**SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE**

FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLÓGIE

Ústav informatizácie, automatizácie a matematiky

# *MODELOVANIE A RIADENIE PRIETOKOVÉHO CHEMICKÉHO REAKTORA S MIEŠANÍM*

*BAKALÁRSKA PRÁCA*

**Mária Mušáková**

| | |
|---|---|
| Študijný program: | Automatizácia, informatizácia a manažment v chémii a potravinárstve |
| Vedúci bakalárskej práce: | Ing. Juraj Vörös |

Bratislava 2008

*Poďakovanie*

Týmto chcem poďakovať môjmu vedúcemu bakalárskeho projektu Ing. Jurajovi Vörösovi za pomoc pri získavaní vedomostí v oblasti matematického modelovania a návrhu regulátorov , cenné rady a pripomienky pri vypracovávaní bakalárskej práce.

# Abstrakt

Cieľom tejto bakalárskej práce je matematické modelovanie chemického prietokového reaktora s miešaním. Práca je tiež zameraná na identifikáciu nelineárneho systému a na návrh regulátorov. Regulátory sú navrhované dvoma analytickými metódami. PI regulátor je navrhnutý Naslinovou metódou a PID regulátor metódou umiestnenia pólov. Navrhovanie regulačných obvodov sa realizuje prostredníctvom simulačného programu Simulink, ktorý je súčasťou Matlab-u.

## Abstract

The aim of this bachelor's thesis is mathematical modelling of continuous stirred-tank reactor. Thesis is also oriented on non-linear system identification and controllers design. Two analytical methods are used for designing of controllers. PI controller is designed by Naslin method and PID controller by pole placement method. Designing of closed loop is realized by using simulation program Simulink, which is part of Matlab.

# Obsah

Úvod ....3

1. Formulácia úloh ....4

2. Analýza problému ....5

2.1 Zavedenie symbolov pre fyzikálno - chemické veličiny ....6

2.2 Hodnoty zadaných parametrov reakcie a reaktora ....7

2.3 Zjednodušujúce podmienky ....8

3. Matematické modelovanie ....9

3.1 Dynamický matematický model ....10

3.2 Matematický model reaktora v rovnovážnom stave ....11

3.2.1 Rovnovážne stavy reaktora ....12

3.2.2 Analýza stability rovnovážnych stavov ....13

3.3 Linearizovaný dynamický matematický model ....15

3.3.1 Linearizácia ....15

3.3.2 Linearizovaný model ....15

4. Porovnanie linearizovaného matematického modelu s nelineárnym modelom na 10 % - nú skokovú zmenu ....17

5. Identifikácia systému ....18

6. Návrh regulátorov ....21

6.1 Naslinova metóda návrhu PI regulátora ....21

6.2 Návrh PID regulátora metódou umiestnenia pólov ....22

7. Riadenie teploty reakčnej zmesi navrhnutými regulátormi ....23

7.1 Riadenie žiadanej teploty reakčnej zmesi PI regulátorom ....24

7.2 Riadenie reakčnej teploty PID regulátorom .....25
7.3 Vyhodnotenie regulačných pochodov pri použití PI a PID regulátora.....26
7.4 Riadenie rektora do nestabilného stavu .....28
Záver.....30
Literatúra.....31
Prílohy .....32

# Úvod

S pokrokmi vedy a techniky priamo úmerne rastú požiadavky na kvalitnejšie a trvácnejšie výrobné zariadenia. Jedným z dôležitých výrobných zariadení v chemickom priemysle predstavuje reaktor.

V laboratóriu, ale najmä v prevádzke, existuje veľké množstvo chemických reaktorov, z ktorých každý má svoje špecifické použitie. Laboratórne reaktory sa konštruujú za účelom štúdia chemických reakcií, a to z hľadiska smeru reakcií, mechanizmu premien, rovnováhy a tiež z hľadiska fyzikálnych a energetických zmien, ktoré ich sprevádzajú.

Prietokový chemický reaktor s miešaním sa používa najmä pre kvapalné systémy. Skladá sa z nádrže vystrojenej vhodným miešadlom. Do nádrže kontinuálne vstupuje surovina, ktorá po zreagovaní vystupuje von. Objem takýchto nádrží je obyčajne relatívne malý. Dôležitým parametrom tohto reaktora je intenzívne premiešavanie reakčnej zmesi. Prietokové reaktory s miešaním sa v prevádzke uplatňujú z viacerých dôvodov:

a) Jednoduchá konštrukcia a spoľahlivosť prevádzky.

b) Jednoduché čistenie vnútorných povrchov, čo je dôležité najmä v prípade reakcií, pri ktorých sa usadzujú tuhé látky.

c) Možnosť udržania izotermického režimu.

Tieto reaktory sa uplatňujú v prípade sulfonačných, nitračných a polymerizačných reakcií. Často sa používajú v technológií organických výrob, čiastočne pri výrobe plastov a výbušnín. V prevádzkových podmienkach je veľmi často výhodné zaradiť niekoľko reaktorov s miešaním za sebou.[1]

# 1. Formulácia úloh

Práca je zameraná na vytvorenie matematického modelu chemického prietokového reaktora a jeho následné riadenie. Mojim cieľom bude predovšetkým splnenie nasledujúcich úloh:

1. Vytvorenie matematického modelu odvodeného pomocou materiálových bilancií látky A a B, tepelnej bilancie reakčnej zmesi a tepelnej bilancie chladiaceho média v plášti reaktora.

2. Vytvorenie modelu reaktora v rovnovážnom stave.

3. Výpočet rovnovážnych stavov pre zadané hodnoty vstupných veličín. V rovnovážnom stave určiť koncentráciu východiskovej látky, teplotu reakčnej zmesi a teplotu chladiaceho média.

4. Analýza stability rovnovážnych stavov.

5. Odvodenie linearizovaného dynamického matematického modelu chemického reaktora vo forme lineárneho stavového opisu, pričom vstupná veličinu bude prietok chladiaceho média a výstupná veličina teplota reakčnej zmesi.

6. Simulovanie odozvy nelineárneho a linearizovaného modelu na 10 % - nú skokovú zmenu prietoku chladiaceho média a overenie správnosti odvodeného linearizovaného stavového modelu.

7. Návrh regulátorov rôznymi metódami.

8. Vyhodnotenie regulačného pochodu.

# 2. Analýza problému

Majme prietokový chemický reaktor s dokonalým miešaním reakčnej zmesi (obr. 1). Dôsledkom tohto znamená, že:

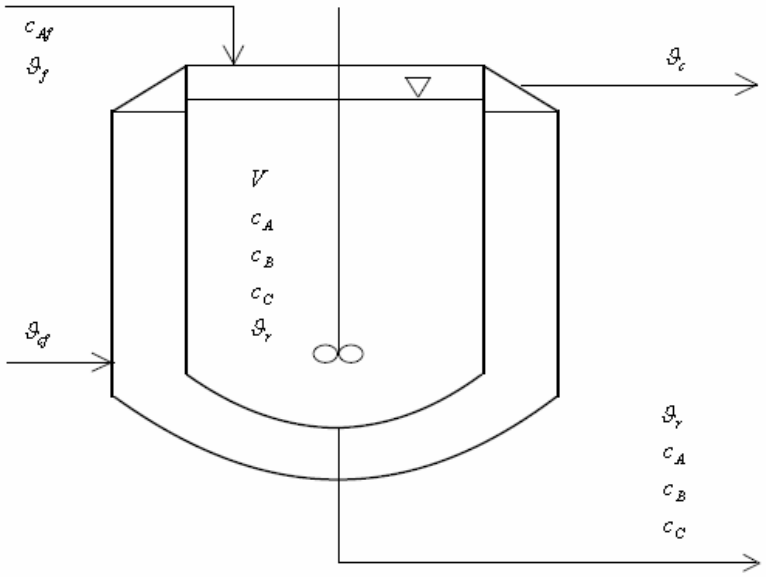
- zloženie a teplota zmesi v celom objeme reaktora sú rovnaké,
- zloženie a teplota zmesi na výstupe z reaktora sú také isté ako v reaktore

Z týchto predpokladov vyplýva, že rýchlosť reakcie je v celom objeme reakčnej zmesi rovnaká, a teda bilanciu možno vztiahnuť na celý reaktor.

Prebiehajú v ňom dve paralelné reakcie prvého poriadku, podľa nasledujúcej schémy [2]:

$$A \xrightarrow{k_1} B$$
$$A \xrightarrow{k_2} C$$

kde A je reaktant, B je hlavný produkt a C vedľajší produkt.




