

A. Identifikace koeficientu efektivního přestupu hmoty $k_L a$

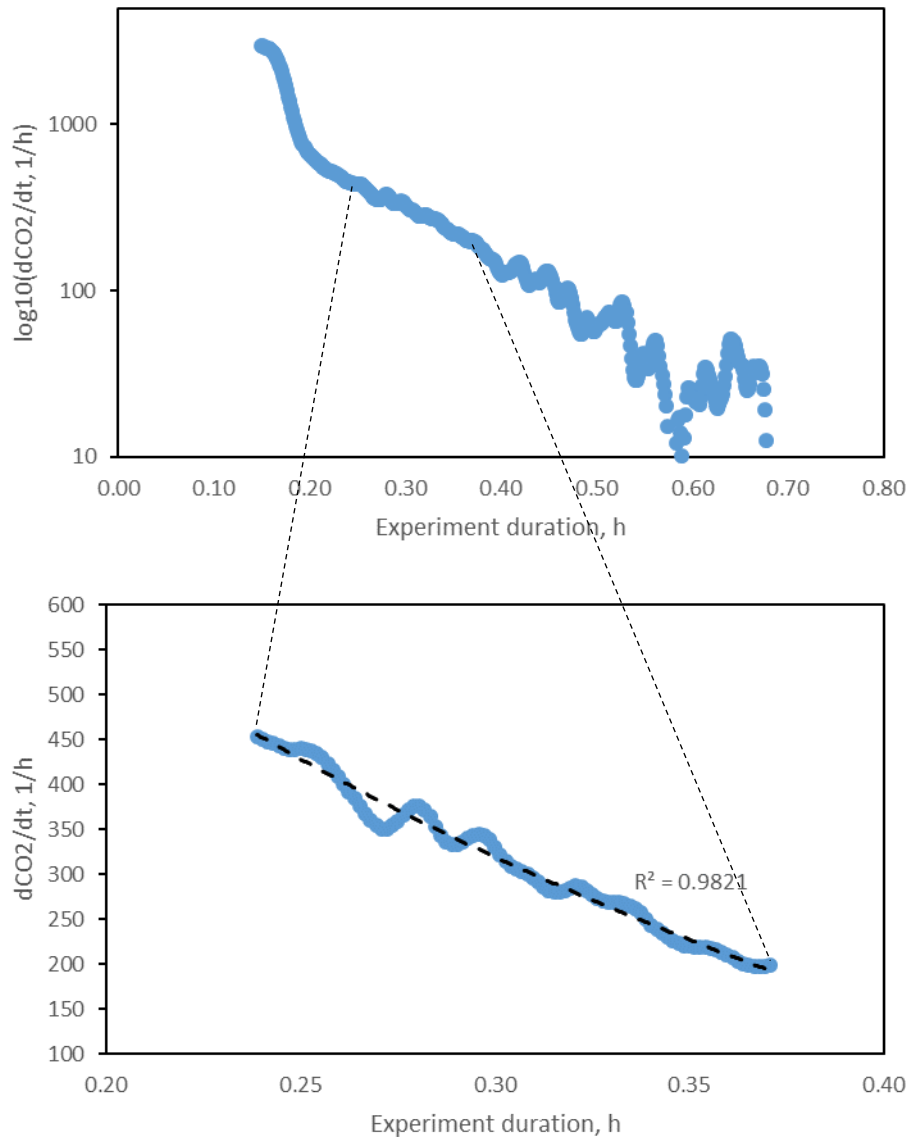
Je nutné provádět z dat naměřených v prostředí s nízkým pH (pH 4.1)

1. Přímou 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 $k_L a$ použít.
 - vzhledem k nelineární odezvě sondy je nutné sondu kalibrovat, čímž mohou vzniknout nepřesnosti.
2. Nepřímou 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) ve výstupním plynu a hodnoty průtoku plynu kapalinou je možné vypočítat molární 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 54 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:
$$flux_{CO_2}(t) = (gCO_2^{IN} - gCO_2^{OUT}(t)) \cdot \frac{Q}{Vn}$$
 - 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 a jeho změna je zároveň logaritmická (viz. Obrázek 1)

Laboratorní cvičení PV225
Numerická identifikace parametrů modelu přestupu CO₂ z experimentálních dat



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:

$$dCO_2(i) = \frac{dCO_2}{dt} \cdot (t_{i+1} - t_i)$$

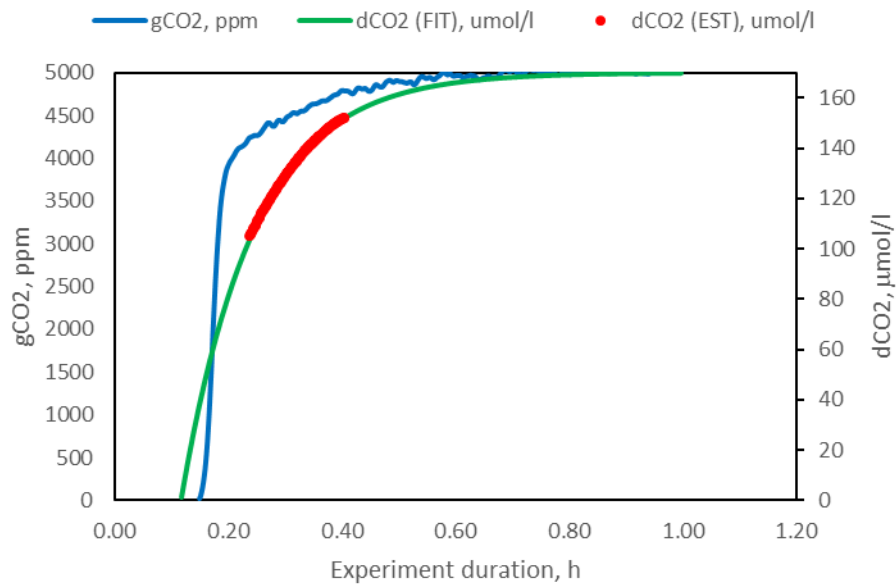
a postupným nasčítáním jednotlivých kroků v daném logaritmickém úseku zrekonstruovat část průběhu dCO_2 (viz. červená křivka v Obrázku 2)

-identifikaci parametru modelu $kLa_CO_2_eff$ lze provést v Copasi nebo alternativně v

Excelu pomocí náhrady algebraickou funkcí $dCO_2(t) = A \cdot (1 - e^{-\frac{t-D}{\tau}})$, kde A je saturační koncentrace dCO_2 , která je pro dané podmínky experimentu **170** a D je posunutí (zohledňuje dopravní zpoždění měřeného signálu), a τ je hledaný parametr pro

Laboratorní cvičení PV225
Numerická identifikace parametrů modelu přestupu CO₂ z experimentálních dat

výpočet koeficientu přestupu hmoty k_La jako $k_{L}a = \frac{1}{\tau}$



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 k_La lze identifikovat parametry k₁* z dat pro měření v prostředí s neutrálním pH (pH 7.5 až 7.3).

Výpočet je nutné provést v Copasi