

**SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE
FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ
TECHNOLÓGIE**

EVIDENČNÉ ČÍSLO: FCHPT-5415-65927

**MATEMATICKÉ MODELOVANIE MEMBRÁNOVÝCH
PROCESOV**

BAKALÁRSKA PRÁCA

2016

Oliver Čizmazia

**SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE
FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ
TECHNOLÓGIE**

Evidenčné číslo: FCHPT-5415-65927

**MATEMATICKÉ MODELOVANIE MEMBRÁNOVÝCH
PROCESOV**

BAKALÁRSKA/DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program: Automatizácia, informatizácia a manažment v chémii a potravinárstve

Študijný odbor: 5.2.14 Automatizácia

Školiace pracovisko: Oddelenie informatizácie a riadenia procesov

Vedúci záverečnej práce/školiťel': Ing. Richard Valo, PhD

Konzultant: Ing. Martin Jelemenský, Ayush Sharma, Msc.

Bratislava 2016

Oliver Čizmazia



ZADANIE BAKALÁRSKEJ PRÁCE

Študent: **Oliver Čizmazia**
ID študenta: 65927
Študijný program: automatizácia, informatizácia a manažment v chémii a potravinárstve
Kombinácia študijných odborov: 5.2.14. automatizácia, 5.2.52. priemyselné inžinierstvo
Vedúci práce: Ing. Richard Valo, PhD.
Konzultant: Ing. Martin Jelemenský, Ing. Ayush Sharma

Názov práce: **Matematické modelovanie membránových procesov**

Špecifikácia zadania:

Membrána funguje ako sito s veľmi malými okami; Tieto procesy majú široké spektrum aplikácií. Napr. v potravinárskom priemysle sa používa na čistenie ovocnej šťavy a mlieka. Teplota hrá dôležitú úlohu v princípe fungovania membrán. Vo farmaceutickom priemysle sa používajú membránové separačné procesy pre rôzne ciele, akým je napr. separácia albumínu z ľudskej krvi a príprava protilátok. Biotechnologické odvetvia využívajú membránové procesy na koncentrovanie enzýmov či odstraňovanie nečistôt, akými sú peptidy a soli. V automobilovom priemysle sa používajú na čistenie náterov a lepidiel pomocou mikrofiltrácie. Ziska sa tak vysoko kvalitný náter karosérie. Tento spôsob používajú spoločnosti Fiat a Ferrari.

Úlohy:

Študovať teóriu a aplikácie membránových procesov.
Modelovať proces matematicky.
Numerická optimalizácia membránového procesu s využitím matematického modelu.

Rozsah práce: 30

Riešenie zadania práce od: 21. 03. 2016

Dátum odovzdania práce: 09. 05. 2016

L. S.

Oliver Čizmazia
študent

prof. Ing. Miroslav Fikar, DrSc.
vedúci pracoviska

prof. Ing. Miroslav Fikar, DrSc.
garant študijného programu

Abstrakt

V bakalárskej práci sa rozoberá téma membránovej separácie. Jej cieľom je v úvode oboznámiť čitateľa so základnými pojmami membránových technológií a stručne predostrieť túto problematiku, jej výhody a nevýhody, ako aj základy dynamickej optimalizácie a jej termínov a prístupov. Ďalšia časť práce je sústredená na membránovú separáciu, ktorej hnacia sila je zvýšený tlak. Opisujú sa tu štyri základné typy a ich praktické využitie. Nasleduje matematické modelovanie paralelne zapojených membrán, ktorého výsledkom je matematický model slúžiaci na simuláciu takehoto procesu. Počet zapojených membrán je potom zredukovaný na jednu membránu a pre túto situáciu je taktiež odvodený matematický model. Pomocou tohto modelu a modelu limitujúceho prúdu je vyriešený príklad, kedy sa separuje roztok s dvoma rôzne veľkými zložkami. V tomto príklade je použitý dvojstupňový štandardný prístup. Práca pokračuje druhým príkladom, ktorý kopíruje prvé zadanie, avšak chceme sa na daný problém pozrieť z optimálneho hľadiska a zminimalizovať čas procesu separácie. Na tento problém sme použili metódu parametrizácie vektora riadenia. Zistili sme, že daný proces sa touto metódou urýchlí oproti štandardnému prístupu viac ako trojnásobne. Práca slúži ako úvod do problematiky dynamickej optimalizácie v membránovej separácii.

Kľúčové slová: membránová separácia; parametrizácia vektora riadenia; dynamická optimalizácia

Abstract

This bachelor thesis analyses the subject of membrane separation. Its goal is to introduce the basic terms of membrane technology, to briefly explain this topic, talk about its advantages and disadvantages, as well as the basics of dynamic optimization problems and related terms and approaches. To continue, we talk about pressure based membrane separation. We describe four basic types and their practical use. Next part is mathematical modeling of membranes connected in parallel, which is used for simulation of such process. The number of membranes is then reduced to a singular membrane, and such model is derived as well. With this model using the limiting flux model we solved a case study, where a solution consisting of two different components is separated. In this case study we used a standard, two-step approach. The thesis continues with second case study, which uses the same problem, approaching it though with dynamic optimization. We applied the control vector parametrization method attempting to minimize the separation time. We found, that the process time is reduced more than three times compared to the standard approach. This thesis is considered as an introduction to the dynamic optimization issue in membrane separation.

Key words: membrane separation; control vector parametrization; dynamic optimization

Obsah

Zoznam ilustrácií.....	10
Zoznam tabuliek.....	11
1 Úvod.....	12
2 Dynamická optimalizácia	14
2.1 Funkcionál	14
2.2 Ohraničenia.....	14
2.3 Matematický model procesu	15
2.4 Definovanie optimalizovaného problému	15
2.5 Analytické metódy.....	16
2.6 Numerické metódy.....	16
2.6.1 Parametrizácia vektora riadenia	17
3 Membránová separácia	19
3.1 Výhody a nevýhody membránovej separácie.....	20
3.2 Princíp membránovej separácie	21
3.3 Mikrofiltrácia	21
3.4 Ultrafiltrácia.....	22
3.5 Nanofiltrácia	23
3.6 Reverzná osmóza	23
4 Matematický model membránovej filtrácie	25
4.1 Modelovanie paralelne zapojených n-membrán	25
4.2 Modelovanie singulárnej membrány.....	27
4.3 Zhrnutie výsledných modelov.....	28
5 Príklad 1.....	29
5.1 Výsledky príkladu 1	29
5.2 Diskusia	30

6	Príklad 2.....	32
6.1	Definícia optimalizovaného problému.....	32
6.2	Zhrnutie optimalizovaného problému.....	33
6.3	Výsledky príkladu 2.....	33
6.4	Diskusia	36
7	Záver.....	37
8	Zoznam použitej literatúry.....	38

Zoznam ilustrácií

Obrázok 1: Parametrizácia vektora riadenia	17
Obrázok 2: Membránová separácia.....	20
Obrázok 3: Mikrofiltrácia a jej priepustnosť	22
Obrázok 4: Ultrafiltrácia a jej priepustnosť	22
Obrázok 5: Nanofiltrácia a jej priepustnosť	23
Obrázok 6: Reverzná osmóza a jej priepustnosť	24
Obrázok 7: Schéma paralelného zapojenia membrán	25
Obrázok 8: Schéma jednoduchého zapojenia membrány.....	27
Obrázok 9: Koncentračný stavový diagram po použití CVP metódy.....	34
Obrázok 10: Optimálne riadenie príkladu 1 parametrom alfa	35

Zoznam tabuliek

Tabuľka 1: Počet zapojených membrán a príslušný čas separácie	30
Tabuľka 2: Stavové veličiny, kontrolný parameter alfa a čas v jednotlivých časových intervaloch optimálneho riadenia.....	35

1 Úvod

Membránové procesy nie sú novým vynálezom. Sú súčasťou nášho sveta od počiatku života na svete, nakoľko sa podieľajú na takmer všetkých bioprocessoch a sú časťou buniek. Priemyselná výroba membrán a ich využitie však pomerne novým vynálezom je, a vďaka širokému spektru využitia, ktoré membránové procesy ponúkajú, sa nimi ľudia zaoberajú stále viac a viac. Membránové procesy sa používajú na filtrovanie kvapalín alebo plyných zmesí a ich ďalšie prečisťovanie. Prevažne sa využívajú v biotechnologickom, farmaceutickom alebo potravinárskom priemysle, hlavne keď je potrebná vysoká kvalita výsledného produktu. Dnešné membránové technológie používajú mnoho procesov ako napríklad membránové reaktory, diafiltráciu, membránovú destiláciu, elektrodialýzu atď. Všetky však majú jednu spoločnú vec – princíp membránovej separácie. Medzi niektoré využitie membránovej separácie patrí napr. výroba pitnej vody z morskej, čistenie odpadových vôd, zvyšovanie koncentrácie látok, zvyšovanie ich kvality, ale aj výroba umelých orgánov, či absorpcia liekov v ľudskom tele.

