

**SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA
V BRATISLAVE**

FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ
TECHNOLÓGIE



KATEDRA INFORMATIZÁCIE A RIADENIA PROCESOV

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Bratislava 2004

Vedúci diplomovej práce: Prof. Ing. Ján Mikleš, DrSc.

Vypracoval: Bc. Martin KRAJMER

ABSTRAKT

Táto diplomová práca sa zaoberá opisom a analýzou chemického prietokového reaktora s miešaním. V práci je uvedený opis tohto zariadenia s vysvetlením funkcie jednotlivých častí a technických možností. Ďalej sú definované predpoklady k odvodeniu, odvodenie matematického modelu reaktora (nelineárny MM, lineárny MM) a optimálny odhad stavových veličín reaktora pomocou Kalmanovho filtra.

ABSTRACT

This diploma thesis deals with description and analysis of continue stirred tank reactor. The work contains plant description and explanation of reactor's parts functionality and technical options of used plant. It also includes assumes deductions, mathematical model of reactor deduction (non-linear and linear mathematical model) and optimal state estimation of reactor by using Kalman filter.

Pod'akovanie:

Týmto si dovoľujem poďakovať vedúcemu diplomovej práce Prof. Ing. Jánovi Miklešovi, DrSc za všestrannú pomoc, ochotu a odborné vedenie. Zároveň chcem poďakovať Ing. Františkovi Jelenčiakovi za cenné rady a pripomienky. Moja vďaka tiež patrí rodičom, blízkym a všetkým, ktorí sa akýmkoľvek spôsobom pričinili o to , aby táto práca mohla uzrieť svetlo sveta.

OBSAH

1. ÚVOD	5
2. FORMULÁCIA CIEĽOV PRÁCE	7
3. KLASIFIKÁCIA CHEMICKEJ REAKCIE	8
4. MATEMATICKÉ MODELOVANIE LABORATÓRNEHO CHEMICKÉHO PRIETOKOVÉHO REAKTORA	9
4.1 Opis chemického reaktora	9
4.3 Nelineárny matematický model s tromi stavovými veličinami	14
4.4 Nelineárny matematický model s dvomi stavovými veličinami	18
4.5 Linearizovaný matematický model	24
5. ODHAD STAVU POMOCOU KALMANOVHO FILTRA	27
5.1..Odhad stavu	27
5.2 Optimálny odhad stavu	29
6. REALIZÁCIA V PROSTREDÍ MATLAB	34
7. ZÁVER	41
8. LITERATÚRA	42
9. PRÍLOHA	44

1. ÚVOD

Počas posledných desaťročí došlo k veľkej expanzii chémie na celom svete. Túto skutočnosť spôsobuje rast teoretických poznatkov skĺbených spolu s praktickým využitím. Počas práve týchto rokov sa transformoval pôvodný základ chemického priemyslu, alchýmia, na jedno z vedúcich odvetví národných hospodárstiev vo vyspelých krajinách sveta.

Dnes chemický priemysel nadobúda čoraz väčší význam v mnohých iných odvetviach, ako napríklad v strojárstve, textilnom, stavebnom, či vo farmaceutickom priemysle. Na základe tejto skutočnosti je potrebné si uvedomiť, že okrem špecializovaných pracovníkov odboru chémie sa dostávajú do styku stále širšie okruhy neodborníkov, ktorí nie sú priamo pracujúci v chemickom priemysle, ale sú odborníkmi v iných oblastiach, respektíve sú zameraní na iné výrobné odvetvie.

U takýchto ľudí, ako napríklad biológovia, lekári, farmaceuti, agronómovia, geológovia, atď. nemá chémia, alebo chemické procesy určujúcu úlohu. No vzhľadom na prudký nárast informačného toku sa musí riešiť problematika odovzdávania výsledkov bádania práve takýmto skupinám, aby bolo možné vypracovanie konkrétneho komplexného výrobného systému, ktorý je výsledkom parciálnych riešení vychádzajúcich z jednotlivých vetiev vývojového tímu.

Medzi jednu z vetiev patrí aj proces obecnej automatizácie a teda v chemickom priemysle ide o automatizáciu chemicko - technologických procesov. Automatizácia je nevyhnutná už pri samotnej výskumnej činnosti ktoréhokoľvek druhu, pri predávaní, respektíve premiestňovaní akýchkoľvek informácií.

Bez použitia automatizácie nie je možné splniť hlavné úlohy chémie, ako sú napríklad skúmanie prírodných dejov, pri ktorých látky vznikajú, alebo sa rozkladajú a to po stránke kvalitatívnej, tak aj kvantitatívnej, zisťovať podmienky chemických reakcií, sledovať deje sprevádzajúce reakcie, skúmať zloženie, vnútornú stavbu látok a napokon dôležité praktické použitie výsledkov, skúseností, laboratórnych výskumov a teoretické poznatky na prípravu známych aj nových látok, potrebných pre prax aj pre ďalšie vedecké bádanie.

Automatizácia chemicko - technologických procesov nemá význam len v ťažkej chémii, alebo výrobe chemikálií, ale zasahuje aj do ďalších odvetví priemyselnej výroby. Je

to napríklad príprava flotačných chemikálií na prípravu rudných koncentrátov pre hutnicke spracovanie kovov. Ďalej príprava čistých monokryštálov prakticky ideálne čistého germánia a kremíka dodáva materiál pre elektronický priemysel. Syntetické živice na výrobu lakov, pigmenty, farbivá, ochranné nátery proti korózii slúžia stavebníctvu, čisté chemikálie sú spotrebúvané taktiež vo farmaceutickom, potravinárskom, alebo fotografickom priemysle. Ďalší veľký význam má priemysel spracovania dreva a tiež priemysel syntetických hmôt.

Jednou z najdôležitejších častí chemického výrobného procesu je chemická reakcia, ktorá prebieha. Práve preto automatizácia chemických reaktorov patrí ku kľúčovej problematike riadenia chemicko-technologických procesov. S tým je spojený problém merania a regulácie. Pretože nie všetky procesy a ich veličiny sú rovnako „lacno“ merateľné, je možné použiť optimálny odhad stavu, ktorý ak je aplikovaný, dokáže s dostatočnou presnosťou odhadovať hodnotu stavovej veličiny, bez nutnosti jej merania, na základe známych hodnôt inej merateľnej veličiny.

Práca je zameraná na opis a štúdium deja v laboratórnom prietokovom chemickom reaktore a na využitie optimálneho odhadu stavu.

2. FORMULÁCIA CIEĽOV PRÁCE

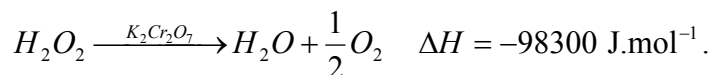
Hlavným cieľom tejto práce je ukázať možnosť využitia teórie automatického riadenia pre návrh riadenia prietokového chemického reaktora s miešaním, v ktorom prebieha katalytický rozklad peroxidu vodíka dvojchrómanom draselným. Výsledkom by mali byť informácie o matematickom modeli reaktora, spôsoby prevádzky takéhoto reaktora z hľadiska optimálnej činnosti a bezpečnosti práce. Pre splnenie uvedeného cieľa je potrebné splniť parciálne úlohy, ktoré môžu byť sformulované a rozdelené nasledovne:

1. Klasifikovanie chemickej reakcie.
2. Získanie vhodného matematického modelu reaktora z hľadiska riadenia.
3. Optimálny odhad stavu pomocou Kalmanovho filtra.
4. Realizovanie odhadu stavu v prostredí MATLAB

Táto práca je členená tak, že riešenia uvedených úloh sú usporiadané za sebou, pričom sa nachádzajú v samostatných častiach.

3. KLASIFIKÁCIA CHEMICKEJ REAKCIE

Chemická reakcia, ktorá prebieha v reaktore sa dá zapísať stechiometrickou rovnicou



Z rovnice vyplývajú dva dôležité závery:

1. Reakcia je exotermická, z čoho vyplýva pre riadenie nutnosť chladenia.
2. Produktmi reakcie sú voda a kyslík, ktoré tvoria heterogénne prostredie. Je nutné pri návrhu konštrukcie reaktora a aj z bezpečnostných dôvodov tento fakt zobrať do úvahy.

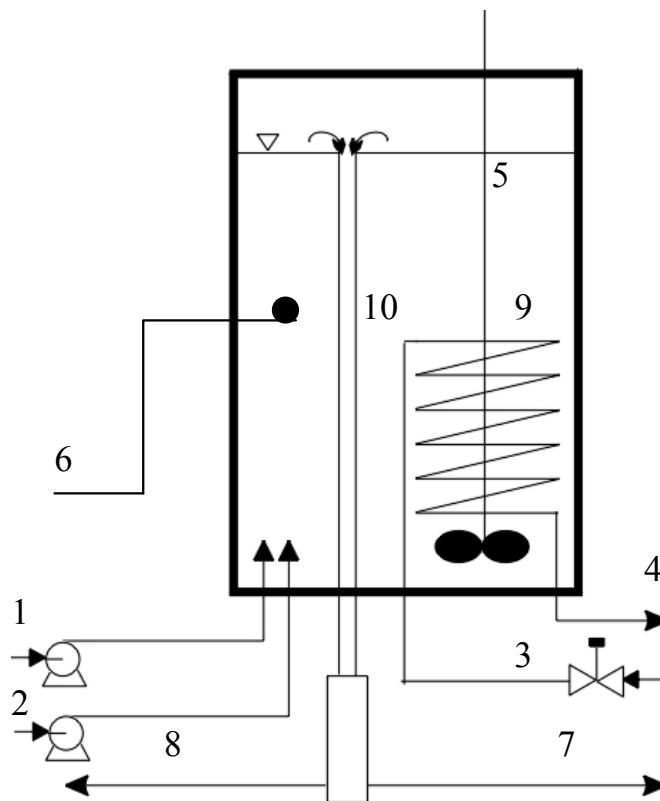
Reakcia sa ďalej vyznačuje aj farebnými zmenami. Roztok peroxidu vodíka je bezfarebný, roztok dvojchrómanu draselného má oranžovú farbu. Pri reakcii dôjde ku zmene farby z oranžovej na hnedočiernú a až po dostatočnom rozložení peroxidu sa začne obnovovať farba na pôvodnú oranžovú. Ďalej je nutné ešte zdôrazniť, že presná kinetika reakcie nie je doteraz známa. Z chemického hľadiska bola táto reakcia podrobnejšie skúmaná v práci [1].

4. MATEMATICKÉ MODELOVANIE LABORATÓRNEHO CHEMICKÉHO PRIETOKOVÉHO REAKTORA

4.1 Opis chemického reaktora

Obrázok 4.1 zobrazuje laboratórny chemický prietokový reaktor vybavený dvomi peristaltickými čerpadlami 1 a 2, ktoré čerpajú vodné roztoky peroxidu vodíka a dvojchrómanu draselného do reaktora, kde sú premiešavané miešadlom 5. Prietok chladiaceho média zabezpečuje čerpadlo termostatu a následné škrtenie pneumaticky ovládaným ventilom 3, cez ktorý prúdi médium ďalej do chladiaceho hada 9 a ohriate sa vracia z hada 4. Prebytočný objem reakčnej zmesi, ale aj produkovaný kyslík opúšťa vnútro reaktora cez prepád 10 a následne sa separuje tento tok na kvapalnú a plynnú časť 7 a 8.

Tri snímače teploty zabezpečujú snímanie teploty reakčnej zmesi 6, teploty vody na vstupe a výstupe z chladiaceho hada 9.



Obr. 4.1 Schéma laboratórneho chemického prietokového reaktora.

Detailnejší opis reaktora je uvedený v práci [3]. Pri nábehu reaktora je reakčná zmes privádzaná do reaktora, ktorý je naplnený vodou, pričom prietok chladiča je maximálny.

Takýmto spôsobom je realizovaná tzv. nábehová fáza reaktora. Po čase dosiahnutý ustálený stav sa nazve dolným, pretože je dosiahnutý pri maximálnom prietoku (podobne pri nulovom prietoku chladiva sa dosiahne horný ustálený stav). Od tohto stavu sa už môže prejsť na fázu samotného riadenia. Na základe znalostí o kinetike chemickej reakcie, materiálovej a entalpickej bilancii je možné odvodiť matematický model takéhoto reaktora. Je nutné definovať predpoklady, za ktorých bude model odvodený. Základná predstava je zostavenie stavového modelu s tromi stavovými veličinami:

- koncentrácia peroxidu vodíka
- teplota reakčnej zmesi
- teplota vystupujúceho chladiaceho média

Predpoklady odvodenia

- a) Homogénna koncentrácia peroxidu vodíka a dvojchrómanu draselného vo vnútri reaktora, čo je zabezpečené dokonalým miešaním.
- b) Homogénna teplota reakčnej zmesi, čo je zabezpečené dokonalým miešaním.
- c) Chladiace médium v hade má správanie, ktoré je možné aproximovať systémom so sústredenými parametrami.
- d) Koncentrácia dvojchrómanu draselného v reakčnej zmesi pri zmene podmienok je v okamžiku ustálená.
- e) Reakčná rýchlosť sa správa podľa definovaného vzťahu.
- f) Tepelná kapacita stavebných prvkov reaktora ako sú napríklad had, plášť, veká, skrutky, snímače, miešadlo, prírodné a odvodné elementy je zanedbateľná oproti tepelnej kapacite reakčnej zmesi.
- g) Tepelné kapacity, hustoty reaktantov, produktov, chladiaceho média, ako aj . úhrnné koeficienty prechodu tepla a tepelných strát sú konštantné.

