MATEMATICKÉ MODELY VYBRANÝCH CHEMICKOTECHNOLOGICKÝCH PROCESOV

PROCESY
S AKUMULÁCIOU HMOTY

ZÁSOBNÍKY KVAPALINY ZAPOJENÉ SÉRIOVO

Dynamický matematický model (DMM)

- materiálová bilancia prietočného systému všeobecne

$$\begin{Bmatrix} \text{hmotnostné toky} \\ \text{do systému} \\ \text{vstupujúce} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \text{hmotnostné toky} \\ \text{zo systému} \\ \text{vystupujúce} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \text{rýchlosť akumulácie} \\ \text{hmotnosti} \\ \text{v systéme} \end{Bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix} \text{toky látkových} \\ \text{množstiev} \\ \text{do systému} \\ \text{vstupujúce} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \text{toky látkových} \\ \text{množstiev} \\ \text{zo systému} \\ \text{vystupujúce} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \text{rýchlosť akumulácie} \\ \text{látkového} \\ \text{množstva} \\ \text{v systéme} \end{Bmatrix}$$

- materiálová bilancia jednotlivých zásobníkov

$$\dot{m}_{v1}(t) = \dot{m}_1(t) + \frac{\mathrm{d}m_1(t)}{\mathrm{d}t} \qquad m_1(0) = m_{10}$$

$$\vdots$$

$$\dot{m}_{vi}(t) + \dot{m}_{i-1}(t) = \dot{m}_i(t) + \frac{\mathrm{d}m_i(t)}{\mathrm{d}t}, \quad i = 2,\ldots,n-1 \qquad m_i(0) = m_{i0}$$

$$\vdots$$

$$\dot{m}_{vn}(t) + \dot{m}_{n-1}(t) = \dot{m}_n(t) + \frac{\mathrm{d}m_n(t)}{\mathrm{d}t} \qquad m_n(0) = m_{n0}$$

- po vyjadrení

$$\dot{m}_{vi}(t) = q_{vi}(t)\rho$$

$$\dot{m}_i(t) = q_i(t)\rho$$

$$m_i(t) = V_i(t)\rho = S_i h_i(t)\rho$$

- za predpokladu, že hustota ρ je konštantná, dostaneme:

$$q_{v1}(t) = q_1(t) + S_1 \frac{\mathrm{d}h_1(t)}{\mathrm{d}t} \qquad h_1(0) = h_{10}$$

$$\vdots$$

$$q_{vi}(t) + q_{i-1}(t) = q_i(t) + S_i \frac{\mathrm{d}h_i(t)}{\mathrm{d}t}, \quad i = 2, \ldots, n-1 \qquad h_i(0) = h_{i0}$$

$$\vdots$$

$$q_{vn}(t) + q_{n-1}(t) = q_n(t) + \frac{\mathrm{d}h_n(t)}{\mathrm{d}t} \qquad h_n(0) = h_{n0}$$

- z Bernoulliho rovnice a rovnice kontinuity sa dá odvodiť

$$q_i(t) = k_{ii}\sqrt{h_i(t) - h_{i+1}(t)}$$

- DMM opisujúci vzťah medzi objemovými prietokmi vstupných nezávislých prúdov a výškami hladín v zásobníkoch

$$q_{v1}(t) = k_{11}\sqrt{h_1(t) - h_2(t)} + S_1 \frac{\mathrm{d}h_1(t)}{\mathrm{d}t} \qquad h_1(0) = h_{10}$$

$$\vdots$$

$$q_{vi}(t) + k_{i-1,i-1}\sqrt{h_{i-1}(t) - h_i(t)} = k_{ii}\sqrt{h_i(t) - h_{i+1}(t)} + S_i \frac{\mathrm{d}h_i(t)}{\mathrm{d}t} \qquad h_i(0) = h_{i0}$$

$$\vdots \qquad i = 2,\dots,n-1$$

$$q_{vn}(t) + k_{n-1,n-1}\sqrt{h_{n-1}(t) - h_n(t)} = k_{nn}\sqrt{h_n(t)} + S_n \frac{\mathrm{d}h_n(t)}{\mathrm{d}t} \qquad h_n(0) = h_{n0}$$