V posledných rokoch ukázali membránové procesy veľký potenciál, a tak sa ich výroba stáva stále viac a viac racionálnejšou. Medzi hlavné výhody oproti štandardným zaužívaným separačným metódam patrí vysoká efektivita, flexibilita, vysoká selektivita a kvalita produktu, nízke energetické náklady a ekologická nezávadnosť.

Najčastejšou aplikáciou membránovej technológie je desalinácia morskej vody a výroba pitnej vody. Používa sa to napr. pri výrobe v Mŕtvom mori alebo Červenom mori. Majoritné využitie je tiež pri výrobe nekryogenického dusíku, alebo prečisťovaní vodíku. V súčasnosti sa taktiež zvažuje možnosť prečisťovania vzduchu od oxidu uhličitého, nakoľko membrány sú schopne veľmi efektívne tento plyn separovať. Umelé orgány, napríklad obličky, sú štandardným využitím v biochemickom inžinierstve. V blízkej budúcnosti sa tiež očakáva, že ďalšie orgány budú syntetizovateľné vďaka membránam, napríklad pečeň či pankreas. Veľký prínos tiež priniesli membránové technológie pre kozmonautov a pre prežitie v laboratóriách na iných planétach.

Membránové technologické procesy potrebujú na svoj priebeh externú silu, čo je opakom pri osmóze alebo difúzií. Touto silou býva prevažne zvýšený tlak, ale môže to tiež byť koncentračný gradient či elektrický potenciál.

Membrány používané na rôzne aplikácie sa často veľmi líšia v ich štruktúre, ich funkcií a v spôsobe akým pracujú. Avšak všetky membrány majú niekoľko spoločných vlastností, ktoré ich robia veľmi atraktívnym nástrojom na separácie molekulárnych zmesí. Medzi najdôležitejšie

z týchto vlastností patrí fakt, že separácia je zabezpečená fyzicky pri okolitej teplote, bez chemického zásahu do zložiek zmesi. Toto je nevyhnutné pre aplikácie umelých orgánov a mnoho procesov pri vstrebávaní medikamentov, ako aj vo farmaceutickom či potravinárskom priemysle. Taktiež sa membránové vlastnosti dajú pri výrobe prispôbiť pre špecifické úlohy, čo ich dokáže urobiť efektívnejšou metódou ako doteraz zaužívané separačné metódy.

2 Dynamická optimalizácia

Pri optimálnom riadení procesov sú definované tri základné časti: funkcionál, funkcie ohraničení a matematický model procesu. Funkcionál reprezentuje matematické vyjadrenie procesu, ktorý chceme maximalizovať resp. minimalizovať. Ohraničenia vytyčujú množinu, v ktorej sa optimálne riešenie nachádza. Model procesu asociuje vstupy, stavové veličiny a výstupy a na jeho základe vzniká oblasť pre optimalizáciu podobne ako to robia funkcie ohraničení.

2.1 Funkcionál

Funkcionál vyjadruje ceny alebo benefity procesu, ktorá sa snažíme dosiahnuť, prípadne sa im vyhnúť. V dynamickej optimalizácii funkcionál môže byť vo všeobecnosti definovaný troma rôznymi spôsobmi, pri čom medzi sebou sú tieto spôsoby ľahko alternovateľné.

Lagrangeov tvar:

$$J = \int_{t_0}^{t_f} F[x(t), u(t), p, t] dt \quad (2.1a)$$

Mayerova tvar:

$$J = F[x(t_f), p, t_f] \quad (2.1b)$$

Bolzov tvar:

$$J = G[x(t_f), p, t_f] + \int_{t_0}^{t_f} F[x(t), u(t), p, t] dt \quad (2.1c)$$

Vo vyššie uvedených zápisoch t reprezentuje nezávislú časovú premennú, indexy 0 a f označujú začiatkový a konečný čas procesu, $x(t)$ je vektor stavových veličín, $u(t)$ je vektor riadiacich veličín, ktoré idú byť optimalizované. Časovo nezávislé premenné, zvyčajne nazývané parametre, sú označené ako p . J a F sú funkcie, o ktorých predpokladáme že sú spojito diferencovateľné podľa všetkých premenných. Úlohou optimálneho riadenia je nájsť takú trajektóriu $u(t)$, kde $t \in [t_0, t_f]$, aby mal funkcionál J minimálnu hodnotu. (Fikar, 2007)

2.2 Ohraničenia

Ako už bolo spomenuté, funkcie ohraničenie vyznačujú množiny, v ktorých sa môže optimalizácia pohybovať a môžu byť v rôznych všeobecných zápisoch. Rôzne rovnostné

a nerovnostné ohraničenia môžu zabezpečovať výsledné hodnoty tak, aby výsledok spĺňal napríklad bezpečnostné normy, aby sa pohyboval okolo vyznačených hodnôt atď.

Niektoré všeobecné zápisy ohraničení sú napr. :

- Ohraničenia typu rovnosti:

$$h(x, u, p, t) = 0, \quad \forall t \in [t_{c0}, t_{cf}], [t_{c0}, t_{cf}] \subseteq [t_0, t_f] \quad (2.2a)$$

Toto sa zvyčajne používa pri chemických procesoch. Ako príklad použitia tohto ohraničenia je separácia plynnej zmesi, kde sumy molových zlomkov všetkých komponentov sa musia navzájom rovnať v každom okamihu procesu.

- Ohraničenia typu nerovnosti:

$$g(x, u, p, t) \leq 0, \quad \forall t \in [t_{c0}, t_{cf}], [t_{c0}, t_{cf}] \subseteq [t_0, t_f] \quad (2.2b)$$

Toto ohraničenie je taktiež prakticky veľmi dôležité, nakoľko môže vyjadrovať limit nejakej suroviny, ktorý nemôže byť prekročený.

2.3 Matematický model procesu

Model procesu je v konečnom dôsledku ďalšou skupinou rovnostných ohraničení, keďže vo všeobecnosti pozostáva z niekoľko algebrických, diferenciálnych a/alebo funkcionálnych rovníc, ktoré po splnení dávajú vstupno-výstupný matematický opis optimalizovaného procesu.

V prípade že sa zaoberáme dynamickým procesom, ktorý beží spojitou v reálnom čase, je potrebný spojitý časovo závislý – dynamický- model. Najjednoduchším typom modelu spĺňajúceho tieto požiadavky je model opísaný jednou, alebo skupinou diferenciálnych rovníc. (Fikar, 2007)

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u, p, t), \quad \forall t \in [t_0, t_f] \quad (2.3)$$

2.4 Definovanie optimalizovaného problému

Po predstavení troch hlavných častí dynamickej optimalizácie (funkcionál (2.1), ohraničenia (2.2), matematický model (2.3)) môžeme vo všeobecnosti optimalizovateľný proces zapísať takto:

$$\min_{u(t), p} \left\{ G[x(t_f), p] + \int_{t_0}^{t_f} F(x, u, p, t) dt \right\},$$

s. t.

$$\dot{x} = f(x, u, p), \quad \forall t \in [t_0, t_f],$$

$$\begin{aligned}
x(t_0, p) &= x_0(p), \\
h(x, u, p, t) &= 0, \quad \forall t \in [t_0, t_f], \\
g(x, u, p, t) &\leq 0, \quad \forall t \in [t_0, t_f], \\
u(t) &\in [u_{\min}(t), u_{\max}(t)], \\
p &\in [p_{\min}, p_{\max}].
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Na vyriešenie takýchto problémov sa dá použiť niekoľko rôznych metód. Medzi deterministické patrí napr. variačná kalkulácia, dynamické programovanie alebo Pontrjaginov princíp minima. Posledný spomenutí naštartoval najpopulárnejšie numerické metódy ako je parametrizácia vektora riadenia, iterácia vektora riadenia, iterácia hraničnej podmienky a iné.