Zavedenie symbolov pre fyzikálno - chemické veličiny

Pre jednoduchosť sa zavedie označenie peroxidu vodíka ako zložka A, a dvojchrómanu draselného ako zložka B.

- A - prestupová plocha chladiaceho hada [m^2]
- c_A - koncentrácia peroxidu vodíka v reakčnej zmesi [mol.cm^{-3}]
- c_{AV} - koncentrácia peroxidu vodíka vo vstupnom prúde [mol.cm^{-3}]
- c_B - koncentrácia dvojchrómanu draselného v reakčnej zmesi [mol.cm^{-3}]
- c_{BV} - koncentrácia dvojchrómanu draselného vo vstupnom prúde [mol.cm^{-3}]
- C_P - stredná špecifická tepelná kapacita reakčnej zmesi [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]
- C_{PCH} - stredná špecifická tepelná kapacita chladiaceho média [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]
- E - aktivačná energia [J.mol^{-1}]
- ΔH - reakčná entalpia [J.mol^{-1}]
- k - rýchlostná konštanta reakcie [$\text{mol.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$]
- k_S - koeficient stratového tepla [1]
- q_A - vstupný prietok peroxidu vodíka [$\text{cm}^3.\text{s}^{-1}$]
- q_B - vstupný prietok dvojchrómanu draselného [$\text{cm}^3.\text{s}^{-1}$]
- q_{CH} - prietok chladiaceho média [$\text{cm}^3.\text{s}^{-1}$]
- R - univerzálna plynová konštanta [$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$]
- V - reakčný objem reaktora [cm^3]
- V_{CH} - objem chladiaceho hada [cm^3]
- y, z - koeficienty udávajúce poriadok reakcie [1]
- t - čas [s]
- α - úhrnný koeficient prechodu tepla [$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$]
- r - reakčná rýchlosť [$\text{mol.s}^{-1}.\text{cm}^{-3}$]
- \mathcal{G} - teplota reakčnej zmesi [K]
- \mathcal{G}_0 - teplota, pri ktorej sú definované konštanty k , y a z [K]
- \mathcal{G}_{CH} - teplota chladiaceho média na výstupe z hada [K]
- \mathcal{G}_{CHV} - teplota chladiaceho média na vstupe do hada [K]
- \mathcal{G}_{OUT} - teplota okolia [K]
- \mathcal{G}_V - stredná teplota pri ktorej prichádzajú reaktanty do reaktora [K]
- ρ - stredná hodnota hustoty reakčnej zmesi [kg.cm^{-3}]
- ρ_{CH} - stredná hodnota hustoty chladiaceho média [kg.cm^{-3}]

4.2 Materiálová a entalpická 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 Δm_k

$$\sum_i m_i = \sum_o m_o + \sum_k \Delta m_k \quad (4.1)$$

Látková bilancia peroxidu vodíka

Množstvo vstupujúceho peroxidu vodíka do reaktora

$$n_{i,A} = q_A c_{AV} \quad (4.2)$$

Množstvo vystupujúceho peroxidu vodíka z reaktora

$$n_{o,A} = (q_A + q_B) c_A \quad (4.3)$$

Množstvo peroxidu vodíka, ktoré zreaguje

$$n_{r,A} = r(c_A, c_B, \vartheta) V \quad (4.4)$$

Potom, pre časovú diferenciu koncentrácie peroxidu vodíka platí

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{1}{V} (q_A c_{AV} - (q_A + q_B) c_A) - r(c_A, c_B, \vartheta). \quad (4.5)$$

Súčet množstva tepla, ktorých nosičmi sú všetky látkové toky do systému Q_i , je rovný súčtu množstva tepla, ktorých nosičmi sú všetky vystupujúce látkové toky Q_o , tepla vzniknutých reakciou Q_r a akumulovaných častí tepla v systéme ΔQ_k

$$\sum_i Q_i = \sum_o Q_o + \sum_r Q_r + \sum_k \Delta Q_k. \quad (4.6)$$

Tepelná bilancia reakčnej zmesi

$$t_{ref} = 0^\circ C \quad (4.7)$$

Množstvo tepla, ktorého nosičom je zmes reaktantov

$$Q_1 = (q_A + q_B) \rho C_p \vartheta_V \quad (4.8)$$

Množstvo tepla, ktoré vznikne reakciou

$$Q_2 = (-\Delta H) r(c_A, c_B, \vartheta) V \quad (4.9)$$

Množstvo tepla, ktoré sa vymení medzi reakčnou zmesou a chladiacim médiom

$$Q_3 = A\alpha(\vartheta - \vartheta_{CH}) \quad (4.10)$$

Množstvo tepla, ktoré odíde vo forme tepelných strát

$$Q_4 = k_s A\alpha(\vartheta - \vartheta_{OUT}) \quad (4.11)$$

Množstvo tepla, ktorého nosičom je zmes produktov

$$Q_5 = (q_A + q_B)\rho C_P \vartheta \quad (4.12)$$

Potom pre časovú akumuláciu tepla platí

$$\frac{dQ}{dt} = Q_2 + Q_1 - Q_5 - Q_3 - Q_4 \quad (4.13)$$

kde

$$Q = C_P V \rho \vartheta \quad (4.14)$$

Po úprave je možné zapísať

$$\begin{aligned} \frac{d\vartheta}{dt} = \frac{1}{C_P \rho} (-\Delta H) r(c_A, c_B, \vartheta) + \frac{q_A + q_B}{V} (\vartheta_V - \vartheta) - \\ - \frac{A\alpha}{C_P V \rho} (\vartheta - \vartheta_{CH}) - \frac{k_s A\alpha}{C_P V \rho} (\vartheta - \vartheta_{OUT}) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Tepelná bilancia chladiaceho média

$$t_{ref} = 0^\circ\text{C} \quad (4.16)$$

Množstvo tepla, ktorého nosičom je vstupný prúd chladiča

$$Q_1 = q_{CH} \rho_{CH} C_{PCH} \vartheta_{CHV} \quad (4.17)$$

Množstvo tepla, ktoré sa vymení medzi chladiacim médiom a reakčnou zmesou

$$Q_2 = A\alpha(\vartheta - \vartheta_{CH}) \quad (4.18)$$

Množstvo tepla, ktorého nosičom je výstupný prúd chladiča

$$Q_3 = q_{CH} \rho_{CH} C_{PCH} \vartheta_{CH} \quad (4.19)$$

Potom pre časovú akumuláciu tepla platí

$$\frac{dQ}{dt} = Q_1 - Q_2 + Q_3 \quad (4.20)$$

kde

$$Q = C_{PCH} V_{CH} \rho_{CH} \vartheta_{CH} \quad (4.21)$$

Po úprave je možné zapísať

$$\frac{d\mathcal{G}_{CH}}{dt} = \frac{q_{CH}}{V_{CH}}(\mathcal{G}_{CHV} - \mathcal{G}_{CH}) + \frac{A\alpha}{C_{PCH}V_{CH}\rho_{CH}}(\mathcal{G} - \mathcal{G}_{CH}) \quad (4.22)$$

Rovnice (4.5), (4.15) a (4.22) tvoria jadro, nelineárneho matematického modelu reaktora. Ďalej je však potrebné uviesť vzťahy pre výpočet koncentrácie dvojchrómanu draselného a reakčnej rýchlosti, ktorá sa vzťahuje na objem reakčnej zmesi.

Látková bilancia dvojchrómanu draselného

$$c_B = \frac{q_B c_{BV}}{q_A + q_B} \quad (4.23)$$

Vzťah pre výpočet reakčnej rýchlosti (vzťahnutej pre zánik peroxidu vodíka) je

$$r(c_A, c_B, \mathcal{G}) = \frac{2}{1000} k (1000c_A)^y (1000c_B)^z \exp\left(\frac{E(\mathcal{G} - \mathcal{G}_0)}{R\mathcal{G}\mathcal{G}_0}\right) \quad (4.24)$$

Vzťah a niektoré hodnoty koeficientov, ktoré v ňom vystupujú, boli prevzaté z práce [1]. V nasledujúcich podkapitolách sa pojednáva o správaní reaktora na základe jeho modelov, pričom porovnanie modelu s experimentálnymi údajmi nie je uvedené, pretože bolo už publikované [2].

4.3 Nelineárny matematický model s tromi stavovými veličinami

Tento model je definovaný rovnicami (4.5), (4.15) a (4.22)

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{1}{V}(q_A c_{AV} - (q_A + q_B)c_A) - r(c_A, c_B, \mathcal{G}) \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{G}}{dt} = & \frac{1}{C_P \rho} (-\Delta H)r(c_A, c_B, \mathcal{G}) + \frac{q_A + q_B}{V}(\mathcal{G}_V - \mathcal{G}) - \\ & - \frac{A\alpha}{C_P V \rho}(\mathcal{G} - \mathcal{G}_{CH}) - \frac{k_S A \alpha}{C_P V \rho}(\mathcal{G} - \mathcal{G}_{OUT}) \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\frac{d\mathcal{G}_{CH}}{dt} = \frac{q_{CH}}{V_{CH}}(\mathcal{G}_{CHV} - \mathcal{G}_{CH}) + \frac{A\alpha}{C_{PCH}V_{CH}\rho_{CH}}(\mathcal{G} - \mathcal{G}_{CH}) \quad (4.27)$$

kde

$$c_B = \frac{q_B c_{BV}}{q_A + q_B} \quad (4.28)$$

$$r(c_A, c_B, \vartheta) = \frac{2}{1000} k (1000c_A)^y (1000c_B)^z \exp\left(\frac{E(\vartheta - \vartheta_0)}{R\vartheta\vartheta_0}\right) \quad (4.29)$$

Tabuľka 4.1 Hodnoty fyzikálno-chemických veličín charakterizujúcich reaktor.

Veličina	Hodnota	Rozmer	Veličina	Hodnota	Rozmer
$A\alpha$	116,0902	[W.K ⁻¹]	V	940	[cm ³]
E	3,0917.10 ⁴	[J.mol ⁻¹]	V_{CH}	90	[cm ³]
ΔH	-98300	[J.mol ⁻¹]	y	1,641	[1]
k	0,091	[mol.cm ⁻³ .s ⁻¹]	z	0,875	[1]
k_S	0,007	[1]	ϑ_0	297,65	[K]
R	8,314	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]			

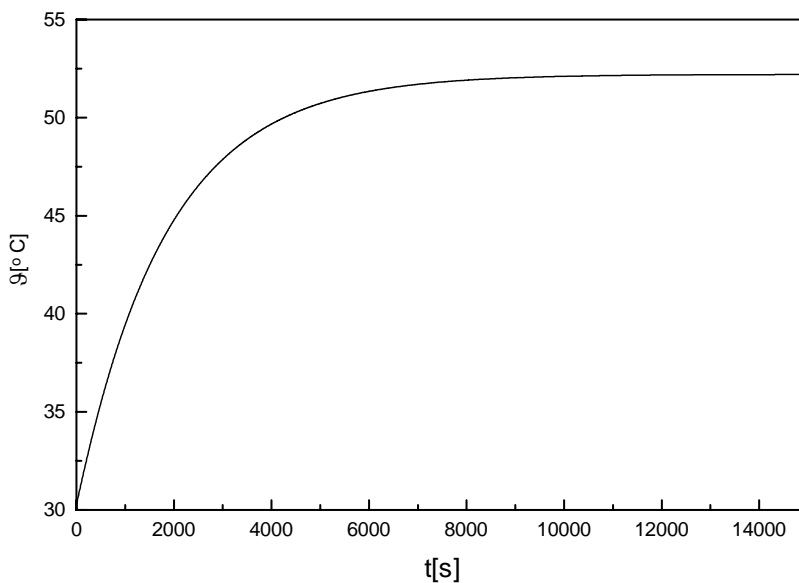
Tabuľka 4.2 Hodnoty prevádzkových parametrov reaktora.

