

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

**INTERNETOVÝ MODUL PRE MODELOVANIE A SIMULÁCIU
PROCESOV**

DIPLOMOVÁ PRÁCA

FCHPT-5414-25564

2010

Bc. Ján Dzurov

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

**INTERNETOVÝ MODUL PRE MODELOVANIE A
SIMULÁCIU PROCESOV**

DIPLOMOVÁ PRÁCA

FCHPT-5414-25564

Študijný program: automatizácia a informatizácia v chémii a potravinárstve

Číslo a názov študijného odboru: 5.2.14 automatizácia

Vedúca záverečnej práce/školiteľka: doc. Ing Monika Bakošová, CSc.

Konzultant záverečnej práce: Ing. Ľuboš Čirka, PhD.

Bratislava 2010

Bc. Ján Dzurov

S T U • •
• • • • •
F C H P T
• • • • •

ZADANIE DIPLOMOVEJ PRÁCE

Študent: **Bc. Ján Dzurov**
ID študenta: **25564**
Študijný program: **automatizácia a informatizácia v chémii a potravinárstve**
Študijný odbor: **5.2.14 automatizácia**
Vedúca práce: **doc. Ing. Monika Bakošová, CSc.**
Konzultant: **Ing. Ľuboš Čirka, PhD.**
Miesto vypracovania: **OIRP ÚIAM FCHPT**

Názov práce: **Internetový modul pre modelovanie a simuláciu procesov**

Špecifikácia zadania:

Vytvorenie internetového modulu pre modelovanie a simuláciu procesov ako základu virtuálneho laboratória na monitorovanie procesov chemickej, biochomickej a potravinárskej technológie. Čiastkové ciele sú nasledovné. Vytvorenie matematických modelov vybraných procesov chemickej a potravinárskej technológie, a to zásobníkov kvapaliny, výmenníkov tepla, chemického reaktora a rektifikačnej kolóny, v jazyku PHP. Vytvorenie programov na zabezpečenie zobrazovania výsledkov simulácií v grafickej a v tabuľkovej podobe. Vytvorenie webových formulárov pre nastavovanie parametrov modelov procesov a simulácií. Overenie funkčnosti modulu porovnaním so simuláciami v prostredí MATLAB-Simulink. Vypracovanie manuálu na použitie modulu.

Rozsah práce: **80**

Zoznam odbornej literatúry:

1. BAKOŠOVÁ, M. – BALEJA, J. – ČIRKA, Ľ. MODELTOOL 1.0 – a Model Toolbox for MATLAB/Simulink. In *Technical Computing Prague 2006 : 14th Annual Conference Proceedings*. Praha/ČR, 26.10.2006. 1. vyd. Praha: Humusoft s.r.o, 2006, s. 12. ISBN 80-7080-616-8.
2. BAKOŠOVÁ, M. – FIKAR, M. *Riadenie procesov*. STU v Bratislave, 2008. 1 s. ISBN 978-80-227-2841-6.
3. DARIE, C. – BRINZAREA, B. – CHERECHES-TOSA, F. – BUCICA, M. *AJAX a PHP tvoríme vysoce interaktívni webové aplikace : Profesionálne*. Brno: Zoner Press, 2006. 320 s. ISBN 80-86815-47-1.
4. LEE, J. – WARE, B. *Open Source – vývoj webových aplikací : Linux, Apache, MySQL, Perl a PHP*. Praha: Mobil Media, 2003. 448 s. ISBN 80-86593-43-6.
5. ŠROBA, J. – DROZD, P. *Vytvorenie grafického prostredia v PHP pre riadenie vybraného systému simulovaného v Matlabe*. Diplomová práce. Bratislava: STU FEI, 2006. 90 s.
6. WELLING, L. – THOMSON, L. *PHP a MySQL : rozvoj webových aplikací*. Praha: SoftPress, 2005. 910 s.

Riešenie zadania práce od: 15. 02. 2010
Dátum odovzdania práce: 22. 05. 2010



Bc. Ján Dzurov
Študent


prof. Ing. Miroslav Fikar, DrSc.
Vedúci pracoviska


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

Pod'akovanie

Tento cestou by som chcel pod'akovať vedúcej diplomovej práce doc. Ing Monike Bakošovej, CSc. a konzultantovi diplomovej práce Ing. Ľubošovi Čirkovi, PhD. za odborné konzultácie, cenné rady a usmerňovanie pri vypracovaní diplomovej práce.

Abstrakt

Cieľom práce je vytvorenie internetového modulu s využitím webových stránok pre modelovanie a simuláciu procesov. Teoretická časť sa zameriava na modely procesov a numerickú metódu riešenia diferencialných rovníc. Praktická časť obsahuje opis php kódu, ktorý bol použitý pre výpočet údajov, preberanie týchto údajov a ich grafické zobrazenie. Táto časť taktiež obsahuje stručné pokyny k používaniu webstránok. Experimentálna časť opisuje výsledky získané simuláciou dynamických vlastností zvolených procesov cez internet s výsledkami získanými simuláciou v prostredí Simulink programu Matlab.

Kľúčové slová: modelovanie, internetový modul, php

Abstract

The goal of this diploma thesis is the design of an internet module using webpages for modeling and simulation of processes. The theoretical part focuses on the models of processes and the method for numerical solution of differential equations. The practical part contains the description of the php code that is used for the calculation of data, downloading of these data and their graphic display. This part also contains brief instructions to the usage of the webpages. The experimental part deals with the comparing of the data acquired by simulation of dynamic behavior of chosen processes via the internet to the data acquired by simulation in the Simulink environment of the program Matlab.

Keywords: modeling, internet module, php

Obsah

Zoznam obrázkov	7
Zoznam tabuľiek	8
Úvod	9
1 Teoretická časť.....	10
1.1 Modelovanie procesov.....	10
1.1.1 Zásobník kvapaliny	10
1.1.2 Dva zásobníky kvapaliny s interakciou..	12
1.1.3 Dva zásobníky kvapaliny bez interakcie.....	14
1.1.4 Plášťový výmenník tepla..	16
1.1.5 Dva plášťové výmenníky tepla.....	18
1.1.6 Prietokový chemický reaktor.....	20
1.1.7 Etážová rektifikačná kolóna.....	24
1.2 Rungeho-Kuttova metóda pre numerické riešenie diferenciálnych rovnic	33
2 Praktická časť	35
2.1 Formulárové prvky	35
2.2 Skript PHP	38
2.2.1 Spracovanie zadávaných údajov	38
2.2.2 Výpočet a zobrazovanie hodnôt stavových veličín.....	40
2.2.3 Ukladanie výsledkov do formátu .xls.....	42
2.2.4 Vykreslovanie grafu	44
2.3 Používanie webstránok	50
3 Experimentálna časť	51
3.1 Porovnanie výsledkov s výsledkami toolboxu Modeltool.....	51
3.1.1 Zásobník kvapaliny	51
3.1.2 Dva zásobníky kvapaliny s interakciou..	54
3.1.3 Dva zásobníky kvapaliny bez interakcie.....	56
3.1.4 Plášťový výmenník tepla..	58
3.1.5 Plášťové výmenníky tepla.....	61
3.1.6 Prietokový chemický reaktor..	63
3.1.7 Etážová rektifikačná kolóna.....	65
4 Záver	67
Literatúra	68

Zoznam obrázkov

Obr. 1 Schéma zásobníka kvapaliny	10
Obr. 2 Schéma zásobníkov kvapaliny s interakciou	12
Obr. 3 Schéma zásobníkov kvapaliny bez interakcie	14
Obr. 4 Schéma výmenníka tepla	16
Obr. 5 Schéma výmenníkov tepla	18
Obr. 6 Schéma prietkového chemického reaktora	20
Obr. 7 Schéma etážovej rektifikačnej kolóny	24
Obr. 8 Ukážka výsledného formulára	38
Obr. 9 Formulár so zadanými údajmi, potrebnými pre vykreslenie grafu.....	49
Obr. 10 Ukážka grafu zobrazujúceho priebeh výšok hladín pri simulácii odozvy zásobníkov na skokovú zmenu vstupného prúdu.....	50
Obr. 11 Vyplnený formulár pre zásobník kvapaliny	51
Obr. 12 Nastavenie bloku <i>Zásobníky kvapaliny</i> , nelineárny model v Modeltool.....	52
Obr. 13 Priebeh výšky hladiny v zásobníku kvapaliny	53
Obr. 14 Vyplnený formulár pre zásobníky kvapaliny s interakciou.....	54
Obr. 15 Nastavenie bloku <i>Zásobníky kvapaliny</i> , nelineárny model v Modeltool.....	54
Obr. 16 Priebehy výšok hladín v zásobníkoch kvapaliny s interakciou	55
Obr. 17 Vyplnený formulár pre zásobníky kvapaliny bez interakcie	56
Obr. 18 Nastavenie bloku <i>Zásobníky kvapaliny</i> , nelineárny model v Modeltool.....	56
Obr. 19 Priebehy výšok hladín v zásobníkoch kvapaliny bez interakcie	57
Obr. 20 Vyplnený formulár pre plášťový výmenník tepla	58
Obr. 21 Nastavenie bloku <i>Plášťové výmenníky tepla</i> v Modeltool.....	59
Obr. 22 Priebeh teploty vo výmenníku tepla	60
Obr. 23 Vyplnený formulár pre plášťový výmenník tepla	61
Obr. 24 Nastavenie bloku <i>Plášťové výmenníky tepla</i> v Modeltool.....	61
Obr. 25 Priebehy teplôt vo výmenníkoch tepla	62
Obr. 26 Vyplnený formulár pre chemický reaktor	63
Obr. 27 Ustálený stav prietkového chemického reaktora	64
Obr. 28 Formulár pre etážovú rektifikačnú kolónu	65
Obr. 29 Priebeh zloženia zvyšku v etážovej rektifikačnej kolóne	66

Zoznam tabuľiek

Tab. 1 Porovnanie výsledkov – zásobník kvapaliny.....	52
Tab. 2 Porovnanie výsledkov – zásobníky kvapaliny s interakciou	55
Tab. 3 Porovnanie výsledkov – zásobníky kvapaliny bez interakcie	57
Tab. 4 Porovnanie výsledkov – výmenník tepla.....	59
Tab. 5 Porovnanie výsledkov – výmenníky tepla.....	62
Tab. 6 Ustálený stav chemického reaktora	64
Tab. 7 Porovnanie výsledkov – etážová rektifikačná kolóna	66

Úvod

Cieľom práce bolo vytvorenie internetového modulu pre modelovanie a simuláciu procesov. Simulácia sa realizuje prostredníctvom internetu pomocou php kódu. Parametre procesov a vstupy do procesu sa majú zadávať pomocou formulára. Internetové stránky majú umožňovať preberanie tabuľky výsledkov vo formáte .xls programu Excel. Ďalej sa majú výsledky dať zobraziť formou grafu.

V teoretickej časti opíšem vytváranie modelov pre procesy: zásobník kvapaliny, dva zásobníky kvapaliny s interakciou, dva zásobníky kvapaliny bez interakcie, plášťový výmenník tepla, dva sériovo zapojené plášťové výmenníky tepla, prietokový chemický reaktor a etážová rektifikačná kolóna. Ďalej v tejto časti uvediem vzťahy pre výpočet hodnôt sledovaných veličín Rungeho-Kuttovou metódou.

V praktickej časti sa budem zaoberať skriptom na vytváranie internetového formulára, skriptom php na výpočet hodnôt, skriptom php na ukladanie údajov a skriptom php na vykreslovanie grafu. V tejto časti taktiež uvediem pokyny k používaniu webstránok.

V experimentálnej časti porovnám údaje získané simuláciou cez internet s údajmi získanými simuláciou v prostredí Simulink programu Matlab.

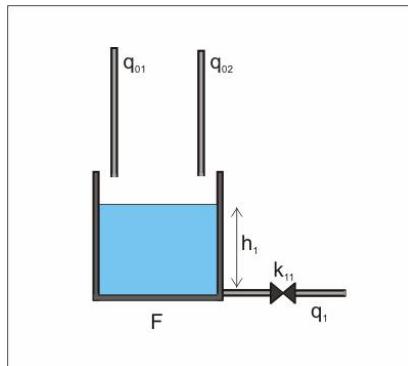
1 Teoretická časť

1.1 Modelovanie procesov

[1,2,3]

V tejto časti sa budem zaoberať odvádzaním matematických modelov technologických procesov pre procesy: zásobník kvapaliny, dva zásobníky kvapaliny s interakciou, dva zásobníky kvapaliny bez interakcie, plášťový výmenník tepla, dva plášťové výmenníky tepla, prietokový chemický reaktor a etážová rektifikačná kolóna.

1.1.1 Zásobník kvapaliny



Obr.1 Schéma zásobníka kvapaliny

Zásobníky kvapaliny patria medzi základné chemickotechnologické zariadenia. Pri odvádzaní matematického modelu uvažujeme len materiálový tok a pracujeme iba s materiálovou bilanciou.

Model zásobníka kvapaliny

$h[m]$ - výška hladiny v zásobníku kvapaliny

$q_{01}, q_{02}, q_{03} [m^3 s^{-1}]$ - prietok kvapaliny na vstupe do zásobníka kvapaliny

$q_i [m^3 s^{-1}]$ - prietok kvapaliny na výstupe zo zásobníka kvapaliny

$F [m^2]$ - plocha prierezu zásobníka kvapaliny

$V [m^3]$ - objem zásobníku kvapaliny

m_0 [kg] - hmotnosť kvapaliny na vstupe do zásobníka kvapaliny

m_1 [kg] - hmotnosť kvapaliny na výstupe zo zásobníka kvapaliny

m_0 [kg.s⁻¹] - hmotnostný tok kvapaliny na vstupe do zásobníka kvapaliny

m_1 [kg.s⁻¹] - hmotostný tok kvapaliny na výstupe zo zásobníka kvapaliny

r [kg.m⁻³] - hustota kvapaliny v zásobníku kvapaliny

k_{11} [m^{2.5}s⁻¹] - konštantá ventilu

Cieľom je vytvoriť nelineárny matematický model pri nasledujúcich zjednodušujúcich predpokladoch:

- Teplota kvapaliny je vo všetkých zásobníkoch rovnaká.
- Hustota kvapaliny je vo všetkých zásobníkoch rovnaká.

