

OBSAH

PŘEDMLUVA.....	7
1 ÚVOD.....	9
1.1 Chemické procesní inženýrství.....	9
1.1.1 Chemické výroby.....	9
1.1.2 Vymezení úlohy procesního inženýrství.....	11
1.1.3 Procesní design.....	16
1.1.4 Informační zdroje pro procesní inženýrství a design procesů.....	18
1.1.5 Nástroje pro procesní inženýrství a design procesů.....	19
1.1.6 Simulace.....	20
1.2 Systémové inženýrství.....	21
1.2.1 Teorie systémů.....	21
1.2.2 Vybrané kapitoly z teorie grafů.....	24
1.2.2.1 Úvodem.....	24
1.2.2.2 Trocha matematiky.....	24
1.2.2.3 Definice grafu.....	25
1.2.2.4 Praktické kódování struktury grafu.....	30
1.2.3 Teorie velkých řídkých systémů.....	32
2 FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ MODELÝ A METODY PRO PROCESNÍ INŽENÝRSTVÍ.....	36
2.1 Úloha fyzikálně-chemických modelů při modelování procesů.....	36
2.2 Přehled fyzikálně-chemických vlastností potřebných pro simulaci.....	37
2.2.1 Vlastnosti čistých látek.....	37
2.2.2 Vlastnosti směsí.....	39
2.2.3 Stavové chování čistých látek a směsí.....	40
2.2.3.1 Úvodem.....	40
2.2.3.2 Klasifikace stavových rovnic.....	41
2.2.3.3 Kubické stavové rovnice.....	43
2.2.3.4 Nekubické stavové rovnice.....	48
2.2.3.5 Prediktivní stavové rovnice.....	51
2.2.3.6 Použitelnost stavových rovnic.....	52
2.2.3.7 Stavové rovnice pro kapalnou fázi.....	56
2.2.4 Termodynamické vlastnosti čistých látek a směsí.....	56
2.2.4.1 Stavové veličiny.....	56
2.2.4.2 Doplnkové veličiny.....	58
2.2.4.3 Termodynamické veličiny pro směsi.....	59
2.2.5 Rovnováha kapalina-pára čistých látek.....	61
2.2.6 Fázové rovnováhy vícesložkových systémů.....	63
2.2.6.1 Ideální směs a dodatkové veličiny.....	63
2.2.6.2 Parciální molární veličiny, aktivity a aktivitní koeficienty.....	64
2.2.6.3 Nejdůležitější modely pro aktivitní koeficienty v kapalně fázi.....	67
2.2.6.4 Expertní doporučení pro výběr modelu pro aktivitní koeficienty.....	72
2.2.7 Rozdělovací koeficienty pro rovnováhu K-P a K-K.....	72
2.2.8 Transportní vlastnosti.....	74
2.2.8.1 Viskozita.....	74

2.2.8.2	Tepelná vodivost.....	77
2.2.8.3	Difúzní koeficient.....	80
2.2.8.4	Povrchové napětí.....	82
2.3	Pseudosložky a odhady fyzikálně-chemických vlastností.....	84
2.3.1	Komplexní směsi	84
2.3.2	Charakterizace komplexních směsí.....	85
2.3.3	Konstrukce náhradních směsí pseudosložek	86
2.3.4	Odhady fyzikálně-chemických vlastností z neúplných dat.....	87
2.4	Fyzikálně-chemické modely v simulačních programech.....	90
2.4.1	Úvodem.....	90
2.4.2	Jak to bývá v simulačních programech	91
3	STACIONÁRNÍ SIMULACE	94
3.1	Modelování pro stacionární simulaci.....	94
3.1.1	Úvod.....	94
3.1.2	Modely proudů.....	95
3.1.3	Modely jednotkových operací.....	97
3.1.4	Příklady modelů vybraných jednotkových operací.....	102
3.1.4.1	Prostý dělič.....	105
3.1.4.2	Prostý míšič.....	107
3.1.4.3	Tepelné výměníky	108
3.1.4.4	Reaktory	113
3.1.4.5	Prosté složkové separátory	119
3.1.4.6	Destilace.....	121
3.1.4.7	Třífázová destilace	124
3.1.4.8	Rektifikace – obecné principy modelování a výpočtu.....	125
3.1.4.9	Rektifikace – aproximativní modely a metody	127
3.1.4.10	Rektifikace – rigorózní modely a metody	132
3.1.4.11	Rektifikace – modely s popisem přestupu hmoty („rate-based“).....	137
3.1.4.12	Absorpce a desorpce	140
3.1.4.13	Extrakce	141
3.1.4.14	Čerpadla, kompresory, turbíny	144
3.1.4.15	Ventily a tlakové ztráty na reálném potrubí	147
3.1.4.16	Ostatní jednotkové operace	151
3.1.5	Simulační model celého procesu.....	152
3.1.6	Simulační úloha	153
3.2	Simulační metody pro stacionární simulaci	154
3.2.1	Úvod.....	154
3.2.2	Sekvenčně-modulární metody	155
3.2.2.1	Úvodem.....	155
3.2.2.2	Příklady realizace sekvenčně-modulárního řešení	156
3.2.2.3	Sekvenčně-modulární metody a struktura proudového schématu	157
3.2.2.4	Předběžná strukturální analýza proudového schématu a výpočetní posloupnost.....	159
3.2.2.5	Algoritmy pro dekompozici proudového schématu	159
3.2.2.6	Algoritmus pro nalezení minimálního počtu recyklů	160
3.2.2.7	Numerická realizace sekvenčně-modulárních metod	161
3.2.3	Rovnicově orientované metody	163
3.2.3.1	Úvodem.....	163
3.2.3.2	Globální rovnicově orientované metody	164