2.5 Analytické metódy

Vývoj analytických metód pre riešenie optimalizačných riadiacich úloh vždy odrážal potrebu riešiť a optimalizovať aktuálne problémy v danej dobe. Variačná kalkulácia definovaná Eulerom a Lagrangom reprezentuje prvú prácu pre nájdenie trajektórií so špecifikovanými minimami/maximami. Sústredili sa na vývoj matematického aparátu pre vyriešenie hlavne teoretických problémov.

Ich práca bola neskôr rozšírená Legendrom, Hamiltonom a Weierstrassom. V minulom storočí bol obrovský záujem o optimalizáciu najmä v leteckom a raketovom priemysle, ako aj pre vesmírny výskum. Problém však nastal keď sa zistilo, že dovtedajšie metódy boli buď príliš nepraktické, alebo v nich chýbali dôležité detaily. Tieto okolnosti doviedli Richarda Bellmana k novej teórii, tzv. Dynamické programovanie, alebo Ruskú skupinu Leva Semyonovicha Pontrjagina k princípu maxima/minima. (Fikar, 2007)

2.6 Numerické metódy

Ako sme už spomenuli vyššie, na riešenie optimalizačných problémov existujú aj tzv. numerické metódy. Hoci je pravdou, že tieto metódy pracujú iba s aproximovaným riešením, v praxi vedú veľmi presne konvergovať k exaktnému riešeniu.

Sú založené buď na priamom alebo nepriamom princípe. Nepriamy princíp najprv vyhodnotí podmienky optimalizácie a až potom prechádza k riešeniu problému. (Fikar, 2007)

Priamy princíp používa najprv diskretizáciu riadiacich premenných alebo riadiacich a stavových veličín v snahe transformovať dynamický optimalizačný problém na statický.

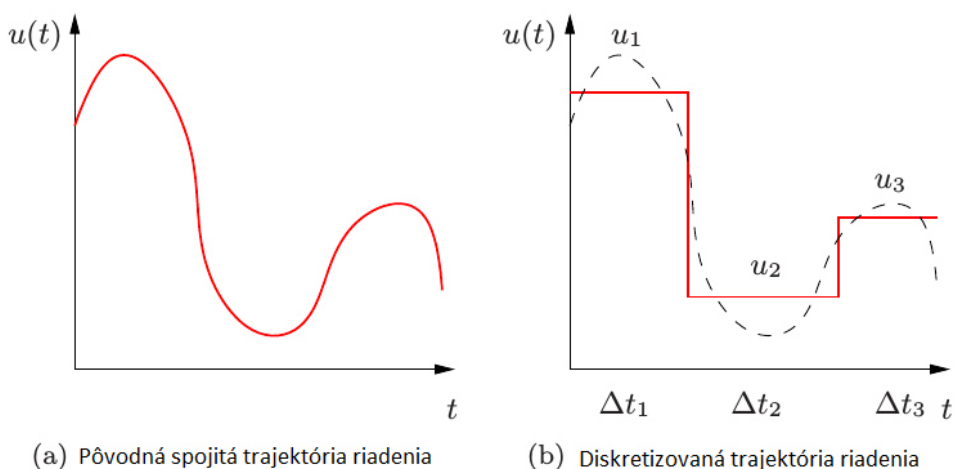
K aproximovanému optimálnemu riešeniu sa potom dôjde pomocou nelineárneho programovania, ktoré používa techniky založené na gradientoch. Medzi najznámejšie numerické metódy patria:

- Nepriame metódy
 - Iterácia riadiaceho vektora
 - Iterácia hraničnej podmienky
- Priame metódy:
 - Kompletná diskretizácia
 - Parametrizácia riadiaceho vektora
 - Priame mnohonásobné nastreľovanie

2.6.1 Parametrizácia vektora riadenia

Parametrizácia vektora riadenia (control vector parametrisation - CVP) patrí medzi najpopulárnejšie numerické metódy na riešenie optimalizačných riadiacich problémov, a to kvôli priamočiaremu prístupu tejto metódy a relatívne jednoduchšej implementácii.

Pôvodná spojitá trajektória riadenia sa aproximuje po častiach konštantným riadením na určitom počte časových intervalov. Táto aproximácia sa robí preto, lebo v pôvodnej spojitaj trajektórii riadenia by sme museli hľadať optimálnu hodnotu u v každom čase a týchto časov je nekonečne veľa. Preto to aproximujeme, aby sme nekonečný počet u znížili na konečný. Výsledná aproximácia je dostatočne presná na to, aby bol problém riešiteľný. V praktickej časti sme nepoužili metódu gradientov, preto sa jej nebudeme ďalej venovať. (Fikar, 2007)



Obrázok 1: Parametrizácia vektora riadenia

Na Obrázok 1a je znázornená spojitá trajektória procesu riadenia a na obrázku 1b je táto trajektória diskretizovaná na tri časové intervaly. Na týchto intervaloch dochádza k linearizácii problému a aproximácii trajektórie.

3 Membránová separácia

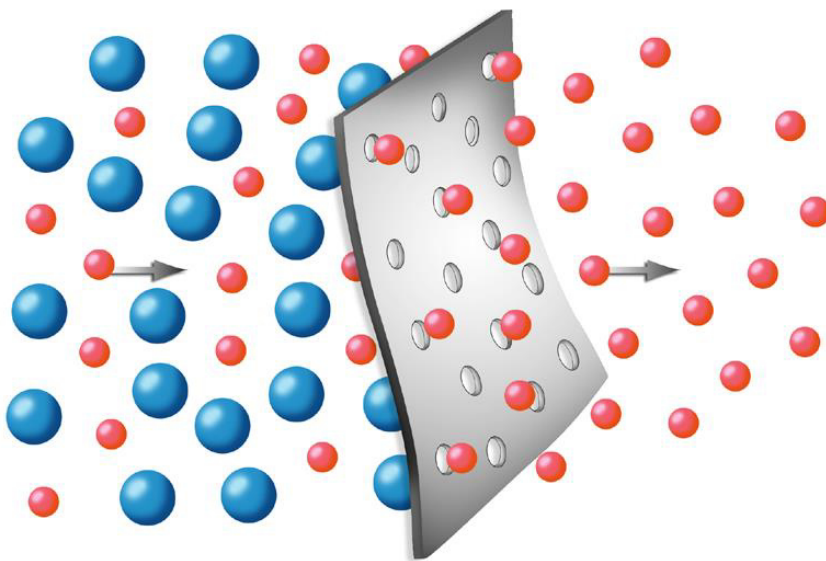
Hoci sú syntetické membrány používané ako vzácny vedecký a technický prístroj v modernej civilizácii, ich fungovanie a štruktúra nie sú veľmi presne popísané a definované. Ľudia si membránu najčastejšie vybavujú ako akýsi filter – zariadenie ktoré je schopné separovať rôzne zložky zo zmesi podľa veľkosti ich molekúl.

Avšak membrány sú oveľa komplexnejšie aj vo funkcií, aj v štruktúre. Membrána môže byť tuhá alebo kvapalná, homogénna alebo heterogénna. Môže byť hrubá zlomok mikrometra, ale aj niekoľko milimetrov. Jej elektrický odpor sa môže pohybovať v miliónoch Ohmov po zlomok Ohmu.

Ďalším charakteristickým znakom membrány je jej permeselektivita, čo je vlastnosť, ktorá zabezpečuje rozdiely v rýchlosti transportu rôznych komponentov cez jej štruktúru. Permeabilita membrány je miera rýchlosti, pri ktorej je daný komponent transportovaný cez membránu za špecifických podmienok – koncentrácia, teplota, tlak alebo elektrický gradient. Tieto vlastnosti závisia od štruktúry membrány, veľkosti molekuly akú je membrána schopná prepustiť, chemických vlastností, elektrického náboja materiálu, z ktorého je membrána vyrobená a tiež od sily, ktorá zabezpečuje prechod látky (koncentrácia, tlak alebo elektrický gradient). Transport špecifických zložiek môže byť tiež zabezpečený chemickou reakciou, ktorá prebehne v membráne.

Vo všeobecnom ponímaní je membrána akousi bariérou, ktorá separuje a/alebo spája dve oblasti a kontroluje výmenu komponentov, ako aj výmenu energie medzi látkami, ako je zjednodušene zobrazené na Obrázok 2: Membránová separácia. Medzi biologickými a syntetickými membránami sú však stále markantné rozdiely. Biologické membrány nachádzajúce sa v bunkách živých organizmov zabezpečujú veľmi špecifický a komplexný transport látok. Musia to vykonávať rýchlo, efektívne pri minimálnom výdaji energie, často využívajúc aktívny transport. Taktiež sa sami regenerujú a membránové poškodzovanie a zanášanie tak pri biologických membránach nehrá rolu.