**Obr. 1: Prietokový chemický reaktor s miešaním.**

## 2.1 Zavedenie symbolov pre fyzikálno - chemické veličiny

| Zn. | Popis | Jednotka |
|---|---|---|
| $A_k$ | Teplovýmenná plocha | $m^2$ |
| $c_A$ | Molárna koncentrácia látky A na výstupe z reaktora | $kmol.m^{-3}$ |
| $c_{Af}$ | Molárna koncentrácia látky A na vstupe z reaktora | $kmol.m^{-3}$ |
| $c_{Bf}$ | Molárna koncentrácia látky B na vstupe z reaktora | $kmol.m^{-3}$ |
| $c_B$ | Molárna koncentrácia látky b na výstupe z reaktora | $kmol.m^{-3}$ |
| $Cp_r$ | Špecifická tepelná kapacita reakčnej zmesi | $J.g^{-1}.K^{-1}$ |
| $Cp_c$ | Špecifická tepelná kapacita chladiacej zmesi | $J.g^{-1}.K^{-1}$ |
| $E_i$ | Aktivačná energia | $J.kmol^{-1}$ |
| $H_i$ | Reakčné entalpie | $J.kmol^{-1}$ |
| $k_{0i}$ | Predexponenciálny faktor | $min^{-1}$ |
| $q_r$ | Objemový prietok reakčnej zmesi | $m^3.min^{-1}$ |
| $q_c$ | Objemový prietok chladiaceho média | $m^3.min^{-1}$ |
| R | Univerzálna plynová konštanta | $J.kmol^{-1}.K^{-1}$ |
| t | Čas | min |
| $V_r$ | Reakčný objem reaktora | $m^3$ |
| $V_c$ | Chladiaci objem reaktora | $m^3$ |
| $\alpha$ | Úhrnný koeficient prechodu tepla | $J.min^{-1}.m^{-2}.K^{-1}$ |
| $\vartheta_r$ | Teplota reakčnej zmesi | K |
| $\vartheta_c$ | Teplota chladiaceho média | K |
| $\vartheta_f$ | Teplota reakčnej zmesi na vstupe | K |
| $\vartheta_{cf}$ | Teplota chladiaceho média na vstupe | K |
| $\rho_r$ | Stredná hodnota hustoty reakčnej zmesi | $g.m^{-3}$ |
| $\rho_c$ | Stredná hodnota hustoty chladiaceho média | $g.m^{-3}$ |
| $Q_{GEN}$,$Q_{OUT}$ | Generované a odvedené teplo | $J.min^{-1}$ |

## 2.2 Hodnoty zadaných parametrov reakcie a reaktora

| | |
|---|---|
| $V_r = 0{,}23\ m^3$ | $\rho_c = 998\ kg.m^{-3}$ |
| $V_c = 0{,}21\ m^3$ | $g_2 = E_2/R = 22019\ K$ |
| $c_{Af} = 4{,}22\ kmol.m^{-3}$ | $\alpha = 42{,}8\ kJ.m^{-2}.min^{-1}.K^{-1}$ |
| $A_k = 1{,}51\ m^2$ | $c_{Bf} = 0\ kmol.m^{-3}$ |
| $q_r = 0{,}015\ m^3.min^{-1}$ | $\vartheta_f = 310\ K$ |
| $q_c = 0{,}004\ m^3.min^{-1}$ | $Cp_r = 4{,}02\ kJ.kg^{-1}.K^{-1}$ |
| $\vartheta_{cf} = 288\ K$ | $g_1 = E_1/R = 9850\ K$ |
| $\rho_r = 1020\ kg.m^{-3}$ | $Cp_c = 4{,}182\ kJ.kg^{-1}.K^{-1}$ |
| $H_1 = -8{,}6.10^4\ kJ.kmol^{-1}$ | $k_{01} = 1{,}55.10^{11}\ min^{-1}$ |
| $H_2 = -5{,}5.10^4\ kJ.kmol^{-1}$ | $k_{02} = 8{,}55.10^{26}\ min^{-1}$ |

## 2.3 Zjednodušujúce podmienky

Na uľahčenie výpočtu a návrhu matematického modelu chemického reaktora sa zvolili tieto zjednodušujúce predpoklady:

- tepelná kapacita steny reaktora a jej tepelný odpor sú zanedbateľné
- úhrnný koeficient prechodu tepla je konštantný
- prietok, hustota, špecifická tepelná kapacita, objem reakčnej zmesi sú konštantné
- objemový prietok reakčnej zmesi na vstupe do reaktora a výstupe z reaktora sú rovnaké a predpokladáme ich konštantné
- teplota chladiacej kvapaliny v celom objeme plášťa je rovnaká

Z predpokladu dokonalého miešania v reaktore vyplýva, že koncentrácia a teplota na výstupe sú rovnaké ako v reaktore [6].

# 3. Matematické modelovanie

Matematický model procesu je matematickou abstrakciou reálneho procesu. Matematický model procesu poskytuje možnosť určiť správanie sa procesu, ak sú známe vstupy. Rozsah platnosti matematického modelu určuje situácie, v ktorých môže byť použitý. Môže to byť napríklad pri riadení spojitých technologických celkov, pri skúmaní dynamických vlastností procesov, pri optimálnom návrhu procesov a pri určení optimálnych prevádzkových podmienok procesu. Skúmanie ľubovoľného typického procesu nás vedie k zostrojeniu jeho matematického modelu, ktorý v sebe zahŕňa základné rovnice a veličiny a opis statiky a dynamiky. [3]

***Materiálová bilancia***

Súčet hmotností všetkých látkových tokov do systému $m_i$ je rovný súčtu hmotností všetkých vystupujúcich látkových tokov $m_o$ a hmotností akumulovaných častí tokov prúdov v systéme $\Delta m_k$.

$$\sum_i m_i = \sum_o m_o + \sum_k \Delta m_k \tag{1}$$

***Entalpická bilancia***

Súčet množstiev tepiel, ktorých nosičmi sú všetky látkové toky do systému $Q_i$, je rovný súčtu množstiev tepiel, ktorých nosičmi sú všetky vystupujúce látkové toky $Q_0$, tepiel vzniknutých reakciou $Q_r$ a akumulovaných častí tepiel v systéme $\Delta Q_k$.

$$\sum_i Q_i = \sum_0 Q_0 + \sum_r Q_r + \sum_k \Delta Q_k \tag{2}$$

## 3.1 Dynamický matematický model

Pre riadenie je dôležitý dynamický model procesu. Pri vytváraní matematického modelu procesu sa vychádza z problému skúmania, pričom je dôležité dokonalé pochopenie skúmaných javov. [3]

Dynamický matematický model reaktora bude odvodený pomocou materiálových bilancií zložiek A a B, entalpickej bilancie reakčnej zmesi a entalpickej bilancie chladiacej zmesi.

*Materiálová bilancia reagujúcich zložiek:*

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = \frac{q_r(t)}{V_r}.c_{Af}(t) - c_A(t)\left(k_1 + k_2 + \frac{q_r(t)}{V_r}\right) \qquad c_A(0) = c_{A0} \tag{3}$$

$$\frac{dc_B(t)}{dt} = \frac{q_r(t)}{V_r}.c_{Bf}(t) - \frac{q_r(t)}{V_r}.c_B(t) + c_A(t).k_1 \qquad c_B(0) = c_{B0} \tag{4}$$

kde

$$k_1 = k_{01}e^{-\frac{E_1}{R\vartheta_r}} \tag{5}$$

$$k_2 = k_{02}e^{-\frac{E_2}{R\vartheta_r}} \tag{6}$$

*Entalpická bilancia reakčnej zmesi*

$$\frac{d\vartheta_r(t)}{dt} = \frac{q_r(t)}{V_r}\left[\vartheta_f(t) - \vartheta_r(t)\right] + \frac{\left(-\Delta_r H_1\right).k_1 + \left(-\Delta_r H_2\right).k_2}{\rho_r.Cp_r}.c_A(t) - \frac{\alpha.A_k}{V_r.\rho_r.Cp_r}\left[\vartheta_r(t) - \vartheta_c(t)\right] \tag{7}$$

$$\vartheta_r(0) = \vartheta_{r0} \tag{8}$$

*Entalpická bilancia chladiacej zmesi*

$$\frac{d\vartheta_c(t)}{dt} = \frac{q_c(t)}{V_c}\left[\vartheta_{cf}(t) - \vartheta_c(t)\right] + \frac{\alpha.A_k}{V_c\rho_c Cp_c}\left[\vartheta_r(t) - \vartheta_c(t)\right] \tag{9}$$

$$\vartheta_c(0) = \vartheta_{c0} \tag{10}$$

## 3.2 Matematický model reaktora v rovnovážnom stave

Proces je v ustálenom alebo rovnovážnom stave ak sa vstupné a výstupné veličiny v čase nemenia. To znamená, že derivačná zložka dynamického modelu bude nulová a všetky veličiny, ktoré sú funkciou času budú v ustálenom stave.

$$0 = \frac{q_r}{V_r}.c_{Af}{}^S - c_A{}^S\left(k_1{}^S + k_2{}^S + \frac{q_r}{V_r}\right) \tag{11}$$

$$0 = \frac{q_r}{V_r}.c_{Bf}{}^S - \frac{q_r}{V_r}.c_B{}^S + c_A{}^S.k_1{}^S \tag{12}$$

$$0 = \frac{q_r}{V_r}\left[\vartheta_f{}^S - \vartheta_r{}^S\right] + \frac{\left(-\Delta_r H_1\right).k_1{}^S + \left(-\Delta_r H_2\right).k_2{}^S}{\rho_r.Cp_r}.c_A{}^S - \frac{\alpha.A_k}{V_r.\rho_r.Cp_r}\left[\vartheta_r{}^S - \vartheta_c{}^S\right] \tag{13}$$

$$0 = \frac{q_c{}^S}{V_c}\left[\vartheta_{cf}{}^S - \vartheta_c{}^S\right] + \frac{\alpha.A_k}{V_c\rho_c Cp_c}\left[\vartheta_r{}^S - \vartheta_c{}^S\right] \tag{14}$$