3.2.3.3	Ukázka flexibilního využití stejného modelu pro různé simulační úlohy ...	166
3.2.3.4	Dekompozice soustavy algebraických rovnic	168
3.2.3.5	Strukturální analýza soustavy algebraických rovnic	171
3.2.3.6	Numerické aspekty ROM.....	175
3.3	Sestavení simulační úlohy a analýza jejích výsledků.....	175
3.3.1	Převod procesního problému na simulační úlohu	175
3.3.1.1	Chemické složky.....	176
3.3.1.2	Proudové schéma a jednotkové operace.....	176
3.3.1.3	Fyzikálně-chemický popis.....	178
3.3.1.4	Shrnutí.....	178
3.3.2	Analýza výsledků simulace.....	179
4	DYNAMICKÁ SIMULACE.....	182
4.1	Využití dynamické simulace	182
4.1.1	Dynamická simulace kontinuálních procesů.....	182
4.1.2	Dynamická simulace vsádkových procesů	182
4.1.3	Simulace a návrh měřicích a regulačních systémů	183
4.1.4	Dynamická optimalizace.....	185
4.2	Dynamické modely jednotkových operací	186
4.2.1	Obecné principy dynamického modelování.....	186
4.2.2	Dynamické bilance.....	186
4.2.3	Obecně o rovnicích pro popis dynamického chování	188
4.2.4	Vybrané příklady dynamických modelů jednotkových operací.....	189
4.2.4.1	Výtok kapaliny z otevřené nádoby	189
4.2.4.2	Průtočná ideálně míchaná nádoba I.....	190
4.2.4.3	Průtočná ideálně míchaná nádoba II.	191
4.2.4.4	Vsádková destilace	192
4.2.4.5	Vsádková rektifikace.....	194
4.2.4.6	Dynamika reaktorů a vsádkový reaktor.....	197
4.2.4.7	Řídící prvky, PID regulátor	198
4.3	Simulační metody pro dynamickou simulaci	201
4.3.1	Obecný průběh simulačního výpočtu při dynamické simulaci	201
4.3.2	Sekvenčně-modulární přístup	202
4.3.3	Rovnicově orientovaný přístup	202
	SEZNAM SYMBOLŮ A ZKRATEK.....	204
	Symbole	204
	Zkratky.....	213
	LITERATURA	216
	PŘÍLOHA A: VYBRANÉ NUMERICKÉ METODY PRO PROCESNÍ	
	INŽENÝRSTVÍ	219
	A.1 Úvod.....	219
	A.2 Řešení systémů lineárních algebraických rovnic	220
	A.2.1 Obecně	220
	A.2.2 Numerické metody pro řešení čtvercových systémů LAR.....	223
	A.2.2.1 Základní Gaussova eliminační metoda	223
	A.2.2.2 Gaussova eliminační metoda s výběrem hlavního prvku.....	224
	A.2.2.3 Gauss-Jordanova eliminační metoda	225
	A.2.2.4 LU rozklad.....	225

A.2.3	Numerické metody pro řešení řídkých čtvercových systémů LAR	225
A.2.3.1	Obecně	225
A.2.3.2	Soustavy s tridiagonální maticí	225
A.2.3.3	Ukládací schémata	227
A.3	Řešení systémů nelineárních algebraických rovnic	232
A.3.1	Obecně	232
A.3.2	Řešení jedné nelineární algebraické rovnice o jedné neznámé	233
A.3.2.1	Newtonova metoda	233
A.3.2.2	Sečnová metoda	234
A.3.2.3	Metoda půlení intervalu	234
A.3.2.4	Metoda postupných aproximací	234
A.3.2.5	Analytická metoda řešení kubické rovnice	235
A.3.3	Řešení systémů nelineárních algebraických rovnic	236
A.4	Řešení systémů obyčejných diferenciálních rovnic	237
A.4.1	Obecně	237
A.4.2	Numerické metody pro systémy ODR	238
A.4.2.1	Explicitní Eulerova metoda	238
A.4.2.2	Implicitní Eulerova metoda	238
A.4.2.3	Metody Runge-Kutta – Heunova varianta a Kuttova varianta	238
A.4.2.4	Metoda Crank-Nicolsonova	239
A.5	Řešení systémů diferenciálně-algebraických rovnic	240
A.5.1	Obecně	240
A.5.2	Numerické metody pro systémy DAR	241
PŘÍLOHA B: ALGORITMY PRO DEKOMPOZICI		242
B.1	Úvod	242
B.2	Algoritmus M	242
B.3	Algoritmus S	246