

Univerzita Pardubice
Fakulta chemicko-technologická

Využití matematických opensource softwarových produktů při řešení
chemicko-inženýrských úloh

Michal Chejn

Bakalářská práce

2018

Univerzita Pardubice
Fakulta chemicko-technologická
Akademický rok: 2017/2018

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Michal Chejn**
Osobní číslo: **C15043**
Studijní program: **B2802 Chemie a technická chemie**
Studijní obor: **Chemie a technická chemie**
Název tématu: **Využití matematických opensource softwarových produktů při řešení chemicko-inženýrských úloh**
Zadávající katedra: **Ústav environmentálního a chemického inženýrství**

Z á s a d y p r o v y p r a c o v á n í :

1. Zpracujte literární rešerši týkající se problematiky difúzních operací a uveďte stručný přehled matematických opensource softwarových produktů.
2. Pozornost v oblasti difúzních operací zaměřte především na řešení izoterní absorpce se stupňovitým stykem fází pro netěkavý absorbent a pohlcování jediné složky z plynné fáze, rektifikace pomocí McCabe-Thielovy metody a protiproudé extrakce.
3. Získané poznatky využijte pro vytvoření algoritmů pro řešení vybraných difúzních operací ve vybraném opensource programu a vytvořené algoritmy prezentujte na konkrétních příkladech.
4. Bakalářskou práci zpracujte v souladu se Směrnicí UPa č. 9/2012 "Pravidla pro zveřejňování závěrečných prací a jejich základní jednotnou formální úpravu" v platném znění.

Univerzita Pardubice
Fakulta chemicko-technologická
Akademický rok: 2017/2018

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Michal Chejn**
Osobní číslo: **C15043**
Studijní program: **B2802 Chemie a technická chemie**
Studijní obor: **Chemie a technická chemie**
Název tématu: **Využití matematických opensource softwarových produktů při řešení chemicko-inženýrských úloh**
Zadávající katedra: **Ústav environmentálního a chemického inženýrství**

Z á s a d y p r o v y p r a c o v á n í :

1. Zpracujte literární rešerši týkající se problematiky difúzních operací a uveďte stručný přehled matematických opensource softwarových produktů.
2. Pozornost v oblasti difúzních operací zaměřte především na řešení izotermní absorpce se stupňovitým stykem fází pro netěkavý absorbent a pohlcování jediné složky z plynné fáze, rektifikace pomocí McCabe-Thielovy metody a protiproudé extrakce.
3. Získané poznatky využijte pro vytvoření algoritmů pro řešení vybraných difúzních operací ve vybraném opensource programu a vytvořené algoritmy prezentujte na konkrétních příkladech.
4. Bakalářskou práci zpracujte v souladu se Směrnicí UPa č. 9/2012 "Pravidla pro zveřejňování závěrečných prací a jejich základní jednotnou formální úpravu" v platném znění.

Prohlašuji:

Tuto práci jsem vypracoval samostatně. Veškeré literární prameny a informace, které jsem v práci využil, jsou uvedeny v seznamu použité literatury.

Byl jsem seznámen s tím, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorský zákon, zejména se skutečností, že Univerzita Pardubice má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona, a s tím, že pokud dojde k užití této práce mnou nebo bude poskytnuta licence o užití jinému subjektu, je Univerzita Pardubice oprávněna ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které na vytvoření díla vynaložila, a to podle okolností až do jejich skutečné výše.

Beru na vědomí, že v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších předpisů, a směrnicí Univerzity Pardubice č. 9/2012, bude práce zveřejněna v Univerzitní knihovně a prostřednictvím Digitální knihovny Univerzity Pardubice.

V Pardubicích dne 1. 7. 2018

Michal Chejn

PODĚKOVÁNÍ

Tímto bych rád poděkoval svému vedoucímu práce panu Ing. Bedřichu Šiškoví, CSc. za jeho odbornou pomoc, cenné rady, poskytnutí materiálů, pomoc při řešení algoritmů a velkou dávku trpělivosti, které mi pomohli při zpracování a řešení jednotlivých úkolů bakalářské práce.

ANOTACE

Tato bakalářská práce se zabývá chemicko-inženýrskými difuzními operacemi. Práce je zaměřena na výpočty absorpce, extrakce a rektifikace se stupňovitým stykem fází s protiproudým uspořádáním v prostředí opensource programu Scilab.

KLÍČOVÁ SLOVA

Difuzní operace, opensource program, Scilab

TITLE

Using mathematical opensource software products to solve chemical-engineering problems

ANNOTATION

This bachelor thesis deals with the description and solution of chemical engineering diffusion operations. The thesis is focused on the solution of absorption, extraction and rectification with stagewise phase contact with countercurrent arrangement in the opensource program Scilab.

KEYWORDS

Diffusion Operations, Opensource Program, Scilab

OBSAH

| | |
|--|-----------|
| SEZNAM ZKRATEK | 9 |
| SEZNAM OBRÁZKŮ | 10 |
| SEZNAM SYMBOLŮ A ZKRATEK | 11 |
| ÚVOD..... | 13 |
| 1 DIFUZNÍ OPERACE | 14 |
| 1.1 Absorpce | 14 |
| 1.2 Rovnováha při absorpci | 15 |
| 1.3 Absorpce se stupňovitým stykem fází | 16 |
| 1.3.1 Výpočet počtu teoretických pater | 16 |
| 1.4 Extrakce | 18 |
| 1.4.1 Protiproudá extrakce | 19 |
| 1.4.2 Extrahovadlo a rozpouštědlo jsou omezeně mísitelné | 19 |
| 1.4.3 Extrahovadlo a rozpouštědlo jsou navzájem nemísitelné | 20 |
| 1.4.4 Výpočet počtu teoretických pater | 20 |
| 1.5 Destilace..... | 23 |
| 1.6 Rektifikace | 24 |
| 1.6.1 McCabeova–Thieleova metoda | 25 |
| 1.6.2 Ovlivnění polohy q-přímky entalpickým stavem nástřiku | 28 |
| 2 PROGRAMY PRO ŘEŠENÍ CHEMICKO-INŽENÝRSKÝCH ÚLOH | 29 |
| 2.1 Specializované programy..... | 29 |
| 2.2 Programy pro numerické výpočty..... | 30 |
| 2.2.1 Matlab | 30 |
| 2.2.2 Scilab | 31 |
| 2.2.3 Maxima | 31 |
| 2.2.4 Octave | 32 |
| 3 APLIKOVANÁ ČÁST | 33 |
| 3.1 Obecný postup při řešení difuzních operací a tvorbě skriptů v programu Scilab..... | 34 |
| 3.2 Ukázka řešení na příkladu rektifikace | 35 |
| 3.2.1 Rovnovážná data – náhradní funkce..... | 36 |

| | | |
|-----------------------------------|--|-----------|
| 3.2.2 | Zadávání vstupních dat | 38 |
| 3.2.3 | Bilanční výpočty, rovnice pracovních přímek a q-přímky | 39 |
| 3.2.4 | Určení počtu teoretických pater | 40 |
| 3.2.5 | Řešení absorpce a extrakce | 42 |
| ZÁVĚR | | 43 |
| POUŽITÁ LITERATURA..... | | 44 |
| ELEKTRONICKÉ PŘÍLOHY | | 46 |

SEZNAM ZKRATEK

PTP počet teoretických pater

PPObČK obohacovací část rektifikační kolony

PPOchČK ochuzovací část rektifikační kolony

SEZNAM OBRÁZKŮ

| | |
|--|----|
| Obrázek 1 – Rovnovážná křivka součinitele fázové rovnováhy..... | 16 |
| Obrázek 2 – Schéma protiproudého absorbéru [4] | 17 |
| Obrázek 3 – Určení počtu teoretických pater u absorbéru se stupňovitým stykem fází. | 18 |
| Obrázek 4 – Grafické zjištění PTP při protiproudé extrakci při omezené mísitelnosti složek A a B [5] | 20 |
| Obrázek 5 – Schéma protiproudě pracujícího kontinuálního extraktoru s N stupni [4] | 21 |
| Obrázek 6 – Stanovení počtu teoretických pater, čisté extrahovadlo a původní rozpouštědlo jsou vzájemně nemísitelné | 22 |
| Obrázek 7 – Schéma rektifikační kolony [4] | 25 |
| Obrázek 8 – Grafické rozhraní (skript) pro prokládání rovnovážných dat – ukázka pro systém etanol-voda a náhradní funkci Modifikovaná relativní těkavost | 37 |
| Obrázek 9 – Dialogové okno v Scilabu..... | 38 |
| Obrázek 10 – Výpis výsledků řešení rektifikace v konzoli programu | 41 |
| Obrázek 11 – Grafický výstup řešení rektifikace..... | 41 |
| Obrázek 12 – Grafický výstup řešení a) absorpce, b) extrakce..... | 42 |

SEZNAM SYMBOLŮ A ZKRATEK

| | | |
|------------|--|---------|
| A | absorpční faktor | [-] |
| c | molární koncentrace | [mol/l] |
| H | výparné teplo | [J] |
| h | molární entalpie | [J/mol] |
| Δh | změna molárního tepla | [J/mol] |
| k_c | rozdělovací koeficient | [-] |
| m | součinitel fázové rovnováhy daný rovnicí (1.3) | [-] |
| \dot{m} | hmotnostní tok | [kg/s] |
| N | počet teoretických pater | [-] |
| \dot{n} | látkový tok | [mol/s] |
| p | tlak | [Pa] |
| q | parametr q | [-] |
| R | refluxní poměr | [-] |
| t | teplota | [°C] |
| x | molový zlomek složky v kapalině | [-] |
| X | relativní molový zlomek složky v kapalině | [-] |
| x' | hmotnostní zlomek složky v kapalině | [-] |
| X' | relativní hmotnostní zlomek složky v kapalině | [-] |
| y | molový zlomek v plynu | [-] |
| Y | relativní molový zlomek v plynu | [-] |
| y' | hmotnostní zlomek v plynu | [-] |
| Y' | relativní hmotnostní zlomek v plynu | [-] |
| α | relativní těkavost | [-] |
| Ψ | součinitel fázové rovnováhy daný rovnicí (1.2) | [-] |
| φ | absorpční účinek | [-] |

INDEXY

- A původní rozpouštědlo (extrakce), pohlcovaná složka (absorpce)
- B spodní produkt (rektifikace), nové rozpouštědlo (extrakce)
- C extrahovaná složka
- G plynná fáze
- L kapalná fáze
- I inert
- * rovnovážné údaje
- F nástřík
- D destilát
- V var
- j ochuzovací část rektifikační kolony
- i obohacovací část rektifikační kolony
- FL nástřík při bodu varu

ÚVOD

Bakalářská práce se zabývá problematikou řešení difuzních operací, probíraných v rámci bakalářského studia v předmětu Chemické inženýrství I, v prostředí opensource softwarového produktu Scilab, což je volně šiřitelný program pro numerické výpočty, simulace apod. Práce je zaměřena na řešení absorpce, rektifikace a extrakce při stupňovitém styku fází a protiproudém uspořádání a je cílena především pro studijní účely. Při řešení uvedených difuzních operací se jedná nejčastěji o výpočet celkové bilance, zjištění průběhu pracovní přímky a příp. limitních poloh této přímky a následné zjištění počtu teoretických stupňů k realizaci požadované operace tak, aby bylo splněno požadované zadání.

Vlastní práce je členěna do několika kapitol, kdy v úvodní teoretické části jsou shrnuty základní informace o difuzních operacích týkající se absorpce, extrakce a rektifikace a také jsou zde shrnuty informace o programech vhodné pro řešení chemicko-inženýrských úloh.

