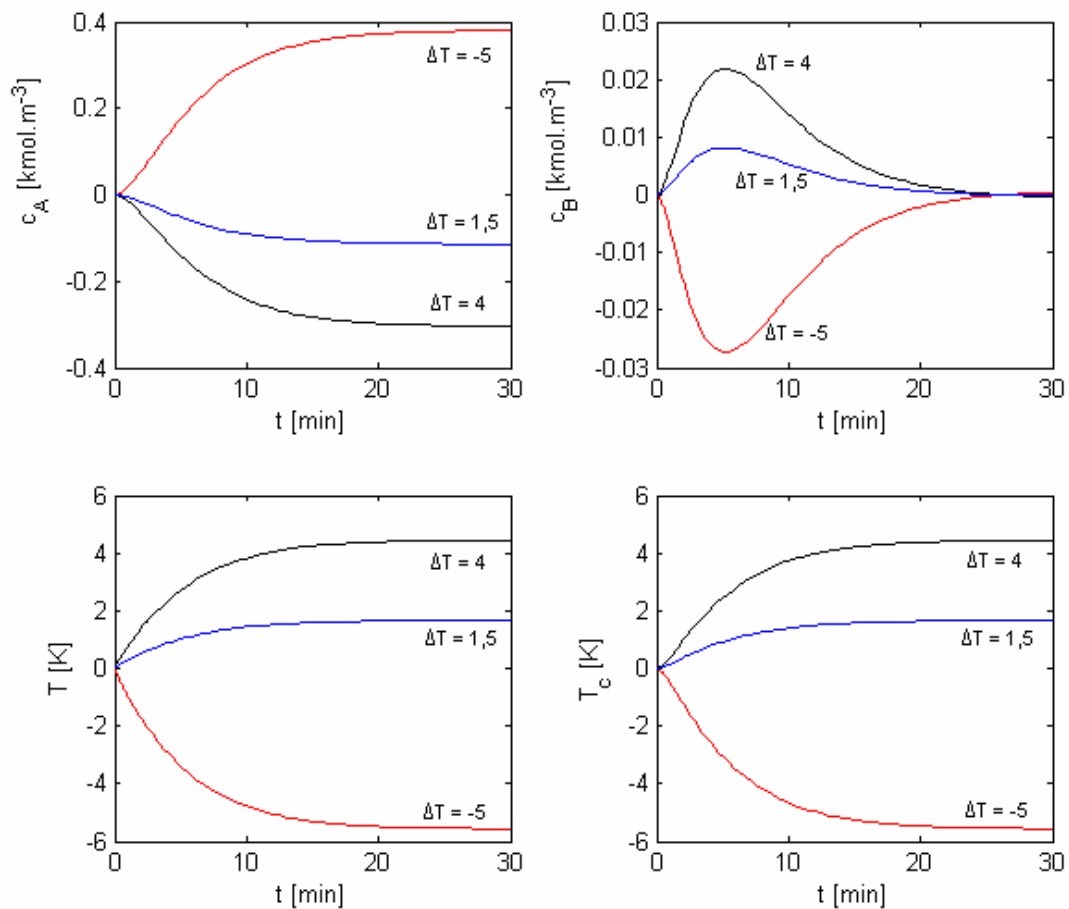
Taktéž zde jsem po určení optimálního pracovního bodu využil hodnot ustálených stavů jednotlivých veličin, abych je dosadil do výpočtu matic odchylkového tvaru modelu a použil pro zkoumání dynamiky celé soustavy pro různé změny vstupních veličin. Nabízí se zde celkem 4 možné parametry, jejichž vstup je možné měnit. Volil jsem jednotlivé změny, vynášel je do grafů a v posledním grafu jsem několik změn vstupních veličin opět zkombinoval a nechal je na soustavu působit současně.

Jako první se nabízela změna vstupního průtoku, jakožto nejčastější v praxi užívané změny. Nastavil jsem tedy vstupní průtok q o $4,72 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$, $2,30 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$ a o $-3 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$ rozdílný, než je vstupní průtok. Výsledkem byly změny, jak ukazuje graf (Obr. 15).



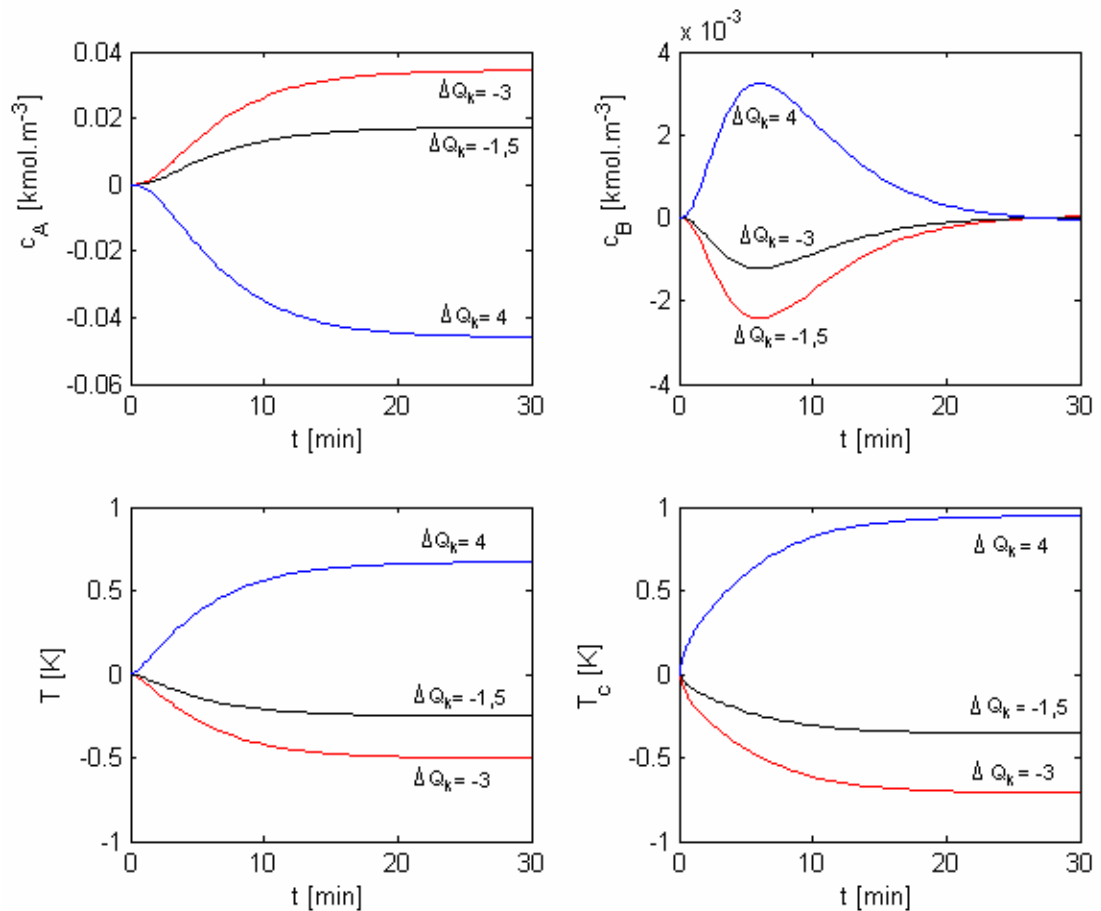
Obr. 15: Dynamické změny v soustavě po změně průtoku q

Jako další jsem zvolil změnu vstupní teploty reakční směsi T . Tentokrát jsem však zvolil dvakrát změnu kladnou a to 4 K a 1.5 K a jednu změnu zápornou, o -5 K. Změny program opět zpracoval automaticky do grafu (Obr. 16).



