

A projekt problémájának meghatározása

Egy köpennyel ellátott CSTR reaktor két bemeneti és egy kimeneti nyílással rendelkezik, melyek állandó térfogaton működnek. A reaktorban egy $A + B \rightarrow C + D$ típusú kémiai reakció zajlik, ahol az „A” komponens az első bemeneti nyíláson keresztül áramlik a reaktorba, a folyamat egy korábbi egységből, ezáltal térfogatáramát nem lehet módosítani. A „B” vegyület beszerzési ára elhanyagolható az „A” vegyületéhez képest, ezt egy tárolótartályból vezetjük be a reaktorba, térfogatárama ezáltal szabadon változtatható. A „C” anyag a fő termék, melyet folyamatosan elválasztunk a reakcióelegytől egy folyamatos, jól kevert kristályosító berendezésben, amelyet a reaktorral sorba kötve működtetünk. A kívánt konverzió a reaktorban legalább 85%. A kristályosító hozama legalább 90%, és az átlagos szemcseméretnek meg kell haladnia az 50 μm -t. A reakció (reaktor) és a kristályosítás (kristályosító) részletes leírása a dokumentum függelékében található. Három PID-szabályozó működteti az integrált rendszert, hogy a reaktor hőmérsékletét, a reaktor konverzióját és a kristályosító hozamát a kívánt referenciaértékeken tartsuk. A kristályszemcseméret közvetlenül nem szabályozható, a minimálisan elvárt célérték megvalósulását a kristályosító megfelelő tervezésével kell biztosítani.

A feladat az integrált folyamat szimulációs vizsgálata stacioner és dinamikus működés tekintetében egyaránt, annak a tervezése ideértve a berendezések és térfogatáramok nominális méretezését, az MV-PV párosításokat, valamint a PID szabályozók hangolását, végül vizsgáljuk az integrált, szabályozott folyamat robusztusságát (zavarásokkal szembeni ellenállóképességét).

A félév végén egy legalább 15, legfeljebb 20 oldalas írásbeli beszámolót kell benyújtani (A4-es formátumban, Times New Roman vagy hasonló betűtípussal, 12 pt, 1,15-os sorközzel, ábrákkal, táblázatokkal, bevezetéssel és hivatkozásokkal együtt), amely az alábbiakban felsorolt problémákra vonatkozik.

A végső osztályzatot három kritérium súlyozott átlaga alapján számítjuk ki:

1. A dokumentum formázása, a táblázatok és az ábrák minősége: 30 %
2. A leírás egyértelműsége és a szaknyelv helyes használata: 20 %
3. Az eredmények megfelelősége: 50 %

A megoldandó problémák felsorolása:

1. Folyamat tervezési feladat: a reaktor és a kristályosító térfogatának névleges értékeit, a „B” reagens áramlási sebességét, a reaktor fűtőközegének és a kristályosító hűtőközegének áramlási sebességét úgy kell megválasztani, hogy az megfeleljen a felsorolt hozam- és szemcseméret-előírásoknak. Ez a lépés magában foglalja a következőket:
 - a) Írja le a reaktort és a kristályosítót külön-külön a megfelelő (anyag, energia és populáció) dinamikus mérlegegyenletekkel,

