

DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS

Kevert vegyipari berendezések modellezési eszköztárának bővítése

DOI: 10.18136/PE.2014.516

Készítette:

Egedy Attila

okleveles vegyészmérnök

Témavezetők:

Dr. Chován Tibor egyetemi docens

Dr. Varga Tamás adjunktus

Vegyészmérnöki és Anyagtudományok Doktori Iskola

Veszprém, 2013

Tartalomjegyzék

1. BEVEZETÉS	5
2. IRODALMI ÁTTEKINTÉS	7
2.1 A keverés művelete	7
2.2 A keveredést leíró modellek	9
2.3 Cellás modellezés	13
2.4 Modell validáció	19
2.5 Modellek gyakorlati alkalmazásai	24
3. MÓDSZEREK ÉS ESZKÖZÖK	29
3.1 CFD modell validáció során létrehozott mérőrendszer	29
3.2 A CFD modell alapú adaptációnál alkalmazott hőcserélő berendezés	31
3.3 Az oldó reaktor kísérletek során végzett kísérletekhez használt berendezések	32
3.4 Az alkalmazott szoftverek	33
4. CELLÁS MODELL STRUKTÚRA IDENTIFIKÁCIÓS ALGORITMUS	36
4.1 Algoritmusfejlesztés	36
4.1.1 Cellakombinációk létrehozása és szűrése	38
4.1.2 Cellás struktúrák definiálása illeszkedési mátrixszokkal	39
4.1.3 Dinamikus szimuláció és a mért valamint a szimulációs adatok kvalitatív analízise	40
4.1.4 Paraméter identifikáció és a lehetséges megoldások további szűrése	42
4.2 Cellás modell struktúra identifikációra kifejlesztett algoritmussal elért eredmények	42
4.2.1 Cellakombinációk létrehozása	43
4.2.2 Cellás struktúrák definiálása illeszkedési mátrixszok segítségével	44
4.2.3 Dinamikus szimulációs, a mért és szimulációs adatok kvalitatív analízise	45
4.2.4 Paraméter identifikáció és a lehetséges megoldások további szűrése	46
4.3 Következtetések	50
5. VIDEÓFELDOLGOZÁSON ALAPULÓ CFD MODELL VALIDÁLÁS	52
5.1 Keverési idő alapú validációs módszerek	52
5.1.1 A javasolt algoritmus	52
5.1.2 CFD szimuláció	54
5.1.3 Validálási vizsgálatok eredményei	62
5.2 Szemcsekövetés alapú validálási módszerek	66
5.2.1 Az algoritmus bemutatása	66

5.2.2	A kevert berendezés CFD modellje	69
5.2.3	Szemcsekövetési validációs eredmények	69
5.3	Következtetések	76
6.	CFD SZIMULÁTOROK ALKALMAZÁSA A VEGYÉSZMÉRNÖKI FELADATOK MEGOLDÁSÁBAN	77
6.1	CFD modell alapú adaptív hőmérsékletszabályozás vizsgálata	77
6.1.1	Modellezési lépések és eredmények	77
6.1.2	A modell analízise és a modell paraméterek korrekciója	83
6.1.3	Modell validáció	85
6.1.4	Adaptív hőmérsékletszabályozás vizsgálata	86
6.2	Oldó reaktor hibrid CFD-cellás modellezése	89
6.2.1	Kinetika identifikálása	89
6.2.2	Az oldó reaktor hidrodinamikai modellje	91
6.2.3	A reaktor cellás modellje	97
6.3	Cellás modell struktúra identifikáció alkalmazása a valós rendszerekre	100
6.4	Következtetések	103
7.	ÖSSZEFOGLALÁS	104
	Új tudományos eredmények	105
	Továbblépési lehetőségek	107
	Köszönetnyilvánítás	108
8.	PUBLIKÁCIÓK	109
	JELÖLÉSJEGYZÉK	112
	ÁBRAJEGYZÉK	115
	IRODALOMJEGYZÉK	118

Kivonat

A vegyipari technológiák üzemeltetése során felmerülő problémák megoldásában egyre inkább teret nyernek a matematikai modell alapú módszerek. A széles körben alkalmazott modellek alkalmasak arra, hogy támogassák a tervezési, fejlesztési, üzemeltetési feladatok megoldását. Mivel a felmerülő problémák megoldása megköveteli az egyre komplexebb modellekkel való számítások elvégzését, így a komplex modellekkel való számításokat lehetővé tevő eszközök egyre inkább teret nyernek a gyakorlatban. A matematikai modellek, a feladat összetettségétől függően, eltérő komplexitásúak lehetnek az egyszerű modellektől a cellás modelleken keresztül, a numerikus áramlástan (Computational Fluid Dynamics -CFD) modellekig.

A dolgozatban a keverést leíró modellezési eszköztár bővítésére folytatott kutatásaimat fogom bemutatni. A cellás modell struktúra meghatározására fejlesztettem ki egy struktúra identifikációs algoritmust és programot, mely mérési adatsor felhasználásával képes cellás modell struktúrát illeszteni egy valós rendszerre. Emellett videó felvételen alapuló validációs módszereket fejlesztettem, amelyek szemcsekövetés, valamint keverési idő számítás felhasználásával lehetővé teszik a kevert berendezések viselkedését leíró modellek validálását.

A kifejlesztett eszközök működését a dolgozatban alkalmazási példákon mutatom be, egy laboratóriumi hőcserélő CFD modell alapú adaptív hőmérsékletszabályozásának, valamint egy oldó reaktor hibrid CFD-cellás modelljének fejlesztésén keresztül.

Kulcsszavak: cellás modellezés, struktúra identifikáció, videó feldolgozás, CFD modell validálás

Abstract

Mathematical models are widely used in industrial problem solving. The widely used models are capable of solving design development or optimisation tasks. The more complex the problem is, the more complex solution can be needed, hence mathematical models with different complexity from simple models to compartment, or even Computational Fluid Dynamics (CFD) models should be applied.

In this work I will summarize my work aimed at enhancing the modelling tools in the field of mixing modelling. I developed an algorithm and program which uses residence time distribution data to identify compartment model structure and parameters. Two different video processing based model validation tools were developed using mixing time and particle tracing experiments. The developed models were tested in two examples: a CFD model based adaptation, and the development of a hybrid CFD-compartment model of an electrochemical leaching reactor.

Keywords: compartment model, video processing, CFD model

Auszug

Bei der Lösung der während der Betrieb der chemischen Technologien auftauchenden Problemen haben die mathematische modellbasierte Methoden zur Zeit an Bedeutung gewonnen. Die Modelle erzielen Breitenwirkung, indem sie bei der Planung, Entwicklung, Optimierung erfolgreich mitwirken.

Die stets komplexere Problemen verlangen, dass die Komplexität der Berechnungsmethoden ebenso zunimmt, so dass die Tools, die dieser neuen Erwartung entsprechen, sich in der alltäglichen Praxis verbreitet haben. In diesem Sinne verweisen die mathematische Modelle abweichende Komplexität (je nachdem wie kompliziert die Aufgabe selbst ist) beginnend mit den einfachen Modelle, sowie Zellenmodelle und numerische Strömungslehrenmodelle (Computational Fluid Dynamics -CFD).

Anlass dieses Referates ist meine Forschungen bezüglich der Erweiterung der die Vermischung beschreibende Modellierungstools vorzustellen. Dieses

Programm wurde entwickelt, um die Struktur der Zellenmodelle mithilfe hydrodynamischen Messdatensatzes zu bestimmen und um Zellenstruktur an einem realen System zu setzen. Hierbei habe ich Video-basierte Validierungsmethoden erstellt, die mittels Körnchennachführung sowie Rührungszeitkalkulation ermöglichen, die Modelle zu validieren, die das Verhalten der vielschichtigen Anlagen zu beschreiben versuchen.

Der Betrieb der Tools wird an Anwendungsbeispiele vorgeführt, anhand einer CFD-modellbasierte Adaptierung und anhand der Entwicklung eines hybrid CFD-Zellenmodells eines elektrochemischen Reaktors.

Schlüsselwörter: Zellenmodellierung, Strukturidentifizierung, Video Erarbeitung, Validierung eines CFD-Modells

1. Bevezetés

A matematikai modellek a mérnöki feladatok megoldásának alapvető eszközeivé nőttek ki magukat az elmúlt évtizedekben. Az egyik legfontosabb dolog a modellek alkalmazhatósága szempontjából, a megfelelő modell struktúra kialakítása. Ehhez a modell elemeinek körültekintő definiálása - pl. egy cellás modell esetében a modellt alkotó cellák - valamint a közöttük lévő kapcsolatok meghatározása szükséges. Abban az esetben, ha sikerül a modellezési célnak megfelelő struktúrát létrehozni, úgy az így kapott modellben szereplő ismeretlen paraméterek identifikációját, majd a modell validálását követően, az eredményül kapott modell alkalmazhatóvá válik gyakorlati feladatok megoldására. A dolgozatban bemutatom a keverést, mint vegyipari műveletet, azonban főként az adott berendezésen belül lezajló folyamatok az egyes folyadékelemek keveredésével és a kialakuló áramlási viszonyokkal kapcsolatos kutatásaimat mutatom be.

A jól definiált modell struktúra és a modellben található ismeretlen paraméterek meghatározását követően szükséges meggyőződni arról, hogy a kidolgozott modell megfelelően közelíti-e a valóságot. A modell megfelelőségének vizsgálatát a modellezett objektumon végzett további mérésekkel végezhetjük el (lehetőleg más munkaponton). A modell ezeket a lépéseket (modellépítés, ismeretlen paraméterek meghatározása, összevetés mérési eredményekkel) követő megfelelőség vizsgálatát validálásnak nevezzük. A modell validáláshoz szükséges mérés többféle módszerrel elvégezhető, kevert berendezések esetében általában lézeres sebességmérést, vagy homogenitás (keverési idő) mérést alapul véve. Emellett a videó felvétellel és feldolgozással is támogathatóak validálási feladatok. Amennyiben a modell struktúrát definiáltuk majd validáltuk a modellünket, akkor megbizonyosodtunk róla, hogy a valóságot az alkalmazott egyszerűsítések mellett, megfelelő pontossággal írja le.

A dolgozatban a kevert berendezések modellezési eszköztárának bővítését tűztem ki célul. A dolgozat gyakorlati része alapvetően három részre tagolódik. Az első részben modell struktúra valamint paraméter identifikációra fókuszálok kevert reaktorok cellás modelljének kidolgozása kapcsán. Struktúra identifikációs

algoritmus és program fejlesztését mutatom be, melynek az a célja, hogy tartózkodási idő mérés során gyűjtött adatok felhasználásával, elfogadható pontosságú cellás modellt illesszen egy kevert reaktorra.

A második rész, és egyúttal tézispont a numerikus áramlástan (Computational Fluid Dynamics -CFD) modellek validálásának problémájára koncentrálna. Többféle videó feldolgozáson alapuló algoritmust és programot mutatok be, melyeknek minden esetben az a célja, hogy jól használható módszert adjon CFD modellek validálására. A mérésekhez kapcsolódóan kidolgozásra került egy mérőrendszer, a fejezet fontossága a mérési és feldolgozási módszerekben, valamint a validációs lépésekben rejlik.

A harmadik rész a CFD modellek alkalmazására koncentrálna. Két példán keresztül mutatom be, hogy a kifejlesztett módszerek alkalmazhatóságát vegyész-mérnöki problémák megoldására, és a mérnöki munka támogatására. A két esettanulmány: CFD szimulátor használata laboratóriumi hőcserélő adaptív hőmérséklet szabályozása, és egy oldó reaktor hibrid CFD-cellás modelljének megalkotása, és vizsgálata.

2. Irodalmi áttekintés

Az irodalmi áttekintésben a kutatásaimhoz kapcsolódó területek irodalmát fogom áttekinteni. A keverés műveletének és a keveredést leíró modellek bemutatása után a cellás modellekről, valamint struktúra identifikációról beszélek. Ezután a CFD modellek, validálási módszereik, valamint különböző felhasználási példák következnek. A fejezet zárásaként az általam használt szimulációs szoftvereket mutatom be.

2.1 A keverés művelete

A modern technológiákban a keverés az egyike a legfontosabb műveleteknek. Széles körben használják a legkülönbözőbb iparágakban a gyógyszergyártástól kezdve, növényvédőszer gyártáson át a különböző műanyagipari eljárásokig.

A kevert berendezések többféleképpen osztályozhatók, leginkább a működés szerint (szakaszos, félfolyamatos, folyamatos); vagy az alkalmazott keverőelem alapján (turbinakeverő, jet keverő, lapátkeverő, stb.). Egy berendezés kevertetése mindig fontos tervezési szempont, ugyanis a lejátszódó folyamatok (legyen az a reagáltatás, hő- vagy komponensátadás) megfelelő sebességgel való végrehajtásához, elengedhetetlen a megfelelő fázisérintkeztetés kialakítása, illetve a fázisok homogenizálása [1]. A keveredési viszonyok modellezésével meghatározhatók azok az üzemeltetési tartományok, amelyekben a rendszer a kívánt hatásfokkal üzemeltethető. A keverés során két vagy több egymástól eltérő tulajdonságú anyagot kényszerített áramlással egyesítünk a kívánt keverési arány eléréséig [2].

A kevert anyag tulajdonságai szerint beszélhetünk önként keveredő anyagokról, amelyek legtöbbször gázok, vagy kis viszkozitású folyadékok; kevertségi állapotukat megőrző anyagokról, amelyek nagy viszkozitású vagy szilárd anyagok; valamint szétváló anyagokról, amelyek szuszpenziók, emulziók, vagy gáz-folyadék rendszerek. A keverés hajtóereje lehet mechanikai munkavégzés, vagy sebességkülönbség. A keverés célja az alkalmazott közegektől függ.

- Egyfázisú folyadékok esetén: a koncentráció, vagy hőmérséklet viszonyok kiegyenlítése, homogén fázisú reakció lejátszatása.
- Folyadék-folyadék extrakciós művelet esetén: a szételegyedés megakadályozása.
- Viskózus folyadék alkalmazása esetén: a melegítés során a falnál ne legyen nagy hőmérsékletkülönbség.
- Folyadék-gáz rendszerek esetén pedig: a kívánt gáz diszperzió megvalósítása, abszorpció, reakció felgyorsítása, habok képzése.

A berendezéseket tekintve az iparban alkalmaznak mechanikus keverőket, amelyeknél egy tengelyre (keverőszár) szerelt, forgó mozgású elem (keverőelem) végzi a keverést. Emellett alkalmaznak pneumatikus keverőket is, ahol a befúvatott gázáram idézi elő a keveredést. Elterjedtek még ezeken kívül a statikus keverők melyeknél a keverést elősegítendő az áramló közeg tehetetlensége is felhasználható a rendszer homogenizálására.

A keverés jellemzésére, valamint a kialakuló áramlási mező leírására hagyományosan dimenziómentes számokat alkalmaznak. A fontosabb mennyiségek, amelyekkel a keverés jellemezhető és a rendszer kevertsége számítható [3]:

- Keverési Reynolds szám: az áramlás jellegét adja meg a kevert berendezésben a tehetetlenségi és a viszkózus erők hányadosaként. A mennyiség a Reynolds számból származtatható.

$$Re = \frac{dv}{\nu} = \frac{d\omega r}{\nu} = \frac{2\pi n r d}{\nu} = \frac{2\pi n d^2}{2\nu} = \frac{\pi n d^2}{\nu} = \frac{d^2 n \pi \rho}{\eta} \quad (2.1)$$

- Keverési Euler szám: dimenziómentes szám, ami áramlási számításoknál használható. A helyi nyomásesés, és a térfogatra vonatkoztatott kinetikai energia hányadosa.

$$Eu = \frac{p}{\rho v^2} \quad (2.2)$$

- Froude szám: a kevert berendezésben uralkodó tehetetlenségi és nehézségi erő hányadosa.

$$Fr = \frac{dn^2}{g} \quad (2.3)$$

- Teljesítmény szám: a keverő teljesítményszükségletét határozhatjuk meg a segítségével. Az M a képletben a keverőmotor nyomatékát

jelenti. Nevezik módosított Eu számnak is, ami a keverési Re szám és Fr szám hatványfüggvényeként származtatható. Emellett ellenállástényezőnek is nevezik.

$$Po = \frac{2\pi NM}{\rho N^3 d^5} = Eu_m = A \cdot Re_m^{-m} \cdot Fr_m^{-n} \quad (2.4)$$

Mivel a kevert berendezések legtöbbször egy működő technológia részei, ezért kísérleti információk nehezen szerezhetők be a berendezésekre vonatkozóan, illetve még ha a szükséges mérőkörök ki is vannak építve, akkor is hosszú időbe telhet egy modell felépítéséhez szükséges adatok összegyűjtése. Megoldást jelenthetnek a félüzemi kísérletek, de ebben az esetben pedig a méretnövelési lépés az ipari méretekre jelentheti a problémát, ugyanis ez jelentősen befolyásolhatja a berendezésben belső viselkedését.

2.2 A keveredést leíró modellek

A számítógépek fejlődésének – különös tekintettel a számítási kapacitásra és a tárolható adatok mennyiségének növekedésére – következményeképpen lehetővé vált komplex áramlási modellek megoldása. A megfelelően felépített modellek megoldásait elemezve következtethetünk a rendszer dinamikus viselkedésére, valamint a lezajló tömeg, impulzus és hő transzport folyamatokra. Három, alapvetően különböző modellezési megközelítésmódot különböztethetünk meg az *a-priori* modellezés területén, a kevert berendezés leírásának komplexitásától függően: a tökéletesen kevert egység (TKE) modellt; cellás modelleket; valamint CFD modelleket.

A TKE modell alapján, a reaktor állapotváltozói hely szerint konstans függvénnyel jellemezhetők. Matematikai modellezés szempontjából az üstreaktorok időbeli viselkedését koncentrált paraméterű modellel írhatjuk le, mely közönséges differenciálegyenletekből építhető fel.

A TKE modell jól alkalmazható, ha a lehető legjobb kevertetést feltételezzük, ami megfelelő keverőelemekkel, vagy magas fordulatszámmal lehet elérhető. Mivel azonban az esetek túlnyomó többségében nem mondható el ez a reális reaktorokról, ezért ahhoz, hogy a valóságot jobban közelítő modellt tudjunk alkotni, az egyszerű modelleknél sokszor komplexebb modell kidolgozása válik szükségessé.

A cellás modellek átmenetet képeznek a TKE, valamint a bonyolultabb CFD modellek között. Jelentőségük abban rejlik, hogy a makrokeveredés modellezésével realisabb áramlási kép írható le velük, mint a TKE esetében, viszont a CFD modelleknél egyszerűbb a leképezésük és a felépítésük, így használatuk kevésbé erőforrás igényes.

Egy cellás modell felépítésénél is, az első lépésként meg kell vizsgálnunk a tanulmányozott rendszert, és összegezni kell, hogy milyen típusú egységekre, cellákra lesz szükség a modell definiálásához. Az alapvető kérdések, amiket ilyenkor fel kell tennünk a következők:

- Mi a keverő típusa (mechanikai stb.)?
- Van-e recirkulációs kör a keverő berendezés miatt?
- Van-e injektálás a rendszerben?
- Tartalmaz-e a rendszer terelőlemezeket, valamint a falak mellett milyen áramlás alakul ki?
- Milyen fázisok vannak jelen (gáz, folyadék, szilárd – pl. fluidizált ágy, töltetes reaktor stb.) [4]?

Ezen kérdések megválaszolása után lehetővé válik a modell felépítése. Maguk a cellák többfélék lehetnek az áramlási képnek megfelelően, de alapvetően ideális keveredési, ill. áramlási viszonyokat feltételező TKE, valamint csőreaktor elemeket használnak. Emellett áramosztók, és keverők használhatóak a reaktor cellák közötti kapcsolatok definiálására. Bizonyos esetekben alkalmazhatóak más hidrodinamikai viszonyokat (pl. axiális visszakeveredés) leíró cellák, valamint az áramlást nem tartalmazó holtter cellák. Az egyes cellák közötti kapcsolatok paraméterei az elosztási arányok, vagyis az egyes áramosztók osztásarányai.

Az egy keverőszáron több keverőelemet tartalmazó berendezést leíró cellás modellek bonyolultabbak is lehetnek, hiszen mindenképpen két vagy több keverőelemmel ellátott rendszert kell leírniuk. Többkeverős berendezéseknél különböző bonyolultságú cellás modellek használhatóak, az adott feladat komplexitásának függvényében [5]. Például több keverőelemet tartalmazó fermentorok esetében alkalmazhatóak kaszkádelemeket tartalmazó cellás struktúrák, pl. airlift fermentorok esetében, ahol nem lehet sem TKE sem csőreaktor modellekkel megfelelően leírni a rendszert. Az alsó és a felső régióban

folyamatos tökéletesen kevert üstöket, míg a felszálló és a leszálló szekcióban reaktorkaszád alkalmazható, a rendszer megfelelő leírására [6].

A cellás modellezés területén léteznek több száz cellát tartalmazó cellás modellek is, a közöttük lévő kapcsolatokkal. Persze gyakran nincs szükség ekkora cellaszámra, előfordul, hogy a két cellából álló modell is elegendő lehet. Ebben az esetben célszerűen a kevert rendszer alapján definiálunk egy keverő, valamint egy cirkulációs zónát [7].

A cellás modelleket a vegyipari alkalmazások mellett széles körben alkalmazzák például meteorológiában is. Ezen a területen azért lehet szükséges a cellás modell alkalmazása, mivel az légköri folyamatok sokszor komplexebbek is lehetnek, mint a vegyipari berendezésekben lejátszódó folyamatok. Többfázisú folyamatok, vagy például zagyreaktorok esetén a vegyipari alkalmazások is igénylik az alapszintű modelleknél összetettebb cellás modell alkalmazását [8]. A cellás modellek alkalmasak lehetnek környezetvédelmi problémák megoldására és toxikus anyag emisszió monitorozására, például klorid szennyeződés szimulációjára üzembiztonsági és veszély megelőzési szempontokat követve [9].

A harmadik modellezési megközelítés az *a-priori* modellezés területén a CFD szimulátorok. A CFD szimulátorok legnagyobb előnye abban rejlik, hogy képesek a cellás modellekhez képest pontosabban leírni a berendezésben kialakuló áramlási teret. Az impulzusmérlegek részletes leképezésével lehetővé válik akár bonyolult áramlási terű berendezések háromdimenziós szimulációja. Végeredményben maga a CFD modell egy a cellás modellekhez képest nagyságrendekkel több cellát (ebben a nevezéktanban elemet, vagy térfogatelemet) tartalmazó modell, amely elemek csúcspontjaiban és peremein számított állapotváltozók értékei jelentik a kapcsolatot az egyes elemek között, az egyes elemekben pedig az adott fluidumot definiáljuk.

CFD szimulátorok alkalmazása az ipar szinte minden szegmensében lehetséges és számos előnnyel járhat. CFD szimuláció alkalmazható például a reaktorok termikus elfutásának előrejelzésére [10], Az elfutás adódhat a hűtés meghibásodásából, motorhibából, korróziós okokból, mechanikai meghibásodásokból, az elfutást pedig gyakran a meghibásodás eredményeképp fellépő inhomogenitások okozzák [11].

A nagy viszkozitású folyadékok keverése mindig is nagy kihívás volt az ipar számára. A kevertetés ebben az esetben elsősorban a homogenizálás miatt fontos, hogy megkönnyítse a nagy viszkozitású folyadékok, illetve szuszpenziók kezelését, valamint megelőzze az esetleges hibás analitikai méréseket. Ehhez a speciális művelethez sokféle keverőtípus terjedt el. CFD szimulációs eszközök alkalmazásával többféle keverőelem kialakítás vizsgálható, így a CFD megközelítés segítséget nyújthat az optimális keverőelem kiválasztásban [12].

A gáz-folyadék rendszereknél gyakran használnak több keverőelemet. Mivel sok változó befolyásolja a kevert tankok hidrodinamikáját, ezért a mérnökök gyakran kénytelenek empirikus információkra hagyatkozni. Különösen igaz ez két vagy több fázis esetén. A CFD modellt bonyolítja, hogy a modellben figyelembe kell venni az áramlási kép mellett a buborékméretet a kétfázisú áramlás számításánál. Sok esetben szimmetria viszonyok miatt a berendezés felére lehet hagyatkozni, így azonos memóriaigénnyel a teljes rendszer részletesebben írható le [13].

Abban az esetben, amikor a CFD modellből nyert információkat egy cellás modellbe építve hasznosítjuk, hibrid CFD-cellás megközelítésről beszélünk. A hibrid CFD-cellás modellezés lényege, hogy egy CFD modell felépítését és validálását követően, az ebből kapott adatok segítségével építenek fel egy cellás modellt. Ebben az esetben a CFD szimulátor alapján beazonosíthatóak és szegmentálhatóak a berendezés azon részei, amelyek helyettesíthetőek lehetnek egy-egy cellával. A CFD modell alapján történik a berendezés cellákra bontása, követve az esetleges cirkulációs köröket. Maga a cellákra bontás történhet kézi módszerrel, vagy algoritmus használatával. Kézi módszer esetén használhatóak heurisztikák, ilyenkor általában a valós reaktorkialakítás alapján definiálják a cellás struktúrát. Algoritmikus megközelítés esetén mérési adatsor felhasználásával identifikálható a cellás struktúra. Ez a hibrid modell alkalmas lehet ezek után különböző mikroorganizmusok, és egyéb biológiai folyamatoknak helyet adó berendezések viselkedésének leírására, és ezek alapján azok vizsgálatára [14]. Emellett hibrid modellekkel kristályosítók, polimerizációs folyamatok is leírhatóak, valamint mikrokeveredési modellekkel kombinálva további hibrid rendszerek építhetőek fel [15].

A különböző keverőelemek alkalmazhatósági vizsgálatának területén az egyik legátfogóbb munka Joshi és Kumaresan kutatása [16]. 18 féle keverőelemet vizsgáltak (turbina, propeller és lapátkeverőket). Egy 0,5 m átmérőjű kevert tankban végeztek méréseket, hogy meghatározzák azokat a kulcsparamétereket, amelyek legnagyobb hatással vannak a berendezés kevertetésére. A fizikai mérések mellett szimulációt is alkalmaztak a kutatás során. Az eredményeiket felhasználva jelenleg is folynak kutatások a különböző keverőgeometriák, horizontális és vertikális tartályelrendezések kialakítása kapcsán [17].

A CFD modelleket felépítő parciális differenciálegyenletek megoldására többféle módszer használható. A véges elem módszer (Finite Element Method - FEM) használata során vagy teljesen elimináljuk az időbeli változásokat a differenciálegyenletekből (stacioner eset), vagy közönséges differenciálegyenletekké alakítjuk, amik aztán megoldhatóak általános módszerekkel. A véges differencia módszer (Finite Difference Method - FDM) esetében differencia egyenletekkel közelíthető a megoldás. Míg a véges térfogat módszer (Finite Volume Method – FVM) esetében az adott csúcspont körül a divergenciát tartalmazó felületi integrálokat térfogati integrálokká alakítjuk.

Mindegyik módszernek megvannak az előnyei és hátrányai. A végeselem módszer könnyen kezel bonyolult peremeket is, és egyszerűen implementálható. Pontosabb közelítést tesz lehetővé, mint a véges differenciák módszere. A véges térfogatok módszerét elterjedten használják áramlási problémák esetében, mivel, ha nagyszámú elemről beszélünk, akkor célszerű a gyorsabb, alacsonyabb rendű közelítések alkalmazása. Kutatásaimban a COMSOL Multiphysics programot használtam, ami végeselem módszert alkalmaz a parciális differenciálegyenletek megoldására.

2.3 Cellás modellezés

A cellás modellezés területén az alap cellák és a közöttük lévő kapcsolatok alkotják a rendszer modelljét. A modell definiálása során így kiemelt fontosságú a cellás struktúra, valamint a paraméterek meghatározása. A struktúra identifikálása történhet heurisztikus megfontolások alapján, melynek során például tökéletesen kevert üstök kaszkádjával írunk le egy csőszerű berendezést. Emellett mérésen

alapuló módszerek esetén lehetséges automatikus struktúraidentifikáló módszerek fejlesztése, amelyek a kézi módszereknél pontosabban képesek leírni a valós rendszert.

A cellás modellezés területén alapszintű modellek használhatóak egy struktúra leírására. Alapesetben négy alap cellát kell definiálnunk:

- Tökéletesen kevert üst reaktor (TKE): rendelkezik egy meghatározott térfogattal, reakciók játszódhatnak le benne, algebrai és differenciálegyenletekkel írható le. A hidrodinamikai viszonyok homogének, a cella egy bemenettel, illetve kimenettel rendelkezik.
- Ideális csőreaktor (CSŐ): rendelkezik egy meghatározott térfogattal, reakciók játszódhatnak le benne, algebrai és differenciálegyenletekkel írható le. Csőreaktor esetében dugószerű áramlás alakul ki. Az ideális csőreaktorokat üstreaktorok kaszkádjaként is lehet modellezni, ezt a megközelítést használom fel a csőreaktorok modellezésénél. Használhatóak valós cső modellek is, azonban ebben az esetben egy térben elosztott modellt építenénk be a többi cella térben koncentrált paraméterű modellje közé, ami numerikus stabilitási problémákhoz vezethet, ezért alkalmaztuk ebben az esetben a vázolt megközelítést.
- Keverő (K): nincs térfogata és a kilépő áram tulajdonságai a belépő áramokból számíthatóak algebrai egyenletek felhasználásával. Egy kimenete van, és legalább két bemenete (biner keverővel számoltam).
- Elosztó (E): nincs térfogata, és a kilépő áramok tulajdonságai a belépő áramból határozhatóak meg algebrai egyenletek felhasználásával. Egy bemenete van és legalább két kimenete (biner elosztóval számoltam).

Az egyes cellák modelljei egyszerűen definiálhatók, ahogy az alábbi egyenletek is mutatják. Az elosztó modelljét (biner elosztó) a 2.5-2.7 egyenletek szemléltetik. F a térfogatáramra, c a koncentrációra α pedig az elosztási arányra utal.

$$F_{out,1} = \alpha \cdot F_{in} \quad (2.5)$$

$$F_{out,2} = (1 - \alpha) \cdot F_{in} \quad (2.6)$$

$$c_{out,1} = c_{out,2} = c_{in} \quad (2.7)$$

Az keverő modelljét (biner keverő) a következő egyenletek szemléltetik (Eq. 2.8-2.9). F a térfogatáramra, c a koncentrációra utal.

$$F_{out} = F_{in,1} + F_{in,2} \quad (2.8)$$

$$c_{out} = \frac{F_{in,1} \cdot c_{in,1} + F_{in,2} \cdot c_{in,2}}{F_{in,1} + F_{in,2}} \quad (2.9)$$

A TKE modellje:

$$F_{out} = F_{in} \quad (2.10)$$

$$\frac{dc}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (c_a - c_{a,in}) \quad (2.11)$$

A TKE modelljében szerepel még a térfogat is (V). A CSŐ modellje annyiban különbözik a TKE modelljétől, hogy ebben az esetben TKE kaszkádot alkalmaztunk.

A CSŐ modellje:

$$F_{out_n} = F_{in_n} \quad (2.12)$$

$$\frac{dc_n}{dt} = \frac{F_n}{V} \cdot (c_{a_n} - c_{a,in_n}) \quad (2.13)$$

$$n = 1 \dots 10$$

Az egyes TKE egységek térfogata CSŐ esetében a teljes térfogat 1/10-e

A struktúra identifikáció területén több kutatás is foglalkozik a lehetséges struktúrák meghatározásával a valós rendszeren mért tartózkodási idő méréseket felhasználva. Claudel és társai [4] negyven alapvető struktúrát használnak, hogy identifikálják valós reaktorok cellás modelljeit mérési adatok felhasználásával. Ezek előre definiált struktúrák, amelyek segítségével megtalálható az ismeretlen rendszer leírására legjobban alkalmazható modell struktúra. Az úgynevezett valószínűségi teóriát használják arra, hogy beazonosítsák melyik modell struktúra illik legjobban az adott problémára. Ezekkel a módszerekkel leírható a jelenlegi ipari problémák kilencven százaléka, azonban tíz százalék leírás nélkül marad, és a jövőben is folyamatosan várható további bonyolult hidrodinamikával rendelkező berendezések kifejlesztése, amelyek új modelleket igényelhetnek. A tartózkodási idő eloszlás alapú megközelítés nem csak vegyipari problémák megoldására alkalmazható, hanem széles körben adaptálható többek között szobaventilláció modellezésére is [18].

Létezik másik megközelítés is a cellás modellek struktúrájának kialakítására. Mérési adatok feldolgozásával a cellás modell közelíthető különböző súlyokkal ellátott bázisfüggvényekkel [19]. Ebben az esetben a paraméter identifikációs lépés négyzetes hiba, vagy egyéb hibaminimalizáló eljárásokon alapulhat. Nagy hátránya a módszernek, hogy nem határozható meg pontos cellákkal leírt struktúra [20].

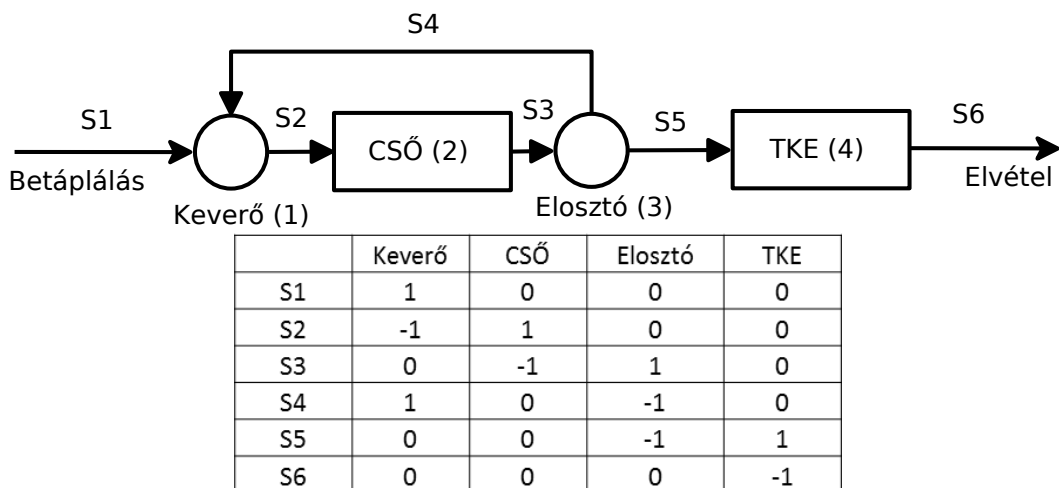
Az egyszerűbb modelleket használó módszerek mellett, előnyös lehet például átviteli függvények alkalmazása. Ezekben az esetekben elsőrendű holtidős átviteli függvényekkel kezelve a rendszereket leírhatóak változatos soros és párhuzamos struktúrák is. Az egyes elemek megfelelő összegzésével a teljes struktúrát leíró átviteli függvényt kapunk. Ez a megközelítés természetesen használható folytonos és diszkrét tartományban is [21] [22]. Hátrányuk az átviteli függvényt alkalmazó módszereknek, hogy mivel csak az összegzett átviteli függvénnyel számolunk, ebben az esetben sem tudunk következtetni a cellás struktúrára.

