

REACTOARE CHIMICE CU FUNCȚIONARE CONTINUĂ ȘI AMESTECARE (RCCA)

Modelare matematica, simulare, analiză.

Cuprins

1	SCOPUL LUCRĂRII	3
1.1	CONTEXT GENERAL	3
1.2	OBIECTIVE	3
2	CONSIDERAȚII TEORETICE.....	4
2.1	REACTOARE CU AMESTECARE ȘI FUNCȚIONARE CONTINUĂ - GENERALITATI.....	4
2.2	MEDIUL MATLAB	5
2.3	SIMULINK	5
3	MODELAREA REACTORULUI CU AMESTECARE ȘI FUNCȚIONARE CONTINUĂ.....	6
3.1	ECUAȚII MATEMATICE.....	6
3.2	ANALIZA PUNCTELOR DE FUNCȚIONARE	8
3.3	DETERMINAREA MODELULUI LINIAR ÎN JURUL UNUI PUNCT DE FUNCȚIONARE	13
3.4	SIMULAREA DINAMICII PROCESULUI.....	17
4	DESFĂȘURAREA LUCRĂRII.....	25
5	CONȚINUTUL REFERATULUI	26

1 Scopul lucrării

1.1 Context general

În această lucrare se urmărește realizarea unui model matematic pentru reactoarele chimice cu amestecare și funcționare continuă, implementarea acestui model în Matlab/Simulink și proiectarea unor structuri de control automat cu regulatoare de tip PID.

Reactorul chimic este un echipament important al fabricilor din industria chimică în care apar reacții chimice și termice. Procesele complexe care apar în aceste reactoare se caracterizează prin conversie chimică, conversie de masă și schimb de căldură. Reactorul chimic este cel mai important utilaj din multe procese chimice, biochimice, în industria polimerilor și industria petrolieră, deoarece transformă materiale prime în produse chimice prețioase.

1.2 Obiective

Obiectivul principal al acestei lucrări este de a modela reactorul chimic izoterm și cel exoterm, și de a proiecta și a testa prin simulare controlul acestor reactoare folosind regulatoare de tip PID.

Pentru a realiza acest obiectiv s-au luat în considerare următoarele etape:

- dezvoltarea unui model matematic neliniar și implementarea acestui model în Matlab/Simulink;
- Testarea modelului pentru diferite valori ale parametrilor reactorului și diferite date de intrare
- Liniarizarea modelului în jurul unui punct de funcționare;
- Determinarea punctelor statice de funcționare stabile;
- Analiza traiectoriilor de stare în jurul punctului de funcționare
- Realizarea buclelor de control cu regulatoare PID și acordarea reguletoarelor;
- Testare sistemului cu regulatoare PID pentru verificarea performanțelor.

2 Considerații teoretice

2.1 Reactoare cu amestecare și funcționare continuă - generalități

În industria chimică, reactorul cu amestecare și funcționare continuă este o unitate a instalației chimice în care un produs final dorit este produs la o temperatură specificată. Controlul parametrilor reactorului chimic este o sarcină dificilă în industria de proces, deoarece este considerat a fi un sistem extrem de neliniar. Cea mai mare eficiență a reactorului poate fi obținută numai dacă se aplică o abordare eficientă de control în toate condițiile de funcționare. În ultimii ani, diferite metode de control au fost concepute pentru acest tip de reactoare. Cu toate acestea, regulatorul cu structură PID a s-a dovedit a fi cea mai simplă și utilizată variantă pentru industria de proces. Controlerile convenționale asigură funcționarea sigură și satisfăcătoare pentru sistemele invariante liniare de timp. În cazul reactoarelor, atâta timp cât procesul se desfășoară într-un interval suficient de aproape de un anumit punct de operare, regulatoarele PID pot asigura performanțe acceptabile de control.

Regulatoarele PID sunt încă utilizate pe scară largă în peste 90% din aplicațiile industriale deoarece nicio altă metodă avansată de control nu conferă simplitatea, funcționalitatea clară, aplicabilitatea și ușurința de utilizare asigurate de acest regulator. Regulatorul PID acordat într-un anumit punct de operare nu va oferi un răspuns satisfăcător atunci când există o abatere semnificativă în intervalul de operare al procesului. Prin urmare, structuri avansate de control bazate pe regulatoare PID au fost propuse pe scară largă în ultimele decenii. Reactoarele cu amestecare și funcționare continuă prezintă adesea o dinamică foarte neliniară, în special atunci când sunt prezente reacții consecutive și secundare. Pot apărea bifurcații în mai multe stări de echilibru. În plus, modelul matematic al procesului în majoritatea cazurilor este cunoscut doar cu precizie limitată, astfel încât cerințele de robustețe asupra schemei de control al procesului sunt perfect justificate. Feedback-ul clasic liniar PID de multe ori nu atinge performanțe satisfăcătoare.

Schema de bază a unui reactor cu amestecare și funcționare continuă este următoarea:

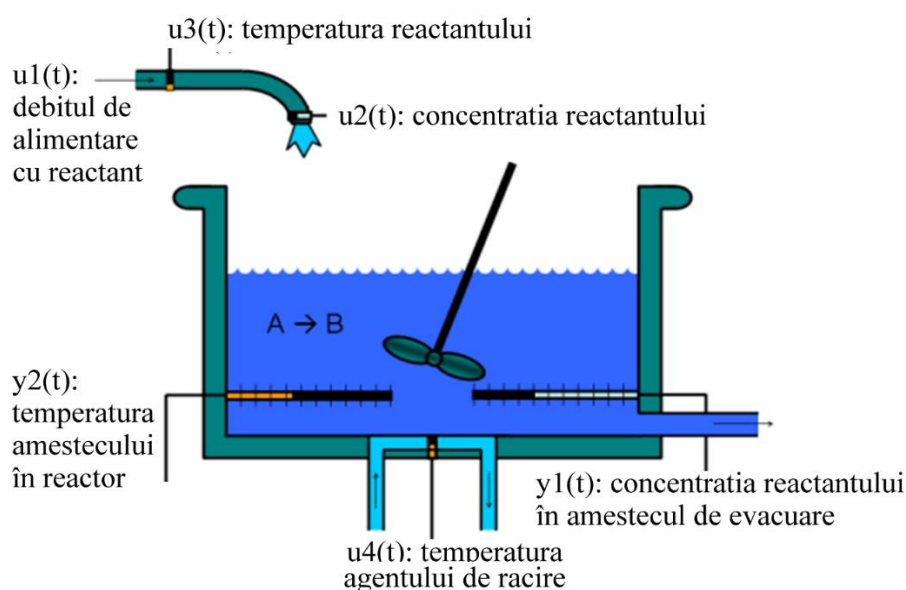


Figura 2.1 Schemă funcțională reactor

2.2 Mediul Matlab

MATLAB este un limbaj de înaltă performanță pentru calcul tehnic. Acesta integrează calculul, vizualizarea și programarea într-un mediu ușor de utilizat, în care problemele și soluțiile sunt exprimate în limbaj familiar, notații matematice familiare. Printre utilizările tipice se numără: matematică și calcul; dezvoltarea algoritmilor; modelare, simulare și prototipare; analiza, explorarea și vizualizarea datelor; grafică științifică și inginerescă; dezvoltarea de aplicații, inclusiv crearea de interfețe grafice pentru utilizator.

Numele MATLAB înseamnă laborator matricial. MATLAB a fost inițial scris pentru a oferi un acces ușor la software-ul matricial dezvoltat de către LINPACK și EISPACK, care împreună reprezintă stadiul actual al tehnologiei de ultimă oră în domeniul software pentru calcul matricial.

MATLAB a evoluat de-a lungul anilor, cu contribuția a numeroși utilizatori. În mediile universitare, acesta este instrumentul standard de instruire pentru cursurile introductive și avansate de matematică, inginerie și știință. În industrie, MATLAB este instrumentul preferat pentru cercetare, dezvoltare și analiză.

MATLAB dispune de o familie de soluții specifice aplicațiilor, denumite toolbox-uri. Foarte importante pentru majoritatea utilizatorilor de MATLAB, toolbox-urile ne permit să învățăm și să aplicăm tehnologii specializate. Toolbox-urile sunt colecții complete de funcții MATLAB (fișiere M) care extind mediul MATLAB pentru a rezolva anumite clase de probleme. Domeniile în care sunt disponibile toolbox-uri includ procesarea semnalelor, sisteme de control, rețele neuronale, logică fuzzy, wavelets, simulare și multe altele.

Cele cinci componente principale ale programului MATLAB sunt:

- Limbajul MATLAB;
- Spațiul de lucru MATLAB;
- Sistemul grafic MATLAB;
- Librăria de funcții matematice MATLAB;
- Interfața de program a aplicației MATLAB(API).

2.3 Simulink

Simulink, un program însoțitor al MATLAB-ului, este un sistem interactiv pentru simularea sistemelor dinamice neliniare. Este un program grafic care funcționează cu ajutorul mouse-ului și care ne permite să modelăm un sistem prin desenarea unei diagrame bloc pe ecran și manipularea dinamică a acesteia. Poate lucra cu sisteme liniare, neliniare, în timp continuu, în timp discret, multivariabile și cu mai multe rate de eșantionare. Sunt disponibile biblioteci suplimentare de blocuri pentru aplicații specializate. Real-time Workshop este un program care ne permite să generăm cod C din diagrame de blocuri și de a-l rula pe o varietate de sisteme în timp real.