### 3.2.1 Rovnovážne stavy reaktora

Rovnovážne stavy sa počítajú z modelu rovnovážneho stavu, spôsobov výpočtov je viacero. Pri jednoduchších modeloch, ako napríklad zásobníkoch kvapalín sa dajú vypočítať z modelu rovnovážneho stavu a to vyjadrením neznámych veličín. V našom prípade, by toto vyjadrenie vyzeralo nasledovne.

$$c_A^{\ S} = \frac{q_r.c_{Af}}{k_1^{\ S}.V_r + k_2^{\ S}.V_r + q_r} \tag{15}$$

$$c_B^{\ S} = \frac{c_A^{\ S}.k_1^{\ S}.V_r + q_r.c_{Bf}}{q_r} \tag{16}$$

$$\vartheta_r^{\ S} = \frac{\rho_r.Cp_r.q_r.\vartheta_f^{\ S} + (-\Delta H_1)k_1^{\ S} + (-\Delta H_2)k_2^{\ S}.V_r.c_A^{\ S} + \alpha.A_K\vartheta_c^{\ S}}{\alpha.A_K + \rho_r.Cp_r.q_r} \tag{17}$$

$$\vartheta_c^{\ S} = \frac{\rho_c.Cp_c.q_c.\vartheta_{cf} + \alpha.A_k.\vartheta_r^{\ S}}{\rho_c.Cp_c.q_c + \alpha.A_k} \tag{18}$$

Vzhľadom na to, že tento spôsob výpočtu je v našom prípade zdĺhavý, môže sa použiť funkcia *f-solve* v Matlabe. V prípade reaktora boli vypočítané tri ustálené stavy. Stabilite ustálených stavov sa venujem v nasledujúcej kapitole.

1. ustálený stav:

$$c_A^{\ S} = 4.0839\ kmol.m^{-3}$$
$$c_B^{\ S} = 0.1308\ kmol.m^{-3}$$
$$\vartheta_r^{\ S} = 308.4112\ K$$
$$\vartheta_c^{\ S} = 304.2210\ K$$

2. ustálený stav:

$$c_A^{\ S} = 1.8614\ kmol.m^{-3}$$
$$c_B^{\ S} = 1.0113\ kmol.m^{-3}$$
$$\vartheta_r^{\ S} = 338.4080\ K$$
$$\vartheta_c^{\ S} = 328.0599\ K$$

3. ustálený stav:

$$c_A^{\ S} = 0.3318\ kmol.m^{-3}$$
$$c_B^{\ S} = 0.5825\ kmol.m^{-3}$$
$$\vartheta_r^{\ S} = 353.6191\ K$$
$$\vartheta_c^{\ S} = 339.3536\ K$$

### 3.2.2 Analýza stability rovnovážnych stavov

Pre analýzu stability je rozhodujúca entalpická bilancia reakčnej zmesi v rovnovážnom stave. Chemický reaktor je v rovnovážnom stave, ak platí:

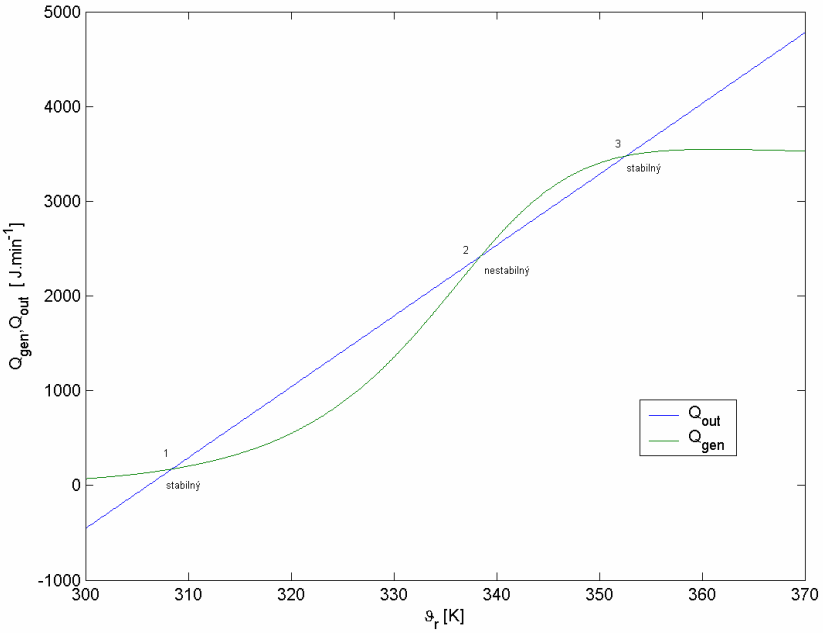
$$\dot{Q}_{GEN}^{\ s} = \dot{Q}_{OUT}^{\ s} \tag{19}$$

$$\dot{Q}_{GEN}^{\ s} = V_r.c_A^{\ s}\left((-\Delta_r H_1)k_1^{\ s} + (-\Delta_r H_2)k_2^{\ s}\right) \tag{20}$$

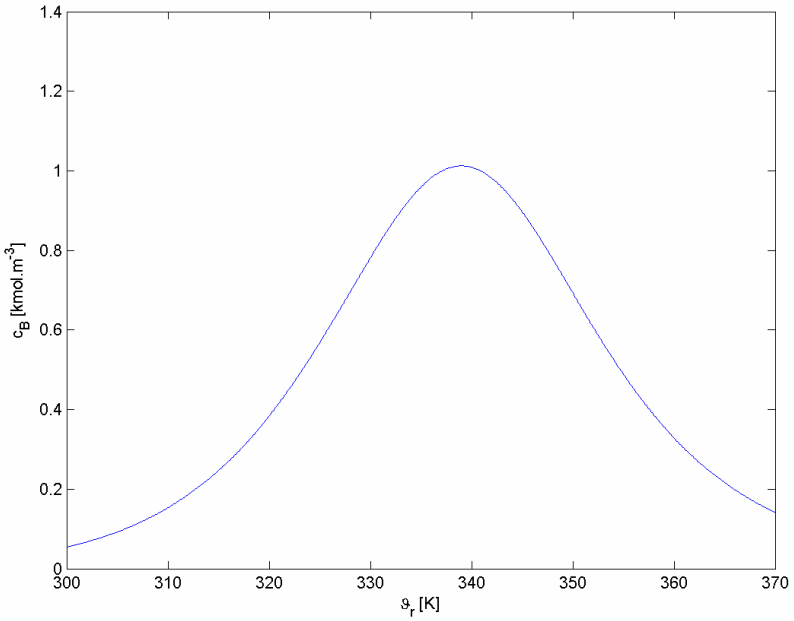
$$\dot{Q}_{OUT}^{\ s} = \vartheta_r^{\ s}\left(q_r.\rho_r.Cp_r + \alpha.A_k\right) - \alpha.A_k.\vartheta_c^{\ s} - q_r.\rho_r.Cp_r.\vartheta_f^{\ s} \tag{21}$$

Priesečníkov krivky závislosti rýchlosti tvorby tepla chemickými reakciami od teploty reakčnej zmesi a krivky závislosti rýchlosti odvádzania tepla zo systému v závislosti od teploty reakčnej zmesi môže byť aj viac, a vtedy má reaktor viac rovnovážnych stavov.

Ak má chemický reaktor viac rovnovážnych stavov, stabilné sú tie rovnovážne stavy, v ktorých smernica priamky rýchlosti odvádzania tepla zo systému je väčšia než smernica dotyčnice ku krivke rýchlosti tvorby tepla chemickými reakciami [4]. Z obr. 2 vyplýva, že rovnovážne stavy 1 a 3 sú stabilné a 2. je nestabilný. Najvyšší výťažok produktu je v 2. rovnovážnom stave (obr. 3).




**Obr. 2: Závislosť odvádzaného tepla a generovaného tepla od teploty reakčnej zmesi.**




**Obr. 3: Závislosť výťažku hlavného produktu od teploty reakčnej zmesi.**

## 3.3 Linearizovaný dynamický matematický model

### 3.3.1 Linearizácia

Podstata linearizácie nelineárnych rovníc spočíva v predpoklade, že veličiny procesu sa menia tak, že odchýlky od ustáleného stavu sú v čase dostatočne malé. Pri linearizácii sa využíva rozvoj do Taylorovho radu a potom sa uvažujú len lineárne členy radu. Takto získame linearizovaný model. [3]

Pri linearizovaní som postupovala podľa nasledujúcich rovníc.

$$f(x) = f(x^s) + \left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x^s} (x - x^s) \tag{22}$$

$$f(x,y) = f(x^s, y^s) + \left.\frac{\delta f(x,y)}{\delta x}\right|_{x=x^s, y=y^s} (x - x^s) + \left.\frac{\delta f(x,y)}{\delta y}\right|_{x=x^s, y=y^s} (y - y^s) \tag{23}$$