Druhou částí této práce je aplikovaná část, kde je popsán algoritmus pro vybrané výpočty z oblasti difuzních operací – absorpce, rektifikace a extrakce. Tato část je členěna do několika sekcí z důvodu detailního zachycení veškerých kroků provedených při programování algoritmu pro řešení uvedených difuzních operací.

Příklady, na kterých bylo prezentováno řešení pomocí programu Scilab v rámci této práce, jsou řešeny na seminářích z Chemického inženýrství I pomocí milimetrového papíru, geometrických pomůcek a mnoha výpočtů. Postup používaný na seminářích je tedy dlouhý, časově náročný a také ve velké míře závisí na dokonalosti grafického zpracování pro dostatečně přesné výpočty. Proto i cílem této práce bylo naprogramování takového algoritmu, kde dochází k minimalizaci vzniku možné chyby nebo chyby vlivem nepřesnosti rýsování a to tak, že uživatel pouze zadá vstupní hodnoty pro daný typ úlohy do dialogového okna a na základě vytvořeného algoritmu proběhne v prostředí programu Scilab výpočet se zobrazením požadovaných výsledků a grafického znázornění řešení. Potom tedy mohou tyto algoritmy sloužit pro kontrolu řešení seminářních příkladů, jež jsou počítány a zpracovávány ručně na seminářích v předmětu Chemické inženýrství I.

1 DIFUZNÍ OPERACE

V chemickém průmyslu mají velký význam děje, při kterých se mění složení směsi s časem, ale i místem v daném procesu. Toto se ovšem netýká jen chemických reakcí, ale také dalších procesů, jako mohou být destilace, extrakce anebo sušení, kde k chemické reakci nutně nemusí docházet. Výsledkem těchto pochodů často bývá rozdělení směsi na několik složek či frakcí s jiným složením než měla původní směs. Tyto děje nazýváme jako difuzní operace.

Při difuzních pochodech se rozdělují systémy, jež jsou tvořeny složkami. Tyto systémy se z makroskopického hlediska považují za spojité. Význam těchto pochodů je značný, protože téměř při každé chemické výrobě se látka musí předběžně čistit a pak oddělovat výsledný produkt od vedlejších. Mezi difuzní operace řadíme absorpci, adsorpci, sušení, destilaci, rektifikaci a extrakci [1]. V následujícím textu budou popsány difuzní operace, na které je zaměřena vlastní bakalářská práce (absorpce, rektifikace, extrakce) a postupy řešení pro dané zjednodušující předpoklady.

1.1 Absorpce

Absorpce je operace, kdy plynná směs, složená ze dvou anebo více složek přichází do styku s kapalinou, kde jedna nebo více složek plynné směsi se v této kapalině rozpouští. Přenos hmoty z plynné fáze do fáze kapalně je zajištěn procesem zvaným difuze. Plynná složka v kapalině navíc může reagovat s rozpouštědlem – absorpce spojená s chemickou reakcí.

Na základě těchto jevů lze dělit absorpci na dva druhy:

- 1) Absorpce fyzikální – při které probíhá již zmiňovaná difuze. Příkladem použití této absorpce může být absorpce benzenových par v oleji nebo absorpce vodních par v roztoku glycerolu.
- 2) Absorpce spojená s chemickou reakcí. Příkladem použití absorpce s chemickou reakcí je absorpce oxidu uhličitého v roztoku hydroxidu sodného a absorpce amoniaku zředěnou kyselinou sírovou.

K absorpci lze využít speciálně upravená zařízení (absorbéry) tak, aby styčná plocha mezi kapalinou a plynem byla vždy co největší. Příkladem zařízení mohou být náplňové a výplňové kolony, patrové kolony, probublávací absorbéry, sprchové absorbéry a mnoho dalších. Průchod kapalně a plynné fáze u těchto kolon je zpravidla protiproudý, avšak lze zaznamenat i souprůdné uspořádání. U baterií věžových absorbérů dochází velmi často ke kombinaci těchto dvou zapojení. Rozpouštědlo, jímž složku absorbujeme, se nazývá *absorbent*, pohlcovaná složka má

název *absorbendum*; ta část plynné směsi, která neabsorbuje, se označuje jako *inert* a konečně, výsledkem absorpce je *absorbát*. Absorpce může být se spojitým stykem fází nebo se stupňovitým stykem fází. Absorpce může probíhat izotermně nebo adiabaticky [2].

Systemy při absorpci mohou být vícesložkové. Další text se bude zabývat pouze systémy, které obsahují 3 složky: tj. pohlcovaná složka, inertní plyn a netěkavé rozpouštědlo.

1.2 Rovnováha při absorpci

Při absorpci se nachází v systému dvě fáze – plyn a kapalina. Z fyzikální chemie dle Gibbsova fázového pravidla má systém 3 stupně volnosti. Je-li teplota a tlak stanoven pak posledním stupněm může být například koncentrace pohlcované složky v plynné nebo kapalně fázi. Rovnovážná data (koncentrace) lze nalézt v literatuře ve formě tabulek, zpracované graficky nebo zadané matematickou funkcí.

Rovnovážná data lze rozdělit na dvě oblasti:

- A) Údaje platné v širokém rozmezí koncentrací
- B) Údaje platí omezeně (oblasti nízkých koncentrací)

Nejčastěji jsou závislosti rovnovážných dat vyjádřené jako parciální tlak pohlcované složky na složení roztoku.

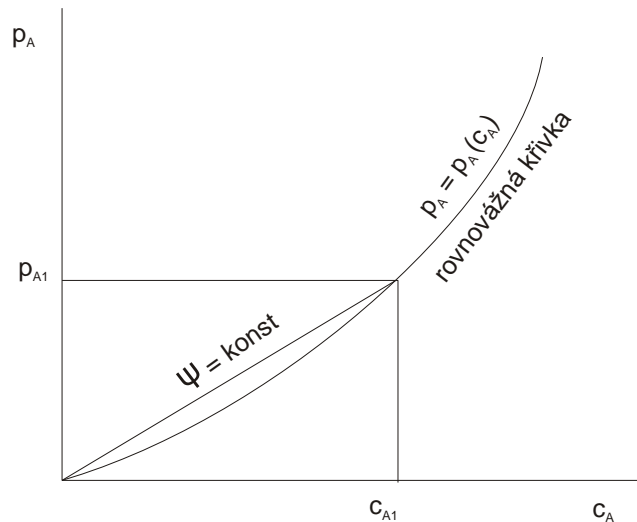
$$p_A^* = f(c_A)_{T,P} \quad , \quad (1.1)$$

kde c_A je obecná koncentrace pohlcované složky v roztoku při konstantní teplotě a tlaku. V oblasti nízkých koncentrací lze tyto závislosti většinou aproximovat lineární závislostí. Rovnovážné údaje jsou reprezentovány pomocí součinitelů fázové rovnováhy.

Křivka znázorňující výše uvedené závislosti se nazývá rovnovážná. Pokud se vyjádří rovnovážná křivka obecným způsobem, součinitel fázové rovnováhy kteréhokoli bodu na každém grafu lze vyjádřit jako

$$\Psi_A = \frac{p_A^*}{c_A} \quad (1.2)$$

Pro $\Psi = \text{konst}$ je rovnovážná křivka přímkou [3]. Na Obrázku 1 je znázorněna rovnovážná křivka součinitele fázové rovnováhy.



Obrázek 1 – Rovnovážná křivka součinitele fázové rovnováhy

Součinitel fázové rovnováhy lze též vyjádřit jako

$$m = \frac{y_A}{x_A} \quad (1.3)$$

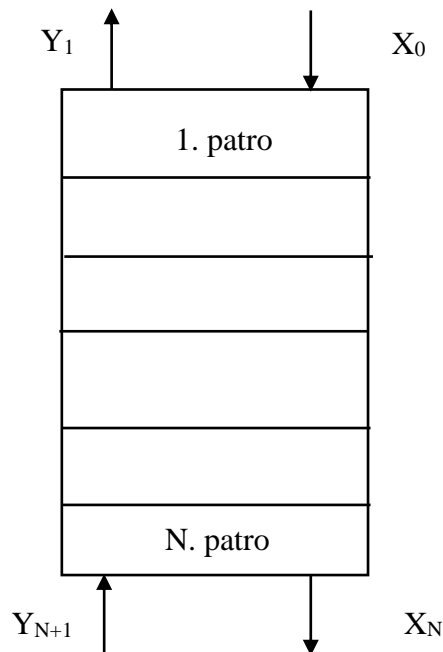
1.3 Absorpce se stupňovitým stykem fází

Zařízení, v němž se plyn a kapalina stýkají stupňovitě, je nejčastěji věž s patry, která mohou mít velmi různorodou konstrukci. Při výpočtech se z pravidla nejdříve stanoví počet rovnovážných stupňů (počet teoretických pater) a při znalosti účinnosti se dopočítá počet stupňů skutečných, kdy se výsledné číslo vždy zaokrouhluje na celé vyšší číslo. Řešení počtu rovnovážných stupňů vychází z hmotnostní a entalpické bilance a z rovnovážných vztahů. Odchází-li plyn a kapalina ve fázové rovnováze z jednoho patra, je toto patro nazváno jako rovnovážný stupeň příp. teoretické patro.

1.3.1 Výpočet počtu teoretických pater

Při výpočtech v aplikované části je řešen protiproudý absorbér, proto i teoretická část se zabývá jen odvozením pracovní přímky pro protiproudý absorbér. Pracovní přímka souproudeho absorbéro je až na znaménko totožná. Při výpočtech absorpce je nutné přijmout několik zjednodušení, jako např. fáze jsou složeny z rozpustné a nerozpustné složky, absorpce je ustálená a chemická reakce neprobíhá. V plynné fázi je absorbující se složka A a inertní složka B, v kapalině je netěkavé rozpouštědlo C a absorbovaná složka A [1]. Pro tento systém lze použít pro

vyjádření koncentrace složek molární relativní zlomky. Schéma protiproudého absorberu je znázorněno na Obrázku 2.



Obrázek 2 – Schéma protiproudého absorberu [4]

Bilancovat lze s použitím molárních zlomků nebo zlomků relativních. Molární zlomky jsou vhodnější v případě, kdy se jedná o absorpci velmi zředěných plynů do roztoku. Je-li koncentrace absorbované složky vysoká, pak je lepší tuto situaci řešit za předpokladu, že v systému se nachází inertní složka a netěkavé rozpouštědlo (spojovací složky) pomocí relativních zlomků.