3 Modelarea reactorului cu amestecare și funcționare continuă

În acest subcapitol se încearcă determinarea comportamentului în regim dinamic al unui reactor chimic cu amestecare și funcționare continuă (RCCA, fig. 3.1). În acest reactor are loc o reacție chimică de ordinul I în fază lichidă, ireversibilă, exotermă. Pentru a asigura răcirea reactorului acesta va avea pereți dubli pentru circulația agentului de răcire. Amestecarea materialului din reactor se realizează cu ajutorul unui agitator. Acesta este cel mai simplu exemplu posibil. Deși pentru un chimist acest exemplu poate părea nerealist și trivial, oferă totuși posibilitatea analizei efectului principalilor parametri constructivi și funcționali asupra dinamicii reacției și a regimului termic, fiind folosit în lucrări de referință referitoare la proiectarea și controlul reactoarelor chimice.

3.1 Ecuatii matematice

Pentru dezvoltarea modelului matematic se consideră următoarele ipoteze simplificatoare:

- amestecare perfectă. Principalul avantaj este obținerea unei uniformități perfecte a temperaturii și concentrației înăuntrul și la ieșirea reactorului.
- nivelul în reactor este menținut constant; ca urmare debitul de intrare și cel de ieșire vor fi egale;
- se neglijează timpul mort datorat transportului pe conducta de alimentare de la elementul de execuție la reactor;
- debitul agentului de răcire se consideră suficient de mare (teoretic infinit) pentru a considera că temperatura agentului nu se modifică. În practică, chiar dacă temperatura agentului de răcire la intrarea în mantaua de răcire a reactorului este diferită de cea de la ieșire se poate considera o medie a acestor temperaturi.
- masa pereților metalici ai reactorului este neglijabilă astfel că nu se va lua în considerare inerția termică a pereților reactorului în transferul de căldură între agentul de răcire și amestecul din reactor (de altfel și căldura specifică pentru oțel este cu un ordin de mărime mai mică decât cea a apei)
- pierderile de căldură către mediul înconjurător sunt neglijabile.

Notățiile variabilelor folosite în lucrare sunt următoarele (fig.3.1):

- q -debit de ieșire(debitul amestecului ce conține produsul rezultat din reacția chimică și partea de reziduu ce nu s-a transformat în produs)
- q_i -debit de intrare reactant
- c_i -concentrația molară a reactantului la intrarea în reactor
- c – concentrația molară a produsului la ieșire din reactor
- m_m -masa moleculară
- T_i -temperatura reactantului la intrare
- T - temperatura amestecului în reactor(temperatura la ieșire din reactor)

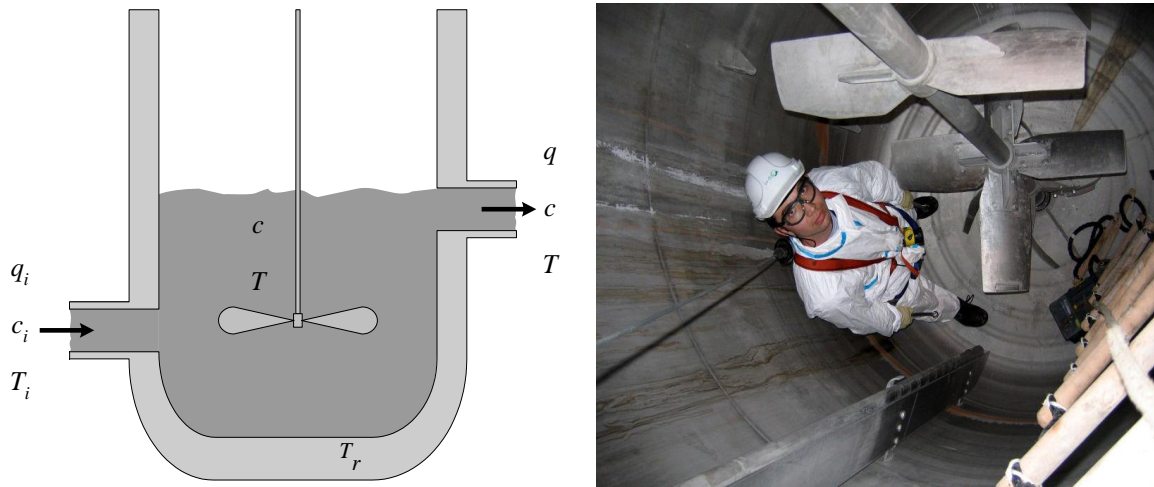


Figura 3.1. Schema simplificată a RCCA și o variantă constructivă

- V - volumul amestecului în reactor
- Q_p – căldura produsă de reacția chimică
- Q_e -căldura evacuată(diferență între căldura de la intrare și cea de la ieșire)
- ρ - densitatea produsului
- c_p -căldură specifică
- ΔH - entalpia de reacție, unde pentru reacțiile exoterme $-\Delta H > 0$ iar pentru reacțiile endoterme $-\Delta H < 0$.
- A – Aria suprafeței de transfer termic a agentului de răcire
- k_T -coeficient de transfer termic
- S – aria secțiunii transversale a reactorului
- d – diametrul bazei reactorului de formă circulară
- E – energia de activare
- h – nivelul amestecului din reactor
- R – constanta gazelor ideale
- k_0 – coeficient de viteză de reacție
- rcp – produsul dintre densitatea amestecului și căldura specifică a acestuia
- T_r – temperatura agentului de răcire

Pentru o mai buna înțelegere a materialului prezentat în continuare se vor consulta și notițele de curs unde sunt descrise mai detaliat fenomenele.

Cel mai simplu RCCA este reactorul izoterm. Reactorul izoterm are la bază legea bilanțului masic descris de ecuația diferențială:

$$V \frac{dc(t)}{dt} = q(t) \cdot c_i(t) - q(t) \cdot c(t) - V \cdot k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T(t)}} \cdot c(t) \cdot \quad (3.1)$$

Această ecuație ne dă relația dintre concentrația reactantului la intrare și concentrația ieșirii (relația dintre $c_i(t)$ și $c(t)$) și relația dintre debitul de intrare și concentrația ieșirii (relația dintre $q(t)$ și $c(t)$).

Pentru obținerea funcțiilor de transfer se realizează liniarizarea în jurul unui punct static de funcționare, acest punct fiind caracterizat de trei valori: c^0 , c_i^0 și q^0 .

Prin liniarizare se ajunge la următoarele funcții de transfer:

-de la intrarea q la ieșirea c

$$\frac{c_i^0 - c^0}{V \cdot s + (q^0 + V \cdot k)} \quad (3.2)$$

-de la intrarea c_i la ieșirea c

$$\frac{q^0}{V \cdot s + (q^0 + V \cdot k)} \quad (3.3)$$

Se observă că în acest model liniarizat, cele două funcții de transfer sunt de ordinul I, cu aceeași constantă de timp dar cu factor de amplificare diferit.

Se notează constanta $t = V/q^0$, aceasta este un parametru important și are numele de timp de staționare.

În cazul reactorului exoterm trebuie folosit și bilanțul termic, pe lângă cel masic, rezultând următorul set de ecuații:

$$V \frac{dc(t)}{dt} = q(t) \cdot c_i(t) - q(t) \cdot c(t) - V \cdot k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT(t)}} \cdot c(t) \quad (3.4)$$

$$\rho V c_p \frac{dT(t)}{dt} = \rho q(t) c_p [T_i(t) - T(t)] + k_T A [T_r(t) - T(t)] + (-\Delta H) V k_0 e^{-E/RT(t)} c(t)$$

Aceste relații sunt neliniare, neliniaritatea fiind în faptul că viteza de reacție depinde exponențial de temperatura amestecului.

3.2 Analiza punctelor de funcționare

În cazul reactoarelor exoterme pe care le vom analiza în continuare, ecuația bilanțului termic are forma:

$$\rho \cdot V \cdot c_p \frac{dT(t)}{dt} = Q_p - Q_e \quad (5)$$

$$Q_p = (-\Delta H) \cdot V \cdot r = (-\Delta H) \cdot V \cdot k_0 \cdot e^{-E/RT(t)} \cdot c(t) \quad (6)$$

$$Q_e = -\rho \cdot q(t) \cdot c_p \cdot T_i(t) + \rho \cdot q(t) \cdot c_p \cdot T(t) + k_T \cdot A \cdot [T(t) - T_r(t)] \quad (7)$$

unde : Q_p – căldura produsă de reacția chimică [J/s];

Q_e – căldura evacuată [J/s] (diferența dintre căldura introdusă prin alimentare și cea evacuată prin extragerea produsului, cumulată cu căldura schimbată cu agentul de răcire);

Se poate observa ca atât Q_p cât și Q_c reprezintă de fapt fluxuri de căldură, adică reprezintă cantitatea de căldură raportată la unitatea de timp.

În continuare vom încerca să găsim puncte statice de funcționare pentru reactoare cu diferite valori ale parametrilor.