Mindemellett a CFD megközelítés is alkalmazható, hogy identifikáljuk a megfelelő paramétereket a cellás modellhez [23]. Ez a megközelítés hasznos lehet, ha komplex reakciórendszereket modellezünk, mint például a polimerizáció, kristályosítás vagy egyéb populációs vagy momentum egyenleteket alkalmazó modellek. A CFD szimulátorból szerzett adatok felhasználhatóak a cellás modellben, ahol aztán kisebb számításigénnyel lesznek számíthatóak a reakciók. A struktúra identifikációs probléma megoldásához használhatóak genetikus algoritmusok és evolúciós stratégiák felhasználásával is [24].

Az alap cellák felhasználásával számos struktúra megépíthető. A cellák maximális számától függően véges számú kombináció hozható létre az összes lehetséges kombinációt feltételezve. Ezeket a kombinációkat feldolgozva számos eredményt kapunk, amik kiindulási adatként tudnak szolgálni a struktúra identifikációhoz.

A cellák között kapcsolatokat legegyszerűbben illeszkedési mátrixszal írhatjuk le. Az illeszkedési mátrix egy mátrix, ami annyi oszlopot tartalmaz, ahány cella van a modellben és annyi sort, amennyi áram van a cellák között. Az illeszkedési mátrix leírja egy hálózat struktúráját, minden kapcsolatot a cellák

között. Ha az áram nem kapcsolódik az adott cellás modellhez, akkor a mátrix adott cellájának értéke 0, ha belép az adott cellába, akkor az érték 1, ha kilép az adott cellából, akkor -1. Az illeszkedési mátrixszokat a dinamikus szimuláció végrehajtásához használjuk, így kapva adatokat a kvalitatív analízishez és a mérési adatokkal való összehasonlításához. Az 1. ábra egy lehetséges cellás struktúrát mutat az azt leíró cellás modellel, S az áramokra utal.



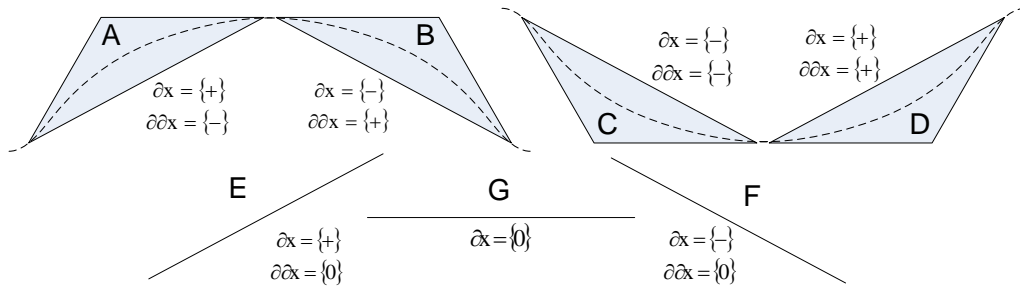
1. ábra Egy lehetséges struktúra és a hozzá tartozó cellás modell

A struktúra identifikációhoz kvalitatív megközelítést alkalmaztam. Kvalitatív adat-feldolgozási módszereket széles körben használnak a statisztikai természetük miatt, azonban minden esetben előzetes tudást igényelnek az adatok elemzése szempontjából. Sok esetben az előzetes tudás valamilyen kvalitatív vagy tendencia modell formájában jelenik meg [25].

A folyamatirányítás valamint a folyamatmonitorozó algoritmusok miatt fontos lehet a komplex rendszerek kvalitatív analízise [26]. A kvalitatív módszerek a numerikus mértékkel nem leírható adatok és az ezekből levonható következtetések segítségével érhetőek el. Használhatóak dinamikus rendszerek modellezésére irányításra és tervezési feladatok támogatására [27]. A fuzzy logikával kiegészített kvalitatív módszerek segíthetnek a kevert rendszerek, vagy csőben való áramlás leírásában is [28].

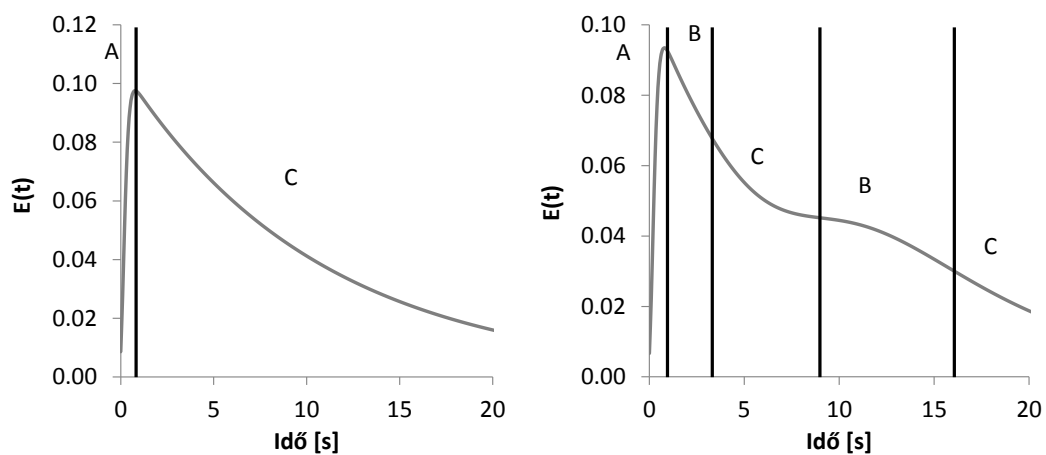
A kvalitatív módszer ebben az esetben az adatfeldolgozási módszertant takarja [29]. A javasolt algoritmus felhasználásával a kísérleti adatokat fel lehet dolgozni és beazonosítható a megfelelő struktúra. A kvalitatív analízishez hét

primitív epizódot használtam a mérési adatok első és második deriváltjait véve alapul. A deriváltak számítása utána a primitív epizódok használhatóak arra, hogy jellemezzük az állapotváltozók dinamikus változását. A hét primitív epizóddal lehetséges az első és második deriváltak összes kombinációját leírni. Forma alapján lehetnek konvex, konkáv és lineáris értékek pozitív, negatív és konstans meredekséggel. A 2. ábra az alkalmazott primitív epizódokat mutatja.



2. ábra Az alkalmazott primitív epizódok

A kutatás fő célja egy olyan algoritmus fejlesztése, amely képes arra, hogy fizikai rendszeren (kevert üst) végzett mérési adatok felhasználásával, cellás modellel írjuk le a rendszer viselkedését. A struktúra identifikációhoz kvalitatív módszereket használtam. A modell struktúra illesztés mellett mindenképpen szükséges a paraméterek meghatározása (térfogatok, elosztási arányok), amelyek számítása szintén része a kifejlesztett algoritmusnak és megvalósított programnak. A 3. ábra két példát mutat adatsor kvalitatív analizésére a beazonosított primitív epizódokkal.



3. ábra Példák az adatsorok kvalitatív elemzésére

2.4 Modell validáció

Miután a modell struktúrát identifikáltuk a következő lépés a modell megfelelőségének vizsgálata, validálása. Cellás modell esetében a validációs lépés kimerülhet abban, hogy magával a mérési adattal hasonlítjuk össze a modellel számított eredményt, ahogyan az előzőekben ismertettem, azonban ha CFD modellről van szó, akkor a validálás sokkal nehezebb feladat lehet.

A kialakuló áramlási kép modellezése eléggé nehézkes, különösen komplex geometriáknál (több keverőelem, terelőlemezek stb.). A részletes hidrodinamikai modellezés során a rendszer kritikus paraméterei és üzemeltetési korlátai meghatározhatóak. A megfelelő modellekkel a gyakorlati tudás határai kiterjeszthetők, és jobban megérthető a kevert reaktorok viselkedése és a makrokeveredési probléma. A CFD modellek kiválóan használhatóak tervezési optimalizálási vagy egyéb mérnöki feladatok támogatására [23] [30] [31]. A CFD modellek parciális differenciálegyenleteket és egyedi mesht (hálót) használnak minden egyes probléma megoldására. Az impulzus, hő és tömegmérlegek a növekvő számítási kapacitásnak köszönhetően manapság már együtt is megoldhatóak. Különböző módszerek vannak a kevert berendezések CFD modellezésére, mint például a *Multiple Reference Frame* (MRF), vagy a mozgó mesh módszer [32]. Mindegyik mozgó koordinátarendszert használ arra, hogy a mozgó elemek időbeli mozgását leírja. Mindkét esetben egy stacioner (külső) és egy forgó rész (belső) kerül leképezésre. A MRF módszer esetében a forgó rész peremén kapott megoldás fog peremfeltételként átadódni, míg a mozgó mesh módszer esetén dinamikus vizsgálat szükséges, hiszen folyamatosan számoljuk az áramlási teret. Itt a külső rész akkor alkalmazható, ha a falat, vagy terelőlemezeket szeretnénk leképezni. Kutatásaim során mozgó mesh modellt alkalmaztam.

A legnagyobb előnye a CFD megközelítésnek, hogy a berendezés három dimenzióban képezhető le és vizsgálható. A háromdimenziós vizsgálat lehetővé teszi, hogy az adott üzem működését megvizsgáljuk, és veszélyes szituációkat kerüljünk el a reaktorban található inhomogenitások feltérképezésével (például melegedési pontok felfedezése a reaktorelfutás megakadályozása érdekében) [33]. Azonban a CFD modelleknek elég nagy a számításigényük (az alkalmazott áramlási modelltől függően) és elengedhetetlen a modellek megfelelő validálása.

Két fő megközelítés létezik a CFD modellek validálására a lézeres mérésen alapuló módszerek és a keverési idő mérések. A lézeres mérésen alapuló módszerek (Lézeres Doppler Anemometria, Szemcsekép Velocimetria) drágábbak, de megbízhatóbb adatokat képesek szolgáltatni. A keverési idő mérések gyakran festék homogenizálási, vezetőképességi vagy hőmérséklet mérési módszereken alapulnak olcsóbbak, de nem annyira kifinomultak [34].

A lézeres mérésen alapuló módszerek transzparens reaktor alkalmazása mellett képesek az áramlási tér vizualizációjára. A lézeres Doppler anemometria, koherens fénynyalábot használ, hogy pásztázza a kialakuló áramlási képet. A szórt fény frekvenciájának változása alapján a sebességek több pontban mérhetőek [35]. A szemcsekép velocimetria követő szemcséket alkalmaz az áramlási tér vizualizációjára. A legnagyobb előnye a lézeres Doppler anemometriához képest, hogy lehetséges a síkban történő mérés. Az szemcsekép mérések során szemcsekonzentrációt lehet mérni és digitális kamerák használhatóak az áramlás vizualizációjához [36]. Emellett alkalmazzák a szemcsekövetés velocimetriát mellyel több szemcse pályáját rögzítik, több kamerát alkalmazó mérőrendszerben. Ezeket a módszereket széles körben alkalmazzák kevert reaktorok sebességi terének vizsgálatára, azonban ezek a módszerek sokkal költségesebbek, mint például a festékhomogenizálási kísérleten alapulóak.

A keverési időn alapuló módszerek jóval egyszerűbbek, és nem igényelnek az esetek többségében költséges berendezést. A keverési idő definíciója szerint az az idő, amely egy adott térfogatú folyadékkelem hozzáadása után annak elkeveredéséhez szükséges egy előre definiált homogenitás elérése érdekében [37]. A keverési időt sok esetben, a kémiai iparágakban úgy definiálják, mint azt az időt, ami alatt a koncentráció az adott berendezésben eléri a stacioner koncentráció 95%-át. Ezt a leállási feltételt széles körben alkalmazzák különböző kutatásokban [38] [39]. A keverési idő kalkuláció gyakran szórás, vagy egyéb statisztikai függvény alapú [40].

A legtöbb keverési idő mérési módszer, hasonlóan a lézeres módszerekhez, csak transzparens reaktorban működik a homogenitás mérésével. A legegyszerűbb módja a keverési idő mérésének a festékhomogenizálási kísérlet, mely tintát használ, hogy megszínezza a kevert reaktor tartalmát. Egy másik

megközelítés valamilyen indikátor használata, és a sav-bázis reakciók alapján a szintelenedés vizsgálata. Mindkét mérési módszer széles körben használt, mint költséghatékony alternatívája a lézeres mérésen alapuló módszereknek [41] [42]. A homogenitás változását szabad szemmel vagy videó feldolgozási technikákkal lehet követni. A fő probléma ezekben az esetekben, hogy mivel átlátszó falú (főleg üveg) reaktort használnak, ezért nem, vagy nehezen adaptálhatóak ipari szintre.

A vezetőképességi és hőmérsékletmérési módszerek mérőműszereket (szondákat) használnak, hogy mérjék a homogenitás változását a kevert reaktorban. Azonban ezek a mérőműszerek megzavarják az áramlási mezőt és csak az adott pozícióban, szolgáltatnak mérési adatokat. Ezekben az esetekben a szonda pozíciót, a szondák számát és egyéb faktorokat is számításba kell venni, ha keverési időt szeretnénk számolni. Ezekben az esetekben nincs szükség átlátszó tartályra, azonban hátrányuk, hogy a keverési idő mindenképpen függ a szonda paramétereitől (típus, anyag, pozíció) [43]. Azokban az esetekben, amikor kevés mérés elegendő, mint például reaktor kilépő hőmérsékletének mérése, ezek a módszerek széles körben használhatóak. Ezek mellett az alapvető módszerek mellett többféle keverési idő mérési módszer ismeretes a maga előnyeivel és hátrányaival. Például: radioaktív követési technika, lézer indukált fluoreszcencia technika vagy például folyadékkristályos termometria. Koncentráció, vagy tartózkodási idő (RTD) valamilyen indikátor impulzus alkalmazásával és konduktometriás módszerrel is mérhető [44].

Tartózkodási idő vizsgálatokat széles körben végeznek a különböző berendezések minősítésére. Az esetek többségében valamilyen impulzus, vagy lépcsőszerű gerjesztéssel inert indikátort juttatnak be a rendszerbe, ami a reaktor kimenetén megjelenve valamilyen módon mérhető [45]. Általában vezetőképességi méréseket szoktak alkalmazni a kilépő indikátor mérésére, viszont használhatóak optikai módszerek is. A módszer legnagyobb előnye, hogy nem igényel transzparens reaktort, viszont mivel a kilépésnél végezzük a mérést, ezért a berendezés pontos hidrodinamikai viszonyairól nem alkothatunk teljes képet. A kilépésnél detektált vezetőképességből koncentrációt (C) számolhatunk át. Ezután ezt a koncentrációfüggvényt felhasználva kiszámítható a tartózkodási

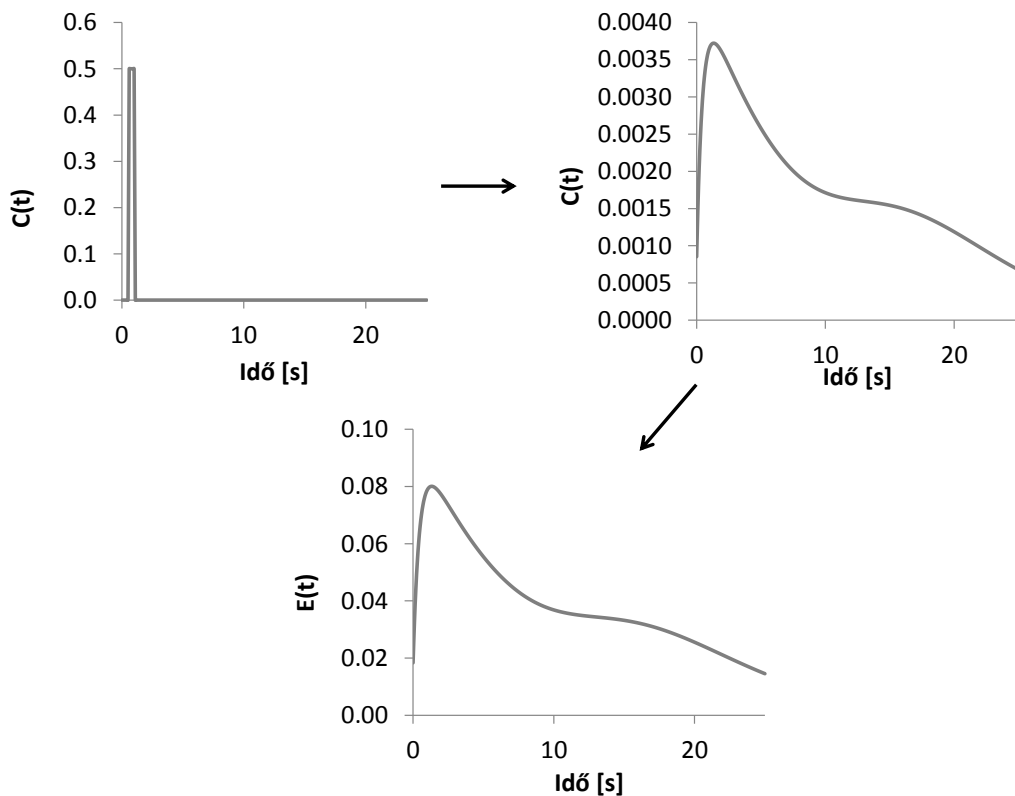
idő eloszlás sűrűség függvény ($E(t)$), ami kvantitatív módon adja meg, hogy az adott fáziselem mennyi idő tölt a reaktorban.

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} \quad (2.14)$$

A tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvény felhasználásával számíthatóvá válik az átlagos tartózkodási idő a reaktorban.

$$t_m = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot E(t) dt}{\int_0^{\infty} E(t) dt} = \int_0^{\infty} t \cdot E(t) dt \quad (2.15)$$

A 4. ábra a tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvény számítását mutatja egy impulzusfüggvény gerjesztés esetén.



4. ábra Tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvény számítása impulzus gerjesztésnél

A video feldolgozási módszerek olcsó és könnyű módja a keverési idő mérések kvantitatív értékelésének. Minden esetben az első lépés a videofelvétel felosztása egyedi képkockákra és az egyedi képkockák további vizsgálata.

Némely kutatásokban színtelenedést vizsgálnak különböző indikátorok használatával [46]. Minden képet feldolgoztak és RGB (Red-Green-Blue) színkód alapján szeparálták a pixeleket. Ha az adott érték egy bizonyos korlátok közé kerül, akkor jól kevertnek minősül a berendezés. Egy másik kutatásban egy a CFD modellezéshez hasonló hálót illesztettek rá a mérésre és egy reaktív követőt használtak. A szín értékeket rögzítették, és a relatív színváltozás alapján számították a keverési időt [47].

A keverési idő mérési feladatokban festékhomogenizálási módszert használtam, a kísérletek során a CFD szimulátorok validálására, mivel a festékhomogenizálási kísérletek olcsóak, könnyen végrehajthatóak és a színváltozás egyszerűen érzékelhető videón. A keverési idő méréseket szabad szemmel és CMOS kamerák használatával végeztem.

A klasszikus validációs technikák mellett új feltörekvő módszerek is vannak a CFD modellek validálására, mint például a szemcsekövetési módszerek. A szemcsekövetési módszerek transzparens reaktort és színezett követőszemcséket használnak, hogy sebességi értékeket nyerjenek ki. Az alapötlet ebben az esetben megegyezik a szemcsekövetés velocimetria módszerekkel. Ugyanúgy használhatóak video feldolgozási módszerek a lézeres mérésen alapuló módszerek helyett, így hozva létre jóval költséghatékonyabb mérési technikákat.

A CFD szimulációkban a szemcsekövetési módszerek különbözőek lehetnek. A COMSOL Multiphysicsben lehetőség van arra, hogy az áramlási mező sebességértékeit felhasználva számítsuk a szemcsék pályáit. Emellett lehetséges, hogy matematikai egyenletekkel leírt, úgynevezett matematikai szemcsekövetést képezzünk le. A szemcsekövetési módszerek felhasználási területei lehetnek:

- plazmatároló berendezések tervezése mágneses szemcsekövetéssel [48];
- megfigyelési rendszerek fejlesztése [49];
- alacsony vízszintű követés fluoreszcens szemcsékkel [50];
- mikrokeverő szemcsekövetés (COMSOL Multiphysics modellekkel) [51];
- keverés vizualizációja [52].

A video és képfeldolgozási technikák, mint például a Laser Sheet Image Analysis [53] segítségével még multifázisos rendszerek is vizsgálhatóak átlátszó

falú reaktorokban és a fejlődő örvények is tanulmányozhatóak [54]. A szemcsék képkockáról képkockára beazonosíthatóak és a pozícióváltozások feltárhatóak.

A szemcsekövetési mérések során műanyag szemcséket használtam, és két irányból rögzített videók segítségével, rögzítettem a mért trajektóriákat. Szimulációs esetben áramlási képen alapuló szemcsekövetési modellt alkalmaztam.

2.5 Modellek gyakorlati alkalmazásai

A mérnöki problémák megoldásában nagy segítséget nyújthatnak a különböző összetettségű matematikai modellek. A TKE modellektől, a neurális hálózat alapú és egyéb *a-posteriori* modellezési technikán át, a bonyolultabb CFD modellekig különböző modellezési megközelítésmódokat fejlesztettek ki, hogy támogassák a mérnöki munkát a technológiatervezés, fejlesztés, vagy éppen biztonságos üzemeltetés területén

A CFD modellek kiválóan alkalmasak arra, hogy segítsenek megérteni egy-egy berendezés, vagy éppen teljes technológia működését. Különböző modelleket hozhatunk létre nem csak egy, hanem két és három dimenzióban is. A modellek könnyen le tudják írni a kialakuló komplex áramlási képet olyan berendezésekben, mint például háromfázisú reaktor, hőcserélő, vagy éppen kristályosító [55] [56] [57]. Miután validáltuk a modellünket valamilyen mérés technika (pl.: lézeres, hőmérséklet, vagy keverési idő mérés) segítségével, felhasználhatjuk a kapott modellt különböző feladatok megoldására.

A hőcserélő az egyik leggyakrabban alkalmazott berendezés a vegyiparban. A hőmérsékletet mindenképpen kézben kell tartani, a normál üzemmenet eléréséhez/tartásához. A CFD módszerek alkalmazása jó választás lehet a hőcserélő tervezésre és kiválasztásra. A különböző hőcserélőtípusok összehasonlíthatóak és fizikai kísérletek nélkül is lehetőség nyílik az adott feladatra optimális hőcserélő kiválasztására [59].

Az egyik legnagyobb előnye a CFD módszereknek, hogy több különböző fizikai folyamatot tudunk leírni és megoldani, valamint stacioner és dinamikus vizsgálatok is elvégezhetőek, hogy jobban meg tudjuk érteni az adott berendezés működését. Még többfázisú reakciórendszerek és reaktorok is vizsgálhatóak az

adott berendezés részletes modelljének segítségével (például bioreaktorok) [60].

A vegyipari üzemek biztonsága az egyik legfontosabb szempont és egyre több forrást emészt fel az adott üzem komplexitásától függően. Az utóbbi kutatások azt mutatják, hogy az üzemi balesetek körülbelül 30%-a emberi vagy működési hibából fakad [61], és ezek a hibák a megfelelő operátor tréninggel és gyakorlással kiküszöbölhetőek. Az utóbbi években rengeteg modell alapú módszert dolgoztak ki az operátorok felkészítésére. A részletes CFD modellek az operátoroknak és mérnökhallgatóknak magas szintű tudást adhatnak az adott folyamatokról és berendezésekről. A teljes berendezést három dimenzióban lehet vizsgálni és az operátorok és kutatók jobb megértésre tesznek szert az adott folyamatról, különös tekintettel a hidrodinamikára, hő és komponensszállításra, akár komplex reakciók vagy geometriai kialakítások esetén is [62].

Dinamikus szimuláció alkalmazásával az adott reaktor dinamikai viselkedése vizsgálható meg és CFD modell használatával a fizikai rendszer helyettesítőjeként költséges mérések válhatnak ki. Az utóbbi évtizedekben több kutatás is foglalkozik a CFD modell alapon történő irányítási algoritmus fejlesztéssel. A részletes CFD modellek használhatóak identifikációra, és irányítórendszer-tervezés támogatására [63]. Emellett zajszűrő (Disturbance rejection) algoritmusok is beépíthetőek kétdimenziós modellekbe irányítási feladatok ellátására [64]. A CFD modellek használhatóak *apriori* modelleként, az adatokat adatbázisokba gyűjthetjük, hogy majd a későbbiekben használjuk modellezési és irányítási feladatokban [65] [66].

A vizsgált laboratóriumi hőcserélő többféle anyagot tartalmaz, és számos transzport jelenség játszódik le, így több fizikai folyamatot kell leképezni a megfelelő pontosságú CFD modell eléréséhez. A modellépítési lépések után a modellt validáltuk a fizikai rendszeren végzett kísérletekkel. Az így kialakított megfelelő modell működését egy adaptív szabályozási példán demonstráljuk.

A másik alkalmazási példa, amit az 6.2 fejezetben szemléltetünk egy oldó reaktor hibrid CFD-cellás modelljének megalkotása és vizsgálata. A probléma aktualitását az adja, hogy a számítógépek folyamatos fejlődésének következtében évről évre jelentős mennyiségű elektronikai hulladék keletkezik. Ezek a hulladékok nagy mennyiségű fémeket tartalmaznak, amelyek újrahasznosítva

felhasználhatóak további gyártásban [67] [68].

Az alkalmazott hulladék különböző fémeket tartalmaz pl. Au, Ag, Pt, Cu, Zn, melyek kinyerése főként úgy történik, hogy az adott fémeket redox reakcióban oldatba visszük, kioldjuk a hulladékból. Szelektív oldás ebben az esetben nem igazán lehetséges, mivel a hatékony oldószerek többsége minden fémet oldatba visz. Azonban a megfelelő oldószer kiválasztása segítséget nyújthat a folyamat optimalizálásában, mivel így gyorsabban és jobb kihozattal hajthatóak végre reakciólépések. Tradicionálisan a fémek kinyerésére többféle oldószer, és komplexképző használható, mint például [69]:

- H_2SO_4
- $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$
- $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ $\text{NH}_4\text{-H}_2\text{O}_2$
- FeCl_3
- CuCl_2
- CN- sók (Au).

Természetesen a komplexképzéses reakcióknál is elmondható, hogy ezek egy időben lejátszódnak az összes fém esetén, legfeljebb az elektromos potenciáltól függ a sorrend. A beoldási fázisban oldatba vitt ionokat ezek után elektrokémiai módszerrel le lehet választani. Ehhez általában valamilyen elektrokémiai reaktort használnak, jellemzően például forgóelektrodot [70] [71].

A kioldási fázisban a megfelelő oldószer koncentráció mellett kiemelkedő fontosságú a megfelelő fázisérintkeztetés. A megfelelő fázisérintkeztetést laboratóriumi körülmények között egyszerűen meg lehet valósítani például mágneses keverő használatával, azonban nagyobb léptékekben ezeknek az eszközöknek a használata nem kivitelezhető. Ebben az esetben valamilyen keverőelemre van szükség, ami elősegíti az oldószer keveredését. Emellett friss oldószer betáplálással is lehet gyorsítani a folyamatot, valamint eltolni az egyensúlyt, ezért is célszerű ezekben az esetekben a folyamatos üzemű reaktorok használata. Ebben a feladatban egy előre kialakított reaktortesttel dolgoztunk, és a fő feladat a berendezés kinetikai és hidrodinamikai modelljének leképezése volt.

A hidrodinamikai modell megalkotásához CFD modellt implementáltam. A geometria itt valamivel komplexebb, mint az eddig megismert rendszerek

esetén, azonban a forgástengely változása (vízszintes), és a „keverőelem” nagyobb fokú komplexitása csak kismértékben bonyolítja a modellezési folyamatot. Emellett több kutatás is bizonyítja, hogy CFD modellezési eszközök használhatóak elektrokémiai, valamint kémiai folyamatok modellezésére különböző reaktorkialakítások esetében [72] [73] [74].

A hidrodinamika leképezése után egy cellás modell paramétereinek meghatározásához használjuk fel a CFD modellből származtatott átlagolt sebességértékeket. Az ilyenfajta hibrid CFD-cellás modelleket egyre szélesebb körben használják modellezési, tervezési és egyéb mérnöki feladatok támogatására. Legnagyobb előnyük abban rejlik, hogy kihasználják a CFD modellek azon előnyét, hogy részletes impulzusmérleg számolható velük, viszont az esetek többségében nem számítanak CFD modellben komponensmérleget. Ilyenkor egy cellás modell megfelelő lehet akár polimerizációs reakciók leképezésére is, mely reakciók megoldása CFD keretek között bonyolult és számításigényes lenne [23].

Az átmenetet a CFD és cellás modellek között a cellás elosztási arányok meghatározása jelenti. Ez történhet többféle mérőszámmal, a turbulens modell különböző paramétereinek (diffúzivitás, energia disszipáció), vagy egyszerűbb esetben a sebességvektorok adott peremen vett átlagértékeinek felhasználásával [75]. Mivel esetünkben nem turbulens modellt használtam, ezért a sebességvektorok értékeiből származtatom a paramétereket.

A cellás modellezésnél a paraméterek mellett a struktúra meghatározása is kritikus. Ez történhet struktúra identifikációval, zónázással (automatikus cellaazonosítás) CFD alapon [14], valamint heurisztikus módszerekkel. A cellás modell struktúra meghatározásnál heurisztikus módszereket használtam. Emellett az úgynevezett multiblokk modellek esetében használt megközelítés is előnyös lehet a CFD modellből cellás modellbe történő adatátvitel során [76] [77]. A multiblokk elnevezést elsősorban a kristályosítás modellezésénél használják nagyszámú cellát tartalmazó cellás modellként fogható fel [78]. A főbb jellemzői ezeknek a modelleknek, hogy nagyszámú cellát tartalmaznak. Amennyiben CFD modellből származtatják a cellás modell bizonyos paramétereit, akkor a cellák definiálásánál a CFD modellből kapott áramvonalak, áramlási viszonyok

dominálnak. Emellett kiemelt szerepet kap a 2D-3D adatátvitel, melynek segítségével egy adott feladat megoldására többféle, különböző bonyolultságú modell előnyei is kiaknázhatóak [79] [80].

Az elektronikai hulladékok (pl.: számítógép alaplapon, telefon panelek) minden esetben többféle komponensből épülnek fel, és változatos összetétellel bírnak [81] [82] [83]. Ez az egyes elemek sajátosságaitól, valamint az egyes reagensekkel szembeni viselkedésüktől függően számos különböző reakciót és viselkedést eredményez. Több kutatás koncentrálna a rézoldás kinetikájának, valamint folyamatának meghatározására, mivel a réz az az összetevő, ami a legnagyobb arányban jelenik meg a hulladékban. Magát a rézoldást legtöbb esetben valamilyen sav, cianid vagy egyéb só használatával végzik el [84] [85] [86]. Emellett a pH függése is szerepet kap az egyes ionok stabilitásában, valamint például a vas-klorid esetében is [87]. A kinetika azonosítását ebben az esetben a réz oldási reakciókra végeztem el, a továbbiakban következhet a többi hulladékalkotó fém oldási reakció leképezése, majd teljes részletességű modell létrehozása. Egy elektronikai hulladék újrahasznosítási technológia mindig több lépésből kell, hogy felépüljön az alapanyag előkészítéstől az oldási lépésen át, valamilyen elektrokémiai kinyerési lépésig [88] [89]. A részletes modell megalkotása majd validálása után a modellt üzemeltetési paraméterek vizsgálata során alkalmazom.

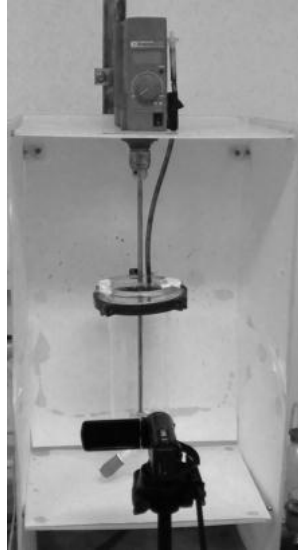
3. Módszerek és eszközök

Ebben a fejezetben az általam alkalmazott mérőberendezéseket, valamint alkalmazott szoftvereket fogom részletesen ismertetni.

3.1 CFD modell validáció során létrehozott mérőrendszer

A CFD modell validációhoz létrehozott mérőrendszer több részből áll. Az alkalmazott módszereknek megfelelően először a kialakított reaktorrendszert, valamint a keverési idő mérési kísérletekhez szükséges módszereket és eszközöket mutatom be, ezután pedig a szemcsekövetési kísérletekhez szükséges változtatásokat.

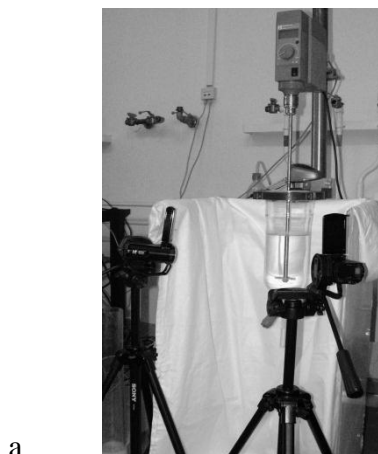
A keverési idő mérési kísérletekhez egyliteres laboratóriumi üvegreaktort használtam. Az alkalmazott reaktor egyfalú, a videó felvételek készítésének megkönnyítése céljából. A keverési idő mérések végrehajtásához fém keverőszárat használtam különböző műanyag keverőelemekkel szerelve, valamint egy számítógéppel vezérelt IKA keverőmotort. A keverési idő mérések festék homogenizálási kísérletek alapján semleges vörös indikátor felhasználásával történtek. Két különböző módszerrel vizsgáltam a keverési időt, szabad szemmel, mikor a felhasználó határozza meg az előírt homogenitás elérését, valamint egy videó feldolgozáson alapuló módszerrel. CX-115E Sony kamera használatával készítettem felvételeket különböző fordulatszámok (100-500 1/min) és keverőelemek (horgony, turbina, penge) mellett. Az 5. ábra a mérőrendszer kialakítását mutatja.



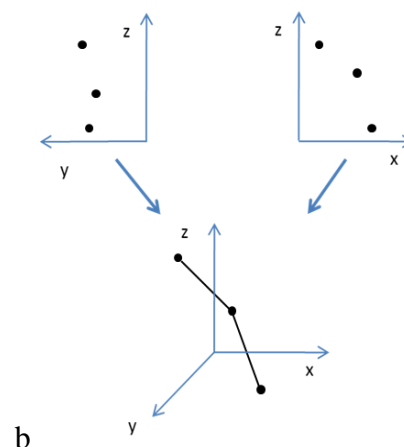
5. ábra A keverési idő mérésére szolgáló mérőrendszer

Először a szabad szemmel végzett vizsgálatokat végeztem el, hogy ezek alapján meg tudjam határozni a video felvételek szükséges hosszát.