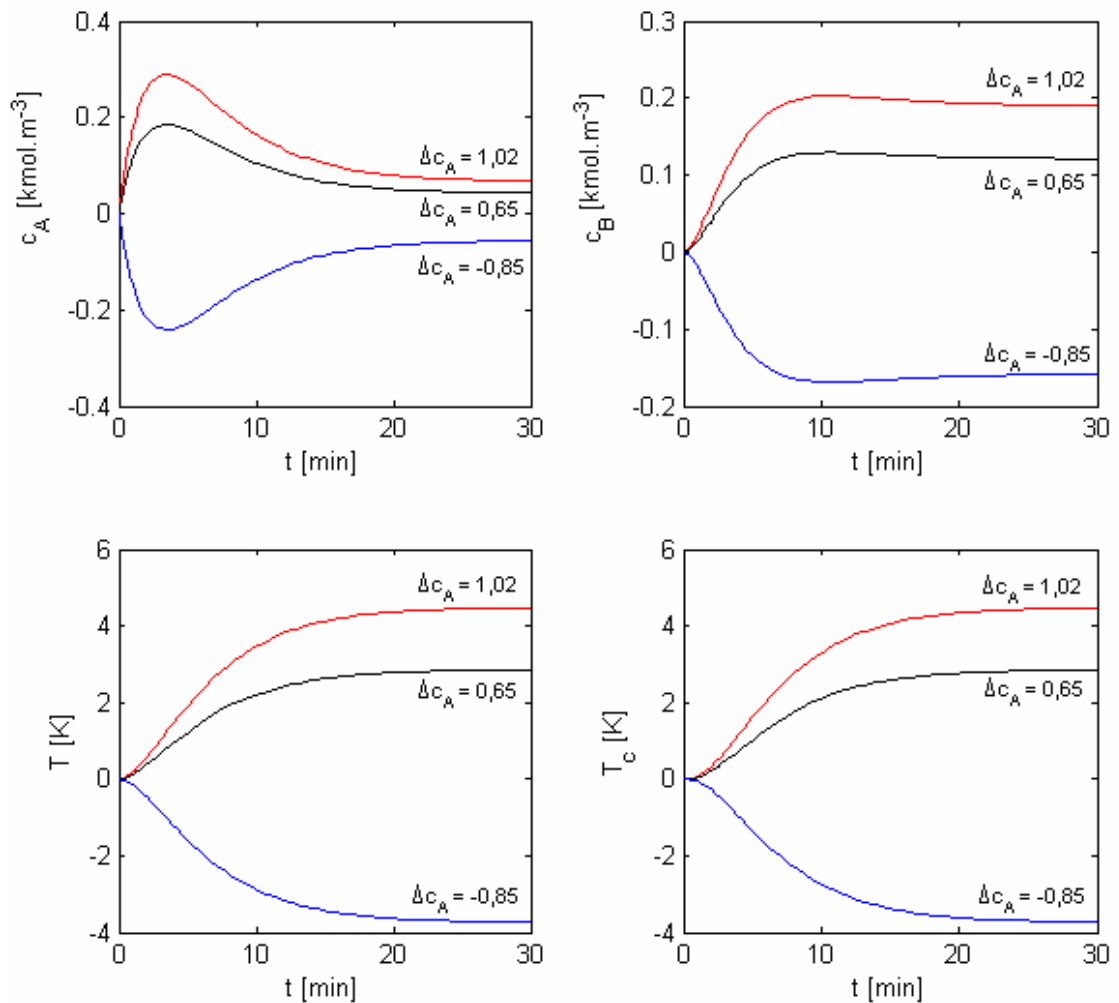
Obr. 16: Dynamické změny soustavy při poklesu vstupní teploty reakční směsi T

Pro další zkoumání změn v systému jsem zvolil skokovou změnu hodnoty předaného tepla Q_k o 4 kJ.min^{-1} , -3 kJ.min^{-1} a o $-1,5 \text{ kJ.min}^{-1}$. V grafu (Obr. 17) pak vidíme reakce soustavy na tyto skokové změny.



Obr. 17: Reakce soustavy na skokovou změnu předaného tepla Q_k

Jako čtvrtou změnu, na níž demonstruji dynamiku soustavy jsem zvolil v praxi ne příliš často používanou změnu vstupní koncentrace látky A (v praxi se požadovaná koncentrace volí vhodně zvoleným průtokem). Tentokrát jsem zvolil nárůst vstupní koncentrace c_A o $1,02 \text{ kmol.m}^{-3}$, $0,65 \text{ kmol.m}^{-3}$ a o $-0,85 \text{ kmol.m}^{-3}$. Výsledné změny můžeme pozorovat níže (Obr. 18).



Obr. 18: Reakce soustavy reaktoru na změnu vstupní koncentrace c_A

U reaktoru, v němž probíhá reakce typu „van der Vusse“ je zkoumání dynamických charakteristik nezbytnou součástí procesu identifikace soustavy a jejího chování při zavedené skokových změn daných veličin. Jak je vidět z grafů, tento reaktor reaguje citlivě i na malé změny vstupních veličin. Také z grafu (Obr. 15) je jasně vidět, že reakce soustavy je velmi rychlá. Proto je řízení tohoto reaktoru poměrně náročné, protože musí být velmi přesné.