### 3.3.2 Linearizovaný model

Linearizovaný model vzniká odpočítaním matematického modelu rovnovážneho stavu od dynamického matematického modelu, pričom používame odchýlkové veličiny:

$$x_1(t) = c_A(t) - c_A{}^s \tag{24}$$

$$x_2(t) = c_B(t) - c_B{}^s \tag{25}$$

$$x_3(t) = \vartheta_r(t) - \vartheta_r{}^s \tag{26}$$

$$x_4(t) = \vartheta_c(t) - \vartheta_c{}^s \tag{27}$$

$$u_1(t) = q_c(t) - q_c{}^s \tag{28}$$

Dostávame linearizovaný model v tvare:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{A}.x + \mathbf{B}.u \tag{29}$$

$$y = \mathbf{C}.x + \mathbf{D}.u \tag{30}$$

kde

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ b \end{pmatrix} \qquad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 \end{pmatrix}$$

pričom prvky matíc **A** a **B** sú definované:

$$a_{11} = -\left( k_1^{\,s} + k_2^{\,s} + \frac{q_r}{V_r} \right)$$

$$a_{12} = 0$$

$$a_{13} = -\left( S_1 + S_2 \right)$$

$$a_{14} = 0$$

$$a_{21} = k_1^{\,s}$$

$$a_{22} = -\frac{q_r}{V_r}$$

$$a_{23} = S_1$$

$$a_{24} = 0$$

$$a_{31} = \left( \frac{\left(-\Delta_r H_1\right)}{\rho_r.Cp_r} k_1^{\,s} + \frac{\left(-\Delta_r H_2\right)}{\rho_r.Cp_r} k_2^{\,s} \right)$$

$$a_{32} = 0$$

$$a_{33} = \left( \frac{\left(-\Delta_r H_1\right)}{\rho_r.Cp_r} S_1 + \frac{\left(-\Delta_r H_2\right)}{\rho_r.Cp_r} S_2 - \frac{q_r}{V_r} - \frac{\alpha.A_k}{\rho_r.Cp_r.V_r} \right)$$

$$a_{34} = \frac{\alpha.A_k}{\rho_r.Cp_r.V}$$

$$a_{41} = 0$$

$$a_{42} = 0$$

$$a_{43} = \frac{\alpha.A_k}{V_c \rho_c Cp_c}$$

$$a_{44} = \left( \frac{q_c^{\,s}}{V_c} + \frac{\alpha.A_k}{V_c \rho_c Cp_c} \right)$$

$$b = \left( \frac{\vartheta_{cf}^{\,s} - \vartheta_c^{\,s}}{V_c} \right)$$

kde

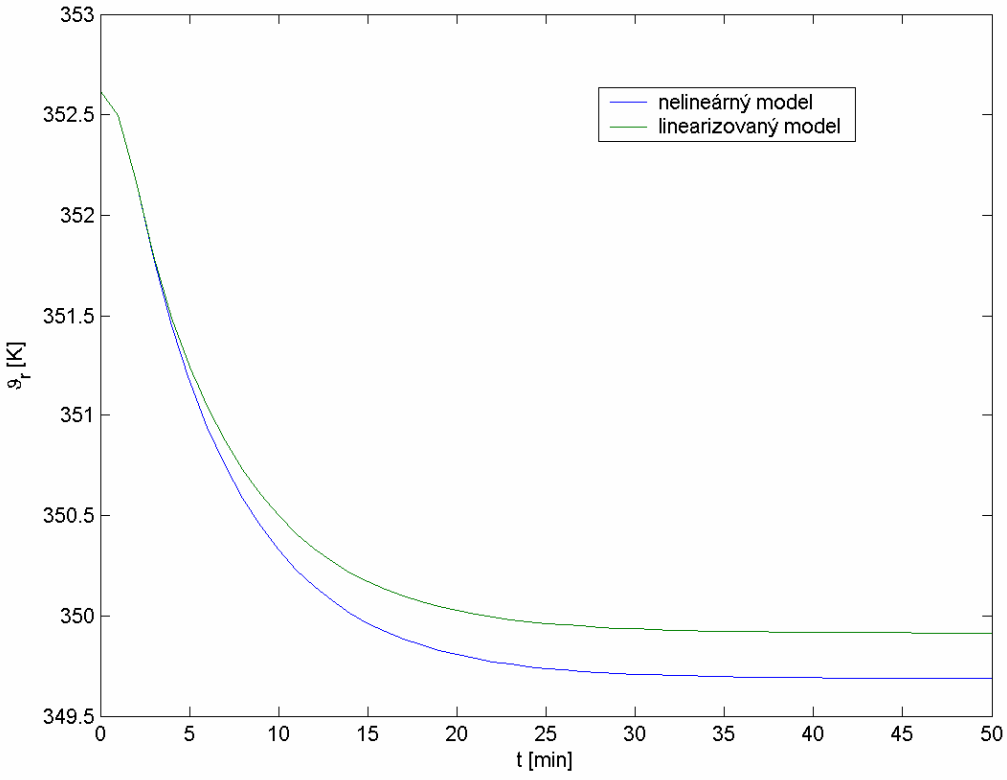
$$S_2 = k_2^{\,s} c_A^{\,s} \frac{\frac{E_2}{R}}{\left(\vartheta_r^{\,s}\right)^2} \tag{31}$$

$$S_1 = k_1^{\,s} c_A^{\,s} \frac{\frac{E_1}{R}}{\left(\vartheta_r^{\,s}\right)^2} \tag{32}$$

Na ďalšie výpočty sa použili údaje vypočítané v okolí 3. rovnovážneho stavu.

# 4. Porovnanie linearizovaného matematického modelu s nelineárnym modelom na 10 % - nú skokovú zmenu

Porovnanie sa dosiahne ak skokovo zmeníme jednu z vstupných veličín, v tomto prípade to je prietok chladiaceho média. Graf odozvy na skokovú zmenu sa nazýva prechodová charakteristika. Na obr. 4 možno vidieť porovnávané prechodové charakteristiky. Odchýlka nelineárneho modelu od linearizovaného predstavuje menej ako 0,5 K, čo je veľmi málo. Z toho vyplýva, že navrhnutý linearizovaný model je správny.




**Obr. 4: Porovnanie nelineárneho mat. modelu a linearizovaného mat. modelu.**

# 5. Identifikácia systému

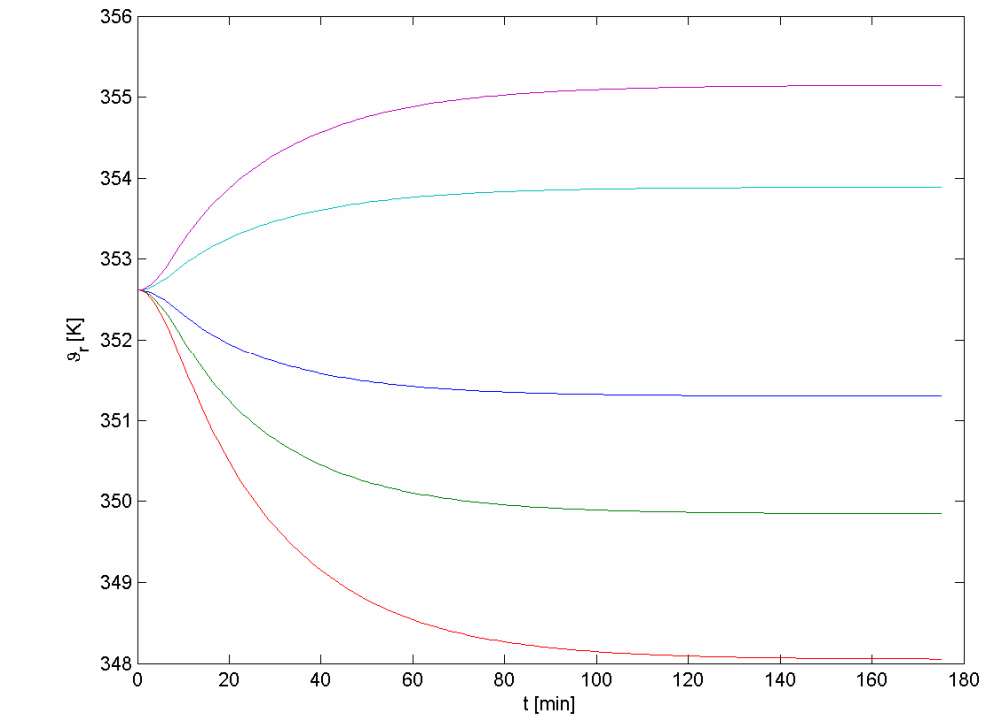
Pomocou príkazu *ss2tf* v Matlab-e sa získal zo stavového opisu nasledovný prenos (33). Pre uľahčenie výpočtov a zjednodušenie pri návrhov regulátora sa robila identifikácia systému. Cieľom identifikácie bolo získať prenos s čo najnižším stupeňom v menovateli.

$$G(s) = \frac{-16{,}7578s^2 - 14{,}9948s - 0{,}9066}{s^4 + 0{,}5460s^3 + 0{,}1540s^2 + 0{,}0123s + 0{,}0003} \tag{33}$$

Na základe viacerých prechodových charakteristík (obr. 5) , ktoré sa získali zo simulácie nelineárneho matematického modelu so štyrmi stavovými veličinami pre rôzne skokové zmeny prietoku chladiaceho média (tab. 1), sa vytvorila priemerovaná prechodová charakteristika, ktorá bola predmetom identifikácie.