A szemcsekövetési kísérletek során egy fontos módosítást végeztem a mérőrendszeren. Két egymáshoz 90° -ban beállított kamerát használtam a video felvételek készítésénél, valamint egy fekete műanyag szemcsét, aminek a pozícióját rögzítettem képkockáról képkockára. Természetesen más színű szemcse is használható, a lényeg az, hogy elkülönüljön a színe a háttértől. A 6. ábra a szemcsekövetési kísérleteknél használt kísérleti elrendezést, valamint a háromdimenziós szemcsetrajektória meghatározására szolgáló elvet mutatja.



a



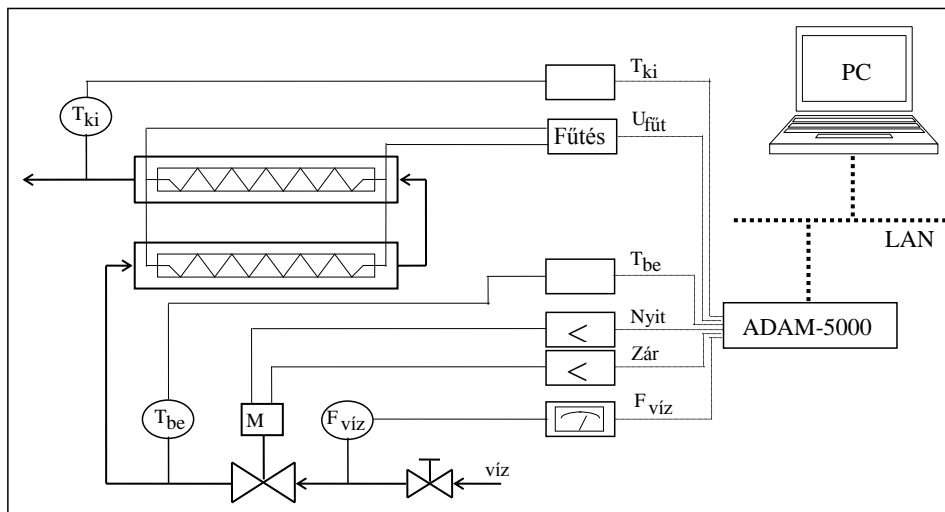
b

6. ábra (a) A kísérleti berendezés (üvegreaktor, két kamera különböző szögből, IKA keverő). (b) A háromdimenziós szemcsetrajektória meghatározásának elve

Mivel a két kamera pontosan 90° -ot zár be egymással azonos függőleges pozícióban, és a fókusz távolságuk megegyezik, ezért nincs szükség további koordinátatranszformációra. Elég az egyik videó felvételt x - z , míg a másik felvételt y - z kétdimenziós koordináta-rendszerként kezelni (mivel az x - y koordináta-rendszerben is 90° -ot zárnak be a koordináták). Ezután már csak egy időbeli szinkronizálásra lesz szükség, ami végrehajtható időbélyeggel, vagy az ebben az esetben alkalmazott z koordináta szerinti összecúsztatással. Ebben a lépésben megvizsgálom a két oldalról rögzített videó z koordinátáit, majd a z koordináta változása alapján szinkronizálom.

3.2 A CFD modell alapú adaptációnál alkalmazott hőcserélő berendezés

A laboratóriumi elektromos hőcserélő egy elektromosan fűtött berendezés két kántál fűtőszállal. A 7. ábra a laboratóriumi hőcserélő rendszer felépítését mutatja.



7. ábra A hőcserélő berendezés sematikus ábrája

A fűtőszálak teljesítménye 1 kW. A fűtőszálak kerámia szigetelőréteggel és egy acélborítással vannak ellátva. A két fűtőtest egy-egy 550 mm hosszú csőben van elhelyezve. A hőmérséklet két Pt100-as hőmérővel mérhető a belépő, valamint a kilépő oldalon. A 1. táblázat a hőcserélő adatait mutatja.

1. táblázat A hőcserélő adatai

Meghatározás	Érték	Mértékegység
A fűtőszál sűrűsége	7150	kg/m ³
A fűtőszál elektromos vezetése	1180	S/m
A szigetelőréteg sűrűsége	3100	kg/m ³
A szigetelő réteg elektromos vezetése	10 ⁻¹⁰	S/m
A szigetelőréteg hővezetése	2,4	W/(mK)
A szigetelőréteg hőkapacitása	1047	J/(kgK)
A hőcserélő hossza	550	mm
A hőcserélő átmérője	25	mm
A szigetelőréteg vastagsága	2,75	mm
A vízoldal vastagsága	5	mm

A helyi szabályozás és az adatgyűjtés egy ADAM5000 modullal történik ADAMView programcsomag segítségével. Két szabályozott jellemző van: a folyadékáram mennyisége, amit egy szelep segítségével lehet szabályozni, valamint a hőmérséklet, amit a fűtőtéljesítménnyel lehet beállítani. A berendezést nemrég egy vezeték nélküli áramlásmérő és szabályozó modul beépítésével korszerűsítettük, így vezeték nélküli kapcsolat segítségével szabályozható a térfogatáram. A laboratóriumi vizsgálatok egy folyamatirányító számítógép segítségével történtek, aminek grafikus felhasználó felületét ADAMView programban hoztam létre. A belépő hőmérsékletet folyamatosan figyelemmel követtem, és a modellezéshez, illetve validáláshoz szükséges adatokat a fűtőtéljesítmény változtatásával nyertem.

3.3 Az oldó reaktor kísérletek során végzett kísérletekhez használt berendezések

Az oldó reaktor modellezése fejezetben található mérések elvégzése során két különböző berendezést alkalmaztam. Az egyik berendezés egy jól kevert szakaszos üzemű, köpennyel ellátott hűthető fűthető berendezés. A fűtés köpenyen keresztül történik. A berendezés mágneses keverővel ellátott, és 100 ml reagenst tartalmazó oldattal végeztük a kísérleteket. A forgódobos oldó reaktor egy laboratóriumi léptékű berendezés. Reagensbe merülő perforált dobot

tartalmaz. A dobon belül helyezük el az elektronikai hulladékot, amivel a furatokon átáramló reagens érintkezik. A kísérletek során többféle fordulatszámot vizsgáltunk. A furatátmérő és pozíció rögzített volt (2 mm, 4 lyuk egy sorban). A 8. ábra a modellezett forgódobos oldó reaktor képét mutatja.



8. ábra A modellezett forgódobos oldó reaktor

Atomabszorpciós módszerrel (AAS) vizsgáltam a minták Cu tartalmát, amihez meghatározott időközönként 1 ml mintát vettem az oldatból. Az emiatt fellépő térfogatcsökkenéssel mind a modellekben, mind a kiértékelés során számoltam.

3.4 Az alkalmazott szoftverek

A COMSOL Multiphysics CFD szimulációs szoftver parciális differenciálegyenletekkel leírható tudományos és mérnöki problémák, modellezésére, illetve megoldására alkalmas eszköz. A szoftver alkalmas különböző típusú fizikai folyamatok egyidejű leírására, míg a beépített fizikai folyamatokat leíró modellek felhasználásával csak a lényeges fizikai mennyiségek (anyag tulajdonságok, korlátok, források, áramok) megadására van szükség az összetett problémák megoldásához. A program a szükséges parciális differenciálegyenleteket a probléma leírására alkalmas egyenletrendszerbe szervezi. A programban két módon képezhetjük le a vizsgálat tárgyát:

- grafikus kezelőfelületen;
- MATLAB programnyelven.

A programban megtalálható, különböző tudományterületek törvényein alapuló parciális differenciálegyenletek a tudományos és mérnöki életben előforduló jelenségek széles spektrumának modellezését és ezen keresztül szimulációs vizsgálatát teszik lehetővé.

A programban lehetőség van egy adott tulajdonságot, állapotváltozót különböző geometriákban leíró parciális differenciálegyenletek összekapcsolására és ezen egyenletrendszer megoldására. Az objektum viselkedését leíró parciális differenciálegyenlet rendszer megoldási időtartamának csökkentése végett lehetőség van az összetett geometria részekre bontására, majd az így előálló egyszerűbb struktúrák különböző felbontású hálókval való felosztására. Az alapprogramban található nagyszámú modell hat modulban lett összegyűjtve, hogy megkönnyítse a vizsgált rendszer modellalkotásának menetét. Ezen modulok az alábbiak:

- vegyészmérnöki modul (Chemical Engineering Module);
- földtudomány modul (Earth Science Module);
- elektromágnesesség modul (Electromagnetics Module);
- hőtranszport modul (Heat Transfer Module)
- mikro elektromechanikus rendszerek modul (MEMS Module);
- strukturális mechanika modul (Structural Mechanics Module).

illetve ezeken kívül van egy ún. CAD import modul (CAD Import Module), ahol számos különböző CAD programban készített geometria importálása végezhető el. A dimenzió kiválasztása után, ki kell választanunk a megfelelő modellegyenleteket, amely egyenleteket a megoldani kívánt probléma, valamint a probléma bonyolultsága definiálja. Ezután következik a geometria kialakítása, megrajzolása vagy meglévő geometria esetén importálása. Majd a modellegyenletekben szereplő paraméterek, kezdeti feltételek megadása. Ezután peremfeltételeket kell rögzíteni, például betáplálás, elvétel, fal stb. Majd a megoldáshoz szükséges finomságú háló kialakítása következik, amelynek segítségével megoldjuk a problémát. Végül a különböző értékelő módszerek segítségével értékelhetjük az eredményeinket.

Emellett a MATLAB/Simulink programcsomagot alkalmaztam, ami egy általános célú szimulációs eszköz. Mátrix adatstruktúrákon alapul, és felhasználóbarát felületet biztosít programozási feladatok elvégzésére. Az alap felületen túl kiterjedt kiegészítővel rendelkezik, amelyek széles körben használhatóak. A cellás modell struktúra identifikációs algoritmus implementálásához használtam a programot. A validációs vizsgálatokban a MATLAB mellett a Simulink-et, valamint a Video Processing Blockset, valamint Image Processing Toolbox kiegészítőket alkalmaztam. A MATLAB alkalmazásával végeztem az 6. fejezet fekete doboz modell identifikációs, valamint cellás modellezési és optimalizációs vizsgálatait is.

4. Cellás modell struktúra identifikációs algoritmus

A cellás modelleket széles körben használják olyan esetekben, amikor a berendezéseket leíró egyszerűbb matematikai modellek (tökéletesen kevert üst, ideális cső) már nem elegendők a megfelelő modell létrehozásához. Különösen igaz ez a vegyipari berendezésekre, ahol az esetek többségében nem ideális és komplex áramlástanai viszonyokkal kell számolnunk. A cellás modellt pontosan leírhatjuk a cellák, valamint a közöttük lévő kapcsolatok (struktúra), és paraméterek (térfogatok elosztási arányok) meghatározásával.

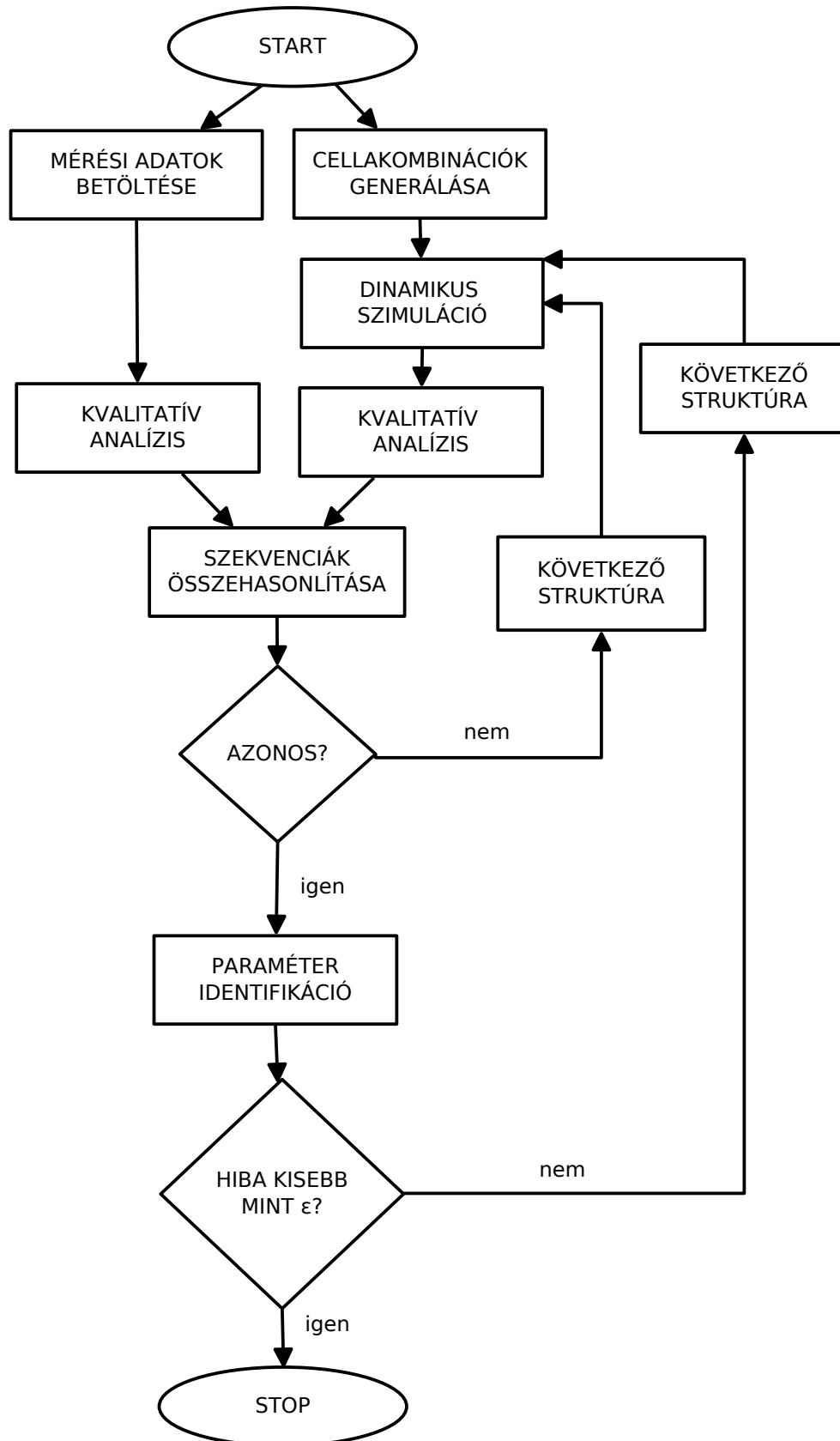
A cellás modell struktúra kiválasztása az egyik legnehezebb feladat a cellás modellezés területén. Általában heurisztikus módszerekkel szokták definiálni ezeket a modell struktúrákat. Ebben a fejezetben egy új, automatikus cellás struktúra identifikációs algoritmust mutatok be. Mérés adatok (pl. tartózkodási idő) felhasználásával kvalitatív módszereket alapul véve a kifejlesztett algoritmus képes valós rendszerekhez megfelelő pontosságú cellás modell struktúra identifikálására. A kapcsolatok leképezéséhez illeszkedési mátrixot alkalmaztam az algoritmus egyes lépései pedig struktúra és paraméter identifikációs lépéseket is tartalmaznak.

4.1 Algoritmusfejlesztés

Ebben a fejezetben az alkalmazott módszereket és a fejlesztett algoritmust mutatom be. Az algoritmus négy fő részre osztható:

- a cellakombinációk létrehozása és szűrése;
- cellás struktúrák definiálása illeszkedési mátrixszokkal;
- dinamikus szimuláció és a mért valamint szimulációs adatok kvalitatív analízise;
- paraméter identifikáció és további szűrés.

A 9. ábra az algoritmus folyamatábrán való szemléltetését mutatja.



9. ábra A fejlesztett algoritmus folyamatábrája

4.1.1 Cellakombinációk létrehozása és szűrése

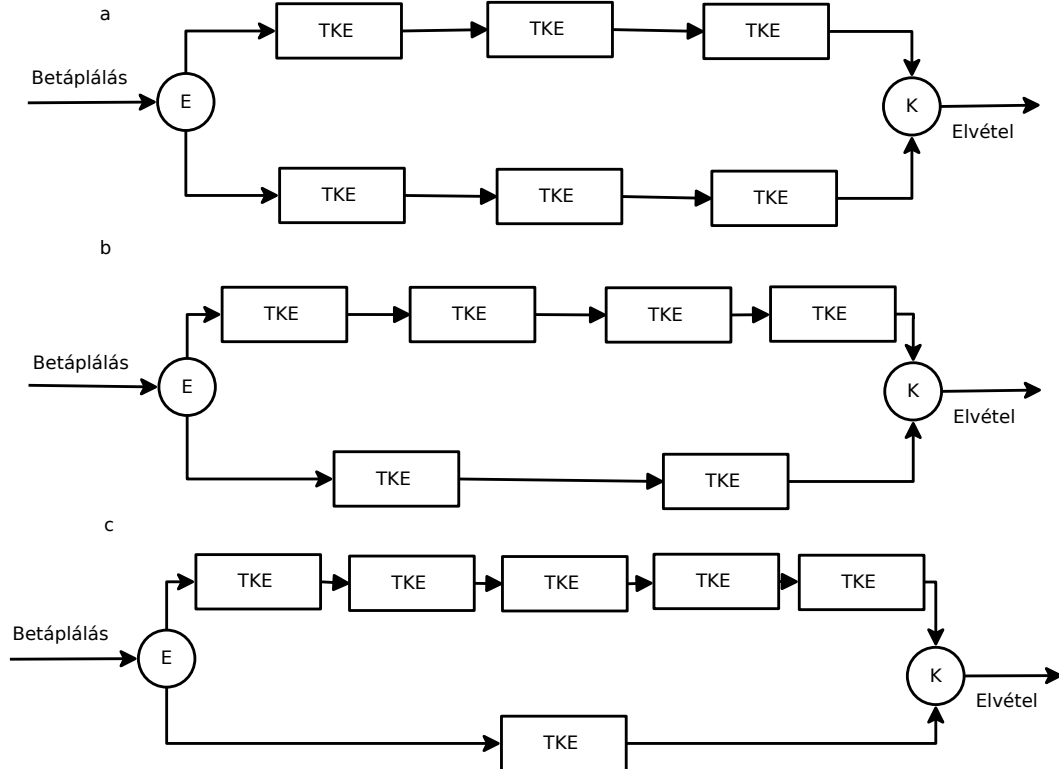
A cellakombinációkat a következő módszerrel hoztam létre. Az első lépésben egy azonosító számot rendeltem minden cellatípushoz. 1 az elosztó, 2 a keverő, 3 a TKE és 4 a CSŐ. A második lépésben az összes lehetséges cellakombinációt létrehoztam (pl. 1332 – elosztó-TKE-TKE-keverő). A cellakombináció alatt ebben az esetben azt a számsort értem, ami kifejezi a cellák egymás utáni sorrendjét. Az elosztót bináris elosztóként, a keverőt bináris keverőként definiáltam). Ezek a kombinációk minden matematikailag lehetséges struktúrát tartalmaznak, amik közül néhány (pl. csak keverőt tartalmazó) nem bír gyakorlati jelentőséggel, ezért célszerű ezeket elvetni. A nem megfelelő cellakombinációk elvetéséhez szűrési feltételeket állítottam fel, amik a következők:

- Minden struktúrának legalább egy TKE vagy CSŐ cellát kell tartalmaznia, hogy kémiai reakció játszódhasson le, és elvégezhetőek legyenek hidrodinamikai mérések.
- Az elosztók és keverők számának meg kell egyeznie (biner elosztó és keverő esetén), mivel az elosztó egy belépő és két kilépő árammal rendelkezik, a keverő két belépő és egy kilépő árammal, és a megfelelő áramok egymással kapcsolódnak.
- A CSŐ cellát, tíz egymást követő TKE cella kaszkádjaként modelleztem, mivel ez eléggé elterjedt megközelítés a reaktormodellezés területén.
- Az olyan struktúrák, amelyek egy bizonyos előre definiált aránynál (0,75) nagyobb mennyiségben tartalmaznak elosztó vagy keverő cellát, szűrtem, hogy elkerüljem a nem megfelelő kombinációkat. A nem megfelelő kombináció pl. az egy TKE két elosztó-két keverő kombináció.
- A direkt recirkulációval rendelkező TKE cellákat tartalmazó struktúrákat szűrtem, mivel a recirkuláció nem változtatja meg a kvalitatív viselkedést TKE cella esetén.

A szűrés után kevesebb struktúrával kell számolni, ezáltal csökkenni fog a szimulációs idő, és az erőforrásigény a dinamikus szimulációs lépésben.

4.1.2 Cellás struktúrák definiálása illeszkedési mátrixszokkal

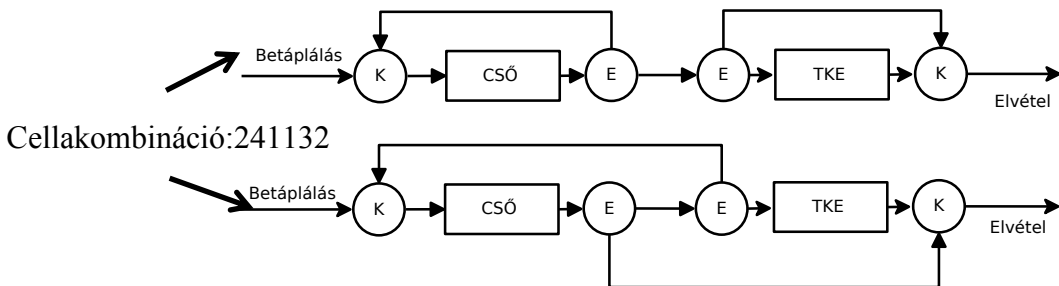
A következő lépés az algoritmusban a cellák közötti kapcsolatok definiálása illeszkedési mátrixszok segítségével. Az egy keverő-elosztó kapcsolatot tartalmazó struktúrákat egyszerűbb modellezni, és az ilyen soros struktúráknál egy illeszkedési mátrix tartozik egy kombinációhoz. Több keverő-elosztó esetén, valamint párhuzamos struktúráknál az egyes cellák közötti kapcsolatok egy kombinációhoz több illeszkedési mátrixszot is definiálhatnak. Lehetséges definiálni párhuzamos struktúrákat, ha egy reaktor (TKE, CSŐ) cellánál több van a keverő és az elosztó között. Ebben az esetben a következő eljárást folytattam. Első lépésben meghatározom az egyes párhuzamos áramokban lévő reaktorok számát. Definíció szerint mindkét ágon legalább egy reaktornak kell lennie. Ezután létrehozom a reaktorok összes lehetséges kombinációját az egyes párhuzamos áramokon. Ebben a fejlesztési lépésben keresztáramokat nem definiáltam, de az algoritmus modulárisan bővíthető keresztáramok alkalmazásával. A 10. ábra a lehetséges struktúrákat mutatja két párhuzamosan kapcsolt TKE cella esetében, két párhuzamos ágban.



10. ábra Lehetséges párhuzamos struktúrák egy cellakombinációhoz. (E-elosztó, K-Keverő, and TKE-reaktor)

Az elosztási arány alapján a 10. ábra (b) és (c) esetei az ellentetteikké alakíthatóak, ezért az azonos esetek közül csak egyet mutatok be. Minél nagyobb a párhuzamos áramokon lévő reaktorok száma annál több lehetséges struktúra adódik. Mivel minden egyes kombinációhoz egyedi illeszkedési mátrix tartozik, ezért minél több az illeszkedési mátrix, annál nagyobb lesz a helyigény, így az illeszkedési mátrixszok tárolása is probléma lehet, amit cella adatstruktúrában történő rögzítéssel oldottam meg. (MATLAB cell ({})) adatstruktúra lehetővé teszi mátrixszok adatpontjain további tömbök tárolását, beágyazását). A számítás további eredményeit is ilyen adatstruktúrában tároltam.

Két vagy több cirkulációs kör esetén (elosztó-keverő kapcsolat) az illeszkedési mátrixszok leírása bonyolulttá válik. Például egy hat cellát tartalmazó struktúránál, ami a következő sorrendben tartalmazza a cellákat (E-CSŐ-K-K-TKE-E) két különböző kapcsolódás van, az első elosztó az első keverőhöz csatlakozik, vagy éppen a másodikhoz. A fejlesztés e lépésénél egy új szűrési feltételt vezettem be. Az egymás mellett lévő összekötött keverő-elosztó kapcsolatokat szűröm, hiszen ebben az esetben a cirkulációs kör egy árammá egyszerűsödik. A szűrési lépés után, amikor már tároltam az illeszkedési mátrixszokat megkezdődhet a dinamikus szimuláció. Az 11. ábra egy példát mutat egy cellakombinációra több lehetséges struktúrával (241132 – Keverő-CSŐ-Elosztó – Elosztó – TKE – Keverő).



11. ábra Többféle struktúra egy cellakombinációhoz. (1: Elosztó, 2: Keverő, 3: TKE, 4: CSŐ)

4.1.3 Dinamikus szimuláció és a mért valamint a szimulációs adatok kvalitatív analízise

A dinamikus szimuláció végrehajtásához szükség van a modell paraméterekre, amik cellás modell esetben elosztási arányok és térfogatok. A különböző kvalitatív szekvenciák előállításához szükséges modell paraméterekhez

bizonyos határok között definiált véletlen szám kombinációk létrehozásával jutottam. Az első paraméterek a keverők és elosztók közötti elosztási arányok. A további paraméterek az egyes reaktor cellák térfogat arányait jelentik. Az elosztási arányoknak 0-nál nagyobbak és 1-nél kisebbnek kell lennie minden esetben, valamint a térfogatarányok összege is 1-et kell, hogy adjon. Az előre definiált cellák modelljei alapján leképeztem a különböző cellákat. Az egyes cellák modelljeit a 2.5-2.13 egyenletek tartalmazzák.

A kvalitatív módszert arra használtam ebben az esetben, hogy szűrjem az eddigi adatmennyiséget, és bemeneti adatokat generáljak a paraméter identifikációhoz. A mért és szimulációs adatokat kvalitatív analízissel elemeztem, hogy meghatározzam az egyéni szekvenciákat minden időfüggő adatsorra. Miután minden szekvenciát meghatároztam, a szimulációval kapott szekvenciákat a mérési adatok alapján kapott szekvenciához hasonlítottam. Ha egy adott szimulációs szekvencia megfelel a mértnek egy bizonyos hibahatáron belül, akkor a struktúrát elfogadom a további paraméter identifikációra. Ebben a lépésben a teljes paraméter térben megvizsgáltam a struktúrák kvalitatív viselkedését. Ez alapján hasonlítottam a mért szekvenciához a szimulációs szekvenciákat. A szekvenciákon alapuló összehasonlítás segítségével megállapíthatóak a paraméter identifikációs lépésben a keresési változókra vonatkozó korlátok. A szimulációs és mért adatsorokat a teljes időtartományban hasonlítottam össze. A hibahatár lehet felhasználó által definiált, de mindenképpen valamilyen kapcsolatba kell lennie a mért adatsor nagyságrendjével. Minden egyes időpillanatban rögzítettem a mért és az adott szimulációs szekvenciát, és mintavételezési lépésként hasonlítottam össze a mért és szimulációs eredményeket. Ebben az esetben a szimulációs szekvenciának 75%-ban kell megegyeznie a mért adatsorral. Ellenkező esetben nem megfelelőnek minősítem. A 75%-os hibahatárt az algoritmus tesztelése során nyert tapasztalatok alapján vezettem be. Természetesen a hibahatár növelése csökkenti a további lépések számítási idejét, mivel kevesebb struktúrával kell tovább számolni. Mindezek mellett a mérési adatokat is megszűrtem, a mérési zajt kiküszöbölése céljából.

4.1.4 Paraméter identifikáció és a lehetséges megoldások további szűrése

A paraméter identifikációs lépésben egy korlátos szélsőérték keresési feladatot kell megoldani. A korlátokat az előző lépésben elfogadott paraméter tartomány alsó és felső korlátai jelentik. Ebben a lépésben az a cél, hogy pontosítsam a paramétereket, valamint hibanégyzet számítás alapján egyértelműen eldönthető legyen, hogy melyik struktúra írja le legjobban az adott valós rendszert.

4.2 Cellás modell struktúra identifikációra kifejlesztett algoritmussal elért eredmények

Az algoritmusfejlesztéshez hasonlóan az eredmények részt is négy külön fejezetre osztottam. Az eredmények részben három különböző teszt példát szeretnék áttekinteni. Esettanulmányból származó tartózkodási idő eloszlás függvény analízise, zajjal terhelt tartózkodási idő eloszlás függvény analízise, valamint egy komplex rendszer viselkedésének közelítése kevésbé komplex cellás modellel. Minden egyes példát előre definiált cellás struktúrák dinamikus szimulációjával nyertem.

Az első példa teszt adatsora tizenegy sorba kapcsolt tökéletesen kevert reaktort tartalmaz, amik modelljei megegyeznek az előzőekben tárgyalt reaktorok felépítésével. A teszt adatsor ebben az esetben szimuláción alapuló adatsor volt. Az azonosított paramétereket összevettem a teszt paraméterekkel, hogy kiderüljön az algoritmus képes-e elvégezni a feladatát, vagyis beazonosítani a kívánt struktúrát. Itt a fő feladat az algoritmus megfelelő működésének tesztelése volt.

A második esetben két egymás után kapcsolt TKE tartózkodási idő eloszlás függvényére szuperponáltam zajt, hogy teszteljem, hogy az algoritmus alapján készített program képes-e zajjal terhelt adatsorok kezelésére.

A harmadik teszt adatsor célja, hogy olyan kevésbé komplex struktúrákat találjon, amelyek képesek megfelelő pontossággal leírni egy komplex modellt. Minden esetben folytonos adatsorokat használtam, azonban abban az esetben, ha nem folytonos a mérési vagy teszt adatsor egy spline interpoláció építhető be a rendszerbe, amellyel folytonossá tehető az adott feldolgozandó idősor.

4.2.1 Cellakombinációk létrehozása

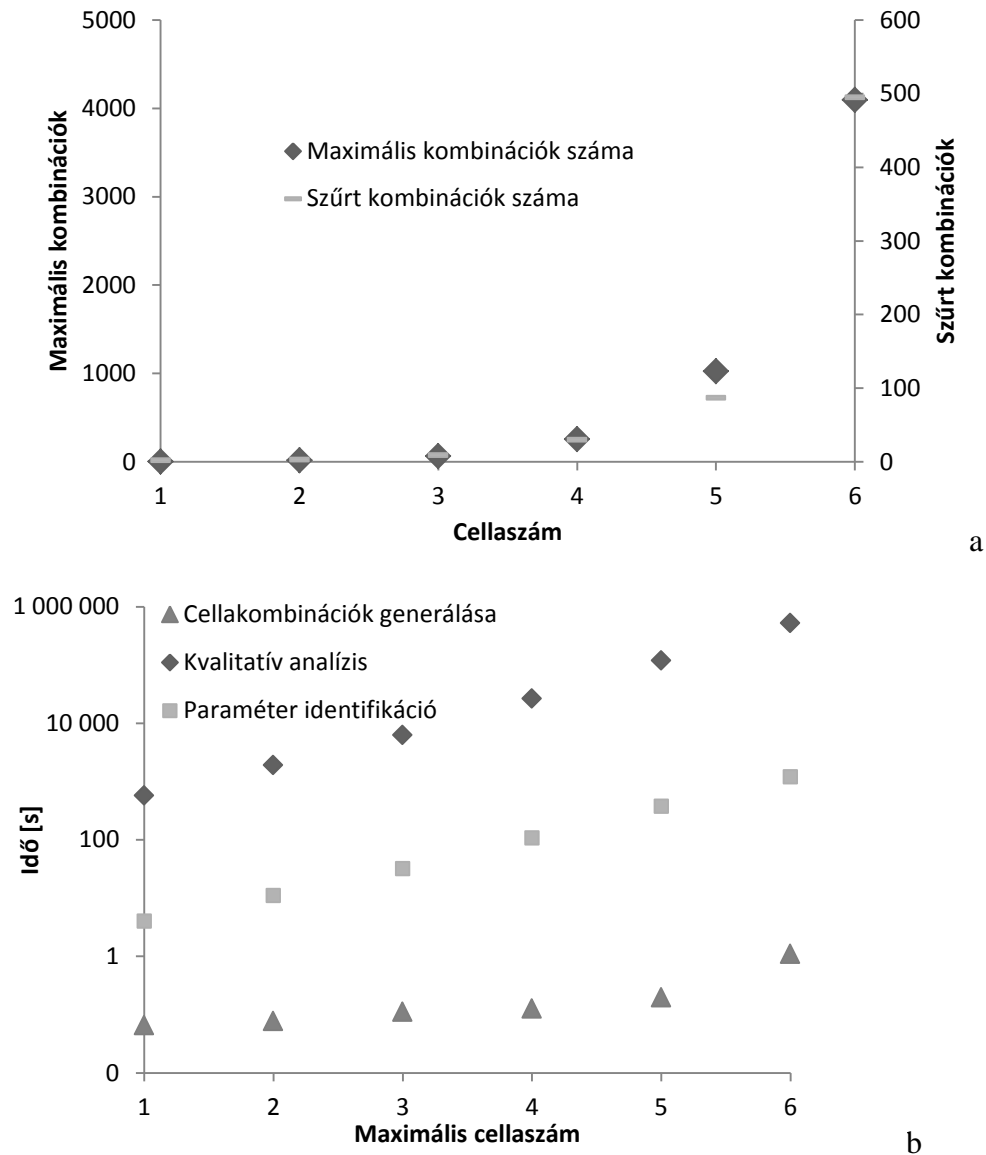
A cellakombinációk száma eléggé nagy és erősen függ a maximális cellaszámtól. Például hat cella esetén az össze kombinációk száma 5460, és exponenciálisan növekszik a cellák számának növelésével. Az összes cellakombinációk száma a minimális (1) az előre megállapított maximális cellaszámig a következő képlettel számolható:

$$N_{\max} = \sum_{n=1}^{n=n_{\max}} 4^n. \quad (4.1)$$

A tesztelési fázisban hatnak választottam a maximális cellaszámot, azonban ez a szám lehet nagyobb is a tanulmányozott rendszer komplexitásától függően. Mivel ilyen nagyszámú kombinációval dolgozom kiemelt fontosságú a kombinációk szűrése. Ebben a lépésben csak a kombinációkat hoztam létre, a kapcsolatokat nem, azokat majd egy későbbi lépésben definiálom.

A 12. ábra a szűrés előtti kombinációk számát, valamint az egyes lépésekhez szükséges időt mutatja. Általánosságban az mondható el, hogy minél nagyobb a maximális cellaszám, annál nagyobb számú struktúrával kell számolni, és annál nagyobb lesz a számítási idő. Ahogy a 12. ábra is mutatja, a szűrési lépés fontos a számítási idő csökkentése, valamint a nem megfelelő kombinációk alkalmazásának elkerülése céljából. A kombináció létrehozási lépés az egyik leggyorsabb lépése az algoritmusnak (6 cella esetében 1,1 s).

Minden lépés után a kapott eredményeket tárolom, majd a következő lépésben betöltve használom fel. A cellakombinációk létrehozása azonos minden egyes lépésben. Ahogy a 12. (b) ábra is mutatja a legidőigényesebb lépés a kvalitatív analízis, mivel ebben az esetben már csak az adatok létrehozása is több szimulációs lépést igényel. A számítógép, amin a vizsgálatokat futtattam Intel Xeon W3530, 16 GB memóriával.