Materiálová bilancia:

$$m_{01}(t) + m_{02}(t) = m_1(t) + \frac{dm(t)}{dt} \quad (1)$$

$$q_{01}(t)r + q_{02}(t)r = q_1(t)r + \frac{d(V(t)r)}{dt} \quad (2)$$

$$q_{01}(t) + q_{02}(t) = q_1(t) + F \frac{dh(t)}{dt} \quad (3)$$

$$q_1(t) = k_{11} \sqrt{h(t)} \quad (4)$$

Odvodenie nelineárneho dynamického matematického modelu:

$$q_{01}(t) + q_{02}(t) = k_{11} \sqrt{h(t)} + F \frac{dh(t)}{dt} \quad (5)$$

$$F \frac{dh(t)}{dt} = q_{01}(t) + q_{02}(t) - k_{11} \sqrt{h(t)} \quad (6)$$

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{F} q_{01}(t) + \frac{1}{F} q_{02}(t) - \frac{k_{11}}{F} \sqrt{h(t)} \quad (7)$$

Stavová veličina: $h(t)$

Vstupné veličiny: $q_{01}(t), q_{02}(t)$

Výstupná veličina: $h(t)$

$h(0) = h^s$, kde h^s je výška hladiny v rovnovážnom stave

Materiálová bilancia v rovnovážnom tvaru

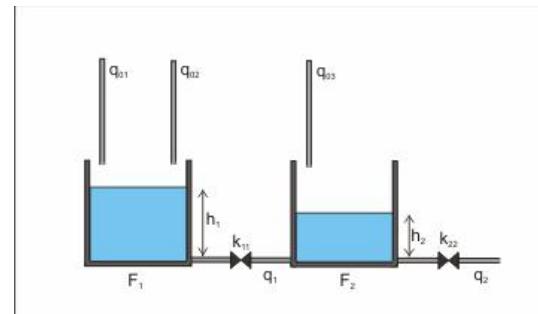
V rovnovážnom stave nedochádza k akumulácii a veličiny sa prestanú meniť v čase.

$$\frac{dh^s}{dt} = \frac{1}{F} q_{01}^s + \frac{1}{F} q_{02}^s - \frac{k_{11}}{F} \sqrt{h^s} \quad (8)$$

Model rovnovážneho stavu:

$$0 = \frac{1}{F} q_{01}^s + \frac{1}{F} q_{02}^s - \frac{k_{11}}{F} \sqrt{h^s} \quad (9)$$

1.1.2 Dva zásobníky kvapaliny s interakciou



Obr.2 Schéma zásobníkov kvapaliny s interakciou

Materiálová bilancia:

$$\dot{m}_{01}(t) + \dot{m}_{02}(t) = \dot{m}_1(t) + \frac{dm_1(t)}{dt} \quad (10)$$

$$\dot{m}_1(t) + \dot{m}_{03}(t) = \dot{m}_2(t) + \frac{dm_2(t)}{dt} \quad (11)$$

$$q_{01}(t)r + q_{02}(t)r = q_1(t)r + \frac{d(V_1(t)r)}{dt} \quad (12)$$

$$q_1(t)r + q_{03}(t)r = q_2(t)r + \frac{d(V_2(t)r)}{dt} \quad (13)$$

$$q_{01}(t) + q_{02}(t) = q_1(t) + \frac{dV_1(t)}{dt} \quad (14)$$

$$q_1(t) + q_{03}(t) = q_2(t) + \frac{dV_2(t)}{dt} \quad (15)$$

$$q_1(t) = k_{11} \sqrt{h_1(t) - h_2(t)} \quad (16)$$

$$q_2(t) = k_{22} \sqrt{h_2(t)} \quad (17)$$

$$V_1(t) = F_1 h_1(t) \quad (18)$$

$$V_2(t) = F_2 h_2(t) \quad (19)$$

Odvodenie nelineárneho dynamického matematického modelu:

$$q_{01}(t) + q_{02}(t) = k_{11} \sqrt{h_1(t) - h_2(t)} + F_1 \frac{dh_1(t)}{dt} \quad (20)$$

$$k_{11} \sqrt{h_1(t) - h_2(t)} + q_{03}(t) = k_{22} \sqrt{h_2(t)} + F_2 \frac{dh_2(t)}{dt} \quad (21)$$

$$F_1 \frac{dh_1(t)}{dt} = q_{01}(t) + q_{02}(t) - k_{11} \sqrt{h_1(t) - h_2(t)} \quad (22)$$

$$F_2 \frac{dh_2(t)}{dt} = k_{11} \sqrt{h_1(t) - h_2(t)} + q_{03}(t) - k_{22} \sqrt{h_2(t)} \quad (23)$$

$$\frac{dh_1(t)}{dt} = \frac{1}{F_1} q_{01}(t) + \frac{1}{F_1} q_{02}(t) - \frac{k_{11}}{F_1} \sqrt{h_1(t) - h_2(t)} \quad (24)$$

$$\frac{dh_2(t)}{dt} = \frac{k_{11}}{F_2} \sqrt{h_1(t) - h_2(t)} + \frac{1}{F_2} q_{03}(t) - \frac{k_{22}}{F_2} \sqrt{h_2(t)} \quad (25)$$

Stavové veličiny: $h_1(t), h_2(t)$

Vstupné veličiny: $q_{01}(t), q_{02}(t), q_{03}(t)$

Výstupné veličiny: $h_1(t), h_2(t)$

V rovnovážnom stave nedochádza k akumulácii a veličiny sa prestanú meniť v čase.

$$F_1 \frac{dh_1^s}{dt} = q_{01}^s + q_{02}^s - k_{11} \sqrt{h_1^s - h_1^s} \quad (26)$$

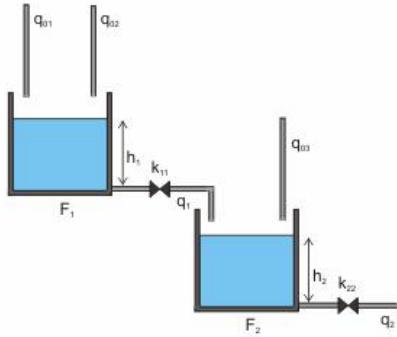
$$F_2 \frac{dh_2^s}{dt} = k_{11} \sqrt{h_1^s - h_2^s} + q_{03}^s - k_{22} \sqrt{h_2^s} \quad (27)$$

Model rovnovážneho stavu:

$$k_{11} \sqrt{h_1^s - h_1^s} = q_{01}^s + q_{02}^s \quad (28)$$

$$k_{22} \sqrt{h_2^s} = k_{11} \sqrt{h_1^s - h_2^s} + q_{03}^s \quad (29)$$

1.1.3 Dva zásobníky kvapaliny bez interakcie



Obr.3 Schéma zásobníkov kvapaliny bez interakcie

Materiálová bilancia:

$$m_{01}(t) + m_{02}(t) = m_1(t) + \frac{dm_1(t)}{dt} \quad (30)$$

$$m_1(t) + m_{03}(t) = m_2(t) + \frac{dm_2(t)}{dt} \quad (31)$$

$$q_{01}(t)r + q_{02}(t)r = q_1(t)r + \frac{d(V_1(t)r)}{dt} \quad (32)$$

$$q_1(t)r + q_{03}(t)r = q_2(t)r + \frac{d(V_2(t)r)}{dt} \quad (33)$$

$$q_{01}(t) + q_{02}(t) = q_1(t) + \frac{dV_1(t)}{dt} \quad (34)$$

$$q_1(t) + q_{03}(t) = q_2(t) + \frac{dV_2(t)}{dt} \quad (35)$$

$$q_1(t) = k_{11} \sqrt{h_1(t)} \quad (36)$$

$$q_2(t) = k_{22} \sqrt{h_2(t)} \quad (37)$$

$$V_1(t) = F_1 h_1(t) \quad (38)$$

$$V_2(t) = F_2 h_2(t) \quad (39)$$

Odvodenie nelineárneho dynamického matematického modelu:

$$q_{01}(t) + q_{02}(t) = k_{11} \sqrt{h_1(t)} + F_1 \frac{dh_1(t)}{dt} \quad (40)$$

$$k_{11} \sqrt{h_1(t)} + q_{03}(t) = k_{22} \sqrt{h_2(t)} + F_2 \frac{dh_2(t)}{dt} \quad (41)$$

$$\frac{dh_1(t)}{dt} = \frac{1}{F_1} q_{01}(t) + \frac{1}{F_1} q_{02}(t) - \frac{k_{11}}{F_1} \sqrt{h_1(t)} \quad (42)$$

$$\frac{dh_2(t)}{dt} = \frac{k_{11}}{F_2} \sqrt{h_1(t)} + \frac{1}{F_2} q_{03}(t) - \frac{k_{22}}{F_2} \sqrt{h_2(t)} \quad (43)$$

Stavové veličiny: $h_1(t), h_2(t)$

Vstupné veličiny: $q_{01}(t), q_{02}(t), q_{03}(t)$

Výstupné veličiny: $h_1(t), h_2(t)$

V rovnovážnom stave nedochádza k akumulácii a veličiny sa prestanú meniť v čase.

$$F_1 \frac{dh_1^s}{dt} = q_{01}^s + q_{02}^s - k_{11} \sqrt{h_1^s} \quad (44)$$

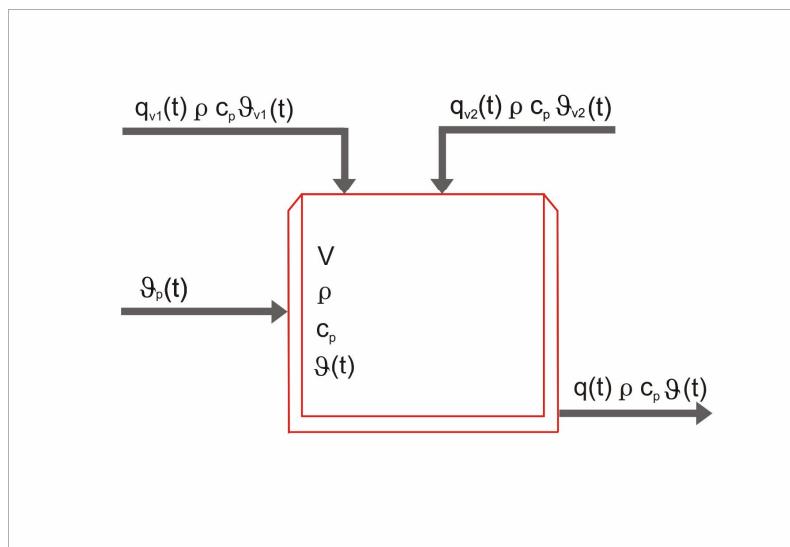
$$F_2 \frac{dh_2^s}{dt} = k_{11} \sqrt{h_1^s} + q_{03}^s - k_{22} \sqrt{h_2^s} \quad (45)$$

Model rovnovážneho stavu:

$$k_{11}\sqrt{h_1^s} = q_{01}^s + q_{02}^s \quad (46)$$

$$k_{22}\sqrt{h_2^s} = k_{11}\sqrt{h_1^s} + q_{03}^s \quad (47)$$

1.1.4 Plášťový výmenník tepla



Obr.4 Schéma výmenníka tepla

Plášťový výmenník tepla patrí medzi procesy s prestupom tepla a vo výrobe je používaný na ohrevanie kvapaliny. Pri odvádzaní matematického modelu uvažujeme entalpickú bilanciu.

Cieľom je vytvoriť matematický model pri nasledujúcich zjednodušujúcich predpokladoch:

- Zanedbávame tepelné kapacity stien výmenníka tepla.
- Zanedbávame straty tepla do okolia (výmenníky sú dokonale izolované).
- Kvapalina vo výmenníkoch je dokonale premiešavaná.
- Prietok ohrievanej kvapaliny sa rovná súčtu vstupujúcich prietokov.
- Objem ohrievanej kvapaliny je konštantný.
- Parametre sú konštantné.

- Tlak v systéme je konštantný.
- Referenčná teplota je nulová.

$J[K]$ - teplota vo výmenníku tepla

$J_{v1}, J_{v2}[K]$ - teploty na vstupe do výmenníka tepla

$J_p[K]$ - teplota vstupnej ohrevnej pary

$\dot{Q}[J.s^{-1}]$ - tok tepla na výstupe z výmenníka tepla

$\dot{Q}_{v1}, \dot{Q}_{v2}[J.s^{-1}]$ - tok tepla na vstupe do výmenníka tepla

$\dot{Q}_p[J.s^{-1}]$ - tok tepla ohrevnej pary

$q_{v1}, q_{v2}[m^3 s^{-1}]$ - vstupné prietoky ohrievanej kvapaliny

$V[m^3]$ - objem ohrievanej kvapaliny

$r[kg.m^{-3}]$ - hustota ohrievanej kvapaliny

$c_p[J.kg^{-1}K^{-1}]$ - špecifická tepelná kapacita ohrievanej kvapaliny

$A[m^2]$ - plocha prestupu tepla

$a[W.m^{-2}K^{-1}]$ - koeficient prestupu tepla

Entalpickebilancia

$$\dot{Q}_{v1}(t) + \dot{Q}_{v2}(t) + \dot{Q}_p(t) = \dot{Q}(t) + \frac{dQ(t)}{dt} \quad (48)$$

$$q_{v1}(t)rc_p J_{v1}(t) + q_{v2}(t)rc_p J_{v2}(t) + aA [J_p(t) - J(t)] = q(t)rc_p J(t) + \frac{d[Vrc_p J(t)]}{dt} \quad (49)$$

$$q_{v1}(t)rc_p J_{v1}(t) + q_{v2}(t)rc_p J_{v2}(t) + aA J_p(t) = J(t)[aA + q(t)rc_p] + \frac{d[Vrc_p J(t)]}{dt} \quad (50)$$

Dynamický matematický model:

$$Vrc_p \frac{dJ(t)}{dt} = -J(t)[aA + q(t)rc_p] + q_{v1}(t)rc_p J_{v1}(t) + q_{v2}(t)rc_p J_{v2}(t) + aA J_p(t) \quad (51)$$

Stavová veličina: $J(t)$

Vstupné veličiny: $q_{v1}(t), q_{v2}(t), J_{v1}(t), J_{v2}(t), J_p(t)$

Výstupná veličina: $J(t)$

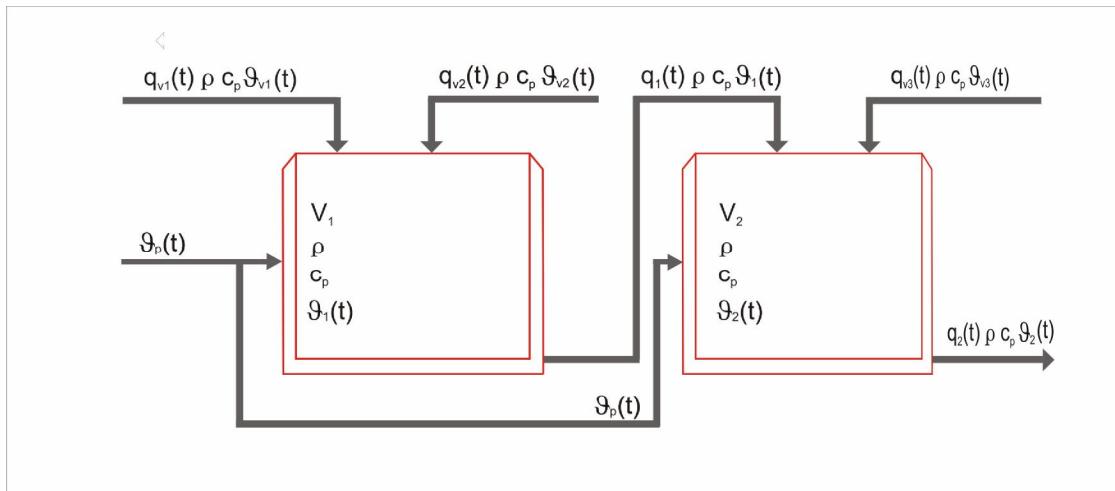
Entalpická bilancia v rovnovážnom stave

$$Vrc_p \frac{dJ^s}{dt} = -J^s [aA + q^s rc_p] + q_{v1}^s rc_p J_{v1}^s + q_{v2}^s rc_p J_{v2}^s + aAJ_p^s \quad (52)$$