- b) Oldja meg az egyenleteket numerikusan egy megfelelő környezetben (erősen ajánlott Matlabban, az ode45 solver segítségével),
 - c) Rajzolja fel a reaktor és a kristályosító állandósult állapotú jellemzőit külön-külön az összes lehetséges reaktor-és kristályosító térfogatra (lásd a részleteket az 1. és 2. függelékben). Ez azt jelenti, hogy:
 - i. Változtassa az áramlási sebességeket az adott tartományokban szisztematikusan, az intervallumokat legalább tíz egyenletesen elosztott ponttal lefedve (lásd az 1. és 2. függelék 1. és 2. táblázatainak pontjait).
 - ii. Futtasson minden szimulációt kellően hosszú ideig az állandósult állapot eléréséhez. Győződjön meg arról, hogy a folyamat stabil adott körülmények között.
 - iii. Ábrázolja az állandósult állapot jellemzőit a reaktor és kristályosító különböző bemeneti változóinak függvényében. Reaktor változói: reaktorhőmérséklet, köpenyhőmérséklet, konverzió, valamint az „A” és „B” reagensek koncentrációja. Kristályosító változói: kristályosító hőmérséklete, köpenyhőmérséklet, hozam, átlagos szemcseméret és „A” komponens koncentrációja.
 - iv. Értelmezze az állandósult állapot jellemzőit! Például: Minden esetben lineáris az állandósult állapot? Ha nem, miért nem? Milyen szabályozási következményekkel jár, és hogyan befolyásolná ez a szabályozószelep és/vagy a szabályozó kiválasztását? Változik-e a folyamat erősítésének előjele az elemzett tartományon belül? Ha igen, ez milyen szabályozási következményekkel jár?
 - d) A parametrikus vizsgálat eredményei alapján válassza ki a megfelelő tervezési paramétereket, indokolja meg választását, és használja ezeket a projekt további részében! Próbálja meg minimalizálni a reaktor térfogatát és a „B” komponens áramlási sebességét!
2. A reaktor hőmérsékletét, a reaktor konverzióját és a kristályosító konverzióját szabályozni kell. A potenciális manipulált változók (MV-k) a „B” áram térfogatárama, a reaktor fűtőközegének és a kristályosító hűtőközegeinek térfogatáramai. Ez a lépés a következőket foglalja magában:
- a) A szimulációk Matlabból Simulinkbe történő áthelyezése a Simulink S-function blokkjának használatával. Építsen külön S-function blokkot a reaktorhoz és a kristályosítóhoz, és tesztelje őket külön-külön, mielőtt a két blokkot ugyanabba a Simulink-modellbe integrálná.
 - b) Identifikálja a fentebb leírt MIMO-rendszer 3x3-as átviteli mátrixát. Feltételezzen FOPTD dinamikus viselkedést az összes átviteli útvonalra, és határozza meg a paramétereket grafikus (gyors, közelítő) módszerrel – egyszerre mindig egy bemenetet változtatva ugrásszerűen.
 - i. Ha a rendszer nem írható le FOPTD dinamikával (pl. inverz rendszerválaszt észlelünk), akkor csak egy erősítési tényezőt határozzunk meg az adott álfolyamatra,
 - ii. Magyarázza meg az fordított válasz okát, és javasoljon műszaki megoldást ezen nemkívánatos viselkedés kiküszöbölésére.

- c) Az azonosított erősítési mátrix alapján számítsa ki a folyamat relatív erősítési mátrixát (RGA), és az RGA alapján tegyen javaslatot a legjobb MV-PV párosításokra.
 - d) Implementálja Simulinkben a visszacsatolt szabályzókat a fent meghatározott párosításokhoz. Használja a Simulink beépített PID szabályozó blokkját. Hangolja be a szabályozókat az IMC/Lambda módszerrel a már azonosított FOPTD átviteli függvények alapján.
 - e) Állítsa be a következő referenciaértékeket: reaktor hőmérséklete: 45 °C, reaktor konverziója: 0,85, kristályosító hozama: 0,9. Simulinkben ábrázolja, a manipulált és szabályozott változók mellett az átlagos szemcseméretet is folyamatkövetési céljából.
 - f) Tesztelje a szabályzórendszert egy kellően hosszú Simulink-szimuláció futtatásával. Ha a rendszer instabil, a referenciaértékek nem, vagy csak nagyon lassan érhetők el, ellenőrizze az alapjelek megvalósíthatóságát, a szabályozók hangolásait, és futtassa újra a szabályozó szimulációt, amíg a megfelelő szabályozási viselkedést el nem éri.
3. A szabályozó rendszert a következő zavarások mellett is vizsgáljuk, először egyesével, majd mindegyiket egyazon szimulációban alkalmazva:
- a) 10 fokos ugrás zavarás a reaktor fűtőközeg hőmérsékletében,
 - b) A kristályosító hűtőközeg hőmérsékletének -10 fokos ugrás zavarása,
 - c) +30%-os ugrás zavarás az "A" reagens koncentrációjában.
- Az utolsó, összes zavarást magába foglaló szimulációban a zavarások között legyen két-két óras késleltetés, és a zavarások sorrendje legyen a fenti felsorolás sorrendje.

A félév ajánlott időbeosztása (14 hét)

Ez a beosztás heti 1 óra felügyelt projektórát és három óra egyéni munkát feltételez. A negyedik héttől kezdve legalább heti egy órát ajánlott a végleges dokumentum megírására és szerkesztésére fordítani. Legjobban akkor jár el, ha munkáját minden héten új heti mappába menti el a véletlen adatvesztés elkerülése érdekében, vagy saját GitHub repo-t használ.