12. ábra (a) Szűrt és összes kombinációk száma (b) időtáblázat az egyes lépések időigénye a maximális cellaszám függvényében

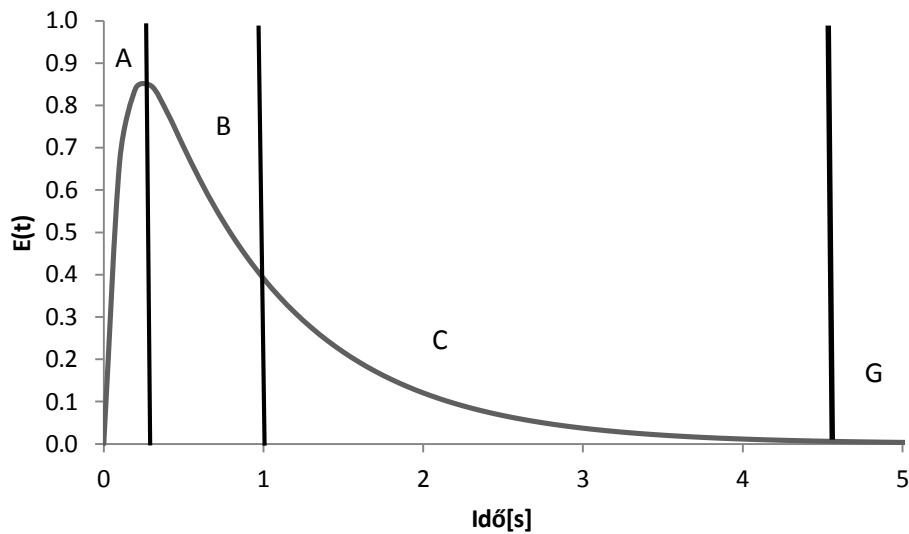
4.2.2 Cellás struktúrák definiálása illeszkedési mátrixszok segítségével

Az illeszkedési mátrixszok létrehozásánál három különböző esetet vettem figyelembe. Egy, illetve több cirkulációs árammal, valamint párhuzamos struktúrával rendelkező kombinációkat hoztam létre. A párhuzamos struktúrák esetén az összes lehetséges kombinációt figyelembe vettem az egyes áramokban lévő reaktorok esetében. Némely esetben egy cella kombináció több struktúrát is jelöl, ezekben az esetekben több illeszkedési mátrix definiálása szükséges. Emellett fontos a keverő-elosztó kapcsolatok definiálása is. Miután az illeszkedési

mátrixszokat definiáltam a következő lépés a dinamikus szimuláció a kvalitatív analízishez történő szimulációs adatok meghatározásához.

4.2.3 Dinamikus szimulációs, a mért és szimulációs adatok kvalitatív analízise

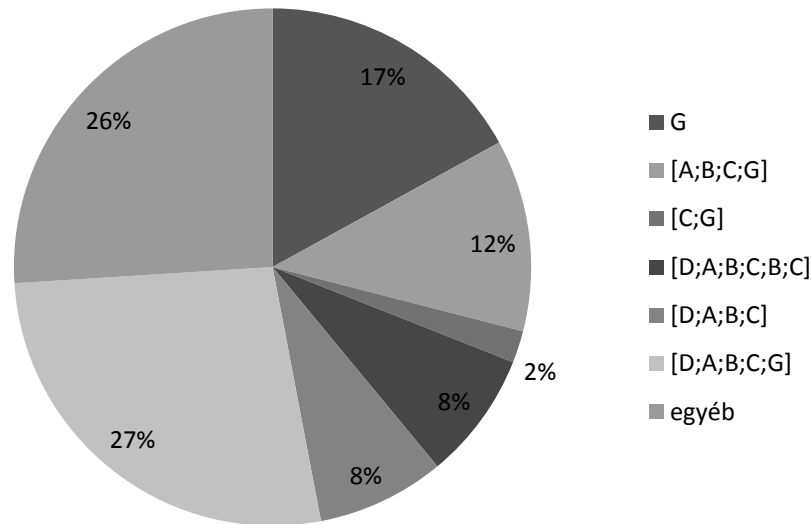
A 13. ábra, az 1. ábra szerinti struktúra esetén mutatja a dinamikus szimuláció eredményét az impulzus bemenetre adott válaszfüggvényt. $E(t)$ a tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvényre utal, amit a komponens koncentrációjából lehet számolni.



13. ábra A dinamikus szimuláció eredménye

A dinamikus szimuláció után a következő lépés a teszt és a szimulációs adatok összehasonlítása kvalitatív analízissel. Ebben a lépésben lehetséges, hogy egy mért szekvenciára több szimulációval nyert szekvencia adódik eredménynek. Struktúránként 1000 db véletlen paraméter kombinációt hoztam létre a több kvalitatív szekvencia meghatározása céljából. Ilyen mennyiségű véletlen szám csak alacsony számú paraméter esetén használható. Magasabb paraméterszám esetén más módszerekre lehet szükség a számítási idő csökkentése céljából. A 14. ábra az elfogadott epizódokat mutatja, és a lehetséges szekvenciákról készített statisztikát a 1. ábrán szemléltetett struktúra esetében. A statisztika az adott egyedi szekvencia százalékos arányát mutatja. A betűk az 2. ábrán szemléltetett epizódokra utalnak, és a diagramot az óramutató járásával egyezően kell értelmezni. A kvalitatív analízis után szűrtem az egyes szekvenciákat, ha a

szimulációs szekvencia 75 %-ban egyezett a mért szekvenciával, akkor további feldolgozásra került, ha nem, akkor kizártam az adott struktúrán belül azt a paraméterekre vonatkozó tartományt a lehetséges modell struktúrákat tartalmazó halmazból.

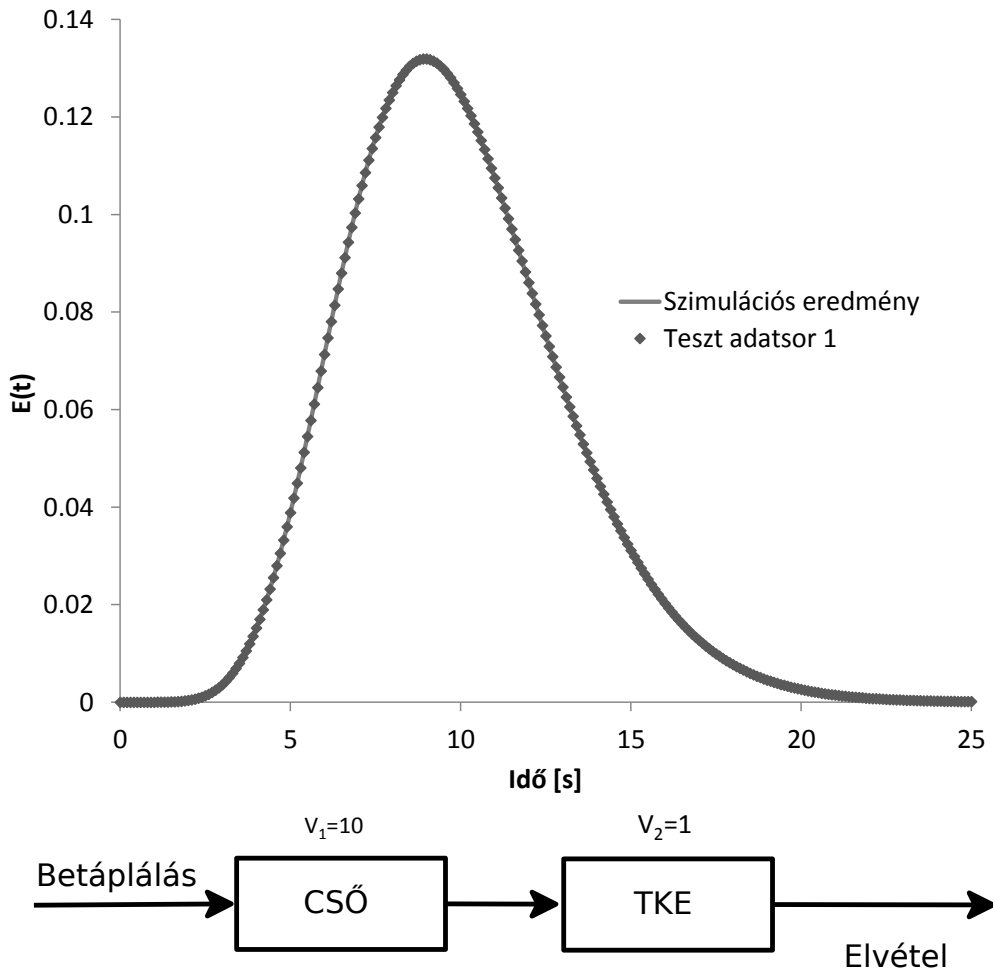


14. ábra Lehetséges szekvenciák megoszlása

4.2.4 Paraméter identifikáció és a lehetséges megoldások további szűrése

A kvalitatív analízis által szolgáltatott lépéseket egy paraméter identifikációs lépés követte. Paraméter identifikációhoz egy korlátos szélsőérték kereső, Sequential Quadratic Programming (SQP) algoritmust használtam [90]. A paraméterek alsó és felső korlátait a véletlen számos vizsgálat (4.2.3 fejezet) eredményeként kapott értékek állítottam be. A fő feladat ebben az esetben azon optimális paraméter kombinációk meghatározása, amivel a valós rendszer is megfelelő pontossággal leírhatóvá válik.

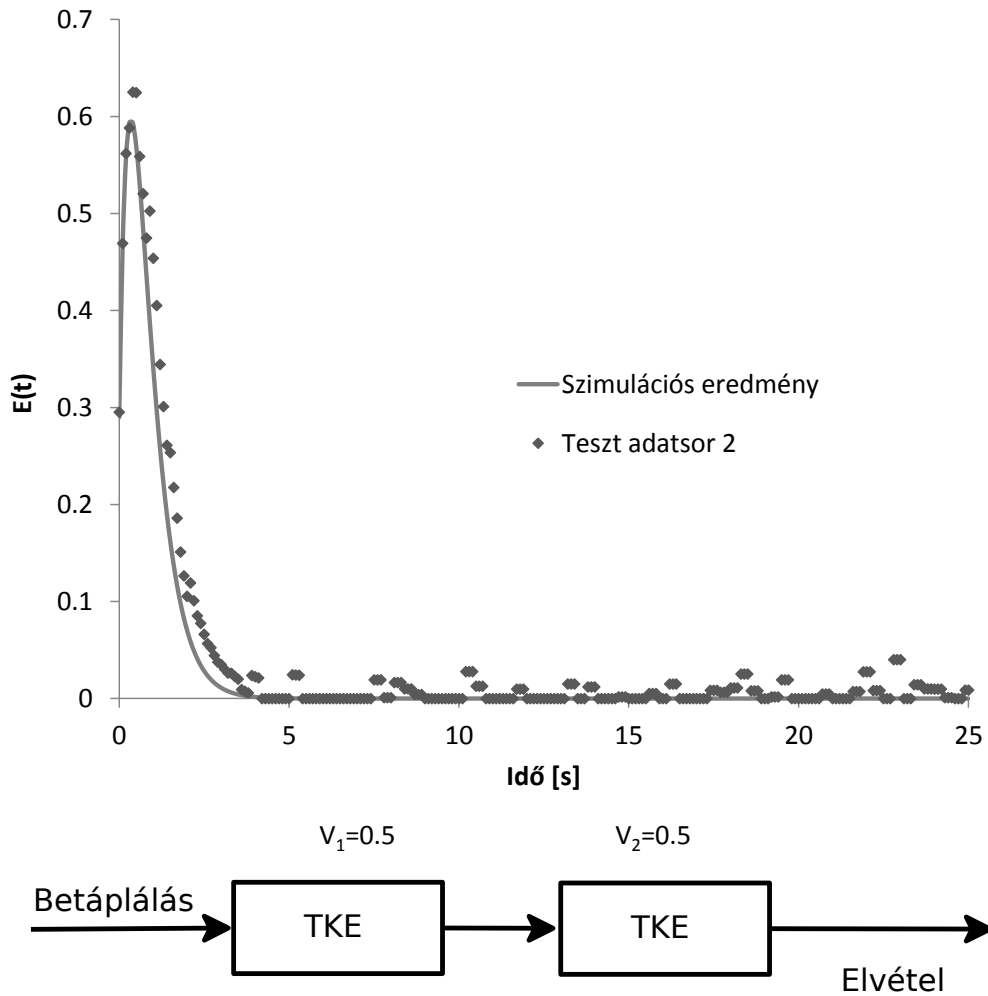
A következő rész az előzőekben említett példákra és a kapott eredményekre koncentrálok. Az első esetben 11 egymást követő TKE-t vizsgáltam. Több lehetőség vizsgálata után a négyzetes hibaösszeg minimalizálással egy megoldást találtam megfelelőnek. A 15. ábra mutatja a teszt és a szimulációs adatsor összehasonlítását. A teljes reaktor térfogat ebben az esetben 11 m^3 volt.



15. ábra Az első teszt adatsor kiértékelése, szimulációs eredmény és az elfogadott cellás struktúra

Gyakorlatilag ez a struktúra egy TKE cellát tartalmaz sorba kötve egy CSŐ cellával, amit tíz TKE kaszkádjaként képeztem le. Az illeszkedés tökéletes, tehát elértem a célt, miszerint egy egyszerű struktúra felhasználásával igazoltam az algoritmus működését.

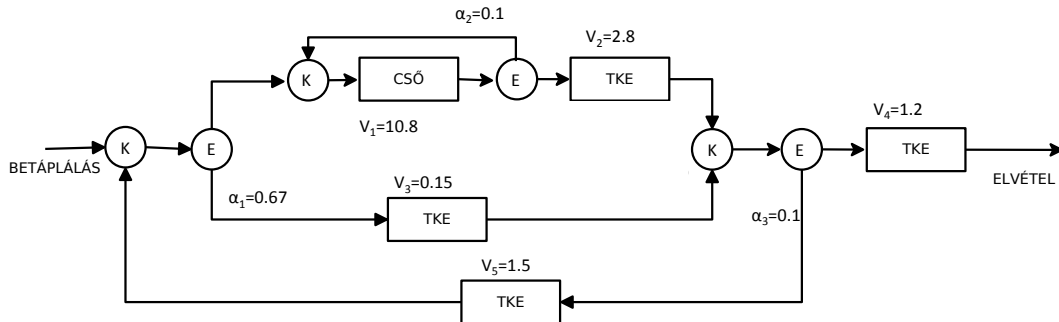
Egy valós ipari reaktorok esetén nem igazán jellemző az olyan sima válaszfüggvény, mint az első példában, mivel a valós rendszereket minden esetben zaj terheli. Vizsgálni kell, hogy a mérési zaj mennyire befolyásolja a berendezés működését, ezért a második esetben egy további egyszerű struktúrát – két sorba kötött azonos térfogatú TKE cellát – alkalmaztam mintarendszerként, és zajt szuperponáltam a mérési adatsorra. A 16. ábra mutatja az elért eredményt. Ebben az esetben 1 m^3 volt a teljes térfogat.



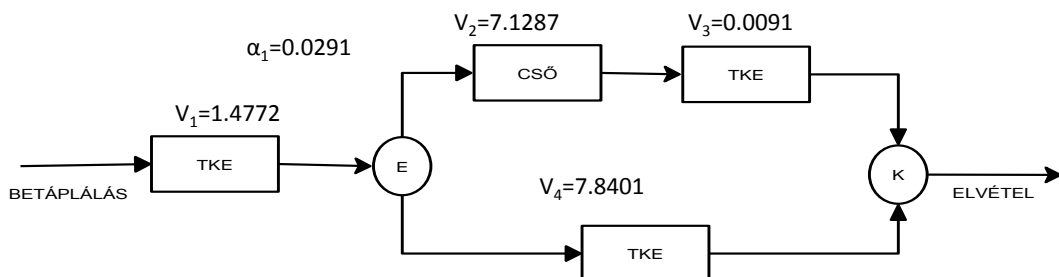
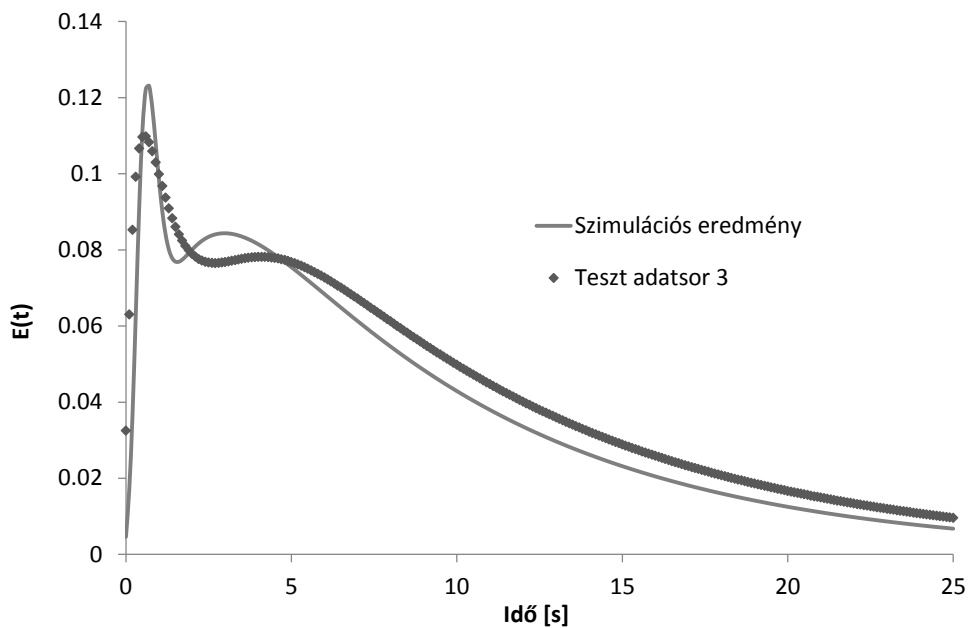
16. ábra A második teszt adatsor kiértékelése, szimulációs eredmény és az elfogadott cellás struktúra

A vártnak megfelelően az identifikált cellás struktúra két sorba kötött TKE cellát tartalmaz. Ahogy 16. ábra mutatja az algoritmus képes zajjal terhelt mérési adatsor kezelésére, és megfelelő pontosságú cellás struktúrák identifikálására. A zajszűrési lépés a kvalitatív analízis lépésen belül történik. Itt számítom a kvalitatív epizódok létrehozásához a deriváltakat. Ha két szomszédos elem különbsége nagyobb, mint egy előírányzott érték (~ 0.03), akkor az adott értéket az előző értékkel helyettesítem, így szűrve az adatsort. A szimulációs sűrűségfüggvény eléri a nullát, de a teszt adatsor nem, azonban ez a mérési zajnak tudható be. Ebben a lépésben azt teszteltem, hogy az algoritmus képes-e valós rendszerhez hasonló, mérési zajjal terhelt rendszerek kezelésére. Az illeszkedés rosszabb, mint az előző esetben, de ez egyértelműen a mérési zajnak tudható be. A struktúra identifikációra az adott mértékű mérési zaj nem volt hatással.

A harmadik teszt adatsor egy komplex struktúrán alapul, négy TKE cellát egy CSŐ cellát, valamint több cirkulációs kört magába foglalva (összesen 11 cella). A 17. ábra azt a struktúrát mutatja (az elosztási arányokkal és a térfogatokkal), amit kiindulásnak használtam, a 18. ábra pedig a kapott struktúrát és az eredményeket. Az össztérfogat ebben az esetben $16,45 \text{ m}^3$ volt.



17. ábra A harmadik példánál használt teszt struktúra



18. ábra Komplex struktúra kiértékelése

A 18. ábra mutatja, hogy az eredményként kapott struktúra egy CSŐ valamint két TKE cellát tartalmaz párhuzamosan kötve, valamint még egy TKE

cellát. A kvalitatív viselkedés hasonló, azonban megfigyelhető, hogy a modell paraméterek eltérőek. Ennek a vizsgálatnak a fontossága abban rejlik, hogy megfelelő pontossággal le tudtam írni kevesebb cella felhasználásával egy bonyolultabb struktúrát, tehát nincs szükség arra, hogy minden határon túl növeljem a maximális cellaszámot. Nincs szükség arra, hogy nagyszámú cellát alkalmazzak, mivel kevesebb cellával is leírhatóak lesznek a rendszerek (ebben a példában 11 helyett 6 cella). Mivel az intenzitások és a görbék alakja hasonló jellegű, ezért az identifikált struktúra sok esetben megfelelő leírást biztosít. Azonban, mivel a hiba a mért és számított között elég nagy, így a későbbiekben szükség lehet az optimalizáló algoritmus változtatására.

4.3 Következtetések

A cellás modellezés területén folytatott kutatásom legfontosabb eredménye, hogy olyan struktúra identifikációs algoritmust dolgoztam ki és teszteltem, amely jól alkalmazható a cellás modell struktúra identifikációra tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvények felhasználásával. A javasolt algoritmust alkalmazva a mérnökök különböző cellás modelleket dolgozhatnak ki és használhatnak sikerrel a részletes modellezés tervezés és on-line szabályozó hangolás területén is. Az algoritmus alkalmas fizikai rendszerek tanulmányozására és az általános felépítés miatt alkalmas új rendszerek leírására már a tervezési fázisban is (pl.: méretnövelés). Meg kell említenem azt, hogy az algoritmus felépítéséből fakadóan magasabb cellaszámnál kombinatorikus robbanás léphet fel, ami nagyban megnöveli a számítási időt.

Az algoritmus idősorokat kezel és megfelelő pontosságú cellás modellt illeszt az adott adatsorra. Első lépése egy általános cellakombinációs módszeren alapul, így az identifikált struktúrák bonyolultsága csak a felhasználtól függ. Több szűrési lépést építettem bele a rendszerbe, és így a nem megfelelő kombinációk, majd később struktúrák eltávolításra kerültek. A továbbiakban a cellás struktúrát használva dinamikus szimulációval generáltam a tartózkodási idő sűrűség függvényeket a kvalitatív analízishez. A görbék minőségi analízise alapján kiválasztom a megfelelő struktúrákat. Emellett egy véletlen szám generáláson alapuló módszerrel további szűrést végeztem, kiküszöbölve egy adott

struktúra a rossz paraméterek miatti esetleges elvesztésének eshetőségét. A véletlen paraméterekkel végzett vizsgálat után teljes paraméter identifikációval érhető el a végleges eredmény.

A javasolt algoritmust három különböző teszt adatsoron vizsgáltam. Az első teszt során bebizonyosodott, hogy a program működőképes, és megtalálja a megfelelő struktúrát. A második esetben zajjal terhelt struktúra vizsgálatával igazoltam, hogy a javasolt algoritmus képes zajjal terhelt ipari mérések kezelésére is. Végezetül egy komplex struktúrára illeszttem elfogadható pontosságú cellás modell, ezzel bebizonyítva, hogy egy bizonyos maximum felett nem szükséges tovább növelni a cellák maximális számát, hiszen jó közelítéssel bonyolult cellás struktúrák is visszavezethetők egyszerűbbekre.

5. Videó feldolgozáson alapuló CFD modell validálás

A CFD módszerek széles körben használhatóak, különböző mérnöki feladatok (tervezés, fejlesztés) támogatására. Legnagyobb előnyük, hogy akár három dimenzióban is tanulmányozhatóak az egyes berendezések, valamint többféle fizikai folyamat is nyomon követhető, így részletes modellek is felépíthetőek. Azonban minden esetben szükséges a modell validálása, hogy megbizonyosodhassunk arról, hogy a modell megfelelően írja le a valóságot.

A CFD modellek validálására számos megoldás született. A legpontosabbak a lézeres mérésen alapuló módszerek, amelyek koherens lézernyalábot alkalmaznak a sebességi tér síkban vagy pontban történő detektálására. Emellett elterjedtek a homogenitás változást detektáló módszerek (pl. keverési idő). Új terület a modell validálás témakörben, a videó felvétel feldolgozásán alapuló módszerek alkalmazása.

Két különböző módszert fejlesztettem CFD modellek validálására. Mindkét esetben bemutatom az egyes módszerek felépítését, a kapott eredményeket, valamint azokat a lépéseket, amik lehetővé teszik a CFD modelleket validálását.

5.1 Keverési idő alapú validációs módszerek

Az első alfejezetben a keverési idő alapú videó felvétel feldolgozás területén elért eredményeket mutatom be. Az kifejlesztett módszer festék homogenizálási kísérlet felhasználásával off-line videó feldolgozás alkalmazásával képes keverési idő számítására, így a CFD modellek validálására.

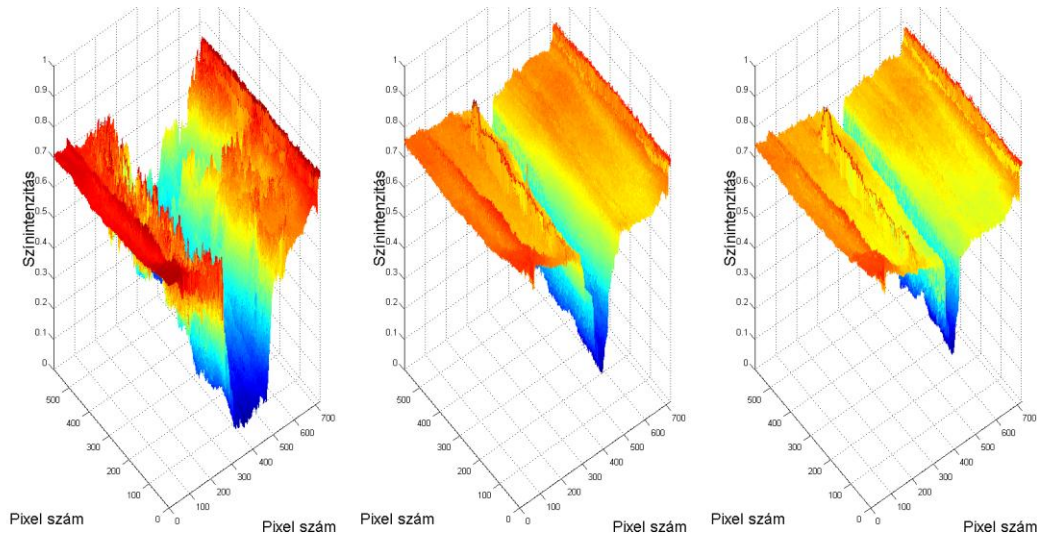
5.1.1 A javasolt algoritmus

A videó feldolgozásra szolgáló algoritmusban minden esetben a szabad szemmel végzett vizsgálatok során meghatározott hosszúságú videókat rögzítettem. A videó feldolgozás során a következő lépéseket követtem:

1. A felvétel betöltése a MATLABba a Simulink Video Processing Blockset használatával (szürkeárnyalat).
2. A felvételt egyéni képkockákra osztottam fel a kamera felbontását alapul véve (25 fps).

3. Egy háttérrel hoztam létre, ami az adott kísérletet mutató videó jól kevert képkockáinak átlagán alapul (jól kevert 50 képkocka). A háttér első képkockájának definiálása a szabad szemmel végzett kísérletek alapján történt (miután a reaktorban látható változások szabad szemmel már nem érzékelhetőek). Mivel kevert berendezések esetén nem igazán beszélhetünk igazi stacioner állapotról a keverőszár forgása miatt, ezért 50 képkockát átlagoltam, a megfelelő háttér kialakítása érdekében
4. Egy tranziens modellt használtam, hogy összehasonlítsam a színértékeket (RGB összege) minden képkockán az eltérések abszolút értékeit számítva. Minden egyes pixelt esetében képeztem az adott pixel és a háttér pixelének különbségét, és abszolút hibát számoltam. Ezután normáltam a hibaértékeket 0 és 1 közötti intervallumra, a jobb összevethetőség érdekében.
5. A keverési időt a 95%-os homogenitás értékből származtattam, ami széles körben használt különböző kutatásokban [38] [39] [91]. Eszerint, ha a háttértől való eltérés tartósan belül kerül 5%-on, akkor a rendszert jól kevertnek tekintem ($t_{kev} = t_{0.95}$).

Három párhuzamos kísérletet végeztem minden fordulatszámnál, és keverőelemnél, és a keverési időt minden esetben meghatároztam. A 19. ábra a betöltött videó különböző képkockáit mutatja (150 1/min fordulatszám, horgonykeverő). Az x és y tengely a pixelszámot mutatja, míg a z tengely az intenzitásértékeket (színértékek).



19. ábra A horgonykeverő 150 1/min fordulatszámos mérésnél tapasztalt színintenzitás értékek 2 s, 22 s és 42 s után

A legsötétebb rész mindig a keverőelemet jelzi. Ahogy az ábrán is látható, az elején zajosabb kép egyre finomabbá válik, ahogy az üstben az injektált indikátor egyre jobban homogenizálódik.

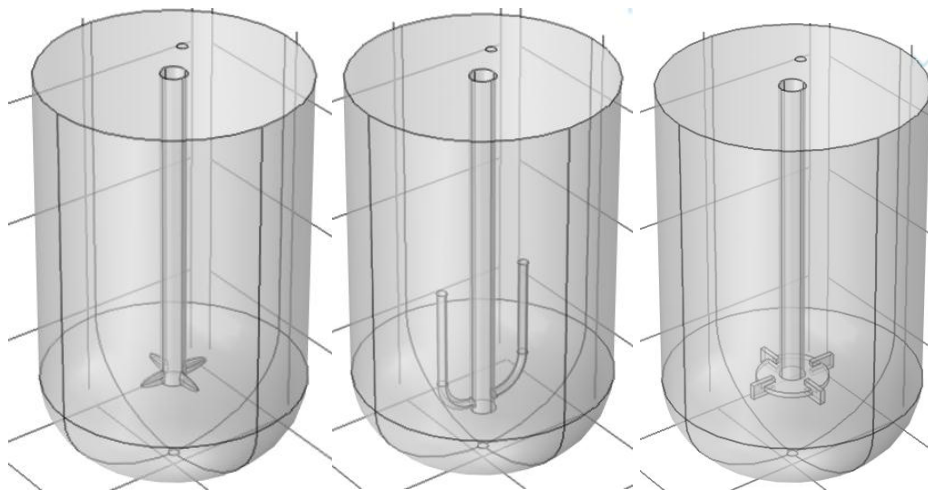
5.1.2 CFD szimuláció

A kísérleti berendezést leképeztem a COMSOL Multiphysics kereskedelmi forgalomban kapható CFD szoftverben. A berendezés modellje három dimenzióban került implementálásra, mivel kevert berendezések esetében, ha nem forgásszimmetrikus keverőelemről van szó, akkor nem lehet kevesebb térdimenzió használatával modellezni a berendezést. Első lépésben a hidrodinamikai modellt oldottam meg, hogy kiszámítsam a kialakuló áramlási képet a reaktorban. A hidrodinamikai modellen alapulva egy indikátor injektálás szimulációját végeztem el, hogy a homogenitás változásokat nyomon tudom követni a reaktorban. A hidrodinamikai modellből származó sebességértékeket felhasználva végeztem az injektálást. Kiszámítottam a keverési időt, és a kapott értékeket összehasonlítottam a szabad szemmel, valamint a videó feldolgozási módszerrel kapott eredményekkel.

A komponensmérleg esetében többféle problémába ütköztem. Az egyes szimulációk akkor adtak konvergens eredményt, ha a diffúzió dominált a konvekcióval szemben. Azokban az esetekben, amikor csökkentettem a diffúziós állandót nem megfelelő eredményt kaptam. Mindemellett nem értem el stacioner

koncentrációt, hanem folyamatos növekedést tapasztaltam a reaktorban. A diffúziós állandó változtatása befolyásolta a keverési időt, a fordulatszám változására nem volt érzékeny. A komponensmérleg konvergens megoldása valószínűleg csak a mesh további nagymértékű finomításával vált volna lehetővé, azonban erre elfogadható számítási idő mellett, a rendelkezésre álló erőforrásokkal nem volt lehetőség. A komponensmérleg megoldásánál tapasztalt hibák miatt az injektálásból származó inhomogenitást hőmérleg segítségével építettem be a rendszerbe. A hőmérleg megoldása során a diffúziós állandó és a hővezetési tényező nagyságrendi eltérése révén már konvergens megoldást kaptam az alkalmazott mesh esetén is.

A 20. ábra a modellezett geometriát szemlélteti a három különböző keverőelemmel. Mozgó mesh modellt alkalmaztam [32], azonban, mivel ebben az esetben nincs szükség terelőlemeze, elég csak a forgó részt definiálni, így a geometria egyszerűsítésével (1 térrész), csökkenhető a számítási igény. A szimulációs vizsgálatok és a kísérletek esetében is vizet használtam kevert közegként. A kevert közeg anyagjellemzőinek hőmérséklet függését nem vettem figyelembe, mivel az általam vizsgált hőmérséklettartományon a víz sűrűsége és viszkozitása nem változik jelentősen, emellett a vizsgálatoknál híg oldattal számoltam.



20. ábra Az indikátorinjektálás modellezéséhez használt modell geometria a keverési idő alapú validációs módszer esetében [m] pengekeverő, horgonykeverő és turbinakeverő esetén

Két mérleget kell leképezni az indikátorinjektálás modellezéséhez: az impulzus és a hőmérleget. Az impulzusmérleg esetében turbulens áramlási

modellt alkalmaztam. A következő egyenletek írják le a mérlegeket. Az első egyenlet a kontinuitási egyenlet, ami a tömegmegmaradást írja le.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (5.1)$$

A keverőelem forgása a szögelfordulásra felírt differenciálegyenlettel számítható (4.2).

$$\frac{d\omega}{dt} = w \quad (5.2)$$

A turbulencia modellezéséhez kétváltozós k-ε modellt és Reynolds átlagolt Navier-Stokes egyenleteket alkalmaztam. A k-ε modellek módosított Navier-Stokes egyenleteket alkalmaznak a turbulens viszkozitással számítva az áramlási mezőt. Ebben az esetben nem számoltam egyéb erőkkel. A tagok sorban a lokális megváltozást, a konvektív gyorsulást, a nyomásváltozás hatását, a viszkozitás hatását, valamint az egyéb erőket írják le.

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-\mathbf{pI} + (\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \right. \\ \left. - \frac{2}{3}(\mu + \mu_T)(\nabla \mathbf{u})\mathbf{I} - \frac{2}{3}\rho k\mathbf{I} \right] + \mathbf{F} \end{aligned} \quad (5.3)$$

A k betű a turbulens kinetikai energiára utal és a nagy örvények mozgását írja le.

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (5.4)$$

Az ε a turbulens energia disszipációra utal, és a kis örvények eltűnését írja le. A turbulens viszkozitás (μ_T) a turbulens kinetikai energiából (k) és disszipációs rátából (ε) származtatható.

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon_1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon_2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (5.5)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.6)$$

A 4.7 egyenlet a feszültségi tenzort írja le (P_k).

$$P_k = \mu_T \left[\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right] - \frac{2}{3}\rho k \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (5.7)$$

Az impulzusmérleg megoldásával a sebességi mező számítható a berendezésben. Az egyenletekben szereplő C_i tagok empirikus konstansok. A kinyert sebességi mező értékek felhasználásával számolható a hőmérleg konvektív tagja. Az általános hőmérleg az 5.8 egyenlet írja le, a hőmérséklet lokális megváltozását, a konvektív, a vezetési, forrás, valamint a viszkozitás hatását leíró és a mechanikai munkából fakadó tagot magába foglalva. Az impulzusmérlegből származó sebességértékek felhasználásával számítom a hőmérleg konvektív tagját.