Model rovnovážneho stavu

$$J^s = \frac{q_{v1}^s rc_p J_{v1}^s + q_{v2}^s rc_p J_{v2}^s + aAJ_p^s}{[aA + q_1^s rc_p]} \quad (53)$$

1.1.5 Dva plášťové výmenníky tepla



Obr.5 Schéma výmenníkov tepla

Entalpická bilancia

$$\dot{Q}_{v1}(t) + \dot{Q}_{v2}(t) + \dot{Q}_p(t) = \dot{Q}_1(t) + \frac{d\dot{Q}_1(t)}{dt} \quad (54)$$

$$\dot{Q}_1(t) + \dot{Q}_{v3}(t) + \dot{Q}_p(t) = \dot{Q}_2(t) + \frac{dQ_2(t)}{dt} \quad (55)$$

$$q_{vl}(t)rc_p J_{vl}(t) + q_{v2}(t)rc_p J_{v2}(t) + aA_1 [J_p(t) - J_1(t)] = q_1(t)rc_p J_1(t) + \frac{d[V_1 rc_p J_1(t)]}{dt} \quad (56)$$

$$q_1(t)rc_p J_1(t) + q_{v3}(t)rc_p J_{v3}(t) + aA_2 [J_p(t) - J_2(t)] = q_2(t)rc_p J_2(t) + \frac{d[V_2 rc_p J_2(t)]}{dt} \quad (57)$$

$$q_{vl}(t)rc_p J_{vl}(t) + q_{v2}(t)rc_p J_{v2}(t) + aA_1 J_p(t) = J_1(t) [aA_1 + q_1(t)rc_p] + \frac{d[V_1 rc_p J_1(t)]}{dt} \quad (58)$$

$$q_1(t)rc_p J_1(t) + q_{v3}(t)rc_p J_{v3}(t) + aA_2 J_p(t) = J_2(t) [aA_2 + q_2(t)rc_p] + \frac{d[V_2 rc_p J_2(t)]}{dt} \quad (59)$$

Dynamický matematický model:

$$V_1 rc_p \frac{dJ_1(t)}{dt} = -J_1(t) [aA_1 + q_1(t)rc_p] + q_{vl}(t)rc_p J_{vl}(t) + q_{v2}(t)rc_p J_{v2}(t) + aA_1 J_p(t) \quad (60)$$

$$V_2 rc_p \frac{dJ_2(t)}{dt} = -J_2(t) [aA_2 + q_2(t)rc_p] + q_1(t)rc_p J_1(t) + q_{v3}(t)rc_p J_{v3}(t) + aA_2 J_p(t) \quad (61)$$

Stavové veličiny: $J_1(t), J_2(t)$

Vstupné veličiny: $q_{vl}(t), q_{v2}(t), q_{v3}(t), J_{vl}(t), J_{v2}(t), J_{v3}(t), J_p(t)$

Výstupné veličiny: $J_1(t), J_2(t)$

Entalpickebilancia v rovnovážnom stave

$$V_1 rc_p \frac{dJ_1^s}{dt} = -J_1^s [aA_1 + q_1^s rc_p] + q_{vl}^s rc_p J_{vl}^s + q_{v2}^s rc_p J_{v2}^s + aA_1 J_p^s \quad (62)$$

$$V_2 rc_p \frac{dJ_2^s}{dt} = -J_2^s [aA_2 + q_2^s rc_p] + q_1^s rc_p J_1^s + q_{v3}^s rc_p J_{v3}^s + aA_2 J_p^s \quad (63)$$

$$0 = -J_1^s [aA_1 + q_1^s rc_p] + q_{vl}^s rc_p J_{vl}^s + q_{v2}^s rc_p J_{v2}^s + aA_1 J_p^s \quad (64)$$

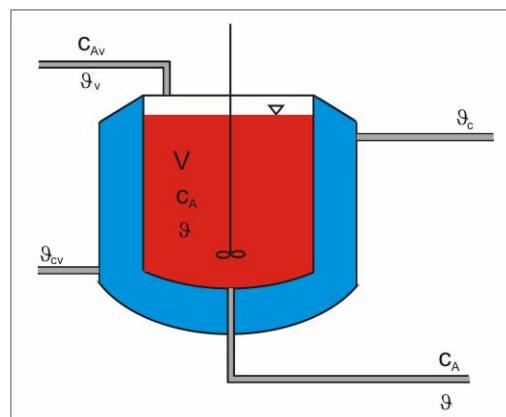
$$0 = -J_2^s [aA_2 + q_2^s rc_p] + q_1^s rc_p J_1^s + q_{v3}^s rc_p J_{v3}^s + aA_2 J_p^s \quad (65)$$

Model rovnovážneho stavu

$$J_1^s = \frac{q_{v1}^s r c_p J_{v1}^s + q_{v2}^s r c_p J_{v2}^s + a A_1 J_p^s}{[a A_1 + q_1^s r c_p]} \quad (66)$$

$$J_2^s = \frac{q_1^s r c_p J_1^s + q_{v3}^s r c_p J_{v3}^s + a A_2 J_p^s}{[a A_2 + q_2^s r c_p]} \quad (67)$$

1.1.6 Prietokový chemický reaktor



Obr.6 Schéma prietokového chemického reaktora

Chemické reaktory spolu s procesmi prestupu látky predstavujú typické výrobné jednotky chemických technológií. Z hľadiska riadenia patria chemické reaktory medzi najťažšie zvládnuteľné procesy. Budeme skúmať prietokový chemický reaktor s dokonalým miešaním reakčnej zmesi, v ktorom prebieha nevratná exotermická chemická reakcia $A \xrightarrow{k} B$. Pri odvádzaní matematického modelu uvažujeme materiálovú bilanciu látky A, entalpickú bilanciu reakčnej zmesi a entalpickú bilanciu chladiaceho média.

Cieľom je vytvoriť matematický model pri nasledujúcich zjednodušujúcich predpokladoch:

- Reagujú 2 zložky: 1 reaktant A a 1 produkt B v 1 reakcii 1. poriadku $A \xrightarrow{k} B$.

$$u_A = -1, u_B = 1$$

- Reakcia je exotermická, reakčná entalpia je záporná. $\Delta_r H < 0$
- Tepelná kapacita stien reaktora je zanedbateľná.
- Straty tepla do okolia sú zanedbateľné.
- Tlak v systéme je konštantný, t.j. zmena entalpie sa rovná zmene tepla.
- Technologické parametre sú konštanté: $r, r_c, c_p, c_{pc}, V, V_c, A$

$J_v(t), J_{cv}(t)[K]$ - teploty reakčnej zmesi a chladiaceho média na vstupe do reaktora

$J(t), J_c(t)[K]$ - teploty reakčnej zmesi a chladiaceho média v reaktore

$c_{vA}, c_{vB} [mol.m^{-3}]$ - koncentrácie reaktantu a produktu na vstupe do reaktora

$c_A(t), c_B(t) [mol.m^{-3}]$ - koncentrácie reaktantu a produktu v reaktore

$n_{Av}(t) [mol]$ - látkové množstvo zložky A na vstupe do reaktora

$n_A(t) [mol]$ - látkové množstvo zložky A v reaktore

$\dot{n}_{Av}(t) [mol.s^{-1}]$ - tok látkového množstva zložky A na vstupe do reaktora

$\dot{n}_A(t) [mol.s^{-1}]$ - tok látkového množstva zložky A v reaktore

$Q_v(t) [J]$ - teplo na vstupe do reaktora

$Q(t) [J]$ - teplo na výstupe z reaktora

$\dot{Q}_v(t) [J.s^{-1}]$ - tok tepla na vstupe do reaktora

$\dot{Q}(t) [J.s^{-1}]$ - tok tepla na výstupe z reaktora

$\dot{Q}_{CHLAD}(t) [J.s^{-1}]$ - tok tepla odovzdaného chladiacemu médiu

$q(t), q_c(t) [m^{-3}s^{-1}]$ - prietoky reakčnej zmesi a chladiaceho média

$V, V_c [m^3]$ - objem reakčnej zmesi a chladiaceho média

$r, r_c [kg.m^{-3}]$ - hustota reakčnej zmesi a chladiaceho média

$c_p, c_{pc} [J.kg^{-1}K^{-1}]$ - špecifická tepelná kapacita reakčnej zmesi a chladiaceho média

$A [m^2]$ - plocha prestupu tepla

$a [W.m^{-2}K^{-1}]$ - koeficient prestupu tepla

$E_a [kJ.mol^{-1}]$ - aktivačná energia

$R [J.K.mol^{-1}]$ - univerzálna plynová konštanta

$$\Delta_r H [kJ \cdot mol^{-1}]$$

- reakčná entalpia

Materiálová bilancia zložky A

$$\dot{n}_{Av}(t) + \left[\frac{dn_A(t)}{dt} \right]_{REAK} = n_A(t) + \frac{dn_A(t)}{dt} \quad (68)$$

Rýchlosť tvorby zložky A chemickou reakciou

$$\left[\frac{dn_A(t)}{dt} \right]_{REAK} = u_A x_V(t) V \quad (69)$$

$$x_V(t) = k(t)c_A(t) = k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ(t)}} c_A(t) \quad (70)$$

$$q(t)c_{vA} + u_A x_V(t)V = q(t)c_A(t) + \frac{d[Vc_A(t)]}{dt} \quad (71)$$

$$q(t)c_{vA} - 1 \cdot k(t)c_A(t)V = q(t)c_A(t) + \frac{d[Vc_A(t)]}{dt} \quad (72)$$

$$q(t)c_{vA} - k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ(t)}} c_A(t)V = q(t)c_A(t) + \frac{d[Vc_A(t)]}{dt} \quad (73)$$

Entalpickebilancia reakčnej zmesi

$$\dot{Q}_v(t) + \left[\frac{dQ(t)}{dt} \right]_{REAK} = \dot{Q}(t) + \dot{Q}_{CHLAD}(t) + \frac{dQ(t)}{dt} \quad (74)$$

$$\left[\frac{dQ(t)}{dt} \right]_{REAK} = x_V(t)V(-\Delta_r H) \quad (75)$$

$$q(t)rc_p J_v(t) + x_V(t)V(-\Delta_r H) = q(t)rc_p J(t) + aA[J(t) - J_c(t)] + \frac{d[Vrc_p J(t)]}{dt} \quad (76)$$

$$q(t)rc_p J_v(t) + k(t)c_A(t)V(-\Delta_r H) = q(t)rc_p J(t) + aA[J(t) - J_c(t)] + \frac{d[Vrc_p J(t)]}{dt} \quad (77)$$

$$q(t)rc_p J_v(t) + k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ(t)}} c_A(t)V(-\Delta_r H) = q(t)rc_p J(t) + aA[J(t) - J_c(t)] + Vrc_p \frac{dJ(t)}{dt} \quad (78)$$

Entalpická bilancia chladiaceho média

$$q_c(t)r_c c_{pc} J_{cv}(t) + aA[J(t) - J_c(t)] = q_c(t)r_c c_{pc} J_c(t) + V_c r_c c_{pc} \frac{dJ_c(t)}{dt} \quad (79)$$

Dynamický matematický model:

$$q(t)c_{vA} - k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ(t)}} c_A(t)V = q(t)c_A(t) + \frac{d[Vc_A(t)]}{dt} \quad (80)$$

$$q(t)rc_p J_v(t) + k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ(t)}} c_A(t)V(-\Delta_r H) = q(t)rc_p J(t) + aA[J(t) - J_c(t)] + Vrc_p \frac{dJ(t)}{dt} \quad (81)$$

$$q_c(t)r_c c_{pc} J_{cv}(t) + aA[J(t) - J_c(t)] = q_c(t)r_c c_{pc} J_c(t) + V_c r_c c_{pc} \frac{dJ_c(t)}{dt} \quad (82)$$

Stavové veličiny: $c_A(t), J(t), J_c(t)$

Vstupné veličiny: $q(t), q_c(t), J_v(t), J_{cv}(t)$

Výstupné veličiny: $c_A(t), J(t), J_c(t)$

Materiálová bilancia zložky A v rovnovážnom stave

$$q^s c_{vA} + u_A x_V^s V = q^s c_A^s + \frac{d[Vc_A^s]}{dt} \quad (83)$$

$$x_V^s = k^s c_A^s \quad (84)$$

$$k^s = k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ^s}} \quad (85)$$

$$q^s c_{vA} - 1.k^s c_A^s V = q^s c_A^s + \frac{d[Vc_A^s]}{dt} \quad (86)$$

$$q^s c_{vA} - 1.k^s c_A^s V = q^s c_A^s \quad (87)$$

Entalpická bilancia reakčnej zmesi v rovnovážnom stave

$$q^s rc_p J_v^s + x_V^s V(-\Delta_r H) = q^s rc_p J^s + aA[J^s - J_c^s] + \frac{d[Vrc_p J^s]}{dt} \quad (88)$$

$$q^s r c_p J_v^s + k^s c_A^s V (-\Delta_r H) = q^s r c_p J^s + aA [J^s - J_c^s] + V r c_p \frac{dJ_c^s}{dt} \quad (89)$$

Entalpicá bilancia chladiaceho média v rovnovážnom stave

$$q_c^s r_c c_{pc} J_{cv}^s + aA [J^s - J_c^s] = q_c^s r_c c_{pc} J_c^s + V_c r_c c_{pc} \frac{dJ_c^s}{dt} \quad (90)$$

$$q_c^s r_c c_{pc} J_{cv}^s + aA [J^s - J_c^s] = q_c^s r_c c_{pc} J_c^s \quad (91)$$

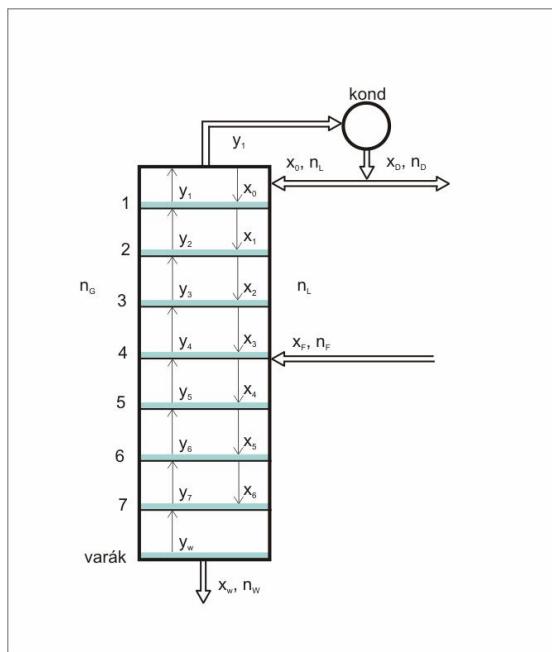
Model rovnovážneho stavu

$$q^s c_{vA} - k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ^s}} c_A^s V = q^s c_A^s \quad (92)$$

$$q^s r c_p J_v^s - k_\infty e^{-\frac{E_a}{RJ^s}} c_A^s V (-\Delta_r H) = q^s r c_p J^s + aA [J^s - J_c^s] \quad (93)$$

$$q_c^s r_c c_{pc} J_{cv}^s + aA [J^s - J_c^s] = q_c^s r_c c_{pc} J_c^s \quad (94)$$

1.1.7 Etážová rektifikačná kolóna



Obr.7 Schéma etážovej rektifikačnej kolóny

Pri odvodení uvažujem kolónu so siedmimi etážami, kde nástrek vstupuje na štvrtnej etáži.