1. hét

1. Végezze el a "Matlab onramp" képzést a www.mathworks.com oldalon, amely az intézményi (...@edu.bme.hu e-mail címével történő bejelentkezést követően szabadon elérhető.). **A képzés elvégzésének visszaigazolásaként küldje el a projekt vezetőjének a teljesítésről szóló jelentést az első hét végéig.**
2. Gyakorolja az ODE megoldását Matlab környezetben. Implementálja egyénileg az ode45 függvény dokumentációjában felsorolt **összes példát** (írja be a "doc ode45" parancsot a Matlab command window-ba). Törekedjen arra, hogy ne csak teljesítse a példákat, hanem megértse az ODE megoldás menetét.
3. Az 5. hétig elvégzendő házi feladatok: Simulink onramp tréning (oldja meg online és küldje el a teljesítés igazolását a projekt vezetőjének). Állítson össze egy FOPTD rendszer visszacsatolt szabályozókört tetszőleges átviteli függvény paraméterekkel, és hangolja be azt a Cohen-Coon és IMC/Lambda módszerekkel. Hasonlítsa össze a két módszerrel hangolt PI-szabályozók által irányított folyamatok dinamikus viselkedését.

2. hét

1. Vezesse le a CSTR-reaktor anyag- és energiamérlegegyenleteit. Állandó reaktortérfogatot feltételezve összesen négy anyag- és két energiamérlegre lesz szüksége (reaktor és köpenytér).
2. Elemezze és értse meg az egyenleteket. Tegye magát próbára a differenciálegyenletek kibővítésével, pl. egyensúlyi reakció, a reakcióhő stb. figyelembevételével.

3. hét

1. Oldja meg numerikusan a CSTR differenciálegyenleteket Matlabban az ode45 megoldó segítségével, és ellenőrizze az eredmények helyességét (pl. ellenőrizze alaposan a komponensmérleg teljesülését, azaz egy mól reagensből egy mól termék képződik).
2. Szükség esetén keresse meg a hibát az egyenletekben és/vagy a szimulációs programokban.
3. Írja meg az állandósult állapotú parametrikus vizsgálatok kódjait (kézenfekvő lenne "for ciklusok" alkalmazásával, de ez nem szükségeszerű – a paraméterek manuális variálásával és a szimulációk egyenkénti futtatásával is végrehajtható a vizsgálat).

4. hét

1. A 3. héten írt szimulációs programok futtatása, a stacioner parametrikus vizsgálatok végrehajtása. Minden eredményt gondosan értelmezzen, összpontosítva az ellenőrzési szempontokra (lineáris vagy nemlineáris viselkedés, minimum/maximum jelenléte stb.).
2. Kezdje el a végső beszámoló megírását.

5. hét

1. A reaktor szimulációs programok átültetése Matlabból Simulinkbe a Simulink S-function blokkjának segítségével.
2. Ellenőrizze az implementáció helyességét a Simulink és a Matlab szimulációkban kapott dinamikus lefutások összehasonlításával.
3. Építsen be visszacsatolt szabályozókört, ahol az MV az F_H^0 , a PV pedig a konverzió (alapjel: 0,85). Határozza meg a FOPTD átviteli függvényt a $F_H^0 \rightarrow$ konverzió útvonalhoz, és hangolja be a PI szabályozót az IMC/Lambda módszerrel. Állítsa be a PI szabályozó MV tartományát az 1. számú függelék 1. táblázatban megadott térfogatáram határokra.

Figyelem! Ne felejtse el bekapcsolni a szabályozón anti-windup "Clamping" Algoritmusát, hogy megelőzzük az integrátor telítődést.

6. hét

1. A kristályosító modell-egyenletek felírása és megértése. A momentum egyenletek rendszerének a megoldása Matlabban az ode45 solver segítségével.

2. Ellenőrizze a szimuláció helyességét. A 3. ábrát használhatja referenciamegoldásként. Szükség esetén keressük meg a hibát a szimulációs programokban.

7. hét

1. Hajtsa végre a kristályosító paraméteres vizsgálatát, és találja meg a legmegfelelőbb névleges értékeket a kristályosító térfogatára és a hűtőközeg áramlási sebességére (F_C^0).

8. hét

1. Ültessük át a szimulációt Matlabból Simulinkbe az S-function blokk segítségével. Ellenőrizze a Simulink-kódok helyességét a dinamikus szimulációs eredményeket a Matlabban kapott eredmények összevetésével.
2. Hozzunk létre egy egyszerű visszacsatolt szabályozókört, ahol az MV az F_C^0 , a PV pedig a kristályosító hozama (hozam alapjel: 0,9). Hangolja be ezt a szabályozót az IMC/Lambda módszerrel.