Syntetické membrány nie sú ani zďaleka tak štruktúrne, ale ani funkčne komplikované ako biologické membrány. Využívajú iba pasívny transport a zvyčajne sú menej selektívne a aj energeticky menej efektívne. Vo všeobecnosti však majú výrazne vyššiu chemickú a mechanickú stabilitu, hlavne pri zvýšených teplotách. (Strathmann, 2006)



Obrázok 2: Membránová separácia

3.1 Výhody a nevýhody membránovej separácie

Membránová separácia sa pri mnohých aplikáciách stretáva s vysokou konkurenciou štandardných separačných metód. Avšak v mnohých prípadoch membránová separácia efektívnejšie využíva spotrebovanú energiu, je jednoduchšia na ovládanie, alebo jednoducho vyprodukuje kvalitnejší výsledný produkt. Toto platí napríklad pri desalinácii vody, alebo jej prečisťovaní. Pri niektorých iných využitíach, napríklad pri výrobe farmaceutík alebo potravinárskych produktoch je ďalšou výhodou fakt, že separácia môže prebiehať pri izbovej teplote, čím sa tak výroba vyhýba risku degradácie produktu.

Niektoré ďalšie faktory hrajú rolu pri výbere správnej separačnej metódy. V prípade, že sa jedná o odslaňovanie veľkého množstva vody a je možné zapojiť veľký zdroj energie, prípadne elektrárňu s desalinačnou jednotkou, destilácia je často krát ekonomickejšia voľba. Pri čistení odpadových vôd mikro- a ultrafiltrácií konkurujú s flokuláciou, uhlíkovou adsorpciou alebo biologickými prístupmi. V týchto prípadoch je membránová separácia väčšinou drahším riešením, avšak dokáže vyprodukovať vyššiu kvalitu vody. Preto je v mnohých prípadoch dobrou voľbou kombinácia štandardných separačných metód a membránovej separácie.

Medzi nevýhody môžeme spomenúť fakt, že pri niektorých procesoch je pri membránovej separácii nevyhnutné veľké množstvo príprav pred procesom, v dôsledku vysokej senzitivity ku polarizácii koncentrovaných látok, ako aj znečisťovanie či zlyhávanie membrány kvôli chemickej interakcii niektorých látok s membránou. Na dôvažok, membrány nie sú veľmi

robustné a mechanicky odolné, a môžu sa teda relatívne ľahko poškodiť. Avšak v posledných rokoch bolo práve na tieto nevýhody sústredená veľa pozornosti a výskumu, aby mohli byť membrány volené ako efektívnejšia voľba pre separačné procesy. (Strathmann, 2006)

3.2 Princíp membránovej separácie

Membránová separácia je proces hnaný externou silou, teda nie samovoľný ako napríklad osmóza či difúzia. Touto hnacou silou môže byť zvýšený tlak, teplota, koncentračný rozdiel alebo elektrický potenciál. Najčastejšie sa používa zvýšený tlak.

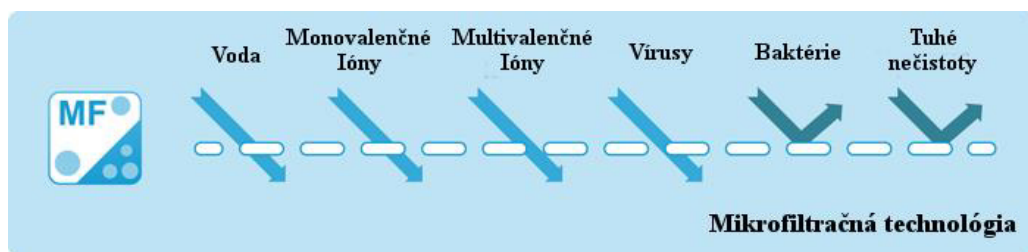
Medzi tlakom poháňané membránové procesy patria štyri základné typy filtrácií:

1. Mikrofiltrácia
2. Ultrafiltrácia
3. Nanofiltrácia
4. Reverzná osmóza

Tieto typy sa odlišujú vo veľkosti molekúl ktoré prepustia, resp. neprepustia. Ako sa znižuje veľkosť prepustených molekúl, tak stúpa cena procesu. Dá sa teda konštatovať, že najlacnejšou metódou je mikrofiltrácia a najdrahšou reverzná osmóza. Toto je z dôvodu ceny výroby membrány, ale aj potrebnej energie pre daný proces. Nakoľko mikrofiltrácia pracuje niekde v rozmedzí 100 – 400 kPa, reverzná osmóza pri 4-8 MPa. Cena za energiu je teda tiež výrazným faktorom. Veľmi často sú všetky tieto membrány zapojené v sérii za sebou, aby sa navzájom chránili a predlžovali tak svoju životnosť.

3.3 Mikrofiltrácia

Mikrofiltrácia je membránovou filtráciou, ktorá prepúšťa najväčšie molekuly spomedzi ostatných spomenutých filtrácií (viď Obrázok 3). Veľkosť prepustených molekúl je od 0,1 – 10 μm . Používa sa ako primárna filtrácia v sériovom zapojení viacerých membrán, pretože zabezpečuje odseparovanie baktérií, či jednobunkovcov. Niektoré prokaryotizmy sú odolné voči štandardným dezinfekciám napr. chlóru, a spôsobujú žalúdočné problémy alebo iné choroby. Proti týmto znečisteniam je mikrofiltrácia vhodnou náhradou chemických dezinfekcií. Prúd vody, alebo iného roztoku je pri mikrofiltrácii privádzaný pri relatívne vysokej rýchlosti 1-3 m/s a pri tlaku 100-400 kPa.

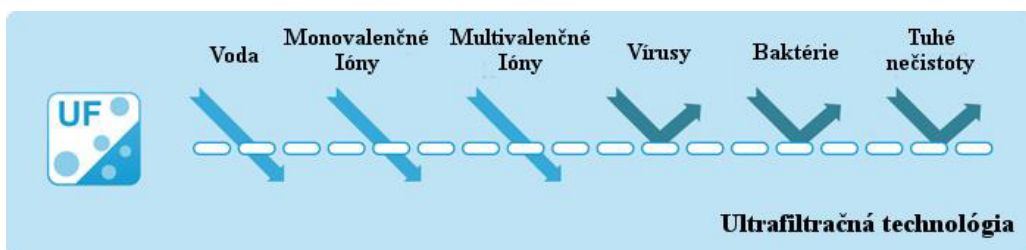


Obrázok 3: Mikrofiltrácia a jej priepustnosť

Najväčšie využitie má mikrofiltrácia pri spomínanom prečisťovaní vody. Ďalším významným využitím je v potravinárskom priemysle pri sterilizácii džusov, vín alebo pív. Je známe, že doteraz používaná pasterizácia síce zbaví občerstvenia od baktérií, ale taktiež znižuje chuť. Pri mikrofiltrácii sa nežiaduci účinok vysokej teploty nevyskytuje, a je pre ňu známy aj názov „chladná sterilizácia“. Ďalším využitím je v mliekarenskom priemysle pri ošetrovaní mlieka, alebo separácii srvátkového proteínu.

3.4 Ultrafiltrácia

Ultrafiltrácia v porovnaní s mikrofiltráciou prepúšťa menšie molekuly v rozmedzí od 0,1-0,01 μm (viď Obrázok 4). Vďaka priepustnosti menších častíc ako mikrofiltrácia je opäť významným využitím výroba pitnej vody. Dokáže nahradiť dnešné primárne metódy ako flotácia, preosievanie, a aj niektoré sekundárne metódy čistenia, ako predpríprava pre nasledujúce metódy.