2.4 Průtočný chemický reaktor – izotermická reakce

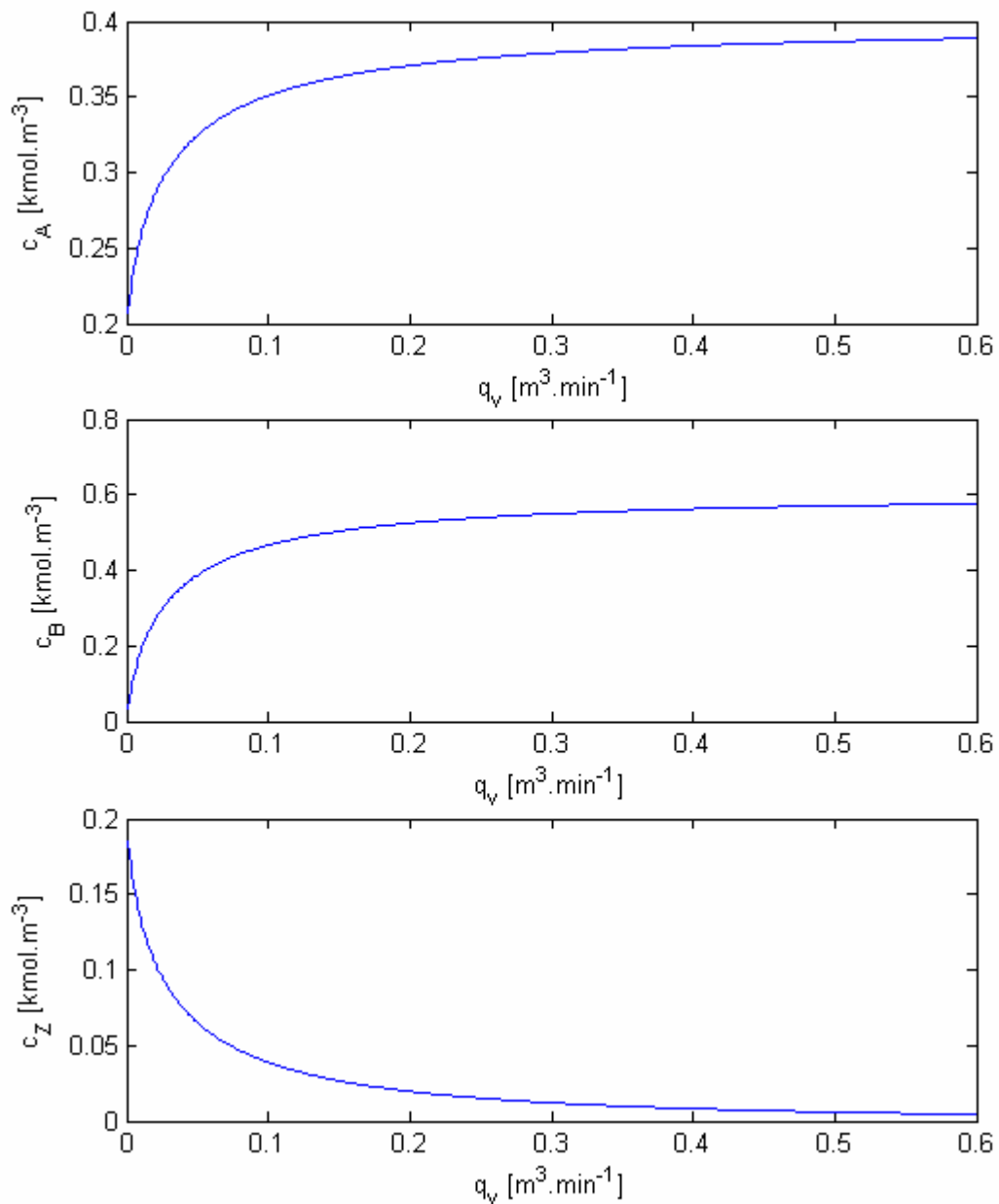
2.4.1 Zadané hodnoty

Tabulka 5: Vstupní veličiny a konstanty pro výpočet charakteristik třetí reakce

Název veličiny	Symbol	Zvolená hodnota [-]
Vstupní koncentrace složky A	c_A	$0,4 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
Vstupní koncentrace složky B	c_B	$0,6 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
Vstupní průtok reakční směsi	q	$2,365 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$
Rychlostní konstanta reakce k_1	k_1	$0,03 \text{ m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$
Rychlostní konstanta reakce k_2	k_2	$3 \text{ m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$
Rychlostní konstanta reakce k_3	k_3	$1,2 \text{ m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$
Objem chemického reaktoru	V	1 m^3

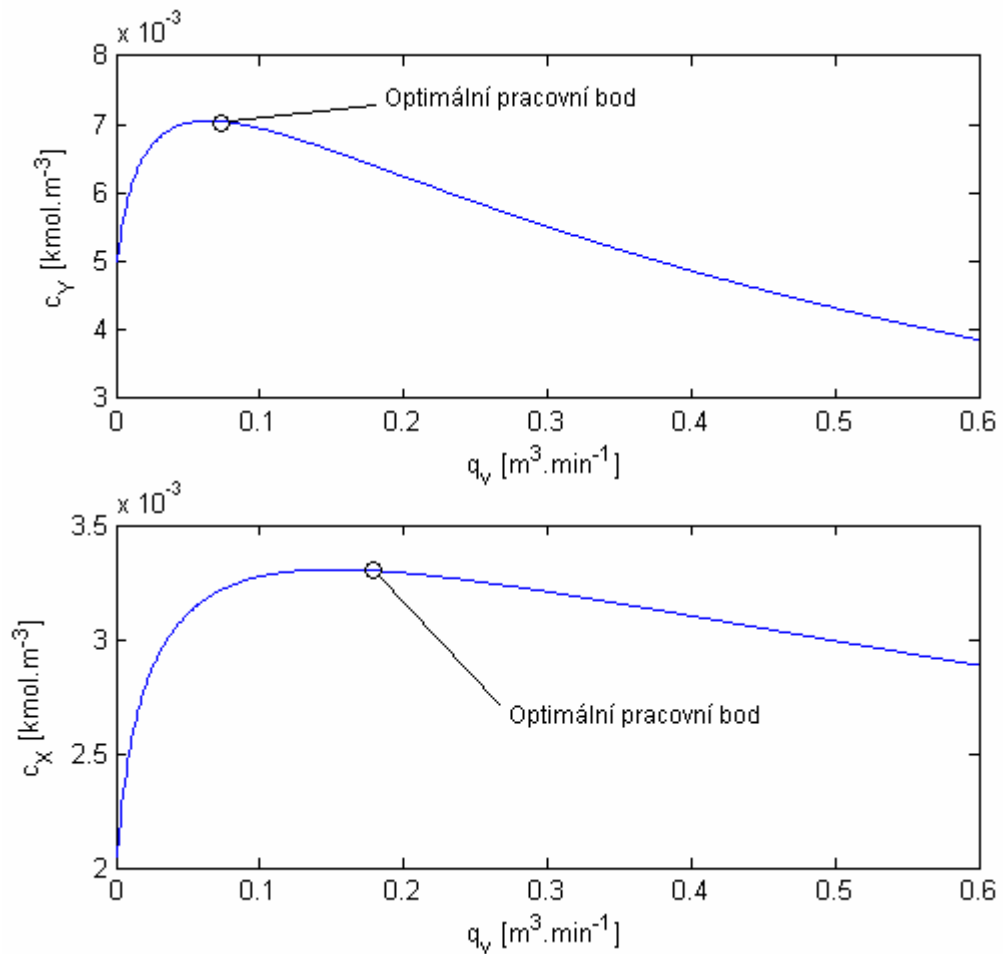
2.4.2 Statické charakteristiky

Pro výpočet statických charakteristik jsem opět využil iteračního cyklu. Vzhledem k faktu, že tentokrát se jednalo o simulaci izotermického reaktoru, kde nezáleželo na vstupních teplotách reaktoru se daly statické charakteristiky vypočítat pouze pro jednotlivé koncentrace pro měnící se hodnotu vstupního průtoku látek A a B o koncentracích c_A a c_B . Protože se však ustálené stavy od sebe řádově lišily, rozdělil jsem je do dvou přehlednějších grafů (Obr. 19) a (Obr. 20). Vstupní průtok jsem postupně zvyšoval v rámci intervalu $q \in \langle 0,001; 0,6 \rangle \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$.