9. hét

1. Implementáljunk egy kaszkád szabályozókört, ahol az MV az F_C^0 , a slave kör PV -je a köpeny hőmérséklete, a master kör PV -je pedig a kristályosító hozama (hozam alapjel: 0,9).
2. Hasonlítsa össze a visszacsatolt és a kaszkád szabályozási körök teljesítményét szabályozási idő és túllendülés tekintetében. Kapcsoljunk $+5^\circ\text{C}$ -os ugrás zavarást a T_C^0 -re 15000 s pillanatban. Hasonlítsa össze a visszacsatolt és a kaszkád szabályozási körök zavaráskompenzálási képességét.

10. hét

1. Kössük össze a reaktor és a kristályosító S-function szimulációit Simulinkben. Tartsa meg a különálló Simulink S-funkció blokkokat, és végezze el az integrációt úgy, hogy a szükséges reaktor kimeneteket a kristályosító bemeneteként használja.

Figyelem! A koncentrációnak a reaktor és a kristályosító modellekben különböző mértékegységei vannak, ezért azok egységesítése elengedhetetlen.

2. A szimulációk futtatása és hibakeresése.

11. hét

1. Határozza meg a 3x3-as MIMO rendszer átviteli mátrixát, FOPTD dinamikát feltételezve minden átviteli útvonalra.
2. Ha bármelyik dinamika nem írható le FOPTD-ként, határozza meg a megfigyelt viselkedés típust, és magyarázza meg a megjelenésének okát. Ebben az esetben csak a folyamat erősítési tényezőjét számolja ki.

3. Számítsa ki az erősítési (Bristol) mátrix alapján a relatív erősítési mátrixot (RGA-t), és tegyen javaslatot a legjobb MV-PV párosításokra ("szerelemdoktor" feladat!).

12. hét

1. Állítsa össze Simulinkben a szabályozóköroket az előző heti RGA alapján kapott párosításokhoz.
2. Hangolja be a PI szabályzókat az IMC/Lambda módszerrel. Gondosan implementálja a szabályozó paramétereit a Simulink szimulációba kiemelten odafigyelve a megfelelő PID-algoritmus (ideális vagy párhuzamos) kiválasztására és a megfelelő paraméterek használatára (pl. arányos sáv vagy szabályozó erősítés, integrálási idő vagy integrálási erősítés). Ha integráló szabályzót használ korlátos MV-vel, ne felejtse el **mindig** bekapcsolni az "anti-windup" rendszert a Clamping algoritmussal.

Legjobban akkor jár el, ha a szabályzókat egymás után hangolja, és minden hangolás után szimulációval teszteli az adott szabályzót.

13. hét

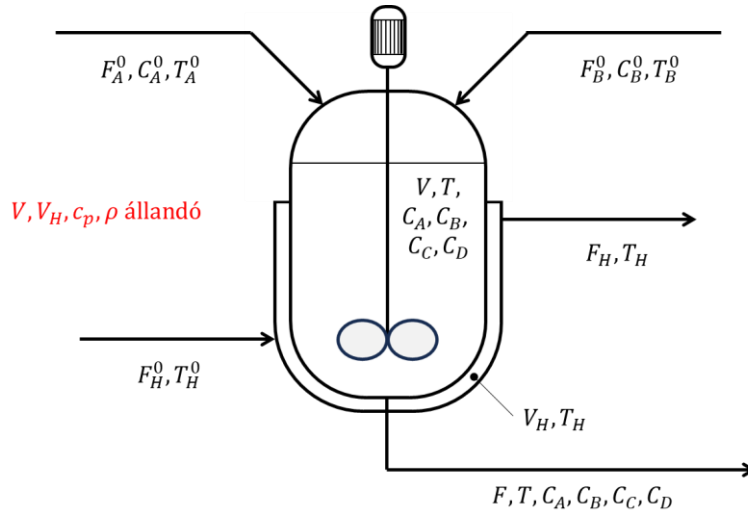
1. Vezesse be a projekt leírásában felsorolt zavarásokat, és futtassa le a szabályozási szimulációkat. Megfelelő-e a szabályozók zavarelhárítási képessége? Ha nem, manuálisan finomhangolja a szabályozók paramétereit. Javasoljon (nem implementálni!) fejlett szabályozási stratégiákat, ha a teljesítményt a kézi utóhangolás után is elfogadhatatlannak találja.
2. A dokumentum véglegesítése.

14. hét

1. A dokumentum véglegesítése és elküldése .pdf formátumban a "Vezetéknél_Keresztnék_PCProjekt _év.pdf" címszó alatt a szilagyi.botond@vbk.bme.hu email címre. Más nevű fájlokat nem veszünk figyelembe.