Pak lze celkovou bilanci zapsat ve tvaru

$$\dot{n}_I Y_1 + \dot{n}_R X_N = \dot{n}_I Y_{N+1} + \dot{n}_R X_0 \quad (1.4)$$

Úpravou rovnice (1.4) pak

$$\dot{n}_I (Y_1 - Y_{N+1}) = \dot{n}_R (X_0 - X_N) \quad (1.5)$$

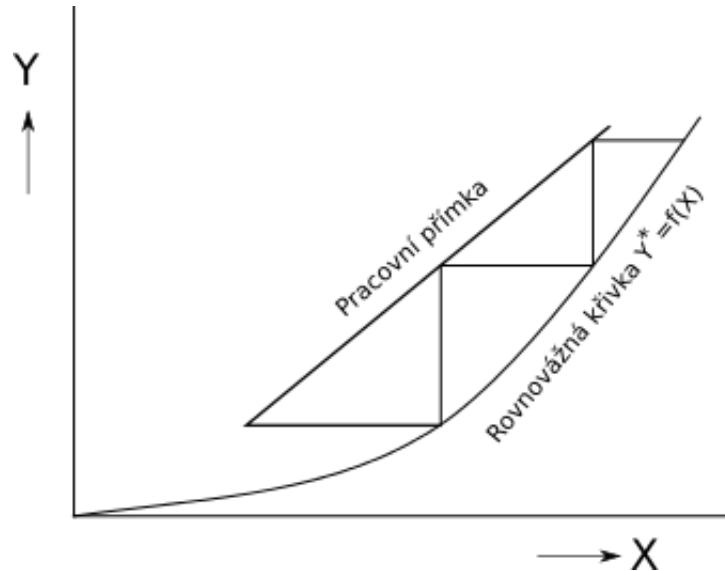
Poté další úpravou rovnice (1.5) lze dostat rovnici pracovní přímky

$$Y_{N+1} - Y_1 = \frac{\dot{n}_R}{\dot{n}_I} (X_N - X_0) \quad (1.6)$$

Pracovní přímka je ohraničena body $[X_N, Y_{N+1}]$ a $[X_0, Y_1]$ a směrnici této přímky je hodnota poměru látkových toků netěkavého rozpouštědla a inerty $\frac{\dot{n}_R}{\dot{n}_I}$. Počet teoretických pater se pak

určí, jako počet pravouhlých kroků mezi pracovní přímkou a rovnovážnou křivkou [4] tak, jak je znázorněno na Obrázku 3.

Je-li rovnováha vyjádřena rovnicí přímky, lze patra spočítat analyticky. Odvození lze nalézt např. v literatuře [1, 4].



Obrázek 3 – Určení počtu teoretických pater u absorbéru se stupňovitým stykem fází.

1.4 Extrakce

Extrakcí rozumíme děj, při němž se složka přítomná v kapalině nebo méně často v tuhé látce převádí přes fázové rozhraní do jiné kapaliny. Přitom příčinou přechodu složky přes fázové rozhraní může být buď – síla fyzikální neboli difuze, nebo se může uplatňovat také vliv chemický. Z hlediska technologického, extrakce téměř vždy zahrnuje dva na sebe navazující postupy:

- Samotný extrakční pochod, tj. uvedení extrahovadla, jímž látku vyluhujeme, do styku s vyluhovanou látkou, a převod této látky do rozpouštědla,
- Separaci vyloužené složky (její oddělení od rozpouštědla). Příkladem separace může být destilace, vymrazení, odpaření apod., a konečně rekuperaci rozpouštědla.

Podmínkou a předpokladem pro extrakce o vysoké účinnosti je zajištění co nejdokonalejšího styku původní fáze (suroviny) s extrahovadlem, Toto rozpouštědlo (extrahovadlo) musí být vysoce selektivní pro látku, jenž má být extrahována. Proces extrakce se uplatňuje hlavně v těch případech, kdy například rektifikace by nebyla dostatečně ekonomicky hospodárná pro malou relativní těkavost složek (příkladem může být zpracování velmi zředěných roztoků kyseliny octové extrakcí estery kyselin) nebo tam, kde by docházelo k tvorbě azeotropu. Dobrým

příkladem může být směs methanolu a benzenu, která neposkytne methanol a benzen v naprosto čistém stavu, neboť tento systém tvoří azeotropickou směs. Zde se proto nabízí možnost oddělení methanolu z této směsi do vody pomocí takových pochodů, kde dochází k intenzivnímu styku fází s extrahovadlem (v laboratoři proces známý jako vytřepávání).

Látky, které při extrakci přicházejí spolu do styku, mohou být různého skupenství. Extrahovadlo, jímž vyluhujeme, je vždy kapalné, kdežto původní soustava, z níž složku do rozpouštědla převádíme, může být teoreticky v libovolné fázi. V chemickém průmyslu jde tedy nejčastěji o extrakci kapaliny kapalinou, v menším počtu případů může být ovšem viděna extrakce složky z tuhé fáze. Extrahovaná složka může být buď tuhá nebo kapalná. Extrakce složky v parách z plynné soustavy již byla popsána jako samostatná operace – Absorpce. Extrakce i absorpce jsou totiž z fyzikálního hlediska pochody velmi podobné. Podle způsobu práce a podle povahy látek podrobených extrakci mluvíme při zpracovávání tuhé suroviny extrakcí někdy též o jejím loužení nebo vyluhování, při laboratorní extrakci kapalné fáze též o vytřepávání např. v děličce [2].

Extrakci je možné dělit na násobnou a protiproudou. V dalším textu bude popisována pouze extrakce protiproudá.

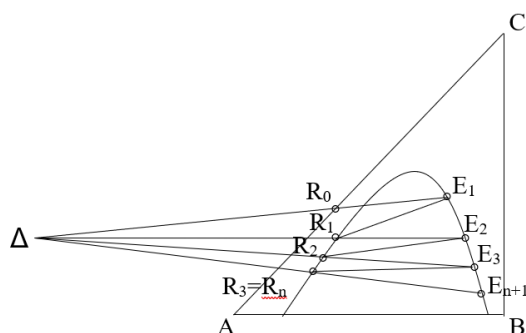
1.4.1 Protiproudá extrakce

Na Obrázku 5 je uvedeno schéma nepřetržitě pracujícího protiproudého extraktoru se stupňovitým stykem fází. Surovina se uvádí do stupně 1 a z téhož stupně vystupuje konečný extrakt. Na druhém konci extraktoru se do posledního stupně N přivádí extrakční činidlo a vystupuje z něj konečný rafinát. Složení extrahovadla, extraktu, rafinátu a suroviny se uvádí nejčastěji v hmotnostních zlomcích.

1.4.2 Extrahovadlo a rozpouštědlo jsou omezeně mísitelné

Při zjišťování počtu teoretických stupňů při protiproudé extrakci (Obrázek 4), kdy je rozpouštědlo a extrahovadlo omezeně mísitelné se obvykle vychází od bodu, jenž reprezentuje výsledné složení extraktu E_1 . Složení rafinátu R_1 , který je s extraktem E_1 v rovnováze pak lze zjistit tak, že se vyhledá průsečík konody, který prochází bodem E_1 s druhou větví binodální křivky. Složení střetného proudu E_2 k proudu R_1 se pak zjistí pomocí bilančního vztahu, což v grafickém znázornění značí, že se vyhledá průsečík pracovní čáry s binodální křivkou. Složení rovnovážného rafinátu R_2 se pak opět určí pomocí konody proložené bodem E_2 . Tyto

kroky pak představují dva teoretické stupně a opakováním tohoto postupu se dojde k výslednému počtu teoretických pater. Je nutné ale splnit podmínku, že obsah extrahované složky ve výsledném rafinátu musí být stejný nebo nižší než obsah požadovaný. Poloha diferenčního bodu Δ je závislá na hodnotě difference toků, jež může být kladná, záporná a dokonce i nulová [5].



Obrázek 4 – Grafické zjištění PTP při protiproudé extrakci při omezené mísitelnosti složek A a B [5]

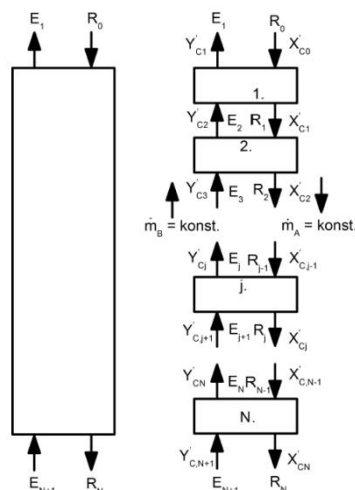
1.4.3 Extrahovadlo a rozpouštědlo jsou navzájem nemísitelné

V tomto případě je fáze rafinátu binární směsí rozpouštědla a extrahované složky, fáze extraktu je binární směsí čistého extrahovadla a extrahované složky. Rozpouštědlo a extrahovadlo tedy tvoří v obou fázích tzv. spojovací látky, inerty. Použitím hmotnostních relativních zlomků se řešení převede na grafické řešení v pravoúhlém systému souřadnic Y' v. X' , kde X' je relativní zlomek pro rafinát a surovinu a Y' pro extrakt a extrahovadlo [5]. Rovnováha znázorněná v tomto souřadnicovém systému se také označuje jako tzv. distribuční diagram.

1.4.4 Výpočet počtu teoretických pater

Bilanční schéma kontinuálního extraktoru je uvedeno na Obrázku 5.

Za předpokladu vzájemné nemísitelnosti původního rozpouštědla a nového rozpouštědla mají složky A a B v případě kontinuální extrakce význam spojovacích složek (taková látka vstupuje/vystupuje do/z extraktoru, nepodléhá chemické reakci a neakumuluje se).



Obrázek 5 – Schéma protiproudě pracujícího kontinuálního extraktoru s N stupni [4]

Jejich

hmotnostní toky se podél extraktoru nemění

$$\dot{m}_A = \dot{m}_{R0}x'_{A0} = \dot{m}_{R0}(1 - x'_{C0}) = \text{konst.} \quad (1.7)$$

$$\dot{m}_B = \dot{m}_{E,N+1}y'_{B,N+1} = \dot{m}_{E,N+1}(1 - y'_{C,N+1}) = \text{konst.} \quad (1.8)$$

Za ustáleného stavu je bilance hmotnosti extrahované složky vyjádřena rovnicí

$$\dot{m}_A x'_{C0} + \dot{m}_B y'_{C,N+1} = \dot{m}_A x'_{CN} + \dot{m}_B y'_{C1} \quad (1.9)$$

Úpravou této rovnice lze získat rovnici pracovní přímky ve tvaru

$$y'_{C1} - y'_{C,N+1} = \frac{\dot{m}_A}{\dot{m}_B} (x'_{C0} - x'_{CN}) \quad (1.10)$$

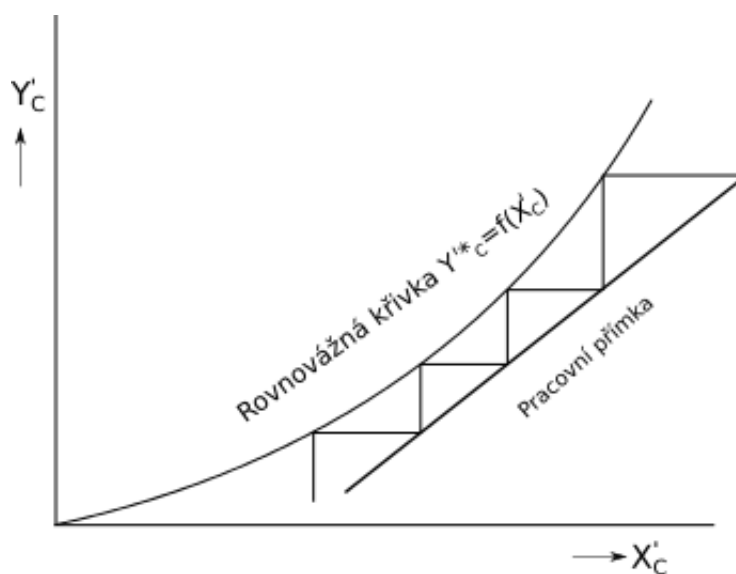
Pro určení teoretických stupňů je tedy nutné znát rovnici pracovní přímky, která vychází z bilance a následně je možné určit body, kterými prochází. To jsou body $[x'_{CN}, y'_{C,N+1}]$ a $[x'_{C0}, y'_{C1}]$. Dále je potřebné znát průběh rovnovážné křivky, kterou lze nalézt v literatuře nebo na specializovaných internetových webech zadanou formou tabulky, graficky anebo vyjádřenou pomocí matematické funkce. V případě, že lze zanedbat vzájemnou mísitelnost obou rozpouštědel, pak rovnováhu lze znázornit graficky jako závislost rovnovážné koncentrace extrahované složky ve fázi obohacované na koncentraci téže složky ve fázi ochuzované. Poměr koncentrací v obohacovací a ochuzované fázi v jednotlivých bodech rovnováhy se nazývá rozdělovací koeficient a matematicky jej lze zapsat ve tvaru:

$$k_C = \frac{Y'_C}{X'_C} \quad (1.11)$$

Je-li rozdělovací koeficient v rozsahu pracovních koncentrací konstantní, rovnováha má lineární průběh a je vyjádřena přímkou. Není-li rozdělovací koeficient konstantní, rovnováha je znázorněna obecně křivkou.