Obr. 19: Ustálené stavy koncentrací izotermického reaktoru pro různý průtok

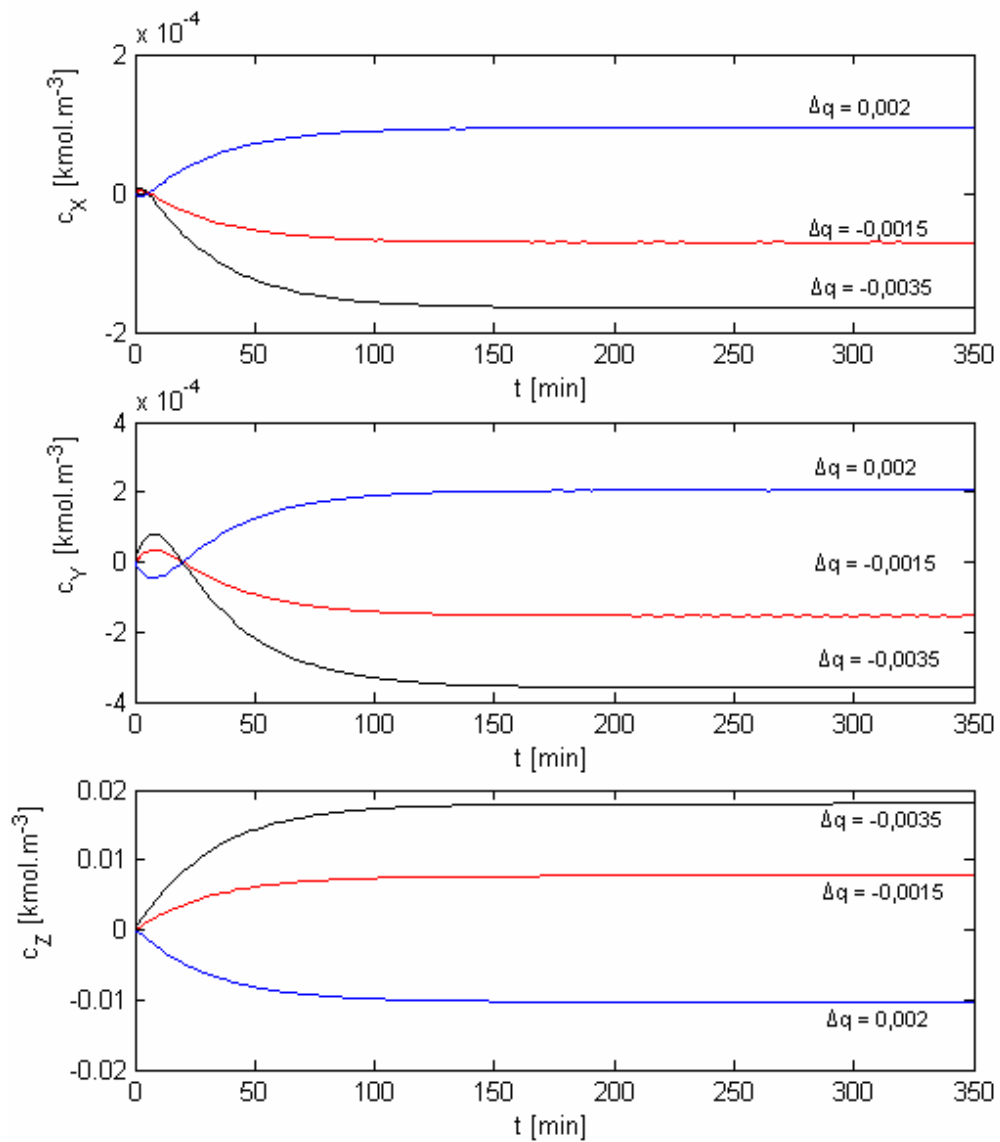
Z druhého grafu (Obr. 20), jsem určil optimální pracovní bod tohoto reaktoru, kdy výtěžnost reaktoru a vznikajících složek X, Y a Z je nejvyšší.



Obr. 20: Určení optimálního pracovního bodu izotermického reaktoru

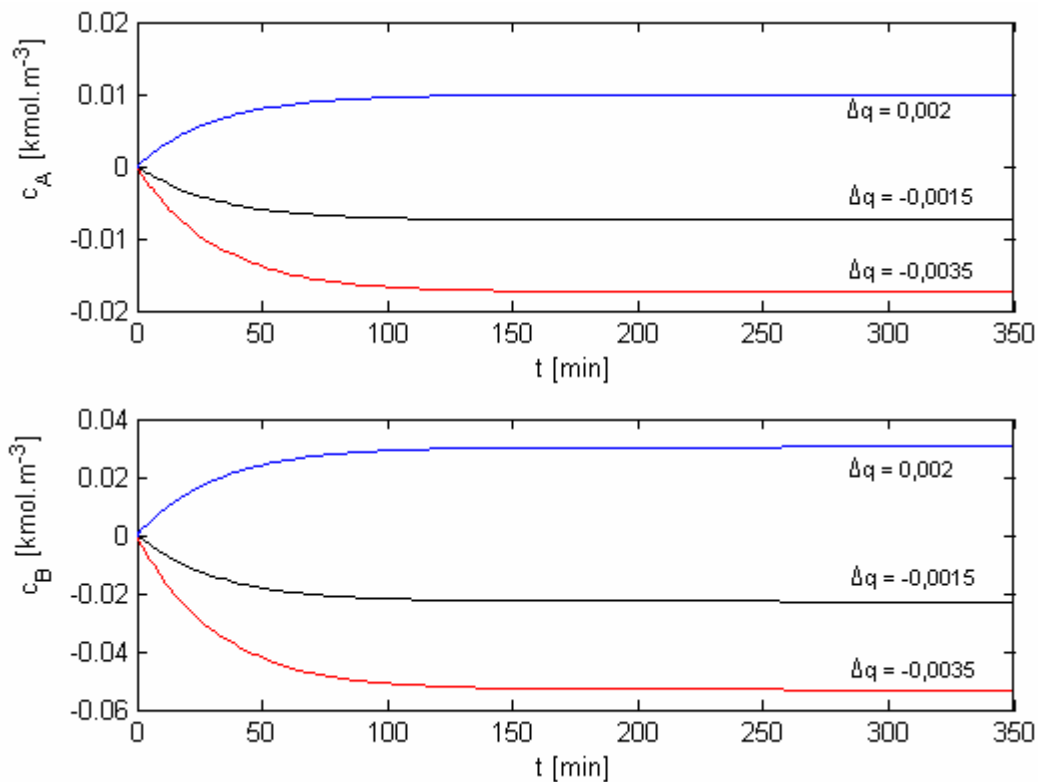
2.4.3 Analýza dynamiky soustavy

Jako první jsem testoval změnu vstupního průtoku do reaktoru, protože jeho tato se používá nejčastěji. Zde jsem volil změnu průtoku kapalin q o $-0,0015 \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$, $-0,0035 \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$ a o $0,002 \text{ m}^3 \cdot \text{min}^{-1}$ (Obr. 21).