Veličina	Hodnota	Rozmer
c_{AV}	9/0,0026	[%]/[mol.cm ⁻³]
c_{BV}	4,5/1,5296.10 ⁻⁴	[%]/[mol.cm ⁻³]
q_A	15/0,25	[cm ³ .min ⁻¹]/[cm ³ .s ⁻¹]
q_B	6/0,1	[cm ³ .min ⁻¹]/[cm ³ .s ⁻¹]
q_{CH}	$\in < 0; 140 > / < 0; 2,3333 >$	[cm ³ .min ⁻¹]/[cm ³ .s ⁻¹]
ϑ_{CHV}	25/298,15	[°C]/[K]
ϑ_{OUT}	25/298,15	[°C]/[K]
ϑ_V	25/298,15	[°C]/[K]

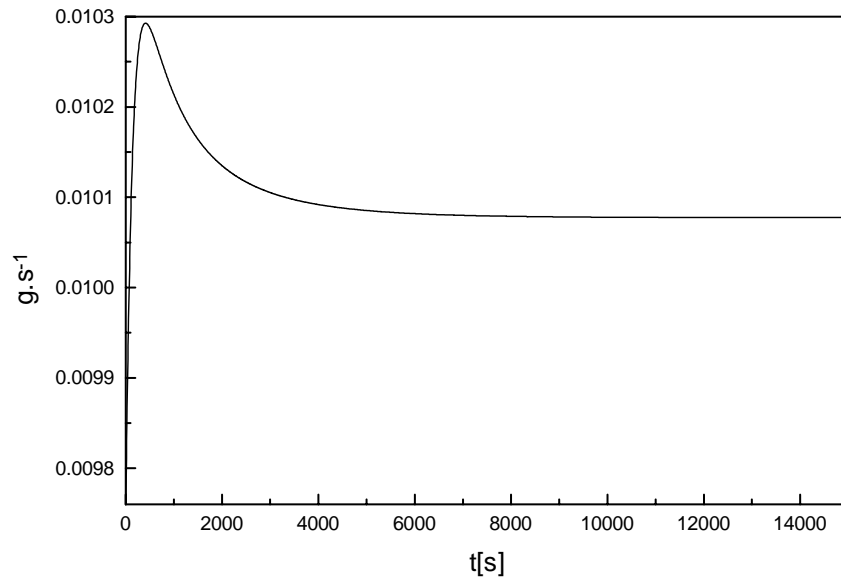
Tabuľka 4.3 Hodnoty stredných špecifických tepelných kapacít a hustôt.

Veličina	Hodnota	Rozmer
C_P	4180	$[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
C_{PCH}	4180	$[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
ρ	0,001	$[\text{kg} \cdot \text{cm}^{-3}]$
ρ_{CH}	0,001	$[\text{kg} \cdot \text{cm}^{-3}]$

Z prechodových charakteristík, obrázky 4.2 a 4.3, ktoré sú nasimulované pre zmenu q_{CH} z 0 na $140 \text{cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$, vyplýva, že prietok chladiaceho média vo veľkej miere ovplyvňuje teplotu reakčnej zmesi (cca 70 %) a v malej miere množstvo produkovaného kyslíka (cca 2 %).



Obr. 4.2 Prechodová charakteristika teploty reakčnej zmesi, pre maximálnu zmenu prietoku chladiča.



Obr. 4.3 Prechodová charakteristika produkovaného kyslíka, pre maximálnu zmenu prietoku chladiva.

Zo správania reaktora, vyplývajú dva fakty:

1. Daný model opisuje správanie reaktora s presnosťou na teplotu reakčnej zmesi $\pm 0,2$ °C v oblasti blízkej k uvedeným pracovným podmienkam (± 25 %), a je možné ho považovať za vhodný.
2. Riadenie teploty reakčnej zmesi je možné na základe prietoku chladiaceho média a riadenie prietoku produkovaného kyslíka na základe množstva vstupujúceho peroxidu vodíka.

Nevýhodou tohto modelu je jeho relatívna zložitosť, čo sa prejavuje pri výpočtoch a pri následných matematických manipuláciách. Preto je vhodné vykonať zjednodušenie tak, aby vlastnosti zjednodušeného modelu boli čo najpodobnejšie s pôvodným.

4.4 Nelineárny matematický model s dvomi stavovými veličinami

Úmyslom je redukcia jednej stavovej veličiny a to teploty chladiaceho média na výstupe z hada. Ďalšie zjednodušenie spočíva v náhrade vzťahu pre reakčnú rýchlosť.

Pôvodný vzťah pre reakčnú rýchlosť (4.24) sa nahradí

$$r'(c_A, c_B, \mathcal{G}) = 2k' c_A c_B \exp\left(-\frac{E}{R\mathcal{G}}\right) \quad (4.30)$$

pričom nový koeficient k' sa vypočíta pomocou regresnej analýzy v "statike", ktorej výsledkom je vzťah pre jeho výpočet

$$2k' c_B = \frac{\sum_i \left(\frac{r(c_A, c_B, \mathcal{G})_i c_{A,i}}{\exp\left(\frac{E}{R\mathcal{G}_i}\right)} \right)}{\sum_i \left(\frac{c_{A,i}^2}{\exp\left(\frac{2E}{R\mathcal{G}_i}\right)} \right)} \quad (4.31)$$

Údaje, ktoré sa použili pre výpočet k' , sú z celého pracovného rozsahu reaktora voči možnému intervalu prietoku chladiaceho média, ale pri dodržaní ostatných hodnôt parametrov ako uvádzajú tabuľky 1 až 3.

Redukcia stavovej veličiny je založená na úvahe náhrady telesa chladiaceho hada a jeho náplne, čiže chladiaceho média, časťou objemu reakčnej zmesi na základe jej špecifickej tepelnej kapacity. V konečnom dôsledku je teda potrebné uvažovať nový objem reakčnej zmesi, ktorý sa označí ako pseudoobjem V_p . Posledným krokom je nahradenie vzťahu pre teplo polynómom, ktoré sa vymení medzi reakčnou zmesou a chladiacim médiom.

Koeficienty polynómu sa určia pomocou regresnej analýzy v "statike", pričom je potrebné už uvažovať hodnotu pseudoobjemu V_p . Člen, ktorého náhrada bude prevedená je v tvare

$$f = \frac{A\alpha}{C_p V \rho} (\mathcal{G} - \mathcal{G}_{CH}) \quad (4.32)$$

a člen, pomocou ktorého sa vykoná náhrada má tvar

$$f' = \frac{k_{1CH}q_{CH} + k_{2CH}q_{CH}^2}{C_p V_p \rho} (\vartheta - \vartheta_{CHV}) \quad (4.33)$$

Regresia sa vykonáva s rôznymi hodnotami pseudoobjemu V_p , ktorý ovplyvňuje hodnoty koeficientov k_{1CH} a k_{2CH} . Po ich získaní sa vypočíta na definovanom časovom intervale a pracovnom intervale chladiaceho média medzikrivková plocha, a na základe nej sa stanoví optimálna hodnota pseudoobjemu.

Koeficienty k_{1CH} a k_{2CH} sa vypočítajú riešením sústavy lineárnych algebraických rovníc

$$\begin{bmatrix} k_{1CH} \\ k_{2CH} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i e_i q_{CH,i}^3 & \sum_i e_i q_{CH,i}^4 \\ \sum_i e_i q_{CH,i}^2 & \sum_i e_i q_{CH,i}^3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum_i e_i f_i q_{CH,i}^2 \\ \sum_i e_i f_i q_{CH,i} \end{bmatrix} \quad (4.34)$$

kde

$$e_i = \frac{1}{C_p V_p \rho} (\vartheta_i - \vartheta_{CHV,i}) \quad (4.35)$$

Údaje, ktoré sa použili pre výpočet koeficientov, sú z celého pracovného rozsahu reaktora voči možnému intervalu prietoku chladiaceho média, ale pri dodržaní ostatných hodnôt parametrov ako sa to uvádza v tabuľkách 4.1 až 4.3.

Takýmto spôsobom sa získa nový nelineárny matematický model reaktora (4.10) a (4.11).

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{1}{V} (q_A c_{AV} - (q_A + q_B) c_A) - r(c_A, c_B, \vartheta) \quad (4.36)$$

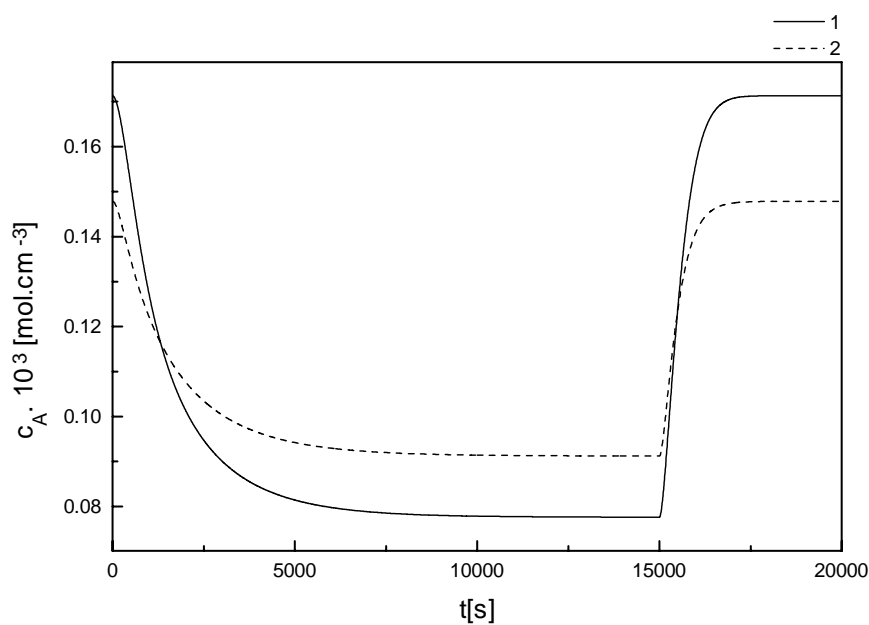
$$\begin{aligned} \frac{d\vartheta}{dt} = & \frac{(-\Delta H)r(c_A, c_B, \vartheta)V}{C_p V_p \rho} + \frac{q_A + q_B}{V_p} (\vartheta_V - \vartheta) - \\ & - \frac{k_{1CH}q_{CH} + k_{2CH}q_{CH}^2}{C_p V_p \rho} (\vartheta - \vartheta_{CHV}) - \frac{k_S A \alpha}{C_p V_p \rho} (\vartheta - \vartheta_{OUT}) \end{aligned} \quad (4.37)$$

kde r je nová funkcia pre reakčnú rýchlosť definovaná vzt'ahom (4.30).

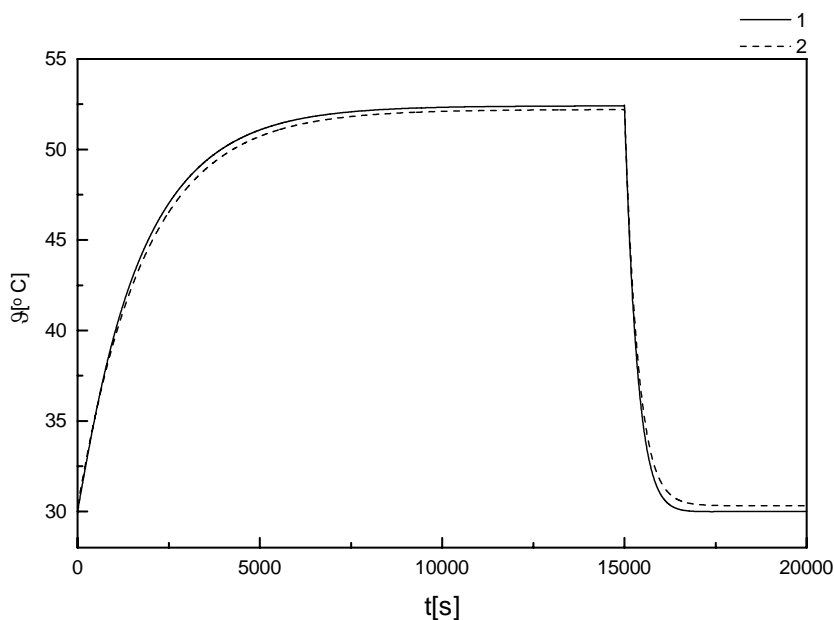
Tabuľka 4.4 Nové hodnoty parametrov, vystupujúce v modeli definovanom vzťahmi (4.36) a (4.37).

Veličina	Hodnota	Rozmer
k	$9,0883 \cdot 10^6$	$[\text{mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}]$
k_{1CH}	4,4256	$[\text{W} \cdot \text{s} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}]$
k_{2CH}	-0,1407	$[\text{W} \cdot \text{s}^2 \cdot \text{cm}^{-6} \cdot \text{K}^{-1}]$
V_P	1000	$[\text{cm}^3]$

Porovnanie modelu s tromi a dvomi stavovými veličinami je na obrázkoch 4.4 a 4.5. Príslušné prechodové charakteristiky sa získali pre maximálnu zmenu prietoku chladiaceho média.