Vlastní postup při řešení extrakce s nemísitelnými rozpouštědly je pak dán následujícím postupem. Znázorní se pracovní přímka, rovnovážná křivka a vykreslí se teoretická patra mezi pracovní přímkou a rovnovážnou křivkou. Počet teoretických pater pak odpovídá počtu pravoúhlých kroků mezi rovnovážnou křivkou a pracovní přímkou v mezích koncentrací složky a to od X'_{C0} do X'_{CN} tak, jak je znázorněno na Obrázku 6 [4].

Počet teoretických pater lze stanovit pro lineárně vyjádřenou rovnováhu i analyticky – metodou extrakčního faktoru. Odvození lze nalézt např. v literatuře [1, 4].



Obrázek 6 – Stanovení počtu teoretických pater, čisté extrahovadlo a původní rozpouštědlo jsou vzájemně nemísitelné

1.5 Destilace

Destilace je děj, při němž dochází k tomu, že se z kapalně fáze tvoří páry a odděleně od této kapalně fáze kondenzují. Vznikají-li tyto páry z různých směsí kapalin, pak mohou mít jiné složení než kapalně fáze. Destilace tedy může sloužit k separaci směsi na směs o odlišném složení nebo k získání prakticky čistého destilátu z původního nástříku. Nástřík ochuzený o těkavější složku se nazývá destilační zbytek.

Je-li převedena část kapalně směsi v páry rovnovážného složení s kapalným zbytkem, při čemž obě fáze zůstanou v rovnováze, poté se hovoří o rovnovážné destilaci.

Opakem rovnovážné destilace je rovnovážná kondenzace, tj. kdy část par obsahujících dvě nebo více složek jsou zkondenzovány tak, aby za určitého tlaku a teploty zůstaly v rovnováze s nekondenzovaným zbytkem.

Dalším typem destilace je destilace diferenciální (neboli jednostupňová periodická destilace). Zde se surovina předloží do kotle, zahřívá se a udržuje ve varu. Vznikající páry více těkavější složky jsou během operace nepřetržitě odváděny, kondenzovány a kondenzát je postupně veden do jedné nebo více předloh.

Výpočtové metody vesměs vycházejí z předpokladu, že kapalina vroucí v kotli a pára přecházející do kondenzátoru jsou ve stavu okamžité rovnováhy. Tento předpoklad je splněn přesně vzato pouze u hladiny vroucí kapaliny a při malé rychlosti odpařování. Lze ho splnit lépe, čím více je kapaliny v kotli. Samozřejmě toto není jediný předpoklad – např. se uplatňuje i velikost parního prostoru, jehož objem je však určován především požadavkem dobré separační funkce (oddělování kapek) [5].

Jednou z nejznámějších typů destilace je frakční destilace. Páry, které vznikají destilací a jejichž složení se s časem mění a jsou-li po určitých dávkách odváděny a následně kondenzovány, jsou jednotlivými frakcemi nástříku.

Opět i zde je známý proces opačný, tj. frakční kondenzace, při níž se zachycují z postupně kondenzujících par podíly, vyznačující se zpravidla určitým průměrným požadovaným složením nebo rozmezím složení [2].

1.6 Rektifikace

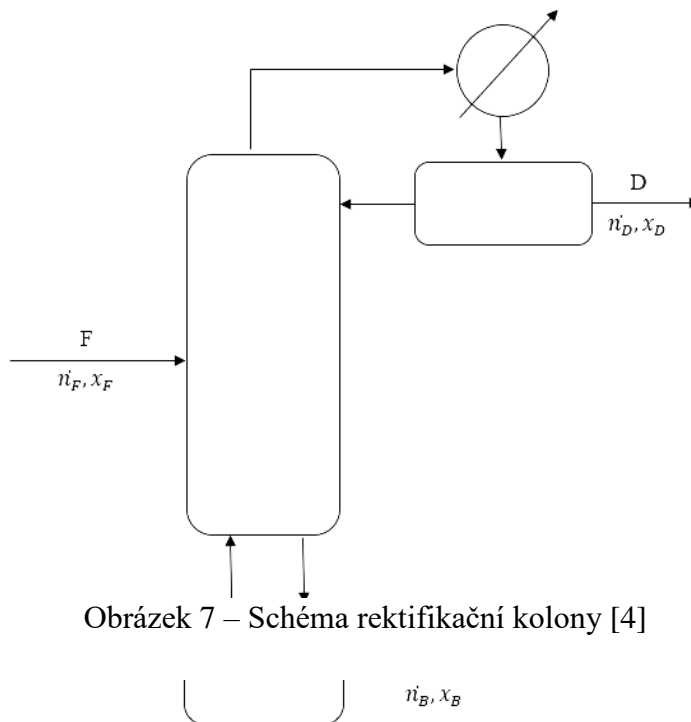
Rektifikaci lze formulovat jako mnohonásobné částečné odpaření kombinované s částečnou kondenzací, které se uskutečňuje v rektifikační koloně. Taková kolona může být patrová, kde kontakt kapaliny při bodu varu a syté páry je v protiproudém uspořádání. Výsledkem rektifikace je rozdělení kapalně směsi o dvou a více složkách na prakticky čisté složky. Nevýhodou rektifikační kolony a procesu jako takového je obrovská energetická náročnost, neboť při ní dochází k fázové přeměně. Do nejspodnější části rektifikační kolony, nazvané jako vařák je nutné přivést velké množství tepla a to z důvodu vytvoření proudu páry stoupajícího kolonou. Druhým významným energetickým faktorem je nutnost pomocí vhodného chladícího média zajistit odvod tepla k vytvoření kapaliny stékající kolonou dolů.

Vlastní rektifikace, jak již bylo zmíněno je prováděna v rektifikační koloně. Schéma rektifikační kolony je znázorněno na Obrázku 7.

Nástřikem rektifikační kolony je surovina, jež může být přehřátá a proudí do rektifikační kolony na nástřikové patro, které rozděluje kolonu na dvě části. Horní část rektifikační kolony, kde je koncentrace těkavější složky vyšší než koncentrace této složky v nástřiku, se nazývá jako obohacovací část rektifikační kolony. Dolní část kolony, kde je koncentrace těkavější složky nižší než v nástřiku, se nazývá ochuzovací část rektifikační kolony.

Veškeré páry, které vystupují z hlavy rektifikační kolony, jsou kondenzovány a jímány do zásobníku. Část kondenzátu se ovšem vrací zpět do kolony jako reflux, druhá část se po dochlazení ve výměníku tepla odebírá jako horní produkt, který se nazývá destilát.

Kapalina ze spodní části rektifikační kolony se ve vařáku zčásti odpařuje. Vzniklá pára se vede zpět do kolony, zatímco kapalina se odvádí jako dolní produkt označovaný jako destilační zbytek – tato kapalina je ochuzena o více těkavější složky v porovnání se složením nástřiku rektifikační kolony. Protože entalpický obsah destilačního zbytku je vysoký, využívá se ho k přehřátí nástřiku. Rektifikační kolony lze použít se spojitým kontaktem fází (např. náplňové kolony) nebo se stupňovým stykem fází (např. patrové kolony) [4]. Následující text a bilanční rovnice budou pojednávat pouze o binární směsi a řešení patrových kolon.



Obrázek 7 – Schéma rektifikační kolony [4]

kační kolony lze pak zapsat jako

$$\dot{n}_F = \dot{n}_D + \dot{n}_B \quad (1.12)$$

S využitím molárních zlomků lze dostat složkovou bilanci pro těkavější složku

$$\dot{n}_F x_F = \dot{n}_D x_D + \dot{n}_B x_B \quad (1.13)$$

1.6.1 McCabeova–Thieleova metoda

Pro využití McCabeovy-Thielovy metody při řešení rektifikace je nutné přijmout určitá zjednodušení a předpoklady. Ztráty tepla a směšovací efekty by měli být zanedbatelné a zároveň by měla být výparná tepla složek stejná (nebo alespoň přibližně stejná), potom kondenzací jednotkového látkového množství páry se uvolní přesně takové množství tepla, které by mělo dostávat právě k odpaření jednotkového látkového množství kapaliny. Tento postup lze nejen aplikovat na izolované patro, ale navíc ho lze rozšířit na jednotlivé části rektifikační kolony.

Jsou-li splněna uvedené zjednodušení a předpoklady, jsou pak toky látkového množství kapaliny a toky látkového množství páry v jednotlivých úsecích rektifikační kolony konstantní. Při použití této metody, výpočty se provádějí vždy pomocí molárních zlomků.

McCabeova–Thieleova metoda stanovení počtu rovnovážných stupňů je vlastně metoda, kdy se jednotlivé části rektifikační kolony řeší od stupně ke stupni. Vždy se řeší bilanční rovnice a rovnovážné vztahy.

K vyjádření rovnovážného vztahu mezi parní a kapalnou fází lze použít např. relativní těkavost, kterou lze vyjádřit jako:

$$\alpha_{AB} = \frac{y_A x_B}{x_A y_B} \quad (1.14)$$

A úpravou rovnice 1.14 lze dostat

$$y = \frac{\alpha_{AB} x_A}{(\alpha_{AB} - 1)x_A + 1} \quad (1.15)$$

V případě systémů, které vykazují malé odchylky od ideálního chování se relativní těkavost s teplotou výrazně nemění a rovnice (1.15) je tedy rovnicí rovnovážné křivky $y_A = f(x_A)$ [4].

V případě rektifikace binárních směsí lze řešení velmi názorně prezentovat grafickou formou s použitím diagramu $y_a - x_a$. McCabeova–Thieleova metoda se skládá z následujících kroků:

- 1) Bilance celkového látkového množství a látkového množství těkavější složky v obohacovací části rektifikační kolony.

Na základě toho je odvozena rovnice obohacovací části rektifikační kolony [4]

$$y_{n+1} = \frac{x_D}{R + 1} + \frac{R}{R + 1} x_n \quad (1.16)$$

V souřadném systému $y_a - x_a$ je rovnice rovnicí pracovní přímky. Symbol R v rovnici (1.16) je označován jako refluxní poměr, který lze definovat jako podíl \dot{n}_{L0} a \dot{n}_D . Pokud v kondenzátoru zkondenzuje všechna pára, je složení kondenzátu identické se složením páry

$$x_0 = x_D = y_1 \quad (1.17)$$

Poté z analýzy rovnice vyplývá, že tato podmínka je splněna pro $n = 0$ (bilančním systémem je kondenzátor a dělič). Tato situace je pak na diagramu $y_a - x_a$ znázorněna bodem o souřadnicích $[x_D; x_D]$ Druhým bodem je pak úsek této pracovní přímky, tj. $[0; \frac{x_D}{R+1}]$.

- 2) Bilance celkového látkového množství a látkového množství těkavější složky v ochuzovací části rektifikační kolony.