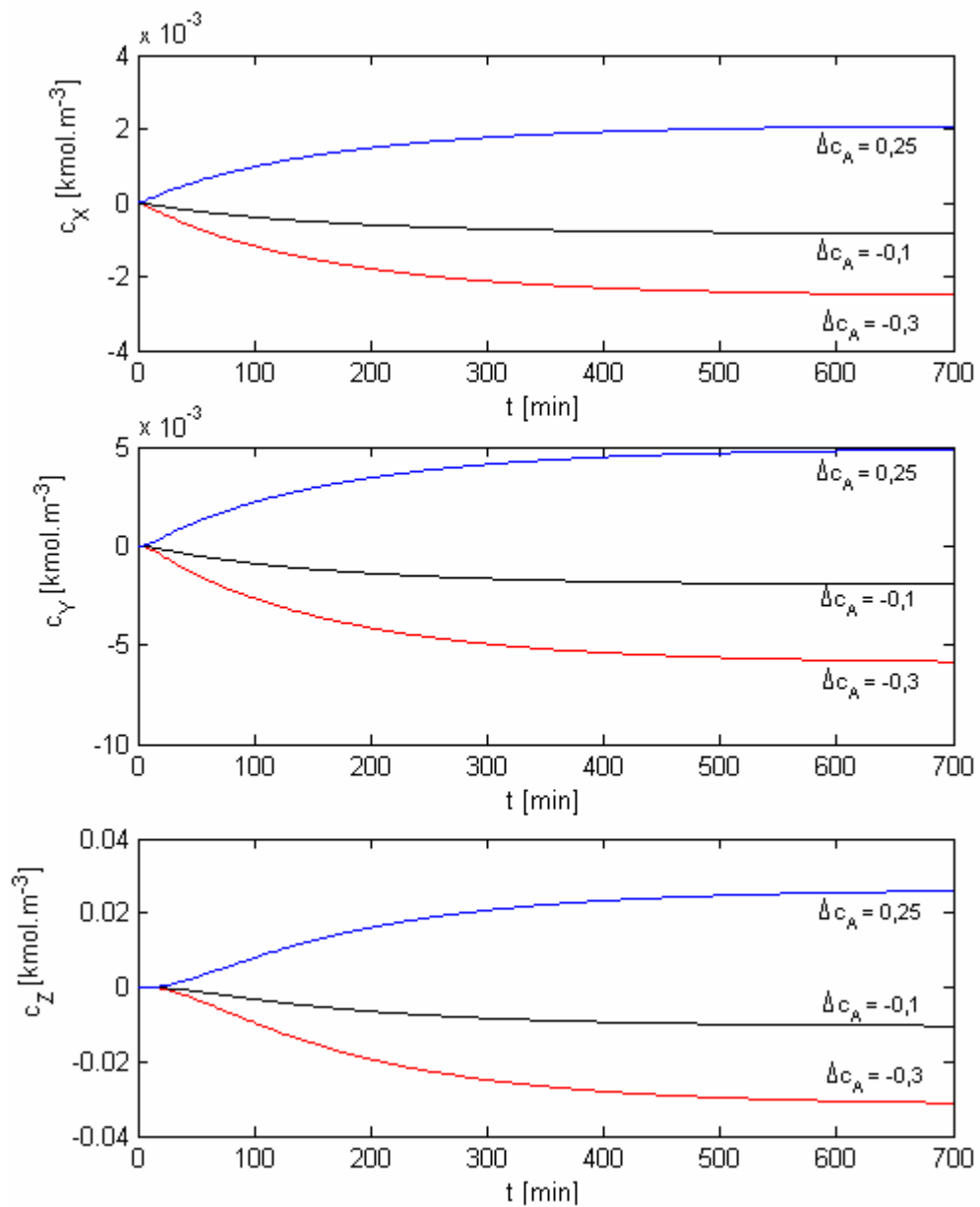
Obr. 21: Dynamika soustavy (c_X , c_Y , c_Z) při změnách průtoku q

Dynamiku vstupních veličin c_A a c_B pro změny q uvádím kvůli přehlednosti do zvláštního grafu (Obr. 22).

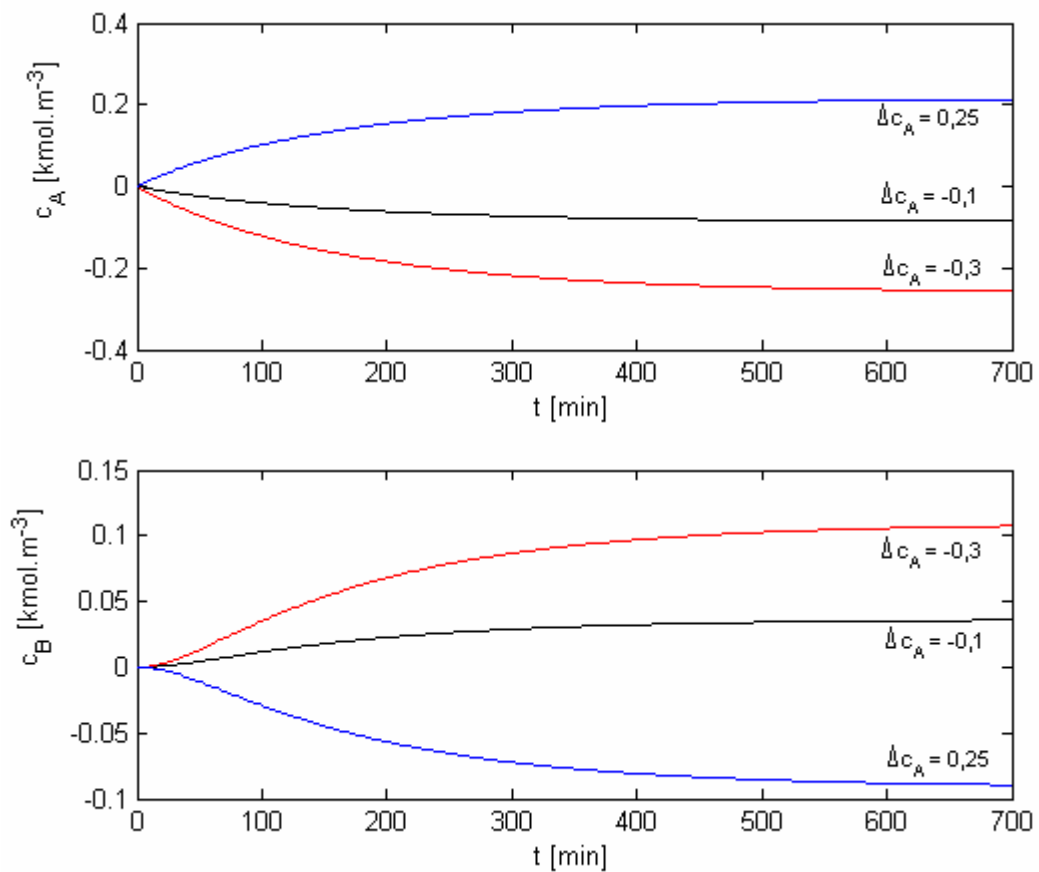


Obr. 22: Dynamika soustavy (c_A a c_B) při různých změnách průtoku q

I zde je součástí programu možnost simulovat i v praxi nepříliš časté změny vstupních koncentrací látek A a B. Proto uvádím příklad, kdy změnami vstupujícími do systému byly: změna koncentrace látky A c_A o $-0,3 \text{ kmol.m}^{-3}$, $-0,1 \text{ kmol.m}^{-3}$ a o $0,25 \text{ kmol.m}^{-3}$ (graf (Obr. 23) a (Obr. 24)).