Obr. 4.4 Prechodová charakteristika z dolného ustáleného stavu do horného a v čase 15000s prechod opačným smerom (1 – model s dvomi stavovými veličinami, 2 – model s tromi stavovými veličinami).



Obr. 4.5 Prechodová charakteristika z dolného ustáleného stavu do horného a v čase 15000s prechod opačným smerom (1 – model s dvomi stavovými veličinami, 2 – model s tromi stavovými veličinami).

Tabuľka 4.5 Hodnoty stavových veličín v dolnom ustálenom stave.

Model s tromi stavovými veličinami	Model s dvomi stavovými veličinami
$c_A = 1,4784 \cdot 10^{-4} \text{ [mol.cm}^{-3}\text{]}$	$c_A = 1.7129 \cdot 10^{-4} \text{ [mol.cm}^{-3}\text{]}$
$\vartheta = 303,4693 \text{ [K]}$	$\vartheta = 303,1482 \text{ [K]}$
$\vartheta_{CH} = 303,0571 \text{ [K]}$	

Tabuľka 4.6 Hodnoty stavových veličín v hornom ustálenom stave.

Model s tromi stavovými veličinami	Model s dvomi stavovými veličinami
$c_A = 9,1236 \cdot 10^{-5} \text{ [mol.cm}^{-3}\text{]}$	$c_A = 7,7634 \cdot 10^{-5} \text{ [mol.cm}^{-3}\text{]}$
$\vartheta = 325,35 \text{ [K]}$	$\vartheta = 325,5575 \text{ [K]}$
$\vartheta_{CH} = 325,35 \text{ [K]}$	

Medzikrivková plocha charakterizujúca rozdiel pre koncentráciu sa definovanuje

$$IAE_c = \int_0^{20000} abs(c_{A_3} - c_{A_2}) dt \quad (4.38)$$

kde

c_{A_3} - hodnota koncentrácie peroxidu vodíka v reakčnej zmesi, vypočítaná pomocou modelu s tromi stavovými veličinami [$\text{mol} \cdot \text{cm}^{-3}$]

c_{A_2} - hodnota koncentrácie peroxidu vodíka v reakčnej zmesi, vypočítaná pomocou modelu s dvomi stavovými veličinami [$\text{mol} \cdot \text{cm}^{-3}$]

$$IAE_c = 0,28568 [\text{mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}].$$

Integrál krivky tvorenej hodnotami c_{A_3} má hodnotu 2,1732. IAE_c nadobúda 13,15 % tejto hodnoty.

Medzikrivková plocha charakterizujúca rozdiel pre teplotu je definovaná

$$IAE_g = \int_0^{20000} abs(\vartheta_3 - \vartheta_2) dt \quad (4.39)$$

kde

ϑ_3 - hodnota teploty reakčnej zmesi, vypočítaná pomocou modelu s tromi stavovými veličinami [K]

ϑ_2 - hodnota teploty reakčnej zmesi, vypočítaná pomocou modelu s dvomi stavovými veličinami [K]

$$IAE_g = 6495,54779 [\text{K} \cdot \text{s}].$$

Integrál krivky tvorenej hodnotami ϑ_3 má hodnotu 902045,8329. IAE_g nadobúda 0,72% tejto hodnoty.

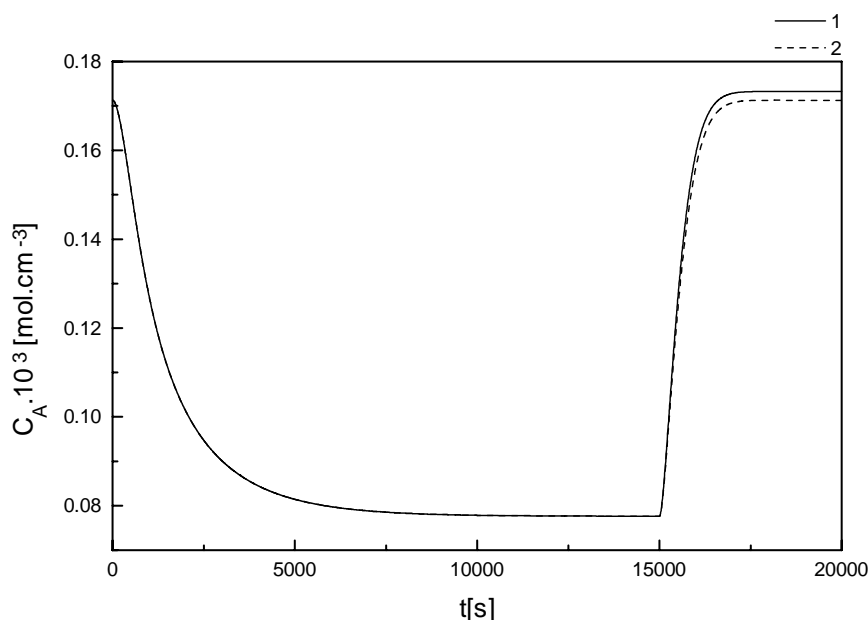
Z obrázkov 4.4 a 4.5, z hodnôt IAE_c a IAE_g vyplýva, že redukovaný model reaktora s dvomi stavovými veličinami je možné používať ako náhradu modelu s tromi stavovými veličinami, pretože z hľadiska riadenia je jeho presnosť postačujúca.

Ak je potrebné zväčšiť presnosť redukovaného modelu, je to možné v prípade, keď uvedená regresia bude prevádzaná v okolí definovaného pracovného bodu, pre ktoré je zároveň charakterizovaný užší interval prietoku chladiaceho média.

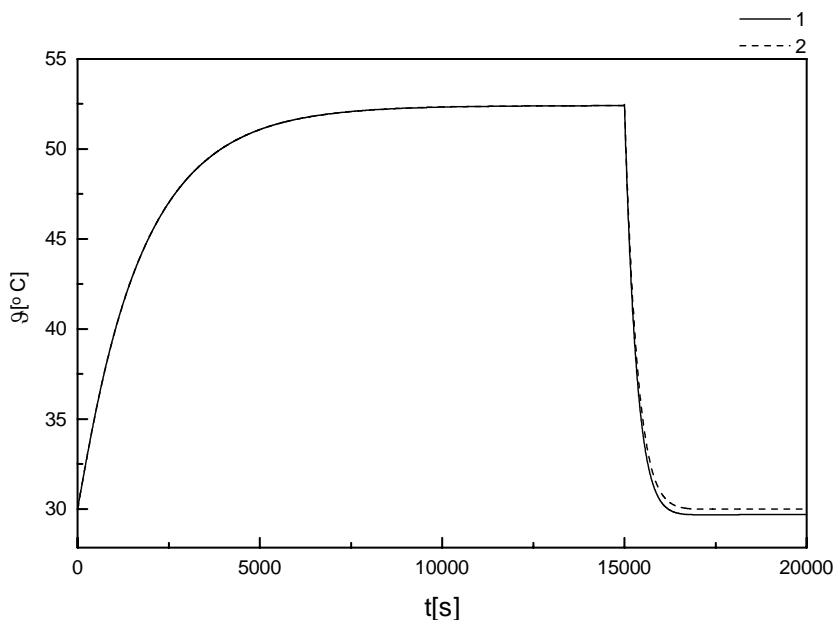
Ďalšie zjednodušenie modelu s dvomi stavovými veličinami je možné tak, že koeficient polynómu k_{2CH} vo vzťahu (4.8) sa zanedbá. Toto je možné vykonať na základe znalosti maximálnej hodnoty, ktorou daný koeficient prispieva k celkovej hodnote polynómu, pri maximálnom prietoku chladiča q_{CH} . Pri $q_{CH} = 140 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1} = 2,33 \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, dosiahne polynóm hodnotu

$$k_{1CH}q_{CH} + k_{2CH}q_{CH}^2 = 4,4256 \cdot 2,33 - 0,1407 \cdot (2,33)^2 = 10,3116 - 0,7638 = 9,5478 \text{ [I]} \quad (4.40)$$

Hodnota kvadratického príspevku ovplyvní výsledok o 8%. Na obrázkoch 6 a 7 je porovnanie modelov s dvomi stavovými veličinami s kvadratickou a bez kvadratickej zložky, ktorá vystupuje vo vzťahu (4.33).



Obr. 4.6 PCH z dolného ustáleného stavu do horného a v čase 15000s prechod opačným smerom (1 -model s kvadratickou zložkou, 2 - model bez kvadratickej zložky).



Obr. 4.7 PCH z dolného ustáleného stavu do horného a v čase 15000s prechod opačným smerom (1 - model s kvadratickou zložkou, 2 - model bez kvadratickej zložky).

Rozdiel sa prejaví len pri prechode z horného ustáleného stavu do dolného, čo zodpovedá $q_{CH} \neq 0 = 140 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$. Ako vyplýva z obrázkov 4.6 a 4.7, tento rozdiel je prakticky zanedbateľný a preto je možné použitie modelu s dvomi stavovými veličinami so zanedbaním kvadratického členu vo vzťahu (4.8) z hľadiska riadenia.

4.5 Linearizovaný matematický model

Po linearizácii modelu s dvomi stavovými veličinami, opísaného rovnicami (4.36) a (4.37) sa získa

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{Ax} + \mathbf{Bu} \\ \mathbf{y} &= \mathbf{Cx}, \end{aligned} \quad (4.41)$$

kde

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2), x_1 = c_A - c_A^s, x_2 = g - g^s, u = q_{CH} - q_{CH}^s, \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 \\ b \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

Ak výstupnou veličinou bude len teplota reakčnej zmesi ϑ , potom

$$y = x_2 \Rightarrow \mathbf{C} = [0 \quad 1] \quad (4.43)$$

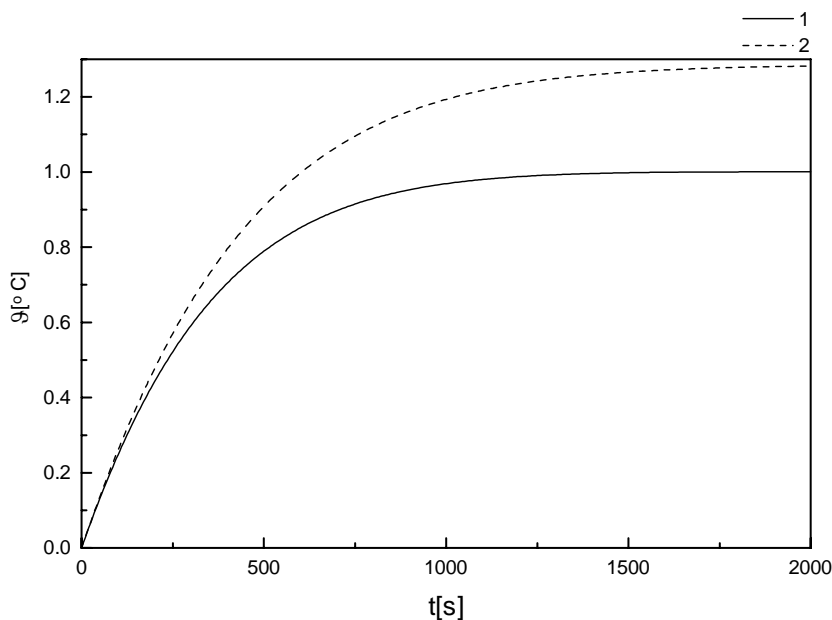
pričom hodnoty prvkov matíc \mathbf{A} a \mathbf{B} sú definované

$$a_{11} = -\frac{q_A + q_B}{V} - \frac{2kc_B}{\exp\left(\frac{g}{g^s}\right)}, \quad a_{12} = -\frac{2gkc_A^s c_B}{\exp\left(\frac{g}{g^s}\right)(g^s)^2}, \quad a_{21} = \frac{2(-\Delta H)kVc_B}{C_p V_p r \exp\left(\frac{g}{g^s}\right)},$$

$$a_{22} = -\frac{q_A + q_B}{V_p} - \frac{k_s A \alpha}{C_p V_p \rho} - \frac{k_{1CH} q_{CH}^s + k_{2CH} (q_{CH}^s)^2}{C_p V_p \rho} + \frac{2g(-\Delta H)kVc_A^s c_B}{C_p V_p \rho (g^s)^2 \exp\left(\frac{g}{g^s}\right)}, \quad (4.44)$$

$$b = \frac{k_{1CH} + 2k_{2CH} q_{CH}^s}{C_p V_p \rho} (g_{CHV} - g^s), \quad g = \frac{E}{R}$$

Porovnanie nelineárneho modelu s linearizovaným je v okolí dolného ustáleného stavu, ako je vidieť z obrázku 4.8. Prietok chladiva bol zmenený zo 140 na 102,9927 $\text{cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$, čo zodpovedá zmene teploty o 1 °C v prípade linearizovaného modelu a cca 1,3 °C pre nelineárny model.