1. Függelék: Reaktor modellezése

Az 1. ábrán bemutatott kémiai reaktorba két reagenst vezetünk be T_A^0 és T_B^0 hőmérsékleten, F_A^0 és F_B^0 térfogatárammal, C_A^0 és C_B^0 koncentrációban az A és B komponensekre nézve.



1. ábra: Az alkalmazott CSTR vázlata.

A reaktorban a következő kémiai reakció játszódik le:



A reakció fő terméke a C komponens. Tegyük fel, hogy a reakciósebesség (r , $[\frac{kmol}{m^3 \cdot s}]$) a következő formális kinetikai egyenlettel írható le:

$$r = k C_A C_B \exp\left(-\frac{E_A}{RT_k}\right) \quad (2)$$

Ahol k a reakciósebességi állandó, E_A az aktiválási energia, R az egyetemes gázállandó, T_k pedig a hőmérséklet Kelvinben.

A reaktor hőmérséklete a reaktorköpenybe bevezetett fűtőközeggel szabályozható, amelynek a bemeneti hőmérséklete T_H^0 , térfogata pedig F_H^0 . A hőcsere felülete A (m^2), és a köpeny és a reaktor közötti hőátbocsátási együttható U ($\frac{W}{m^2 \cdot K}$). A köpeny és környezete közötti hőcserét (hővesztéseget) elhanyagolhatónak tekintjük.

A cél olyan körülmények találása, amelyeknél az A reagensre számított konverzió legalább 85%. Ehhez első körben a reaktorba jutó fűtőközeg mennyiségét használhatjuk tervezési változóként, és a megfelelő reaktor kiválasztásával a reaktor aktív térfogatát (V) is

változtathatjuk. További cél a főtermék koncentrációjának szabályozása egy adott munkapontban. Ezt a folyamatot modell alapú szimulációk segítségével oldjuk meg.

Az állandó reaktor- és köpenytérfogat feltételezésekből következik, hogy $F = F_A^0 + F_B^0$ és $F_H = F_H^0$. Ezek mellett az anyagmérlegek a következő módon alakulnak.

$$\frac{dC_A}{dt} = C_A^0 \frac{F_A^0}{V} - C_A \frac{F}{V} - r \quad (3a)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = C_B^0 \frac{F_B^0}{V} - C_B \frac{F}{V} - r \quad (3b)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = -C_C \frac{F}{V} + r \quad (3c)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = -C_D \frac{F}{V} + r \quad (3d)$$

Az energiamérlegekből a következő egyenletek vezethetők le a köpeny és a reaktor hőmérséklet dinamikájára:

$$\frac{dT}{dt} = T_A^0 \frac{F_A^0}{V} + T_B^0 \frac{F_B^0}{V} - T \frac{F}{V} - \frac{UA}{\rho c_p V} (T - T_H) \quad (4a)$$

$$\frac{dT_H}{dt} = T_H^0 \frac{F_H^0}{V_H} - T_H \frac{F_H}{V_H} + \frac{UA}{\rho_H c_{p,H} V_H} (T - T_H) \quad (4b)$$

„Költői kérdés”: a probléma ismeretében melyik egyenletet, vagy egyenleteket lehetne elhagyni? Miért?

A szimulációk során az 1. táblázatban felsorolt állandókat használtuk.

Figyelem! A konstansok értékei a ZH-n változhatnak!

1. táblázat: A szimulációkban alkalmazandó rendszerspecifikus konstansok és működési paraméterek.

