

## Laboratorní cvičení – Numerická identifikace parametrů modelu přestupu CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub>

-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 CO<sub>2</sub> na výstupu z bioreaktoru (po průchodu kapalinou).

-ze znalosti koncentrace CO<sub>2</sub> ve vstupním plynu, koncentrace CO<sub>2</sub> po průchodu kapalinou (gCO<sub>2</sub>) a velikosti průtoku plynu kapalinou je možné vypočítat tok CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> v plynu gCO<sub>2</sub> je 5000 ppm a objem kapaliny V je 0.4 litru.**

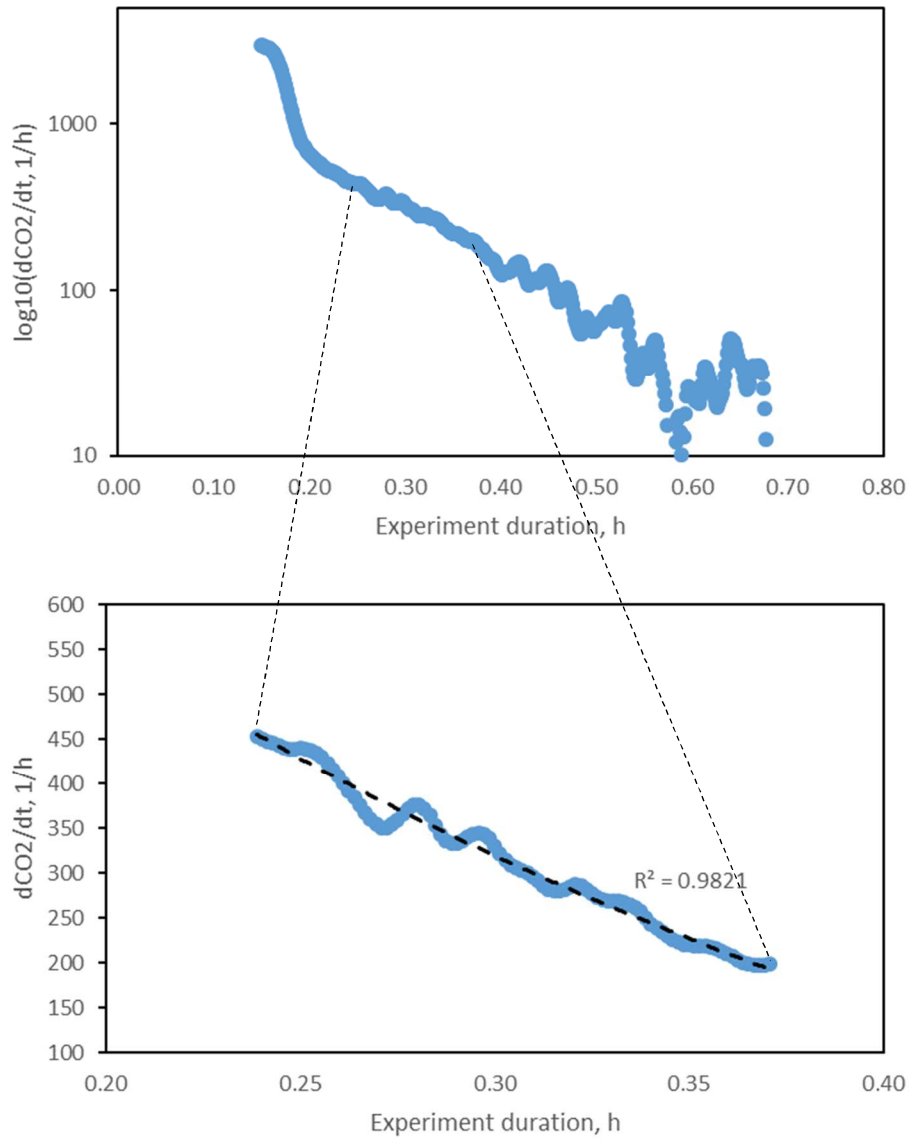
-tok CO<sub>2</sub> z plynu do kapaliny je dán následujícím vztahem:

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

-na základě tohoto vztahu lze dopočítat změnu koncentrace rozpuštěného CO<sub>2</sub> (dCO<sub>2</sub>)

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

-z takto zrekonstruované rychlosti akumulace CO<sub>2</sub> v kapalině je potřeba pro další krok vybrat vhodnou část křivky, kdy není zrekonstruovaný signál zatížen šumem jeho změna je zároveň logaritmická (viz. Obrázek 1)



Obrázek 1 Rekonstruovaný průběh změny rychlosti akumulace  $CO_2$  v kapalině

-pro tento logaritmický úsek zrekonstruovaného signálu lze již dopočítat naakumulované  $CO_2$  za daný časový úsek (krok) následovně:

—

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

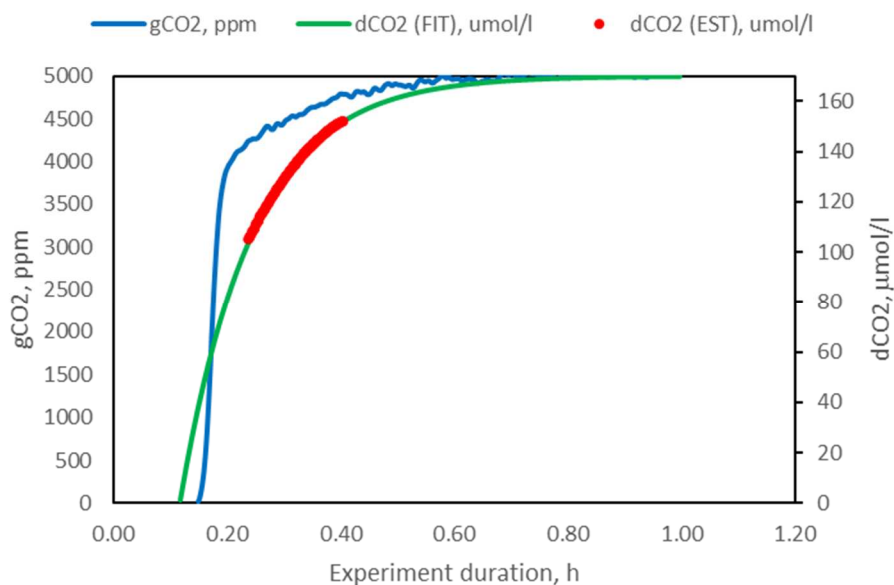
-identifikaci parametru modelu  $kLa\_CO2\_eff$  lze provést v Copasi nebo alternativně v

Excelu pomocí náhrady algebraickou funkcí

—, kde  $A$  je

saturační koncentrace  $dCO_2$ , 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 CO<sub>2</sub> v kapalině (dCO<sub>2</sub>) a měřená koncentrace CO<sub>2</sub> v plynu po průchodu kapalinou (gCO<sub>2</sub>)

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

#### B. Identifikace parametrů hydratace CO<sub>2</sub> a dehydratace HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>

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*