- DMM vo forme nelineárneho stavového opisu s deriváciami vľavo (tvar vhodný napr. pre vytvorenie s-funkcie)

$$\frac{\mathrm{d}h_1(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{S_1} q_{v1}(t) - \frac{k_{11}}{S_1}\sqrt{h_1(t) - h_2(t)} \qquad h_1(0) = h_{10}$$

$$\vdots$$

$$\frac{\mathrm{d}h_i(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{S_i} q_{vi}(t) + \frac{k_{i-1,i-1}}{S_i}\sqrt{h_{i-1}(t) - h_i(t)} - \frac{k_{ii}}{S_i}\sqrt{h_i(t) - h_{i+1}(t)} \qquad h_i(0) = h_{i0}$$

$$i = 2,\dots,n-1$$

$$\vdots$$

$$\frac{\mathrm{d}h_n(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{S_n} q_{vn}(t) + \frac{k_{n-1,n-1}}{S_n}\sqrt{h_{n-1}(t) - h_n(t)} - \frac{k_{nn}}{S_n}\sqrt{h_n(t)} \qquad h_n(0) = h_{n0}$$

Tieto rovnice tvoria rovnicu stavu (dynamiky), ktorá má pre stacionárne systémy všeobecne tvar

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}(t)}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t, \boldsymbol{u}(t))$$

- stavové veličiny: $h_1(t),\ldots, h_n(t)$
- vstupné veličiny: $q_{v1}(t),\ldots, q_{vn}(t)$

Výstupné veličiny sú tie, ktoré sa na procese sledujú a môžu byť definované rôzne:

- výstupné veličiny napr.:
  - $h_1(t),\ldots, h_n(t)$
  - $h_n(t)$
  - $q_n(t)$

Rovnica výstupu potom závisí od definície výstupných veličín, napr.:

1.
$$\begin{aligned} y_1(t) &= h_1(t) \\ &\vdots \\ y_n(t) &= h_n(t) \end{aligned}$$

2.
$$y(t) = h_n(t)$$

3.
$$y(t) = k_{nn}\sqrt{h_n(t)}$$

Matematický model rovnovážneho stavu (MMRS)

- materiálová bilancia prietočného systému všeobecne

$$\left\{\begin{array}{l}\textit{hmotnostné toky}\\ \textit{do systému}\\ \textit{vstupujúce}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{l}\textit{hmotnostné toky}\\ \textit{zo systému}\\ \textit{vystupujúce}\end{array}\right\}$$

$$\left\{\begin{array}{l}\textit{toky látkových}\\ \textit{množstiev}\\ \textit{do systému}\\ \textit{vstupujúce}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{l}\textit{toky látkových}\\ \textit{množstiev}\\ \textit{zo systému}\\ \textit{vystupujúce}\end{array}\right\}$$

V rovnovážnom stave (v ustálenom stave) nedochádza k akumulácii, t.j. akumulačný člen v bilancii je nulový.

- MMRS opisujúci vzťah medzi objemovými prietokmi vstupných nezávislých prúdov a objemovými prietokmi prúdov vystupujúcich zo zásobníkov v rovnovážnom stave za predpokladu konštantnej hustoty ρ

$$q_{v1}^{s} = q_{1}^{s}$$

$$\vdots$$

$$q_{vi}^{s} + q_{i-1}^{s} = q_{i}^{s} \qquad i = 2,\ldots,n-1$$

$$\vdots$$

$$q_{vn}^{s} + q_{n-1}^{s} = q_{n}^{s}$$

- MMRS opisujúci vzťah medzi objemovými prietokmi vstupných nezávislých prúdov a výškami hladín v zásobníkoch v rovnovážnom stave