Cieľom je vytvoriť matematický model pri nasledujúcich zjednodušujúcich predpokladoch:

- Delí sa binárna zmes.
- Binárna zmes má ideálne vlastnosti – obe kvapaliny sa miešajú dokonale pozdĺž celej kolóny (varák, etáže, kondenzátor).
- K prestupu látky dochádza len na etáži.
- Para odchádzajúca z etáže je v rovnováhe s kvapalinou na etáži.
- Účinnosť etáži nie je 100%-ná, je definovaná Murphreeho účinnosť etáže.
- Skutočné zloženie kvapalnej fázy sa rovná rovnovážnemu zloženiu kvapalnej fázy, t.j. $x = x^*$
- Skutočné zloženie parnej fázy sa nerovná rovnovážnemu zloženiu kvapalnej fázy, t.j. $y \neq y^*$
- Zádrže parnej fázy na etážach, vo varáku a v kondenzátore sú zanedbateľné.
- Zádrže kvapalnej fázy na etážach Z , vo varáku Z_w a v kondenzátore Z_0 sú konštantné.
- Kvapalina v celej kolóne je zohriata na bod varu.
- Nástrek sa privádza do kolóny ako kvapalina zohriata na bod varu.
- Tok látkového množstva parnej fázy pozdĺž celej kolóny je rovnaký.
- Tok látkového množstva kvapalnej fázy je rovnaký v ochudobňovacej časti kolóny a je rovnaký v obohacovacej časti kolóny.
- K prestupu látky dochádza pri konštantnom tlaku – tlak pozdĺž kolóny je konštantný.
- Relatívna prchavosť zmesi je konštantná.
- Kondenzátor je totálny, t.j. pary odchádzajúce z hlavy kolóny v ňom úplne skondenzujú.
- Mólové výparné teplá oboch delených zložiek sú približne rovnaké.
- Zjavné teplá sú zanedbateľné.
- Straty tepla do okolia sú zanedbateľné, kolóna je izolovaná.

- $n_w(t)[mol]$ - látkové množstvo zvyšku
 $n_F(t)[mol]$ - látkové množstvo nástreku
 $n_G(t)[mol]$ - látkové množstvo parnej fázy
 $n_L(t)[mol]$ - látkové množstvo spätného toku
 $n_D(t)[mol]$ - látkové množstvo destilátu
 $\dot{n}_w(t)[mol.s^{-1}]$ - tok látkového množstva zvyšku
 $\dot{n}_F(t)[mol.s^{-1}]$ - tok látkového množstva nástreku
 $\dot{n}_G(t)[mol.s^{-1}]$ - tok látkového množstva parnej fázy
 $\dot{n}_L(t)[mol.s^{-1}]$ - tok látkového množstva spätného toku
 $\dot{n}_D(t)[mol.s^{-1}]$ - tok látkového množstva destilátu
 $x_w(t)$ - mólový zlomok prchavejšej zložky vo zvyšku
 $x_i(t), i = 1, \dots, 7$ - mólový zlomok prchavejšej zložky v kvapalnej fáze na etážach
 $x_0(t)$ - mólový zlomok prchavejšej zložky v destiláte
 $y_w^*(t)$ - rovnovážne zloženie parnej fázy vo varáku
 $y_i^*(t), i = 1, \dots, 7$ - rovnovážne zloženie parnej fázy na etážach
 $y_w(t)$ - mólový zlomok prchavejšej zložky v parnej fáze vo varáku
 $y_i(t), i = 1, \dots, 7$ - mólový zlomok prchavejšej zložky v parnej fáze na etážach
 h_w - účinnosť varáka
 $h_i, i = 1, \dots, 7$ - účinnosť etáží
 $Z_w[mol]$ - zádrž vo varáku
 $Z_i, i = 1, \dots, 7 [mol]$ - zádrž na etážach
 $Z_0[mol]$ - zádrž v kondenzátore
 a, b, c, d, e - konštanty rovnovážnej krivky

Dynamický matematický model

Varák:

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_w^*(t) = \frac{a + bx_w(t) + cx_w(t)^2}{1 + dx_w(t) + ex_w(t)^2} \quad (95)$$

Rovnica účinnosti

$$y_w(t) = h_w y_w^*(t) \quad (96)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$\left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_7(t) = n_w(t) x_w(t) + n_G(t) y_w(t) + \frac{dZ_w x_w(t)}{dt} \quad (97)$$

Ochudobňovacia časť:

7. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_7^*(t) = \frac{a + bx_7(t) + cx_7(t)^2}{1 + dx_7(t) + ex_7(t)^2} \quad (98)$$

Rovnica účinnosti

$$y_7(t) = h_7 y_7^*(t) + (1 - h_7) y_w(t) \quad (99)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$\left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_6(t) + n_G(t) y_w(t) = \left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_7(t) + n_G(t) y_7(t) + \frac{dZ_7 x_7(t)}{dt} \quad (100)$$

6. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_6^*(t) = \frac{a + bx_6(t) + cx_6(t)^2}{1 + dx_6(t) + ex_6(t)^2} \quad (101)$$

Rovnica účinnosti

$$y_6(t) = h_6 y_6^*(t) + (1 - h_6) y_7(t) \quad (102)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$\left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_5(t) + n_G(t) y_7(t) = \left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_6(t) + n_G(t) y_6(t) + \frac{dZ_6 x_6(t)}{dt} \quad (103)$$

5. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_5^*(t) = \frac{a + bx_5(t) + cx_5(t)^2}{1 + dx_5(t) + ex_5(t)^2} \quad (104)$$

Rovnica účinnosti

$$y_5(t) = h_5 y_5^*(t) + (1 - h_5) y_6(t) \quad (105)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$\left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_4(t) + n_G(t) y_6(t) = \left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_5(t) + n_G(t) y_5(t) + \frac{dZ_5 x_5(t)}{dt} \quad (106)$$

Nástreková etáž:

4. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_4^*(t) = \frac{a + bx_4(t) + cx_4(t)^2}{1 + dx_4(t) + ex_4(t)^2} \quad (107)$$

Rovnica účinnosti

$$y_4(t) = h_4 y_4^*(t) + (1 - h_4) y_5(t) \quad (108)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_F(t) x_F(t) + n_L(t) x_3(t) + n_G(t) y_5(t) = \left(n_L(t) + n_F(t) \right) x_4(t) + n_G(t) y_4(t) + \frac{dZ_4 x_4(t)}{dt} \quad (109)$$

Obohacovacia časť:

3. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_3^*(t) = \frac{a + bx_3(t) + cx_3(t)^2}{1 + dx_3(t) + ex_3(t)^2} \quad (110)$$

Rovnica účinnosti

$$y_3(t) = h_3 y_3^*(t) + (1 - h_3) y_4(t) \quad (111)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_L(t)x_2(t) + n_G(t)y_4(t) = n_L(t)x_3(t) + n_G(t)y_3(t) + \frac{dZ_3x_3(t)}{dt} \quad (112)$$

2. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_2^*(t) = \frac{a + bx_2(t) + cx_2(t)^2}{1 + dx_2(t) + ex_2(t)^2} \quad (113)$$

Rovnica účinnosti

$$y_2(t) = h_2 y_2^*(t) + (1 - h_2) y_3(t) \quad (114)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_L(t)x_1(t) + n_G(t)y_3(t) = n_L(t)x_2(t) + n_G(t)y_2(t) + \frac{dZ_2x_2(t)}{dt} \quad (115)$$

1. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_1^*(t) = \frac{a + bx_1(t) + cx_1(t)^2}{1 + dx_1(t) + ex_1(t)^2} \quad (116)$$

Rovnica účinnosti

$$y_1(t) = h_1 y_1^*(t) + (1 - h_1) y_2(t) \quad (117)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_L(t)x_0(t) + n_G(t)y_2(t) = n_L(t)x_1(t) + n_G(t)y_1(t) + \frac{dZ_1x_1(t)}{dt} \quad (118)$$

Kondenzátor:

materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_G(t)y_1(t) = n_L(t)x_0(t) + n_D(t)x_0(t) + \frac{dZ_0x_0(t)}{dt} \quad (119)$$

Stavové veličiny: $x_w(t), x_7(t), x_6(t), x_5(t), x_4(t), x_3(t), x_2(t), x_1(t), x_0(t)$

Vstupné veličiny: $n_G(t), n_L(t), n_D(t), n_W(t), n_F(t), x_F(t)$

Výstupné veličiny: $x_w(t), x_D(t) = x_0(t)$

Matematický model rovnovážneho stavu

Varák:

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_w^* = \frac{a + bx_w^s + cx_w^{s^2}}{1 + dx_w^s + ex_w^{s^2}} \quad (120)$$

Rovnica účinnosti

$$y_w^s = h_w y_w^* \quad (121)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$(n_L^s + n_F^s)x_7^s = n_G^s y_w^s + n_W^s x_w^s \quad (122)$$

Ochudobňovacia časť:

7. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_7^* = \frac{a + bx_7^s + cx_7^{s^2}}{1 + dx_7^s + ex_7^{s^2}} \quad (123)$$

Rovnica účinnosti

$$y_7^s = h_7 y_7^* + (1 - h_7) y_w^s \quad (124)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$(n_L^s + n_F^s)x_6^s + n_G^s y_w^s = (n_L^s + n_F^s)x_7^s + n_G^s y_7^s \quad (125)$$

6. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_6^* = \frac{a + bx_6^s + cx_6^{s^2}}{1 + dx_6^s + ex_6^{s^2}} \quad (126)$$

Rovnica účinnosti

$$y_6^s = h_6 y_6^* + (1 - h_6) y_7^s \quad (127)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$(n_L^s + n_F^s) x_5^s + n_G^s y_7^s = (n_L^s + n_F^s) x_6^s + n_G^s y_6^s \quad (128)$$

5. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_5^* = \frac{a + bx_5^s + cx_5^{s^2}}{1 + dx_5^s + ex_5^{s^2}} \quad (129)$$

Rovnica účinnosti

$$y_5^s = h_5 y_5^* + (1 - h_5) y_6^s \quad (130)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$(n_L^s + n_F^s) x_4^s + n_G^s y_6^s = (n_L^s + n_F^s) x_5^s + n_G^s y_5^s \quad (131)$$

Nástreková etáž:

4. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_4^* = \frac{a + bx_4^s + cx_4^{s^2}}{1 + dx_4^s + ex_4^{s^2}} \quad (132)$$

Rovnica účinnosti

$$y_4^s = h_4 y_4^* + (1 - h_4) y_5^s \quad (133)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_F^s x_F^s + n_L^s x_3^s + n_G^s y_5^s = (n_L^s + n_F^s) x_4^s + n_G^s y_4^s \quad (134)$$

Obohacovacia časť:

3. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_3^* = \frac{a + bx_3^s + cx_3^{s^2}}{1 + dx_3^s + ex_3^{s^2}} \quad (135)$$

Rovnica účinnosti

$$y_3^s = h_3 y_3^* + (1-h_3) y_4^s \quad (136)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_L^s x_2^s + n_G^s y_4^s = n_L^s x_3^s + n_G^s y_3^s \quad (137)$$

2. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_2^* = \frac{a + bx_2^s + cx_2^{s^2}}{1 + dx_2^s + ex_2^{s^2}} \quad (138)$$

Rovnica účinnosti

$$y_2^s = h_2 y_2^* + (1-h_2) y_3^s \quad (139)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_L^s x_1^s + n_G^s y_3^s = n_L^s x_2^s + n_G^s y_2^s \quad (140)$$

1. etáž

Rovnica rovnovážnej krivky

$$y_1^* = \frac{a + bx_1^s + cx_1^{s^2}}{1 + dx_1^s + ex_1^{s^2}} \quad (141)$$

Rovnica účinnosti

$$y_1^s = h_1 y_1^* + (1-h_1) y_2^s \quad (142)$$

Materiálová bilancia prchavejšej zložky

$$n_L^s x_0^s + n_G^s y_2^s = n_L^s x_1^s + n_G^s y_1^s \quad (143)$$

Kondenzátor:

$$n_G^s y_1^s = n_L^s x_0^s + n_D^s x_D^s \quad (144)$$

Bilancia kolóny:

$$n_F^s = n_W^s + n_D^s \quad (145)$$

Bilancia kondenzátora:

$$n_G^s = n_L^s + n_D^s \quad (146)$$

Bilancia zložky pre kolónu:

$$n_F^s x_F^s = n_W^s x_W^s + n_D^s x_D^s \quad (147)$$

Bilancia zložky pre kondenzátor:

$$n_G^s y_1^s = n_L^s x_0^s + n_D^s x_D^s \quad (148)$$

1.2 Rungeho-Kuttova metóda pre numerické riešenie

diferenciálnych rovníc [4]

Rungeho-Kuttova metóda patrí medzi najpoužívanejšie metódy pri riešení obyčajnej diferenciálnej rovnice. Ja som použil metódu Runge-Kutta štvrtého rádu. Prírastková funkcia sa vypočíta na základe nasledujúcich vzťahov.

$$k_1 = h.f(x_n, y_n) \quad (149)$$

$$k_2 = h.f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \quad (150)$$

$$k_3 = h.f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) \quad (151)$$

$$k_4 = h.f(x_n + h, y_n + k_3) \quad (152)$$

$$\Delta y_n = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (153)$$

$$y_{n+1} = y_n + \Delta y_n \quad (154)$$

kde f je pravá strana diferenciálnej rovnice v tvare $\frac{dy_n}{dx_n} = f(x_n, y_n)$, a h je krok riešenia.

Ako príklad použitia tejto metódy v php kóde, uvádzam implementáciu pre zásobník kvapaliny.

```

$x_old = $x;
$f = model($x,$F,$k11,$q01,$q02);
$k1 = $dt*$f;
$x = $x_old+0.5*$k1;
$f = model($x,$F,$k11,$q01,$q02);
$k2 = $dt*$f;
$x = $x_old+0.5*$k2;
$f = model($x,$F,$k11,$q01,$q02);
$k3 = $dt*$f;
$x = $x_old+$k3;
$f = model($x,$F,$k11,$q01,$q02);
$k4 = $dt*$f;
$x = $x_old + ($k1+2*($k2+$k3)+$k4)/6;

```

2 Praktická časť

V tejto časti uvediem opis skriptu na vytváranie formulárových prvkov a opis php skriptu na načítanie, spracovanie, preberanie a grafické zobrazenie údajov. Stránky sa nachádzajú na adrese <http://www.kirp.chtf.stuba.sk/~bakosova/Dzurov>.

2.1 Formulárové prvky

[5]

Údaje pre výpočet hodnôt sledovaných veličín sa na stránke zadávajú cez formulárové prvky. Základný tag pri vytváraní formulárov je tag *form*, ktorý inicializuje formulár a obsahuje tagy na zadávanie údajov. Atribúty tagu *form* sú *action* a *method*. *action* určuje, kde sa informácie z formulára spracujú, a *method* určuje metódu spracovania.