Obr. 4.8 Prechodová charakteristika z dolného ustáleného stavu (1 - linearizovaný, 2 - nelineárny model).

Z obrázkov 4.4, 4.5 respektíve 4.6, 4.7 a 4.8, vyplýva niekoľko dôležitých záverov, ktoré sú zaujímavé z hľadiska riadenia:

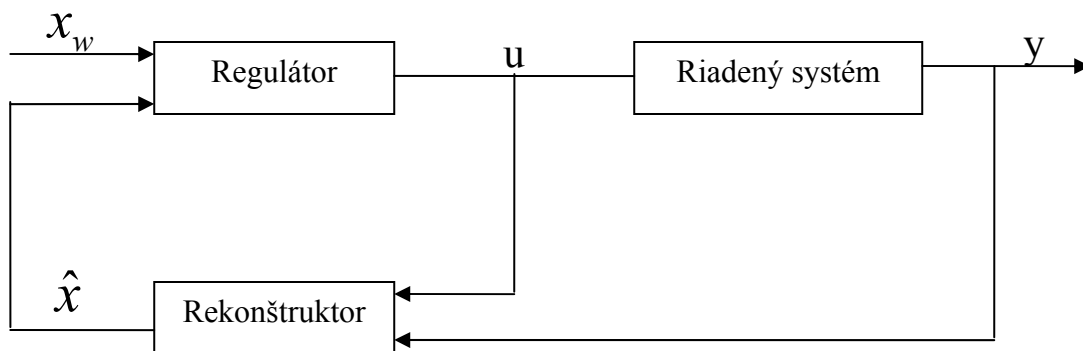
1. Systém má rôzne časové konštanty pri prechode z dolného ustáleného stavu do horného a z horného ustáleného stavu do dolného.
2. Zjednodušený model s dvomi stavovými veličinami reaktora je možné použiť ako náhradu modelu s tromi stavovými veličinami.
3. Linearizovaný model je možné použiť len pre veľmi blízke okolie ustáleného stavu.

Porovnanie modelu reaktora s tromi stavovými veličinami s experimentálnymi údajmi je v práci [2].

5. ODHAD STAVU POMOCOU KALMANOVHO FILTRA

5.1. Odhad stavu

Deterministický odhad stavu systému sa dá realizovať pomocou „rekonštruktora“. Rekonštruktor je dynamický systém, ktorý rekonštruuje stav deterministického systému, t.j. systému bez významnejšieho šumu a bez významnejšej chyby merania. Rekonštruktor sa používa na rekonštrukciu vektora stavových veličín $x(t)$ na základe nameraného vektora výstupných veličín $y(t)$ a vektora vstupných veličín $u(t)$ [4].



Obr. 5.1 Systém automatického riadenia s deterministickým odhadom stavu

Na obrázku 5.1 sa dá ukázať ako sa využíva odhadnutý stav \hat{x} deterministického systému pri automatickom riadení. Pričom x_w je vektor žiadaných stavových veličín.

Vlastnosti rekonštruktora pre lineárny deterministický systém

$$\frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + Bu(t) \quad (5.1)$$

$$y(t) = Cx(t) \quad (5.2)$$

Vektor x má n zložiek, vektor y má r zložiek a vektor u má m zložiek. Predpokladá sa, že náš skúmaný systém je pozorovateľný. Rekonštruktor sa dá popísať rovnicou

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \hat{A}\hat{x}(t) + \hat{B}u(t) + K_d y(t) \quad (5.3)$$

Rád systému (5.3) sa zhoduje s rádom systému (5.1). Otázkou je ako voliť matice \hat{A} , \hat{B} a K_d aby chyba rekonštrukcie

$$e(t) = x(t) - \hat{x}(t) \quad (5.4)$$

pri ľubovoľných začiatočných podmienkach išla asymptoticky k nule.

Odpočítaním rovnice (5.3) od rovnice (5.1) sa dostane

$$\frac{dx(t)}{dt} = \hat{A}x(t) + (A - \hat{A})x(t) + Bu(t) \quad (5.5)$$

$$-\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = -\hat{A}\hat{x}(t) - K_d Cx(t) - \hat{B}u(t) \quad (5.6)$$

$$\frac{de(t)}{dt} = \hat{A}e(t) + (A - \hat{A} - K_d C)x(t) + (B - \hat{B})u(t) \quad (5.7)$$

Ak platí

$$B = \hat{B} \quad (5.8)$$

$$\hat{A} = A - K_d C \quad (5.9)$$

potom rovnica (5.7) nadobudne tvar

$$\frac{de(t)}{dt} = \hat{A}e(t) = (A - K_d C)e(t) \quad (5.10)$$

Chyba rekonštrukcie $e(t)$ sa blíži asymptoticky k nule pri ľubovoľných začiatočných podmienkach vtedy, keď vlastné hodnoty matice $A - K_d C$ majú zápornú reálnu časť. Toto je možné splniť vhodnou voľbou matice K_d .

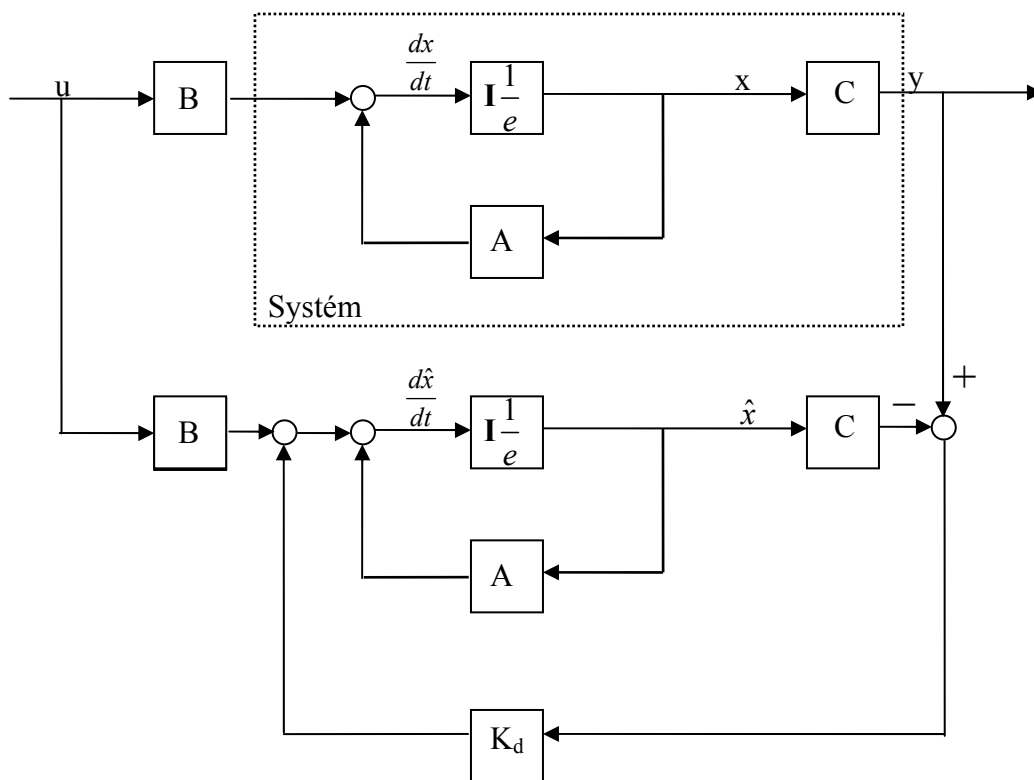
Rovnica rekonštruktora na základe vyššie uvedeného teraz bude

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = (A - K_d C)\hat{x}(t) + Bu(t) + K_d y(t) \quad (5.11)$$

Je vhodné dodať, že matice systému vo vzťahoch (5.10) a (5.11) sú totožné. Rovnica (5.11) sa teraz môže prepísať do tvaru

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = A\hat{x}(t) + Bu(t) + K_d [y(t) - C\hat{x}(t)] \quad (5.12)$$

a návrh rekonštruktora spočíva vo voľbe matice K_d .



Obr. 5.2 Bloková schéma lineárneho spojitého systému s konštantnými koeficientmi a zodpovedajúcim rekonštruktorom

Znalosť odhadu stavu $\hat{x}(t)$ umožňuje použiť regulátor

$$u = u[\hat{x}(t)] \quad (5.13)$$

ktorý pôsobí jednak na skutočný systém, jednak na jeho model, ktorý je korigovaný na základe chyby rekonštrukcie.

5.2 Optimálny odhad stavu

Ak na systém pôsobia náhodné vstupy potom výsledkom odhadu stavu bude Kalmanov filter, ktorý je hlavným praktickým výsledkom teórie optimálneho odhadu. Bez straty na všeobecnosti sa predpokladá, že na systém pôsobí biely šum. Totiž skutočný náhodný vstup je možné vždy vyjadriť ako výstup lineárneho filtra, na ktorého vstupe pôsobí biely šum. Optimálny odhad stavu v Kalmanovom zmysle bol mnohokrát publikovaný. [9], [10], [15]

Zavedie sa systém

$$\frac{dx(t)}{dt} = A(t)x(t) + \xi(t) \quad (5.14)$$

$$x(0) = x_0 + \xi_0 \quad (5.15)$$

$$y(t) = C(t)x(t) + \eta(t) \quad (5.16)$$

kde

x je vektor stavových veličín rozmeru n ,

y - vektor výstupných veličín rozmeru r ,

ξ - vektor náhodných procesov na vstupe systému rozmeru n ,

x_0 - odhad začiatočného stavu,

ξ_0 - náhodná chyba odhadu začiatočného stavu,

A, C - matice konštánt príslušných rozmerov,

η - vektor náhodných chýb merania rozmeru r .

Predpokladá sa, že náhodné procesy $\xi(t), \eta(t)$ sú Gaussove biele šумы navzájom nekorelované a nekorelované so začiatočným stavom.

Predpokladá sa platnosť nasledovných vzťahov:

$$\begin{aligned} E\{\xi(t)\} &= 0, & E\{\xi(t)[\xi(\tau)^T]\} &= R(t)\delta(t-\tau) \\ E\{\xi(t)\} &= 0, & E\{(x_0 - x(0))(x_0 - x(0))^T\} &= P_0 \\ E\{\xi(t)\} &= 0, & E\{\eta(t)[\eta(\tau)^T]\} &= Q(t)\delta(t-\tau) \end{aligned} \quad (5.17)$$

Úlohou je nájsť optimálny odhad stavu tak, aby funkcionál

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{2} [x(0) - x_0]^T P_0^{-1} [x(0) - x_0] \\ &+ \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} [(x - A(t)x)^T R(t)^{-1} (x - A(t)x + (y - C(t)x)^T Q^{-1}(t)(y - C(t)x)] dt \end{aligned} \quad (5.18)$$

bol minimálny. Tento problém sa môže považovať za problém deterministického optimálneho riadenia ak sa definuje riadenie ako

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + u(t) \quad (5.19)$$

a funkcionál J sa prepíše do tvaru

$$J = \frac{1}{2}[x(0) - x_0]^T P_0^{-1}[x(0) - x_0] + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} [u^T R^{-1}(t)u + (y - C(t)x)^T Q^{-1}(t)(y - C(t)x)] dt \quad (5.20)$$

Po preformulovaní úloha hľadania optimálneho stavu spočíva v nájdení takého $u(t)$, aby funkcionál J podľa rovnice (5.20) bol minimálny, pričom musí platiť vzťah

$$\dot{x}(t) = A(t)x(t) + u(t) \quad (5.21)$$

Hamiltonián pre sformulovanú úlohu optimalizácie je

$$H = \frac{1}{2}[u^T R^{-1}u + (y - Cx)^T Q^{-1}(t)(y - Cx)] + \lambda^T (Ax + u) \quad (5.22)$$

Z podmienky

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 \quad (5.23)$$

vyplýva, že

$$u(t) = -R(t)\lambda(t) \quad (5.24)$$

kde

$$\dot{\lambda} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -C^T Q^{-1}Cx + C^T Q^{-1}y - A^T \lambda \quad (5.25)$$

Z podmienky transversality pre voľné $x(0)$ a $x(t_f)$ vyplývajú dve okrajové podmienky

pre λ v tvare

$$x(0) = x_0 - P_0 \gamma(0) \quad (5.26)$$

$$\lambda(t_f) = 0 \quad (5.27)$$

Ak sa označí optimálny odhad a riadenie v čase t s údajmi $y(t)$ do času t_f pomocou

$$\hat{x}(t/t_f), \hat{u}(t/t_f) \quad (5.28)$$

Problém filtrácie je určený optimálnym odhadom v koncovom čase s danými údajmi do

tohto času. Optimálny filtrovaný odhad a riadenie sa označuje pomocou

$$\hat{x}(t_f / t_f), \hat{u}(t_f / t_f) \quad (5.29)$$

Optimálny odhad je daný vzťahom (5.21) so zákonom optimálneho riadenia (5.24)

$$\hat{x}(t / t_f) = A(t)\hat{x}(t / t_f) - R(t)\lambda(t) \quad (5.30)$$

Ďalej sa zavedie transformácia

$$\hat{x}(t / t_f) = z(t) - P(t)\lambda(t) \quad (5.31)$$

pričom $z(t)$ je vektor rozmeru n a $P(t)$ je matica rozmeru $n \times n$, ktoré treba určiť.