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Prietok chladiacej zmesi [$m^3.min^{-1}$] (t<0 min) | 0,004 | 0,004 | 0,004 | 0,004 | 0,004 | 0,004 |
| Prietok chladiacej zmesi [$m^3.min^{-1}$] (t≥0 min) | 0,0044 | 0,0048 | 0,0052 | 0,0036 | 0,0032 | 0,0028 |

**Tab. 1: Skokové zmeny prietoku chladiacej zmesi.**




**Obr. 5: Prechodové charakteristiky.**

Z uvedených prechodových charakteristík vyplýva, že skúmaný systém je nelineárny.

Pre návrh jednoduchých regulátorov je vhodné vytvoriť priemerovanú prechodovú charakteristiku

$$\hat{y}_i = \frac{\sum_{k=1}^{N=6} \Delta u_k . y_{ik}}{\sum_{k=1}^{N=6} (\Delta u_k)^2} \tag{34}$$

kde

$i$ je i-tý bod prechodovej charakteristiky

$k$ je k-te meranie

$\Delta u_k$ je skoková zmena vstupu pri k-tom meraní

$y_{ik}$ je hodnota výstupu pri k-tom meraní v i-tom intervale

$\hat{y}_i$ je výsledná hodnota prechodovej charakteristiky v čase t = iΔt, kde Δt je perióda vzorkovania

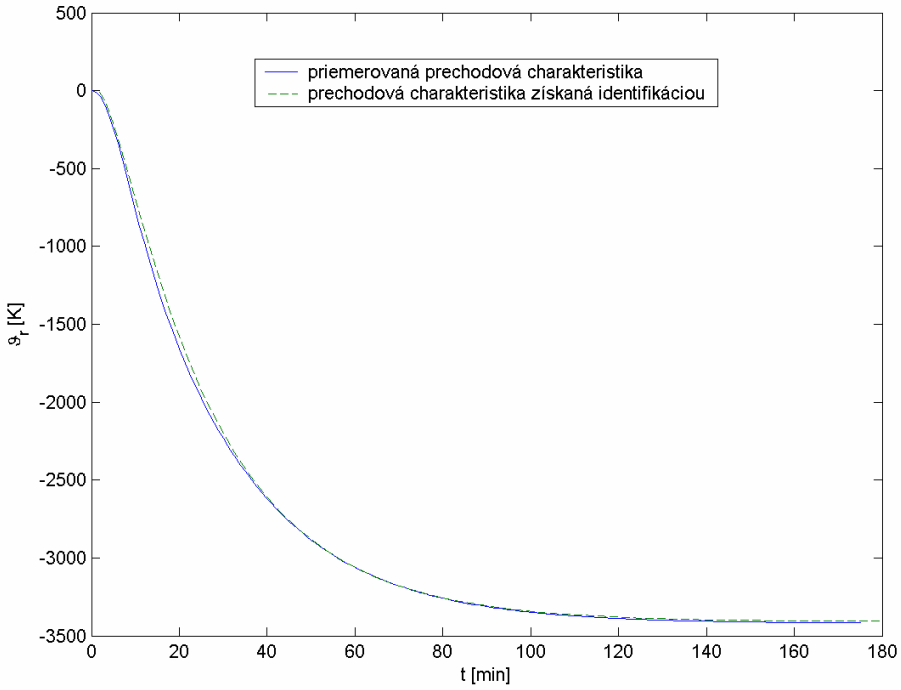
Priemerovaná prechodová charakteristika bola identifikovaná ako aperiodický systém 2. rádu s rozdielnymi časovými konštantami nasledovným postupom:

1) Zosilnenie systému je hodnota PCH v nekonečne K=y(∞).
2) Zistia sa hodnoty konštánt $T_u$, $T_n$ a vypočíta sa ich podiel $T_n/T_u = f_1(k)$.
3) Pomocou tabuľky so závislosťami $f_1(k)$ sa odčíta pre dané $f_1(k)$ hodnota k.
4) Pre dané k sa zistí hodnota $f_2(k)$ a odhad časovej konštanty $T_1 = T_n / f_2(k)$.
5) Hodnota časovej konštanty $T_2$ sa vypočíta podľa vzťahu $T_2 = k.T_1$ [5].

Identifikáciou priemerovanej prechodovej charakteristiky, ako systému 2. rádu sa získala prenosová funkcia:

$$G(s) = \frac{b_0}{a_2 s^2 + a_1 s + a_0} = \frac{-3409{,}1}{88.19 s^2 + 27.782 s + 1} \tag{35}$$

ktorá je takmer totožná s priemerovanou prechodovou charakteristikou (obr. 6)




**Obr. 6: Porovnanie prechodovej charakteristiky získanej identifikáciou a priemerovanej prechodovej charakteristiky.**

# 6. Návrh regulátorov

## 6.1 Naslinova metóda návrhu PI regulátora

Naslinova metóda patrí medzi analytické metódy syntézy regulátorov. Regulátor sa navrhuje na základe požiadavky na maximálne preregulovanie. [4]

Vychádza sa z charakteristickej rovnice uzavretého regulačného obvodu (URO),

$$1 + G(s).G_r(s) = 0 \tag{36}$$

kde Gr(s) je v tvare:

$$G_r(s) = Zr + \frac{Zr}{Ti.s} \tag{37}$$

ktoré určí voľbou parametrov regulátora tak, aby medzi všetkými tromi za sebou nasledujúcimi koeficientmi charakteristickej rovnice platila vzájomná súvislosť.

$$a_i^{\,2} = \alpha.a_{i+1}.a_{i-1} \qquad i = 1, 2... \tag{38}$$

Hodnota parametra α závisí od požadovaného percentuálneho maximálneho preregulovania. Nasledujúca tabuľka (tab. 2) obsahuje príslušné hodnoty α k zvolenému maximálnemu preregulovaniu.

| $\sigma_{MAX}$ [%] | 20 | 12 | 8 | 5 | 3 | 1 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| α | 1,7 | 1,8 | 1,9 | 2 | 2,2 | 2,4 |

**Tab. 2: Koeficientov maximálneho preregulovania.**

Touto metódou navrhnutý regulátor s maximálnym preregulovaním do 5% má nasledujúce parametre:

$Zr = -9{,}9029.10^{-4}$
$Ti = 9{,}7958$

## 6.2 Návrh PID regulátora metódou umiestnenia pólov

Regulátor sa navrhuje na základe požiadavky na správanie sa URO, ktorý vznikne pripojením navrhnutého regulátora k riadenému systému. Rýchlosť regulácie rastie v závislosti od umiestnenia pólov, preto treba voliť póly čo najviac na ľavo od nuly.

Pri návrhu regulátora sa vychádza opäť z charakteristickej rovnice URO (36), kde

$$G_r(s) = Zr + \frac{Zr}{Ti.s} + Zr.T_D.s \tag{39}$$

ktorá predstavuje ľavú stranu rovnice. Pravú stranu rovnice tvoria umiestnené póly v tvare:

$(s-s_1)^n \quad \Rightarrow \quad s_1 \; je \; n-násobný$
$(s-s_1).....(s-s_n) \quad \Rightarrow \quad s_1....s_n \; n-rôznych \; pólov$
$(s-s_1)(s-s_2)^{n-1} \quad \Rightarrow \quad s_1, s_2 \; n-1 \; násobný$

Pri návrhu regulátora sa použil jeden trojnásobný pól s hodnotou -0.5 , pričom sa postupovalo nasledovne:

$$s^3 + \left(\frac{27{,}782 - 3409{,}1.Zr.Td}{88{,}19}\right)s^2 + \left(\frac{1 - 3409{,}1.Zr}{88{,}19}\right)s + \left(\frac{-3409{,}1.\left(\frac{Zr}{Ti}\right)}{88{,}19}\right) = s^3 + 1{,}5.s^2 + 0{,}75.s + 0{,}125 \tag{40}$$

$$s^3: \quad 1 = 1$$
$$s^2: \quad \left(\frac{27{,}782 - 3409{,}1.Zr.Td}{88{,}19}\right) = 1{,}5$$
$$s^1: \quad \left(\frac{1 - 3409{,}1.Zr}{88{,}19}\right) = 0{,}75$$
$$s^0: \quad \left(\frac{-3409{,}1.\left(\frac{Zr}{Ti}\right)}{88{,}19}\right) = 0{,}125$$

Metódou porovnania koeficientov sa vypočítali neznáme parametre regulátora, ktoré sú nasledovné:

$Zr = -0{,}0191084$
$Ti = 5{,}909$
$Td = 1{,}604222$

# 7. Riadenie teploty reakčnej zmesi navrhnutými regulátormi

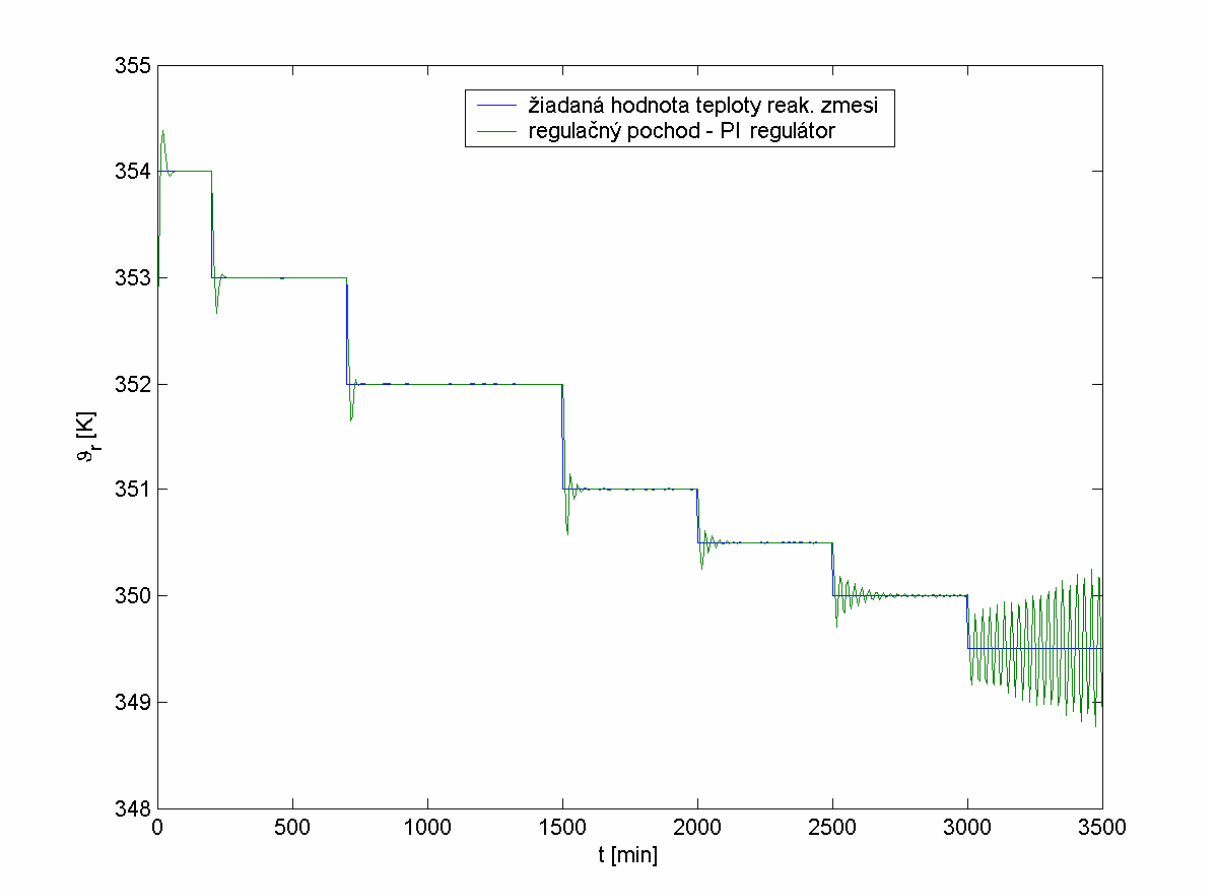
Overenie správnej činnosti navrhnutých regulátorov je možné uskutočniť pomocou simulácii prechodových charakteristík pri skokovej zmene žiadanej hodnoty. V tomto prípade sa zvolilo viac skokových zmien (tab. 3).

| Čas [min] | **0** | **200** | **700** | **1500** | **2000** | **2500** | **3000** |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Žiadaná hodnota teploty reak. zmesi [K] | **354** | **353** | **352** | **351** | **350,5** | **350** | **349,5** |

**Tab. 3: Zmeny žiadanej hodnoty teploty reakčnej zmesi.**

## 7.1 Riadenie žiadanej teploty reakčnej zmesi PI regulátorom

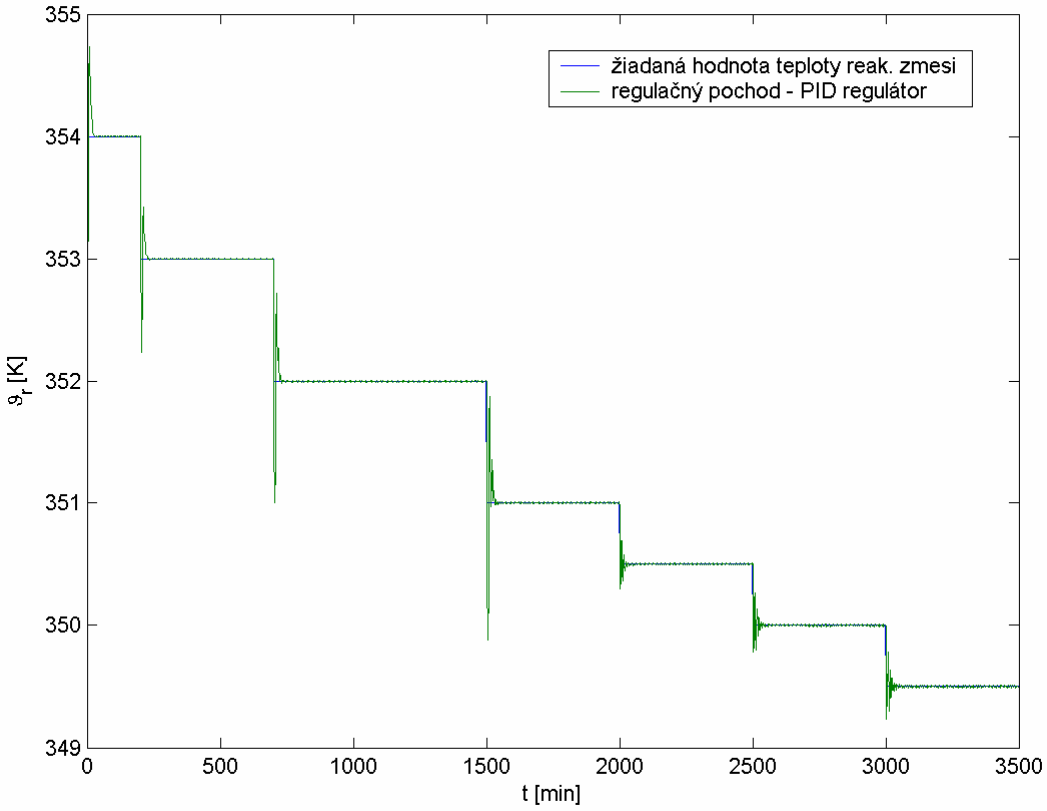
Teplota reakčnej zmesi na výstupe sa riadila PI regulátorom. Na obr. 7 je znázornený priebeh regulácie pri rôznych hodnotách žiadanej veličiny (tab. 3).




**Obr. 7: Priebeh regulácie PI regulátorom.**

## 7.2 Riadenie reakčnej teploty PID regulátorom

Rovnakým spôsobom ako pri použití PI regulátora sa overovala činnosť PID regulátora. Zvolili sa tie isté žiadané hodnoty teploty reakčnej zmesi.




**Obr. 8: Priebeh regulácie PID regulátorom.**

## 7.3 Vyhodnotenie regulačných pochodov pri použití PI a PID regulátora

Na obr. 7 možno vidieť, že PI regulátor sa pri nižších žiadaných hodnotách teploty reakčnej zmesi stáva agresívnejším a pri väčšej skokovej zmene žiadanej hodnoty sa obvod rozkmitá a stáva sa nestabilným. Ako možno vidieť na obr. 8, PID regulátor je výhodnejší ako PI regulátor, pretože D – zložka tlmí kmity a preto sa teplota reakčnej zmesi rýchlejšie ustaľuje, čím sa zabráni rozkmitaniu obvodu a teda obvod zostáva stabilný aj pri väčších skokových zmenách žiadanej hodnoty.

Na porovnanie a vyhodnotenie regulačného pochodu sa použili vybrané ukazovatele, a to:

- trvalá regulačná odchýlka (TRO)
- maximálne preregulovanie ($\sigma_{MAX}$)
- čas regulácie ($t_{reg}$)
- čas maximálneho preregulovania.