Príklad použitia:

```
<form action="zasobnik.php" method="post">
```

Tag *input* umožňuje zadávať hodnoty, ktoré sú spracované na stránke, výber medzi viacerými možnosťami a vytváranie tlačidiel na spúštanie akcií.

Príklady použitia:

```
<input type="text" name="F1" />
```

Tento tag vytvorí pole na zadávanie údaju.

```
<input type="radio" name="typ" value="interakcia" >
```

Tento tag vytvorí políčko výberu.

```
<input type="submit" value="simulácia"/>
```

Tento tag vytvorí tlačidlo na spracovanie zadaných údajov.

```
<input type="button" value="uložiť údaje vo formáte .xls"
onClick="window.open('excel_zasobnik.php');" />
```

Tento tag vytvorí tlačidlo na otvorenie súboru *excel.php*.

```
<input type="button" value="vykresliť graf" onClick="window.open('volanie_zasobnik.html');"  
/>
```

Tento tag vytvorí tlačidlo na otvorenie súboru *volanie_zasobnik.html*.

Príklad kompletného formuláru, zásobník kvapaliny:

```
<form action="zasobnik.php" method="post">  
  
<span>q<sub>01</sub>:</span><br/><input type="text" name="q01"/>  
<br/>  
  
<span>q<sub>02</sub>:</span><br/><input type="text" name="q02"/>  
<br/>  
  
<span>F:</span><br/><input type="text" name="F"/>  
<br/>  
  
<span>krok:</span><br/><input type="text" name="dt"/>  
<br/>  
  
<span>k<sub>11</sub>:</span><br/><input type="text" name="k11"/>  
<br/>  
  
<span>čas simulácie:</span><br/><input type="text" name="t_end"/>  
  
<p>  
<span>Zadajte veľkosti vstupných prúdov</span>  
</p>  
  
<input type="radio" name="v_v" value="u1"  
checked><span>q<sub>01</sub>:</span><br/><input type="text" name="u1"/>
```

```

<br/>
<input type="radio" name="v_v" value="u2"><span>q<sub>02</sub>:</span><br/><input
type="text" name="u2" />
<br/>

<input type="submit" value="simulácia"/>
<br/>
</form>

<form>
<input type="button" value="uložiť údaje vo formáte .xls"
onClick="window.open('excel_zasobnik.php');" />
</form>

<form>
<input type="button" value="vykresliť graf" onClick="window.open('volanie_zasobnik.html');"
/></form>

```

Po otvorení webstránky *zasobniky.php* prehliadačom sa zjaví nasledujúci formulár.

S interakciou
 Bez interakcie

q01:

q02:

q03:

F1:

F2:

krok:

k11:

k22:

čas simulácie:

Zadajte veľkosti vstupných prúdov

q01:

q02:

q03:

Obr. 8 Ukážka výsledného formulára

2.2 Skript PHP

[6]

2.2.1 Spracovanie zadávaných údajov

Údaje, zadávané cez formulárové prvky sa v súbore php priradujú k premenným.

Príklad:

`$F1 = $_POST["F1"];`

Tento príkaz priradí premennej $\$F1$ hodnotu, ktorú sme zadali do prvku formuláru, kde atribút *name* nadobúda hodnotu F1.

Stránky umožňujú výber vstupnej veličiny pomocou formulárového prvku *input* typu *radio*, označením príslušnej vstupnej veličiny a zadaním jej hodnoty do formuláru.

```
<input type="radio" name="v_v" value="u1"
checked><span>q<sub>01</sub>:</span><br/><input type="text" name="u1" />
```

Hodnota atribútu *name* označuje meno skupiny tlačidiel *radio*, ktorá sa priraduje do premennej $\$v_v$.

```
$v_v=$_POST["v_v"];
```

Po poslaní hodnôt z formulára na spracovanie sa priradujú premenným ich hodnoty. Funkcie, ktoré počítajú prírastok stavových veličín, využívajú hodnoty na výpočet ustáleného stavu na začiatku a novú, vstupnú veličinu. Premenným, reprezentujúcim vstupné veličiny, sa na základe zadaných údajov priradujú ich hodnoty. Vstupná veličina zvolená vo formulári sa priradí zodpovedajúcej premennej, pričom ostatné premenné nadobúdajú hodnoty, ktoré sú použité pre výpočet začiatočného stavu.

```
if($v_v=="u1")
{
    $u1=$_POST["u1"];
    $u2=$_POST["q02"];
}

elseif($v_v=="u2")
{
    $u1=$_POST["q01"];
    $u2=$_POST["u2"];
}
```

2.2.2 Výpočet a zobrazovanie hodnôt stavových veličín

V tejto sekcii uvediem postup výpočtu hodnôt na príklade zásobníka kvapaliny.

Stavové veličiny majú začiatočnú hodnotu vypočítanú na základe modelu rovnovážneho stavu.

Výpočet ustáleného stavu na začiatku:

```
$x = pow(((q01+$q02)/$k11),2);
```

Premenná $\$xt$ je zaokrúhlená hodnota premennej $\$x$ a táto premenná sa zobrazí vo výslednej tabuľke.

```
$xt=round($x,4);
```

Premenná $\$i$ predstavuje index polí $\$cas$ a $\$xarray$, do ktorých sa priradí nová hodnota v každom kroku.

```
$i=0;
```

Hodnota stavu na začiatku sa zapíše do vygenerovanej tabuľky. Na začiatku je čas vždy nulový.

```
$t = 0;
```

```
echo "<tr><td>".$t."</td><td>".$xt."</td></tr>\n";
```

Čas simulácie a veľkosť integračného kroku sa získávajú z formulára.

```
$t_end = $_POST["t_end"];  
$dt = $_POST["dt"];
```

Pre výpočet hodnôt v časoch t až t_end je použitý cyklus *do while*.

```
do
```

```
{
```

Hodnota $\$t$ sa v každom kroku priraďuje do poľa, premennej $\$cas$.

```
$cas[$i] = $t;  
$t += $dt;
```

Hodnota $\$t$ sa zvyšuje v každom kroku o hodnotu integračného kroku. Hodnota $\$x$ sa v každom kroku priraduje do poľa, premennej $\$xarray$.

```
$xarray[$i] = $xt;
```

```
$x_old = $x;
```

Premenná $\$x_{old}$ nadobúda hodnotu predošlého $\$x$. Nová hodnota premennej $\$x$ sa vypočíta numericky, Rungeho-Kuttovou metódou 4. rádu. Táto hodnota sa následne zaokrúhli na 4 desatinné čísla.

```
$f = model($x,$F,$k11,$u1,$u2);  
$k1 = $dt * $f;
```

```
$x = $x_old + 0.5 * $k1;  
$f = model($x,$F,$k11,$u1,$u2);  
$k2 = $dt * $f;
```

```
$x = $x_old + 0.5 * $k2;  
$f = model($x,$F,$k11,$u1,$u2);  
$k3 = $dt * $f;
```

```
$x = $x_old + $k3;  
$f = model($x,$F,$k11,$u1,$u2);  
$k4 = $dt * $f;
```

```
$x = $x_old + ($k1 + 2 * ($k2 + $k3) + $k4) / 6;  
$xt = round($x, 4);  
$i = $i + 1;
```

Na konci cyklu sa vygeneruje nový riadok tabuľky s aktuálnymi hodnotami času a stavovej veličiny.

```
echo "<tr><td>".$t."</td><td>".$xt."</td></tr>\\n";  
}  
while($t <= $t_end);
```

Cyklus sa vykonáva až kým čas nedosiahne čas simulácie.

Prírastok stavovej veličiny sa vypočíta vo funkcií. Pre prípad zásobníka kvapaliny je to funkcia *model*

```
function model($x,$F,$k11,$u1,$u2)  
{  
    $dh = ($u1/$F)+($u2/$F) - ($k11*sqrt($x))/$F;  
    return $dh;  
}
```

2.2.3 Ukladanie výsledkov do formátu .xls

Po kliknutí na tlačítko  uložit údaje vo formáte .xls sa otvorí okno preberania súboru.

Tlačidlo je vytvorené prvkom *input* typu *button*.

```
<input type="button" value="uložiť údaje vo formáte .xls"  
onClick="window.open('excel.php');"
```

Súbor na preberanie je vytvorený na stránke *excel_zasobnik.php*

```
<?php  
session_start();
```

Príkaz *session_start()*; umožňuje prácu so session premennými, ktoré sú definované

v súbore *zásobnik.php*.

```
include_once "excel_class.php";
```

Príkaz include_once umožňuje prácu s funkciami triedy *excel_class*, ktoré generujú výsledný súbor.

```
$excel = new ExcelGen("nazov harka");
$x=$_SESSION['x'];
$cas=$_SESSION['t'];
```

Priradenie session premenných.

```
$size = count($x);
for ($i = 0;$i < $size;+$i) {
$excel->WriteText($i,0, $cas[$i]);
$excel->WriteText($i,1, $x[$i]);
```

WriteText zapisuje do prvých dvoch stĺpcov i-tého riadku hodnoty času a stavovej veličiny.

```
}
```

```
$excel->SendFile();
ob_end_flush();
```

Príkazy na poslanie výsledného súboru na prebranie.

```
?>
```

2.2.4 Vykresľovanie grafu

Vytváranie grafu uvediem na príklade dvoch zásobníkov kvapaliny:

```
<?php  
session_start();
```

Načítanie údajov potrebných na vykreslenie grafu.

```
$udaje1=$_SESSION['x1'];  
$udaje2=$_SESSION['x2'];  
$cas_end=$_SESSION['t_end'];  
$dcas=$_SESSION['dt'];
```

Definovanie rozmerov a pomocných premenných.

```
$sirka_o = 840;  
$vyska_o = 640;  
$sirka = 800;  
$vyska = 600;
```

```
$odstup_od_okraja = 20;  
$odstup_od_spodu = 20;
```

Vytvorenie obrázku.

```
$im = imagecreate ($sirka_o,$vyska_o);
```

Alokácia farieb.

```
$seda = imagecolorallocate ($im,0xcc,0xcc,0xcc);  
$bledo_seda = imagecolorallocate ($im,0xee,0xee,0xee);  
$tmavo_seda = imagecolorallocate ($im,0x7f,0x7f,0x7f);  
$biela = imagecolorallocate ($im,0xff,0xff,0xff);  
$cervena = imagecolorallocate ($im, 255, 0, 0);  
$modra = imagecolorallocate ($im, 0, 0, 205);  
$cierna = imagecolorallocate ($im, 0, 0, 0);
```

Vykreslenie obdĺžnika do obrázku.

```
imagefilledrectangle($im,0,0,$sirka_o,$vyska_o,$bledo_seda);
```

Vykreslenie osí x a y.

```
imageline ($im, $odstup_od_okraja, $odstup_od_spodu,  
$odstup_od_okraja, $vyska_o-$odstup_od_spodu, $tmavo_seda);  
imageline ($im, $odstup_od_okraja, $vyska_o-$odstup_od_spodu,  
$sirka_o-$odstup_od_okraja, $vyska_o-$odstup_od_spodu, $tmavo_seda);
```

Definovanie veľkosti dielika na osi x.

```
$pocet=$cas_end/$dcas;  
$dielik_x = ($sirka)/$pocet;
```

```
$min_y1= $udaje1[0];  
$max_y1= $udaje1[0];  
$min_y2= $udaje2[0];  
$max_y2= $udaje2[0];
```

Vyhľadanie maximálnej a minimálnej hodnoty zo spracovaných údajov.

```
for ($i = 1;$i < $pocet;+$i) {  
  
if ($udaje1[$i] < $min_y1) {  
  
$min_y1 = $udaje1[$i];  
  
}  
else if ($udaje1[$i] > $max_y1) {
```

```

$max_y1 = $udaje1[$i];

}

}

for ($i = 1;$i < $pocet;+$i) {

if ($udaje2[$i] < $min_y2) {

$min_y2 = $udaje2[$i];

}

else if ($udaje2[$i] > $max_y2) {

$max_y2 = $udaje2[$i];

}

}

if ($max_y1>$max_y2)

{

$max_y=$max_y1;

}

else

{

$max_y=$max_y2;

}

if ($min_y1<$min_y2)

{

$min_y=$min_y1;

}

else

{

```

```

$min_y=$min_y2;
}

```

Definovanie veľkosti dielika na osi y.

```

$vyska1 = $vyska_o-2*$odstup_od_spodu;
$dielik_y = ($vyska1)/($max_y - $min_y);

```

Vykresľovanie krivky t, x_1, x_2 , kde x_1 a x_2 predstavujú sledované premenné, uložené v premenných *udaje1* a *udaje2*.

```
for ($i = 1;$i < $pocet;+$i) {
```

```

$zac_x = $odstup_od_okraja+($i-1)*$dielik_x;
$kon_x = $odstup_od_okraja+$i*$dielik_x;

```

```

$zac_y1 = $vyska1-($udaje1[$i]-$min_y)*$dielik_y+$odstup_od_spodu;
$kon_y1 = $vyska1-($udaje1[$i]-$min_y)*$dielik_y+$odstup_od_spodu;
imageline ($im, $zac_x, $zac_y1, $kon_x, $kon_y1, $cervena);

```

```

$zac_y2 = $vyska1-($udaje2[$i]-$min_y)*$dielik_y+$odstup_od_spodu;
$kon_y2 = $vyska1-($udaje2[$i]-$min_y)*$dielik_y+$odstup_od_spodu;
imageline ($im, $zac_x, $zac_y2, $kon_x, $kon_y2, $modra);

```

```
}
```

Vytváranie popisu osi x.

```

$i=0;
$m=0;
$p=0;
do
{

```

```

imagestring($im, 1, $m+$odstup_od_okraja, $vyska_o-$odstup_od_spodu+6, $p,
$tmaovo_seda);
$m=$m+$sirka/10;
$p=$p+$cas_end/10;
$i=$i+1;
imageline ($im, $m+$odstup_od_okraja, $vyska_o-$odstup_od_spodu,
$m+$odstup_od_okraja, $vyska_o-$odstup_od_spodu+2, $tmaovo_seda);
}

```

while (\$i <= 10);

```

$maxy=round($max_y,2);
$miny=round($min_y,2);

```

```

$i=0;
$m=0;
$p=$miny;

```

Vytváranie popisu osi y.

```

do
{
imagestring($im, 1,2, $vyska_o-$odstup_od_spodu-$m, $p, $tmaovo_seda);
$m=$m+$vyska/10;
$p=$p+($maxy-$miny)/10;
$p=round($p,2);
$i=$i+1;
imageline ($im, $odstup_od_okraja, $vyska_o-$odstup_od_spodu-$m,
$odstup_od_okraja-2, $vyska_o-$odstup_od_spodu-$m, $tmaovo_seda);
}

```

while (\$i <= 10);

Označenie osí.

```
imagestring ($im,3,($sirka_o-2*$odstup_od_okraja),$vyska_o-$odstup_od_spodu+5,$cierna);  
imagestring ($im,3,8,$odstup_od_spodu+10,$cierna);
```

Generovanie obrázka

```
imagepng($im);
```

```
?>
```

Zobrazenie grafu sa koná na samostanej stránke pomocou tagu

```

```

Na nasledujúcom obrázku sú údaje zadané pre simuláciu zásobníkov s interakciou. Po simulácii sa získajú údaje potrebné pre vykreslenie grafu.