$$q_{v1}^{s} = k_{11}\sqrt{h_1^s - h_2^s}$$

$$\vdots$$

$$q_{vi}^{s} + k_{i-1,i-1}\sqrt{h_{i-1}^s - h_i^s} = k_{ii}\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s} \qquad i = 2,\ldots,n-1$$

$$\vdots$$

$$q_{vn}^{s} + k_{n-1,n-1}\sqrt{h_{n-1}^s - h_n^s} = k_{nn}\sqrt{h_n^s}$$

- Výpočet výšok hladín v rovnovážnom stave pre zadané objemové prietoky vstupných prúdov

$$q_{v1}^s = k_{11}\sqrt{h_1^s - h_2^s} \Rightarrow \quad k_{11}\sqrt{h_1^s - h_2^s} = q_{v1}^s$$

$$q_{v2}^s + q_1^s = k_{22}\sqrt{h_2^s - h_3^s} \Rightarrow q_{v2}^s + q_{v1}^s = k_{22}\sqrt{h_2^s - h_3^s} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k_{22}\sqrt{h_2^s - h_3^s} = q_{v2}^s + q_{v1}^s$$

$$\vdots$$

$$q_{vi}^s + q_{i-1}^s = k_{ii}\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s} \Rightarrow q_{vi}^s + q_{v,i-1}^s + \cdots + q_{v1}^s = k_{ii}\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k_{ii}\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s} = q_{vi}^s + q_{v,i-1}^s + \cdots + q_{v1}^s \qquad i = 2,\ldots,n-1$$

$$\vdots$$

$$q_{vn}^s + q_{n-1}^s = k_{nn}\sqrt{h_n^s} \Rightarrow q_{vn}^s + q_{v,n-1}^s + \cdots + q_{v1}^s = k_{nn}\sqrt{h_n^s} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k_{nn}\sqrt{h_n^s} = q_{vn}^s + q_{v,n-1}^s + \cdots + q_{v1}^s$$

- Vzťahy pre výpočet výšok hladín v rovnovážnom stave pre zadané objemové prietoky vstupných prúdov

$$
\begin{aligned}
h_n^s &= \left(\frac{q_{vn}^s + q_{v,n-1}^s + \cdots + q_{v1}^s}{k_{nn}} \right)^2 \\
&\vdots \\
h_i^s &= \left(\frac{q_{vi}^s + q_{v,i-1}^s + \cdots + q_{v1}^s}{k_{ii}} \right)^2 + h_{i+1}^s \qquad\qquad i = n-1,\ldots,2 \\
&\vdots \\
h_1^s &= \left(\frac{q_{v1}^s}{k_{11}} \right) + h_2^s
\end{aligned}
$$

Výšky hladín v rovnovážnom stave môžu byť začiatočnými podmienkami pre riešenie diferenciálnych rovníc opisujúcich DMM zásobníkov.

- Ďalšia úloha pre výpočet rovnovážneho stavu môže predstavovať výpočet objemových prietokov vstupných prúdov, ktoré treba nastaviť, aby sa dosiahla požadovaná výška hladín v zásobníkoch.

Linearizovaný dynamický matematický model

- linearizácia funkcie f jednej premennej x v okolí pracovného bodu x^s rozvojom do Taylorovho radu a zanedbaním nelineárnych členov rozvoja

$$f(x)\big|_{x^s} \approx f(x^s) + \left.\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x^s} .\left(x - x^s\right)$$

- linearizácia funkcie f dvoch premenných x, y v okolí pracovného bodu $[x^s, y^s]$ rozvojom do Taylorovho radu a zanedbaním nelineárnych členov rozvoja

$$f(x,y)\big|_{[x^s,y^s]} \approx f(x^s,y^s) + \left.\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right|_{\substack{x=x^s\\ y=y^s}} .\left(x - x^s\right) + \left.\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right|_{\substack{x=x^s\\ y=y^s}} .\left(y - y^s\right)$$

