

Laboratorní cvičení – Numerická identifikace parametrů modelu přestupu CO₂ z experimentálních dat

A. Identifikace koeficientu efektivního přestupu hmoty kLa

Je nutné provádět z dat pro měření v prostředí s nízkým pH (pH 4.1)

1. Přímo z měřených dat pro rozpuštěné CO₂

-pro identifikaci parametru je zapotřebí zajistit dostatečně rychlou odezvu měřící elektrody. Odezva sondy na skokovou změnu (čas 24.4 až cca 26 h) ukazuje dostatečně rychlou odezvu sondy v porovnání s přechodovým dějem v reálném experimentu (čas 0.15 až cca 2 h pro pH 4.1 a čas 5.55 až cca 12 h pro pH 7.4) a tudíž je možné sondu pro identifikaci kLa použít.

-vzhledem k nelineární odezvě sondy je nutné sondu kalibrovat, čímž mohou vzniknout nepřesnosti.

!pozn. zatím není dostupná přesná kalibrace sondy, proto prosím použijte alternativní postup z bodu 2 a postup z bodu 1 bude použit pro ověření

2. Nepřímo z měřených dat pro plynné CO₂ na výstupu z bioreaktoru (po průchodu kapalinou).

-ze znalosti koncentrace CO₂ ve vstupním plynu, koncentrace CO₂ po průchodu kapalinou (gCO₂) a velikosti průtoku plynu kapalinou je možné vypočítat tok CO₂ z plynu do kapaliny.

-při podmínkách experimentu je **molární objem plynu Vn 25.18 litrů** (stav, kdy právě jeden mol plynu zaujímá daný objem - výpočet viz snímek 46 prezentace). **Průtok plynu kapalinou Q je 100 ml/min, koncentrace CO₂ v plynu gCO₂ je 5000 ppm a objem kapaliny V je 0.4 litru.**

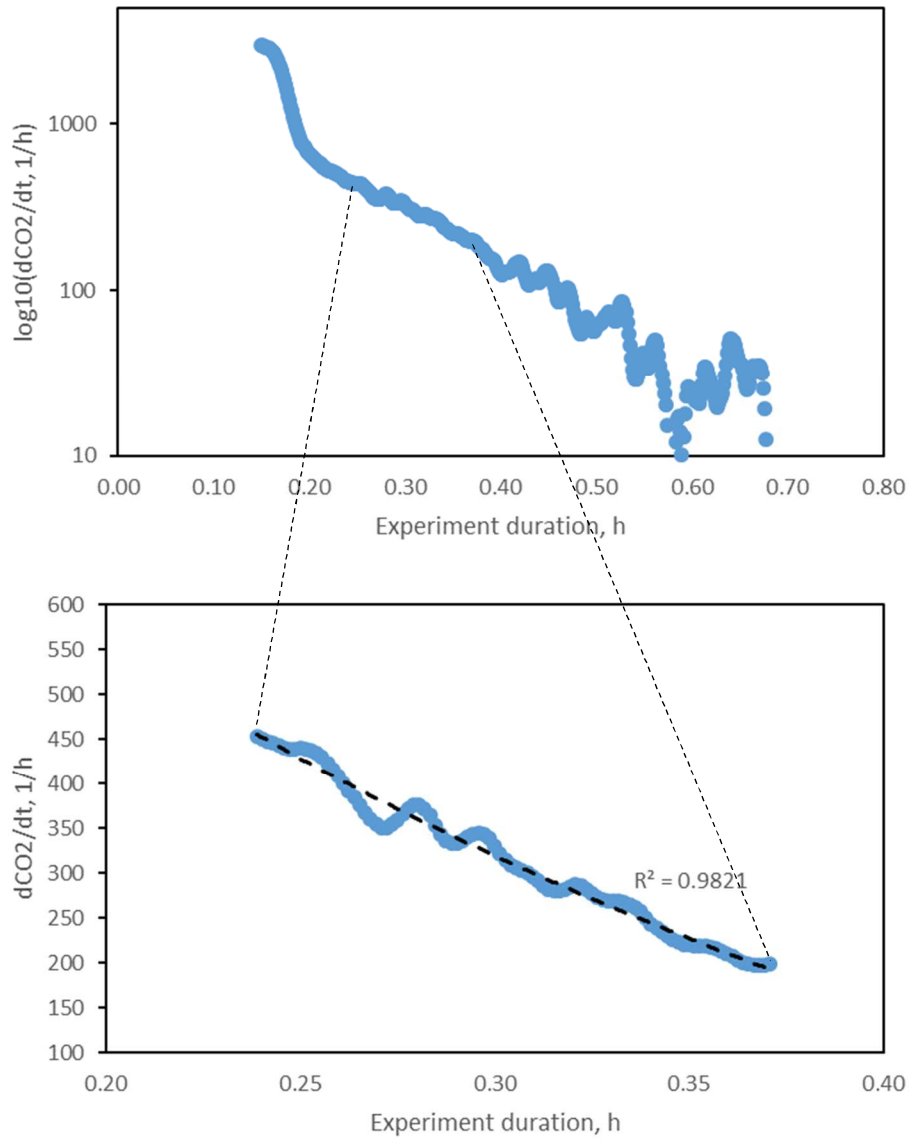
-tok CO₂ z plynu do kapaliny je dán následujícím vztahem:

$$flux_{CO_2}(t) = (gCO_2^{IN} - gCO_2(t)) \cdot \frac{Q}{Vn}$$

-na základě tohoto vztahu lze dopočítat změnu koncentrace rozpuštěného CO₂ (dCO₂)

$$\frac{dCO_2}{dt} = \frac{flux_{CO_2}(t)}{V}$$

-z takto zrekonstruované rychlosti akumulace CO₂ v kapalině je potřeba pro další krok vybrat vhodnou část křivky, kdy není rekonstruovaný signál zatížen šumem jeho změna je zároveň logaritmická (viz. Obrázek 1)



Obrázek 1 Rekonstruovaný průběh změny rychlosti akumulace CO₂ v kapalině

-pro tento logaritmický úsek zrekonstruovaného signálu lze již dopočítat naakumulované CO₂ za daný časový úsek (krok) následovně:

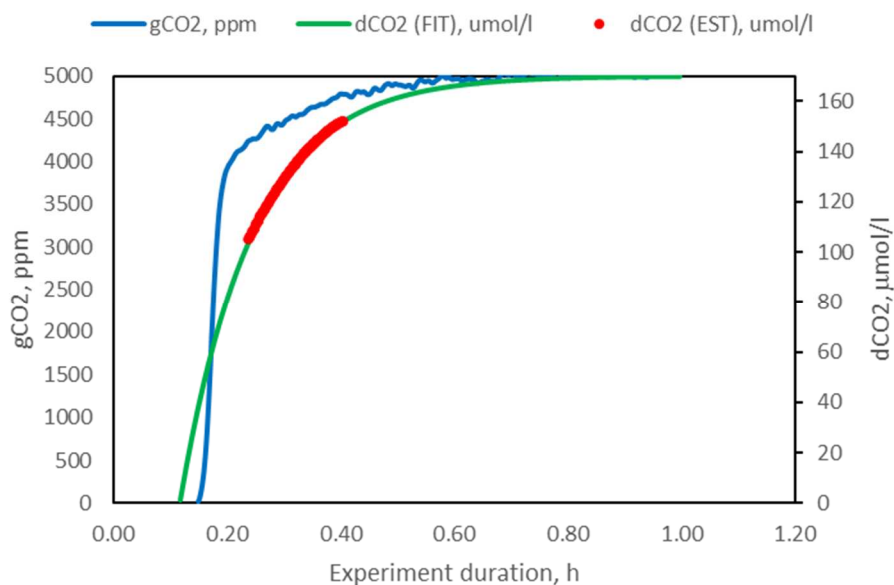
—

a postupným nasčítáním jednotlivých kroků v daném logaritmickém úseku zrekonstruovat část průběhu dCO₂ (viz. červená křivka v Obrázku 2)

-identifikaci parametru modelu kLa_CO2_eff lze provést v Copasi nebo alternativně v

Excelu pomocí náhrady algebraickou funkcí $\frac{A}{1 + D \cdot e^{-\tau \cdot t}}$, kde **A** je saturační koncentrace dCO₂, která je pro dané podmínky experimentu **170** a **D** je posunutí (zohledňuje dopravní zpoždění měřeného signálu), a **tau** je hledaný parametr pro

výpočet koeficientu přestupu hmoty kLa jako kLa —



Obrázek 2 Zrekonstruovaný průběh akumulace CO₂ v kapalině (dCO₂) a měřená koncentrace CO₂ v plynu po průchodu kapalinou (gCO₂)

-celou rekonstrukci a popsané výpočet lze realizovat v Excelu (pro odhad parametru τ a D je nutné použít doplněk Řešitel).

B. Identifikace parametrů hydratace CO₂ a dehydratace HCO₃⁻

S použitím identifikovaného parametru kLa lze identifikovat parametry $k_{1_}$ z dat pro měření v prostředí s neutrálním pH (pH 7.5 až 7.3).

Výpočet je nutné provést v Copasi

!pozn. zatím není dostupná přesná kalibrace sondy, proto prosím řešitě dob A a v průběhu příštího týdne dodám kalibraci