Dosadením (5.31) do (5.30) sa dostane

$$\dot{z} - P\dot{\lambda} - P\dot{A}z = A[z - P\lambda] - R\lambda \quad (5.32)$$

S využitím rovnice (5.25) a (5.31) rovnica (5.32) bude

$$\dot{z} - P\dot{\lambda} - P[-C^T Q^{-1} C(z - P\lambda) + C^T Q^{-1} y - A^T \lambda] = A[z - P\lambda] - R\lambda \quad (5.33)$$

resp.

$$\dot{z} - PC^T Q^{-1}(y - Cz) - Az = [P\dot{A} + PC^T Q^{-1} CP - PA^T - AP - R]\lambda \quad (5.34)$$

Táto rovnica je splnená vtedy, ak platí

$$\dot{z} - PC^T Q^{-1}(y - Cz) + Az \quad (5.35)$$

$$P\dot{A} - PC^T Q^{-1} CP + PA^T + AP + R \quad (5.36)$$

Zo začiatočnej podmienky transverzality a transformácie (5.31) vyplýva, že

$$z(0) = x_0 \quad (5.37)$$

$$P(0) = P_0 \quad (5.38)$$

V prípade problému filtrácie $\hat{x}(t_f / t_f)$ je odhad založený na metóde najmenších štvorcov v čase t_f , ktorý je podmienený všetkými dátami do času t_f . Z koncovej podmienky transverzality (5.27) vyplýva, že v čase $t = t_f$ je $\lambda(t_f) = 0$. Na základe tohto pre dané t_f z transformácie (5.31) vyplýva, že

$$\hat{x}(t_f / t_f) \equiv z(t_f) \quad (5.39)$$

Filtrovaný odhad je teda určený rovnicou (5.35), pričom t je vždy aktuálny čas

$$\dot{\hat{x}}(t / t) = P(t)C^T(t)Q^{-1}(t)(y(t) - C(t)\hat{x}(t / t)) + A(t)\hat{x}(t / t) \quad (5.40)$$

pričom

$$\hat{x}(0/0) = x_0 \quad (5.41)$$

a matica $P(t)$ je daná rovnicou (5.36). **Rovnice (5.36) a (5.40) predstavujú rovnice Kalmanovho filtra.**

$$K(t) = P(t)C^T(t)Q^{-1}(t) \quad (5.42)$$

je zosilnenie Kalmanovho filtra. Ak sa zadefinuje chyba odhadu

$$e(t) = x(t) - \hat{x}(t/t) \quad (5.43)$$

potom pre

$$\mu_e = E\{e(t)\} \quad (5.44)$$

platí

$$\dot{\mu}_e(t) = (A - PC^TQ^{-1}C)\mu_e(t), \quad \mu_e(0) = 0 \quad (5.45)$$

$\mu_e(t)$ je identicky nulové, a preto odhad daný rovnicami (5.36) a (5.40) je neodchýlený.

Kovariancia chyby odhadu je

$$Cov_e(t, \tau) = E\{e(t)e^T(\tau)\} \quad (5.46)$$

a pre $t = \tau$ sa môže písať

$$Cov_e(t, \tau) = Cov_e(t) \quad (5.47)$$

Na základe vyššie uvedených vzťahov sa dá veľmi jednoducho ukázať, že

$$Cov_e(t) = P(t) \quad (5.48)$$

teda $P(t)$ je rozptylom chyby odhadu.

Poznámka 1: Existuje viac postupov na odvodenie rovníc diskrétného Kalmanovho filtra.

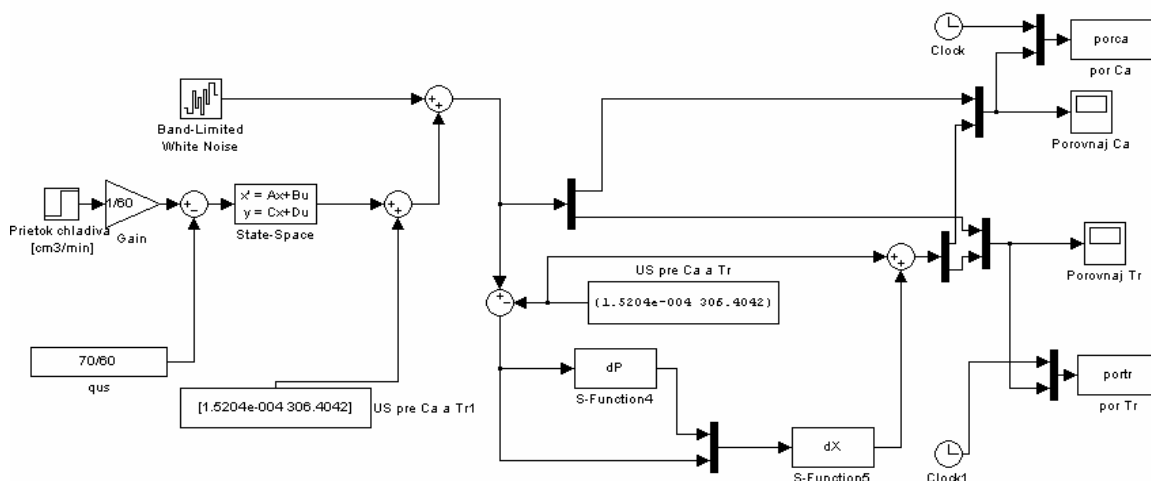
Poznámka 2: Kalmanova filtrácia sa môže výhodne použiť na sekvenčný odhad neznámych, alebo neurčitých parametrov modelu.[9], [10], [15]

6. REALIZÁCIA V PROSTREDÍ MATLAB

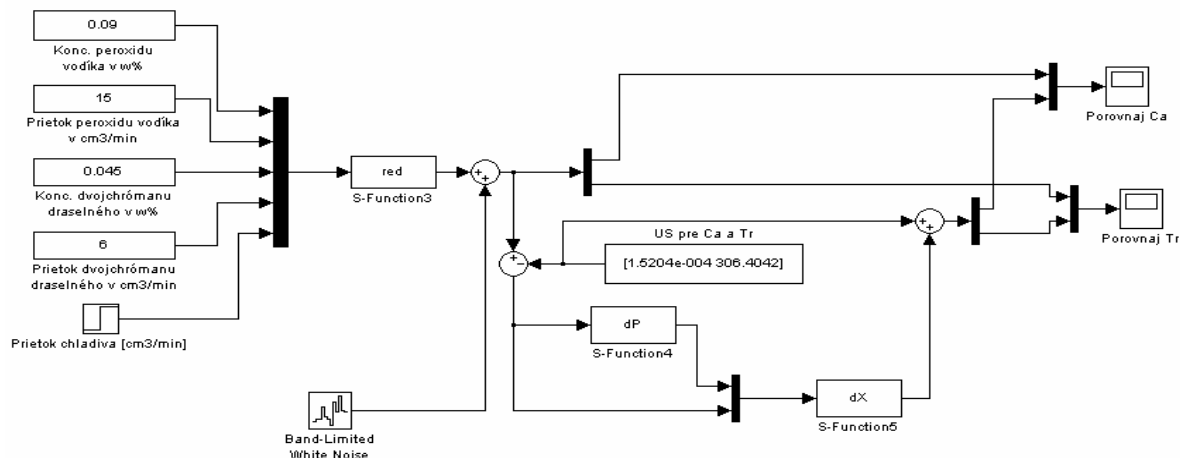
Matlab je vysokovýkonný integrovaný prostriedok pre technické výpočty. Je charakterizovaný integráciou výpočtov, vizualizáciou a programovaním v jednoduchom užívateľskom prostredí, kde problémy a riešenia sú vyjadrené bežnými matematickými zápsmi. Jedná sa o interaktívny systém, ktorého základným typom sú dvojrozmerné polia bez potreby deklarácie rozmeru. Táto jeho vlastnosť spolu s množstvom zabudovaných funkcií umožňuje riešenie mnohých technických problémov, špeciálne takých, ktoré vedú na vektorovú, alebo maticovú formuláciu, v omnoho kratších časoch ako riešenia v klasických programovacích jazykoch (C, C++, FORTRAN ...). Zahŕňa nasledovné oblasti:

- Matematické výpočty
- Vývojové prostriedky pre tvorbu algoritmov
- Modelovanie a simulácia
- Vizualizácia a analýza dát
- Vysoko výkonná 2D a 3D grafika
- Aplikačné prostriedky pre vytváranie grafického užívateľského prostredia[14]

Zostavenie algoritmu optimálneho odhadu stavu založenom na Kalmanovom filtri. Bol realizovaný v MATLAB Simulink-u (viď. Obr. 6.1, 6.2)



Obr.6.1 Simulačná schéma na odhad stavu z linearizovaného modelu



Obr.6.2 Simulačná schéma na odhad stavu z nelineárneho modelu

Rovnice Kalmanovho filtra boli algoritmicky rozdelené na dva bloky dP a dX. V prvom bloku dP sa realizuje výpočet prvej rovnice Kalmanovho filtra (5.36) v roznásobenom tvare a zápis zodpovedajúcej časti s-funkcie v Matlabe vyzerá takto

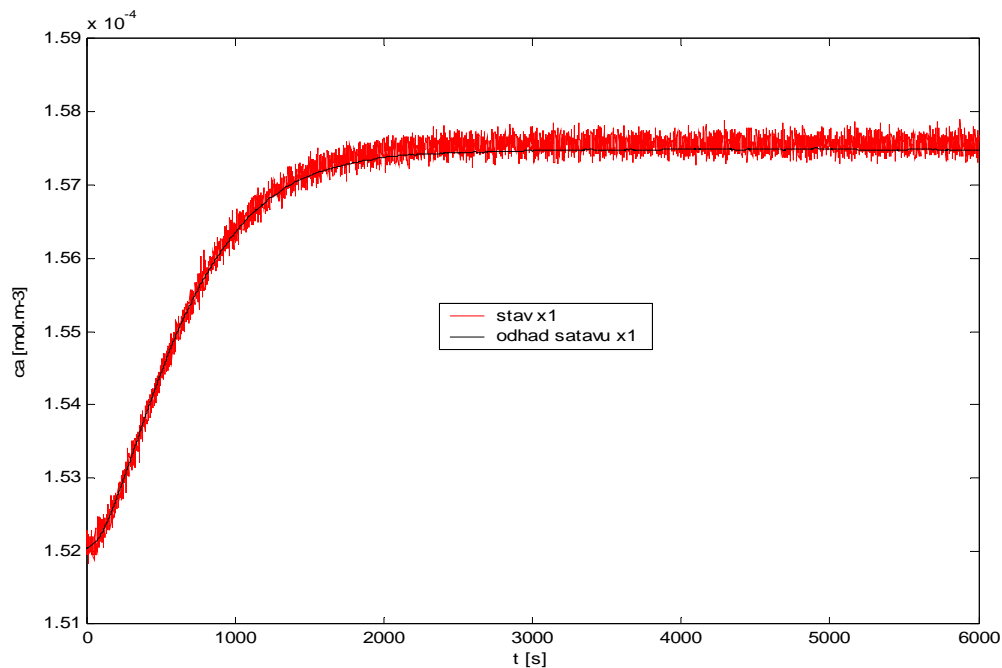
$$\begin{aligned} dx(1) &= -p11^2 * conj(c11) / q11 * c11 p12 * conj(c22) / q22 * c22 * p21 + p11 * conj(a11) + \\ &+ p12 * conj(a12) + a11 * p11 + a12 * p21 + r11; \\ dx(2) &= -p11 * conj(c11) / q11 * c11 * p12 p12 * conj(c22) / q22 * c22 * p22 + \\ &+ p11 * conj(a21) + p12 * conj(a22) + a11 * p12 + a12 * p22; \\ dx(3) &= -p21 * conj(c11) / q11 * c11 * p11 - p22 * conj(c22) / q22 * c22 * p21 + p21 * conj(a11) + \\ &+ p22 * conj(a12) + a21 * p11 + a22 * p21; \\ dx(4) &= -p21 * conj(c11) / q11 * c11 * p12 - p22^2 * conj(c22) / q22 * c22 + p21 * conj(a21) + \\ &+ p22 * conj(a22) + a21 * p12 + a22 * p22 + r22; \end{aligned}$$

V druhom bloku dX sa realizuje samotný odhad stavu vo vektorovom tvare (5.40) a zápis príslušného úseku s-funkcie v Matlabe vyzerá takto