Na základě toho je odvozena rovnice ochuzovací části rektifikační kolony [4]

$$y_m = \frac{\dot{n}_{Lm}}{\dot{n}_{Lm} - \dot{n}_B} x_{m-1} - \frac{\dot{n}_B}{\dot{n}_{Lm} - \dot{n}_B} x_B \quad (1.18)$$

Tato přímka se směrnici $\frac{\dot{n}_{Lm}}{\dot{n}_{Lm} - \dot{n}_B}$ prochází bodem $[x_B; x_B]$ ležícím na diagonále a průsečíkem q přímky a přímky obohacovací části rektifikační kolony.

- 3) Zjištění průsečíku pracovní přímky obohacovací části a pracovní přímky ochuzovací části rektifikační kolony [4].

Posledním avšak, velmi důležitým parametrem je znalost q přímky. Tuto přímku lze zapsat ve tvaru

$$y = \frac{q}{q-1} x - \frac{x_F}{q-1} \quad (1.19)$$

Každý bod této přímky pak tedy představuje souřadnice možného průsečíku pracovních přímek obohacovací a ochuzovací části rektifikační kolony v intervalu souřadnic $[x_F; x_F]$ a průsečíku q -přímky s rovnovážnou křivkou. K zakreslení q přímky je nutná znalost dvou bodů. První z nich lze získat řešením rovnice q přímky s rovnicí diagonály ($y = x$). Takže:

$$x = \frac{q}{q-1} x - \frac{x_F}{q-1} \quad (1.20)$$

Úpravou rovnice (1.20) lze dostat

$$x = x_F \quad (1.21)$$

Prvním známým bodem tedy bude bod $[x_F; x_F]$. Tento bod není ovlivněn entalpickým stavem nástřiku. Druhý bod se dostane řešením rovnice q přímky, kdy se položí $y=0$, takže:

$$0 = \frac{q}{q-1} x - \frac{x_F}{q-1} \quad (1.22)$$

Úpravou rovnice (1.22) lze dostat

$$x = \frac{x_F}{q} \quad (1.23)$$

Druhým známým bodem je tedy bod $[\frac{x_F}{q}; 0]$. Tento bod je ovlivněn entalpickým stavem nástřiku [4].

Parametr q lze vyjádřit jako

$$q = \frac{\dot{n}_{Lj} - \dot{n}_{Li}}{\dot{n}_F} = 1 + \frac{h_{FL} - h_F}{\Delta H_V}, \quad (1.24)$$

Kde, \dot{n}_{Lj} a \dot{n}_{Li} jsou látkové toky kapaliny v ochuzovací (j) a obohacovací (i) části rektifikační kolony, h_{FL} je molární entalpie nástřiku při bodu varu, h_F je molární entalpie daného stavu nástřiku a ΔH_V je molární výparné teplo nástřiku při bodu varu [6].

1.6.2 Ovlivnění polohy q-přímky entalpickým stavem nástřiku

Jak již bylo zmíněno v podkapitole (1.6.1), q-přímka prochází dvěma body. Jedním bodem je bod na diagonále, konkrétně $[x_F; x_F]$. Tento bod je daný a není ovlivněn entalpickým stavem nástřiku. Druhým bodem je bod $[\frac{x_F}{q}; 0]$. Tento bod se nachází na ose x a je ovlivněn entalpickým stavem nástřiku [4].

- 1) Nedosahuje-li teplota nástřiku teploty bodu varu, potom

$$t_F < t_{FV}, h_F < h_{FV} \quad (1.25a, 1.25b)$$

hodnota parametru: $q > 1$

z čeho vyplývá, že $\frac{x_F}{q} < x_F$.

- 2) Je-li nástřik přiváděn jako kapalina při bodu varu, potom

$$t_F = t_{FV}, h_F = h_{FV} \quad (1.26a, 1.26b)$$

hodnota parametru: $q = 1$

z čeho vyplývá, že $\frac{x_F}{q} = x_F$.

- 3) Je-li nástřikem směs kapaliny při bodu varu a sytá pára, potom

$$t_{FV} < t_F < t_{Fr}, h_{FV} < h_F < \Delta H_V + h_{FV} \quad (1.27a, 1.27b)$$

hodnota parametru: $0 < q < 1$

z čeho vyplývá, že $x_F < \frac{x_F}{q} < \infty$.

- 4) Je-li nástřik přiváděn do kolony jako sytá pára, potom

$$t_F = t_{Fr}, h_F = \Delta H_V + h_{FV} \quad (1.28a, 1.28b)$$

hodnota parametru: $q = 0$

z čehož vyplývá, že $\frac{x_F}{q} \rightarrow \infty$.

- 5) Je-li nástřik přiváděn do kolony jako přehřátá pára, potom

$$t_F > t_{Fr}, h_F > \Delta H_V + h_{FV} \quad (1.29a, 1.29b)$$

hodnota parametru: $q < 0$.

2 PROGRAMY PRO ŘEŠENÍ CHEMICKO-INŽENÝRSKÝCH ÚLOH

Pomocí různých softwarových produktů (programů) lze řešit problémy týkající se chemicko-inženýrských úloh, ale lze využít i takové softwary, které simulují např. kolonová zařízení, biologické, fyzikální a chemické pochody uvnitř reaktorů anebo kolon pro vybrané difuzní operace. Na základě toho lze tyto programy obecně rozdělit na programy specializované a programy pro numerické výpočty.

2.1 Specializované programy

Do přehledu nejznámějších programů zabývajících se difuzními operacemi lze řadit programy jako *ChemSep* [7], *Chemcad* [8], *Mobatec Modeller* [9], *DWSIM* [10], *HYSYS* [11] a mnoho dalších. Výhodou těchto programů je i to, že mají vlastní databáze s mnoha užitečnými informacemi (termodynamická data, kinetika apod.).

ChemSep [7] je simulátor kolonových zařízení pro difuzní procesy jako je destilace, absorpce, extrakce a mnoho dalších. Tento program je ke stažení zdarma ve verzi ChemSep LITE. Placená licence obsahuje plnohodnotný program Chemsep a navíc také databázi obsahující informace o více než 400 chemikáliích.

Chemcad [8] je všestranný software na komerční bázi společnosti *Chemstations*. Tento simulační software chemických procesů je volně ke stažení na 7. dní, poté musí uživatel *Chemcad* zakoupit. V programu *Chemcad* je možné např. simulovat laboratorní pokusy v reálném měřítku.

Mobatec Modeller [9] umožňuje dynamické modelování procesů na vysoké úrovni. Díky tomuto softwaru je možné namodelovat procesy probíhající uvnitř chemického podniku. Výhodou tohoto softwaru je, že demo verze je ke stažení zdarma.

DWSIM [10] je multiplatformní simulátor, jenž je kompatibilní se systémy Windows, Linux, MacOS, Android a dokonce i iOS. Oproti všem zmíněným programům se jedná o open-source program, což ocení hlavně studenti vysokých škol při modelování chemických procesů. Důraz programu *DWSIM* je zde kladen především na termodynamické operace, kinetiku, či rovnováhu reakcí.

2.2 Programy pro numerické výpočty

Tyto programy mají z hlediska svého obecného určení velké uplatnění v průmyslu, vědecké činnosti anebo na akademické půdě. Tyto programy lze použít pro inženýrské výpočty, tvorbu algoritmů, modelování a simulaci, analýzu dat, vědeckou a inženýrskou grafiku, tvorbu aplikací (včetně grafického rozhraní) a mnoho dalšího. V nabídce těchto programů nalezneme produkty jak na komerční, tak i na freewarové či open-source bázi. Mezi nejznámější komerční programy patří Matlab a v oblasti freewarových či open-source programů zaujímá popřední místa Scilab.

2.2.1 Matlab

Ačkoli Matlab není open-source programem, je důležité o něm zmínit a to z důvodu jeho využitelnosti jak v praxi, tak i na akademické půdě. Většina open-source programů se snaží mít co nejvyšší kompatibilitu právě s programem Matlab.

MATLAB (matrix laboratory) je interaktivní programové prostředí a skriptovací programovací jazyk čtvrté generace. MATLAB umožňuje počítání s maticemi, vykreslování 2D i 3D grafů funkcí, implementaci algoritmů, počítačovou simulaci, analýzu a prezentaci dat i vytváření aplikací včetně uživatelského rozhraní a mnoho dalších užitečných funkcí.

Matlab je využíván pro vědecké a výzkumné účely. Své uplatnění nachází nejen v sektoru soukromém, ale i na akademické půdě. Pro jeho multifunkčnost je využíván zejména v technických (inženýrství, matematika, fyzika apod.) a ekonomických oborech.

Matlab je programovacím jazykem, který je určen pro vědeckotechnické účely, simulace, paralelní výpočty apod. Zahrnuje matematické výpočty, vizualizaci a programování do uživatelsky ovladatelného prostředí.

Mezi základní vlastnosti Matlabu lze zahrnout vlastnost, že veškeré objekty jsou považovány za prvky pole (matice). Tyto prvky však mohou být nejen čísla, proměnné, ale i složitější struktury jako například obrázky. Výkonnost Matlabu je rozšiřována díky navazujícímu softwaru, které tvoří především soubory programu tzv. "toolboxy" [12].

2.2.2 Scilab

Scilab (SCIENCE LABORATORY) je bezplatný a zdrojově otevřený software pro numerické výpočty, který poskytuje výkonné výpočetní prostředí pro inženýrské a vědecké aplikace. Scilab je vydán pod licencí CeCILL (kompatibilní s GPL) a je k dispozici ke stažení zdarma. Rozšíření a zlepšování kvality zajišťují tzv. „toolboxy“, jež jsou taktéž ke stažení zdarma.

Scilab zahrnuje stovky matematických funkcí. Má programovací jazyk na vysoké úrovni, který umožňuje přístup k pokročilým datovým strukturám, 2D a 3D grafickým funkcím. Jako příklad lze vyčíst několik možností využití open-source programu Scilab:

Matematika a simulace

Pro běžné inženýrské a vědecké aplikace včetně matematických operací a analýzy dat.

Vizualizace 2-D & 3-D

Grafické funkce pro vizualizaci, anotaci a export dat a mnoho způsobů, jak vytvářet a přizpůsobovat různé typy parcel a grafů.

Optimalizace

Algoritmy pro řešení omezených a neomezených nepřetržitých a diskrétních optimalizačních problémů.

Statistika

Nástroje pro analýzu a modelování dat.

Xcos – simulátor hybridních dynamických systémů

Modelování mechanických systémů, hydraulických obvodů, řídicích systémů ...

Díky své schopnosti lze Scilab propojit s technologiemi a aplikacemi „třetích“ stran a může působit také jako jedinečná platforma, která spojuje kódy napsané v různých programovacích jazycích v jediném jednotném jazyce, a tím usnadňuje jejich distribuci, zálohování a používání [13].

2.2.3 Maxima

Maxima je matematický program pro manipulaci se symbolickými nebo numerickými rovnicemi včetně diferenciálních. V tomto programu je možnost integrace, derivace, aplikací Taylovy řady, Laplaceovy transformace, obyčejných diferenciálních rovnic, řešení lineárních rovnic o více neznámých. Lze zde řešit polynomy, vektory, matice a tenzory. Maxima pro

zachování přesnosti výpočtů nepřevádí automaticky zlomky na číselnou hodnotu. Maxima umí vykreslit grafická řešení jak ve 2D, tak i ve 3D projekci. Zdrojový kód lze sestavit na mnoha systémech, včetně Windows, Linux i MacOS X [14].

2.2.4 Octave

Jedná se o matematický program pro numerické řešení lineární algebry, hledání řešení nelineárních rovnic, integraci, práci s polynomy a integrování diferenciálních rovnic. Výhodou programu Octave je určitá kompatibility s dalšími programy (např. Matlab). Rozhraní programu je ve formě příkazového řádku [15].