Ca și primă variantă se consideră următorii parametri de funcționare:

- $S = 4.28$ – aria secțiunii transversale a reactorului [m^2];
- $d = 2.335$ – diametrul reactorului de formă cilindrică [m];
- $E = 49584$ – energia de activare [$kJ/kmol$];
- $h = 2.335$ – nivelul amestecului din reactor [m];
- $-\Delta H = 24953$ – entalpia de reacție [$kJ/kmol$];
- $R = 8.32$ – constanta gazelor ideale [$kJ/(kmol)(K)$]
- $k_0 = 34930800$ – coeficient de viteză de reacție [$1/h$]
- $\rho \cdot c_p$ (rcp) = 2093 – produsul dintre densitatea amestecului din reactor și căldura specifică medie a acestuia [$kJ/(m^3)(K)$];
- $k_T = 293$ – coeficient de transfer termic [$kJ/(m^2)(K)(h)$];

Cu aceste valori se pot calcula:

- $V = S \cdot h = 10$ – volumul amestecului din reactor [m^3]
- $A_t = S + \pi \cdot d \cdot h = 21.4$ - aria suprafeței de transfer termic al agentului de răcire (considerând că reactorul are fundul și pereții laterali dubli) [m^2]

S-au considerat următoarele valori pentru variabilele de intrare:

- $c_i^0 = 10$ – concentrația molară a reactantului la intrare [$kmol/m^3$];
- $q^0 = 10$ – debitul de intrare [m^3/h];
- $T_i^0 = 25 + 273$ – temperatura reactantului în alimentare [K];
- $T_r^0 = 25 + 273$ – temperatura agentului de răcire [K];

Utilizând aceste valori s-a construit următorul program Matlab pentru determinarea punctelor statice de funcționare:

```
Tv=300:0.001:500;|
Q1=-(rcp*q*(Ti-Tv)-kT*At*(Tv-Tr));
Q2=minusdeltaH*V*k0*exp(-EdR./Tv).*cv;
figure(1)
plot(Tv,[Q1',Q2']);
xlabel('T [K]');ylabel('Q [kJ/h]')
cx=-(rcp*q*(Ti-Tv)-kT*At*(Tv-Tr))./(minusdeltaH*V*k0*exp(-EdR./Tv));
cv=(q*ci)./(q+V*k0*exp(-EdR./Tv));
figure(2)
plot(Tv,cv,Tv,cx)
xlabel('T [K]');ylabel('c [kmol/m3]')
```

Figura 3.1 Program determinare puncte statice de funcționare

Rulând acest program ne rezultă următoarele grafice, din care putem citi valorile pentru punctul static de funcționare.

În regim staționar termic, punctul de funcționare (P) rezultă la intersecția dreptei $Q_e(T)$ cu curba $Q_p(T)$. Dacă panta dreptei este mai mare decât panta maximă a curbei ele se vor intersecta într-un singur punct; în caz contrar vom avea două sau trei puncte de intersecție.

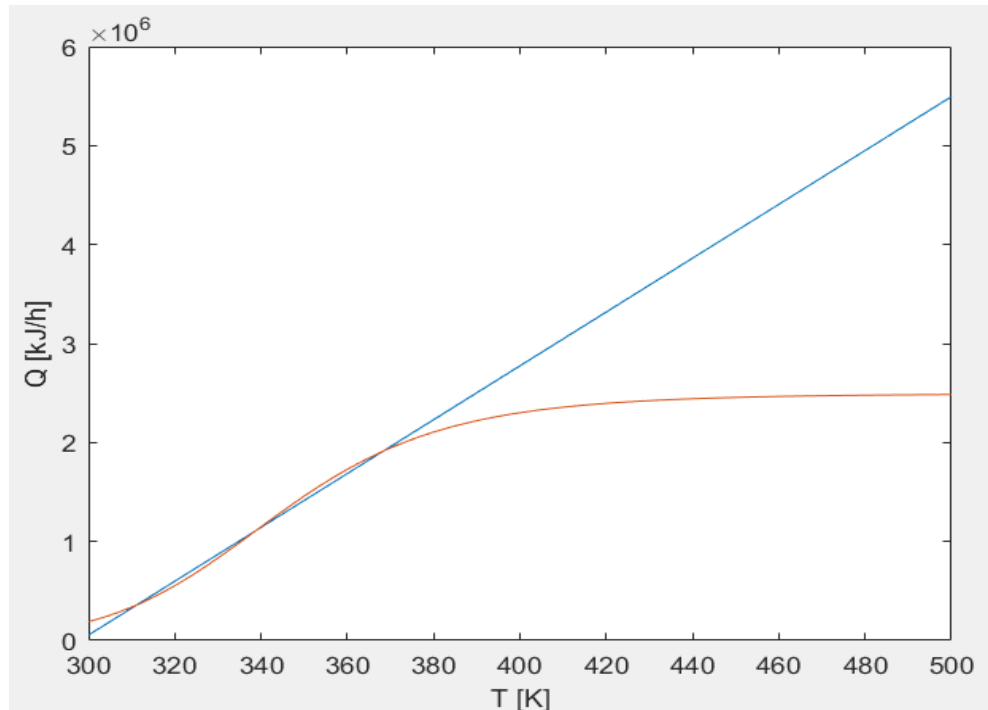


Figura 3.2 Comparație între căldura evacuată și căldura produsă

Dacă se mărește figura în zona de interes (zoom) se poate observa că există trei puncte statice de funcționare:

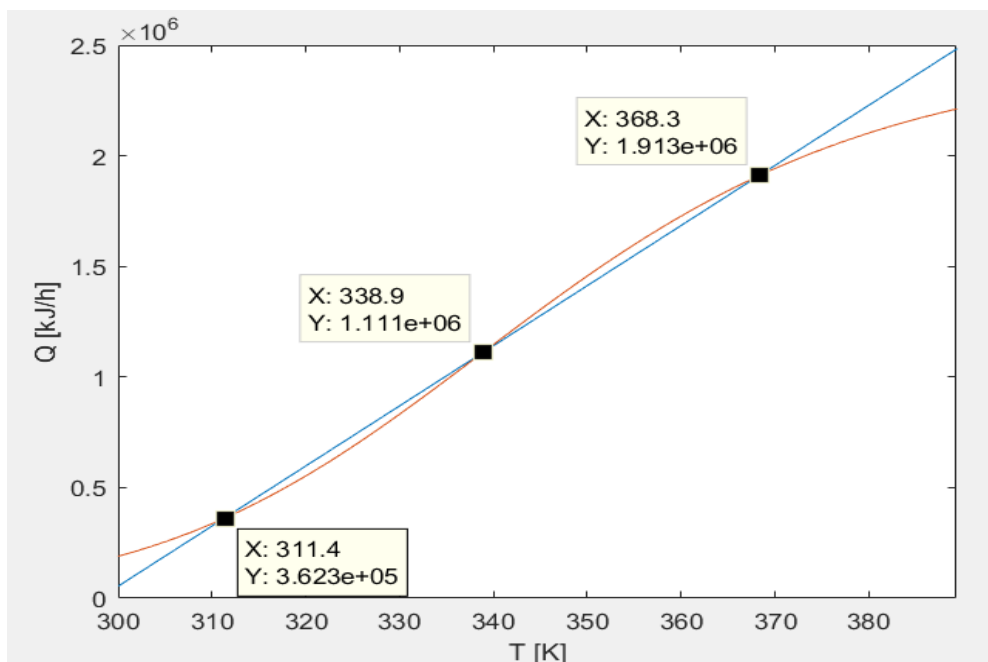


Figura 3.3 Selecția punctelor statice de funcționare

Mai puțin sugestivă dar mai completă este reprezentarea punctelor de echilibru în reprezentarea grafică a concentrației amestecului din reactor în funcție de temperatură. În condiții de regim staționar, din ecuația de bilanț material rezultă:

$$c(T) = c_i^0 \cdot q^0 / (q^0 + V k_0 e^{-E/RT})$$

iar din ecuația de bilanț termic:

$$c(T) = \frac{k_T A [T - T_r^0] - \rho q^0 c_p [T_i^0 - T]}{(-\Delta H) V k_0 e^{-E/RT}}$$

Reprezentând grafic cele două curbe, intersecția lor determină punctele de echilibru staționar. Se pot citi cele trei valori pentru temperatură $T_1=311.4$ K, $T_2=338.9$ K și $T_3=368.3$ K. Din următorul grafic se pot citi și valorile pentru concentrație:

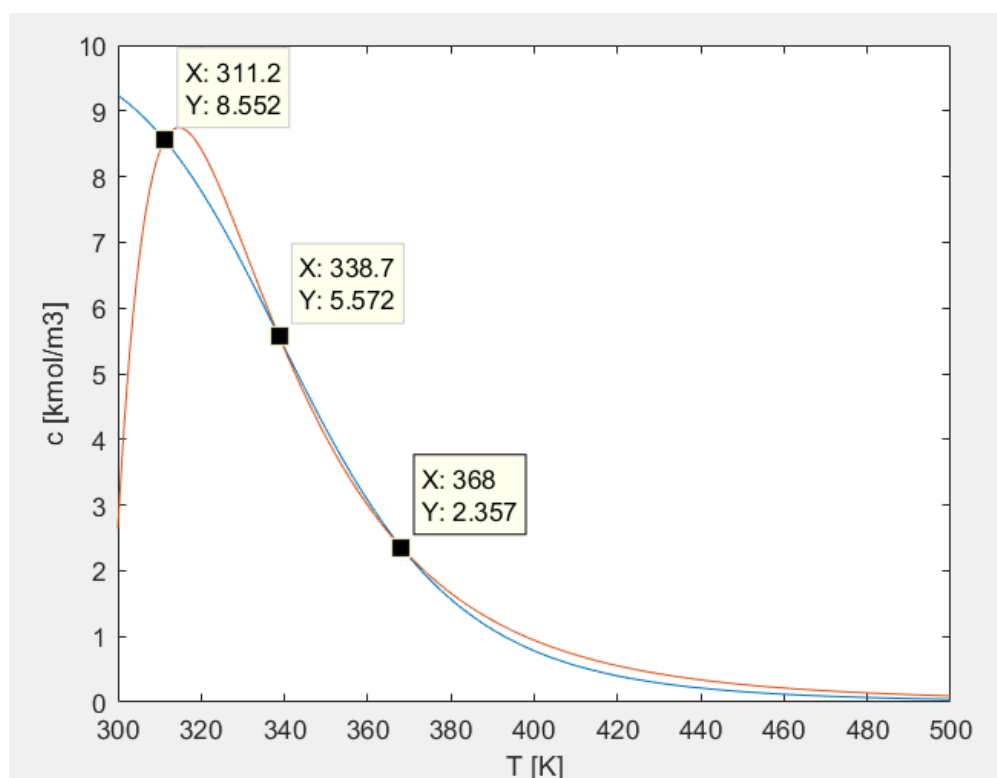


Figura 3.4 Selectarea valorilor pentru concentrație

Valorile pentru concentrație sunt $c_1=8.552$ kmol/m³, $c_2=5.572$ kmol/m³ și $c_3=2.357$ kmol/m³ rezultând cele 3 puncte statice de funcționare:

P1(311.4,8.552) , P2(338.9,5.572) și P3(368.3,2.357).