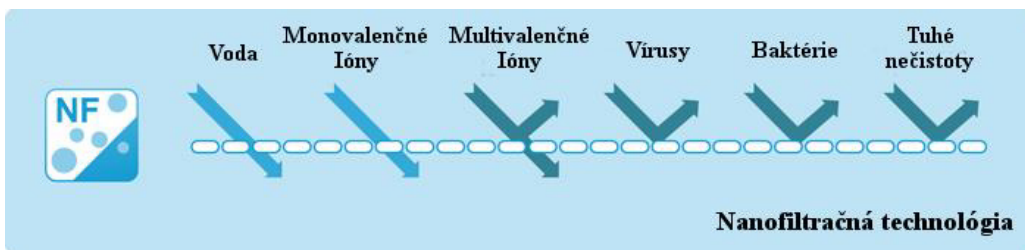
Obrázok 4: Ultrafiltrácia a jej priepustnosť

Medzi hlavné výhody patrí fakt, že sa nepoužívajú žiadne chemikálie, konštantná kvalita produktu, a tiež to že sa zabezpečí 90-100 % nezávadnosť vody. Ďalšie využitia sú opäť v

mliekarenskom priemysle pri separácii srvátky a proteínov z mlieka, dialýza krvi, čistenie znečistených vôd a iné.

3.5 Nanofiltrácia

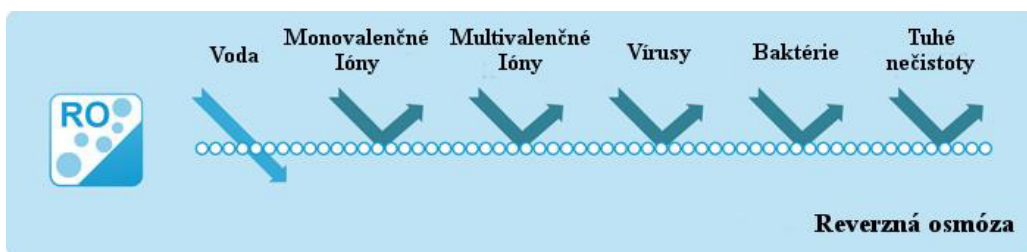
Nanofiltrácia dokáže prepustiť 1-10 nm veľké molekuly (viď Obrázok 5). Pôvodné použitie nanofiltrácie je na zmäkčenie vody – odstránenie vápenatých a horečnatých iónov. Ďalšie použitie je opäť v potravinárskom či farmaceutickom priemysle. Ďalej sa používajú v ropnom priemysle pri prečisťovaní plynných kondenzátov, či odstraňovaní dechtu. V lekárskom prostredí sa využíva pri extrakcii aminokyselín alebo tukov z krvi.



Obrázok 5: Nanofiltrácia a jej priepustnosť

3.6 Reverzná osmóza

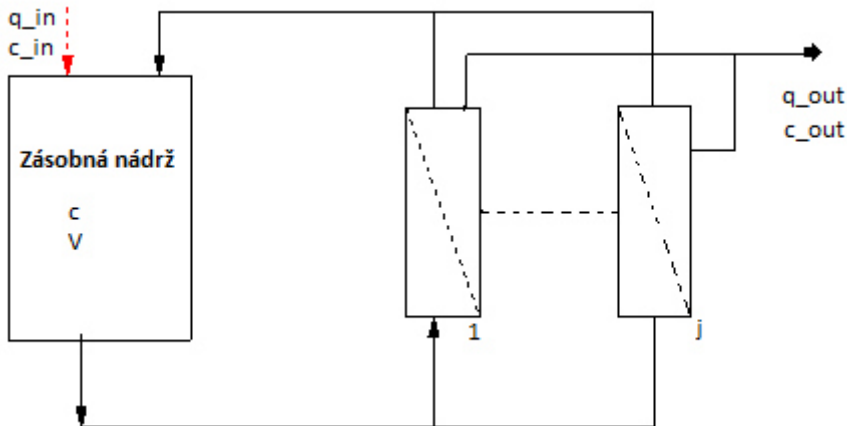
Touto filtračnou metódou už prejdú iba molekuly vody a najmenšie ióny (viď Obrázok 6). Táto metóda vyžaduje tlak o hodnote 4-8 MPa. Pri štandardnej osmóze je hnacou silou rozdiel koncentrácií dvoch roztokov, a tzv. osmotický tlak. Roztok s nižšou koncentráciou potom prechádza do roztokov s vyššou koncentráciou so snahou vyrovnať tieto koncentrácie a stabilizovať energie. Pri reverznej osmóze je aplikovaný vysoký tlak, aby bol prekonaný osmotický tlak, a prechádzala čistá voda z koncentrovanejšieho roztoku na stranu membrány s nižšou koncentráciou. Dnes sa reverzná osmóza používa bežne v domácnostiach, kedy séria filtrov pred membránou odstráni chemikálie a organizmy, ktoré by mohli zničiť membránu, a poslednú filtráciu vykoná membrána. Filtruje sa tiež dažďová voda napr. v USA, kde sa používa na priemyselné využitie, aby sa tak šetrila pitná voda. Reverzná osmóza sa môže tiež používať na výrobu deionizovanej vody. Dôležitá je tiež výroba pitnej vody z morskej vody. Najvýznamnejšie je to pri filtrácii vody z Mŕtveho mora alebo Červeného mora. (Wagner, 2001)



Obrázok 6: Reverzná osmóza a jej priepustnosť

4 Matematický model membránovej filtrácie

Modelovanie membránového procesu je dôležité, aby bolo možné proces riadiť. Treba teda poznať rozhodujúce parametre, ako aj celý model aby sa mohla funkčnosť najprv odsimulovať.



Obrázok 7: Schéma paralelného zapojenia membrán

Na Obrázok 7 je reprezentované paralelné zapojenie membrány, v ktorom počet zapojených membrán nadobúda hodnoty $n=1...j$. Do nádrže vstupuje prúd s objemovým prietokom q_{in} o koncentracii c_{in} . Cez membrány odchádza filtrát s objemovým prietokom q_{out} a koncentráciou c_{out} . Uvažujeme tiež, že membrány majú identické vlastnosti voči filtrovanej zmesi.

4.1 Modelovanie paralelne zapojených n-membrán

Na začiatok treba uviesť a ozrejmiť dva koeficienty:

1. Odmietavý koeficient (R)
2. Koeficient alfa (α)

Odmietavý koeficient je parametrom priepustnosti membrány v súvislosti s koncentráciou.

$$R = 1 - \frac{c_{out}}{c} \Rightarrow c_{out} = c(1 - R) \quad (4.1)$$

Odmietavý koeficient sa pohybuje v hodnotách od 0 po 1 a definuje, akú časť koncentrácie prepustí, a akú „odmietne“ resp. neprepustí. Alfa koeficient je riadiaca veličina ktorá je daná pomerom pridávaného objemového prietoku q_{in} a odchádzajúceho objemového prietoku q_{out} .

$$\alpha = \frac{q_{in}}{nq_{out}} \Rightarrow q_{in} = \alpha n q_{out} \quad (4.2)$$

Premenná $n \in (1, j)$ predstavuje počet membrán, ktorý je v systéme zapojený.

Tieto parametre sa neskôr použijú v modelovaní.

Na začiatku sa urobila štandardná materiálová bilancia – vstup sa rovná výstupu:

$$\frac{dV}{dt} = q_{in} - nq_{out} \quad (4.3)$$

Pokračuje sa hmotnostnou bilanciou:

$$\frac{dmV}{dt} = q_{in}m_{in} - nq_{out}m_{out} \quad (4.4)$$

Keďže pre nás je dôležitý faktor koncentrácia, tak sme ňou nahradili hmotnosť:

$$\frac{dcV}{dt} = c_{in}q_{in} - nc_{out}q_{out} \quad (4.5)$$

Ďalej sa použije produktové pravidlo a ľavá strana rovnice sa rozšíri a upraví:

$$c \frac{dV}{dt} + V \frac{dc}{dt} = c_{in}q_{in} - nc_{out}q_{out} \quad (4.6)$$

$$V \frac{dc}{dt} = -c \frac{dV}{dt} + c_{in}q_{in} - nc_{out}q_{out} \quad (4.7)$$

Následne dosadíme za $\frac{dV}{dt}$ už známy tvar z rovnice 1. a upravíme ho

$$V \frac{dc}{dt} = cq_{out} - cq_{in} + c_{in}q_{in} - nc_{out}q_{out} \quad (4.8)$$

$$V \frac{dc}{dt} = q_{in}(c_{in} - c) + nq_{out}(c - c_{out}) \quad (4.9)$$

V nasledujúcom kroku implementujeme koeficienty R a alfa a upravíme

$$V \frac{dc}{dt} = n\alpha q_{out}(c_{in} - c) + nq_{out}(c + cR - c) \quad (4.10)$$