S interakciou
 Bez interakcie

q01:

q02:

q03:

F1:

F2:

k11:

k22:

krok:

čas simulácie:

Zadajte veľkosti vstupných prúdov

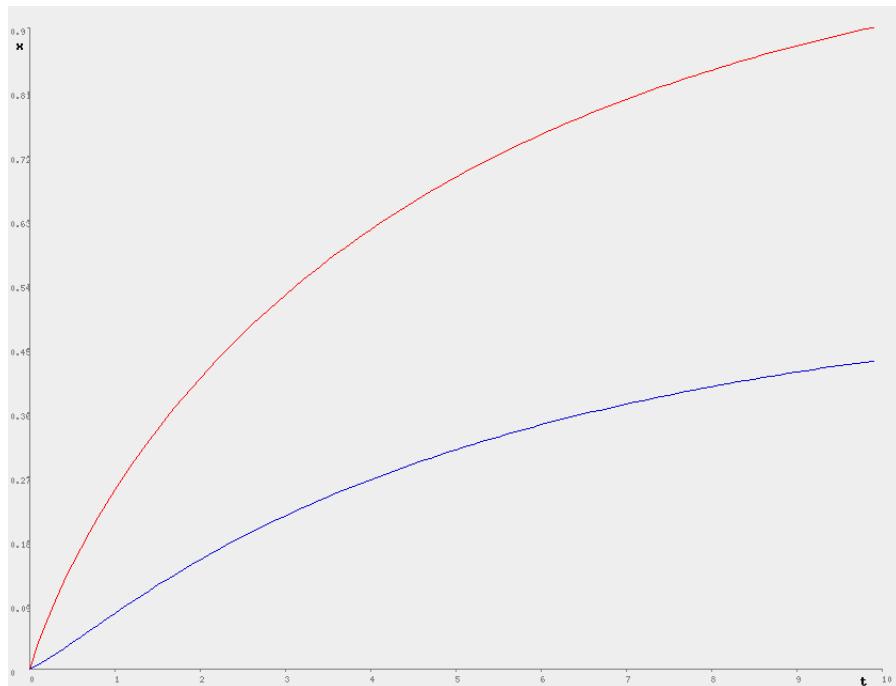
q01:

q02:

q03:

Obr. 9 Formulár so zadanými údajmi, potrebnými pre vykreslenie grafu

Výsledný graf



Obr. 10 Ukážka grafu zobrazujúceho priebeh výšok hladín pri simulácii odozvy zásobníkov na skokovú zmenu vstupného prúdu

2.3 Používanie webstránok

Stránky pre simuláciu technologických procesov uvedených v teoretickej časti sa nachádzajú na adrese <http://www.kirp.chtf.stuba.sk/~bakosova/Dzurov>. Pre vykonanie úspešnej simulácie je potrebné vyplniť všetky formulárové okná na zadávanie technologických parametrov a začiatočných podmienok, a jedno formulárové okno pre nový vstup do systému. Pri etážovej rektifikačnej kolóne je potrebné zadat aj začiatočný odhad zloženia zvyšku.

Pre iteračný krok je vhodné zadať číslo z intervalu <0.1,1>, pre dĺžku simulácie sa odporúčaná hodnota mení na základe dynamiky procesu. Keď sme nedosiahli požadovanú presnosť, zopakujeme zadanie údajov z väčšou dĺžkou simulácie.

Pri zadávaní čísel s exponenciálnym faktorom, napr. 1.5×10^{11} , zadávame číslo vo formáte 1.5E11.

3 Experimentálna časť

3.1 Porovnanie výsledkov s výsledkami toolboxu Modeltool

Pomocou internetového modulu som simuloval odozvy procesov na skokové zmeny zvolených vstupných veličín. Získané numerické údaje sú uvedené v tabuľkách a zároveň sú z nich vykreslené grafické priebehy tak, ako sa zjavujú na webstránke. Výsledky som porovnal s výsledkami získanými pomocou toolboxu Modeltool [7], ktorý bol vytvorený na simuláciu dynamických vlastností rôznych chemickotechnologických procesov v prostredí MATLAB-Simulink.

Táto časť slúži ako manuál na používanie internetového modulu. Stránky sa nachádzajú na stránke <http://www.kirp.ctf.stuba.sk/~bakosova/Dzurov>. Stránky pre jednotlivé procesy sa nachádzajú v podsekciách adresára. Pre ich zobrazenie je potrebné otvoriť php súbory s menom zvoleného procesu, napr.:
<http://www.kirp.ctf.stuba.sk/~bakosova/Dzurov/zasobnik/zasobnik.php>.

3.1.1 Zásobník kvapaliny

Pomocou internetového modulu som simuloval odozvu zásobníka (Obr. 1) na skokovú zmenu objemového prietoku q_{01} vstupného prúdu.

Parametre zadané do formulára webstránky

q01:
0

q02:
0

F:
2.4

k11:
1.4

krok:
0.5

čas simulácie:
10

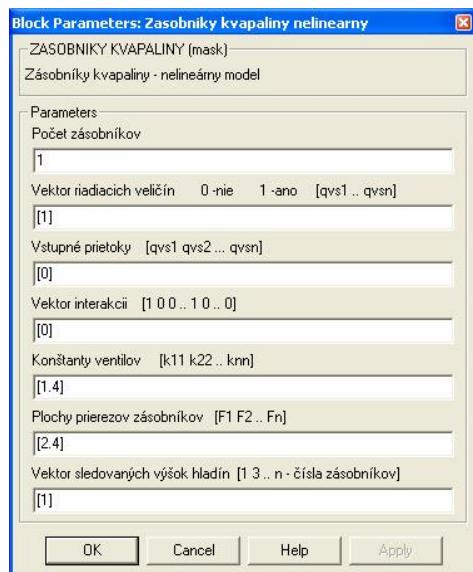
Zvoľte vstupnú veličinu a zadajte jej hodnotu.

q01:
1

q02:

Obr. 11 Vyplnený formulár pre zásobník kvapaliny

Nastavenie bloku Zásobníky kvapaliny, nelineárny model v Modeltool



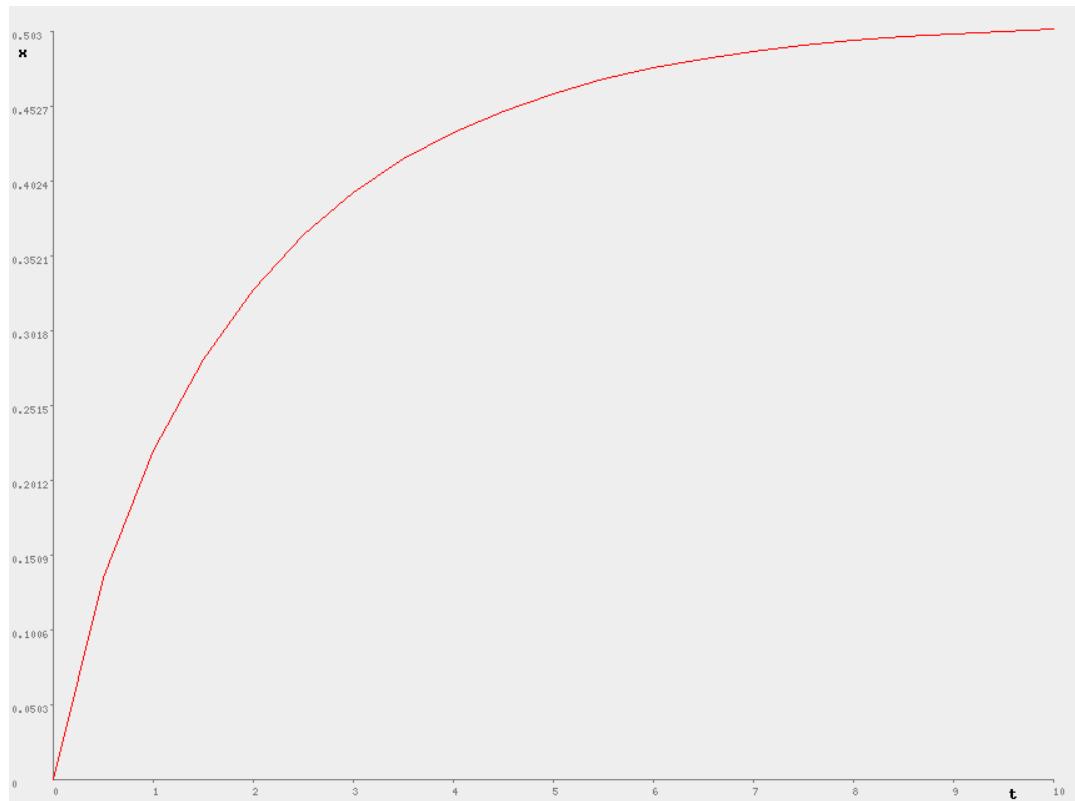
Obr. 12 Nastavenie bloku *Zásobníky kvapaliny, nelineárny model* v Modeltool

Porovnanie výsledkov

Tab. 1 Porovnanie výsledkov – zásobník kvapaliny

t	h_{form}	h_{Matlab}
0	0	0
0.5	0.1356	0.1356
1	0.2203	0.2204
1.5	0.2821	0.2821
2	0.329	0.3290
2.5	0.3653	0.3653
3	0.3938	0.3938
3.5	0.4164	0.4164
4	0.4344	0.4345
4.5	0.4489	0.4489
5	0.4605	0.4605
5.5	0.4699	0.4699
6	0.4775	0.4774
6.5	0.4836	0.4836
7	0.4886	0.4885
7.5	0.4926	0.4926
8	0.4959	0.4959
8.5	0.4986	0.4985
9	0.5008	0.5007
9.5	0.5025	0.5025
10	0.5039	0.5039

Výsledný graf



Obr. 13 Priebeh výšky hladiny v zásobníku kvapaliny

3.1.2 Dva zásobníky kvapaliny s interakciou

Pomocou internetového modulu som simuloval odozvu zásobníkov s interakciou (Obr. 2) na skokovú zmenu objemového prietoku q_{01} vstupného prúdu.

Parametre zadané do formulára webstránky

S interakciou
 Bez interakcie

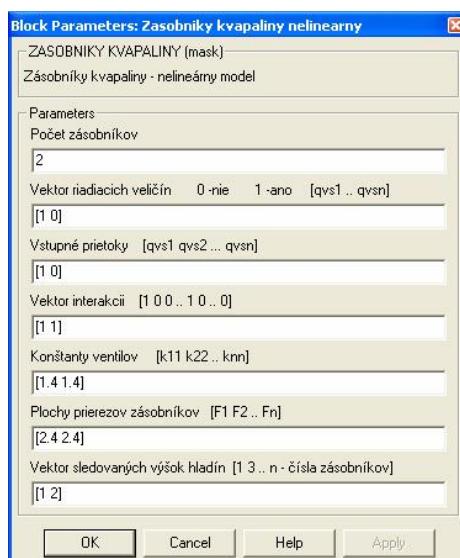
q₀₁:
q₀₂:
q₀₃:
F₁:
F₂:
K₁₁:
K₂₂:
krok:
čas simulácie:

Zadajte veľkosti vstupných prúdov

q₀₁:
 q₀₂:
 q₀₃:

Obr. 14 Vyplnený formulár pre zásobníky kvapaliny s interakciou

Nastavenie bloku *Zásobníky kvapaliny, nelineárny model* v Modeltool



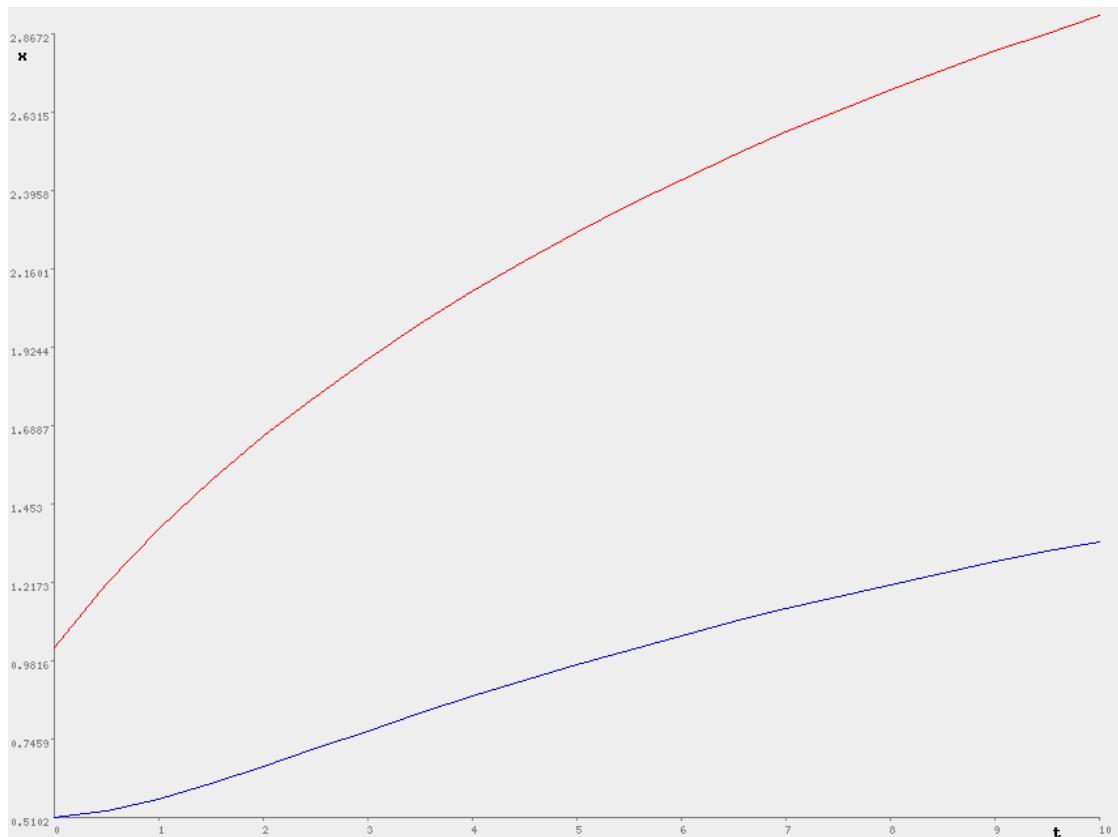
Obr. 15 Nastavenie bloku *Zásobníky kvapaliny, nelineárny model* v Modeltool

Porovnanie výsledkov

Tab. 2 Porovnanie výsledkov – zásobníky kvapaliny s interakciou

t	h_{1,form}	h_{2,form}	h_{1,Matlab}	h_{2,Matlab}
0	1.0204	0.5102	1.0204	0.5102
0.5	1.2109	0.5269	1.2109	0.5269
1	1.375	0.5643	1.3750	0.5643
1.5	1.5209	0.6115	1.5209	0.6115
2	1.6532	0.6631	1.6532	0.6631
2.5	1.7746	0.7162	1.7746	0.7162
3	1.8869	0.7692	1.8869	0.7692
3.5	1.9915	0.8211	1.9915	0.8211
4	2.0894	0.8716	2.0894	0.8716
4.5	2.1813	0.9202	2.1813	0.9202
5	2.2679	0.967	2.2679	0.9670
5.5	2.3495	1.0119	2.3495	1.0119
6	2.4267	1.0549	2.4267	1.0549
6.5	2.4997	1.096	2.4997	1.0960
7	2.569	1.1353	2.5690	1.1353
7.5	2.6347	1.1729	2.6347	1.1729
8	2.6971	1.2089	2.6971	1.2089
8.5	2.7565	1.2432	2.7565	1.2432
9	2.8129	1.2761	2.8129	1.2761
9.5	2.8667	1.3075	2.8667	1.3075
10	2.9179	1.3375	2.9179	1.3375

Výsledný graf



Obr. 16 Priebehy výšok hladín v zásobníkoch kvapaliny s interakciou

3.1.3 Dva zásobníky kvapaliny bez interakcie

Pomocou internetového modulu som simuloval odozvu zásobníkov bez interakcie (Obr. 3) na skokovú zmenu objemového prietoku q_{01} vstupného prúdu.