Postup pri linearizácii

- od DMM odčítame MMRS

$$q_{v1}(t)-q_{v1}^{s}=k_{11}\sqrt{h_1(t)-h_2(t)}-k_{11}\sqrt{h_1^s-h_2^s}+S_1\frac{\mathrm{d}h_1(t)}{\mathrm{d}t}-S_1\frac{\mathrm{d}h_1^s}{\mathrm{d}t}$$

$$\vdots$$

$$q_{vi}(t)-q_{vi}^{s}+k_{i-1,i-1}\sqrt{h_{i-1}(t)-h_i(t)}-k_{i-1,i-1}\sqrt{h_{i-1}^s-h_i^s}=$$

$$k_{ii}\sqrt{h_i(t)-h_{i+1}(t)}-k_{ii}\sqrt{h_i^s-h_{i+1}^s}+S_i\frac{\mathrm{d}h_i(t)}{\mathrm{d}t}-S_i\frac{\mathrm{d}h_i^s}{\mathrm{d}t},\quad i=2,\dots,n-1$$

$$\vdots$$

$$q_{vn}(t)-q_{vn}^{s}+k_{n-1,n-1}\sqrt{h_{n-1}(t)-h_n(t)}-k_{n-1,n-1}\sqrt{h_{n-1,n-1}^s-h_{nn}^s}=$$

$$k_{nn}\sqrt{h_n(t)}-k_{nn}\sqrt{h_n^s}+S_n\frac{\mathrm{d}h_n(t)}{\mathrm{d}t}-S_n\frac{\mathrm{d}h_n^s}{\mathrm{d}t}$$

- definujeme odchýlkové veličiny:

vstupné: $u_i(t) = q_{vi}(t) - q_{vi}^s, i = 1, \ldots, n$

stavové: $x_i(t) = h_i(t) - h_i^s, i = 1, \ldots, n$

výstupné: napr. $y_i(t) = x_i(t), i = 1, \ldots, n$

alebo $y(t) = x_n(t)$

- linearizujeme nelineárne funkcie a po linearizácii použijeme definované odchýlkové veličiny:

$$\sqrt{h_n}\Big|_{h_n^s} \approx \sqrt{h_n^s} + \frac{\mathrm{d}\sqrt{h_n}}{\mathrm{d}h_n}\Bigg|_{h_n = h_n^s} .\left(h_n - h_n^s\right) = \sqrt{h_n^s} + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{h_n^s}}\, x_n$$

$$\sqrt{h_i - h_{i+1}}\Big|_{h_i^s, h_{i+1}^s} \approx \sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s} + \frac{\partial\sqrt{h_i - h_{i+1}}}{\partial h_i}\Bigg|_{\substack{h_i = h_i^s \\ h_{i+1} = h_{i+1}^s}} .\left(h_i - h_i^s\right).1$$

$$+ \frac{\partial\sqrt{h_i - h_{i+1}}}{\partial h_{i+1}}\Bigg|_{\substack{h_i = h_i^s \\ h_{i+1} = h_{i+1}^s}} .\left(h_{i+1} - h_{i+1}^s\right).(-1) =$$

$$\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s} + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s}}\, x_i - \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s}}\, x_{i+1}$$

- použijeme výsledok linearizácie v rovniciach, ktoré vznikli odčítaním DMM a MMRS a pre i-tý zásobník dostaneme

$$
\begin{aligned}
&q_{vi}(t) - q_{vi}^{s} + k_{i-1,i-1}\left(\sqrt{h_{i-1}^{s} - h_{i}^{s}} + \frac{1}{2\sqrt{h_{i-1}^{s} - h_{i}^{s}}}\,x_{i-1}(t) - \frac{1}{2\sqrt{h_{i-1}^{s} - h_{i}^{s}}}\,x_{i}(t)\right) \\
&- k_{i-1,i-1}\sqrt{h_{i-1}^{s} - h_{i}^{s}} = k_{i,i}\left(\sqrt{h_{i}^{s} - h_{i+1}^{s}} + \frac{1}{2\sqrt{h_{i}^{s} - h_{i+1}^{s}}}\,x_{i}(t) - \frac{1}{2\sqrt{h_{i}^{s} - h_{i+1}^{s}}}\,x_{i+1}(t)\right) \\
&- k_{ii}\sqrt{h_{i}^{s} - h_{i+1}^{s}} + S_i\,\frac{\mathrm{d}\left(h_i(t) - h_i^{s}\right)}{\mathrm{d}t}
\end{aligned}
$$