Dintre aceste puncte statice de funcționare P1 și P3 sunt stabile iar P2 este instabil, acesta fiind instabil pentru că se observă pe grafic că panta dreptei Q_e este mai mică decât panta curbei Q_p în punctul P2.

Pentru a doua variantă de funcționare se modifica punctul de funcționare conform următoarelor valori pentru intrări:

$$c_{i0}=10[\text{kmol/m}^3]$$

$$q_0=10/4[\text{m}^3/\text{h}]$$

$$T_{i0}=25+273[\text{K}]$$

$$T_{r0}=10+273[\text{K}]$$

Utilizând aceste valori și programul din figura de mai sus ne rezultă următoarele grafice din care putem identifica punctul static de funcționare.

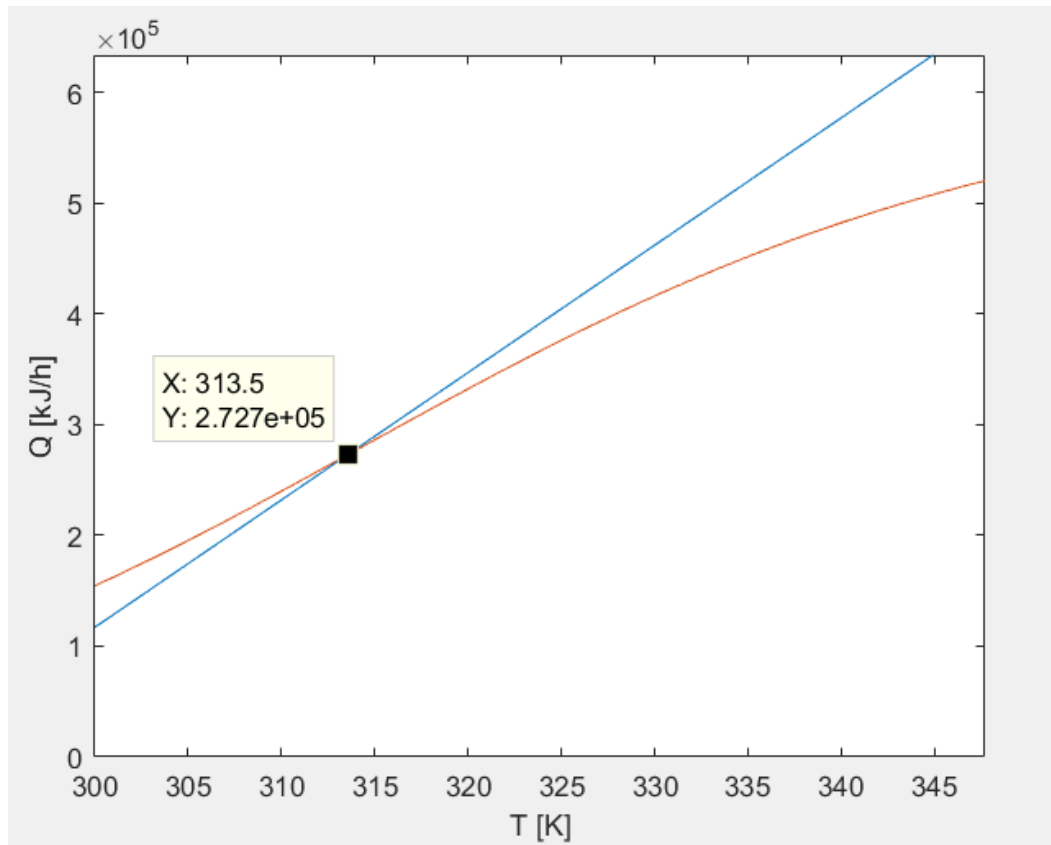


Figura 3.5 Comparație între căldura produsă și cea evacuată

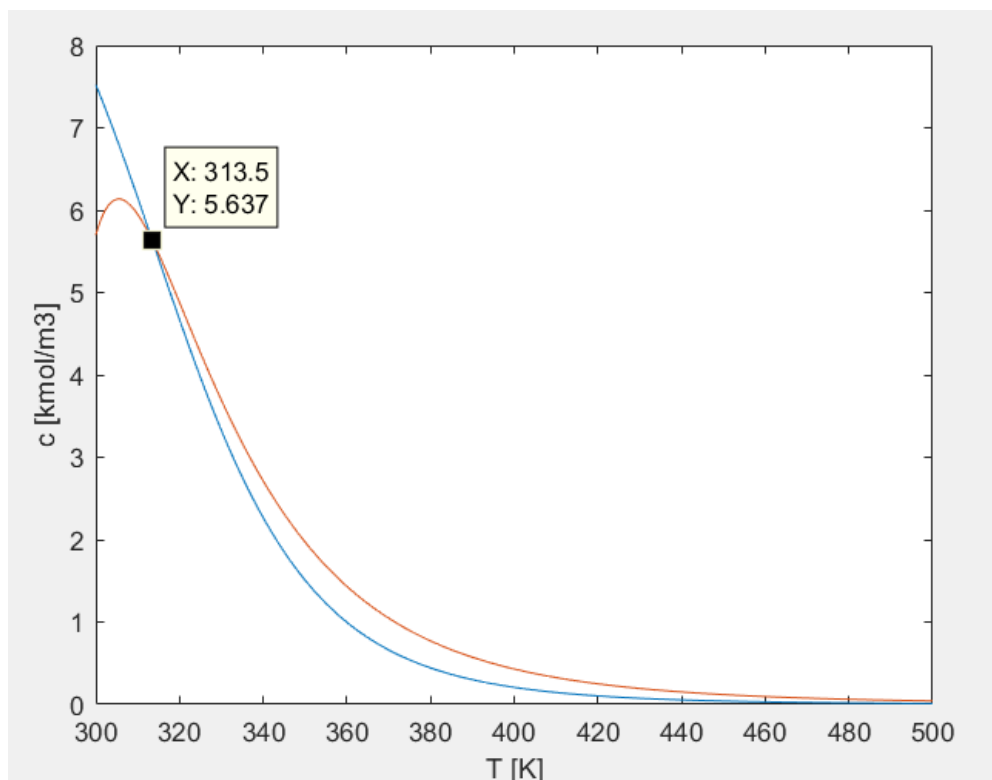


Figura 3.6 Selectarea valorii de concentrație pentru punctul static de funcționare

Din grafic se poate citi valoarea de regim staționar pentru concentrație și pentru temperatură: $c_1 = 5.637 \text{ kmol/m}^3$, $T_1 = 313.5 \text{ K}$

Aceste grafice ne dau ca și rezultat punctul static de funcționare $P_1(313.5, 5.637)$ care este un punct static de funcționare stabil.

3.3 Determinarea modelului liniar în jurul unui punct de funcționare

Următorul pas pentru modelarea reactorului a fost încercarea de a liniariza modelul neliniar și de a determina pentru un punct de funcționare funcțiile de transfer de la intrare la ieșire pentru fiecare intrare și ieșire în parte. Pentru aceasta vom avea un model de forma:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= A \cdot x + B \cdot u \\ y &= C \cdot x + D \cdot u \end{aligned} \quad (3.5)$$

unde $x^T = y^T = [c \ T]$ și $u^T = [q \ c_i \ T_i \ T_r]$.

Pentru liniarizarea termenului

$$r = kc = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} c \quad (3.6)$$

din relația 3.4 se vor urmări notițele de curs.

Calculul matricilor modelului liniar s-a realizat cu următoarea funcție Matlab (pentru suport teoretic se vor consulta notițele de curs):

```

A=zeros(2,2);
B=zeros(2,4);
C=eye(2,2);
D=zeros(2,4);
A(1,1)=-q/V-(k0*exp(-EdR/T0));
A(1,2)=-k0*exp(-EdR/T0)*EdR*c0/T0^2;
A(2,1)=(mdH/rcp)*k0*exp(-EdR/T0);
A(2,2)=-q/V-hA/(rcp*V)+mdH*k0*exp(-EdR/T0)*EdR*c0/(T0^2*rcp);
B(1,1)=(ci-c0)/V;
B(1,2)=q/V;
B(2,1)=(Ti-T0)/V;
B(2,3)=q/V;
B(2,4)=hA/(rcp*V);

```

Figura 3.7 Cod Matlab pentru liniarizare

Au rezultat patru matrici, A, B, C și D de forma:

$$\begin{aligned}
 A &= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \\
 B &= \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & 0 & 0 \\ B_{21} & 0 & B_{23} & B_{24} \end{pmatrix} \\
 C &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 D &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

iar din calculele de mai sus au rezultat valorile:

$$A_{11} = -0.4440$$

$$A_{12} = -0.0662$$

$$A_{21} = 2.3133$$

$$A_{22} = 0.2401$$

$$B_{11} = 0.4370$$

$$B_{12} = 0.25$$

$$B_{21} = -1.5522$$

$$B_{23} = 0.25$$

$$B_{24} = 0.2996$$

Cu aceste valori, și folosind funcția ss2tf din mediul de lucru Matlab putem calcula funcțiile de transfer de la fiecare intrare la fiecare ieșire în parte.