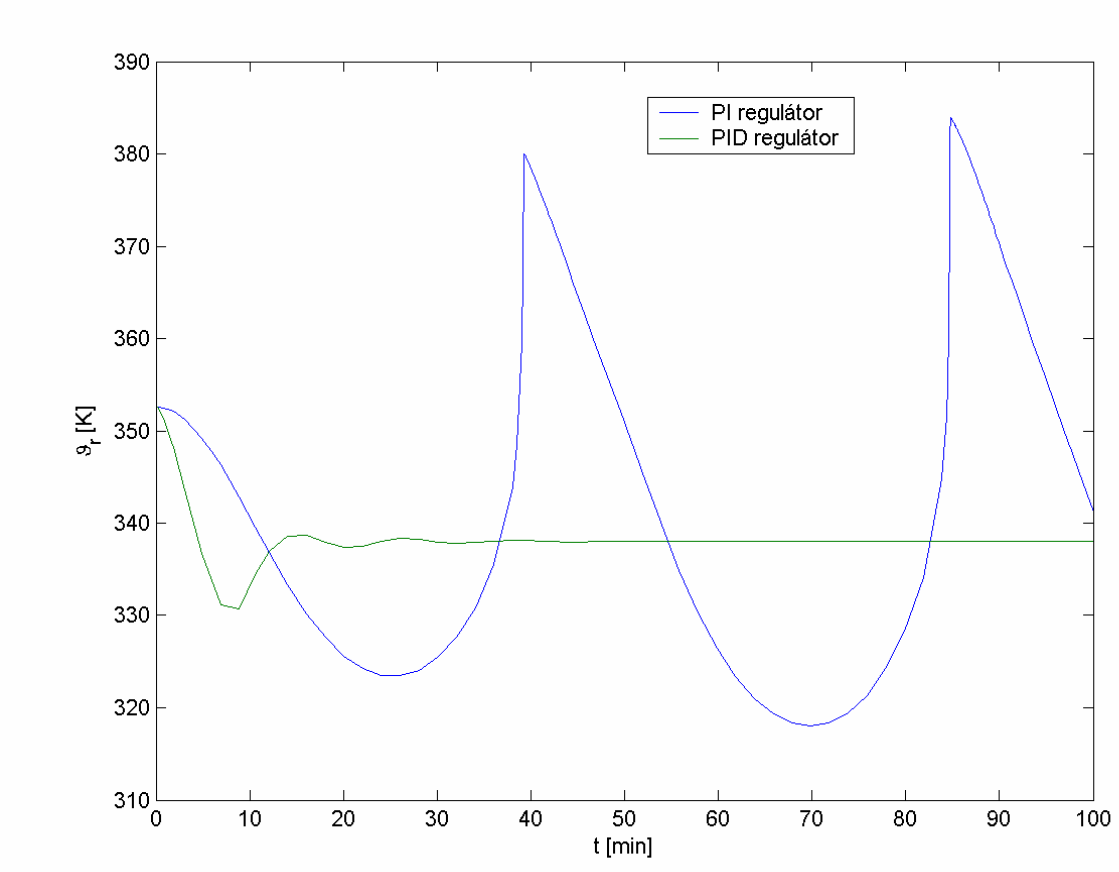
| | **ukazovatele /w [K]** | **354** | **353** | **352** | **351** | **350,5** | **350** | **349,5** |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **PI** | **TRO** | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | - |
| | **$\sigma_{MAX}$ [%]** | 0,1082 | 0,0943 | 0,0997 | 0,1234 | 0,0713 | 0,0834 | - |
| | **$t_{reg}$ [min]** | 90 | 70 | 56,5 | 91,5 | 140 | 300 | - |
| | **Čas max. prer. [min]** | 18,3 | 18,2 | 16,5 | 18,9 | 15,8 | 17,3 | - |
| **PID** | **TRO** | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | **$\sigma_{MAX}$ [%]** | 0,1094 | 0,0338 | 0,0618 | 0,1802 | 0,232 | 0,3011 | 0,3824 |
| | **$t_{reg}$ [min]** | 26 | 22,75 | 25 | 35 | 50 | 55 | 70 |
| | **Čas max. prer. [min]** | 4,42 | 4,51 | 5,35 | 5 | 4,674 | 5,8932 | 5,841 |

**Tab. 4: Ukazovatele regulácie**

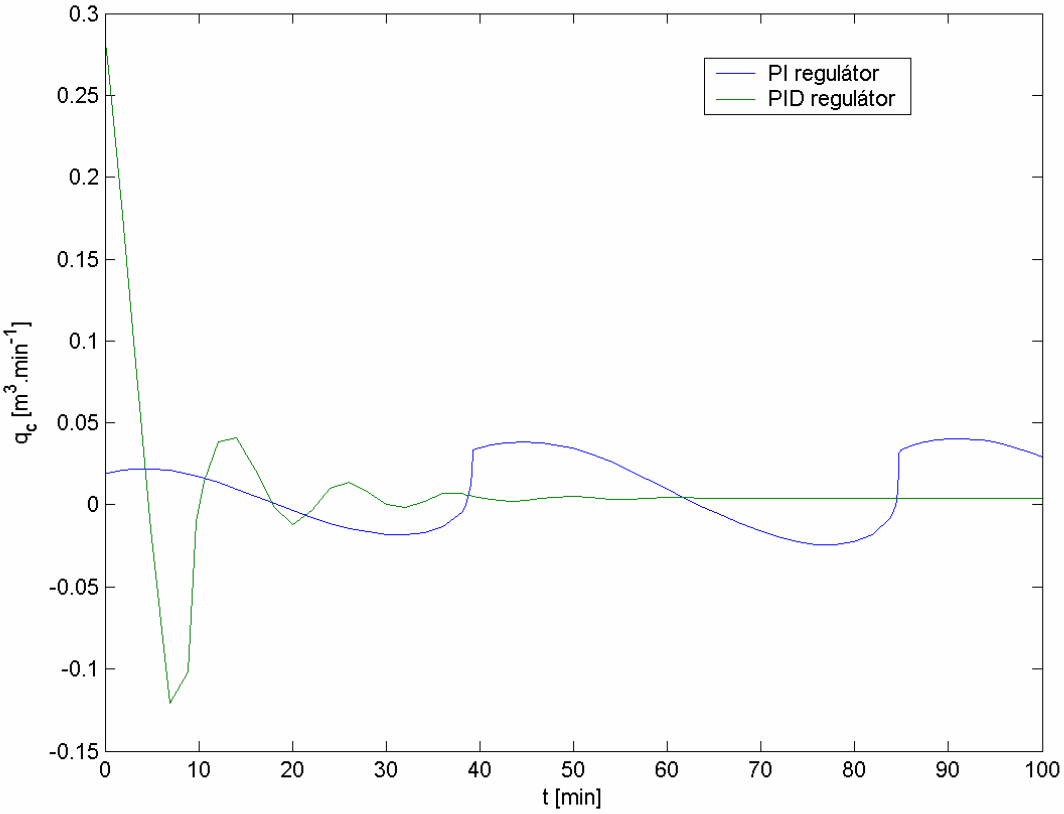
Z tab. 4 možno spozorovať, že trvalá regulačná odchýlka je pri oboch regulátoroch nulová, okrem posledného prípadu PI regulátora. Nulovú regulačnú odchýlku spôsobuje integračná zložka v regulátoroch. Ďalej je dôležité, všimnúť si, že podmienka 5 % - ného maximálneho preregulovania je splnená. Ďalší ukazovateľ a to čas regulácie signalizuje čas, od ktorého sa riadená veličina dostane natrvalo do δ – okolia žiadanej veličiny. Vo všetkých ukazovateľoch najlepšie obstál PID regulátor navrhnutý metódou umiestnenia pólov.

## 7.4 Riadenie rektora do nestabilného stavu

Keďže najvyšší výťažok produktu B je v nestabilnom stave, navrhnuté regulátory boli použité na riadenie teploty reakčnej zmesi na hodnotu 338,4080 K (obr. 9),(obr. 10). Z obrázkov je vidieť, že je možné systém uriadiť aj do nestabilného stavu, pričom by sa musel použiť navrhnutý PID regulátor, pretože PI regulátor je príliš agresívny a obvod sa stáva nestabilným. Pri použití PID regulátora sa teplota pomerne rýchlo ustaľuje v dôsledku tlmených kmitov, čo spôsobuje D – zložka.




**Obr. 9: Regulačné pochody získané zo simulácie do nestabilného stavu.**




**Obr. 10: Časové závislosti prietoku chladiva ako akčnej veličiny pri regulačných pochodoch získaných zo simulácie do nestabilného stavu.**

# Záver

Cieľom tejto práce bolo vytvorenie matematického modelu chemického reaktora s miešaním a jeho následné riadenie. Prvým krokom bolo vytvorenie dynamického matematického modelu. Z neho sa potom odvodil matematický model v rovnovážnom stave. V tomto štádiu bolo potrebné si vypočítať rovnovážne stavy. Vzhľadom na to, že zadaný reaktor mal tri rovnovážne stavy, bolo nutné si zvoliť jeden rovnovážny stav nevyhnutný na ďalšie výpočty. Na výpočty sa zvolil stav označený v kapitole 3.2.1 ako 3. ustálený stav.

Pretože matematický model reaktora je silne nelineárny, bola potrebná linearizácia nelineárnych členov, pričom sa získal linearizovaný matematický model reaktora. Pri vytváraní prenosu z linearizovaného modelu bol stupeň polynómu v menovateli štvrtého rádu.

Pre zjednodušenie a uľahčenie návrhu regulátorov bolo potrebné urobiť identifikáciu tohto systému. Po identifikácii bol stupeň polynómu v menovateli druhého radu a tým bolo jednoduchšie navrhovať regulátory. Regulátory sa navrhovali pomocou dvoch rôznych metód. Pomocou simulácii bolo overené, že regulátor navrhnutý metódou umiestnenia pólov je vhodnejší ako regulátor navrhnutý Naslinovou metódou, pretože sa pri simuláciách dosiahol kratší čas regulácie.

Pretože najvyšší výťažok hlavného produktu je v 2. ustálenom stave, navrhnuté regulátory boli použité na riadenie teploty reakčnej zmesi do nestabilného stavu. Zistilo sa, že PID regulátor je schopný systém uriadiť.

# Literatúra


[1] Ilavský, J. a kol.: Aplikovaná chemická kinetika a teória reaktorov. Bratislava, SVŠT, 1989.

[2] Závacká, J., Bakošová, M., Puna, D.: Robustné riadenie chemického reaktora. AT&P Journal, č. 11, zv. 13, str. 65 – 68, 2006.

[3] Mikleš, J., Dostál, P., Mészáros, A.: Riadenie technologických procesov. Bratislava, Vydavateľstvo STU, 1994.

[4] Bakošová, M., Fikar, M., Čirka, Ľ.: Základy automatizácie. Laboratórne cvičenia zo základov automatizácie. Bratislava, Vydavateľstvo STU, 2003.