- použijeme definované odchýlkové veličiny a dostaneme

$$u_1(t) = \frac{k_{11}}{2\sqrt{h_1^s - h_2^s}} x_1(t) - \frac{k_{11}}{2\sqrt{h_1^s - h_2^s}} x_2(t) + S_1 \frac{\mathrm{d}x_1(t)}{\mathrm{d}t}$$

$$\vdots$$

$$u_i(t) + \frac{k_{i-1,i-1}}{2\sqrt{h_{i-1}^s - h_i^s}} x_{i-1}(t) - \frac{k_{i-1,i-1}}{2\sqrt{h_{i-1}^s - h_i^s}} x_i(t) =$$

$$\frac{k_{ii}}{2\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s}} x_i(t) - \frac{k_{ii}}{2\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s}} x_{i+1}(t) + S_i \frac{\mathrm{d}x_i(t)}{\mathrm{d}t}$$

$$\vdots$$

$$u_n(t) + \frac{k_{n-1,n-1}}{2\sqrt{h_{n-1}^s - h_n^s}} x_{n-1}(t) - \frac{k_{n-1,n-1}}{2\sqrt{h_{n-1}^s - h_n^s}} x_n(t) =$$

$$\frac{k_{nn}}{2\sqrt{h_n^s}} x_n(t) + S_n \frac{\mathrm{d}x_n(t)}{\mathrm{d}t}$$

po zavedení tzv. linearizovanej konštanty ventilu v tvare

$$k_i = \frac{k_{ii}}{2\sqrt{h_i^s - h_{i+1}^s}}, \quad k_n = \frac{k_{nn}}{2\sqrt{h_n^s}}$$

dostaneme

$$u_1(t) = k_1 x_1(t) - k_1 x_2(t) + S_1 \frac{\mathrm{d}x_1(t)}{\mathrm{d}t} \qquad x_1(0) = h_1(0) - h_1^s = h_1^s - h_1^s = 0$$

$$\vdots$$

$$u_i(t) + k_{i-1} x_{i-1}(t) - k_{i-1} x_i(t) = k_i x_i(t) - k_i x_{i+1}(t) + S_i \frac{\mathrm{d}x_i(t)}{\mathrm{d}t} \qquad x_i(0) = 0$$

$$\vdots \qquad i = n-1, \ldots, 2$$

$$u_n(t) + k_{n-1} x_{n-1}(t) - k_{n-1} x_n(t) = k_n x_n(t) + S_n \frac{\mathrm{d}x_n(t)}{\mathrm{d}t} \qquad x_n(0) = 0$$

- Štandardný tvar linearizovaného matematického modelu – rovnica dynamiky

$$\frac{\mathrm{d}x_1(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{k_1}{S_1} x_1(t) - \frac{k_1}{S_1} x_2(t) - \frac{1}{S_1} u_1(t)$$

$$\vdots$$

$$\frac{\mathrm{d}x_i(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{k_{i-1}}{S_i} x_{i-1}(t) - \frac{k_{i-1}}{S_i} x_i(t) - \frac{k_i}{S_i} x_i(t) + \frac{k_i}{S_i} x_{i+1}(t) + \frac{1}{S_i} u_i(t)$$

$$\vdots \qquad i = n-1, \ldots, 2$$

$$\frac{\mathrm{d}x_n(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{k_{n-1}}{S_n} x_{n-1}(t) - \frac{k_{n-1}}{S_n} x_n(t) - \frac{k_n}{S_n} x_n(t) + \frac{1}{S_n} u_n(t)$$

matice A, B stavového opisu

$$
\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix}
-\frac{k_1}{S_1} & \frac{k_1}{S_1} & 0 & & \cdots & & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & & & & & & & & \\
0 & 0 & \cdots & \frac{k_{i-1}}{S_i} & -\frac{k_{i-1}+k_i}{S_i} & \frac{k_i}{S_i} & \cdots & 0 & 0 \\
0 & 0 & & & \cdots & & 0 & \frac{k_{n-1}}{Sn} & -\frac{k_{n-1}+k_n}{S_n}
\end{pmatrix}
$$