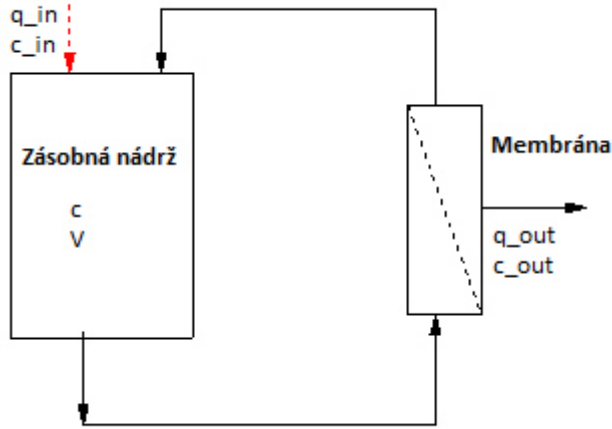
$$V \frac{dc}{dt} = nq_{out}(\alpha c_{in} - \alpha c + cR) \quad (4.11)$$

Po všetkých úpravách dostávame výsledný model koncentrácie :

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{nq_{out}(\alpha c_{in} - \alpha c_i + c_i R_i)}{V} \quad (4.12)$$

Kde $i \in (1, \infty)$ a reprezentuje počet rôznych koncentrácií, resp. počet separovaných zložiek. Počet zapojených membrán by teoreticky mal skracovať dĺžku separácie, avšak aj toto nebude platiť donekonečna, ako bude neskôr simulačne dokázané.

4.2 Modelovanie singularnej membrány



Obrázok 8: Schéma jednoduchého zapojenia membrány

V tejto práci sme uvažovali o singularnom zapojení membrány, a teda v modeli sa premenná n zredukuje na 1. Na Obrázok 8 je schematicky znázornené zapojenie jednej membrány, kde do zásobnej nádrže priteká zmes s objemovým prietokom q_{in} o koncentrácii c_{in} a cez membránu odchádza filtrát s objemovým prietokom q_{out} a koncentráciou c_{out} . Koeficient i predstavuje počet separovaných zložiek v roztoku. Matematický model bude potom odvodený nasledovne:

$$\frac{dmV}{dt} = q_{in}m_{in} - q_{out}m_{out} \quad (4.13)$$

$$\frac{dV}{dt} = q_{in} - q_{out} \quad (4.14)$$

$$\frac{dc_i V}{dt} = c_{in}q_{in} - c_{out}q_{out} \quad (4.15)$$

$$c_i \frac{dV}{dt} + V \frac{dc_i}{dt} = c_{in}q_{in} - c_{out}q_{out} \quad (4.16)$$

$$V \frac{dc_i}{dt} = -c_i \frac{dV}{dt} + c_{in}q_{in} - c_{out}q_{out} \quad (4.17)$$

$$V \frac{dc_i}{dt} = c_i q_{out} - c_i q_{in} + c_{in}q_{in} - c_{out}q_{out} \quad (4.18)$$

$$V \frac{dc_i}{dt} = q_{in}(c_{in} - c_i) + q_{out}(c_i - c_{out}) \quad (4.19)$$

$$V \frac{dc_i}{dt} = \alpha_i q_{out}(c_{in} - c_i) + q_{out}(c_i + c R_i - c_i) \quad (4.20)$$

$$V \frac{dc_i}{dt} = q_{out}(\alpha_i c_{in} - \alpha_i c_i + c_i R_i) \quad (4.21)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{q_{out}(\alpha_i c_{in} - \alpha_i c_i + c_i R_i)}{V} \quad (4.22)$$

Pre dvojzložkový roztok pozostávajúci z mikro- a makro- zložky vyzerá model nasledujúco:

$$\frac{dc_1}{dt} = \frac{q_{out}[c_1(R_1 - \alpha_1) + \alpha_1 c_{in1}]}{V} \quad (4.23)$$

$$\frac{dc_2}{dt} = \frac{q_{out}[c_2(R_2 - \alpha_2) + \alpha_2 c_{in2}]}{V} \quad (4.24)$$

4.3 Zhrnutie výsledných modelov

Postupným odvodzovaním základnej materiállovej bilancie sme dospeli k výsledným modelom membránovej separácie. Pre zapojenie n membrán paralelne vyzerá výsledný model nasledovne:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{n q_{out}(\alpha c_{in} - \alpha c_i + c_i R_i)}{V} \quad (4.25)$$

a v prípade, že je v systéme zapojená iba jedna membrána, teda $n=1$, model vyzerá takto:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{q_{out}(\alpha c_{in} - \alpha c_i + c_i R_i)}{V} \quad (4.26)$$

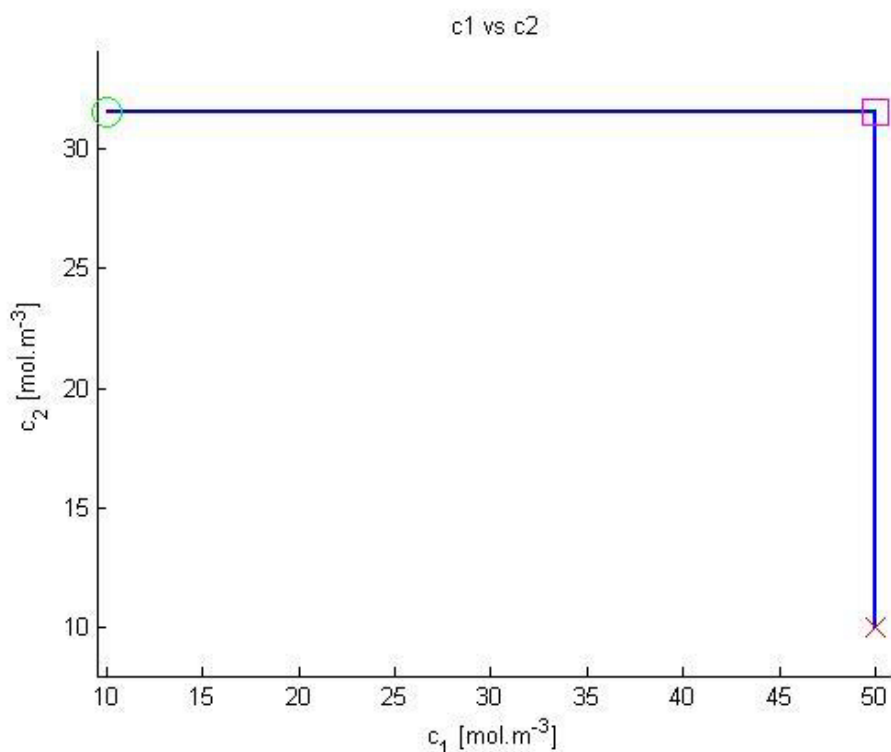
Výsledný model pre objem je:

$$\frac{dV}{dt} = q_{in} - q_{out} \quad (4.27)$$

5 Príklad 1

V tejto štúdií simulujeme, že máme roztok obsahujúci 2 komponenty – makro - komponent (c_1) a mikro – komponent (c_2). Cieľom je spracovať objem 100 litrov roztoku zo začínajúcich koncentrácií $c_{10} = 10 \text{ mol m}^{-3}$ a $c_{20} = 31.5 \text{ mol m}^{-3}$ na konečné hodnoty $c_{1f} = 50 \text{ mol m}^{-3}$ a $c_{2f} = 10 \text{ mol m}^{-3}$. Limitujúci model prietoku je definovaný rovnicou $q_p = kA \ln(\frac{c_{lim}}{c_1})$, kde $c_{lim} = 319 \text{ mol m}^{-3}$, koeficient hmotnostného prenosu $k = 4,79 \cdot 10^{-6} \text{ ms}^{-1}$ a povrch membrány $A = 1 \text{ m}^2$. Membrána má absolútne odmietnutie pre c_1 , teda $R_1 = 1$, a žiadne odmietnutie pre c_2 , teda $R_2 = 0$. Do systému nepridávame žiadnu kvapalinu obsahujúcu nejaké látky, teda $c_{in} = 0 \text{ mol m}^{-3}$.