Parametre zadané do formulára webstránky

S interakciou
 Bez interakcie

q₀₁:
1

q₀₂:
0

q₀₃:
0

F₁:
2.4

F₂:
2.4

K₁₁:
1.4

K₂₂:
1.4

krok:
0.5

čas simulácie:
10

Zadajte veľkosti vstupných prúdov

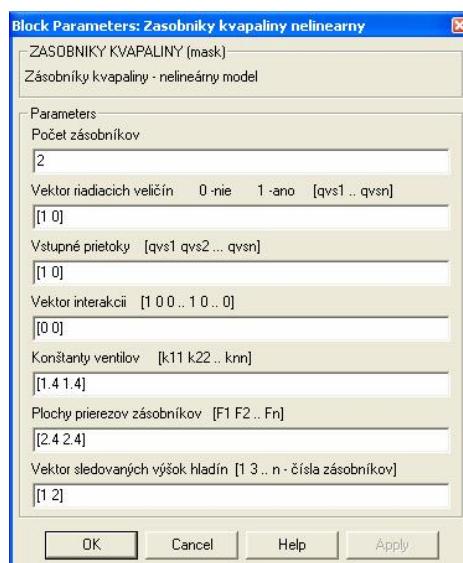
q₀₁:
2

q₀₂:

q₀₃:

Obr. 17 Vyplnený formulár pre zásobníky kvapaliny bez interakcie

Nastavenie bloku *Zásobníky kvapaliny, nelineárny model* v Modeltool



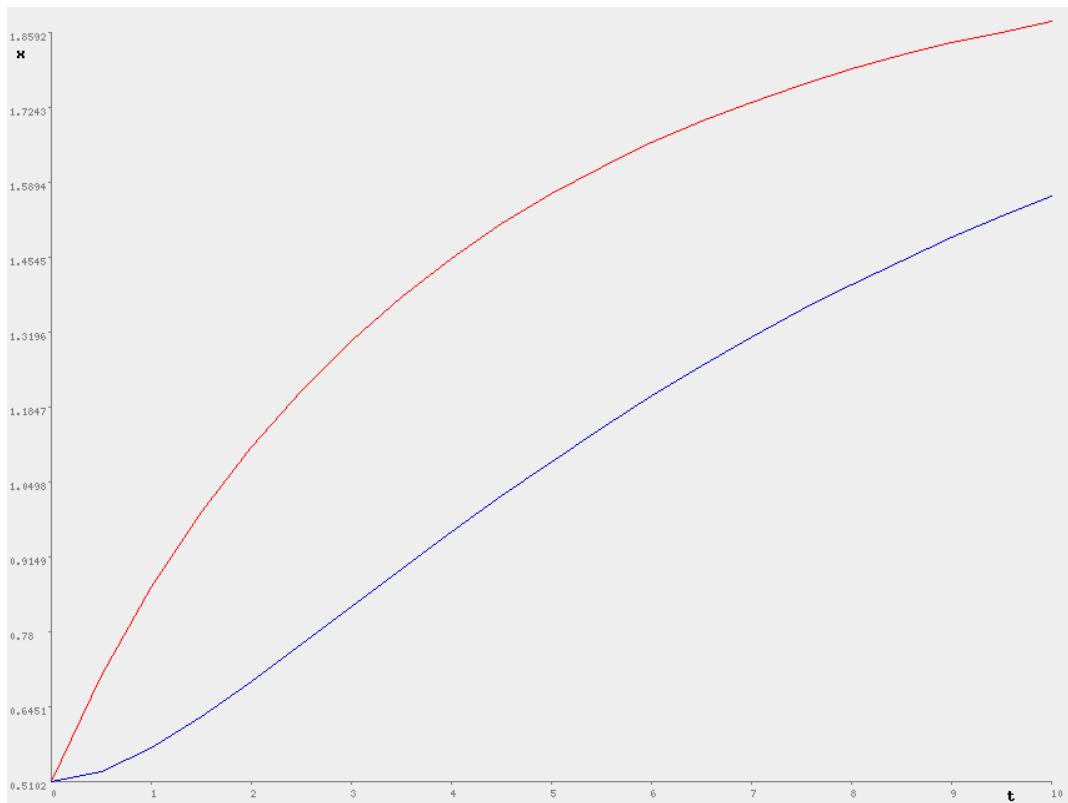
Obr. 18 Nastavenie bloku *Zásobníky kvapaliny, nelineárny model* v Modeltool

Porovnanie výsledkov

Tab. 3 Porovnanie výsledkov – zásobníky kvapaliny bez interakcie

t	h_{1,form}	h_{2,form}	h_{1,Matlab}	h_{2,Matlab}
0	0.5102	0.5102	0.5102	0.5102
0.5	0.6997	0.5278	0.6997	0.5278
1	0.8587	0.5698	0.8587	0.5698
1.5	0.9944	0.6254	0.9944	0.6254
2	1.1116	0.6886	1.1116	0.6886
2.5	1.2136	0.7554	1.2136	0.7554
3	1.303	0.8236	1.3030	0.8236
3.5	1.3817	0.8915	1.3817	0.8915
4	1.4511	0.9582	1.4511	0.9582
4.5	1.5127	1.023	1.5127	1.0230
5	1.5673	1.0855	1.5673	1.0855
5.5	1.616	1.1455	1.6160	1.1455
6	1.6594	1.2027	1.6594	1.2027
6.5	1.6981	1.2572	1.6981	1.2572
7	1.7327	1.3088	1.7327	1.3088
7.5	1.7637	1.3577	1.7637	1.3577
8	1.7915	1.4038	1.7915	1.4038
8.5	1.8164	1.4473	1.8164	1.4473
9	1.8387	1.4883	1.8387	1.4883
9.5	1.8588	1.5267	1.8588	1.5267
10	1.8768	1.5628	1.8768	1.5628

Výsledný graf



Obr. 19 Priebehy výšok hladín v zásobníkoch kvapaliny bez interakcie

3.1.4 Plášťový výmenník tepla

Pomocou internetového modulu som simuloval odozvu výmenníka (Obr. 4) na skokovú zmenu teploty J_v vstupného prúdu.

Parametre zadané do formulára webstránky

a:
c_p:
p:
V:
A:

q_{v1}: **q_{v2}:**
U_{v1}: **U_{v2}:**
U_p:

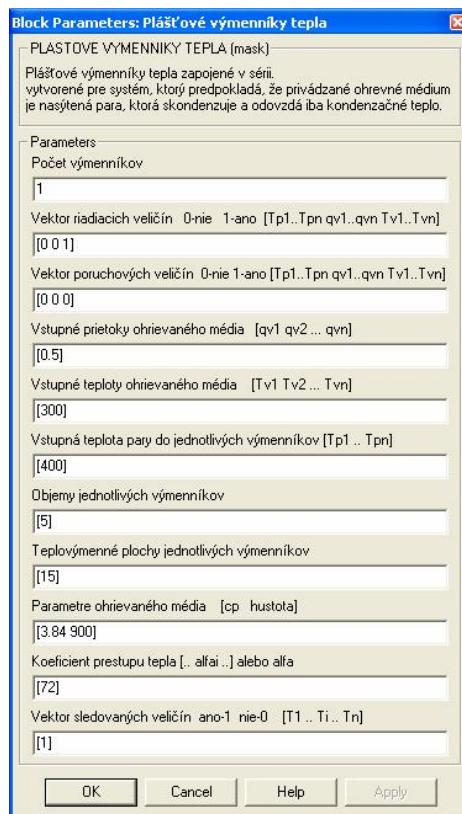
Zvolte vstupnú veličinu a zadajte jej hodnotu.

q_{v1}: **q_{v2}:**
 U_{v1}: **U_{v2}:**
 U_p:

krok:
čas simulácie:

Obr. 20 Vyplnený formulár pre plášťový výmenník tepla

Nastavenie bloku *Plášťové výmenníky tepla* v Modeltool



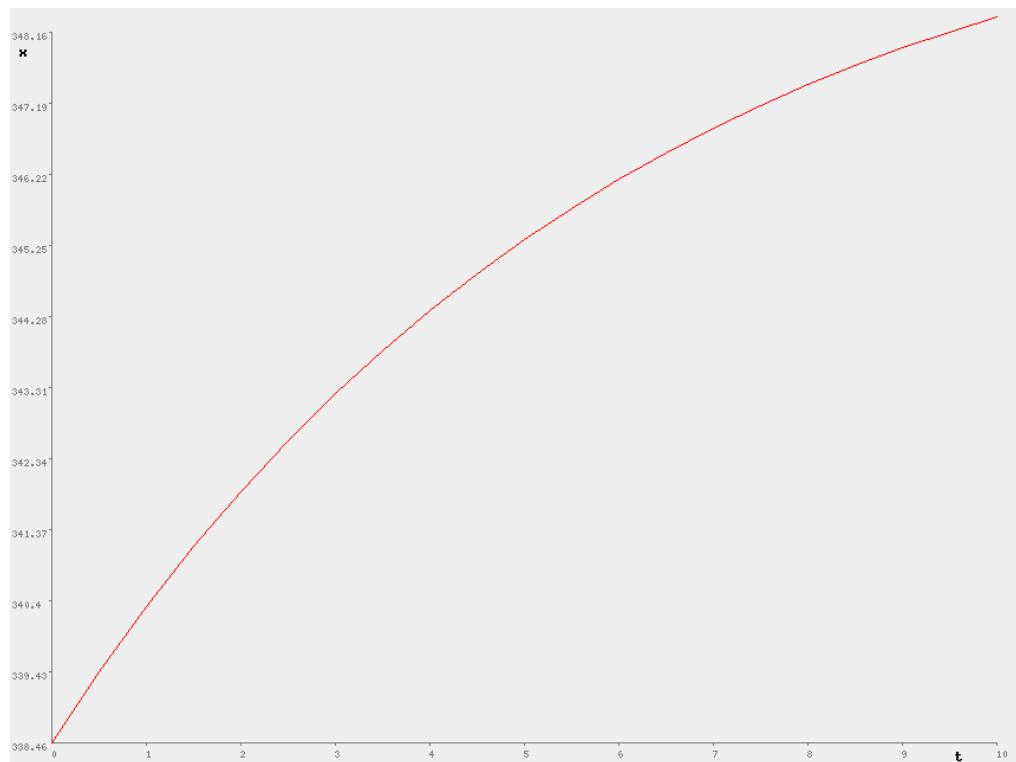
Obr. 21 Nastavenie bloku *Plášťové výmenníky tepla* v Modeltool

Porovnanie výsledkov

Tab. 4 Porovnanie výsledkov – výmenník tepla

t	J_{web}	J_{Matlab}
0	338.4615	338.4615
0.5	339.422	339.4220
1	340.3075	340.3075
1.5	341.1239	341.1239
2	341.8766	341.8766
2.5	342.5705	342.5705
3	343.2103	343.2103
3.5	343.8002	343.8002
4	344.3441	344.3441
4.5	344.8455	344.8455
5	345.3077	345.3077
5.5	345.7339	345.7339
6	346.1269	346.1269
6.5	346.4891	346.4891
7	346.8231	346.8231
7.5	347.1311	347.1311
8	347.415	347.4150
8.5	347.6767	347.6767
9	347.9181	347.9181
9.5	348.1406	348.1406
10	348.3457	348.3457

Výsledný graf



Obr. 22 Priebeh teploty vo výmenníku tepla

3.1.5 Plášťové výmenníky tepla

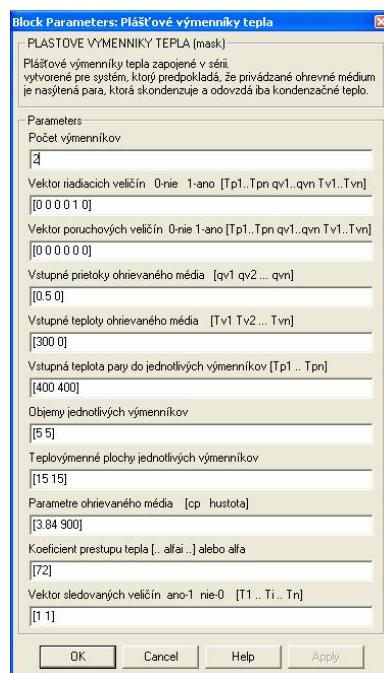
Pomocou internetového modulu som simuloval odozvu výmenníkov (Obr. 5) na skokovú zmenu teploty J_{v1} vstupného prúdu.