Acestea vor fi:

De la intrarea q la ieșirea c:

$$\frac{0.437 s - 0.002099}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.8 Funcție de transfer de la q la c

De la intrarea ci la ieșirea c:

$$\frac{0.437 s - 0.002099}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.9 Funcție de transfer de la ci la c

De la intrarea Ti la ieșirea c:

$$\frac{-0.01656}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.10 Funcție de transfer de la Ti la c

De la intrarea Tr la ieșirea c:

$$\frac{-0.01984}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.11 Funcție de transfer de la Tr la c

De la intrarea q la ieșirea T:

$$\frac{-1.552 s + 0.3216}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.12 Funcție de transfer de la q la T

De la intrarea ci la ieșirea T:

$$\frac{-1.552 s + 0.3216}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.13 Funcție de transfer de la c_i la T

De la intrarea T_i la ieșirea T :

$$\frac{0.25 s + 0.111}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.14 Funcție de transfer de la T_i la T

De la intrarea T_r la ieșirea T :

$$\frac{0.2996 s + 0.133}{s^2 + 0.204 s + 0.04662}$$

Figura 3.15 Funcție de transfer de la T_r la T

Aceste funcții de transfer pot fi determinate cu următoarea parte de cod Matlab:

```
[NUM,DEN] = ss2tf(A,B,C,D,1);
num1=NUM(1,1:3); num2=NUM(2,1:3); den=DEN;
H11=minreal(tf(num1,den))
H12=minreal(tf(num2,den))
[NUM1,DEN1] = ss2tf(A,B,C,D,2);
num1=NUM(1,1:3); num2=NUM(2,1:3); den=DEN;
H21=minreal(tf(num1,den))
H22=minreal(tf(num2,den))
[NUM,DEN] = ss2tf(A,B,C,D,3);
num1=NUM(1,1:3); num2=NUM(2,1:3); den=DEN;
H31=minreal(tf(num1,den))
H32=minreal(tf(num2,den))
[NUM,DEN] = ss2tf(A,B,C,D,4);
num1=NUM(1,1:3); num2=NUM(2,1:3); den=DEN;
H41=minreal(tf(num1,den))
H42=minreal(tf(num2,den))
```

Figura 3.16 Cod pentru transformare din spațiul stărilor în funcții de transfer

3.4 Simularea dinamicii procesului

Pentru studiul comportării dinamice, modelul neliniar va fi implementat pentru simulare în Matlab și Simulink. În Matlab se folosește funcția ode23 împreună cu valorile punctului static de funcționare și cu ecuațiile de bilanț termic și masic pentru a simula sistemul pe un timp de 100 de secunde cu un pas de integrare de 0.01 secunde. Pentru acest lucru s-au realizat următoarele coduri de Matlab:

Primul cod pentru implementarea ecuațiilor de bilanț termic și masic:

```
function Xdot=RCCA(~,X)
    c=X(1); T=X(2);
    if (c<0)
        c=0;
    end
    k0=evalin('base','k0');
    EdR=evalin('base','EdR');
    q=evalin('base','q');
    ci=evalin('base','ci');
    V=evalin('base','V');
    rcp=evalin('base','rcp');
    Ti=evalin('base','Ti');
    hA=evalin('base','hA');
    Tr=evalin('base','Tr');
    mdH=evalin('base','mdH');
    k=k0*exp(-EdR/T);
    cdot=(q*(ci-c)-V*k*c)/V;
    Tdot=(rcp*q*(Ti-T)+hA*(Tr-T)+mdH*V*k*c)/(rcp*V);
    Xdot=[cdot;Tdot];
```

Figura 3.17 Funcție Matlab pentru evaluarea bilanțului termic și cel masic

Al doilea cod care folosește funcția preimplementată în Matlab, ode23, pentru simularea datelor în jurul punctului static de funcționare în regim dinamic:

```
tsimulare=0:0.01:100;
[timpsimulare,Y]=ode23(@RCCA,tsimulare,[c0;T0]);
subplot(2,1,1);plot(timpsimulare,Y(:,1));
subplot(2,1,2);plot(timpsimulare,Y(:,2));
```

Figura 3.18 Simulare folosind funcția 3.17

Rulând acest program se afișează următorul grafic, care confirmă că punctul ales este un punct stabil de funcționare. Teoretic graficul ar trebui să fie o linie dar datorită aproximărilor în calcularea valorilor de regim staționar și erorilor de *trunchiere* și de rotunjire apărute în

timpul calculului numeric vom avea o mica deviere in grafic, diferențe nesemnificative, la a patra zecimală.

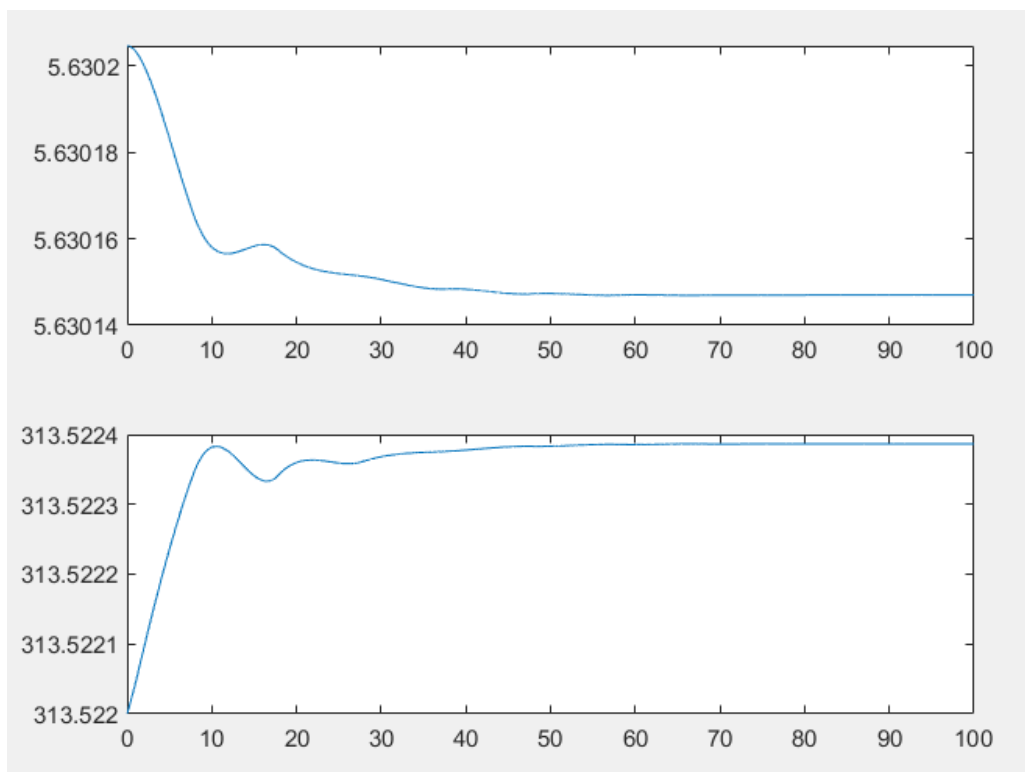


Figura 3.19 Rezultatul simulării în jurul punctului static de funcționare cu funcția ode23

A doua posibilitate pentru studiul comportării dinamice în jurul punctului static de funcționare ales este implementarea modelului neliniar (ecuațiilor de bilanț termic și masic) în mediul de lucru Simulink și simularea acestora în jurul punctului ales, cu perturbații minime.

Pentru acest lucru se implementează în mediul de lucru simulink câte un subsistem pentru viteza de reacție k , pentru ecuația de bilanț masic c și pentru ecuația de bilanț termic T .

Subsistemul pentru viteza de reacție k :

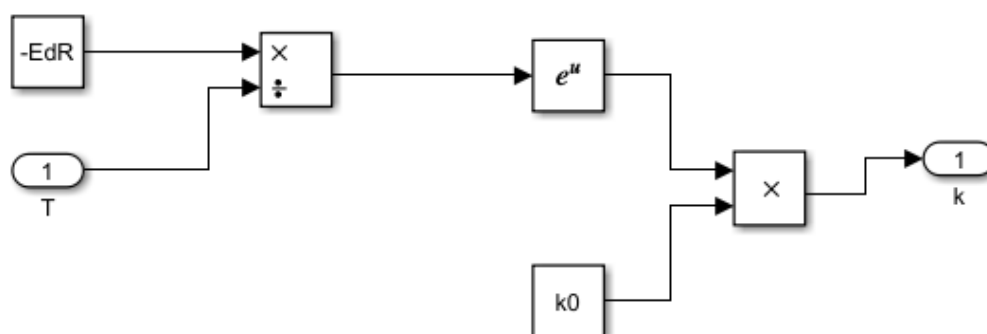


Figura 3.20 Sistemul Simulink pentru implementarea vitezei de reacție

Acest subsistem are ca și intrare temperatura T și ca și ieșire viteza de reacție k .