5.1 Výsledky príkladu 1



Graf 1: Koncentračný stavový diagram

Na grafe 1 môžeme vidieť ako sa v simulácii daného príkladu správali koncentrácie 1 a 2. Podľa zadania koncentrácia 1, so začiatkom 10 mol.m^{-3} stúpala do finálneho stavu 50 mol.m^{-3} ,

zatiaľ čo koncentrácia 2 zostávala konštantná (os y). Po dosiahnutí bodu c_{1f} ostáva koncentrácia 1 konštantná a koncentrácia dva sa začne znižovať až do bodu 10 mol.m^{-3} . Túto simuláciu sme spracovali v Matlabe, za použitia modelu, ktorý bol vyššie odvodený a integračnej funkcie ODE 45 s dvoma tzv. udalosťami – prvá keď dosiahla koncentrácia 1 svoj finálny bod c_{1f} , a druhá keď finálny bod c_{2f} dosiahla koncentrácia 2.

5.2 Diskusia

Tabuľka 1: Počet zapojených membrán a príslušný čas separácie

Počet zapojených membrán	čas [h]
1	7,22
2	2,14
3	1,43
4	1,07
5	0,86
6	0,71
7	0,61
8	0,54
9	0,48
10	0,43

Pre porovnanie sme uviedli tabuľku 1, ktorá porovnáva zapojenie rôzneho počtu membrán paralelne v súvislosti s časom, aký treba na spracovanie zadaného množstva koncentrácií. Dá sa teda konštatovať, že je výhodné zapojiť viac membrán za sebou. Najefektívnejšou formou v takomto prípade, s ohľadom na parametre ceny, je zrejme zapojenie 3-4 membrán, keďže pri vyššom počte membrán sa čas neskracuje až tak markantne, ale to samozrejme závisí od konkrétneho objemu produkcie, produktu resp. filtrátu ako takého a rôzne ďalšie faktory.

6 Príklad 2

Príklad 2 je pokračovaním príkladu 1, na ktorý sme implementovali optimalizačnú metódu parametrizácia riadiaceho vektora. V príklade 1 sme chceli dosiahnuť v membránovej separácii určité hodnoty dvoch koncentrácií, ku ktorým sme nakoniec aj simulačne dospeli. V tomto príklade chceme tento proces zoptimalizovať, a to z časového hľadiska. Chceme teda dospieť k týmto finálnym koncentráciám v čo najrýchlejšom čase.

6.1 Definícia optimalizovaného problému

Ako bolo spomenuté vyššie, optimalizovaný problém je rozdelený na tri základné časti – funkcionál, ohraničenia a model procesu. Náš proces sme pri použití metódy CVP rozdelili na tri časové intervaly, ktoré sme chceli minimalizovať, z čoho vyšla účelová funkcia v tvare:

$$J = dt_1 + dt_2 + dt_3 \quad (6.1)$$

kde dt_1 , dt_2 a dt_3 predstavujú jednotlivé časové intervaly. V každom z týchto troch intervalov sa predpokladá rôzne alfa. V prvom predpokladáme 0, teda nepridávanie žiadnej tekutiny, v druhom 1, teda pridávanie práve toľko vody, koľko sa zo systému odfiltruje, a v treťom predpokladáme alfu vysoké číslo reprezentujúce instantné rozriedenie.

Do ohraničení nedáme prakticky nič iné ako finálne hodnoty našich koncentrácií:

$$\begin{aligned} c_1(tf) - 50 &= 0 & c_1(t_f) &= c_{1f} \\ (6.2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_2(tf) - 10 &= 0 & c_2(t_f) &= c_{2f} \\ (6.3) \end{aligned}$$

Jedná sa o ohraničenia rovnosti, ako sú vyššie definované v sekcii 2.2 ohraničenia.

Poslednou časťou optimalizovaného riadiaceho problému je model procesu, ktorý je už odvodený vyššie v sekcii 4.3 zhrnutie matematického modelu.

Na simulačné vyriešenie tohto problému sme použili jednu z metód nelineárneho programovania v Matlabe (NLP) a to funkciu `fmincon`. Pre túto funkciu sme potrebovali zadať všetky tri základné funkcie optimalizovaného kontrolného problému, a štvrtú funkciu teda `fmincon`.

6.2 Zhrnutie optimalizovaného problému

Optimalizujeme problém rovnakého zadania ako Príklad 1, kedy separujeme roztok s dvoma rôznymi zložkami – mikro- a makro zložkou. Tieto koncentrácie chceme dostať na ich konečné hodnoty za čo najkratší čas. Membrána má absolútne odmietnutie pre zložku s koncentráciou c_1 , teda $R_1=1$, a žiadne odmietnutie pre zložku s koncentráciou c_2 , teda $R_2=0$.

$$\min_{\alpha} t_f$$

s. t.

$$\dot{c}_1 = \frac{q_{out}[c_1(R_1-\alpha_1)]}{V} \quad c_1(0) = 10 \text{mol.m}^{-3} \quad c_1(t_f) = 50 \text{mol.m}^{-3} \quad (6.4)$$

$$\dot{c}_2 = \frac{q_{out}[c_2(R_2-\alpha_2)]}{V} \quad c_2(0) = 31.5 \text{mol.m}^{-3} \quad c_2(t_f) = 10 \text{mol.m}^{-3}$$

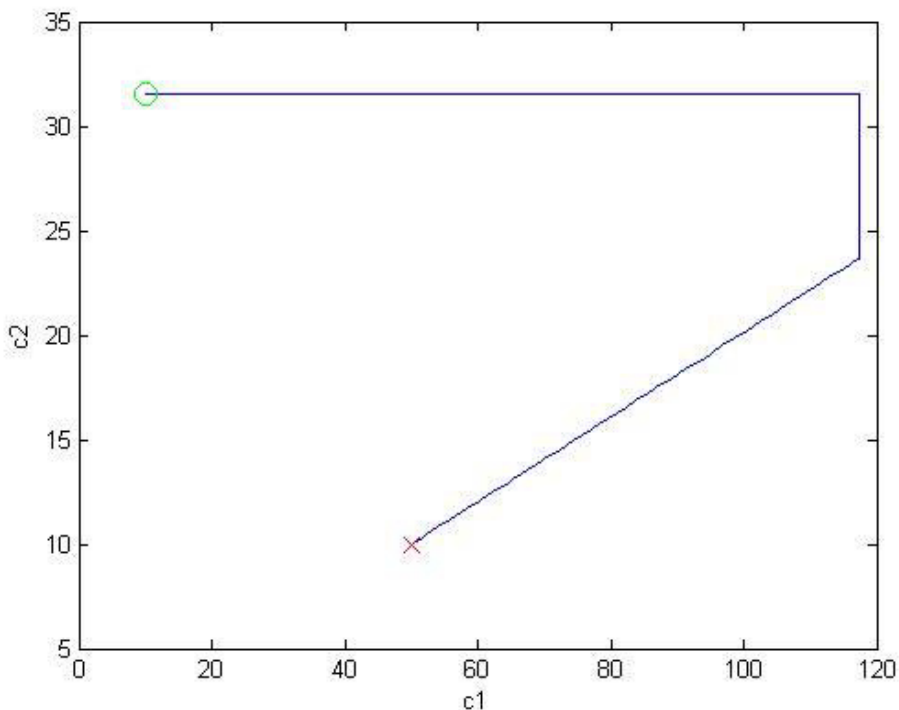
$$\dot{V} = q_{in} - q_{out}$$

$$\alpha \in [0, \infty]$$

Daný problém sme riešili numericky pomocou metódy parametrizácie vektora riadenia.

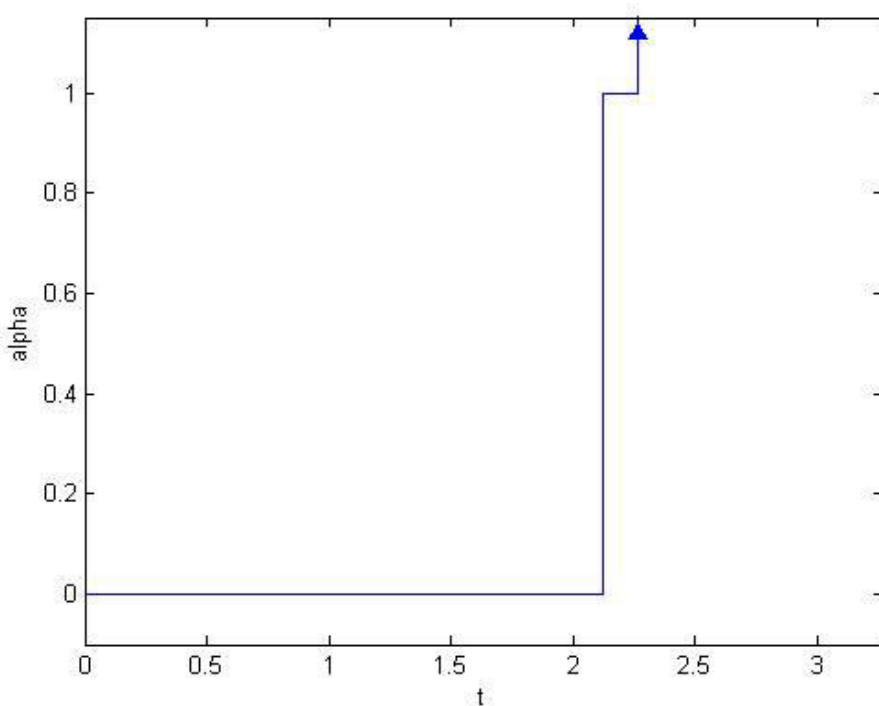
6.3 Výsledky príkladu 2

Použitím NLP riešiteľa fmincon, do ktorého sme aproximovali tri časové intervaly a rôznymi odhadmi týchto časových intervalov sme dosiahli optimálne riešenie, vzhľadom na minimalizáciu času.