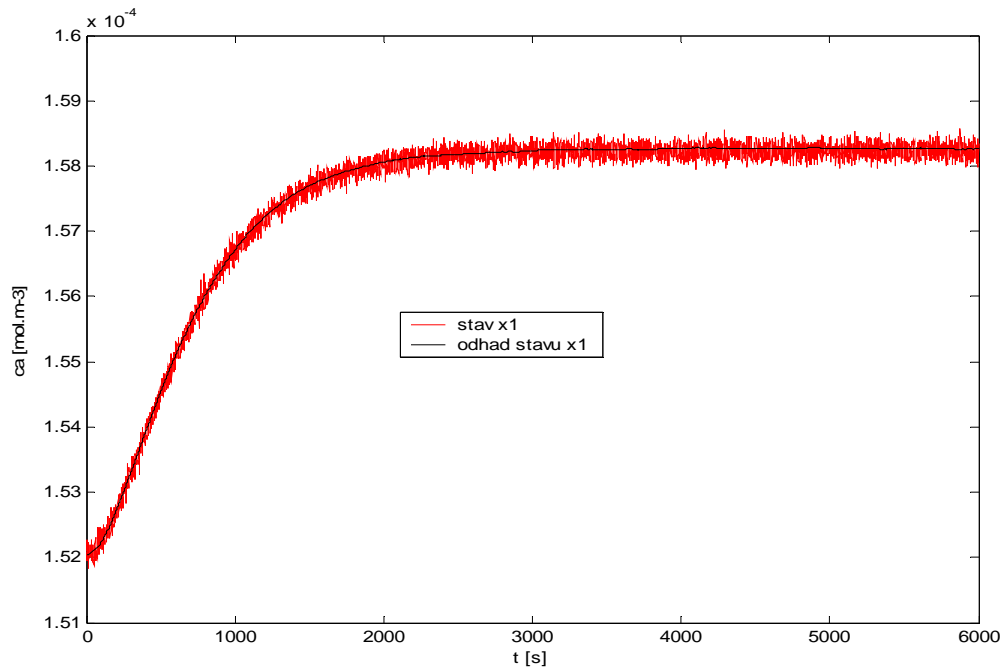
$$\begin{aligned} Y &= [u(8)]; \\ dx &= P * C' * inv(Q) * (Y - C * x) + A * x; \end{aligned}$$

Matica A, používaná v Kalmanovom filtri je konštantná a odvodená od US pre prietok chladiča $70 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$. Výstupnou veličinou, z testovaných systémov je ϑ – teplota reakčnej zmesi, ktorú používa algoritmická forma Kalmanovho filtra pre odhad koncentrácie peroxidu vodíka.

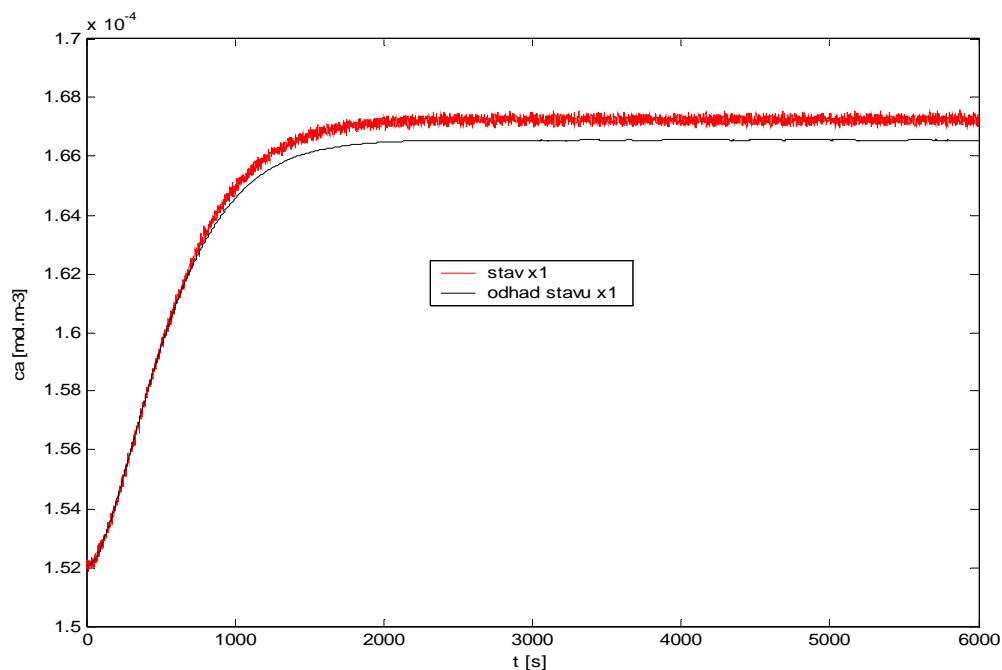
Optimálny odhad stavu bol realizovaný pre nelineárny a linearizovaný model (simulácie).



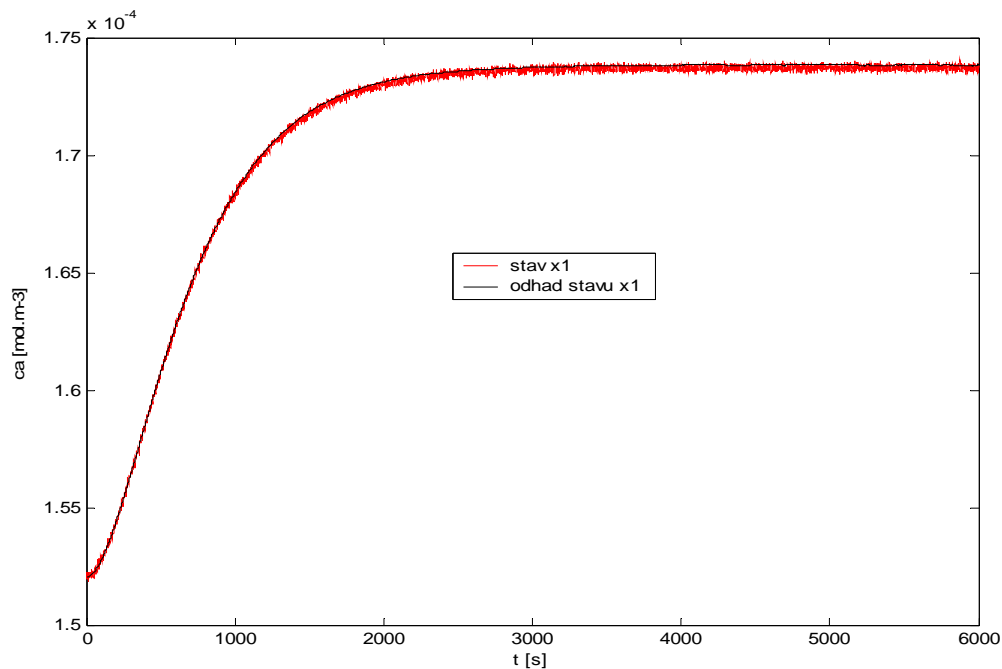
Obr.6.3 Odhad c_a na nelineárnom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 20%,
 $x_1 = c_A$)



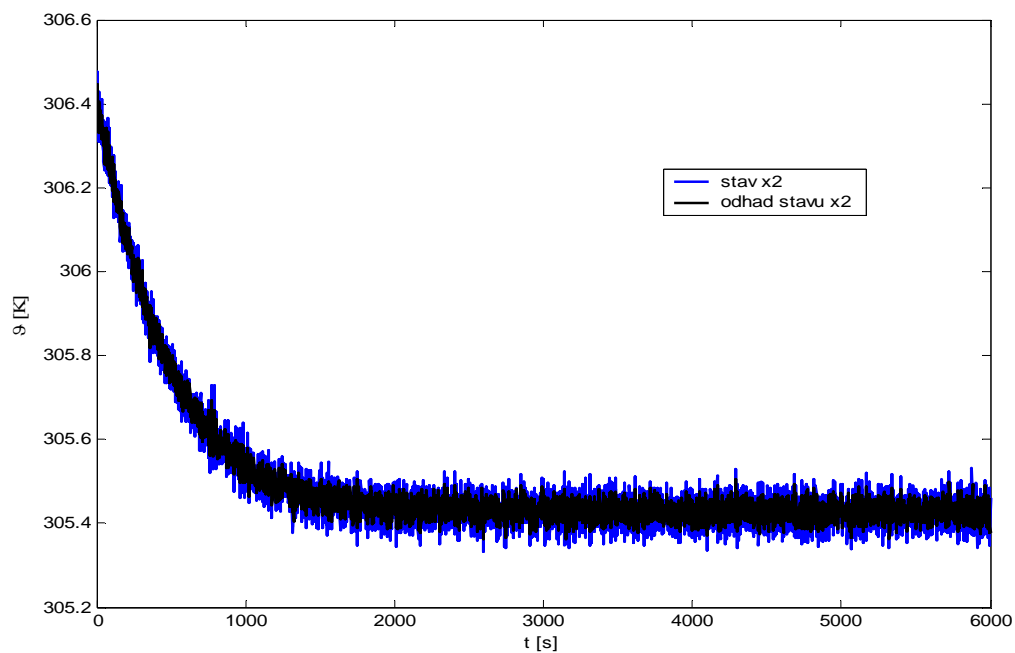
Obr.6.4 Odhad c_a na linearizovanom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 20%,
 $x_1 = c_A$)



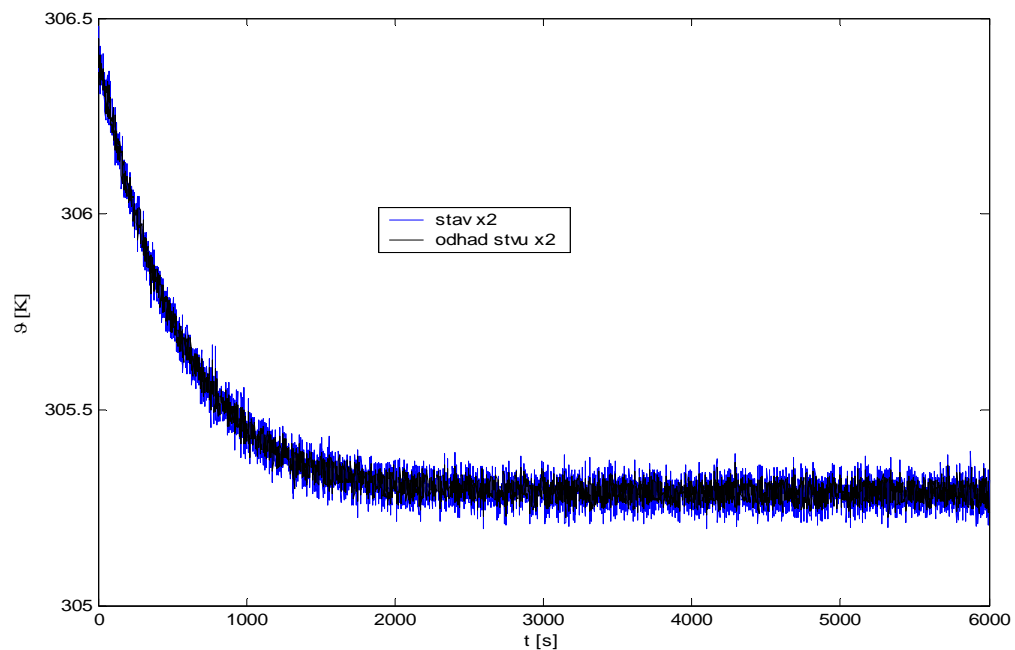
Obr.6.5 Odhad c_a na nelineárnom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 70%,
 $x_1 = c_A$)



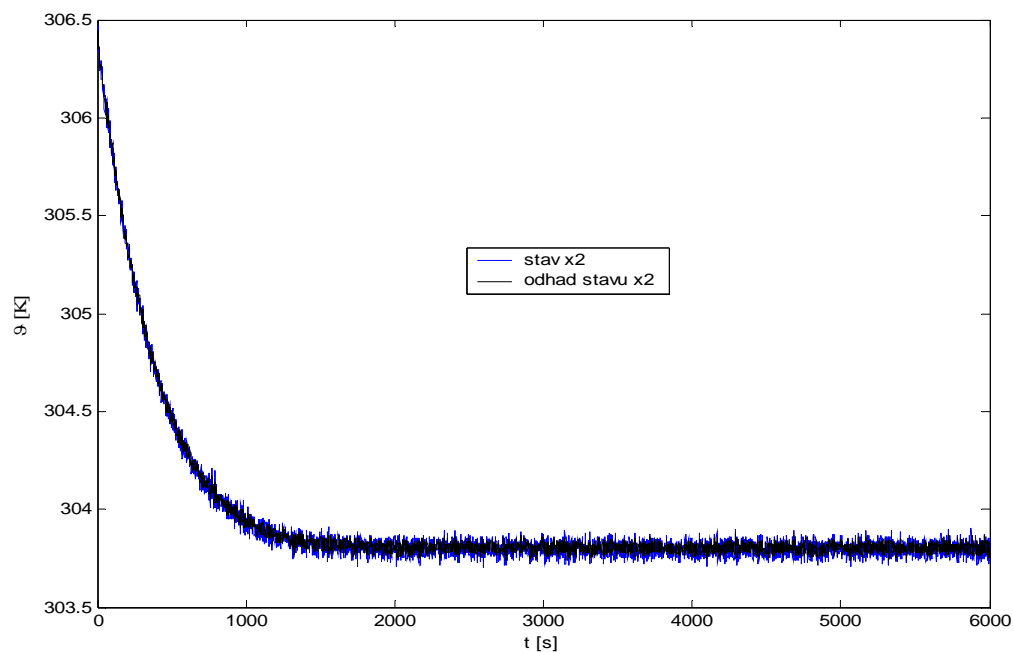
Obr.6.6 Odhad c_a na linearizovanom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 70%,
 $x_1 = c_A$)