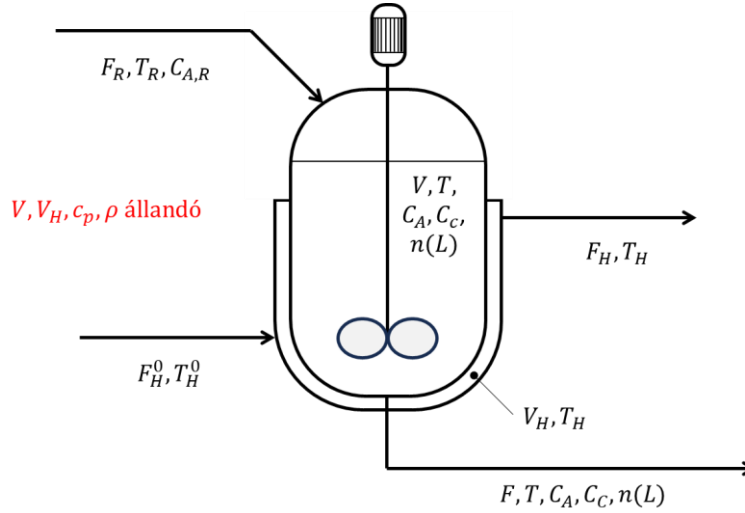
Paraméter	Mértékegység	Érték*
k	(m ³ /kmol) /s	$5 \cdot 10^9$
R	kJ/kmol/K	8.31
E_A	kJ/kmol	65000
F_A^0	m ³ /s	0.001
F_B^0	m ³ /s	0.004-ig
T_A^0	°C	25
T_B^0	°C	45
C_A^0	kmol/m ³	2
C_B^0	kmol/m ³	2
ρ	kg/m ³	998
ρ_H	kg/m ³	998
c_p	J/kg/K	3140
$c_{p,H}$	J/kg/K	3140
V	m ³	0.1 vagy 0.5 vagy 1
V_H	m ³	$V/10$
U	W/m ² /K	1200
A	m ²	$5V^{2/3}$
F_H^0	m ³ /s	0.01-ig
T_H^0	°C	90

*intervallum esetén a paraméter értéke szabadon választható a határok között

A differenciálegyenlet-rendszert úgy oldjuk meg, hogy a reaktor kezdetben csak oldószert tartalmaz, és a reaktor és a köpeny hőmérséklete 20-20°C.

2. Függelék: Kristályosító modellezése

A 2. ábra a kristályosítót ábrázolja, amely közvetlenül a reaktorhoz van csatlakoztatva a betáplálási áramon keresztül.



2. ábra: Az MSMPR kristályosító vázlata.

Feltételezzük, hogy a kristályosítóban nem történik kémiai reakció. A kristályosodás globálisan folyadék-szilárd fázisátalakulást jelent, ahol az A komponens a folyadékfázisból a szilárd fázisba kerül:



A kristályosodás hajtóereje a túltelítés, amely a koncentráció (C_A) és az oldhatósági koncentráció függvényében ($C_{A,s}$) fejezhető ki az alábbi egyenlettel:

$$\sigma = \frac{C_A - C_{A,s}}{C_{A,s}} \quad (6)$$

Az oldhatóság exponenciálisan függ a hőmérséklettől:

$$C_{A,s} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right] = a_1 \exp(a_2 T) \rightarrow C_{A,s} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] = M_w a_1 \exp(a_2 T) \quad (7)$$

Ahol M_w a kristályosuló anyag moláris tömege. Az elsődleges gócképződés sebessége ($B, \frac{\#}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}$) és a kristálynövekedési sebesség ($G, \text{m/s}$) a túltelítettség függvényében számítható:

$$B = k_p \sigma^p$$

$$G = k_g \sigma^g \exp \left(-\frac{E_g}{RT_K} \right) \quad (8)$$

A kristályosító hőmérséklete a kristályosító köpenyterébe vezetett hűtőközeggel szabályozható, amelynek bemeneti hőmérséklete T_C^0 , térfogata pedig F_C^0 . A hőcsere felülete $A \text{ (m}^2\text{)}$, a köpenytér és a reaktor közötti hőátbocsátási tényező $U \left(\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \right)$. A köpeny és környezete közötti hőcserét (hővesztés) elhanyagolhatónak tekintjük.

A tervezési feladat célja olyan működési paraméterek találása, amelyek mellett az A komponens számított termelése 90 %, ugyanakkor az átlagos részecskeméret legalább 50 μm . Ezt a reaktorba belépő hűtőközeg áramlási sebességét hangolhatjuk, valamint fontos a megfelelő reaktortérfogat (V) választása.

Az mérlegegyenletek felírásakor feltételezzük, hogy a rendszer jól kevert, és hogy csak elsődleges gócképződés és kristálynövekedés történik (a kristályok agglomerációját és a törését elhanyagolhatónak tekintjük). A szemcseméret eloszlás a szemcseszám-sűrűségfüggvénnyel $n(L)$ írható le, amely a $[L, L+dL]$ mérettartományba eső szemcsék számát adja meg a szuszpenzió egy térfogategységére vetítve. A populációmérleg modell a következő parciális differenciálegyenlettel írható le:

$$\frac{\partial n(L)}{\partial t} + G \frac{\partial n(L)}{\partial L} = B\delta(L - L_n) - \frac{F}{V}n(L) \quad (9)$$

ahol δ a Dirac delta függvény, L_n pedig a kristálygócok mérete. A populációmérleg-egyenlet kezdeti és peremfeltételei a következők:

$$\begin{aligned} n(L, t = 0) &= n_0(L) \\ \lim_{L \rightarrow \infty} (n(L)) &= 0 \end{aligned} \quad (10)$$

Ahol a kezdeti feltétel $n_0(L)$ az oltókristályok méreteloszlása. A peremfeltétel azt mondja ki, hogy minden kristály véges méretű.