[5] Fikar, M., Mikleš, J.: Identifikácia systémov. Bratislava, STU Press, 1999.

[6] Mikleš, J., Fikar, M.: Modelovanie, identifikácia a riadenie procesov 1. Modely a dynamické charakteristiky spojitých procesov. Bratislava, STU Press, 1999.

[7] Ditl, P.: Chemické reaktory. Praha, ČVUT, 2006.

[8] Molnár, A., Jaššo, I.: Chemické reaktory. Bratislava, SVŠT, 1990.

[9] Levenspiel, O.: Teorie a výpočty chemických reaktorů. Praha, SNTL – Nakladatelství technické literatúry, 1967.

# Prílohy

M-file používaný pri výpočtoch ustálených stavoch, generovaného a odvedeného tepla, pri výpočte matíc odchýlkového modelu a prenosu.

D:\Bakalarska praca\pr.m*

File Edit Text Window Help

```
cav=4.22;
cbv=0;
tv=310;
tcv=288;
q=0.015;
qc=0.004;
ro=1020;
roc=998;
cp=4.02;
cpc=4.182;
V=0.23;
Vc=0.21;
A=1.51;
k=42.8;
gl=9850;
g2=22019;
kla=1.55e+11;
k2a=8.55e+26;
Hrl=-8.6e+4;
Hr2=-5.5e+4;

%vypovet ustaleneho stavu
stav = fsolve(@fun,[0 0 359 359],optimset('fsolve'))

%vypocet gen. a odv. tepla
i=0;
for ths=300:0.1:370
 i=i+1;
    kls=kla*exp(-gl/ths);
    k2s=k2a*exp(-g2/ths);
    cas=(q*cav)/(q+V*kls+V*k2s);
    cbs=cbv+(kls/q)*cas*V;
    thcs=(qc*roc*cpc*tcv+A*k*ths)/(qc*roc*cpc+A*k);
    Qod=(q*ro*cp+A*k)*ths-q*ro*cp*tv-A*k*thcs;
    Qgen=-(Hrl*kls*cas+Hr2*k2s*cas)*V;
    odv(i)=Qod;
    gen(i)=Qgen;
    cb(i)=cbs;
    ca(i)=cas;
end
Ths=[300:0.1:370]';
odv=odv';
gen=gen';
cb=cb';
ca=ca';

cas=0.3318;
cbs=0.5825;
Ts=352.6191;
Tcs=339.3536;

kls=kla*exp(-gl/Ts);
k2s=k2a*exp(-g2/Ts);
Kl=kls*cas*gl/(Ts)^2;
K2=k2s*cas*g2/(Ts)^2;

all=-(q/V+kls+k2s);
al2=0;
al3=-(Kl+K2);
al4=0;
a21=kls;
a22=-(q/V);
a23=Kl;
a24=0;
a31=-(kls*Hrl+k2s*Hr2)/(ro*cp);
a32=0;
a33=-(q/V+A*k/(V*ro*cp)+(Kl*Hrl+K2*Hr2)/(ro*cp));
a34=(A*k)/(V*ro*cp);
a41=0;
a42=0;
a43=A*k/(Vc*roc*cpc);
a44=-(qc/Vc+A*k/(Vc*roc*cpc));

%matice odchylkoveho modelu
matA=[all al2 al3 al4;a21 a22 a23 a24;a31 a32 a33 a34;a41 a42 a43 a44]
matB=[0;0;0;(tcv-Tcs)/Vc]
matC=[0 0 1 0]
matD=[0]

%transformacia na prenos
[cit,men]=ss2tf(matA,matB,matC,matD);
cit=[cit(3) cit(4) cit(5)]
men=men
```

s-funkcia nelineárneho modelu reaktora.

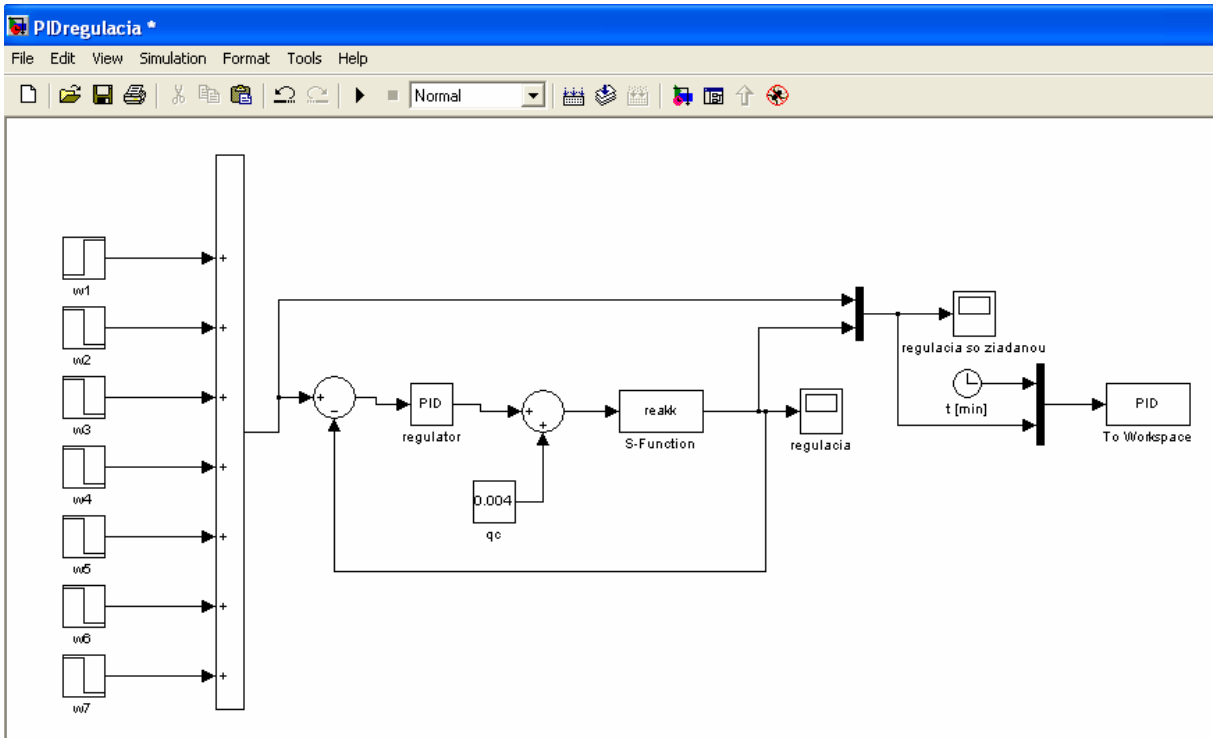
D:\Bakalarska praca\reakk.m*

File Edit Text Window Help

```
function [sys,x0,str,ts] = reakk(t,x,u,flag)
switch flag,
case 0,
    [sys,x0,str,ts]=mdlInitializeSizes;
case 1,
    sys=mdlDerivatives(t,x,u);
case 2,
    sys=mdlUpdate(t,x,u);
case 3,
    sys=mdlOutputs(t,x,u);
case 4,
    sys=mdlGetTimeOfNextVarHit(t,x,u);
case 9,
    sys=mdlTerminate(t,x,u);
otherwise
    error(['Unhandled flag = ',num2str(flag)]);
end
function [sys,x0,str,ts]=mdlInitializeSizes
sizes = simsizes;
sizes.NumContStates  = 4;
sizes.NumDiscStates  = 0;
sizes.NumOutputs     = 1;
sizes.NumInputs      = 1;
sizes.DirFeedthrough = 1;
sizes.NumSampleTimes = 1;
sys = simsizes(sizes);
x0  = [0.3318 0.5825 352.6191 339.3536];
str = [];
ts  = [0 0];
function sys=mdlDerivatives(t,x,u)
cav=4.22;
cbv=0;
tv=310;
tcv=288;
q=0.015;
qc=0.004;
ro=1020;
roc=998;
cp=4.02;
cpc=4.182;
V=0.23;
Vc=0.21;
A=1.51;
k=42.8;
g1=9850;
g2=22019;
k1a=1.55e+11;
k2a=8.55e+26;
Hr1=-8.6e+4;
Hr2=-5.5e+4;

sys (1) = -(q/V+k1a*exp(-g1/x(3))+k2a*exp(-g2/x(3)))*x(1)+(q/V)*cav;
sys (2) = -(q/V)*x(2)+k1a*exp(-g1/x(3))*x(1)+(q/V)*cbv;
sys (3) = -((k1a*Hr1*exp(-g1/x(3))+k2a*Hr2*exp(-g2/x(3)))/(ro*cp))*x(1)+(q/V)*(tv-x(3))+((A*k)/(V*ro*cp))*(x(4)-x(3));
sys (4) =  ((u)/Vc)*(tcv-x(4))+((A*k)/(Vc*roc*cpc))*(x(3)-x(4)) ;

function sys=mdlUpdate(t,x,u)
sys = [];
function sys=mdlOutputs(t,x,u)
sys = x(3);
function sys=mdlGetTimeOfNextVarHit(t,x,u)
sampleTime = 1;
sys = t + sampleTime;
function sys=mdlTerminate(t,x,u)
sys = [];

```

Simulačná schéma použitá pri regulácii.