3 APLIKOVANÁ ČÁST

Při řešení úloh týkajících se chemickoinženýrské problematiky (rektifikace, absorpce a extrakce), probíraných v rámci předmětu Chemické inženýrství I, byl využit open-source program Scilab, jenž je ke stažení zdarma z webových stránek Scilabu [13]. Byla využita aktuální verze 6.0.1 pro Windows 10 64bits. Jako doplněk (modul, toolbox) k Scilabu verze 6.0.1 byl využit Stixbox, též volně stažitelný z webových stránek [16] a to zejména z důvodu využití jeho vnitřní funkce *polyfit*. Dále byl použit doplněk GUIBuilder pro tvorbu uživatelského prostředí pro prokládání tabulkově zadaných rovnovážných dat.

Vlastní naprogramované algoritmy pro řešení úloh byly napsány v editoru SciNotes (součást Scilabu) a uloženy jako skripty (někdy nazývané jako procedury) pro opakované použití a jsou zaměřeny na řešení absorpce pro systémy s netěkavým rozpouštědlem, inertem v plynné fázi a absorbovanou jednou složkou, dále pro extrakci tří složkového systému s nemísitelnými rozpouštědly a rektifikaci binární směsi.

V rámci bakalářské práce byly použity při numerickém řešení úloh a programování algoritmů následující vnitřní funkce programu Scilab a doplňku Stixbox, které jsou důležité pro zpracování řešené problematiky:

- *polyfit* – prokládání dat polynomem n -tého stupně, doplněk Stixbox,
- *lsqrsolve* - minimalizace součtu čtverců odchylek nelineární funkce pomocí Levenberg-Marquardtovy metody,
- *plot*, *plot2d* – vykreslení dat ve 2D grafu,
- *fsolve* – řešení systému nelineárních rovnic,
- *linsolve* – řešení soustavy lineárních rovnic.

Podrobnější popis parametrů a použití těchto funkcí lze nalézt v nápovědě Scilabu příp. dokumentaci k doplňku Stixbox.

Mimo těchto hlavních funkcí jsou samozřejmě použity i další vestavěné funkce Scilabu a příkazy např. pro tvorbu vlastních funkcí, větvení programu apod., které příp. uživatel skriptů nalezne popsane v nápovědě Scilabu. Grafické výstupy (grafy) vytvořených skriptů jsou zobrazeny v grafických oknech, textové výstupy (hodnoty zadaných, vypočítaných veličin) jsou zobrazeny v konzolovém okně programu Scilab.

Tato kapitola v první části popisuje obecný postup při tvorbě skriptů a algoritmů pro řešení uvedených operací, v druhé části je zaměřena na praktickou ukázkou použití skriptů na konkrétní

úloze. Součástí bakalářské práce je také jako příloha kompaktní disk (CD) s nahranými ukázkovými skripty, vytvořenými v rámci této bakalářské práce.

V dalším textu práce, pokud je vypsána část kódu algoritmu použitého ve skriptu v programu Scilab, je tento kód uveden v rámečku odstavce. Jistou nevýhodou programování v Scilabu z hlediska našeho národního prostředí v operačním systému je to, že desetinný oddělovač není čárka, ale vždy tečka. To může občas vést k jistým problémům při přenosu výsledků do jiných programů. Proměnné, vyskytující se ve vyvinutých algoritmech, byly pojmenovány tak, aby co nejlépe popisovaly jejich význam z hlediska autora.

3.1 Obecný postup při řešení difuzních operací a tvorbě skriptů v programu Scilab

Při řešení difuzních operací, na které je zaměřena tato práce, lze postup řešení zobecnit do následujících kroků:

- a) podrobná analýza příkladu (zadané a požadované veličiny, systém),
- b) zjištění rovnovážných dat z literatury příp. jejich přepočtení do požadovaných koncentračních veličin,
- c) celková bilance zařízení a zjištění průběhu pracovní přímky příp. limitních poloh pracovní přímky,
- d) výpočet počtu teoretických pater,
- e) výpočet dalších požadovaných veličin.

Z hlediska tvorby skriptů a návrhu algoritmů v programu Scilab tedy vyplývá, že na základě předchozího uvedeného obecného postupu je potřeba provést zpracování následujících kroků, jejichž pořadí zpracování záleží na zadání úlohy:

- a) formátování rovnovážných dat pro načítání, zápis a využití ve skriptech vytvořených algoritmů pro řešení uvedených operací a příp. jejich přepočtení do požadovaných koncentračních veličin v rámci skriptu,
- b) zjištění náhradní funkce, která danou rovnováhu nejlépe popisuje, pomocí prostředků programu Scilab (funkce `lsqrsolve`, `polyfit`),
- c) zadání vstupních dat úlohy, tvorba dialogového okna pro využití pro jiné varianty zadání úloh,
- d) vyřešení bilančních vztahů, zjištění rovnice pracovní přímky a dalších požadovaných veličin příkladu – řešení soustavy rovnic (funkce `linsolve` apod.),

- e) návrh výpočtu pro limitní polohy pracovní přímky, pokud je požadováno,
- f) vytvoření algoritmu pro výpočet počtu teoretických pater tzv. od patra k patru (cyklus while apod.),
- g) zobrazení vypočtených dat graficky – rovnováha, pracovní přímka, teoretická patra.

V následujícím textu je uveden příklad pro řešení rektifikace binární směsi, který je řešen v rámci předmětu Chemické inženýrství I a současně i některé obecné informace týkající se tvorby skriptů a postupů, které se využívají i při řešení absorpce a extrakce. Vytvořený skript pod názvem *rektifikace-pr.sce* je součástí bakalářské práce na přiloženém CD, kde jsou uloženy i skripty pro příklady řešení absorpce a extrakce (*absorpce-pr.sce*, *extrakce-pr.sce*). U říšlušných souborů je vždy jako úvodní poznámka zapsán tex zadání příkladů. Na CD je také uložen skript pro nalezení vhodného tvaru náhradní funkce rovnováhy systému, který má název *GUI-rovnovaha.sce*.

3.2 Ukázka řešení na příkladu rektifikace

Jako ukázkový příklad ze všech řešených úloh difuzních operací je vybrána rektifikace binární směsi etanol-voda při normálním tlaku. Rovnovážná data pro tento systém jsou převzata z doplňkových materiálů pro Chemické inženýrství I [6].

Vlastní zadání příkladu je:

Kontinuální rektifikace vodného roztoku etanolu probíhá při norm. tlaku. Množství nástřiku je 85 kmol/h, složení jednotlivých proudů: nástřik 21 mol. % etanolu, zbytek 5,4 mol.% etanolu, destilát 70 mol.% etanolu. Nástřik přiváděný do kolony je ohřát na teplotu bodu varu. Kondenzátor pracuje jako totální, zpětný tok je do kolony vracen při teplotě bodu varu a jeho množství je 19 kmol/h. Účinnost kolony je 45 %.

Určete:

1. množství destilátu a zbytku v kmol/h, množství destilátu v kg/h a výtěžek destilace vzhledem k etanolu,
2. množství parní fáze odváděné z hlavy kolony,
3. rovnici pracovní přímky obohacovací části kolony a rovnici q-přímky,
4. počet teoretických pater a počet skutečných pater rektifikační kolony.

Z rozboru zadání vyplývá, že jsou známy následující údaje:

$$\dot{n}_F = 85 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}, \quad x_F = 0,210, \quad x_B = 0,054, \quad x_D = 0,700, \quad t_F = t_V$$

$$\dot{n}_{LO} = 19 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}, \quad \eta = 0,45.$$

3.2.1 Rovnovážná data – náhradní funkce

Při řešení úloh je nejdříve nutno pro systém nalézt rovnovážná data a aproximovat vhodnou náhradní funkcí. Nalezení vhodné náhradní funkce lze provést např. v LibreOffice Calc, MS Office Excelu, Originu, qtiPlotu apod. a následně využít výsledky při programování algoritmu při řešení vybraných úloh. Tuto část lze samozřejmě udělat také v Scilabu, a z tohoto důvodu byl vytvořen skript s grafickým uživatelským rozhraním pro výběr vhodné náhradní funkce pro daná rovnovážná data. Pro tvorbu grafického uživatelského rozhraní byl použit modul GUIBuilder, který dovoluje tvorbu tohoto rozhraní bez širších znalostí příkazů tvorby gui rozhraní, a to na základě vizuálního rozmístění ovládacích, zobrazovacích apod. prvků rozhraní pro interakci s uživatelem. Po vytvoření tohoto rozhraní stačí tedy už jen dopsat požadované kroky algoritmu pro vyhodnocení prokládání rovnovážných dat náhradní funkcí. Na základě používaných dat v rámci řešených úloh v Chemickém inženýrství I byly do tohoto skriptu vloženy následující náhradní funkce:

- rovnice polynomu (Polynom) – stupeň polynomu se volí interaktivně po výběru této volby (max. stupeň 4)

$$y = a + b \cdot x + c \cdot x^2 + d \cdot x^3 + e \cdot x^4, \quad (3.1)$$

kde a , b , c , d a e jsou zjišťované parametry polynomu.

- Rovnice růstové křivky (Růst. křivka I) s exponenciálním členem

$$y = A \cdot e^{-B/x}, \quad (3.2)$$

kde A a B jsou zjišťované parametry funkce.

- Rovnice růstové křivky (Růst. křivka II) s dekadickým členem

$$y = \frac{A}{1+10^{(B-x)}} + C, \quad (3.3)$$

kde A , B a C jsou zjišťované parametry funkce.

- rovnice (1.15) pro vyjádření rovnováhy pomocí relativní těkavosti
- modifikovaná rovnice relativní těkavosti (Modif. rel. těk.)

$$y = \frac{(\alpha+\beta+\gamma)x}{(\alpha-1)x + \beta x^2 + \gamma x^3 + 1}, \quad (3.4)$$

kde α , β a γ jsou zjišťované parametry funkce. V závorce jsou uvedeny názvy pro dané funkce použité ve skriptu.

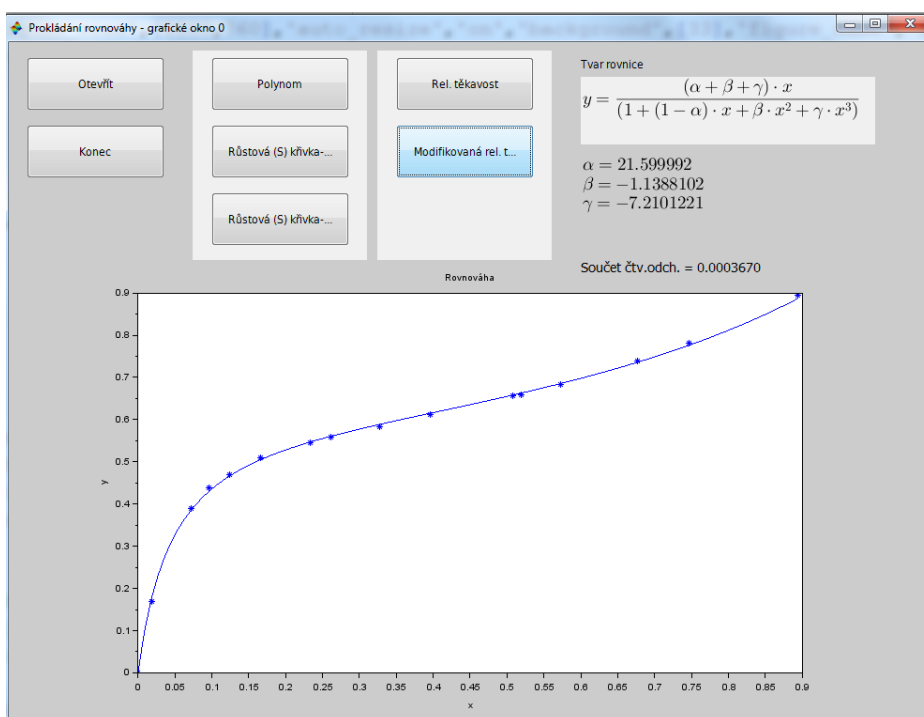
První tři uvedené funkce jsou vhodné pro prokládání rovnovážných dat u absorpce a extrakce, poslední dvě funkce pro prokládání dat u rektifikace.