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \frac{1}{S_1} & 0 & & \cdots & & & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{S_i} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & & & \cdots & & 0 & \frac{1}{S_n} \end{pmatrix}$$

- Štandardný tvar linearizovaného matematického modelu – rovnica výstupu

pre výstupné veličiny: napr. $y_i(t) = x_i(t), i = 1, \ldots, n$

matice ***C***, ***D*** stavového opisu sú matice n x n v tvare

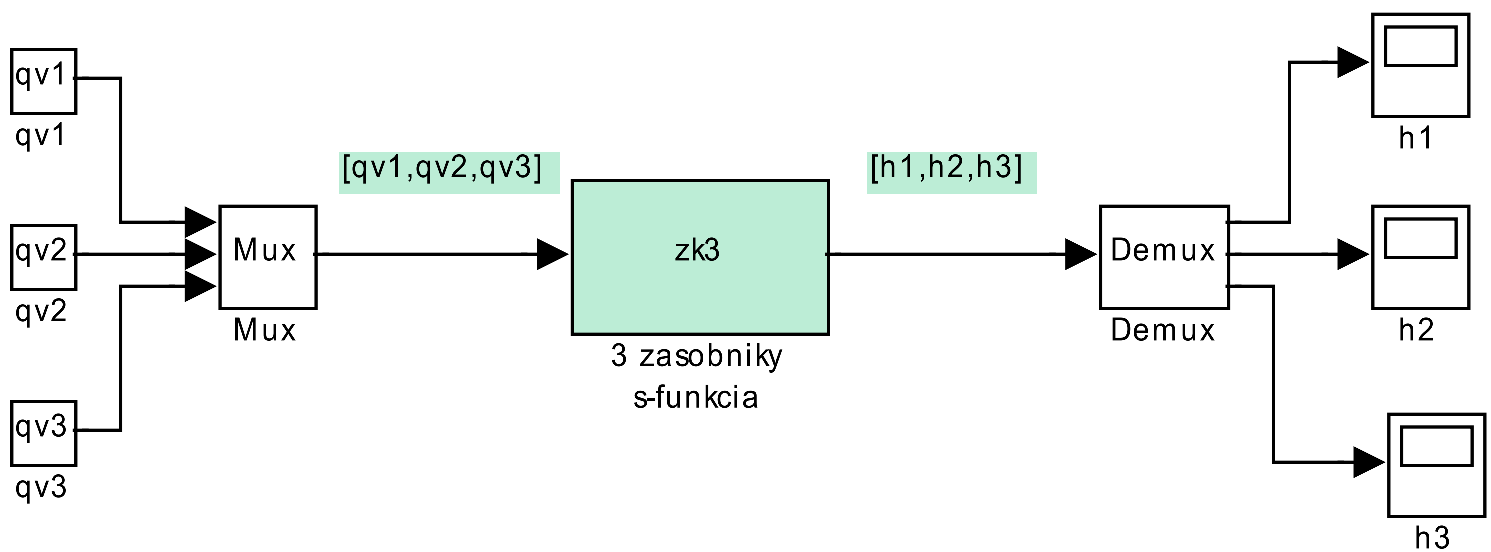
$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \cdots & & & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & & & \cdots & & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & \cdots & & & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & & & \cdots & & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