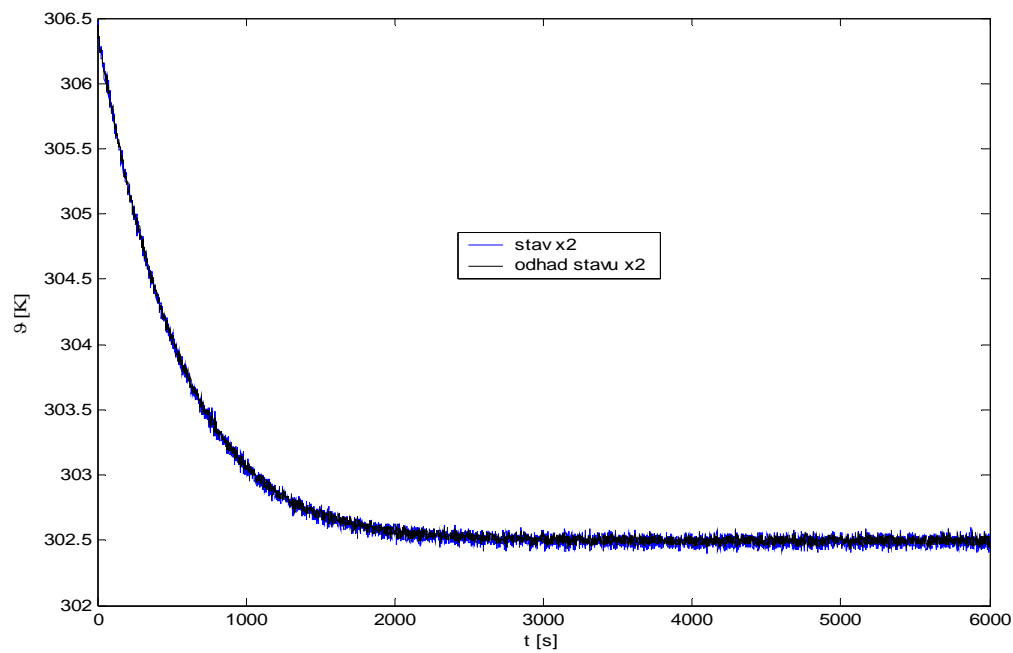
Obr.6.7 Odhad teploty na nelineárnom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 20%,
 $x_2 = \vartheta$)



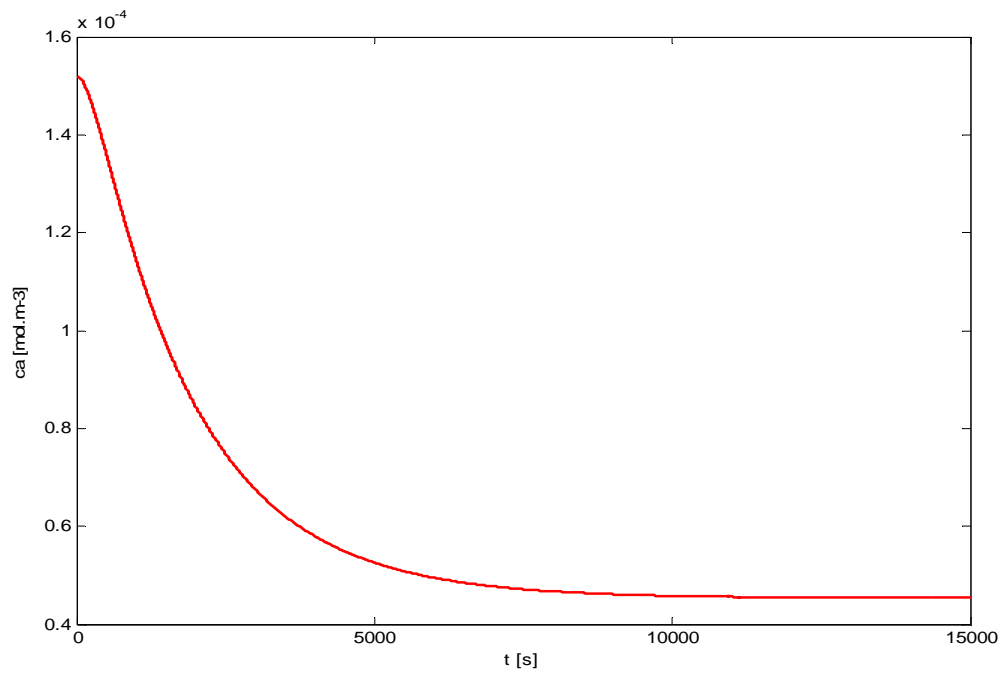
Obr.6.8 Odhad teploty na linearizovanom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 20%,
 $x_2 = \vartheta$)



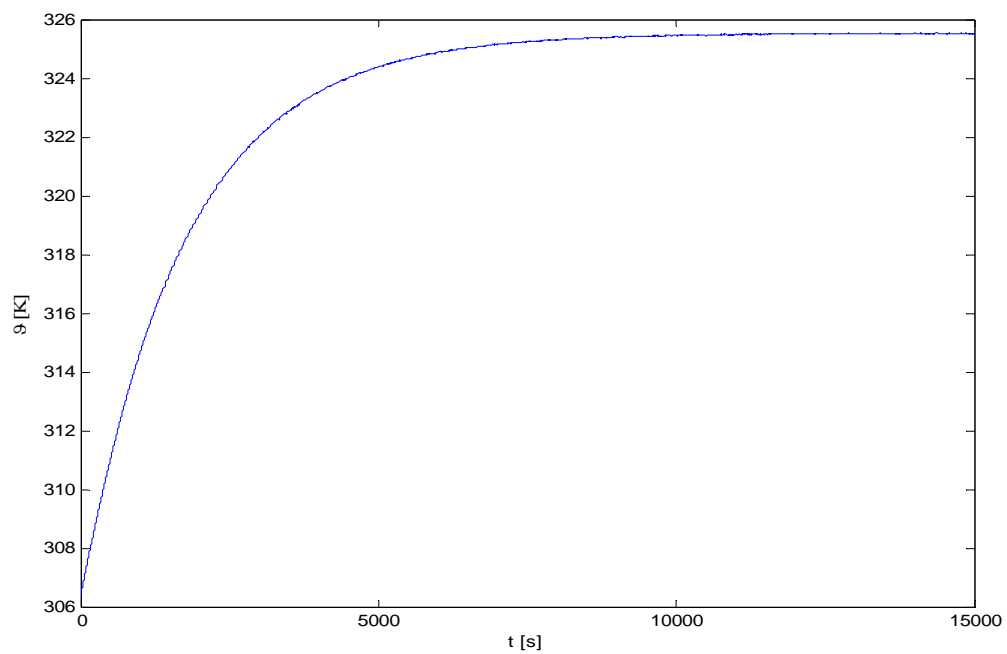
Obr.6.9 Odhad teploty na nelineárnom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 70%,
 $x_2 = \vartheta$)



Obr.6.10 Odhad teploty na linearizovanom MM (skoková zmena prietoku chladiva o 70%,
 $x_2 = \vartheta$)



Obr.6.11 Odhad koncentrácie peroxidu vodíka na laboratórnem CSTR



Obr.6.12 Odhad teploty na laboratórnem CSTR

7. ZÁVER

Chyba odhadu

$$e_{od} = \frac{|x_i(\infty) - \hat{x}_i(\infty)|}{x_i(\infty) - x_i(0)}$$

kde $x_i(\infty)$ je i -ta hodnota stavovej veličiny po ustálení, $\hat{x}_i(\infty)$ je odhad i -tej stavovej veličiny po ustálení a $x_i(0)$ označuje začiatočnú hodnotu i -tej stavovej veličiny.

Tabuľka 7.1 Hodnoty chýb odhadu stavu pre jednotlivé typy realizácie

Model	Odhadovaný parameter	Skoková zmena	Chyba [%]
<i>nelinárny</i>	c_A	20%	3,385
<i>nelinárny</i>	c_A	70%	7,378
<i>linearizovaný</i>	c_A	20%	1,334
<i>linearizovaný</i>	c_A	70%	0,917
<i>nelinárny</i>	ϑ	20%	5,275
<i>nelinárny</i>	ϑ	70%	2,064
<i>linearizovaný</i>	ϑ	20%	0,486
<i>linearizovaný</i>	ϑ	70%	2,027

Optimálny odhad stavu podľa Kalmana, ktorý sa aplikoval v tejto práci sa javí ako presný, pretože chyby odhadu stavu voči stavu získanému simuláciami nepresahujú hranicu 8 %. Môže sa konštatovať, že menšie odchýlky sú pri skokovej zmene 20% a pri odhade stavu aplikovanom na linearizovaný model CSTR. Táto skutočnosť sa dá vysvetliť tým, že boli použité rovnice Kalmanovho filtra odvodené pre lineárny systém.

8. LITERATÚRA

- [1] **A. Kotocova and T. Dugovicova (1997)** *Kinetics of a homogeneous decomposition of hydrogen peroxide*, Bc. thesis, CHTF STU Bratislava.
- [2] **A.M. Lyapunov (1892)** *The General Problem of Motion Stability*, In Russian, Translated to English, Ann. Math. Study, No 17, 1949, Princenton University Press, 1947.
- [3] **A.M. Lyapunov (1992)** *The General Problem of the Stability of Motion*, Lyapunov Centenary Issue, Ynt. J. Control, 55, 521.
- [4] **F. Jelenciak, J. Mikles, J. Dvoran , J. Dzivak (1999a)** *Analýza dynamických vlastností rozkladového chemického reaktora*, AT&P Journal 11/99.
- [5] **F. Jelenciak, J. Mikles, J. Dvoran, J. Dzivak (1999b)** *Analýza dynamických vlastností chemického reaktora z hľadiska riadenia*, Proceeding of the 26th Int. Conference of Slovak Society of Chemical Engineering '99, Demänovská dolina, 24.5-28.5.1999, pp. 113.
- [6] **H. Unbehauen and G.P. Rao (1987)** *Identification of Continuous Systems*, North-Holland Systems and Control Series, Vol. 10.
- [7] **J. Dzivak, J. Mikles, S. Kozka, F. Jelenciak, J. Dvoran (1999a)** *Model of a continuous stirred tank reactor*, Proceeding of the 12th Int. Conference Process Control '99, Tatranske Matliare, 31.5-3.6.1999, Vol. 1, pp. 155-157.
- [8] **J. Dzivak , J. Mikles, S. Kozka, F. Jelenciak, J. Dvoran (1999b)** *Model of a chemical reactor for decomposition reaction*, Selected Topics in Modelling and Control. Vol.2 , pp.87.

[9] **J. Mikles and M. Fikar (1999)** *Process Modeling, Identification and Control I*, STU Press, Bratislava.

[10] **M. Fikar and J. Mikles (1998)** *Identifikacia systemov*, STU Press, Bratislava.

[11] **R.E. Kalman and J.E Bertram (1960)** *Control Systems Analysis and Design via the "Second Method" of Lyapunov*, Journal of Basic Engineering, Vol. 82, 371-392.

[12] **S. Kozka, J. Mikles, L. Cirka, F. Jelenciak (1999)** *Identification of chemical reactor in closed-loop*, Proceeding of the 26th Int. Conference of Slovak Society of Chemical Engineering '99, Demänovská dolina, 24.5-28.5.1999, pp. 115.

[13] **M. Bafrnec, V. Bálež, I. Langfelder, J. Longauer (1999)** *Chemické inžinierstvo I*, MALÉ CENTRUM, Bratislava

[14] <http://www.mathworks.com>

[15] http://www.cs.unc.edu/~welch/media/pdf/Julier1997_SPIE_KF.pdf

9. PRÍLOHA



Laboratórny chemický prietokový reaktor s miešaním