Před vlastní aproximací zjištěných rovnovážných dat náhradní funkcí je důležité si na základě zadání řešené úlohy zjistit rozsah pracovních koncentrací a prokládat data v rozsahu těchto koncentrací. Tímto se zmenší chyba při následných výpočtech.

Vlastní rovnovážná data pro danou řešenou úlohu musí být zapsána do textového souboru ve formě matice $m \times 2$, kde m je počet bodů rovnováhy, sloupec 1 má význam složení kapalné resp. rafinátové fáze (v rámci skriptu označené jako x) a sloupec 2 má význam plynné (parní) resp. extraktové fáze (v rámci skriptu označené jako y). Po otevření souboru s daty se body vykreslí do grafu a následně lze prokládat stiskem příslušného tlačítka dané náhradní funkce tato data. Po této akci se vypíše tvar náhradní funkce a vypočítané parametry společně se součtem čtverců odchylek vypočítaných a experimentálních hodnot y .

Na základě toho postupu se vybere vhodná náhradní funkce a její tvar a příp. zjištěné hodnoty parametrů se dále použijí při vlastním řešení úlohy absorpce, extrakce či rektifikace.

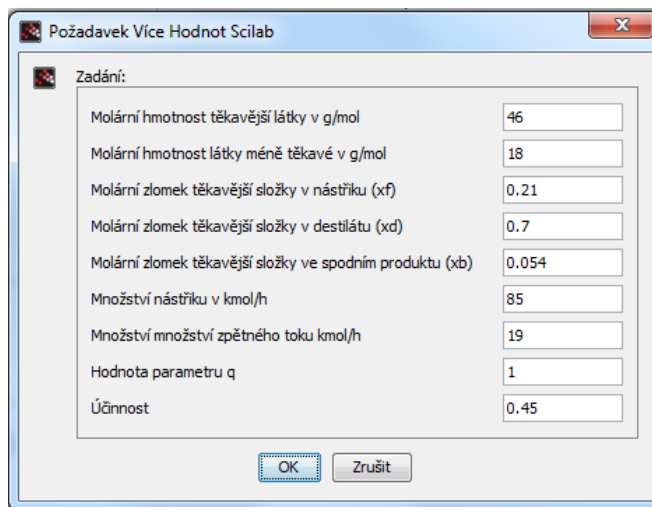
Pro zadaný ukázkový příklad rektifikace systému etanol-voda se jako nejvhodnější náhradní funkcí jeví rovnice (3.4) a tento případ je znázorněn na Obrázku 8. Proto v dalších krocích, při vlastním vytvoření algoritmu řešení rektifikace se využívá tento tvar rovnice.



Obrázek 8 – Grafické rozhraní (skript) pro prokládání rovnovážných dat – ukázka pro systém etanol-voda a náhradní funkci Modifikovaná relativní těkavost

3.2.2 Zadávání vstupních dat

Při tvorbě algoritmů je možné zapsat vstupní data přímo do proměnných pomocí přiřazovacího příkazu, ovšem pro uživatele tohoto skriptu, který si pouze kontroluje výsledky zpracované např. ručně, nemusí být při změně vstupních parametrů snadné změnit (např. neznalost programování v Scilabu) ve skriptu tyto vstupní hodnoty. Proto do veškerých naprogramovaných algoritmů byla přidána vstupní dialogová okna s jejich přednastavenými hodnotami. Takové okno je vytvořeno pomocí kódu, kde je možné ponechat přednastavené či pozměnit veškeré vstupní hodnoty, s nimiž bude příklad vypočítán.



Obrázek 9 – Dialogové okno v Scilabu

Pro názornost je zde uvedena část kódu pro vytvoření tohoto okna a zadání jedné veličiny:

```
txt = ['Molární hmotnost těkavější látky v g/mol'] // Veličina
zadane_info = x_mdialog('Zadání:',txt,['46']) //dialogové okno
M_Et = evstr(zadane_info(1)) // Převod na číselnou hodnotu double
```

V prvním řádku je přiřazovací příkaz, který do proměnné *txt* uloží název pro první hodnotu. Ve druhém řádku je použit příkaz *x_mdialog*, kde první položka je nadpis dialogového okna, druhá položka název veličiny a následující položka je přednastavená hodnota požadované veličiny, která se vypíše při otevření dialogového okna. Ve třetím řádku kódu se vstupní hodnota veličiny převede z řetězcové hodnoty na číselnou a uloží do příslušné proměnné, která je použita napříč algoritmem. Podle potřeby lze dialogové okno rozšířit na požadovaný počet vstupů. Příklad takto sestaveného kódu pro vstupní dialogové okno je uveden na Obrázku 9.

3.2.3 Bilanční výpočty, rovnice pracovních přímek a q-přímky

Vstupní údaje pro bilanci jsou převzaty ze vstupních hodnot zadaných na základě dialogového okna, popsaného v předchozí podkapitole. Pro bilanční výpočty jsou použity rovnice (1.12) a (1.13), které lze počítat např. pomocí vnitřní funkce Scilabu `linsolve` nebo z hlediska toho, že se jedná o relativně jednoduchou soustavu dvou rovnic o dvou neznámých metodou substituční. V tomto případě je použita substituční metoda, ale možnost použití funkce `linsolve` je ve vyvinutém kódu znázorněna u výpočtu pracovní přímky ochuzovací části kolony.

Následně je ve skriptu vypočítána střední molová hmotnost destilátu a určen jeho hmotnostní tok. Na základě zjištěného látkového toku destilátu je pak určen také výtěžek rektifikace. Z bilance kondenzátoru je následně určen látkový tok vstupujících par do kondenzátoru. Všechny výsledky jsou pak zobrazeny v konzoli programu Scilab (Obrázek 10).

Určení směrnice a úseku rovnice pracovní přímky pro obohacovací část kolony vychází v tomto daném případě ze znalosti refluxního poměru, který je určen z poměru zpětného toku a látkového toku destilátu. Rovnice q-přímky (1.19) je vypočítána ze zadaného parametru q . Ve vlastním skriptu je zabudována kontrola na hodnotu parametru q , při kterém by mohlo dojít „k selhání“ výpočtu, a to pro hodnoty $q=1$ či 0 tak, aby výpočty byly správné a nedošlo k předčasnému ukončení výpočtu na základě chyby. Výpis části kódu pro $q=1$ ukazuje způsob řešení této kontroly:

| Kód | Význam |
|--|--|
| ... | |
| <i>if</i> $q==1$ <i>then</i> | Kontrola parametru q |
| $A=[0\ 1;x_d\ 1]$; | matice soustavy pro dva body PPObČK |
| $b=[-usek;-x_d]$; | hodnoty pravých stran |
| $res_pri=linsolve(A,b)$ | použití funkce <code>linsolve</code> k řešení soustavy lineárních rovnic |
| $res_pr=res_pri(1)*x_f+res_pri(2)$ | výpočet průsečíku q-přímky a prac. přímky ObČK |
| $x_PPOch=[x_b\ x_f]$ | x souřadnice PPOchČK pro vykreslení do grafu |
| $y_PPOch=[x_b\ res_pr]$ | y souřadnice PPOchČK pro vykreslení do grafu |
| ... | |

Jak už je naznačeno ve výpisu kódu, ze znalosti průsečíku PPObČK a q-přímky byly určeny koeficienty rovnice PPOchČK. Výpis obou přímek ve směrnicovém tvaru je pak uveden taktéž v konzoli programu. Znalosti obou rovnic je pak využito v následující části při určení počtu teoretických pater rektifikační kolony.

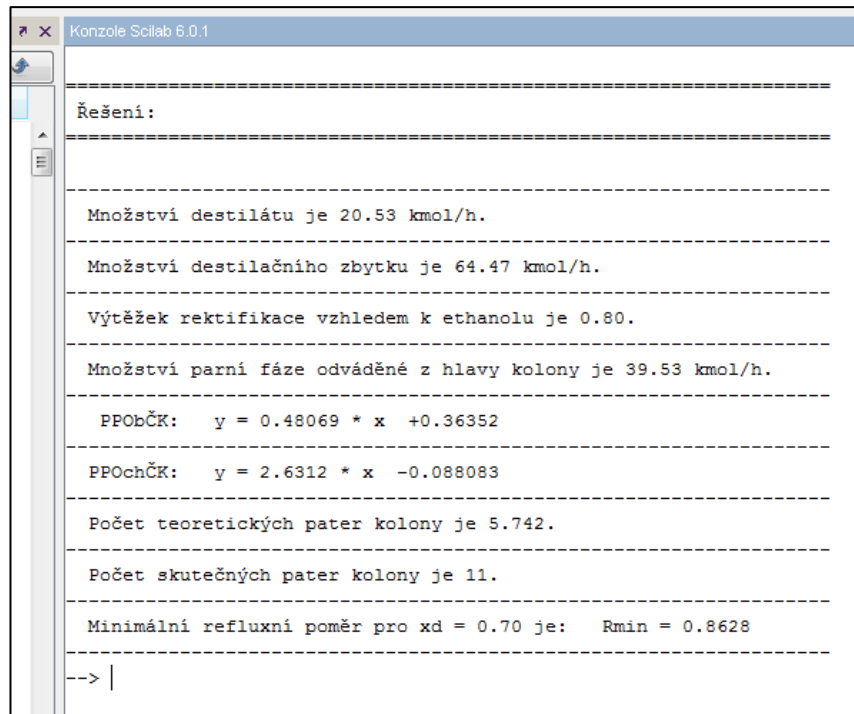
V rámci příkladu je řešena také otázka průběhu pracovní přímky ObČK pro minimální reflux. Řešení je založeno na určení průsečíku q-přímky a PPObČK a výsledky jsou zobrazeny v textové podobě v konzoli programu a v grafickém výstupu řešení (Obrázek 10 a 11).