Subsistemul pentru ecuația de bilanț masic:

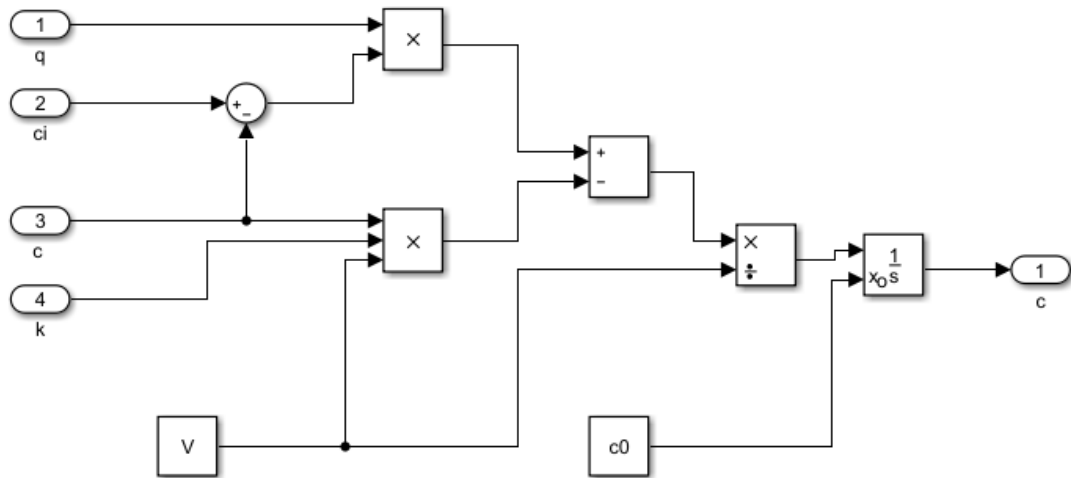


Figura 3.21 Sistemul simulink pentru implementarea bilanțului masic dintre concentrația intrării și a ieșirii

Acest subsistem are ca și cele patru intrări: debitul de ieșire q , concentrația de intrare c_i , concentrația de ieșire c și viteza de reacție k iar ca ieșire concentrația de ieșire c .

Subsistemul pentru ecuația de bilanț termic:

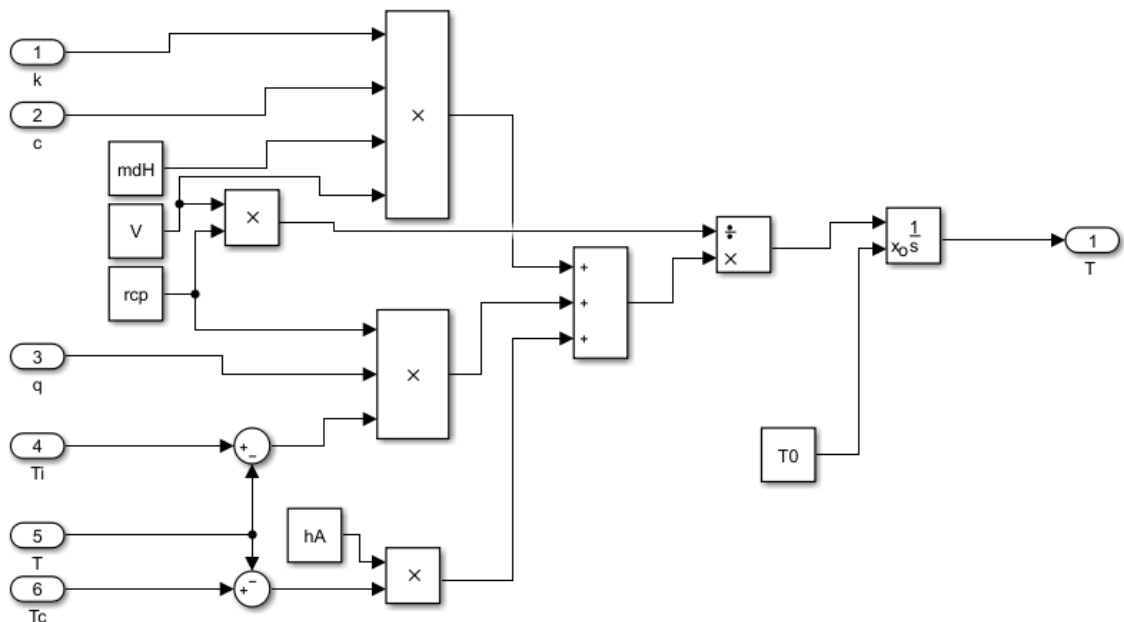


Figura 3.22 Sistemul Simulink pentru implementarea bilanțului termic între temperatura de intrare și cea de ieșire

Acest subsistem are ca și cele șase intrări: viteza de reacție k , concentrația de ieșire c , debitul de ieșire q , temperatura de intrare T_i , temperatura la ieșire T și temperatura agentului termic de răcire T_c iar ca ieșire are temperatura de ieșire T .

Se poate observa ca în subsistemele pentru c și T , care implementează cele două ecuații de bilanț, ultimul bloc este un integrator iar în fața acestui bloc o combinație de blocuri elementare Simulink ce implementează membrul drept al ecuațiilor. Într-o variantă mai simplă de implementat dar cu timp de rulare posibil mai mare membrul drept al ecuației poate fi implementat și printr-o funcție Matlab (ex fcn) având ca intrare un vector u care conține toate intrările blocului respectiv.

Combinând cele trei subsisteme, ne rezultă sistemul reactorului simplificat cu amestecare și funcționare continuă, reactorul exoterm.

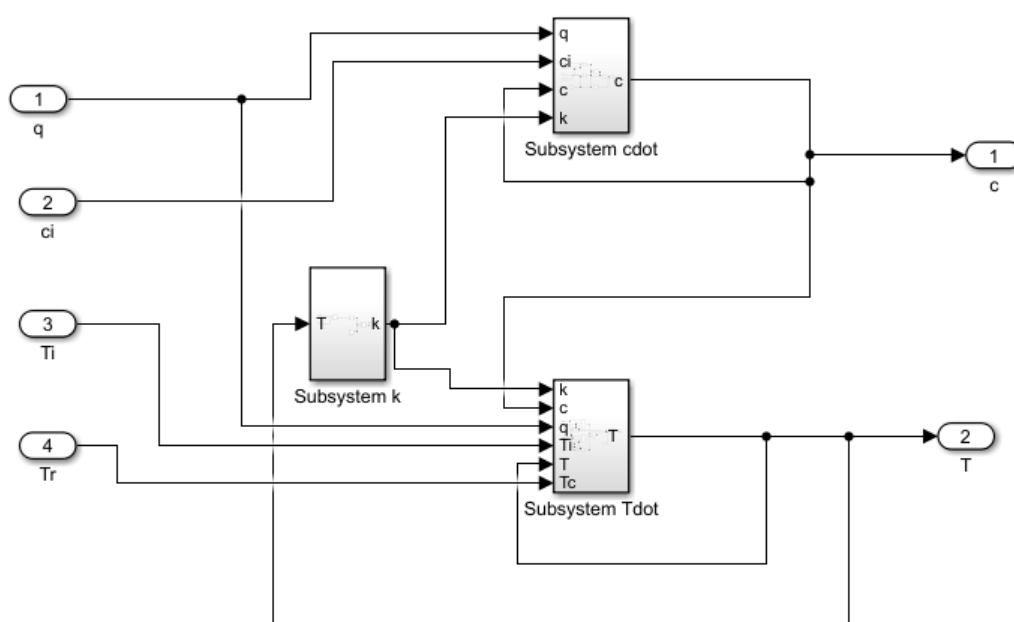


Figura 3.23 Sistemul Simulink pentru reactorul exoterm simplificat

Se observă cele patru intrări în sistem: debitul de intrare, egal cu cel de ieșire q , concentrația de intrare c_i , temperatura de intrare T_i , temperatura agentului termic de răcire T_r , și cele două ieșiri: concentrația de ieșire c și temperatura de ieșire T .

Aceeași liniarizare care s-a făcut matematic mai sus se poate realiza cu comanda 'linmod' din Matlab, acesta folosind sistemul realizat în simulink ne dă rezultate similare pentru cele patru matrici de mai sus A, B, C și D .

Comparația dintre modelul liniarizat și modelul neliniar din Simulink se poate afișa cu următorul sistem:

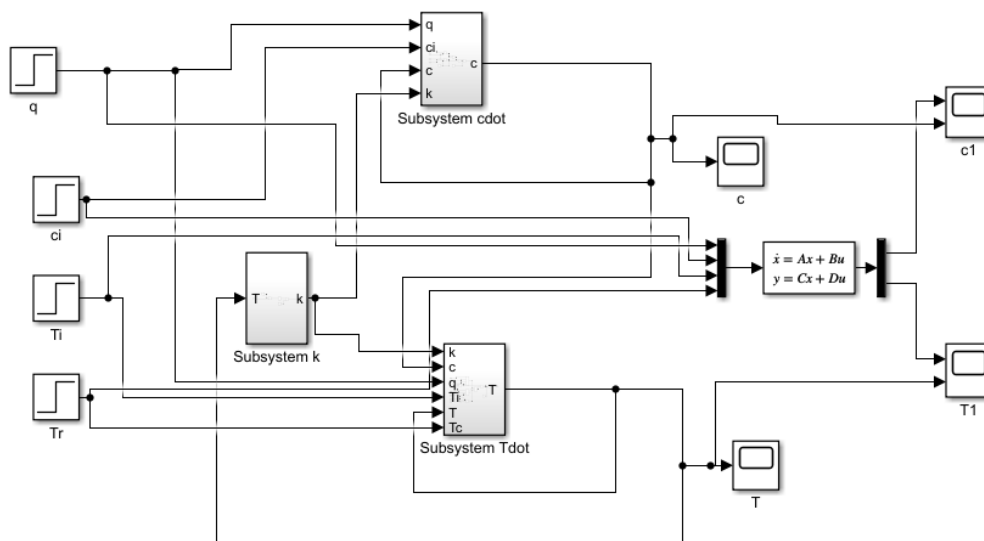


Figura 3.24 Sistemul Simulink care compară sistemul liniar cu cel neliniar pentru reactorul neizoterm