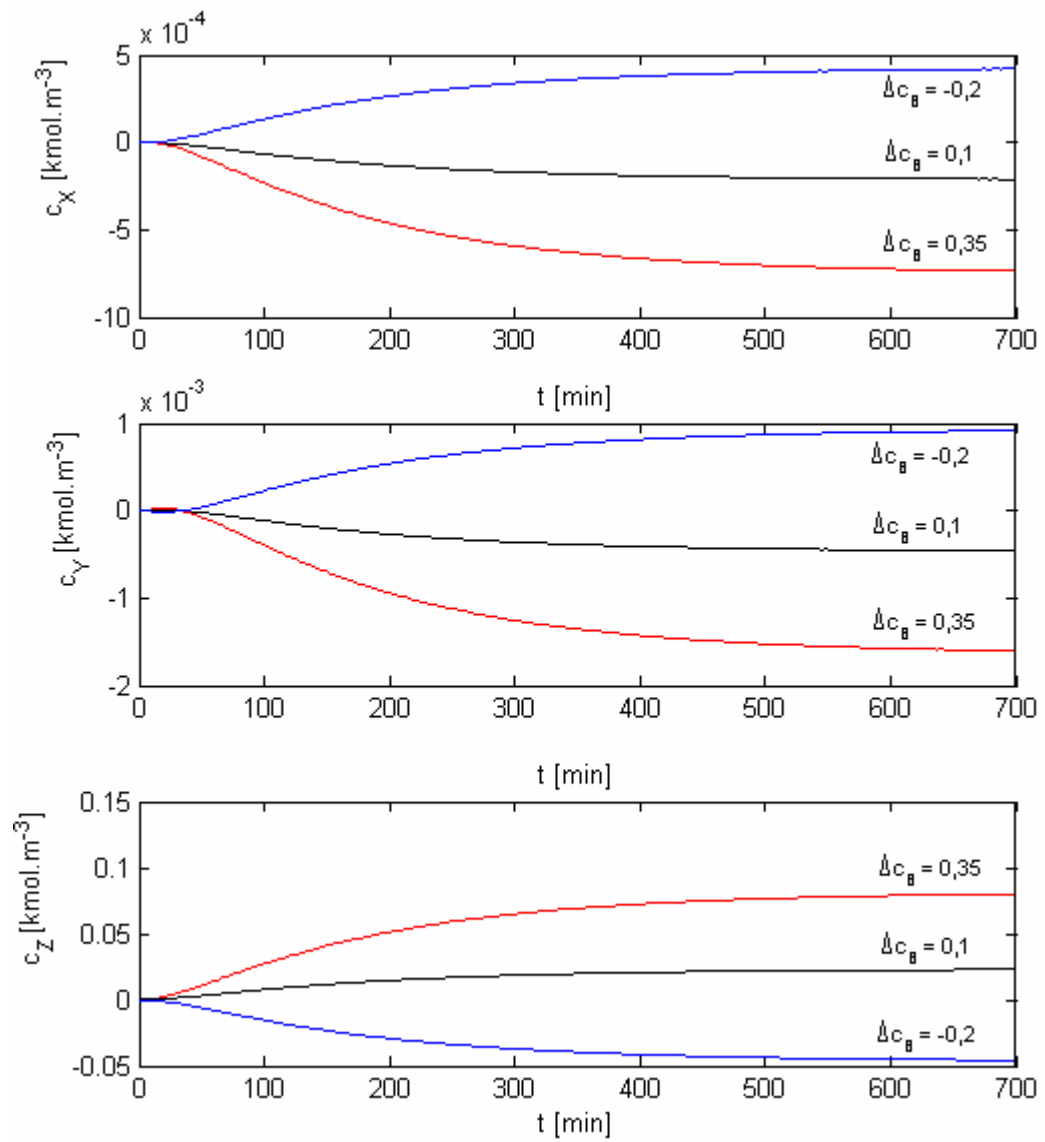


Obr. 23: Dynamika soustavy (c_X , c_Y , c_Z) při změnách koncentrace vstupní látky A

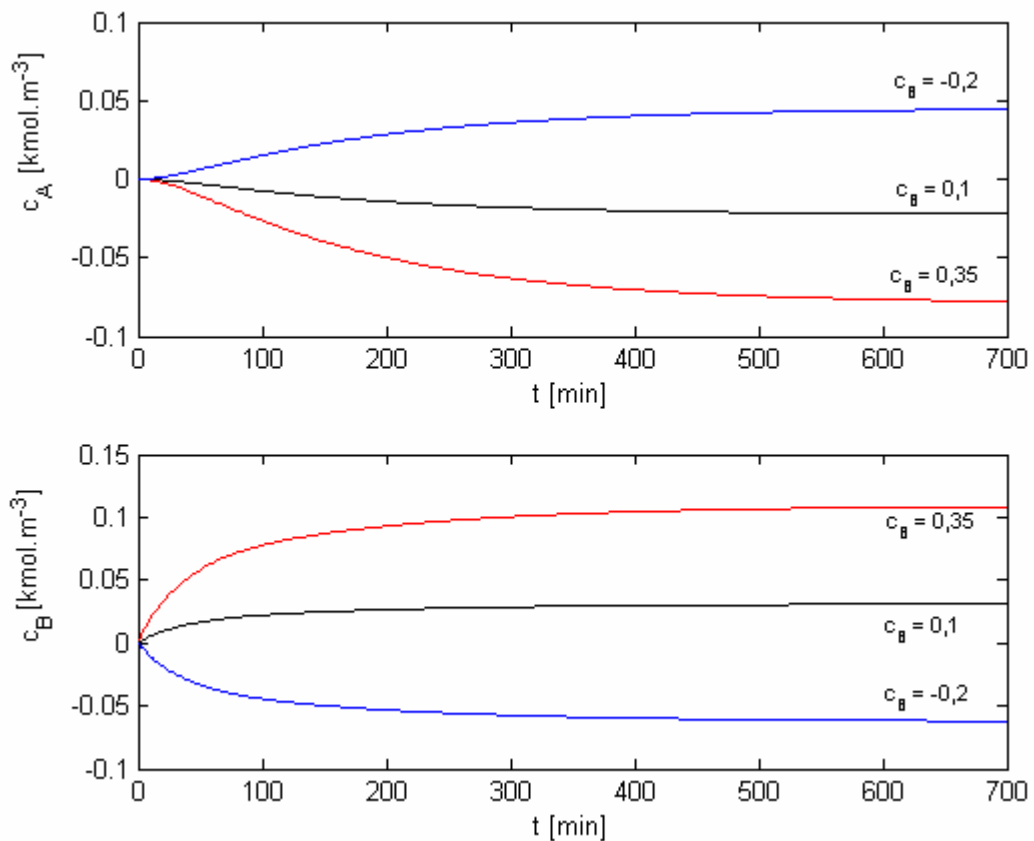


Obr. 24: Dynamika soustavy (c_A , c_B) při změnách koncentrace vstupní látky A

Dále pak skoková změna koncentrace vstupující látky B c_B o $0,1 \text{ kmol.m}^{-3}$, $0,35 \text{ kmol.m}^{-3}$ a o $-0,2 \text{ kmol.m}^{-3}$. Výsledek simulace těchto změn uvádím do grafů (Obr. 25 a Obr. 26).



Obr. 25: Koncentrace c_X , c_Y , c_Z pro změny vstupní koncentrace látky B



Obr. 26: Koncentrace c_A a c_B pro změny vstupní koncentrace látky B

U tohoto typu reaktoru, jak je zřejmé z jeho názvu nelze měnit charakteristiky s pomocí vstupních teplot. Proto se zde nabízí možnost řízení a ovlivňování chování reaktoru s pomocí průtoku. A také se tak v praxi děje. Řízení pomocí vstupní koncentrace se takřka nepoužívá. Je také vidět, že při změnách koncentrací bylo ustalování soustavy po zavedení změn asi 4x delší, než při změně vstupního průtoku.

3 ZÁVĚR

Úkolem této diplomové práce bylo zkoumání a zpracování statických charakteristik, určení optimálního pracovního bodu a zkoumání dynamiky chemického průtočného reaktoru s chlazením v plášti pro různé typy reakcí.