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q + Q_{vh} + W_p \quad (5.8)$$

Ebben az esetben hőforrással nem számoltam. Az injektálás az 5. másodpercben történt. Pontforrásként definiáltam az injektálási pontot, és egy négyszögfüggvény bemenettel végeztem az injektálás szimulációját. Peremfeltételeket definiáltam a reaktorfalra (fal), valamint a keverőelemre (forgó fal), mivel ezeken a peremeken keresztül nem történik anyagtranszport. Turbulens áramlási modell alkalmazása esetén a fal körüli áramlást falfüggvényekkel közelíthető (4.10, 4.13). A két peremfeltétel ebben az esetben annyiban különbözik, hogy a forgó fal esetében mozgó peremet kell definiálni. Az alkalmazott peremfeltételeket leíró egyenletek:

- Fal (reaktorfal)

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (5.9)$$

$$\left[(\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} (\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{u}) I - \frac{2}{3} \rho k I \right] \cdot \mathbf{n} = -\rho \frac{u_\tau}{\delta_w^+} \mathbf{u}_{tan} \quad (5.10)$$

$$\mathbf{u}_{tan} = \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} \quad (5.11)$$

$$\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (5.12)$$

$$\varepsilon = \rho \frac{C_\mu k^2}{\kappa_v \delta_w^+ \mu} \quad (5.13)$$

- Forgó fal (keverőelem)

$$\mathbf{u}_{rel} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (5.14)$$

$$\mathbf{u}_{rel} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_w \quad (5.15)$$

$$\mathbf{u}_{rel,tang} = \mathbf{u}_{rel} - (\mathbf{u}_{rel} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} \quad (5.16)$$

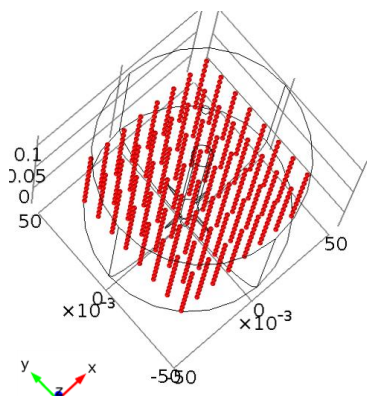
$$\mathbf{u}_w = \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) \Big|_x \quad (5.17)$$

A forgó fal esetében a fordulatszám definiálása nem kezdeti feltételként történt. A numerikus megoldó működését megkönnyítendő egy simított lépcsőfüggvény alkalmazásával növeltem a fordulatszámot 0-ról a szimulációban megadott értékre 1 s alatt. A hőmérleg esetében a fal peremfeltétel azt jelenti, hogy nincs hőátadás az adott peremen (hőszigetelés). A modellben minden peremre hőszigetelést definiáltam, mivel az injektálás pontforrásként adtam meg.

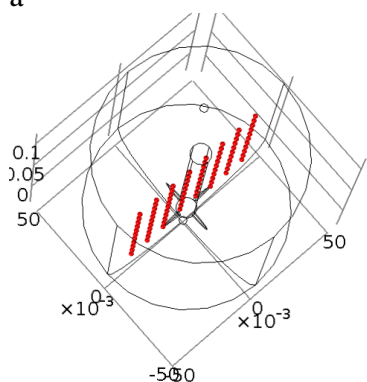
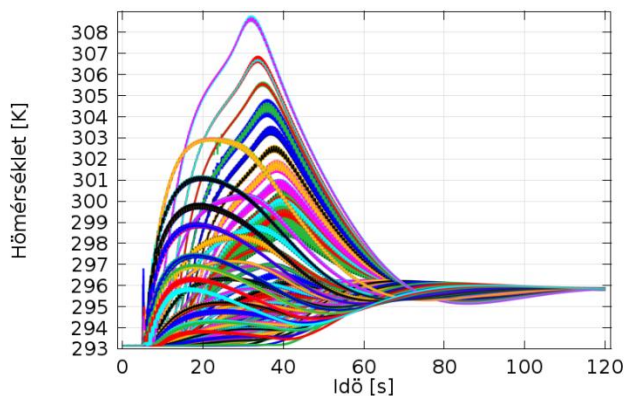
- Fal (hőmérleg – reaktorfal+keverőelem)

$$-\mathbf{n} \cdot (-\lambda \nabla T) = 0 \quad (5.18)$$

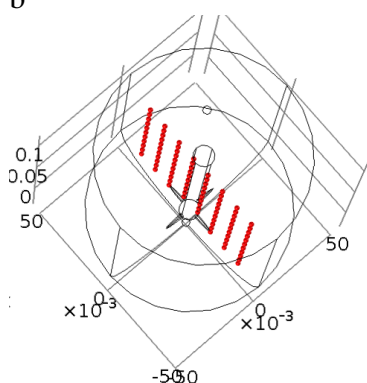
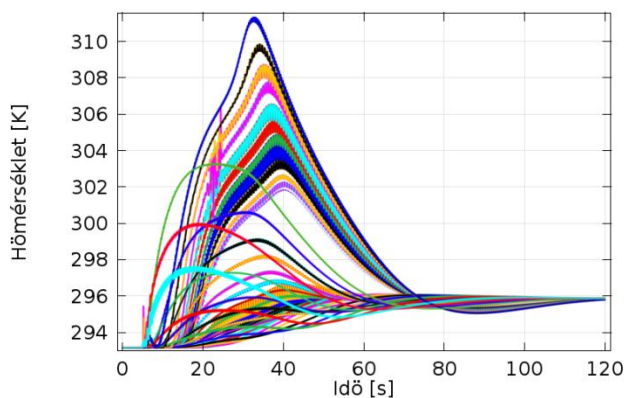
Dinamikus vizsgálatot alkalmaztam, hogy a homogenitás változások kiszámítására. A megfelelő adatgyűjtéshez a CFD szimuláció eredményeiből különböző megközelítéseket vizsgáltam meg. Az 18. (a) ábra egy rendezett 490 pontból álló hálót mutat négyzetes kialakításban, ami egy strukturált kialakítás és a teljes reaktorban végbemenő folyamatokról szolgáltat információt. A 18 (b) és (c) ábra ennek $y=0$ illetve $x=0$ paraméterű szeleteit mutatja. Ezek a kialakítások a kamera fókusz síkjában értelmezett eredményeknek tekinthetők (a felvétel irányától függően). A 18. (d) ábra a reaktor palástján vett eredményeket mutatja, ami a kamera által a reaktor falán érzékelt színváltozásnak feleltethető meg. A 18. (e) ábra koncentrikus köröknek tekinthető, ami a 18 (a) ábrához hasonlóan a teljes reaktor belső viselkedésének tanulmányozására szolgál. Az adatgyűjtési lehetőségek vizsgálatát a 100 1/min fordulatszámmal elvégzett pengekeverős szimulációnál végeztem. A 21. ábra azt mutatja, hogy a négyzetes és koncentrikus körök esetében kapott eredmények szinte teljesen azonosnak tekinthetők. A 18. (b)-(d) ábrák pedig ezeknek az elrendezéseknek szűkített információ tartalommal bíró részegységei.



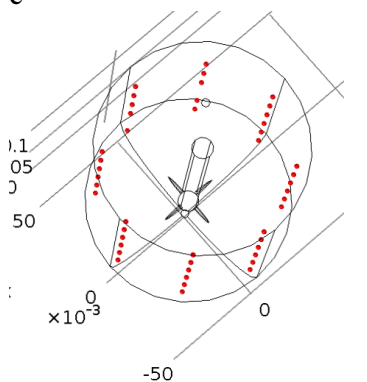
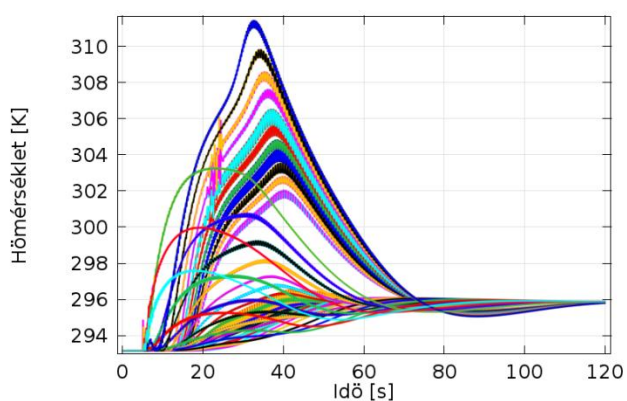
a



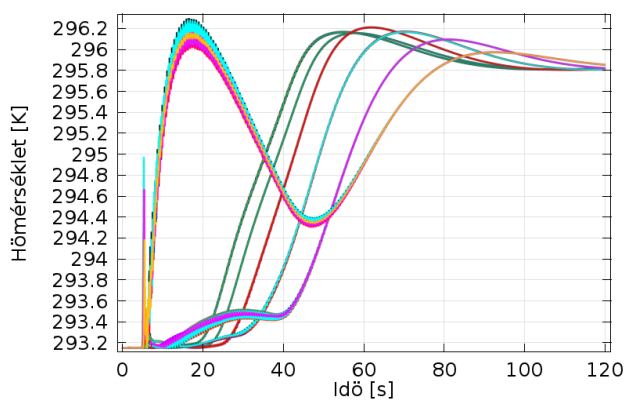
b

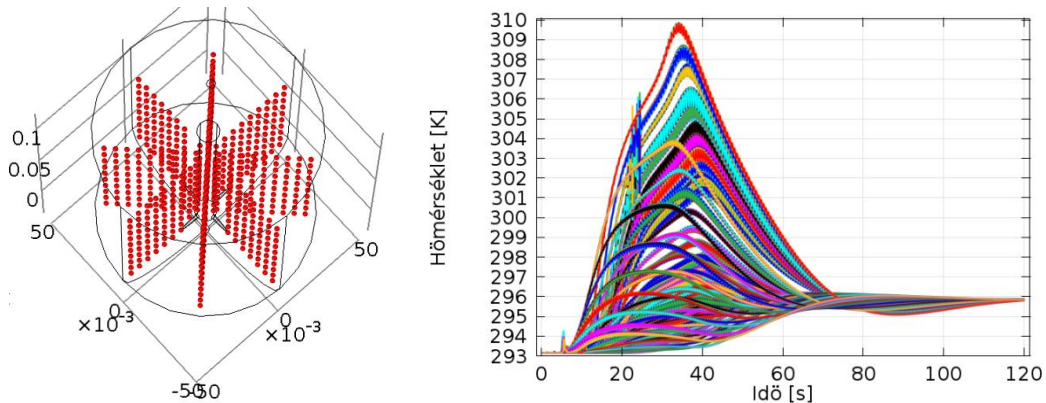


c



d

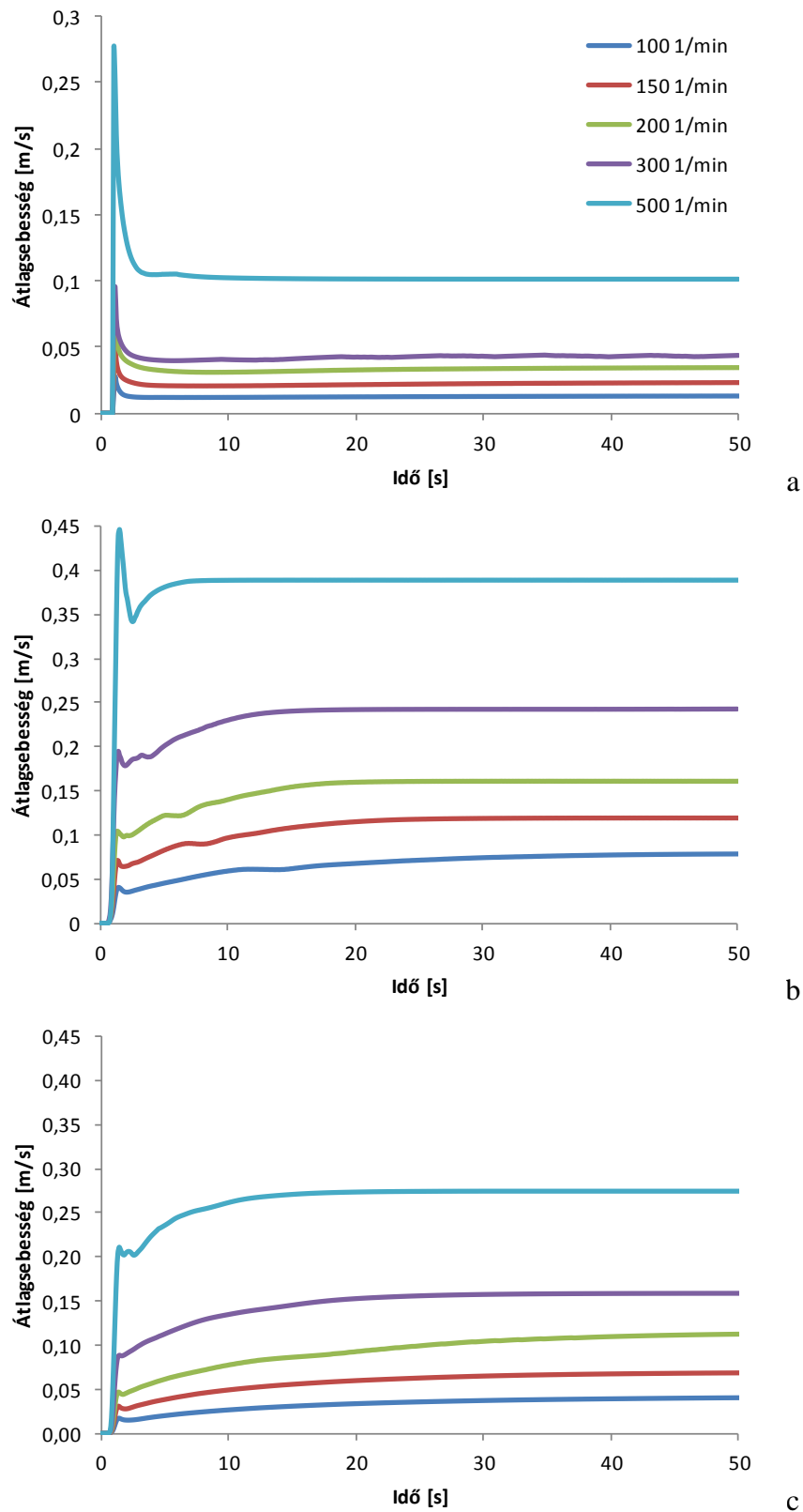




e
21. ábra Adatgyűjtési lehetőségek változatai

Az értékelések alapján az első variációt választottam a szimulációk kiértékeléshez. A hibaszámítás ebben az esetben hasonló, mint a mért esetben, az utolsó időpillanatokból számított háttérből vontam ki az aktuális időpillanatban lévő hőmérséklet értékeket. Ebben az esetben a pixelek helyett a háló egyes pontjainak hőmérsékleteit vonom ki egymásból. A szimulációkat ebben az esetben 120 s-ig végeztem. Minden egyéb esetben egy közel stacioner hőmérsékleti érték eléréséig végeztem a vizsgálatokat.

Mivel a kísérletek keverés szempontjából kvázi stacioner állapotban mentek végbe, ezért fontos, hogy a szimulációk is hasonló körülmények között kerüljenek elvégzésre. A szimuláció során egy lépcsőfüggvényt használtam, hogy megkönnyítsem a numerikus megoldó működését. Abban az esetben, ha kezdeti feltételként definiáljuk a fordulatszámot, a numerikus megoldás nehézségekbe ütközhet. Egy lépcsőfüggvény alkalmazásával azonban vezethetjük a numerikus megoldót, így könnyítve a konvergens megoldás elérését. A 22. ábra az egyes keverőelemek esetében a reaktorban számított térfogatra vonatkoztatott átlagsebességeket mutatja be.



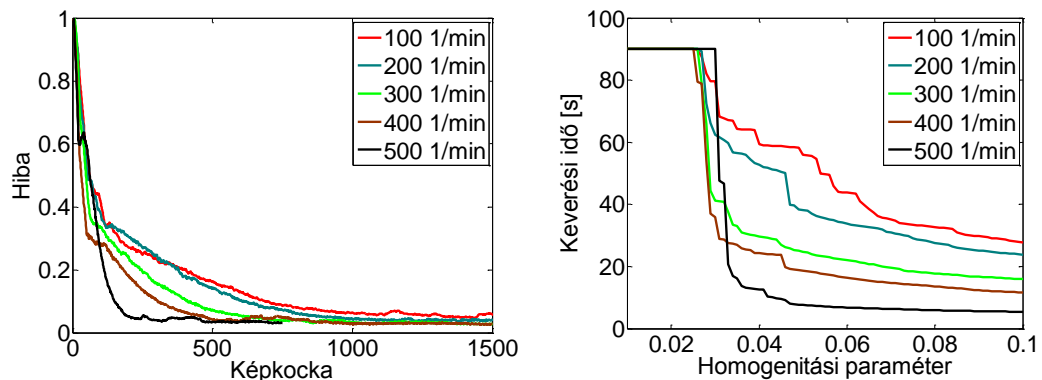
22. ábra Átlagsebességek számítása a különböző keverőelemeknél (a) pengekeverő, (b) horgonykeverő (c) turbinakeverő

Ahogy a 22. ábra szemlélteti 50 s - ra már minden keverőelem esetében elérhető a kvázi stacioner áramlási kép.

5.1.3 Validálási vizsgálatok eredményei

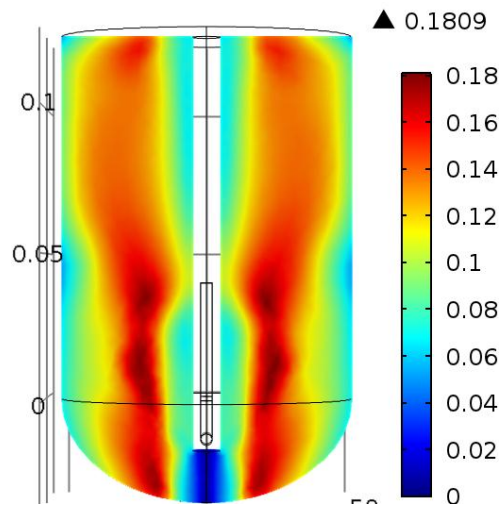
A validációs lépéseket részletesen egy keverőelem példáján szeretném szemléltetni, a többi keverőelem esetén a végleges keverési időt mutatom be.

A 23. ábra az abszolút hibát mutatja különböző fordulatszámoknál a horgonykeverő esetében. Ebben az esetben rögzítettem egy hibaértéket, és azt az időt definiáltam keverési időnek, amikor a hibaérték ez alá csökkent. A keverési idő az injektálás (maximális hibaérték) és az előre definiált hibaérték közötti eltelt időt jelenti, ami után a hiba alacsonyabb, mint az előre definiált homogenitási paraméter.



23. ábra Hibaváltozás időben és homogenitási paraméter vizsgálat (horgonykeverő)

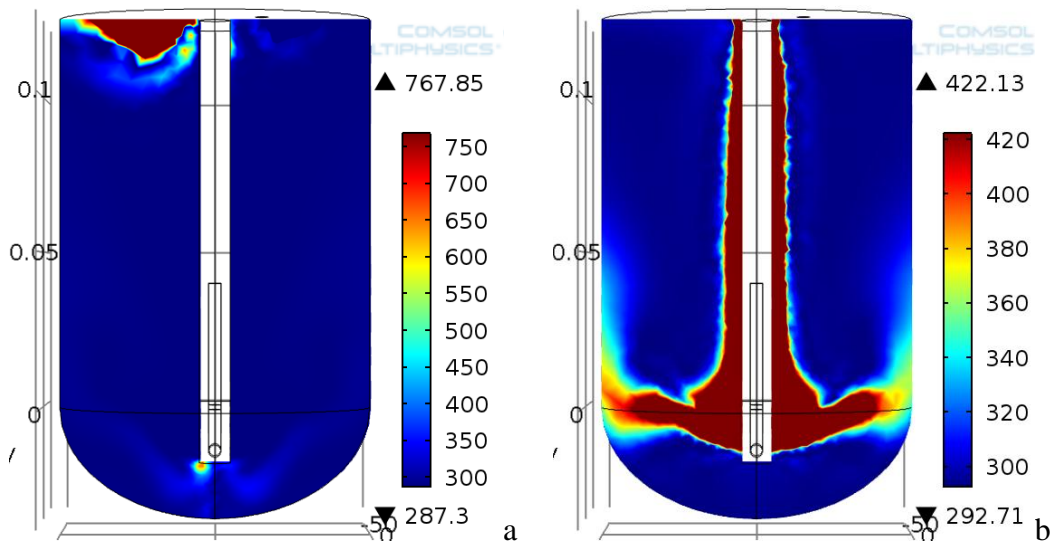
A bal oldali ábra a hibaértékek csökkenését mutatja időben. A hiba fluktuációja a keverőelem excentricitásából fakad. A jobboldali diagram a homogenitási paraméter hatását mutatja a keverési időre. A görbék szinte ugyanolyan értéket vesznek fel alacsony homogenitási paraméternél, így 0,05-ös hibaértéket választottam, ami jól dokumentált módon széles körben használt egyéb kutatásokban (95%-os homogenitás).

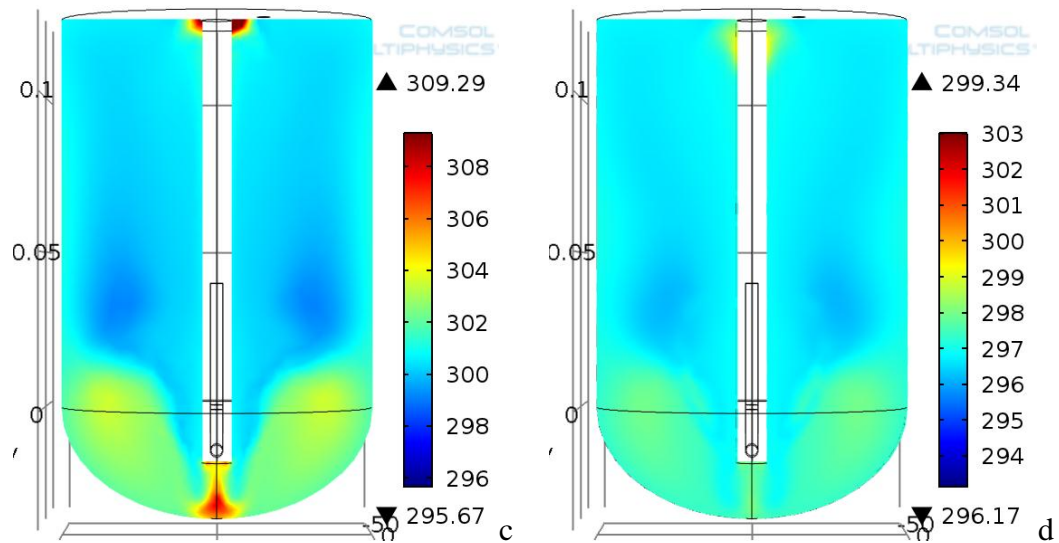


24. ábra A kialakult sebességi mező a reaktorban horgonykeverő és 100 1/min fordulatszám esetén

A CFD szimulációk esetében első lépésben az impulzusról oldottam meg, ezután pedig a hőmérséletről. A 24. ábra a horgonykeverő által keltett sebességi teret, míg a 25. ábra a horgonykeverő esetében mutatja a hőmérséklet eloszlást az indikátorinjektálás után több időpillanatban.

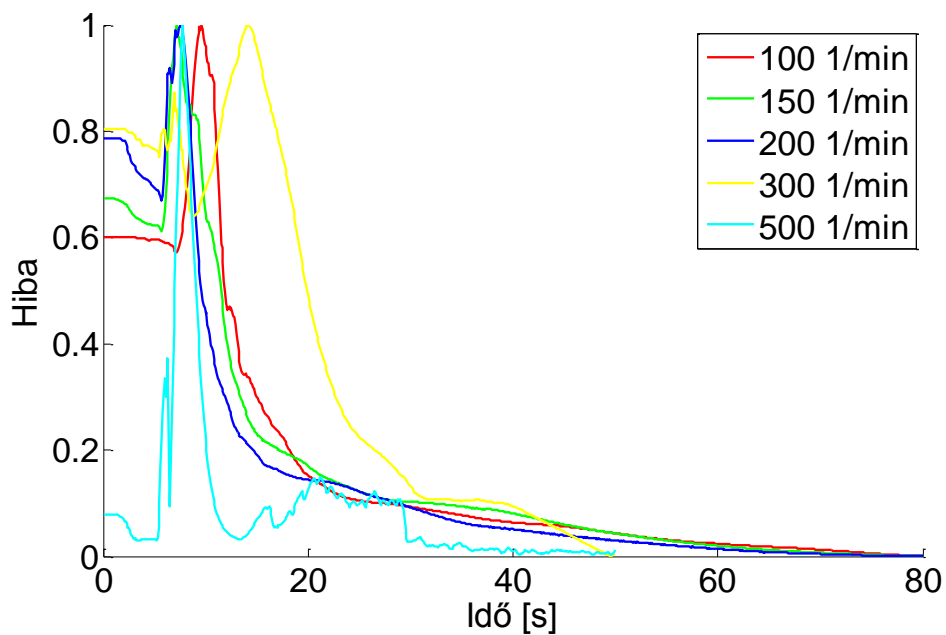
A keverőelem környékén nagyobb sebességek tapasztalhatóak, és a fal mellett, valamint a keverőelem alatti területektől eltekintve jól kevertnek tekinthető a berendezés.





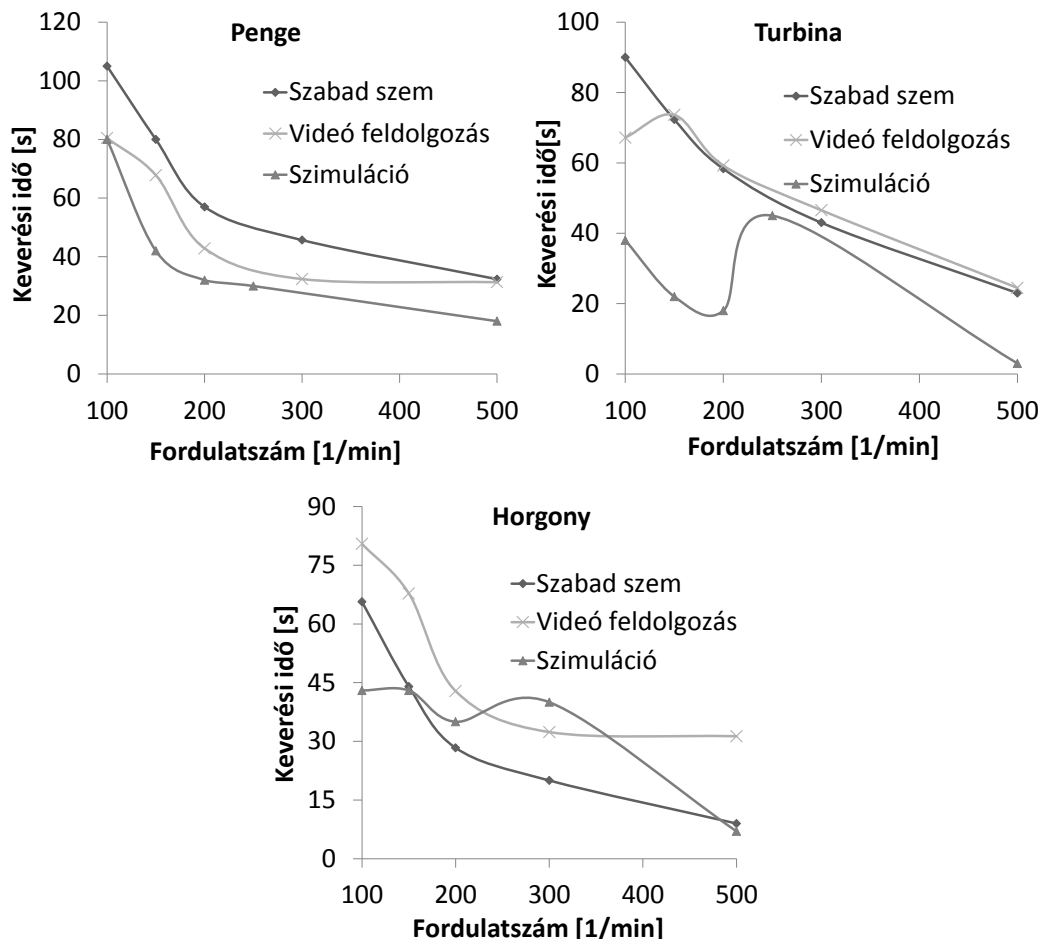
25. ábra Hőmérséklet eloszlás a reaktorban (horgonykeverő), (a) 5,5 s, (b) 10 s (c) 30 s, (d) 50 s időpillanatokban

Az injektálás után a hőmennyiség nagy része még a reaktor felső részében található. Ahogy haladunk előre az időben úgy válik egyre homogénebbé a hőmérsékleti tér a reaktorban. A 26. ábra a horgonykeverő esetében mutatja a fordulatszám hatását a homogenitás változására. Ahogy azt várható volt, és korábban a mérések során is tapasztaltam, a hibafüggvény a fordulatszám növekedésével egyre gyorsabban éri el a minimális hibaértéket.



26. ábra CFD mérés alapú vizsgálat (horgonykeverő)

A 27. ábra a szabad szemmel és a videó feldolgozással kapott vizsgálatok eredményeit valamint a CFD szimulációs eredményeket mutatja mindhárom keverőelem esetén. A szabad szemmel végzett és a videó feldolgozások eredmények majdnem ugyanazt az értéket adják a horgonykeverő esetében, és kis hibát mutatnak a turbinakeverő esetében. A videó alapú keverési idők alacsonyabbak, mint a szabad szemmel mért értékek a pengekeverő esetében, mivel ebben az esetben egy örvény formálódik a keverőszárnál, amit a szabad szemmel mért esetekben lehet látni, de nem jelennek meg a videó feldolgozáson alapuló vizsgálatoknál. A szimulációs eredmények esetében a kapott keverési idő értékek a penge és a turbinakeverő esetében alacsonyabbak, mint a mért eredmények, kiugró értékeket azonban csak a turbinakeverő esetén tapasztaltam.



27. ábra Mért és számított keverési idők

Az eredményeket az irodalomban található keverési időkkel összevetve megállapítható, hogy a kifejlesztett módszerrel hasonló eredmények érhetőek el.

Mindkét, az irodalomban bemutatott vizsgálat, egy keverőszáron több keverőelemet tartalmaz, de a keverési idő négylapátos ferde pengekeverő esetében 250 és 340 1/min fordulatszámnál 30-40 s közötti értéknek adódik [91], kétszintes turbínakeverő esetében pedig 10-25 s közötti értéknek [40].

A kifejlesztett szimulátor alkalmas arra, hogy lokalizáltan számítsa a keverési időt a reaktor kisebb részein, egyfajta hálót hozva létre, így specifikusabb validáció is elképzelhető a berendezések egyes kisebb régióit alapul véve. A szimulációs eredmények jól közelítik a videó feldolgozással kapott eredményeket, így a módszer alkalmazható kevert berendezések CFD modelljeinek validálására.

5.2 Szemcsekövetés alapú validálási módszerek

A második alfejezet szemcsekövetés alapú validációs módszert mutat be. A mozgó élek detektálásával lehetővé válik a keverőelemtől eltérő mozgások (szemcse) detektálása, és így háromdimenziós szemcse trajektóriák leképezése.

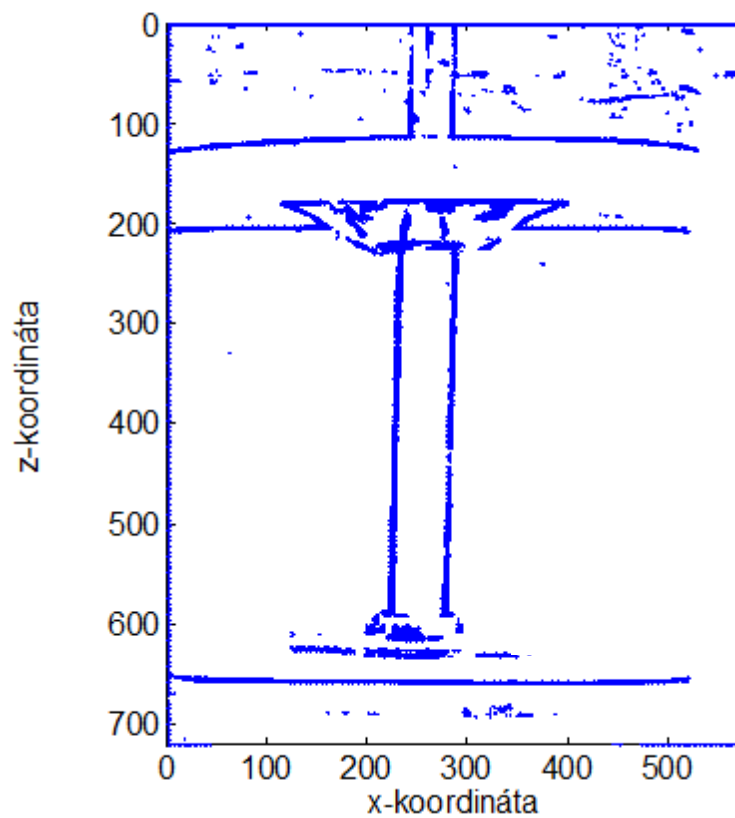
5.2.1 Az algoritmus bemutatása

Fekete műanyag szemcsét használtam a szemcsetrajektóriák követésére. Ebben az esetben is definiálni kell egy hátteret, majd ehhez hasonlítani az élek mozgását. Mikor a szemcse bejut a rendszerbe az addigi mozgó élek (keverő, keverőszár) mellett új élek jelennek meg, és ezeknek a mozgását kell térben és időben detektálni. A videó feldolgozásnál a következő lépéseket követtem:

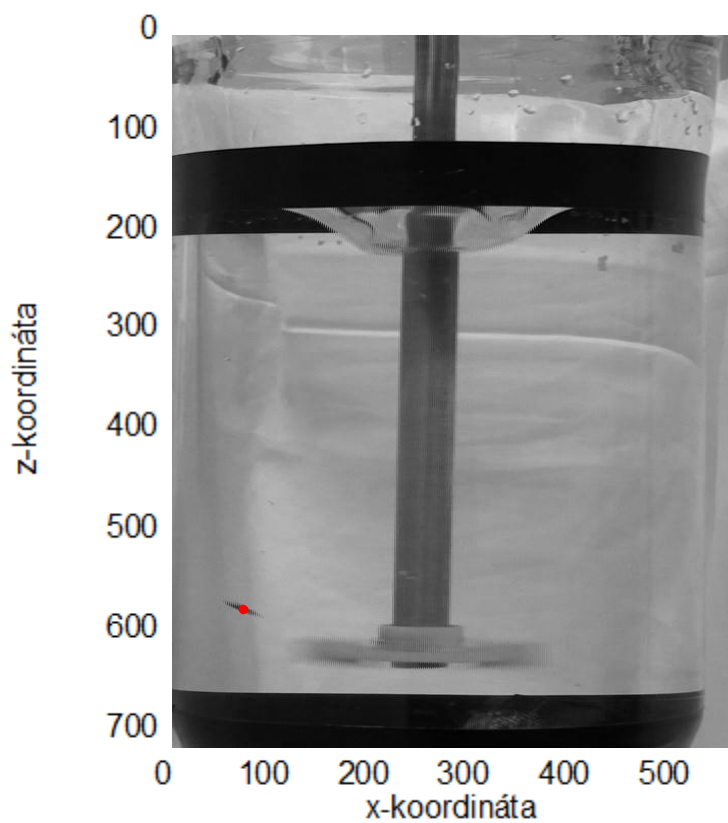
1. Első lépés a videó betöltése. A három színskála (RGB) átlagát származtattam (szürkeárnyalat), majd az így kapott idősorozatot egy háromdimenziós mátrixban tároltam (pixel*pixel*idő). Fontos ennél a lépésnél a kísérlet kivitelezése is. Az egyes méréseket két kamerával egyenlő magasságban és fókusztávolsággal végeztem. A két kamera a további lépések miatt 90°C-ot kell, hogy bezárjon.
2. Minden esetben képkockánként haladtam. Az elemzéshez szükség van további paraméterekre. Ezek a videó sebessége (25 fps), egy szűrési paraméter az élek meghatározásához, valamint a szemcse minimális méretét leíró pixelszám.