Pentru fiecare dată de intrare s-a considerat datele din punctul static de funcționare. Pentru plot-area și compararea datelor prima dată pentru variabila c iar după pentru variabila T se poate folosi următorul program de matlab:

```
hold on
plot(time.Data, clinear.Data, time.Data, cnelinar.Data);
xlabel('timp[ore]');
ylabel('concentrație[kmol/m3]');
legend({'date liniare', 'date neliniare'}, 'Location', 'northwest');
hold off
figure
hold on
plot(time.Data, Tliniar.Data, time.Data, Tnelinar.Data);
xlabel('timp[ore]');
ylabel('Temperatură[K]');
legend({'date liniare', 'date neliniare'}, 'Location', 'northwest');
hold off
```

Figura 3.25 Cod Matlab pentru afișarea diferenței dintre sistemul liniar și cel neliniar

Graficele rezultate din rularea acestui program sunt următoarele:

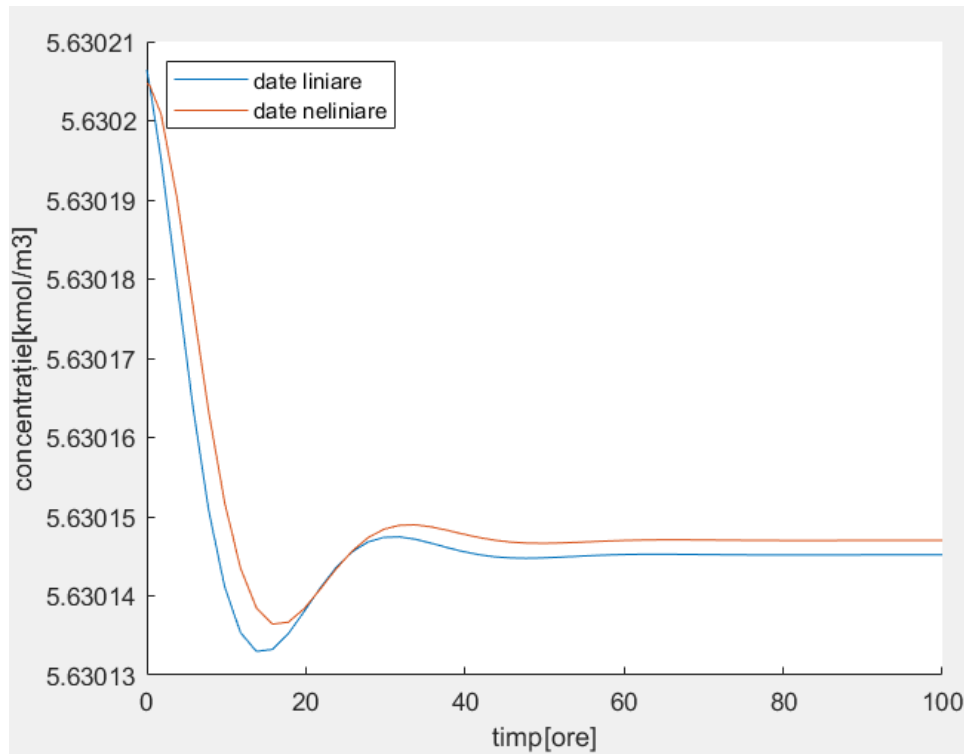


Figura 3.26 Comparare date din sistemul liniar și cel neliniar pentru concentrația la ieșire a sistemului în jurul unui punct de echilibru static

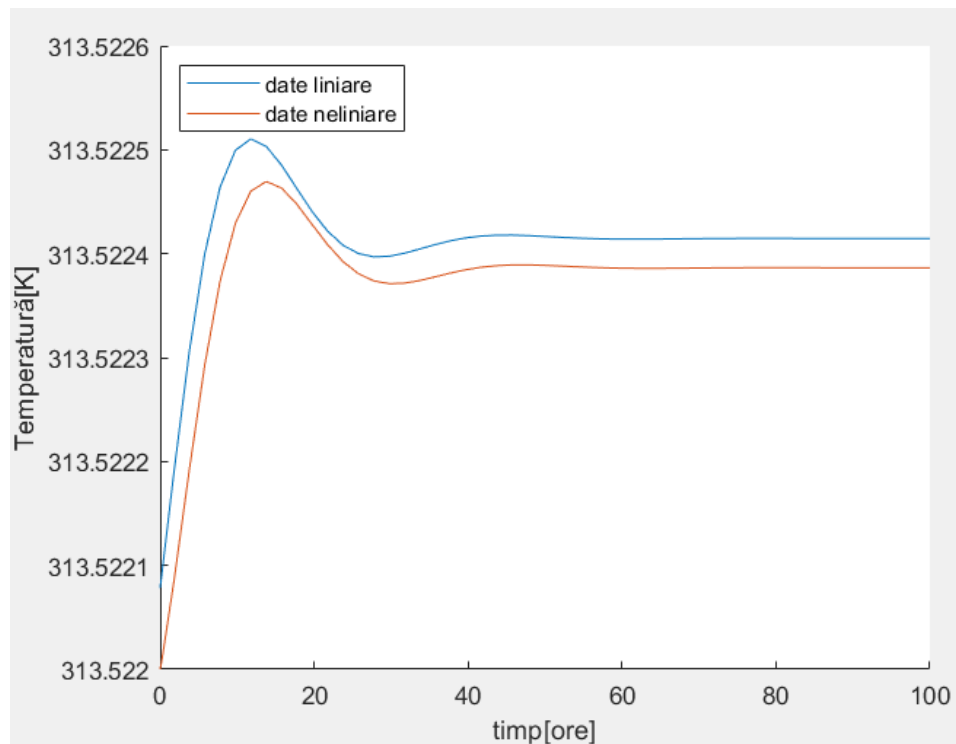


Figura 3.27 Comparare date din sistemul liniar și cel neliniar pentru temperatura la ieșire a sistemului în jurul unui punct de echilibru static

Se observă de pe aceste grafice diferență minimă între datele neliniarizate și cele liniarizate la simulare.

Urmează o analiză a modelelor obținute. O modalitate de testare a modelului neliniar este testarea cu intrări de tip treaptă de 10% față de valoarea staționară.

Primul caz testat este cazul procesului de amestecare. Pentru o valoare nulă a constantei vitezei de reacție ($k=0$), adică în lipsa reacției, va rezulta un proces simplu de amestecare.

În acest caz avem valoarea punctului staționar de funcționare $c=5.63[\text{kmol}/\text{m}^3]$.

Dând o treaptă crescătoare de 10% față de valoarea acestui punct vom avea la ieșire o valoare pentru noul regim staționar de 6.193 ($5.63 \cdot 1.1$) iar constanta de timp a procesului nostru va fi de 4 ore (timpul de răspuns va fi de aproximativ 16 ore). Constanta $\tau = V/q^0$ reprezintă un parametru de construcție important și poartă numele de timp de staționare. Calculând $\tau = V/q^0 = 10/(10/4) = 4$ rezulta aceeași valoare cu cea determinată din grafic, deci sunt șanse ca modelul neliniar realizat să fie corect.

Modelul Simulink pentru proces este:

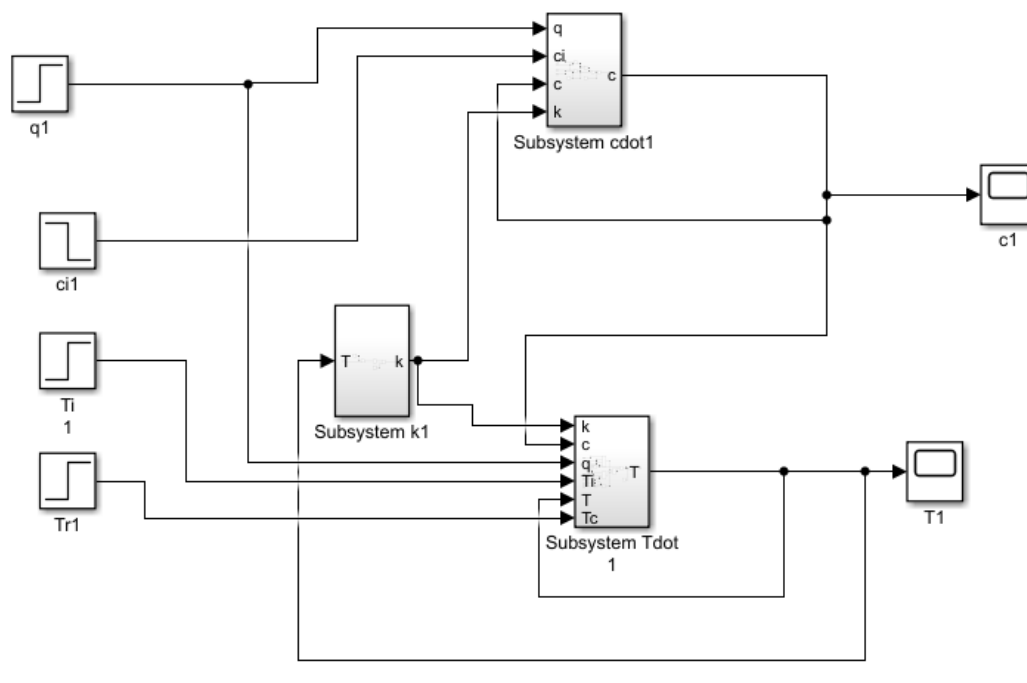


Figura 3.28 Model de simulare pentru cazul de amestecare, $k_0=0$

Exportând datele în mediul de lucru Matlab ne rezultă următorul grafic de pe care se poate citi timpul de răspuns și valoarea de staționare.