V teoretické části této práce jsem se věnoval vytvoření obecného přehledu o chemických reaktorech, jejich funkci v průmyslu a jejich modelování. Přednesl jsem několik možných postupů, jak pracovat s matematickými modely těchto reaktorů a jak s nimi pracovat. Zvolil jsem si také metody, s pomocí nichž jsem s matematickými modely pracoval.

Tyto metody jsem pak blíže rozvedl, uvedl jsem jejich matematickou podstatu a způsob řešení a práce s nimi. Uvedl jsem princip a matematický základ metody prosté iterace, jež slouží ke zkoumání statických charakteristik. Dále jsem rozvedl metodu Runge – Kutta čtvrtého řádu a její aplikaci na matematické modely, s pomocí níž se zkoumá dynamické chování takovýchto nelineárních modelů.

Zkoumal jsem tři různé typy reakcí v chemickém reaktoru probíhajících. Jako první jsem zvolil reakci obecnou exotermickou, jako druhou reakci typu van der Vusse a jako poslední jsem zkoumal reakci izotermickou. Všechny tyto reakce jsou specifické a přestože jejich matematické modely jsou podobné, jejich chování nikoli.

Abych v experimentální části této práce mohl uvést jakékoli výsledky, napsal jsem program, v prostředí programového balíku MATLAB verze 6.5, který umožňuje jak zobrazení statických charakteristik pro různé vstupní parametry u jednotlivých reaktorů, tak i zkoumání dynamiky těchto reaktorů, ať už pro jednu, či více změn vstupních veličin. Tento program, samozřejmě umožňuje zkoumání také několika současně působících skokových změn na chování reaktoru. Jeho součástí je automatické vyhodnocení dat do přehledných grafů. U statických charakteristik pak lze v maximech křivek určit i požadovaný optimální pracovní bod toho kterého reaktoru a tím určit, kdy reaktor pracuje nejefektivněji.

Dynamika jednotlivých reakcí je počítána s pomocí takzvaných odchytkových tvarů matematických modelů. Tyto odchytkové tvary se vytvářejí linearizací modelu v okolí zvoleného pracovního bodu a práce s nimi je jednodušší. Přesto však v dnešní době

je k dispozici dostatečná technika, i pro výpočty přímo z obyčejných diferenciálních rovnic.

V experimentální části jsem pak nastínil možnosti dalšího rozvoje tohoto tématu a mého studia. Jedná se o možnosti řízení těchto reaktorů a problematiku identifikace těchto soustav. Z tohoto hlediska se mi jako nejjednodušší pro řízení jeví reaktor izotermický, jehož model neobsahuje členy teploty. Nejobtížněji říditelný bych řekl podle mých výsledků je reaktor, v němž probíhá reakce typu „van der Vusse.“

V dalším studiu této problematiky bych se pak chtěl věnovat zkoumání rozdílu mezi výpočtem dynamiky přímo z modelu a výpočtem z odchylkového tvaru matematického modelu a řízením modelů těchto reaktorů.

SEZNAM POUŽITÉ 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., Přenosil, 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] Schmidt, L. D.: The Engineering of Chemical Reactions. Oxford University Press US, 1997
- [5] Missen, R. W., Mims, Ch. A., Saville, B. A.: Chemical Reaction Engineering and Kinetics. John Wiley & Sons Inc., 1998
- [6] Chen, H., Kremling, A., Allgöwer, F. Nonlinear Predictive Control of a Benchmark CSTR. In: *Proceedings of 3rd European Control Conference*. Rome, Italy 1995
- [7] Dostál, P., Vojtěšek, J. Adaptivní řízení nelineárních procesů s průběžnou identifikací spojitého a delta modelu, *AT&P Journal plus 4*, 2003. **10**, 37-44
- [8] Vojtěšek, J., Dostál, P., Haber, R. Simulation and Control of a Continuous Stirred Tank Reactor. In: *Proc. of Sixth Portuguese Conference on Automatic Control CONTROLLO 2004*. Faro. Portugal, 2004, p. 315-320.
- [9] Ralston, A. *Základy numerické matematiky*. Praha, Academia 1979.
- [10] Oficiální stránka MATLABu: dostupná z www: <http://www.mathworks.com/>
- [11] The Free Encyclopedia WIKIPEDIA: dostupná z <http://www.wikipedia.org/>

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

c_A	Koncentrace látky A
c_B	Koncentrace látky B
c_X	Koncentrace látky X
c_Y	Koncentrace látky Y
c_Z	Koncentrace látky Z
CSTR	Continuous Stirred Tank Reactor
CSTRCOM	Continuous Stirred Isothermal Reactor With Complex Reactions
T	Teplota reakční směsi
T_c	Teplota chladicí směsi
q	Průtok reakční směsi
q_c	Průtok chladicí směsi
Q_k	Předané teplo
k_i	Rychlostní konstanta pro i -tou reakci
E_i	Aktivační energie i -té reakce
R	Molární plynová konstanta
V	Objem reaktoru
V_c	Objem pláště
α	Koeficient přestupu tepla
F	Přestupná plocha
t	Spojité čas
m	Hmotnost
a_i	Koeficienty matice A
b_i	Koeficienty matice B
ρ	Hustota reakční směsi

ρ_c	Hustota chladicí směsi
c_p	Měrná tepelná kapacita
c_{pc}	Měrná tepelná kapacita chladiva
h_i	Reakční entalpie i -té reakce
φ	Nelineární vektorová funkce
D	Uzavřená konvexní oblast
\mathbf{f}	Funkce
\mathbf{g}	Funkce
\mathbf{u}	Vektor vstupních veličin
\mathbf{x}	Vektor stavových veličin
\mathbf{y}	Vektor výstupních veličin
n, m, r	Dimenze vektorů \mathbf{x} , \mathbf{u} a \mathbf{y}
h	Integrační krok
ε	Přesnost výpočtu
$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$	Matice stavových a výstupních veličin
Δ	Diference

SEZNAM OBRÁZKŮ

<i>Obr. 1: Schéma různých typů chemických reaktorů</i>	11
<i>Obr. 2: Obecné schéma chemického průtočného reaktoru s chlazením v plášti</i>	13
<i>Obr. 3: Schéma modelu CSTR pro obecnou exotermickou reakci</i>	23
<i>Obr. 4: Schéma CSTR pro modelování reakce typu „van der Vusse“</i>	27
<i>Obr. 5: Schéma CSTR pro izotermickou reakci.....</i>	31
<i>Obr. 6: Určení optimálního pracovního bodu pro proměnný průtok reakční směsi</i>	38
<i>Obr. 7: Statické charakteristiky pro proměnný průtok chladicí směsi</i>	39
<i>Obr. 8: Reakce ustálených stavů soustavy na změnu vstupního průtoku reakční směsi.....</i>	40
<i>Obr. 9: Změna ustálených stavů veličin při změně vstupního průtoku q_c.....</i>	41
<i>Obr. 10: Změna ustálených stavů při změně teploty vstupující reakční směsi</i>	42
<i>Obr. 11: Změna ustálených stavů při změně vstupní teploty chladicí kapaliny</i>	43
<i>Obr. 12: Dynamické změny při zavedení skokových změn koncentrace c_A</i>	44
<i>Obr. 13: Statické charakteristiky pro proměnný vstupní průtok reakční směsi</i>	46
<i>Obr. 14: Určení optimálního pracovního bodu pro různou hodnotu předaného tepla</i>	47
<i>Obr. 15: Dynamické změny v soustavě po změně průtoku q.....</i>	48
<i>Obr. 16: Dynamické změny soustavy při poklesu vstupní teploty reakční směsi T</i>	49
<i>Obr. 17: Reakce soustavy na skokovou změnu předaného tepla Q_k.....</i>	50
<i>Obr. 18: Reakce soustavy reaktoru na změnu vstupní koncentrace c_A.....</i>	51
<i>Obr. 19: Ustálené stavy koncentrací izotermického reaktoru pro různý průtok</i>	53
<i>Obr. 20: Určení optimálního pracovního bodu izotermického reaktoru.....</i>	54
<i>Obr. 21: Dynamika soustavy (c_X, c_Y, c_Z) při změnách průtoku q.....</i>	55
<i>Obr. 22: Dynamika soustavy (c_A a c_B) při různých změnách průtoku q.....</i>	56
<i>Obr. 23: Dynamika soustavy (c_X, c_Y, c_Z) při změnách koncentrace vstupní látky A.....</i>	57
<i>Obr. 24: Dynamika soustavy (c_A, c_B) při změnách koncentrace vstupní látky A</i>	58
<i>Obr. 25: Koncentrace c_X, c_Y, c_Z pro změny vstupní koncentrace látky B</i>	59
<i>Obr. 26: Koncentrace c_A a c_B pro změny vstupní koncentrace látky B.....</i>	60
<i>Obr. 27: Rozhraní programu CSTR pro výpočet požadovaných charakteristik.....</i>	69