A kristályosodó anyag komponensmérlegét a következő egyenlet adja:

$$\frac{dC_A}{dt} = -3Gk_v\rho_c \int_0^\infty L^2 n(L) dL + \frac{F}{V}(C_{A,R} - C_A) \quad (11)$$

ahol k_v a térfogati alaktényező, amely az L kristályátmérőt a kristály térfogatához (v) kapcsolja a $v = k_v L^3$ formájában. Gömb esetén $k_v = \pi/6$, kocka esetén pedig 1. ρ_c a kristály sűrűsége. A komponensmérleg-egyenlet kezdeti értéke a kezdeti koncentráció.

Elhanyagolható kristályosodási hő feltételezve, a köpenytér és a kristályosító hőmérsékletváltozására vonatkozó energiamérlegekből a következő egyenletek vezethetők le:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_R - T) - \frac{UA}{\rho_c c_p V}(T - T_C) \quad (12a)$$

$$\frac{dT_C}{dt} = \frac{F_C^0}{V_C}(T_C^0 - T_C) + \frac{UA}{\rho_c c_{p,C} V_C}(T - T_C) \quad (12b)$$

A fenti egyenletek alkotják a kristályosító dinamikai modelljének egyenleteit. A populációs mérleg egy parciális differenciálegyenlet; a komponens- és energiamérleggel egyidejű megoldása összetett feladat. Az egyszerűsítés érdekében bevezetjük az eloszlás momentumait, amelyeket a következőképpen határozunk meg:

$$\mu_k = \int_0^{\infty} L^k n(L) dL, k = 0, 1, \dots \quad (13)$$

ahol μ_k a szemcseméret eloszlás k -adik momentuma. Az első négy momentumnak fizikai jelentése van: a 0 és 1 momentumok a kristályok teljes számát, illetve teljes hosszát adják meg térfogategységre vetítve, ezek aránya pedig a szám alapú átlagos szemcseméret:

$$\bar{L} = \frac{\mu_1}{\mu_0} \quad (14)$$

Továbbá a 2. és 3. momentum arányos a részecskék fajlagos felületével és térfogathányadával. A momentumoknak ebben az esetben további gyakorlati haszna van. A momentum átalakításnak a populációmérleg-egyenleten való alkalmazásával a parciális differenciálegyenletet közönséges differenciálegyenletek rendszerévé egyszerűsödik. Feltételezve, hogy $L_n = 0$, a momentumrendszer a következőképpen írható fel:

$$\begin{aligned} \frac{d\mu_0}{dt} &= B - \frac{F}{V} \mu_0 \\ \frac{d\mu_k}{dt} &= kG\mu_{k-1} - \frac{F}{V} \mu_k \end{aligned} \quad (15)$$

Az átalakítás kompromisszumot jelent, mivel egyetlen parciális differenciálegyenletet redukál közönséges differenciálegyenletek rendszerévé (végtelen számú, mivel a k -nak nincs felső határa). Fizikai szempontból azonban elegendő a rendszert az első négy momentumra megoldani, ami véges számú egyenletet eredményez. Végző soron a folyamatos tank kristályosító megoldandó modellegyenletei a következők:

$$\begin{aligned} \frac{d\mu_0}{dt} &= B - \frac{F}{V} \mu_0 \\ \frac{d\mu_1}{dt} &= G\mu_0 - \frac{F}{V} \mu_1 \\ \frac{d\mu_2}{dt} &= 2G\mu_1 - \frac{F}{V} \mu_2 \\ \frac{d\mu_3}{dt} &= 3G\mu_2 - \frac{F}{V} \mu_3 \\ \frac{dC_A}{dt} &= -3Gk_V\rho_C\mu_2 + \frac{F}{V}(C_{A,R} - C_A) \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{F}{V}(T_R - T) - \frac{UA}{\rho_C c_{p,C} V}(T - T_C) \\ \frac{dT_C}{dt} &= \frac{F_C^0}{V_C}(T_C^0 - T_C) + \frac{UA}{\rho_C c_{p,C} V_C}(T - T_C) \end{aligned} \quad (16)$$