3. Az elemzés során először az éleket határoztam meg, majd a mozgó éleket fogom követni. Ahol különbség van, ott van mozgó él. Különbséget kell tenni a fix élek (keverőelem, keverőszár), valamint a nem fix élek (szemcse) között.
4. Ezután definiálom a háttérét a megadott háttér idő intervallum alapján. A szemcsét tartalmazó képkockákat levonva ebből a háttérből fogom eredményül kapni a szemcséknek a pozícióját. Nagyon fontos a célterület meghatározása, hiszen ez alapján lehet majd a léptékezési lépést végrehajtani.
5. x-z pontpárok detektálhatóak, amik azonban még nincsenek összehangolva a másik szögből kapott trajektóriákkal. A lépések a következőek a másik videó esetében is, azonban itt y-z pontpárokat fogok eredményül kapni. A két videó összehangolása után, következhet a háromdimenziós trajektóriák kialakítása.
6. Először normáltam a koordinátákat (ebben az esetben csak azokról a koordinátákról van szó, amik az értelmezési tartományon belül vannak), majd a valós méretekre léptékezem azokat (pixel \rightarrow m).
7. A trajektóriák élesíthetőek tovább spline interpolációval, aminek során az éleket lekerekítettem, így hozva létre a valósághoz jobban közelítő trajektóriát.
8. A szemcsetrajektóriák segítségével egy tartózkodási valószínűség diagramot generáltam, amelyben vizsgáltam, hogy a reaktor kisebb térfogataiban mennyit tartózkodik a szemcse, és ezáltal összehasonlíthatóvá válnak a mérési eredmények a szimulációs eredményekkel.

A 28. ábra az érzékelt mozgó éleket mutatja (késsel), a háttér részeként, míg a 29. ábra a detektált szemcsét a reaktorban (piros pont).



28. ábra A detektált mozgó élek, a háttér részeként



29. ábra A detektált szemcse a reaktorban

A korrekció után háromdimenziós szemcsetrajektóriákat számoltam. A pontosabb szemcsetrajektóriák meghatározásához ismételt és átlagolt szemcsetrajektóriák számítására lehet szükség.

5.2.2 A kevert berendezés CFD modellje

Két fizikai folyamatot kell ebben az esetben leképezni: turbulens áramlás leírására alkalmas impulzusmérleget, amivel a kevert berendezés belső áramlási viszonyait számítom, illetve a szemcsemozgását leíró összefüggéseket, amik alkalmasak arra, hogy leírják ebben a térben a szemcse mozgását. 500 1/min fordulatszámon végeztem a kísérleteket és a szimulációs vizsgálatokat, a három előzőekben említett keverőelem felhasználásával. Az impulzusmérleg egyenleteit a 4.1-4.7 egyenletek mutatják. Az előzőekben megismert geometriákat implementáltam a szimulációk esetében is (20. ábra). A szemcsekövetés ebben az esetben áramlási kép alapú szemcsekövetés, amit az alább egyenlettel írható le:

$$\frac{d(m_p \mathbf{v})}{dt} = \mathbf{F}_t \quad (5.19)$$

A húzóerőket és a gravitációs erőket kell figyelembe venni le ebben az esetben, amik a következőképpen írhatóak le.

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\tau_p} m_p (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \quad (5.20)$$

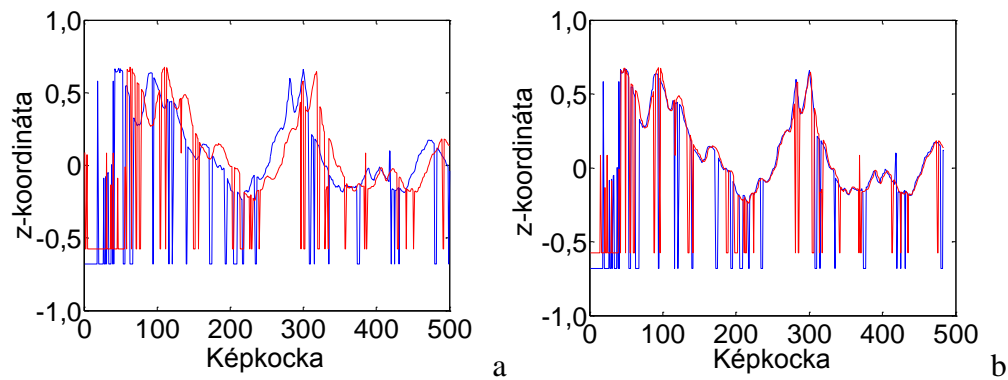
$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \quad (5.21)$$

$$\mathbf{F} = m_p \mathbf{g} \frac{\rho_p - \rho}{\rho_p} \quad (5.22)$$

A modellek megoldása után ki tudom nyerni a szemcsetrajektóriákat, és megtörténhet az összehasonlításuk a kísérleti alapon számolt szemcsetrajektóriákkal.

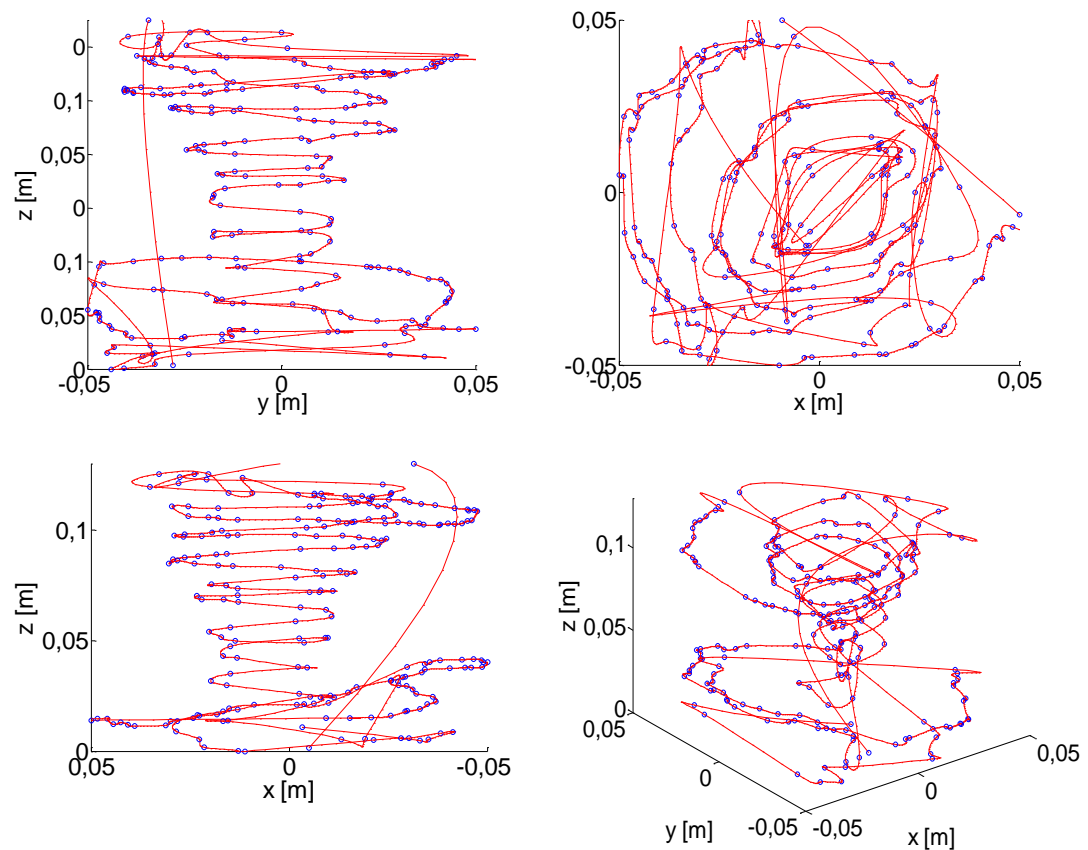
5.2.3 Szemcsekövetési validációs eredmények

Az azonos fókusztávolság és kameramagasság miatt nincs szükség időbélyegre a két kamera felvételének szinkronizálásához, elég ezt a z koordináták alapján megtenni. A 30. ábra a szinkronizálás előtt és után mutatja a z koordináták értékeit.



30. ábra z koordináta értékek szinkronizálás előtt (a), és után (b).

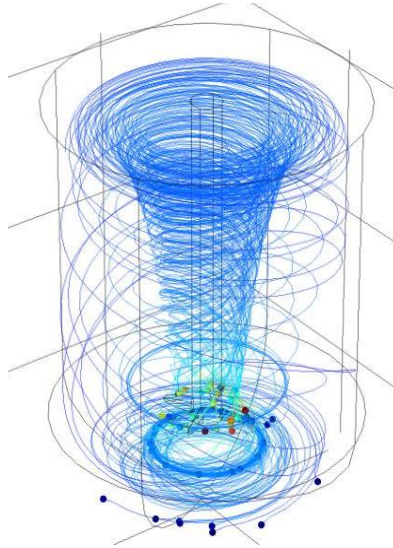
A szinkronizálási lépés után lehetővé válik háromdimenziós trajektóriák számítása. A trajektóriák szükség esetén tovább simíthatóak spline interpoláció alkalmazásával.



31. ábra Szemcsetrajektóriák a kísérleti esetben pengekeverő esetén különböző nézetekből

A szimulációs vizsgálatok során a modellek megoldását követően a szemcsék mozgásának háromdimenziós koordinátái közvetlenül kinyerhetők. A

31. ábra a kísérleti úton, míg a 32. ábra a CFD szimulációval nyert szemcsetrajektóriákat mutatja pengekeverő esetében (500 l/min).

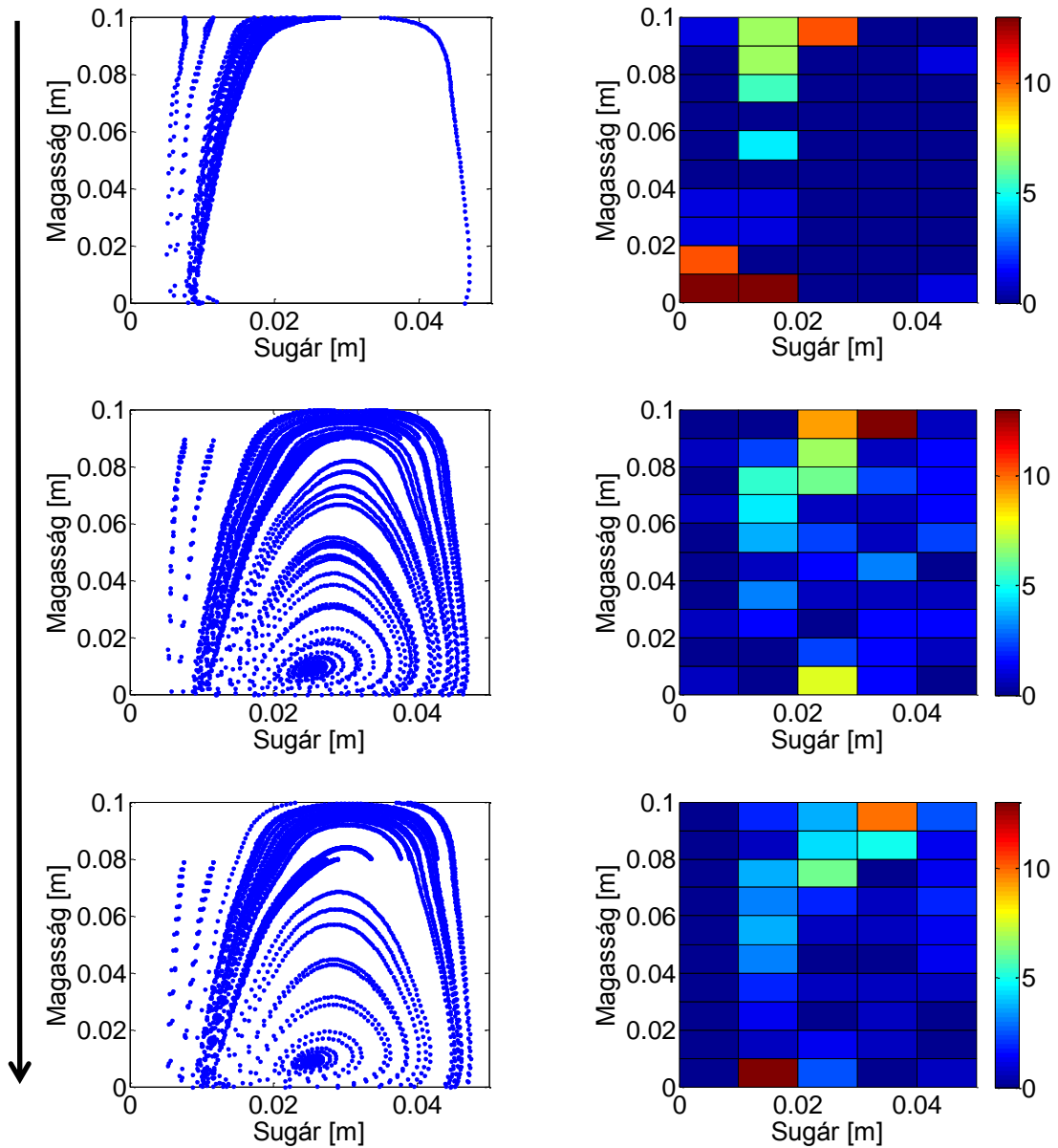


32. ábra Szemcsetrajektóriák a szimulációs esetben pengekeverő esetén

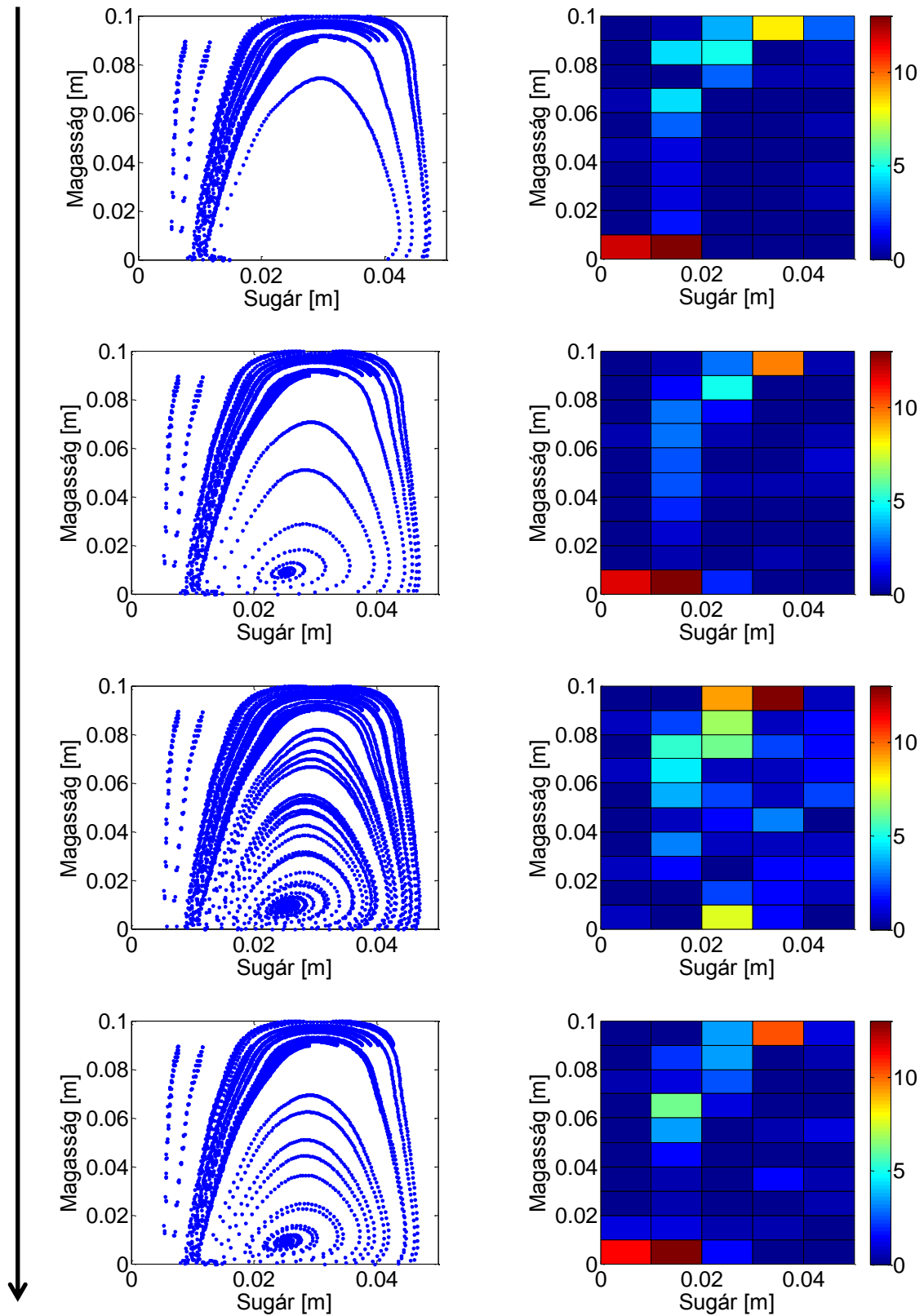
A kevert berendezés CFD modelljének validálására egy statisztikai módszert dolgoztam ki. A szemcsék időbeni pozícióira egy kvázi tartózkodási idő függvényt illesztettem. Kisebb részekre osztottam a reaktort, és meghatároztam, hogy az adott kisebb részekben mennyi időt tölt a szemcse. Ezeknek az adatoknak a felhasználásával egy grafikont hoztam létre, amivel vizualizálni lehet az eredményeket. A validáció során az x-y koordinátákból sugárkoordinátát számítottam. A színskála azt mutatja, hogy a teljes időnek hány százalékát tölti a szemcse a reaktor adott térrészében. A keverőszár minden esetben 0-nál található.

Annak érdekében, hogy megállapítsam a modell érzékenységét a modell paraméterekre különböző vizsgálatokat végeztem. A szemcsék kiindulási pozícióinak definiálása egy háló segítségével történik. Ez a háló több párhuzamos réteget tartalmazhat, amelyek hatással vannak a szemcsék által bejárt útra. Az első vizsgálatban áttekintettem a hálósíntek számának hatását a végső trajektóriákra. Ahogy a 33. ábra mutatja egy háló szint esetén a szemcsék többsége a keverőszár mellé tart, míg magasabb háló szinteknél jobb keveredést érhető el. A második vizsgálat eredményeit a 34. ábra mutatja. Ebben a vizsgálatban a szemcse sűrűségének hatását vizsgáltam meg a szemcsetartózkodásra. Ahogy látható

alacsony sűrűségnél nem érik el a szemcsék az adott időintervallumban a keverőelemet, míg egy bizonyos sűrűség fölött már nincs változás.

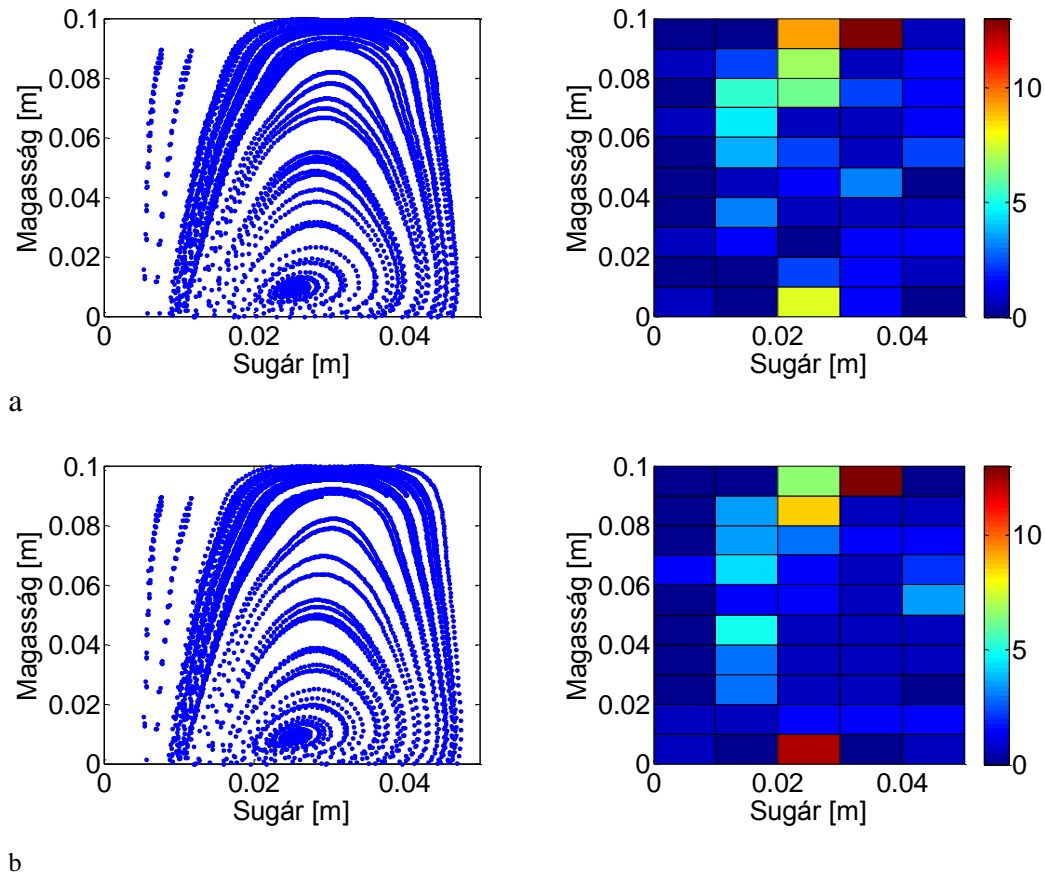


33. ábra Kiindulási szemcsepozíció hatása a szemcsetartózkodásra (párhuzamos háló szintek 1-3)



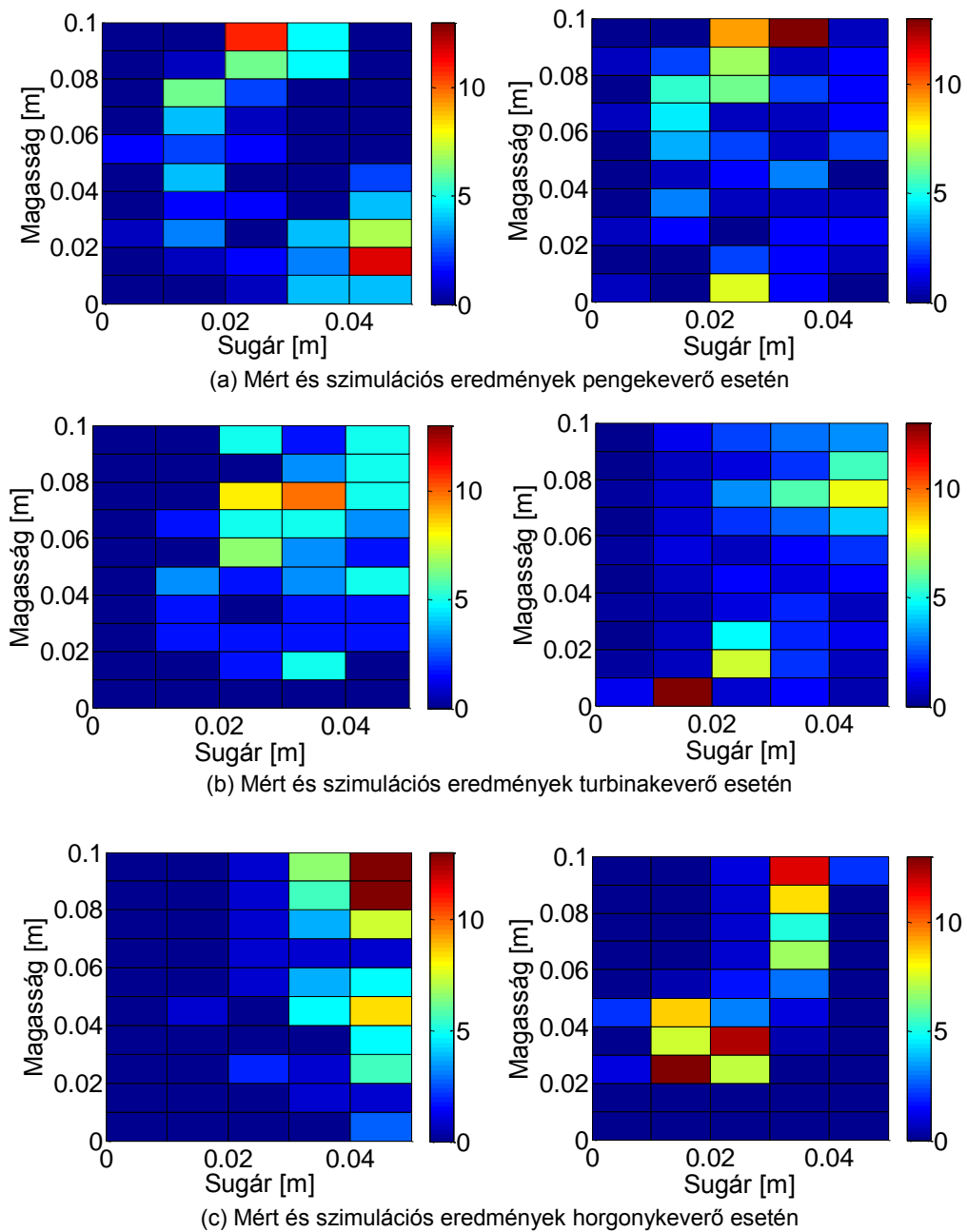
34. ábra Szemcsesűrűség vizsgálata (800 kg/m^3 , 1600 kg/m^3 , 2200 kg/m^3 , 2800 kg/m^3)

A vizsgálatok alapján a két háló szintet, valamint a 2200 kg/m^3 -es szemcsesűrűséget választottam, és ezekkel a paraméterekkel végeztem a mérési eredmények validálását. Emellett még megvizsgáltam a szemcse-fal peremfeltétel hatását. Az általam használt programban (COMSOL Multiphysics) többféle peremfeltétel megadására van lehetőség azokban a pontokban, ahol a szemcse a fallal érintkezik. Megáll, odatapad vagy visszapattan. Ezen esetek közül a megáll, és a visszapattan peremfeltételt vizsgáltam. A megáll feltételt akkor célszerű használni, ha a fal mellett nagy mértékben lelassulnak a szemcsék, így nincs nagy különbség a leáll és a visszapattan esetek között. A vizsgálatok eredményeit a 35. ábra mutatja.



35. ábra Peremfeltétel vizsgálata ((a) megáll, (b) visszapattan)

Mivel a két esetben kapott eredmények nem sok eltérést mutatnak egymástól, ezért a kevesebb számítási igényű *megáll* peremfeltétellel számoltam tovább. Ezután a már említett szemcsetartózkodási módszerrel átlagos tartózkodást számoltam. A 36. ábra az eredményeket mutatja mérés (jobb) és szimulációs (bal) esetben



36. ábra A szemcse trajektóriák statisztikai analízise mérés(bal) és szimuláció (jobb) alapján különböző keverőelemeknél

Kvalitatív hasonlóságok megfigyelhetők minden keverőelem esetében, habár a horgonykeverőnél tapasztalt kép eléggé eltér a többitől. A pengekeverő esetén egyértelműen megfigyelhető a keverőelem felé tartó örvényszerű forma. Turbinakeverő esetében a külső régiókban tartózkodik többet a szemcse, hasonlóan a horgonykeverőhöz. Kvantitatív értékelés ebben az esetben nem igazán lehetséges.

5.3 Következtetések

Kevert reaktorok CFD modelljeinek a validálása meglehetősen komplex feladat. Ebben a fejezetben videó feldolgozáson alapuló módszereket mutattam be CFD modellek validálására.

Az első esetben egy festékhomogenizáláson alapuló keverési idő mérési validációs módszer került bemutatásra. Különböző keverőelemeknél és fordulatszámoknál végzett vizsgálatokat rögzítettem videó felvételre, és egy olyan módszert fejlesztettem ki, amivel fel lehet dolgozni ezeket az adatokat. A vizsgált berendezés jellegzetességéből eredően, több képkocka felhasználásával alkotott háttérrel használtam és több, párhuzamos mérést átlagoltam ki, megbízhatóbb eredmények elérése érdekében. A kevert berendezés viselkedését leíró CFD modell megoldásával kapott, valamint a kidolgozott mérőrendszeren végzett mérések eredményeit összevetve ellenőriztem a kidolgozott validációs módszer alkalmazhatóságát.

A fejezet második felében egy olyan videó feldolgozási módszer került bemutatásra, amely képes szemcsekövetési módszerek használatával kevert berendezések leírására alkalmazott modellek minősítésére. Off-line eszköz készült el, ami háromdimenziós szemcsetrajektóriák létrehozásával, kezelésével, valamint egy statisztikai analízis segítségével költséghatékony és egyszerű módot nyújt CFD modellek kvalitatív jellemzésére, és összevetésére mérési eredményekkel. A modellépítés során meghatároztam azokat a modell paramétereket (hálószingek, sűrűség, peremfeltételek), amelyek segítségével hatékonyan leírhatóak a szemcsekövetési CFD modellek.

A kifejlesztett módszerek transzparens falú berendezések esetén alkalmazhatóak a kidolgozott modellek jóságának ellenőrzésére.

6. CFD szimulátorok alkalmazása a vegyészmérnöki feladatok megoldásában

Az ötödik fejezet a CFD modellek újszerű alkalmazási lehetőségeit vizsgálja. Két alfejezetre tagolható, egy laboratóriumi hőcserélő CFD modell alapú adaptív hőmérsékletszabályozásának bemutatásából, valamint egy oldó reaktor hibrid CFD és cellás modellezésével foglalkozó részből. Mindkét alfejezet részletesen tartalmazza a leképezett modelleket, a megoldási lépéseket, valamint az eredményeket.

6.1 CFD modell alapú adaptív hőmérsékletszabályozás vizsgálata

Az alkalmazási példában a laboratóriumi hőcserélő hőmérsékletszabályozását végeztem. Szabályozott jellemző a kilépő hőmérséklet, beavatkozó jellemző a fűtőfeszültség. Mért zavarásként jelentkezik a belépő hőmérséklet, valamint a térfogatáram. A hőmérsékletszabályozást korlátos PI szabályozóval szeretném megoldani.

Rögzített munkaponton (150 l/h) végzett mérés alapján elkészítettem a laboratóriumi hőcserélő berendezés részletes CFD modelljét. Modell paraméterek identifikálásával egy megfelelő pontosságú modellt hoztam létre, mely modellt az általam vizsgált térfogatáram tartomány két szélső pontján validáltam (120 ill. 180 l/h). Az így kapott validált modell felhasználásával szimulációs vizsgálatokat végeztem, mely vizsgálatok után az eredményül kapott fűtőfeszültség, kilépő hőmérséklet adatpárok segítségével bemenet, kimenet modelleket (fekete doboz) identifikáltam. A fekete doboz paraméterek felhasználásával szabályozóparaméterek számíthatóak, és így egy adaptív hőmérsékletszabályozó hangolható. A kapott eredményeket összevettem a CFD modellt nem alkalmazó adaptív szabályozó, valamint az egy ponton hangolt szabályozó teljesítményével.

6.1.1 Modellezési lépések és eredmények

A berendezés külső szigetelése miatt a hőveszteség elhanyagolható így a következő négy folyamatot kell leképezni: a folyadékfázis áramlását, az elektromos fűtést a fűtőszállal kapcsolatban valamint a hőtranszportot szilárd és folyadék fázisban. A modellezés során az anyagi jellemzők meghatározásához a

COMSOL Multiphysics beépített tulajdonságtárát, és egy online adatbázist [92] használtam. A fűtőszál ellenállásának meghatározására mérést alkalmaztam.

Turbulens k - ε modellt használtam az impulzusmérleg megoldásához a nagy fellépő turbulencia miatt (5.1-5.7 egyenlet). A hőcserélő külső falára fal peremfeltételt definiáltam (5.9-5.13 egyenlet). Mivel a hőcserélő esetében folyamatos üzemű berendezésről van szó, ezért definiálni kell a CFD modellben folyadék betáplálást és elvétel peremfeltételt. Betáplálás esetén átlagsebességet definiáltam, valamint a k és ε paraméterek értékét az adott peremen, elvétel esetében pedig nyomásspecifikáció megadása szükséges.

- Folyadék betáplálás

$$\mathbf{u} = u_0 \cdot \mathbf{n} \quad (6.1)$$

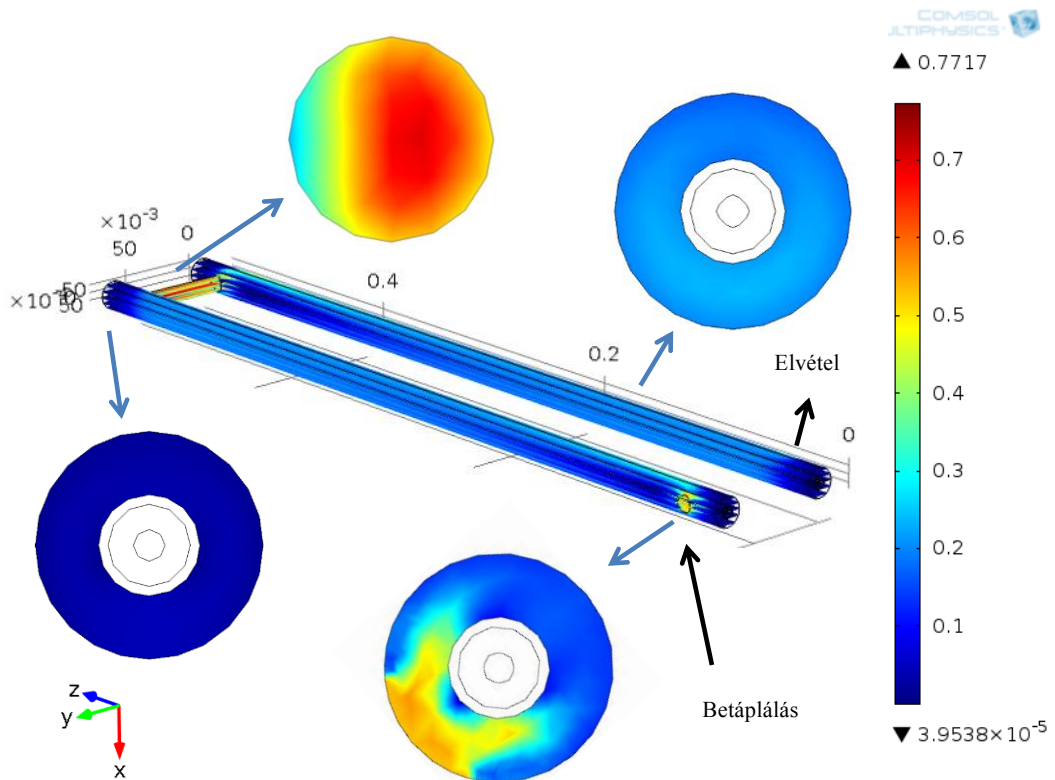
$$k = k_0 \quad (6.2)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \quad (6.3)$$

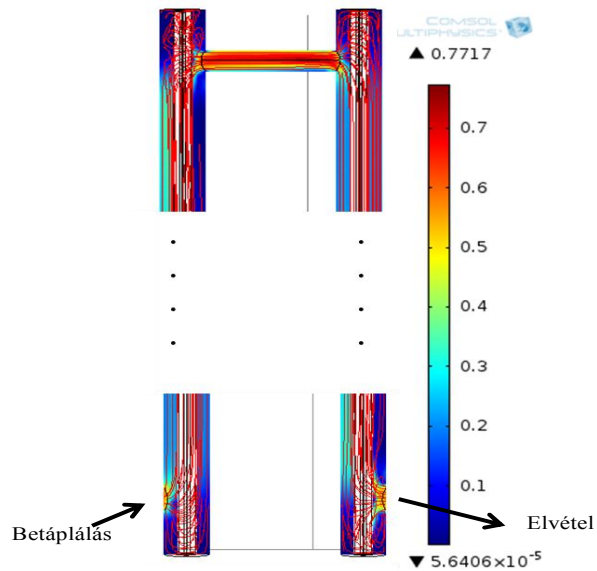
- Folyadék elvétel

$$p = p_0 \quad (6.4)$$

Stacioner szimulációban oldottam meg az impulzusmérleget, mivel az áramlás szempontjából kvázi stacioner állapotban végeztem a méréseket. Először 150 l/h térfogatárammal végeztem szimulációs vizsgálatot, a 37. ábrán pedig a hőcserélőben kialakuló áramlási kép látható. A kisebb képek a hőcserélő sebességi mezejének az x-y szeleteit mutatják az adott pontokban. A 37. ábrán látható hogy a sebesség abszolút értéke nagyobb a belépésnél és a kilépésnél, valamint a két cső közötti részen. A 38. ábrán a hőcserélő sebességi terének áramvonalas képe látható. Jól megfigyelhetők a hőcserélő két végén kialakuló örvények.