SEZNAM TABULEK

<i>Tabulka 1: Konstanty pro výpočet charakteristik první reakce.....</i>	<i>37</i>
<i>Tabulka 2: Vstupní veličiny pro výpočet charakteristik první reakce</i>	<i>37</i>
<i>Tabulka 3: Konstanty pro výpočet charakteristik druhé reakce.....</i>	<i>45</i>
<i>Tabulka 4: Vstupní veličiny pro výpočet charakteristik druhé reakce</i>	<i>46</i>
<i>Tabulka 5: Vstupní veličiny a konstanty pro výpočet charakteristik třetí reakce</i>	<i>52</i>

SEZNAM PŘÍLOH

P I: PROGRAM „CSTR“ A UŽIVATELSKÉ ROZHRANÍ VYTVOŘENÉ PRO
VÝPOČTY

PŘÍLOHA P I: PROGRAM „CSTR“ A UŽIVATELSKÉ ROZHRAŇÍ VYTVOŘENÉ PRO VÝPOČTY

Program je vytvořen v programovém balíku MATLAB verze 6.5. Po spuštění programu příkazem „Main“ v konzoli MATLABu se zobrazí hlavní okno program, s pomocí něž se vypočítávají požadované charakteristiky. Okno vypadá viz. Obr. 27.

The screenshot shows the CSTR program interface with three main panels for different reactor types. Each panel contains input fields for flow rates, temperatures, concentrations, and simulation time, along with buttons for 'Stat. char.' and 'Dynamické charakteristiky'. Circled numbers 1 through 6 highlight specific elements in the interface.

Panel 1: Chemický průtočný reaktor - Obecná exotermická reakce

- Průtok: q_V od: 0.001 do: 0.1 m^3/min Stat. char.
- Průtok: q_{cV} od: 0.001 do: 0.1 m^3/min Stat. char.
- Zvolte průtok: $q_V = 0.08$ m^3/min Teplota reakční směsi: $T_V = 323$ K Zvolte koncentraci: $c_{AV} = 2.85$ $kmol/m^3$
- Zvolte průtok: $q_{cV} = 0.03$ m^3/min Teplota chladiva: $T_{cV} = 293$ K Zvolte délku simulace: $t = 200$ min
- Změna průtoku: $\Delta q_V = 0.01$ m^3/min Změna teploty: $\Delta T = 5$ K Změna koncentrace: $\Delta c_A = 0.5$ $kmol/m^3$
- Změna průtoku: $\Delta q_c = -0.02$ m^3/min Změna teploty: $\Delta T_c = -10$ K
- Buttons: Stat. char., Dynamické charakteristiky

Panel 2: Chemický průtočný reaktor - reakce typu "van der Vusse"

- Zvolte: q_V od: 0.0005 do: 0.03 m^3/min Stat. char.
- Zvolte: Q_k od: -500 do: 500 $kJ.min$ Stat. char.
- Teplota reakční směsi: $T_V = 378.05$ K Zvolte průtok: $q_V = 0.00236$ m^3/min Zvolte koncentraci: $c_{AV} = 5.1$ $kmol/m^3$
- Teplota chladicí: $T_{cV} = 293$ K Předané: $Q_k = -18.55$ $kJ.min$ Zvolte délku simulace: $t = 30$ min
- Změna teploty: $\Delta T = 5$ K Změna průtoku: $\Delta q_V = 0.01$ m^3/min
- Změna tepla: $\Delta Q_k = -0.02$ $kJ.min$ Změna koncentrace: $\Delta c_A = 0.5$ $kmol/m^3$
- Buttons: Stat. char., Dynamické charakteristiky

Panel 3: Chemický průtočný reaktor - izotermický CSTR

- Průtok: q_V od: 0.001 do: 0.6 m^3/min Stat. char.
- Zvolte koncentraci: $c_A = 0.4$ $kmol/m^3$ Zvolte vstupní průtok: $q_V = 0.006$ m^3/min
- Zvolte koncentraci: $c_B = 0.6$ $kmol/m^3$ Zvolte objem reaktoru: $V = 1$ m^3 Délka simulace: $t = 350$ min
- Změna koncentrace: $\Delta c_A = 0.5$ $kmol/m^3$ Změna průtoku: $\Delta q_V = 0.015$ m^3/min
- Změna koncentrace: $\Delta c_B = 0.5$ $kmol/m^3$
- Buttons: Stat. char., Dynamické charakteristiky

Buttons: Konec

Obr. 27: Rozhraní programu CSTR pro výpočet požadovaných charakteristik

Jak je vidět, jsou všechny proměnné zadatelné pomocí editovacích políček, která jsou popsány i jednotlivými rozměry zadávaných veličin, aby uživatel zadával hodnoty ve správných jednotkách a program pracoval bezchybně.

Výpočty po zadání jsou pak provedeny stiskem jednotlivých tlačítek, jež jsou barevně odlišeny a očíslovány. Blíže tedy k funkcím jednotlivých tlačítek:

Tlačítko 1: Vypočítá dynamické charakteristiky pro zadané proměnné pro obecnou exotermickou reakci

Tlačítko 2: Vypočítá z uživatelem zadaných proměnných dynamické charakteristiky reaktoru s reakcí typu „van der Vusse“

Tlačítko 3: Spočte dynamické charakteristiky izotermálního reaktoru pro uživatelem zadané proměnné

Tlačítko 4 (vlevo): Vypočítá statické charakteristiky prvního reaktoru pro zadaný interval vstupního průtoku reakční směsi

Tlačítko 4 (vpravo): Vypočítá statické charakteristiky prvního reaktoru pro zadaný interval vstupního průtoku chladiva

Tlačítko 5 (vlevo): Vypočítá statické charakteristiky druhého reaktoru pro zadaný interval vstupního průtoku reakční směsi

Tlačítko 5 (vpravo): Vypočítá statické charakteristiky druhého reaktoru pro zadaný interval vstupního průtoku reakční směsi