Parametre zadané do formulára webstránky

$\alpha:$	72	
$c_p:$	3.84	
$\rho:$	900	
$V_1:$	5	
$V_2:$	5	
$A_1:$	15	
$A_2:$	15	
$q_{v1}:$	0.5	
$q_{v2}:$	0	
$q_{v3}:$	0	
$\delta_{v1}:$	300	
$\delta_{v2}:$	0	
$\delta_{v3}:$	0	
$\delta_p:$	400	
Zvolte vstupnú hodnotu a zadajte jej hodnotu.		
<input type="radio"/> $q_{v1}:$	<input type="radio"/> $q_{v2}:$	<input type="radio"/> $q_{v3}:$
<input checked="" type="radio"/> $\delta_{v1}:$	<input type="radio"/> $\delta_{v2}:$	<input type="radio"/> $\delta_{v3}:$
<input type="radio"/> $\delta_p:$		
krok:	0.5	
čas simulácie:	10	

Obr. 23 Vyplnený formulár pre plášťové výmenníky tepla

Nastavenie bloku *Plášťové výmenníky tepla* v Modeltool



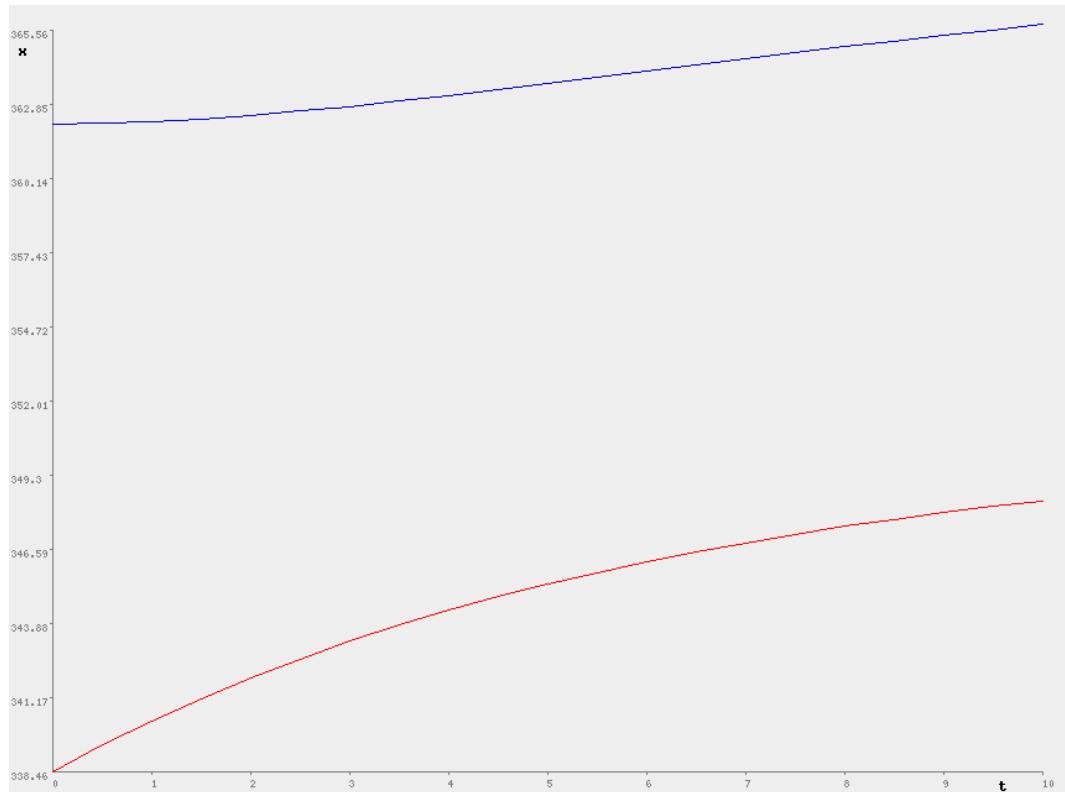
Obr. 24 Nastavenie bloku *Plášťové výmenníky tepla* v Modeltool

Porovnanie výsledkov

Tab. 5 Porovnanie výsledkov – výmenníky tepla

t	$J_{1,\text{web}}$	$J_{2,\text{web}}$	$J_{1,\text{Matlab}}$	$J_{2,\text{Matlab}}$
0	338.4615	362.1302	338.4615	362.1302
0.5	339.422	362.1539	339.4220	362.1539
1	340.3075	362.22	340.3075	362.2200
1.5	341.1239	362.3218	341.1239	362.3218
2	341.8766	362.4533	341.8766	362.4532
2.5	342.5706	362.6092	342.5705	362.6091
3	343.2104	362.7849	343.2103	362.7849
3.5	343.8003	362.9764	343.8002	362.9764
4	344.3441	363.1802	344.3441	363.1801
4.5	344.8455	363.3931	344.8455	363.3930
5	345.3078	363.6125	345.3077	363.6125
5.5	345.734	363.8361	345.7339	363.8361
6	346.1269	364.0619	346.1269	364.0619
6.5	346.4892	364.2882	346.4891	364.2882
7	346.8232	364.5135	346.8231	364.5135
7.5	347.1311	364.7367	347.1311	364.7367
8	347.415	364.9566	347.4150	364.9566
8.5	347.6768	365.1725	347.6767	365.1725
9	347.9181	365.3836	347.9181	365.3835
9.5	348.1406	365.5893	348.1406	365.5893
10	348.3457	365.7892	348.3457	365.7892

Výsledný graf



Obr. 25 Priebehy teplôt vo výmenníkoch tepla

3.1.6 Prietokový chemický reaktor

Pre prietokový chemický reaktor som overil ustálený stav teploty reakčnej zmesi. Pri zadávaní údajov do formulára som nevykonal skokovú zmenu vstupnej veličiny. Výsledok som porovnal s grafickým výsledkom programu na výpočet ustáleného stavu.

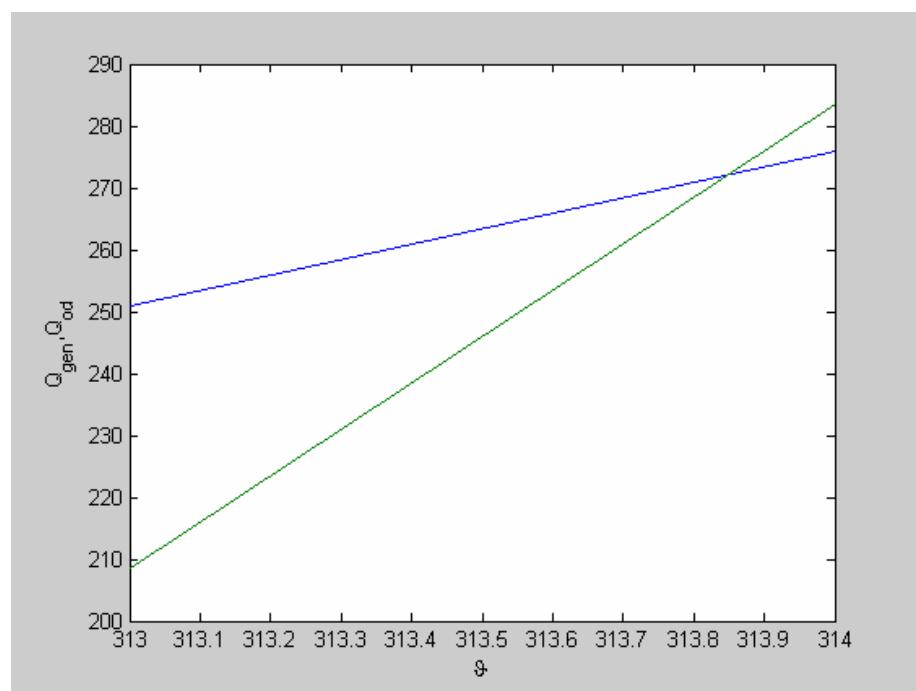
Pri simulácii dynamických vlastností reaktora sa vykonávajú dva cykly. Prvý cyklus slúži na výpočet ustálených stavov na začiatku a druhý na výpočet hodnôt v jednotlivých časoch. Oba cykly využívajú Rungeho-Kuttovu metódu výpočtu diferenciálnych rovníc.

Parametre zadané do formulára webstránky

c_{Av}:	4.22				
ρ:	1020				
ρ_c:	998				
c_p:	4.02				
c_{pc}:	4.182				
V:	0.23				
V_c:	0.21				
A:	1.51				
α:	42.8				
g:	9850				
ΔHf:	-8.4E4				
k_f:	1.5E11				
q:	0.015	q_c:	0.004		
θ_v:	315	θ_{cv}:	288		
Zvolte začiatočné podmienky pre výpočet ustáleného stavu.					
c_{Av}:	4.22	θ_v:	315	θ_{cv}:	288
Zvolte vstupnú veličinu a zadajte jej hodnotu.					
<input type="radio"/> q:	<input type="text"/>	<input checked="" type="radio"/> q _c :	<input type="text"/> 0.004		
<input type="radio"/> θ _v :	<input type="text"/>	<input type="radio"/> θ _{cv} :	<input type="text"/>		
krok:	0.5				
čas simulácie:	10				

Obr. 26 Vyplnený formulár pre chemický reaktor

Grafické znázornenie určenia ustáleného stavu chemického reaktora v Matlab



Obr. 27 Ustálený stav prietokového chemického reaktora

Stavové veličiny reaktora v rovnovážnom stave

Tab. 6 Ustálený stav chemického reaktora

t	c _{A,web}	J _{web}	J _{c,web}
0	4.0045	313.8379	308.5312
0.5	4.0045	313.838	308.5314
1	4.0045	313.8381	308.5315
1.5	4.0045	313.8382	308.5316
2	4.0045	313.8383	308.5317

3.1.7 Etážová rektifikačná kolóna

Pri simulácii dynamických vlastností etážovej rektifikačnej kolóny sa vychádza z rovnovážneho stavu, ktorý je vypočítaný pomocou iteračného algoritmu.

Parametre zadané do formulára

n:	0.6
Z_i:	0.2
Z_w:	1
n_G:	0.345
n_D:	0.172
n_L:	0.173
n_F:	0.254
x_f:	0.5
a:	0.00046224365
b:	15.131084
c:	-5.1346083
d:	25.2741
e:	-16.30502
krok:	0.5
čas simulácie:	10

Zvolte vstupnú veličinu a zadajte jej hodnotu.

n_G: n_D: n_L: 0.1817 n_F: x_f:

Zadajte začiatočný odhad pre iteračný výpočet ustáleného stavu na začiatku.

x_w:	0.001
-----------------------	-------

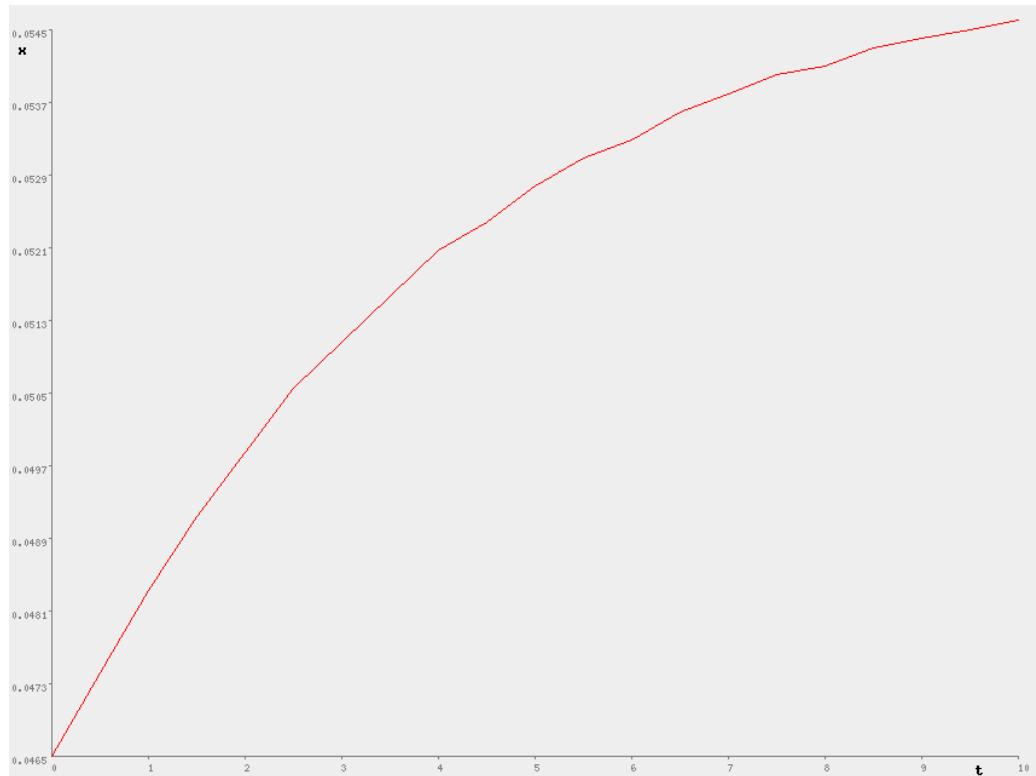
Obr. 28 Formulár pre etážovú rektifikačnú kolónu

Výsledky zo stránky som porovnal s programom na výpočet dynamiky etážovej rektifikačnej kolóny.

Tab. 7 Porovnanie výsledkov – etážová rektifikačná kolóna

t	X_{w,web}	X_{w,Matlab}
0	0.0465	0.0465
0.5	0.0474	0.0474
1	0.0483	0.0484
1.5	0.0491	0.0493
2	0.0498	0.0503
2.5	0.0505	0.0512
3	0.051	0.0521
3.5	0.0515	0.0531
4	0.052	0.0540
4.5	0.0523	0.0550
5	0.0527	0.0559
5.5	0.053	0.0568
6	0.0532	0.0577
6.5	0.0535	0.0586
7	0.0537	0.0595
7.5	0.0539	0.0604
8	0.054	0.0612
8.5	0.0542	0.0621
9	0.0543	0.0629
9.5	0.0544	0.0637
10	0.0545	0.0645

Výsledný graf



Obr. 29 Priebeh zloženia zvyšku v etážovej rektifikačnej kolóne

Predpokladá sa, že odchýlka od výsledkov z Matlabu je spôsobená numerickými chybami.

4 Záver

Cieľom práce bolo vytvorenie internetového modulu pre modelovanie a simuláciu procesov.

V teoretickej časti som opísal vytváranie modelov pre procesy: zásobník kvapaliny, dva zásobníky kvapaliny s interakciou, dva zásobníky kvapaliny bez interakcie, plášťový výmenník tepla, dva plášťové výmenníky tepla, prietokový chemický reaktor a etážová rektifikačná kolóna. Ďalej som v tejto časti uviedol vzťahy pre výpočet hodnôt sledovaných veličín Rungeho-Kuttovou metódou.

V praktickej časti som sa zaoberal php skriptom na vytváranie internetového formulára, skriptom na výpočet hodnôt, skriptom na ukladanie údajov a skriptom na vykreslovanie grafu. V tejto časti som uviedol aj pokyny na používanie webových stránok.

V experimentálnej časti som porovnal údaje získané simuláciou cez internet s údajmi získanými simuláciou v prostredí Simulink programu Matlab.

Z výsledkov práce je zrejmé, že metóda s využitím webových stránok je vhodná na riešenie zadania z predmetu Modelovanie. Výsledky sa s veľkou presnosťou zhodujú s výsledkami, ktoré poskytuje toolbox Modeltool v prostredí Simulink programu Matlab.

Vytvorený internetový modul bude využívaný v predmete Modelovanie, ktorý je predmetom v 2. ročníku bakalárskeho študijného programu Informatizácia, automatizácia a manažment v chémii a potravinárstve na FCHT STU v Bratislave. Študenti tak získajú možnosť odsimulovať si dynamické vlastnosti vybraných typov procesov aj prostredníctvom internetu bez nutnosti využívania MATLAB.

Literatúra

- [1] Bakošová, M. – Kurz Modelovanie v systéme Moodle
<http://www.kirp.ctf.stuba.sk/moodle/course/view.php?id=160>
- [2] Bakošová, M. – Kurz Modelovanie v procesnom priemysle v systéme Moodle
[http://www.kirp.ctf.stuba.sk/moodle/course/view.php?id=243.](http://www.kirp.ctf.stuba.sk/moodle/course/view.php?id=243)
- [3] Bakošová, M. – Fikar, M. *Riadenie procesov*. STU v Bratislave, 2008.1 s. ISBN 978-80-227-2841-6.
- [4] Šabo, M. – Kvasnička, V. – Varga, Š. – Garaj, I. – Baláž, V. – Antoni, J. – Kusý, P. *Matematika III*. STU v Bratislave, 1993.3 s. ISBN 80-227-0534-9
- [5] Čirka, L – Kurz XHTML, CSS, PHP v systéme Moodle
<http://www.kirp.ctf.stuba.sk/moodle/course/view.php?id=48>
- [6] <http://www.kirp.ctf.stuba.sk/~cirka/vyuka/php/index.phpFEI>, 2006. 90 s.
- [7] Baleja, J. – Tvorba knižnice matematických modelov chemickotechnologických procesov. Diplomová práca, FCHPT STU v Bratislave, 2005.