pre výstupnú veličinu: napr. $y(t) = x_n(t)$

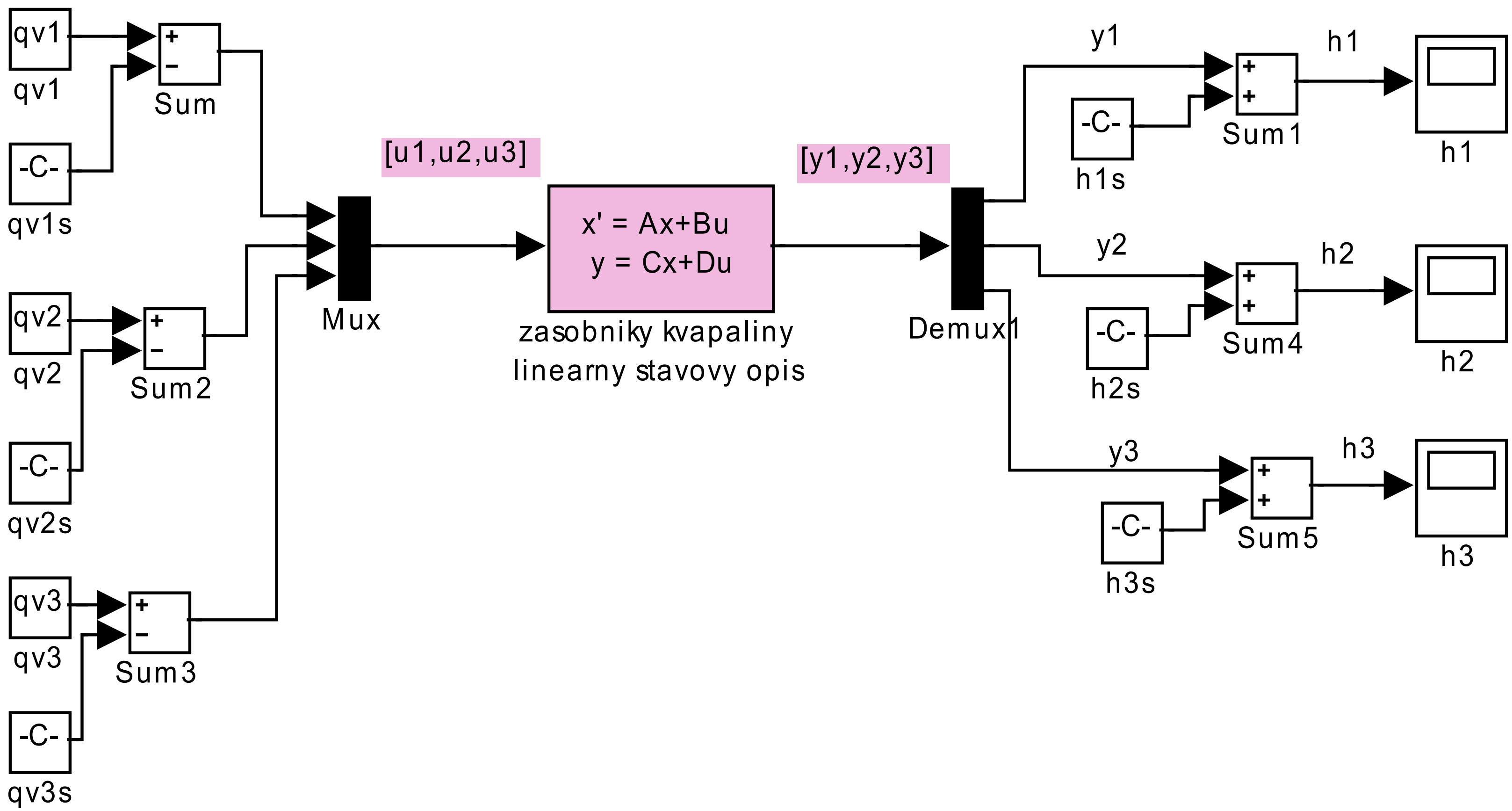
matice ***C***, ***D*** stavového opisu sú matice 1 x *n* v tvare

$$C = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Simulácia pomocou nelineárneho matematického modelu



Simulácia pomocou linearizovaného matematického modelu - LSO



Simulácia pomocou linearizovaného matematického modelu - prenosy