Obrázok 9: Koncentračný stavový diagram po použití CVP metódy

Na Obrázok 9: Koncentračný stavový diagram po použití CVP metódy. Obrázok 9 sú zobrazené obe koncentrácie po aplikovaní optimalizačnej metódy parametrizácie riadiaceho vektora. Koncentrácia 1 zobrazená na x-ovej osi diagramu začína podľa predpisu na hodnote $c_{1,0}=10\text{mol.m}^{-3}$. Tomuto časovému intervalu prislúcha $\alpha_1=0$, t.j. nepridávame žiadnu tekutinu do systému. Pri takomto parametri alfa a úplnom odmietnutí membránou zložky c_1 zákonito dochádza k zvyšovaniu tejto koncentrácie. V tomto prípade však koncentrovanie neskončí na žiadanom bode c_{1f} , ale pokračuje až do hodnoty $115,35\text{mol.m}^{-3}$. Tento prvý časový interval trvá $2,12\text{hod}$. Následne sa prechádza do druhého časového intervalu, kde sa parameter $\alpha_2=1$. To znamená, že tu dochádza k prilievaniu kvapaliny do systému rovnému množstvu, ktoré zo systému odchádza cez membránu. Dochádza tu tak k poklesu koncentrácie 2, ktorá je zobrazená na y-ovej osi Obrázok 9. Tento časový úsek trvá $0,14\text{hod}$ a hodnota c_2 poklesne opäť nie na hodnotu c_{2f} , ale na hodnotu $23,2\text{mol.m}^{-3}$. Za posledný krok tejto separácie sa považuje instantné zriedenie vodou. Teoreticky je tento akt vyčíslený tak, že $\alpha_3=100$ a trvá $0,005\text{hod}$, avšak prakticky si pod tým môžeme predstaviť priliatie presného množstva vody, ktoré trvá pár sekúnd.



Obrázok 10: Optimálne riadenie príkladu 1 parametrom alfa

Na Obrázok 10 je zobrazený kontrolný parameter alfa v troch časových úsekoch, ktoré vyšli ako optimálne riešenie. V prvej časti grafu je alfa rovné nule, ako už bolo vyššie spomenuté, pretože sa nič do systému neprilieva. Skokovou zmenou sa po vyše dvoch hodinách alfa zvýši na jedna, kedy sa do systému prilieva rovnaké množstvo kvapaliny, ako zo systému odchádza. Tento úsek trvá niečo málo cez 8 minút. Tretí časový úsek je na grafe zobrazený šípkou, ktorá reprezentuje, že alfa v tomto intervale ide do nekonečna, teda dochádza k spomínanému instantnému riedeniu.

Tabuľka 2: Stavové veličiny, kontrolný parameter alfa a čas v jednotlivých časových intervaloch optimálneho riadenia

	α	t [hod]	$c_1[\text{mol.m}^{-3}]$	$c_2[\text{mol.m}^{-3}]$
Interval 1	0	2.124	115.35	31.5
Interval 2	1	0.141	115.35	23.2
Interval 3	∞	0.005	50.00	10.0

6.4 Diskusia

Výsledky príkladu 2 demonštrujú, aká vie byť dynamická optimalizácia efektívna. Pri porovnaní z výsledkami z príkladu 1, ku ktorému bol jednoduchý prístup je zrejmé, že dynamickou optimalizáciou vieme ušetriť veľké množstvo času, a teda v konečnom dôsledku nákladov. Pri štandardnom prístupe, ktorý je dvojkrokový ($\alpha = (0, 1)$) trvalo dosiahnutie finálnych koncentrácií 7,22 *hod* čo je v porovnaní s optimálnym výsledkom 2,27 *hod* vyše trojnásobok. Dynamická optimalizácia dostala čas separácie na rýchlosť, aká je pri paralelnom zapojení dvoch membrán, to znamená že týmto prístupom by sme ušetrili napríklad náklady na celú membránu.

Dynamickou optimalizáciou vieme v tomto prípade tiež optimalizovať aj s cieľom minimalizovať spotrebu pridávanej riediacej tekutiny, prípadne kombináciu minimalizácie času a pridávanej kvapaliny. Taktiež nie je problém vypočítať spotrebu vody v jednotlivých časových intervaloch. Spotreba vody v intervale 2 sa dá vypočítať podľa rovnice:

$$V_{w2} = kA \ln\left(\frac{c_{lim}}{c_1^*}\right) \Delta t_2 \quad (6.5)$$

kde c_1^* predstavuje koncentráciu c_1 po skončení prvého intervalu. Spotreba vody v treťom intervale sa vypočíta:

$$V_{w3} = c_{1,0} V_0 \left(\frac{1}{c_{1,f}} - \frac{1}{c_1^*} \right) \quad (6.6)$$

7 Záver

V tejto práci sme na úvod objasnili teoretické poznatky ohľadom membránových technológií, membránovej separácie a stručne predostreli jej použitie v rôznych priemysloch. Uviedli sme, že na fungovanie membránovej separácie sa najčastejšie používa zvýšený tlak a takejto membránovej separácií sme sa aj ďalej venovali. Opísali sme hlavné výhody membránovej separácie a spomenuli štyri hlavné typy membránovej separácie poháňanej tlakom.

Následne sme sa sústredili na odvodenie matematického modelu membránovej separácie, aby sme mohli simulačne testovať priebeh tohto procesu. Simulácie prebehli v programe Matlab, ktorý sme použili na vyriešenie príkladu využívajúci model limitujúceho toku. K výsledkom tohto príkladu sme najprv pristúpili štandardnou cestou, neskôr sme však riešili ten istý problém z pohľadu dynamickej optimalizácie a zistili sme, že tento prístup je až 3-krát efektívnejší.

Snažili sme sa minimalizovať čas operácie. Na to sme implementovali metódu parametrizácie riadiaceho vektora a opäť sme v prostredí Matlabu riešili daný problém. Použili sme riešiteľ nelineárneho programovania fmincon, ktorý určil, že tri časové intervaly s rôznymi kontrolnými parametrami alfa sú optimálnym riešením minimalizácie času pri jednoduchej membránovej separácií.

Práca môže slúžiť ako základný úvod do problematiky membránovej separácie, alebo aj ako príprava pre podrobnejší prístup k problémom dynamickej optimalizácie. Na problematiku sa dajú využiť rôzne ďalšie metódy optimalizácie, ktorá ukrýva veľký študijný potenciál.

8 Zoznam použitej literatúry

- STRATHMANN, a.i., 2006 . An Introduction to Membrane Science and Technology: Heiner Strathmann, Lidietta Giorno, Enrico Drioli. Roma: Institute on Membrane Technology, 2006.
- WAGNER, J. 2001.Membrane Filtration Handbook: Practical Tips and Hints. Minnetonka MIN: Osmonics, 2001.
- WANG, WILLIAM K.. 2001 Membrane Separations in Biotechnology. New-York: M. Dekker, 2001.
- PAULEN, R – FIKAR, M. 2015. Optimal Operation of Batch Membrane Processes, 2015 158s., ISBN: 3319204750
- FIKAR, M. Dynamická Optimalizácia Procesov. Bratislava: Slovenská Technická Univerzita, 2007. 26 Jan. 2016. Web.
- JELEMENSKÝ, M a.i., Multi-objective optimal control of ultrafiltration/diafiltration processes