A biztonság kedvéért végezzünk dimenzióelemzést a tömegmérleg egyenleten:

$$\frac{dC_A}{dt} = -3Gk_V\rho_C\mu_2 + \frac{F}{V}(C_{A,R} - C_A): \frac{kg}{m^3} \frac{1}{s} = \frac{m}{s} \frac{kg}{m^3} \frac{m^2}{m^3} + \frac{m^3}{s} \frac{1}{m^3} \frac{kg}{m^3}$$

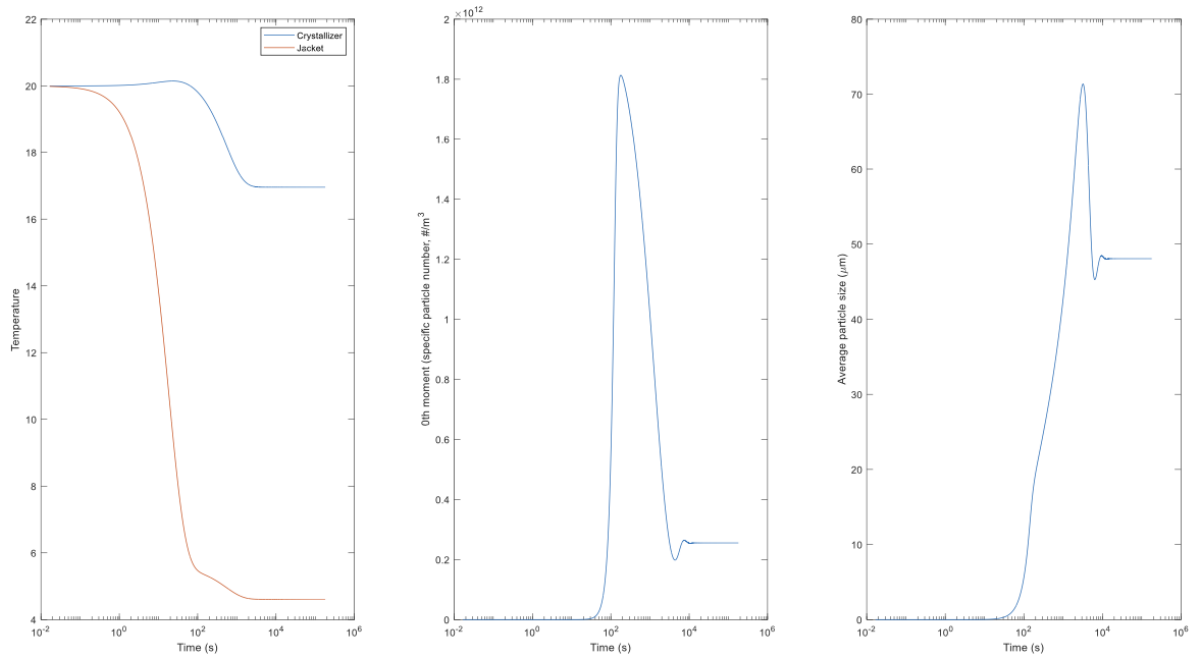
Ebből következően az egyenlet tagjai azonos mértékegységgel rendelkeznek ($\frac{kg}{m^3 \cdot s}$). A szimulációkban a 2. táblázatban felsorolt állandókat használjuk.

2. táblázat: A szimulációban használandó konstansok.

Paraméter	Mértékegység	Érték*
a_1	kmol/m ³	0.0079
a_2	-	0.108
M_w	kg/kmol	215
E_g	kJ/kmol	45000
R	kJ/kmol/K	8.31
k_p	#/m ³ /s	10 ¹¹
p	-	3
k_g	m/s	75
g	-	1.32
T_r	°C	40
F_r	m ³ /s	0.004
$C_{A,R}$	kg/m ³	$C_{A,S}(T = 40)$
ρ	kg/m ³	998
ρ_C	kg/m ³	998
ρ_c	kg/m ³	1300
k_V	-	$\pi/6$
c_p	J/kg/K	3140
$c_{p,C}$	J/kg/K	3140
V	m ³	1 vagy 5 vagy 10
V_H	m ³	$V/10$
U	W/m ² /K	1800
A	m ²	$5V^{2/3}$
F_C^0	m ³ /s	0.05-ig
T_C^0	°C	0

*intervallum esetén a paraméter értéke szabadon választható a határok között

A differenciálegyenleteket úgy oldjuk meg, hogy a reaktor kezdetben csak oldószert tartalmaz, és a reaktor és a köpeny hőmérséklete egyaránt 20-20°C



3. ábra: A kristályosító szimulációja $V = 5\text{m}^3$, $F^0 = 0,02\text{ m}^3$ értékekkel