3.2.4 Určení počtu teoretických pater

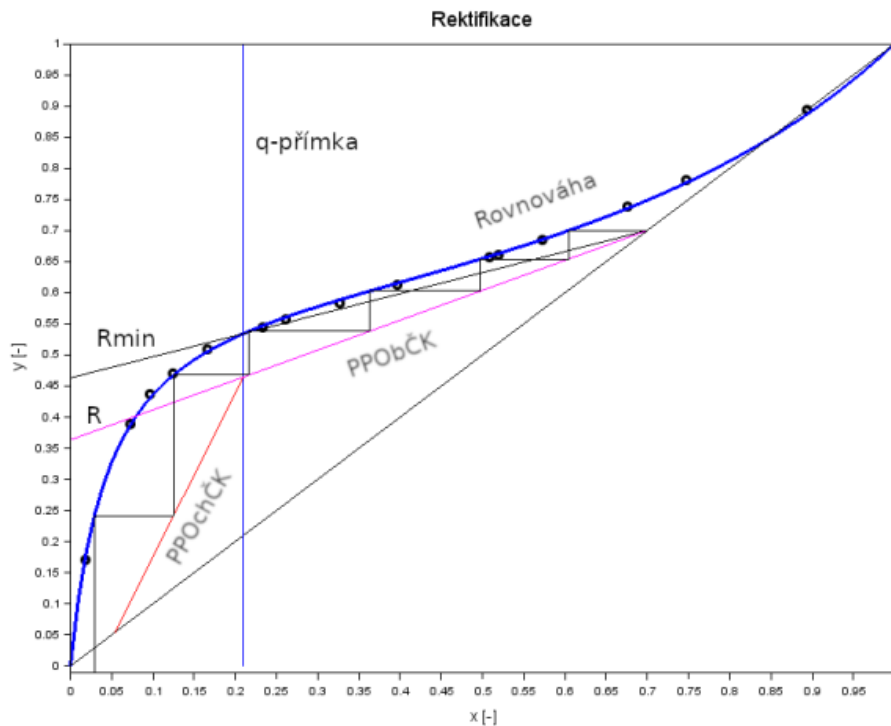
Na základě určené náhradní funkce (podkap. 3.2.1) je její tvar použit ve vlastním skriptu pro řešení rektifikace. Z hlediska studijních účelů je ve skriptu provedena i optimalizace parametrů náhradní funkce pomocí funkce `lsqrsolve`. Tzn., že rovnovážná data x , y zjištěná z literatury jsou také zapsána ve skriptu ve formě řádkových vektorů (rozměr $m \times 1$) a proložena náhradní funkcí s optimalizovanými parametry. Pro výpočet počtu teoretických pater (PTP) kromě náhradní funkce byly využity ještě zjištěné rovnice PPObČK a PPOchČK v předchozí podkap. 3.2.3. Vlastní výpočet PTP je naprogramován pomocí algoritmu od patra k patru, což je v podstatě grafický způsob převedený do numerického zpracování a zapsán ve skriptu pomocí cyklu `while ... end`. Ukázka části kódu pro výpočet PTP v ObČK je uvedena v následujícím výpisu:

| Kód | Význam |
|--|---|
| ... | |
| <code>GX(1)=x_d</code> | pomocná proměnná, využití i pro graf |
| <code>GY(1)=x_d</code> | pomocná proměnná, využití i pro graf |
| <code>i=2</code> | |
| <code>//Zjištění PTP v cyklu while</code> | |
| <code>while GX(i-1) >= res_pr(2)</code> | <code>res_pr(2)</code> x souřadnice průsečíku PPObČK a PPOchČK tedy nástříkové patro |
| <code>GY(i)=GY(i-1)</code> | hodnota y na rovnováze |
| <code>x_odh=GX(i-1)</code> | odhad hodnoty x na rovnováze |
| <code>y_p=GY(i)</code> | pomocná proměnná pro funkci <code>f_res1</code> |
| <code>GX(i)=fsolve(x_odh,f_res1)</code> | výpočet x z nelineární rovnice pomocí <code>fsolve</code> |
| <code>GX(i+1)=GX(i)</code> | hodnota x pro PPObČK |
| <code>if GX(i+1) >= res_pr(2) then</code> | test zda se x nachází stále v ObČK, <code>res_pr(2)</code> x souřadnice průsečíku PPObČK a PPOchČK |
| <code>GY(i+1)=smer_PPOb*GX(i)+usek_PPOb</code> | hodnota y pro PPObČK |
| <code>else</code> | |
| <code>GY(i+1)=smer_PPOch*GX(i)+usek_PPOch</code> | hodnota y pro PPOchČK |
| <code>end</code> | |
| <code>i=i+2</code> | |
| <code>end</code> | |
| ... | výpočet pokračuje analogicky pro OchČK |

Výsledky v textové podobě (konzole programu Scilab) a grafickém vyjádření jsou uvedeny na Obrázku 10 a 11. Na Obrázku 11 je vložen i popis významu jednotlivých částí grafu.



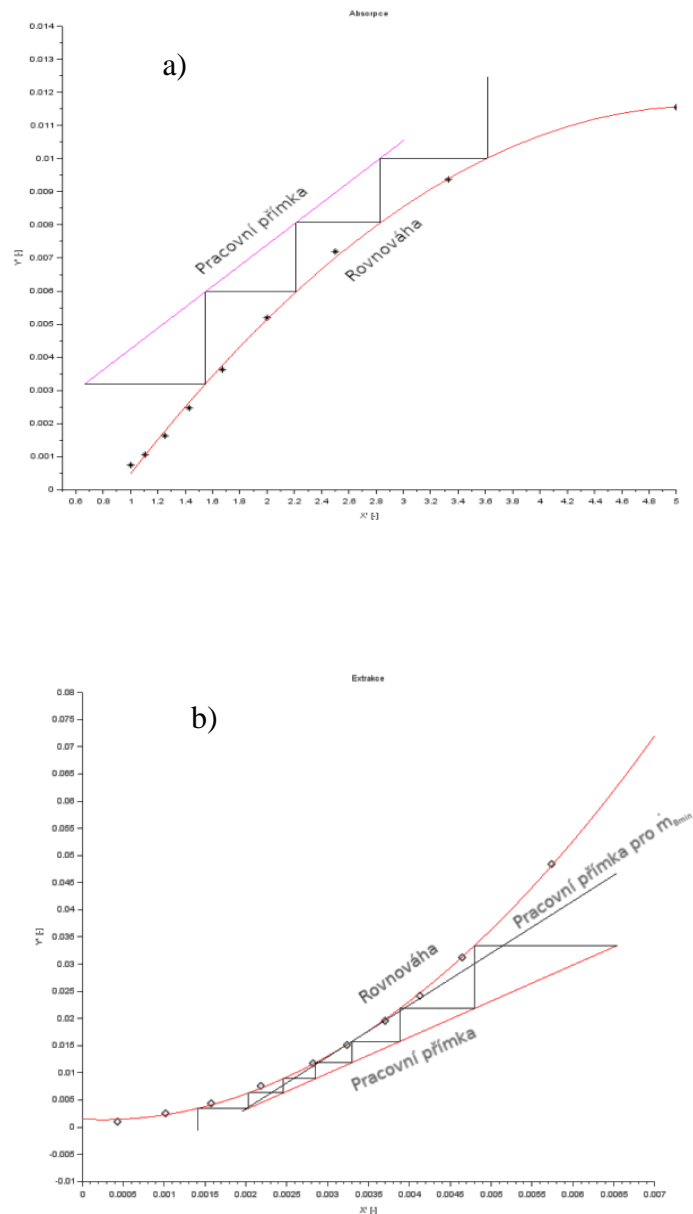
Obrázek 10 – Výpis výsledků řešení rektifikace v konzoli programu



Obrázek 11 – Grafický výstup řešení rektifikace

3.2.5 Řešení absorpce a extrakce

Jak už bylo zmíněno v předchozím textu, kromě rektifikace se řešily úlohy také z absorpce a extrakce. Vytvořené skripty pro řešení těchto úloh jsou uloženy na přiloženém CD a zde je uvedena ukázka grafického výstupu s popisem jednotlivých částí grafu – Obrázek 12 a), b). Ve vlastních skriptech je vždy jako úvodní poznámka uvedeno zadání příslušných příkladů.



Obrázek 12 – Grafický výstup řešení a) absorpce, b) extrakce

ZÁVĚR

Během zpracování bakalářské práce jsem se naučil a následně rozšířil znalosti z hlediska využití softwarového produktu Scilab při řešení chemickoinženýrských úloh. Seznámil jsem se s prostředím programu a poté s jeho vnitřními příkazy a funkcemi jako jsou např. *fsolve*, *lsqrsolve*, *linsolve*, *function*, *plot2d* a mnoho dalších důležitých, které jsem využil při vlastním řešení úloh.

V rámci této bakalářské práce jsem vytvořil algoritmy pro řešení vytypovaných příkladů z rektifikace, absorpce a extrakce se stupňovitým kontaktem fází, které jsou řešeny na seminářích v rámci předmětu Chemické inženýrství I. Vytvořené algoritmy (např. pro prokládání rovnovážných dat vhodnou náhradní funkcí, výpočet bilancí, zjištění pracovních přímek, určení počtu teoretických pater apod.) jsem pak použil při psaní skriptů v uvedeném programu Scilab pro řešení uvedených jednotkových operací. Praktická ukázka výstupu těchto skriptů je uvedena v kap. 3.

Vlastní vytvořené skripty pro výpočet vytypovaných příkladů jednotkových operací mohou být použity pro studijní účely na seminářích z Chemického inženýrství I, protože je u nich možnost pomocí úvodních dialogových oken pro vstupní data obměňovat zadání hodnot vstupních veličin a následným výpočtem ve skriptu ověřit výsledky získané grafickým způsobem používaným na seminářích.

Tato práce ukázala, že univerzálnost softwarových matematických programů, v tomto případě programu Scilab, umožňuje použít tyto programy i při řešení chemickoinženýrské problematiky.

POUŽITÁ LITERATURA

- [1] MÍKA, Vladimír. *Základy chemického inženýrství*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1977.
- [2] PILAŘ, Antonín, Jaroslav NÝVLT a Ivan MACHAČ. *Chemické inženýrství: Difuzní operace*. Vyd. 1. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1972.
- [3] ČEŠKOVÁ, Jarmila. *Řešení chemicko-inženýrských úloh pomocí tabulkových kalkulátorů: Absorpce binárních směsí*. Pardubice, 2014. Bakalářská práce. Univerzita Pardubice.
- [4] PALATÝ, Zdeněk. *Učební text – chemické inženýrství I*. Pardubice: Univerzita Pardubice,
- [5] PILAŘ, Antonín. *Příklady chemicko-inženýrských výpočtů*. 1. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1973.
- [6] DOLEČEK, Petr a Alena ŽÁKOVÁ. *Data k chemickoinženýrským výpočtům II – kap. I.-IV*. Pardubice, 2004.
- [7] *Chemsep* [online].[cit. 2018-06-12].
- [8] *Chemcad* [online].[cit. 2018-06-12]. Dostupné z: <https://www.chemstations.com/>
- [9] *Mobatec modeller*. *Mobatec modeller* [online].[cit. 2018-06-12]. Dostupné z: <https://www.mobatec.nl/web/>
- [10] *DWSIM*. *DWSIM* [online].[cit. 2018-06-12]. Dostupné z: <http://dwsim.inforside.com.br>
- [11] *HYSYS*. *HYSYS* [online].[cit. 2018-06-12]. Dostupné z: <https://www.aspentech.com/products/engineering/aspens-hysys>
- [12] *Matlab*. *Altiusdirectory: matlab programming language* [online]. [cit. 2018-06-12]. Dostupné z: <http://www.altiusdirectory.com/Computers/matlab-programming-language.php>
- [13] *Scilab*. *Scilab: About scilab* [online].[cit. 2018-06-12]. Dostupné z: <https://www.scilab.org/en/scilab/about>
- [14] *Maxima*. *Maxima* [online].[cit. 2018-06-12]. Dostupné z: <http://maxima.sourceforge.net/>

- [15] Octave. *Linuxexpres: Octave* [online].[cit. 2018-06-12]. Dostupné z:
<https://www.linuxexpres.cz/software-pro-skoly/matematika/octave>
- [16] Toolbox. *Scilab toolboxes* [online].[cit. 2018-06-20]. Dostupné z:
<https://atoms.scilab.org/toolboxes/stibox>
- [17] ŠIŠKA, Bedřich. *Materiály k chemickému inženýrství I.*, Univerzita Pardubice.

ELEKTRONICKÉ PŘÍLOHY

Příloha 1 Kompaktní disk CD s vytvořenými skripty (*.sce) a rovnovážnými daty (*.txt)