37. ábra Sebességi mező a hőcserélőben [m/s]



38. ábra A hőcserélőben kialakuló áramlási tér áramvonalakkal szemléltetve (m/s)

Az impulzusmérleg megoldása után a kiszámított sebességi tér adatait felhasználva lehetővé válik a hőmérleg konvektív tagjának számítása. A

hőmérsékletet a 5.8 egyenlet írja le. Mivel ebben az esetben elektromos fűtésről van szó ezért a modellnek tartalmaznia kell az elektromos fűtés leíró egyenleteket is. Az elektromos fűtés egy olyan folyamat, melyben az elektromos töltés áthaladás hőt generál. Ezt Joule első törvényével írható le: ebben az esetben a fűtőszálakra alkalmaztam. Ahogy az elektromos áram áthalad a vezetón hő generálódik. A következő egyenletekkel modelleztem az elektromos fűtést:

$$\nabla J = Q_j \quad (6.5)$$

ahol J a vezető sűrűség, Q_j pedig a hőmennyiség

$$J = (\sigma + \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{\partial}{\partial t}) \cdot E + \frac{\partial D_r}{\partial t} \quad (6.6)$$

$$E = -\nabla U \quad (6.7)$$

ahol σ az elektromos ellenállás, ε_0 a vákuum permittivitása, ε_r a relatív permittivitás, E az elektromos térerősség, D_r a töltéserősséget U pedig a feszültséget jelöli.

A Joule fűtés fizikai probléma leírásánál a fűtőszál és a szigetelést vettem figyelembe. Az elektromos fűtés esetében a fűtőszálak egyik végén feszültséget,

$$U = U_0 \quad (6.8)$$

míg a másik végén földelést definiáltam, így lehetővé téve a töltésáthaladást.

$$U = 0 \quad (6.9)$$

Mivel a szigetelőrétegnek ebben az esetben az elektromos szigetelés a fő feladata, ezért a szigetelő réteg külső peremén elektromos szigetelést definiáltam.

$$-n \cdot J = 0 \quad (6.10)$$

Hővezetés szempontjából a hőcserélő külső részei a jó szigetelés miatt hőszigetelőnek tekinthetők, ezért hőszigetelés peremet definiáltam. λ ebben az esetben a hővezetési tényezőt jelöli, T pedig a hőmérsékletet [K]

$$-n \cdot (-\lambda \nabla T_i) = 0 \quad (6.11)$$

A fűtőszál szilárd alkotóelemei között nincsen hőszigetelés, ezért ezek között a hővezetést, csak az egyes anyagok tulajdonságai határozzák meg. Ezeken a peremeken folytonosságot definiáltam.

$$-n \cdot (-\lambda \nabla T_i) = 0 \quad (6.12)$$

Az folyadékban lezajló hőtani folyamatok modellezésére fel kell írni a hőmérleget a folyadékfázisra is. Mivel folyamatos rendszerről van szó, peremfeltételként betáplálási hőmérsékletet, valamint elvételt definiáltam. A betáplálási hőmérséklet esetében a mért betáplálási hőmérsékletet definiáltam.

- Hőmérséklet betáplálás

$$T_f = T_{f0} \quad (6.13)$$

- Hőmérséklet elvétel

$$-n \cdot (-\lambda \nabla T_f) = 0 \quad (6.14)$$

A szilárd és folyadékfázis határán fellépő hőátadás számításához a következő módszert alkalmaztam. A peremen számítottam a Pr számot,

$$Pr = \mu \cdot c_p / \lambda \quad (6.15)$$

majd a Pr szám és a Re szám (impulzusmérleg megoldásából számítva) segítségével kifejeztem a Nusselt számot:

$$Nu = 1.86 \cdot Re^{0.4} \cdot (Pr(D/L))^{1/3} \quad (6.16)$$

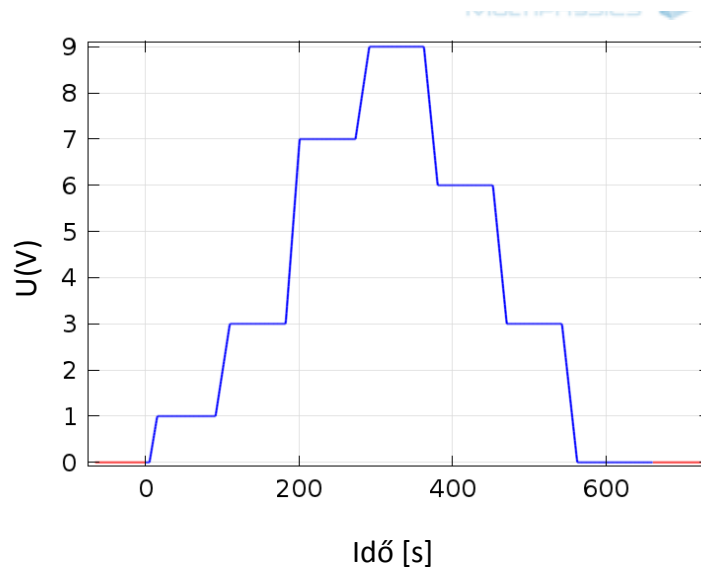
A Nu szám ismeretében számítható a hőátadási tényező:

$$\alpha = Nu \cdot (\lambda/D) \quad (6.17)$$

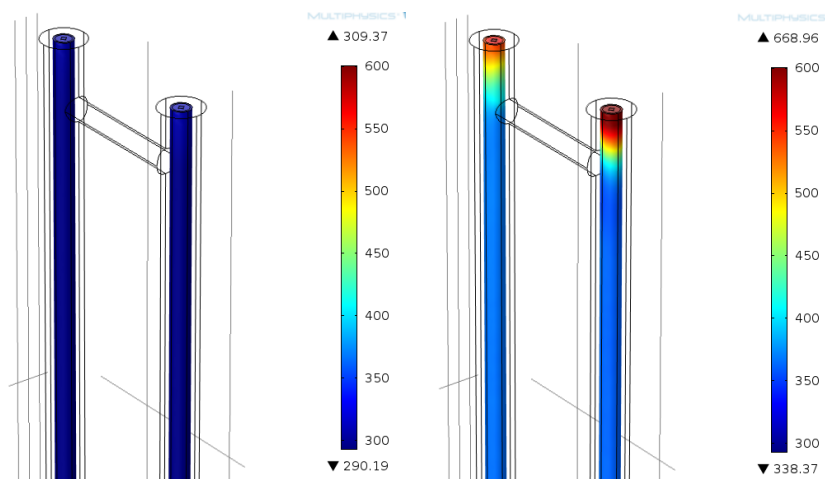
majd a hőátadási tényező ismeretében a szilárd és folyadékfázis közötti hőátadásra is definiálható a peremfeltétel.

$$-n \cdot (-\lambda \nabla T_f) = -\alpha \cdot (T_f - T_s) \quad (6.18)$$

A mérlegek, valamint a peremfeltételek definiálása után dinamikus szimulációt alkalmaztam a hőmérleg megoldásához. A fűtőfeszültséget a 39. ábra szerinti program szerint változtattam. Az értékek ebben az esetben a folyamattírányító számítógépen definiált 0-10 értékek a fizikai rendszerre kiadva 0-230 V-nak felelnek meg. A 40. ábra az elektromos fűtés hatását szemlélteti, a hőmérséklet időbeli változását a fűtőszál felületén.

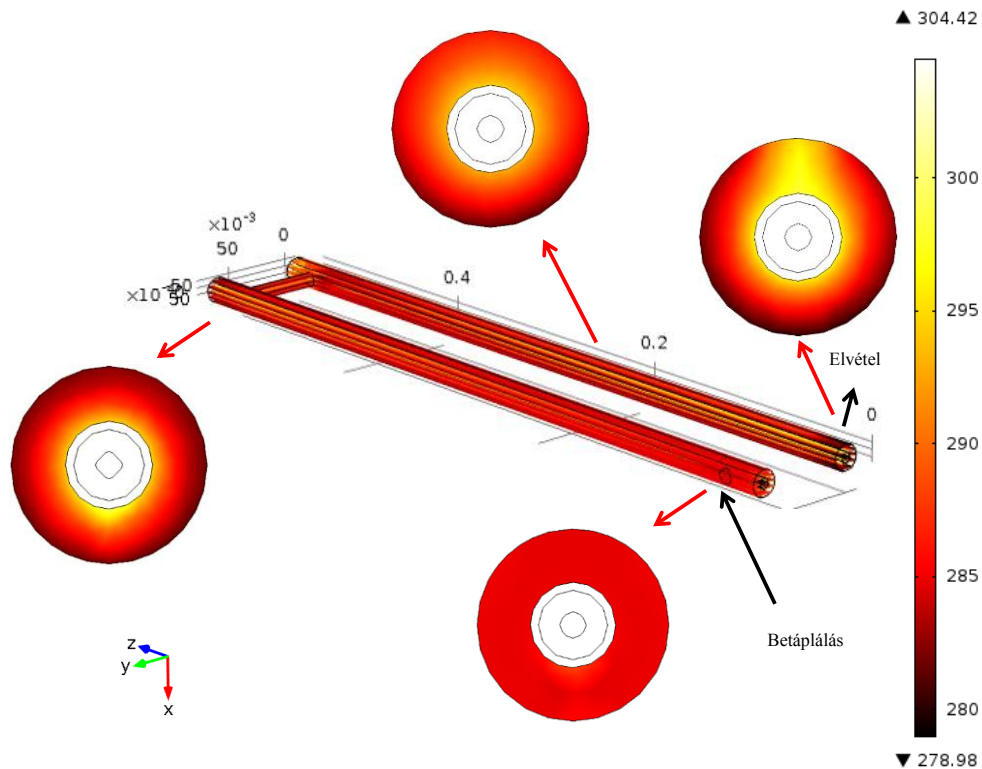


39. ábra Az alkalmazott fűtési program



40. ábra A hőmérséklet [K] változása a fűtőszálban (50,350 s)

A 41. ábra a kapott eredményeket mutatja ($t=350$ s). A hőmérséklet a fűtőszálhoz közel magasabb. A hőmérő pozíció miatt a validációhoz a kilépő peremen detektáltam a hőmérsékletet. A kisebb képek a hőcserélő hőmérsékleti mezejének az x-y szeleteit mutatják a folyadékfázisban az adott pontokban.



41. ábra A hőmérséklet [K] eloszlása a hőcserélőben

Az anyagi adatbázisokat és mérési eredményeket felhasználva leképeztem a hőcserélő CFD modelljét. A modell kimenet és a hőcserélőn tapasztalt kimenet között jelentős különbségeket fedeztem fel, ezért a modell paraméterek finomítása szükséges, amit korrekciós faktorok bevezetésével értem el.

6.1.2 A modell analízise és a modell paraméterek korrekciója

Három különböző vizsgálatot végeztem a modellen. Először a magnézium-oxid elektromos vezetőképességének hatását vizsgáltam meg. Az eredmények azt mutatják, hogy ennek nincs hatása a kilépő hőmérsékletre, sem a dinamikára. Ezután a fűtőszál hővezető képességét, valamint a hőátadási tényezőt vizsgáltam a szilárd és a folyadékfázis között. Az alkalmazott korrekciós tényezők:

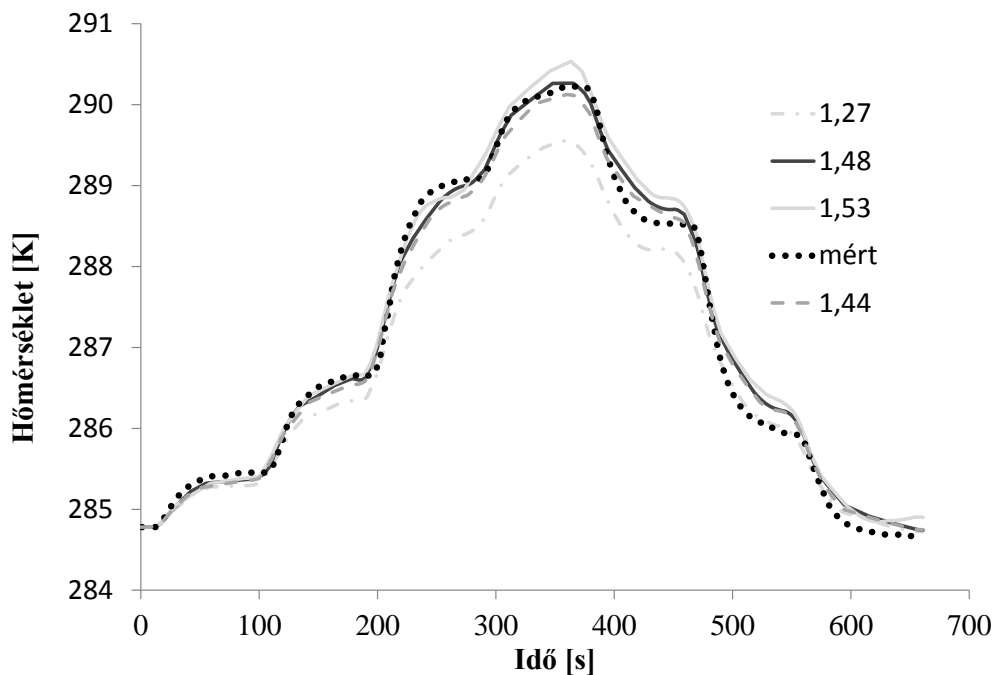
- Hőátadási tényező:

$$\alpha' = \alpha(T) \cdot A_K \quad (6.19)$$

- Fűtőszál elektromos vezetése:

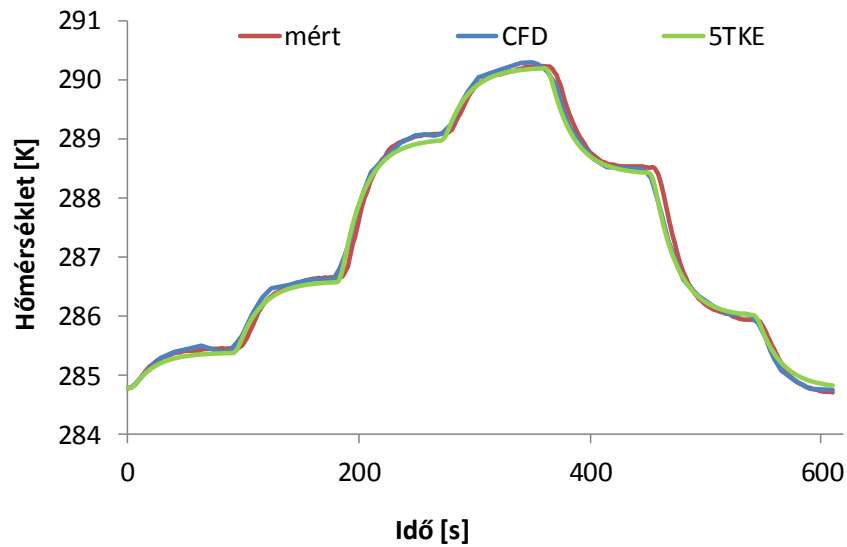
$$\lambda' = \lambda(T) \cdot \lambda_K \quad (6.20)$$

A szimulációs hőmérséklet nagyságát nagyban befolyásolja a fűtőszál elektromos vezetése, így egy parametrikus vizsgálatot végeztem, hogy meghatározzam a megfelelő korrekciós faktort a szimulációs hővezetési tényezőfinomhangolására. A 42. ábra a mért és szimulációval nyert eredményeket mutatja ($\lambda_K = \{1.27 \ 1.44 \ 1.48 \ 1.53\}$). A fűtőszál elektromos vezetése természetesen hatással van a kilépő hőmérsékletre, minél nagyobb annál nagyobb lesz a kilépő hőmérséklet. A szimulációs eredmények alapján 1,44-et választottam korrekciós faktornak.



42. ábra Elektromos vezetés korrekciós faktor kiválasztása

A második analízisben a hőátadási koefficiens korrekcióját számítottam. Az előző esetben azonosított korrekciós tényezőt itt már beépítettem a modellbe. Ebben a lépésben a mérési adatokhoz igazítva korrigáltam a hőátadási tényezőt. A 43. ábra a kapott eredményeket szemlélteti.

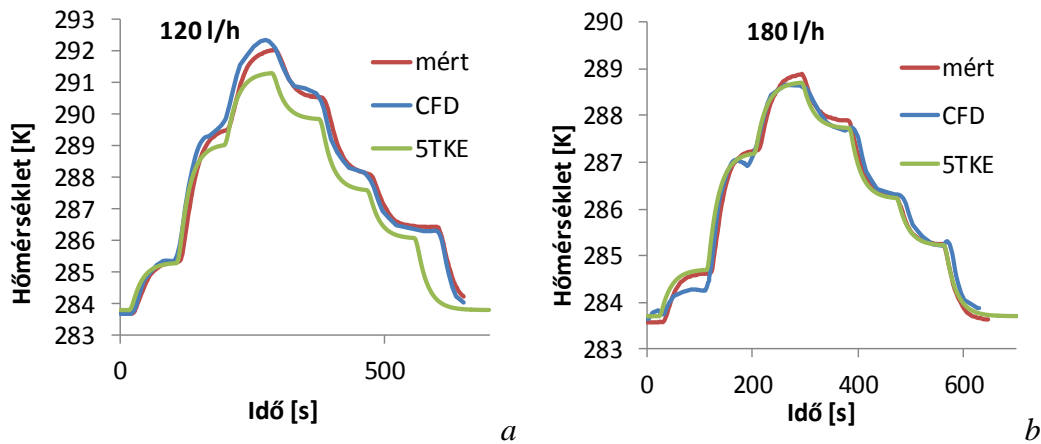


43. ábra A hőátadási tényező korrekciója

Az eredmények alapján 1,8-at választottam korrekciós faktornak. Az eredményeket összevetve egy 5 tökéletesen kevert üstöt tartalmazó kaszkádmoddellel jó egyezés írható le.

6.1.3 Modell validáció

A validációs lépésben 120 és 180 l/h térfogatáramnál vizsgáltam a modell megfelelőségét. A 44. ábra a validációnál kapott eredményeket foglalja össze. A validáció esetében új fűtési programot definiáltam mindkét esetben, hogy teszteljem a szimulátor megfelelő működését. Összevetve a CFD modell esetében kapott eredményeket az 5TKE eredményekkel, az utóbbi esetében jóval rosszabb teljesítményt tapasztaltam. Az 5TKE modellnél kapott nagyobb eltéréseket figyelembe véve az adaptív szabályozás vizsgálatát csak a CFD és a mérésen alapuló esetekre végeztem el. Mivel ebben az esetben nem transzparens reaktorról van szó, a videó feldolgozáson alapuló validációs módszerek nem alkalmazhatóak. A validációt a kilépő hőmérsékletet alapul véve végeztem.

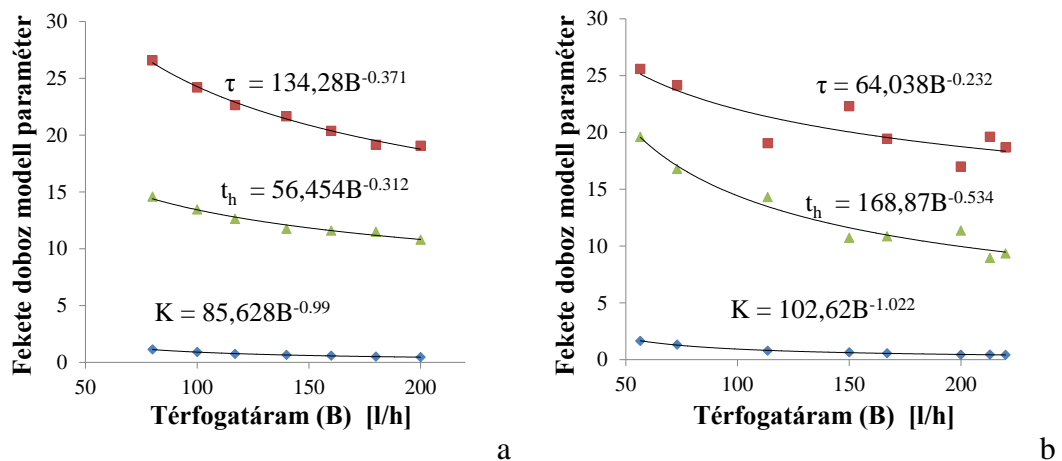


44. ábra Szimulációs és mért adatsorok összehasonlítása modell validáció céljából 120 l/h (a) és 180 l/h (b) térfogatáramoknál

A mért és szimulációs adatsorokban vannak eltérések, azonban jól közelítik a szimulációs eredmények a mért eredményeket.

6.1.4 Adaptív hőmérséklet szabályozás vizsgálata

Ebben a fejezetben arra keresem a választ, hogy a validált CFD modell alkalmas-e a valós rendszert helyettesítve adaptív hőmérséklet szabályozó hangolására. A validált modell segítségével több térfogatáram esetén végeztem szimulációs vizsgálatokat, majd a kapott fűtőfeszültség mint bemenetre, kilépő hőmérséklet mint kimenetre elsőrendű holtidős fekete doboz modelleket illesztettem. A 45. ábra a térfogatáramok és a CFD modell felhasználásával számított fekete doboz modell paraméterek közötti összefüggéseket mutatja.



45. ábra Összefüggés a térfogatáram és a fekete doboz paraméterek között (a) CFD alapú összefüggés, (b) mérés alapú összefüggés

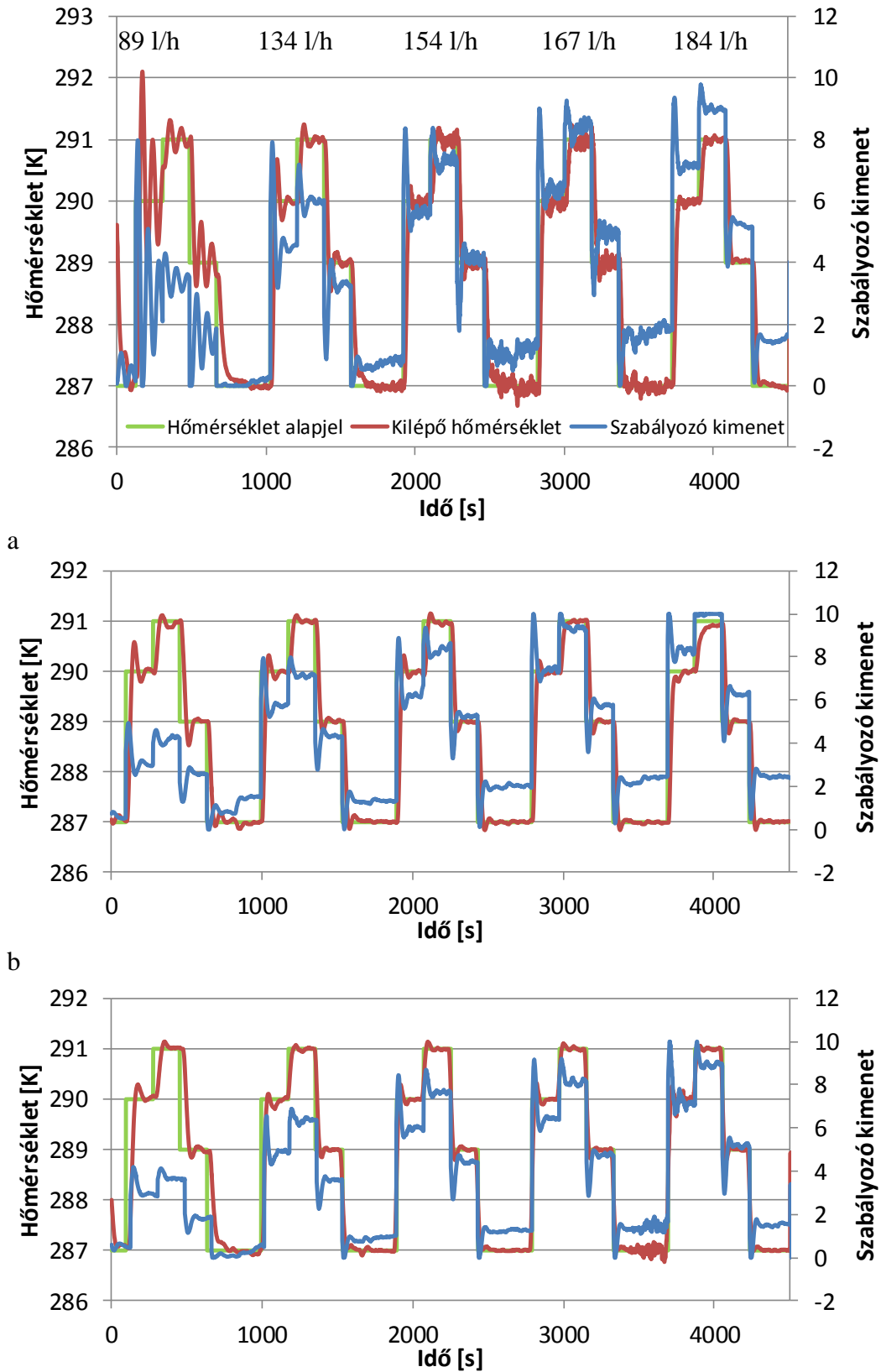
Emellett több fizikai mérés felhasználásával a mérésekből kapott adatok segítségével identifikáltam fekete doboz modelleket. A fekete doboz modellek identifikálásához MATLAB Ident Toolboxot használtam. A CFD modell esetében a holtidőt korrigálni kellett, mivel a folyamatirányító rendszerben tapasztalt adatátvitelből fakadó holtidővel a szimulációban nem számoltam. A fekete doboz modellek felhasználásával szabályozó paramétereket hangoltam ITAE módszer felhasználásával. Ezután már a rendelkezésre állnak azok az összefüggések, amik a térfogatáramok, valamint a szabályzó paraméterei (P, I tag) között állnak fenn. Az így kapott összefüggések beépíthetők a fizikai rendszerbe, adaptív hőmérsékletszabályozó hangolása céljából. Változtattam a térfogatáramokat és az előre definiált fűtési programot (alapjelváltás) implementáltam minden egyes esetben, hogy vizsgáltam az adaptív hőmérsékletszabályozó működését. A CFD alapú szabályozó működését összevettem egy ponton hangolt PI szabályozó, valamint a mérési adatok felhasználásával hangolt adaptív hőmérsékletszabályozó esetében kapott eredményekkel.

Az térfogatáramok a 46. (a) ábrán látható értékek voltak minden esetben. Idővel súlyozott abszolút hibát (ITAE) számoltam mindhárom esetre. A 2. táblázat a kapott eredményeket mutatja.

2. táblázat Az adaptációs vizsgálatok eredményei

Eset	ITAE érték
Egy ponton hangolt PI szabályozó	54300
Mérés alapú adaptív hőmérsékletszabályozás	31780
CFD alapú adaptív hőmérsékletszabályozás	31800

Ahogy a 2. táblázat mutatja, nagyon kicsi különbség van a CFD és a kísérlet alapú adaptív hőmérsékletszabályozás teljesítménye között. Az egy munkaponton hangolt szabályozó a várakozásoknak megfelelően jóval rosszabb teljesítményt mutat, mint az adaptív hőmérsékletszabályozás alkalmazó esetekben.



46. ábra (a) Egy ponton hangolt PI szabályozó (b) CFD alapú adaptív hőmérsékletszabályozás (c) mérés alapú adaptív hőmérsékletszabályozás

Mivel a CFD és a mérés alapú megközelítés szinte azonos eredményt ad, ezért elmondható, hogy a CFD megközelítés jól használható adaptív szabályozási feladatok ellátására. Jó választás lehet azokban az esetekben, amikor limitált a lehetőség a mérésre, vagy a mérés jóval nagyobb költségű, mint a CFD modell elkészítésének költsége.

6.2 Oldó reaktor hibrid CFD-cellás modellezése

Ebben a részben egy oldó reaktor modellezését mutatom be, amely feladat egy részletes modell megalkotásával oldható meg. Első lépésben a kinetikát identifikáltam, majd a hidrodinamikai modelleket képeztem le COMSOL Multiphysicsben. A hidrodinamikai modell segítségével nyert adatok felhasználásával meghatároztam a cellás modell paramétereit. A kinetikai paramétereket, valamint a hidrodinamikai modellből számított elosztási arányokat felhasználva elvégeztem a berendezés üzemeltetési vizsgálatát.

6.2.1 Kinetika identifikálása

Két fő reakció játszódik le a rézdrót savas pH-jú FeCl_3 oldatba helyezésekor, aminek a kinetikai paramétereit meg kell határozni. A kinetikai paraméterek meghatározásához három különböző hőmérsékleten végeztem méréseket (30-45-60 °C). Az oldószer koncentráció (FeCl_3) 0,2, 0,3, 0,4 mól/l (M) volt. A kilenc mérést felhasználva végeztük az identifikációt, az eltérések összegét minimalizálva. Feltételezett reakciómechanizmus



A fenti komponensek koncentrációjának, ill. a rézdrót tömegének időbeli változása a megfelelő komponens és tömegmérlegekkel írható le (6.23-6.29).

$$\frac{dm}{dt} = -V_0 \cdot (r_1 + r_2) \cdot M_{\text{Cu}} \quad (6.23)$$

$$r_1 = k_{01} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A1}}{R \cdot T}\right) \cdot (c_{\text{Fe}^{3+}})^{n_1} \quad (6.24)$$

$$r_2 = k_{02} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A2}}{R \cdot T}\right) \cdot (c_{\text{Cu}^{2+}})^{n_2} \quad (6.25)$$

$$\frac{dc_{\text{Fe}^{3+}}}{dt} = \frac{-2 \cdot A \cdot r_1}{V_0} \quad (6.26)$$

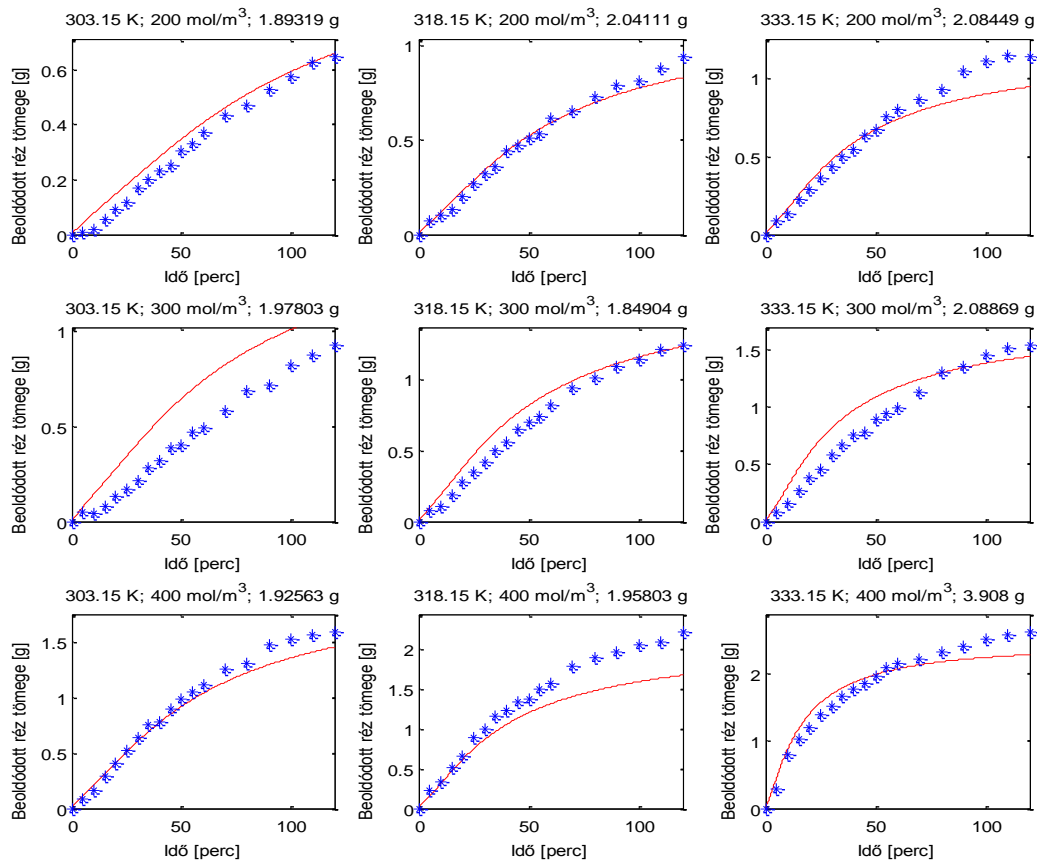
$$\frac{dc_{\text{Fe}^{2+}}}{dt} = \frac{2 \cdot A \cdot r_1}{V_0} \quad (6.27)$$

$$\frac{dc_{\text{Cu}^{2+}}}{dt} = \frac{A \cdot (r_1 - r_2)}{V_0} \quad (6.28)$$

$$\frac{dc_{\text{Cu}^+}}{dt} = \frac{2 \cdot A \cdot r_2}{V_0} \quad (6.29)$$

Particle Swarm Optimization algoritmus felhasználásával identifikáltuk a kinetikai paramétereket, amely feltételes szélsőértékkeresési feladat megoldására alkalmas [93]. A kapott eredményeket a 47. ábra mutatja.

A szimulációt a mérésekkel megegyező ideig folytattam a 32. fejezetben bemutatott szakaszos üzemű reaktorban. A térfogatot változtattuk a kísérleti eljárásnak megfelelően (1 ml mintákat vettem Atomabszorpciós (AAS) vizsgálatokhoz).