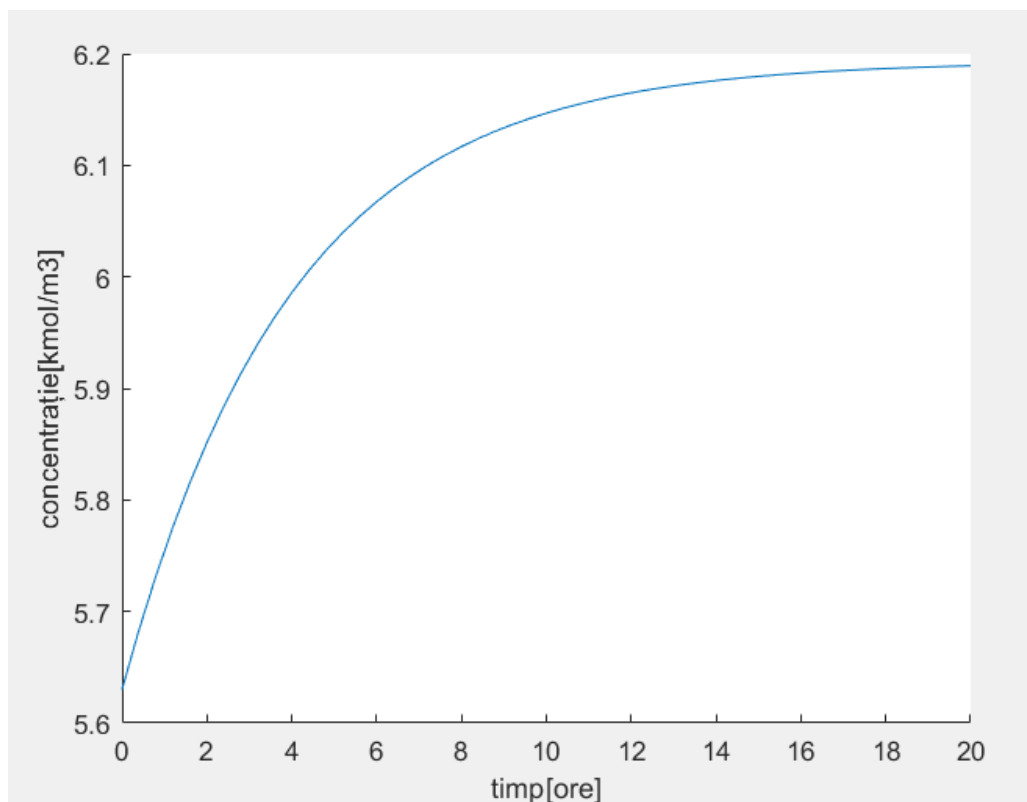


Figura 3.29 Rezultatul simulării la o treaptă de 10% pe intrare – proces de amestecare

Următorul caz testat va fi reacția izotermă, cu $c_i=10$ și k înapoi la valoarea originală de 34930800. În acest caz se consideră ca și temperatură de intrare temperatura constantă din punctul static de funcționare 313.5 K. Ca și intrare considerăm tot o treaptă de 10% pe valoarea concentrației c_i . Sistemul simulink în acest caz arată astfel:

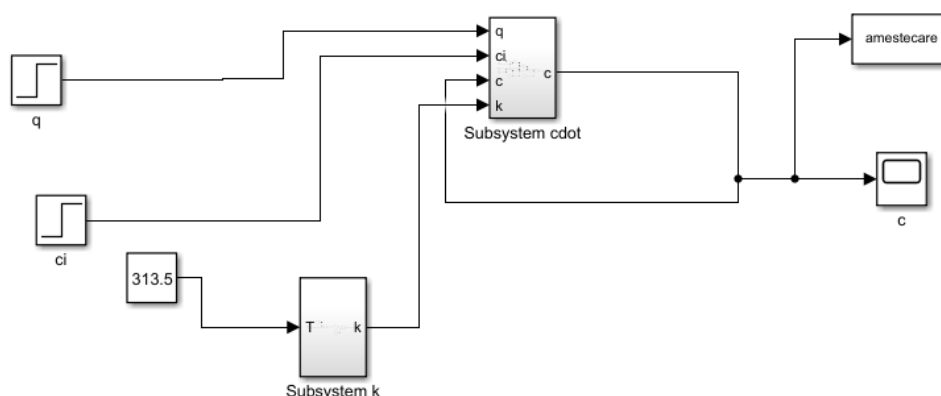


Figura 3.30 Model de simulare pentru cazul izoterm, la temperatura constantă de 313.5 K

Simulând acest sistem ne rezultă un grafic, pe care se observă același punct de pornire, dar un timp de răspuns mult mai scurt. Acest timp de răspuns mai scurt de aproximativ 9 ore se datorează aportului reacției chimice în modificarea concentrației.

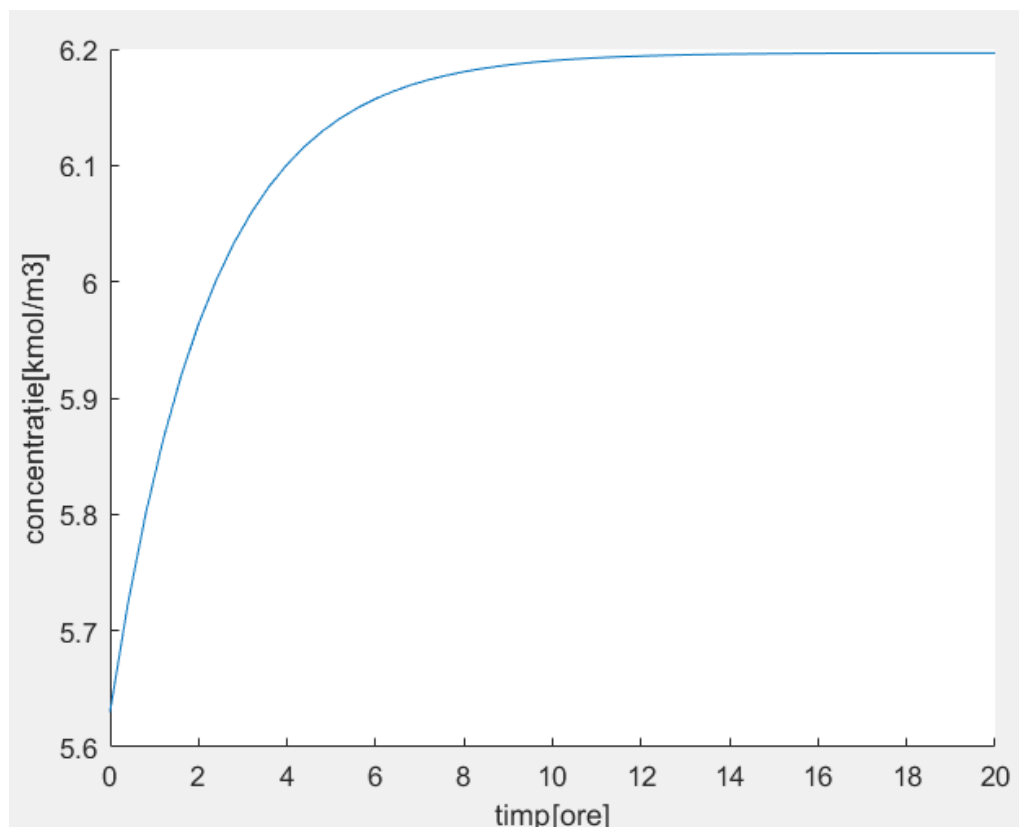


Figura 3.31 Rezultat simulare caz izoterm

Valoarea constantei de timp în acest caz se poate calcula cu relația (a se vedea notițele de curs) $\tau_1 = \tau / (1 + k \tau)$, cu $k = k_0 e^{-E/RT}$. Va rezulta $\tau_1 = 2.25$ ore

4 Desfășurarea lucrării

Se scriu programele Matlab prezentate în lucrare și modelele Simulink (atât varinata cu blocuri elementare cât și varianta cu funcții matlab fcn). Se parcurg toate etapele prezentate în lucrare cu valorile date pentru parametri.

Pentru cele două variante prezentate (1 punct și respectiv 3 puncte de funcționare) se vor calcula: matricea A , polinomul caracteristic și valorile proprii pentru fiecare punct de funcționare și se va confirma stabilitatea sau instabilitatea pe baza acestor valori (a se vedea notițele de curs).

Se va modifica punctul de funcționare încercând diferite valori pentru debitul de intrare reactant q și temperatura agentului de răcire Tr . Se va observa influența acestor modificări asupra graficelor 3.3 și 3.4. Se vor modifica q și Tr astfel încât să se obțină un punct staționar de funcționare stabil și un coeficientul de conversie al reactantului în produs de 0.7.

5 Conținutul referatului

- Valorile variabilelor de intrare pentru care se obține un punct staționar de funcționare stabil și un coeficientul de conversie al reactantului în produs de 0.7.
- Modelul liniarizat în spațiul stărilor, și funcțiile de tranfer de la intrări la ieșiri, analiza stabilității prin calcularea valorilor proprii.
- Compararea și analiza rezultatelor obținute utilizând modelul liniar și cel neliniar pentru două situații – variații de 5 % ale intrarilor și respectiv variații de 50%.