47. ábra Réz oldódási kinetika paramétereinek meghatározása FeCl₃ oldószer esetén

Mivel a minták térfogatával csökkentettem a reakcióelegy térfogatát, ezért ezzel a térfogatcsökkenéssel, valamint tömegcsökkenéssel (Cu) is számoltam a

modellben. Az identifikációval kapott kinetikai paramétereket a 3. táblázat mutatja.

3. táblázat Az identifikált kinetikai paraméterek

Paraméter	FeCl ₃	Mértékegység
k ₀₁	0,0038	mol·m ⁻² ·s ⁻¹ ·m ³ⁿ¹ ·mol ⁻ⁿ¹
E _{a1}	18018	J·mol ⁻¹
n ₁	1,43	1
k ₀₂	31,92	mol·m ⁻² ·s ⁻¹ ·m ³ⁿ² ·mol ⁻ⁿ²
E _{a2}	43834	J·mol ⁻¹
n ₂	2,32	1

6.2.2 Az oldó reaktor hidrodinamikai modellje

Az oldó reaktor hidrodinamika modelljét a kisebb áramlási sebességek miatt lamináris áramlást leíró egyenletekkel képeztem le. Egy folyamatos működésű reaktorról van szó, betáplálással és elvétellel, valamint egy forgó perforált dobbal, amiben a reakció játszódik le. Mivel a dobon belül is létezik a folyadéktér, ezért ebben az esetben két külön rész definiálása szükséges, és a modell bővül a forgó és álló fázis határfelületének peremfeltétel egyenleteivel. Az első két egyenlet a kontinuitási (5.1) és a forgást leíró (5.2) egyenlet. Ezen kívül a modell az áramlást leíró Navier-Stokes egyenletet tartalmazza.

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-p \cdot \mathbf{I} + \mu \cdot \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) - \frac{2}{3} \mu \cdot (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{I} \right] + \mathbf{F} \quad (6.25)$$

A kevert berendezések modellezése során megismert peremfeltételeket definiáltam a forgó falra, annyi különbséggel, amely peremet a reaktor belsejében elhelyezkedő dobra definiáltam.

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w \quad (6.26)$$

$$\mathbf{u}_w = \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) \Big|_x \quad (6.27)$$

A forgó falhoz leegyszerűsödik a fal peremfeltétel is is (reaktor külső részei).

$$\mathbf{u} = 0 \quad (6.28)$$

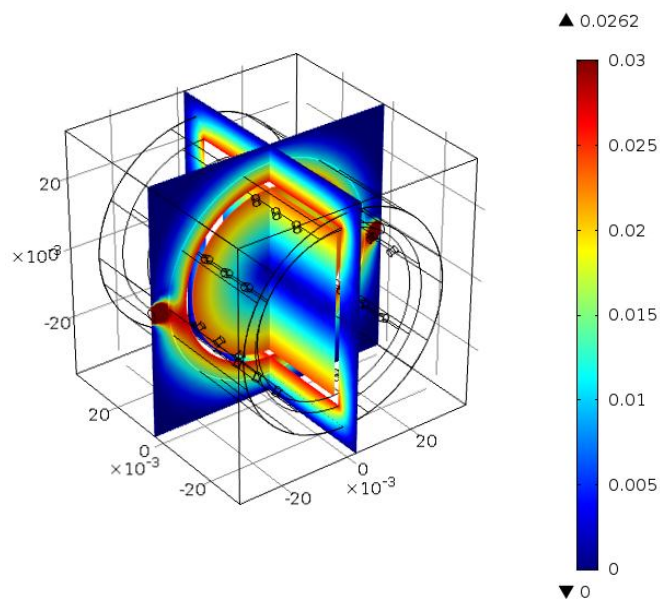
Betáplálás esetén átlagsebességet definiáltam,

$$\mathbf{u} = -u_0 \cdot \mathbf{n} \quad (6.29)$$

míg az elvétel esetében nyomásspecifikációt.

$$p = p_0 \quad (6.30)$$

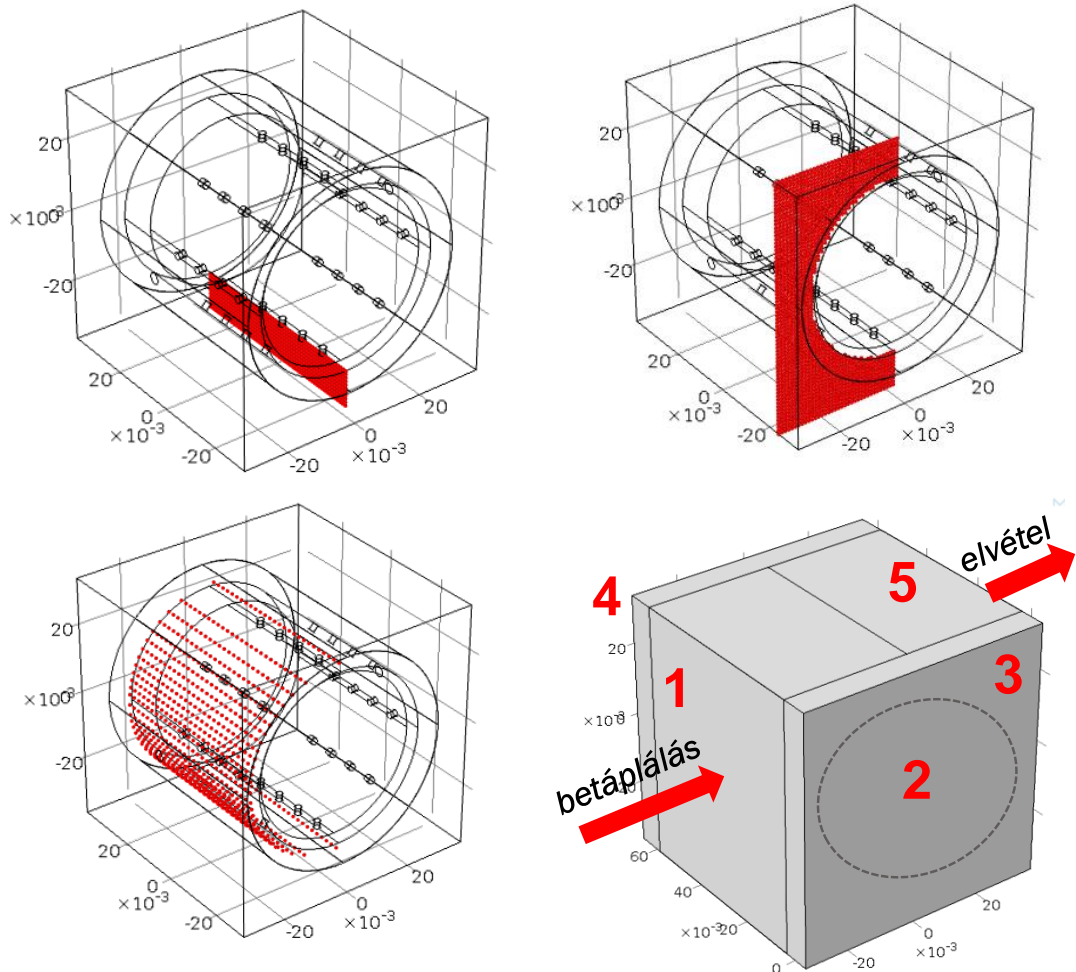
Az 48. ábra az impulzuszámológép megoldását mutatja, a kialakuló sebességi teret.



48. ábra Sebességi tér [m/s] az oldó reaktorban

A cellás modell definiálásához a reaktor geometriát öt főrésze osztottam. A reaktordob (2) a középső forgórészt, a betáplálási zóna (1) a betáplálás és a dob közötti részt (a reaktor feléig) míg az elvételi rész (5) az elvételtől a dobig tartó részt foglalja el (a reaktor feléig). A maradék két oldalsó zóna(3-4) feltételezhetően holtterként viselkedik. A 49. ábra a határfelületeket mutatja. A két síkidom típusú határfelület mellett, egy fél hengerpalást szerű hálót is definiáltam a forgódob peremén fellépő változások leírására. A síkok esetében mindig az

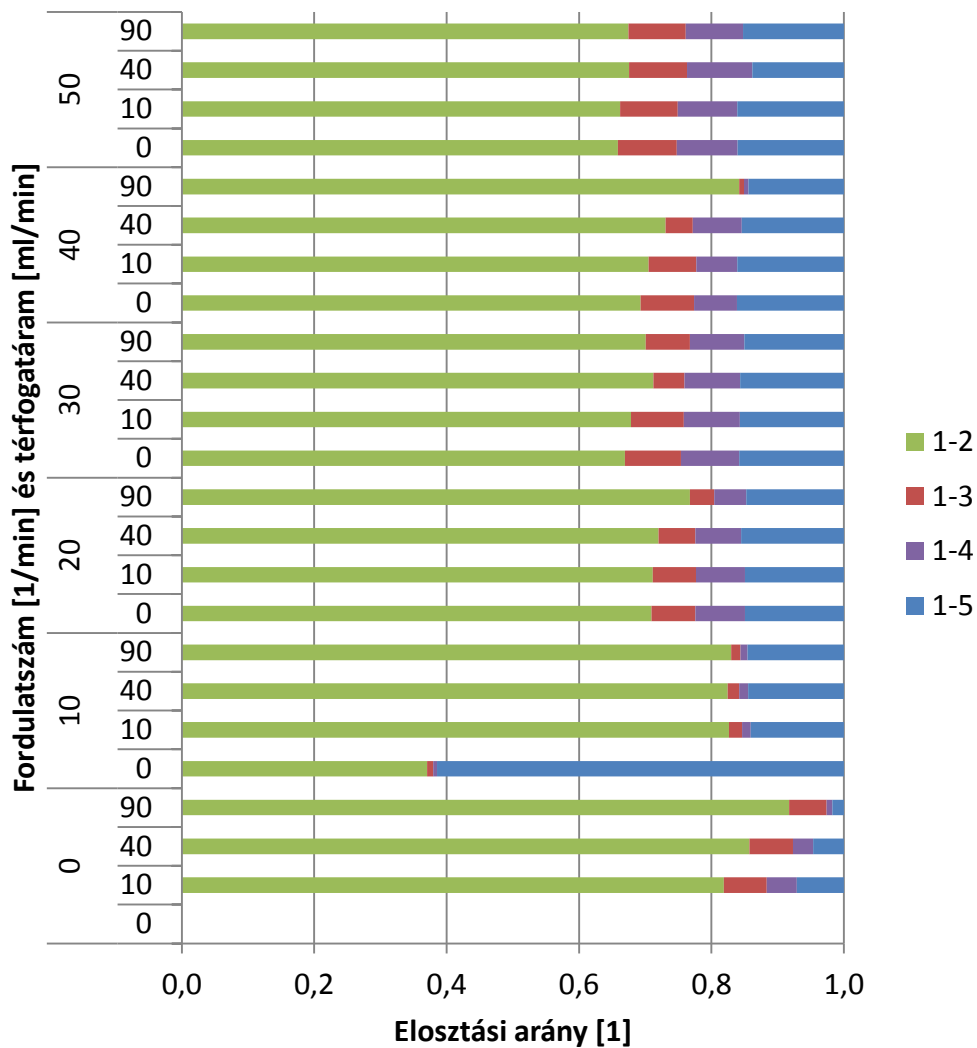
adott síkra merőleges sebességvektorokat számítottam (x illetve y), míg a hengerpalástos esetekben x irányú sebességvektort számítottam.



49. ábra A sebességvektorok kigyűjtéséhez használt határfelületek és a reaktor felosztása

A megfelelő határfelületeken számítottam az átlépő sebességvektorokat, majd a pozitív és negatív átlagsebességekből számítottam az elosztási arányokat. Vegyük példaként a 3-as cella elosztási arányait. Definíció szerint az y irányú sebességkomponenseket számítom. A belépő áramok a peremeken pozitív előjellel szerepelnek, míg a kilépők negatívval (koordinátarendszer miatt). Az 1. cellába kilépő sebesség átlagérték 0.0033 m/s, az 5. cellába kilépő 0.0041 m/s. Ezeket ezután normáljuk a perem felületével (0.001469 m^2), majd az egyes peremeken vett térfogatáramértékeket osztjuk az összes kilépő térfogatáram összegével. A kapott elosztási arányok ebben az esetben: $\alpha_{3-1}=0,446$ és $\alpha_{3-5}=0,554$.

Az elosztási arányok esetében az egyes peremek felületét szorozva az adott peremen vett cellából kilépő átlagebességgel, kiszámítható az adott peremen kilépő térfogatáram. Ezt elosztva az adott cellából kilépő összes térfogatárammal az elosztási arány meghatározható. Az így kiszámított elosztási arányok ezek után már közvetlenül alkalmazhatók a cellás modellben. Az impulzusrétegek megoldását öt különböző fordulatszámnál (10-20-30-40-50 1/min) végeztem el. Ezután megvizsgáltam különböző fordulatszámok, betáplálási térfogatáramok, valamint a furatátmérők és furatszámok hatását az elosztási arányokra.



50. ábra A fordulatszám és betáplálási sebesség hatása a belépő cella elosztási arányaira

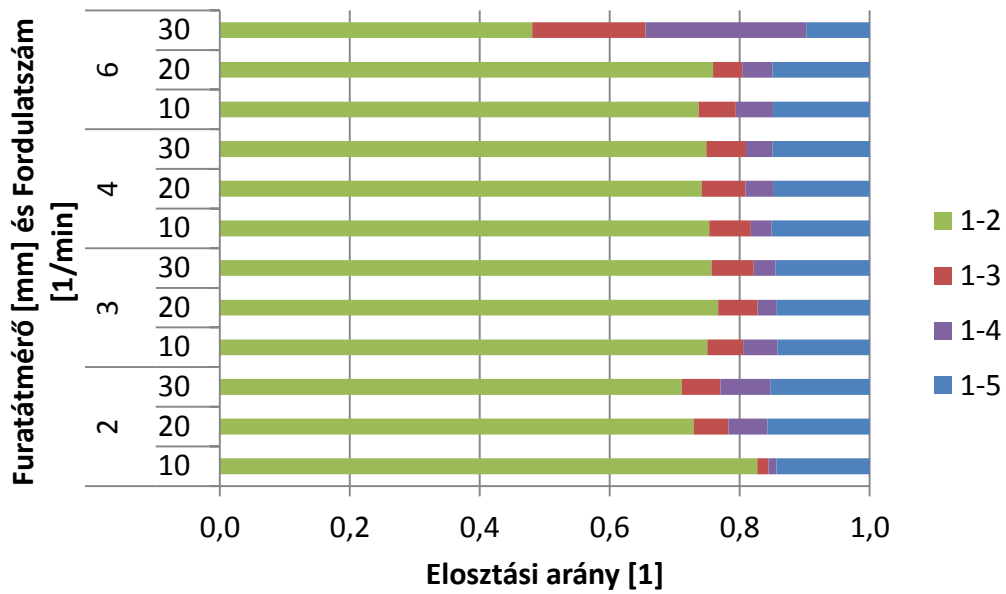
A fordulatszám és betáplálási sebesség hatásait az elosztási arányokra az 50. ábrán mutatom be. Az elosztási arányok számítását minden esetben elvégeztem, és az egyes eseteket összevetettem. Szemléltetésképpen az egyes

vizsgálatok esetén az 1 cella elosztási arányait mutatom be, a következtetéseket azonban az összes elosztási arányt figyelembe véve közlöm.

Az 50 ábrán a fordulatszámok (0-50 1/min), valamint a betáplálási térfogatáramok (0,10,40,90 ml/min) láthatóak. A jelmagyarázatban látható értékek az 1-es cellából a többi cellába történő áram elosztási arányát fejezik ki. A fordulatszám és betáplálási sebesség növekedésének hatásai a következők:

- Adott fordulatszám és furatátmérő mellett a betáplálási sebesség növelésével növekszik a reaktordobba áramlás aránya, és csökken az oldalsó reaktorcellákba irányuló áramlás mértéke.
- Az elvételi cellával való kapcsolatra sem a betáplálási térfogatáram, sem a fordulatszám növelésének nincs jelentős hatása.
- A fordulatszám növelésével az első cellából a reaktorba történő áramlás mértéke csökken, az oldalsó cellákba történő áramlás mértéke nő.
- A reaktordobból történő kiáramlásra, a forgás nélküli eseteken kívül, nincs jelentős hatása sem a fordulatszámnak, sem a betáplálási térfogatáramnak.
- Az oldalsó cellákból történő kiáramlás a térfogatárammal növekednek, majd csökkennek, a fordulatszámnak nincs egyértelműen elkülöníthető hatása.
- A térfogatáram növelésével az oldalsó cellákba való áramlás a kilépő cellából kismértékben csökken.
- A kilépő áram aránya csökkenő tendenciát mutat az összes az 5. cellából kilépő áramhoz képest (a kilépő áramot a térfogatáramból származtattuk).
Nagyobb térfogatáramok esetén lehet jelentősége (0,21 m/s).

A következő vizsgálat során a reaktordobon elhelyezett furatok átmérőjének hatását vizsgáltam. Az eddigi vizsgálatokban 2 mm-es furatátmérővel számoltam. Emellett 3, 4 és 6 mm-es furatátmérő esetén is vizsgáltam az elosztási arányok változását 10, 20 és 30 1/min-es fordulatszám esetén. Az 51. ábra a kapott eredményeket szemlélteti.

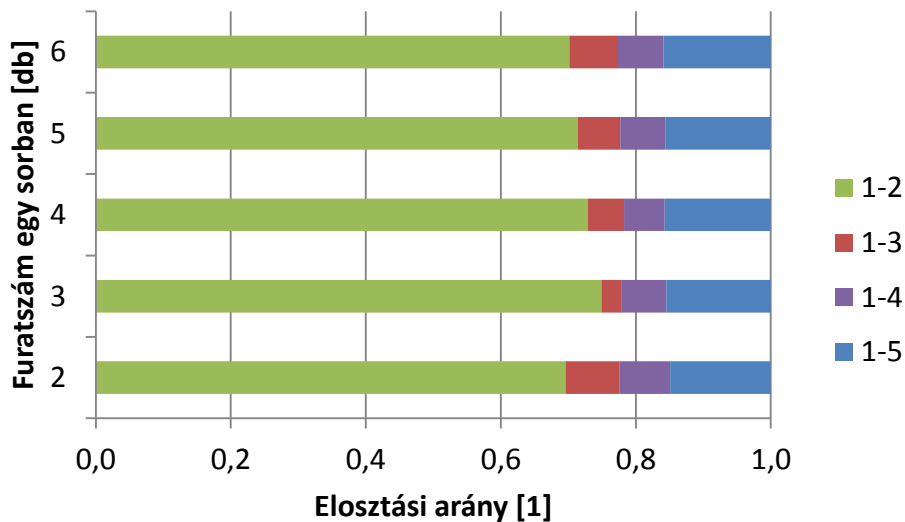


51. ábra A fordulatszám és furatátmérő hatása a belépő cella elosztási arányaira

Az 51. ábra alapján következő megállapításokat tettem:

- A furatátmérő növelésével a 3-5 irányú elosztási arány növekedik.
- A kilépő áram hatása a furatátmérő növekedésével jelentősebbé válik.

Vizsgáltam a furatszám hatását az elosztási arányokra. 2-től 6-ig vizsgáltam az egy sorban lévő furatok számát. A kapott eredményeket az 52. ábra mutatom be.



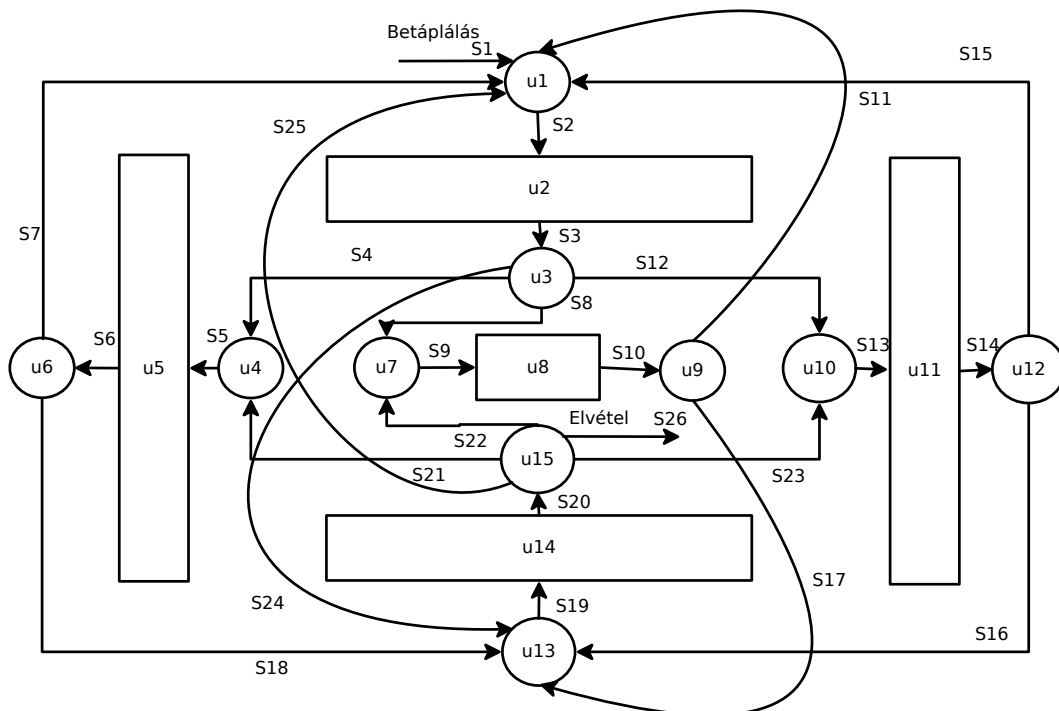
52. ábra Furatszám hatása a belépési cella elosztási arányaira

A következő megállapításokat tettem:

- A belépő cellából az oldalsó cellákba történő áramlás minimumot mutat a 3, illetve a 4 furat darabszámnál.
- A második és harmadik cella elosztási arányai nem változnak szignifikánsan a furatszám változtatásával.
- A negyedik cella esetében az elsőbe áramlás minimumot mutat 4-es furat darabszámnál.
- A kilépő cellából a negyedik cellába történő áramlás maximuma szintén 4-es furatszámánál található.

6.2.3 A reaktor cellás modellje

A cellás modellt a valós berendezés működésének elemzése alapján építettem fel, struktúráját az 53. ábra mutatja. A cellás modell struktúra esetében a cellákat folyamatosan számoztuk, az az előzőekben (49 ábra) tapasztalt elnevezés megváltozik. (u1, u4, u7, u10, u13 –keverők, u3, u6, u10, u12, u15 – elosztók, 1=>u2, 2=>u8, 3=>u5, 4=>u11, 5=>u13).

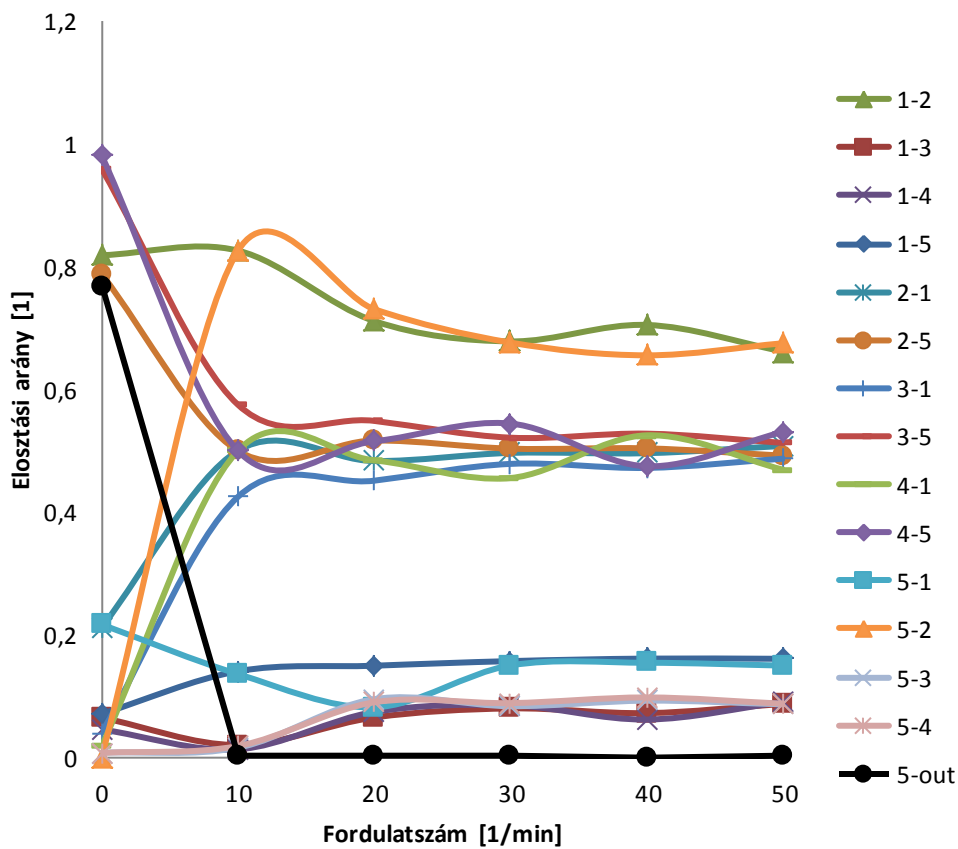


53. ábra A leképezett cellás modell struktúra

A cellás modell esetében a hidrodinamikai modellből nyert elosztási arányokra vonatkozó összefüggésekkel számoltam a fordulatszám alapján az elosztási arányokat. Az 54. ábra a fordulatszámok és elosztási arányok

összefüggését bemutató görbéket szemlélteti. Minden esetben polinomos összefüggéssel (másod, ill. harmadfokú) számoltam az elosztási arányt, így beleépítve a fordulatszámfüggést a cellás modellbe.

A kilépő áram értékét a fizikai berendezés adatai alapján számítottam, és definíció szerint megegyezik minden fordulatszám esetében (a betáplálási/elvételi térfogatáram egyenlő minden esetben). Természetesen, a betáplálási térfogatáram változásával változik ezen áram nagysága is.

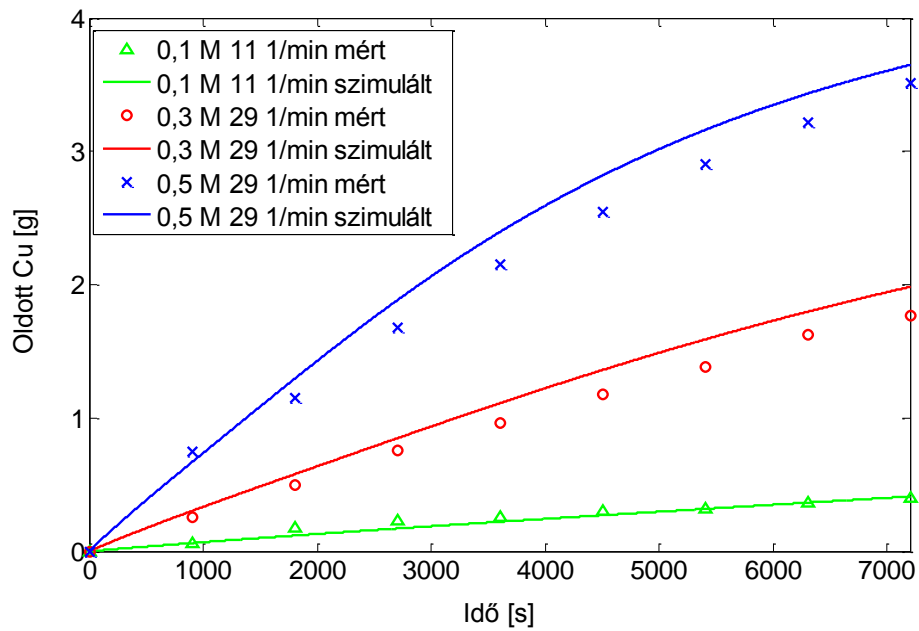


54. ábra Az elosztási arányok számítása a cellás modellben

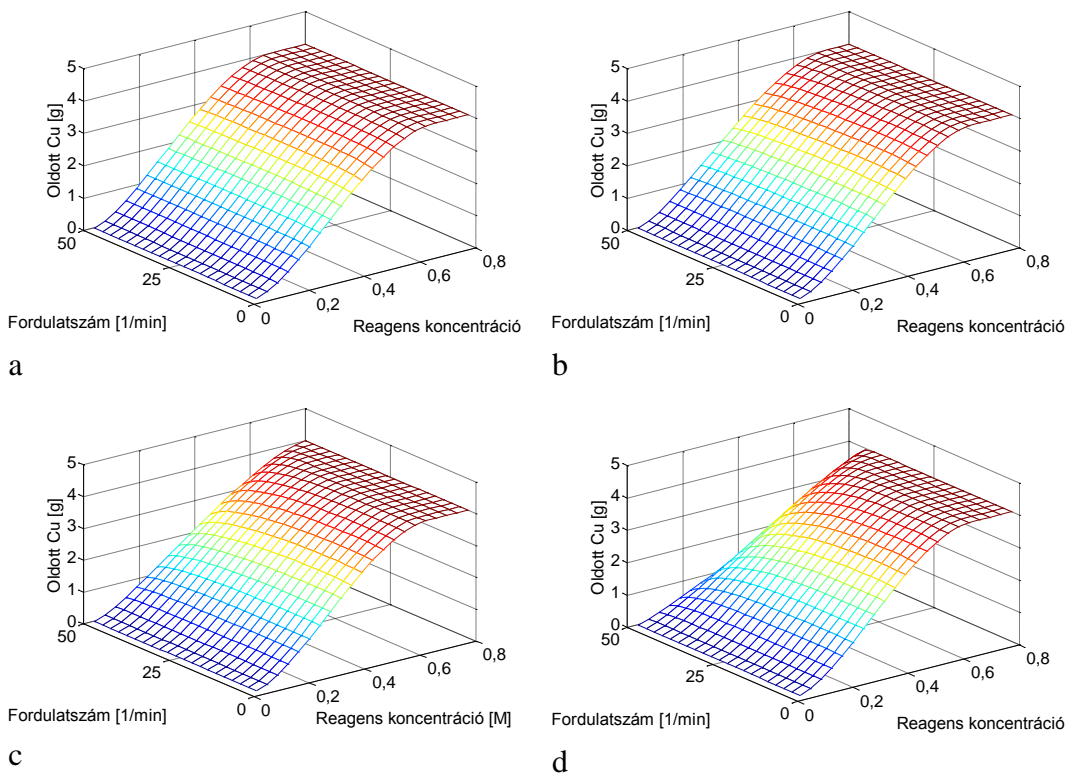
Megállapítható, hogy a legnagyobb változás a kilépő áram esetében figyelhető meg, mivel ez az áram minden fordulatszám esetében azonos értékű (a kilépési térfogatáramból számolva), míg a fordulatszám növekedésével az adott cellából visszakeveredő áramok nagysága megnő, míg a kilépő áram aránya csökken.

A cellás modell paramétereinek meghatározása után vizsgáltam a modell megfelelőségét. Az 55. ábra a modell validálását mutatja többféle fordulatszám

kezdeti koncentráció esetén. A mért eredmények jó egyezést mutatnak a szimulációs eredményekkel, ezzel is bizonyítva a modell megfelelőségét.



55. ábra A cellás modell validálása különböző üzemeltetési paraméterek esetén

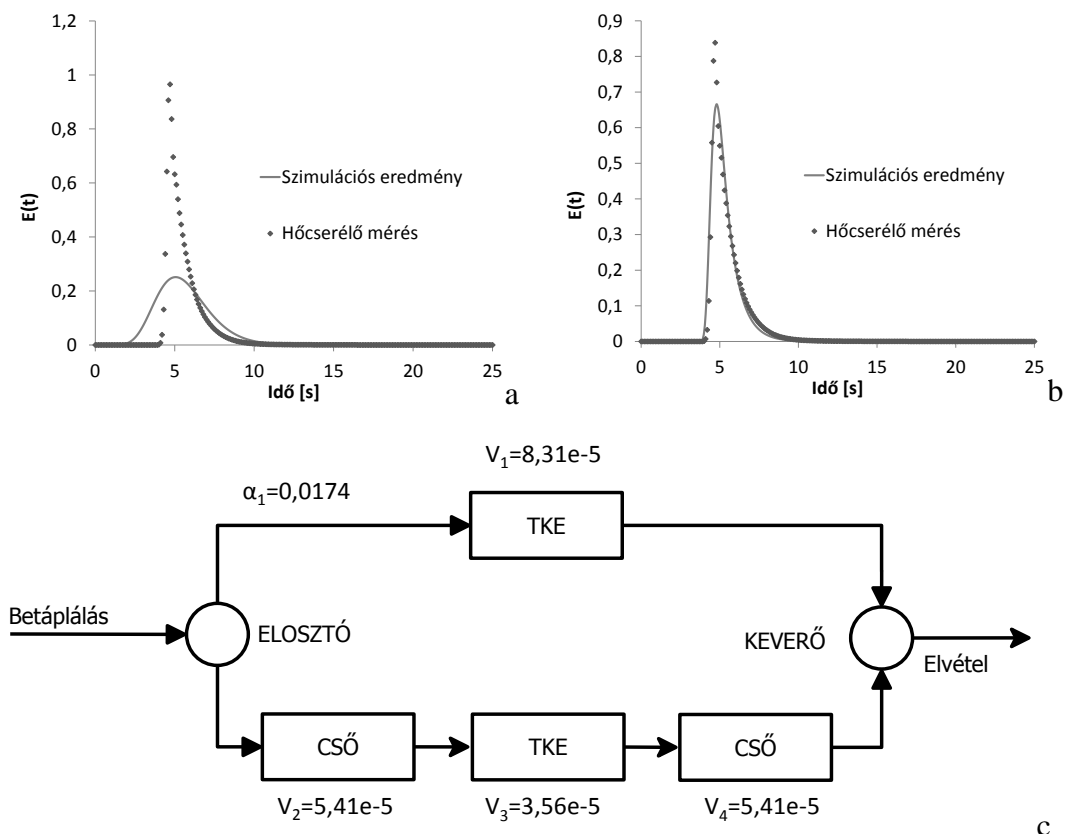


56. ábra A fordulatszám és a reagens koncentráció hatása (a) 10 ml/min b) 20 ml/min c) 30 ml/min d) 40 ml/min térfogatáram

A fordulatszám és a reagens koncentráció mellett vizsgáltam a betáplálási sebesség hatását is. Az 56. ábra négy különböző térfogatáram esetén mutatja a szimulációs vizsgálattal kapott termékkoncentrációkat. A reagens koncentráció növelésével egyértelműen és nagymértékben növekedik a termékkoncentráció. A fordulatszám növelésének nincs ennyire egyértelmű hatása, viszont elmondható, hogy a térfogatáram növelésével a fordulatszám növelésének hatása egyértelműen növekszik. Az optimum 0.6 M koncentráció és alacsony (10-20 1/min) fordulatszámnál található.

6.3 Cellás modell struktúra identifikáció alkalmazása a valós rendszerekre

A laboratóriumi hőcserélő és az oldó reaktor esetében vizsgáltam a struktúra identifikációs algoritmus működését. A hőcserélő esetében CFD modell segítségével végeztem a tartózkodási idő vizsgálatot.

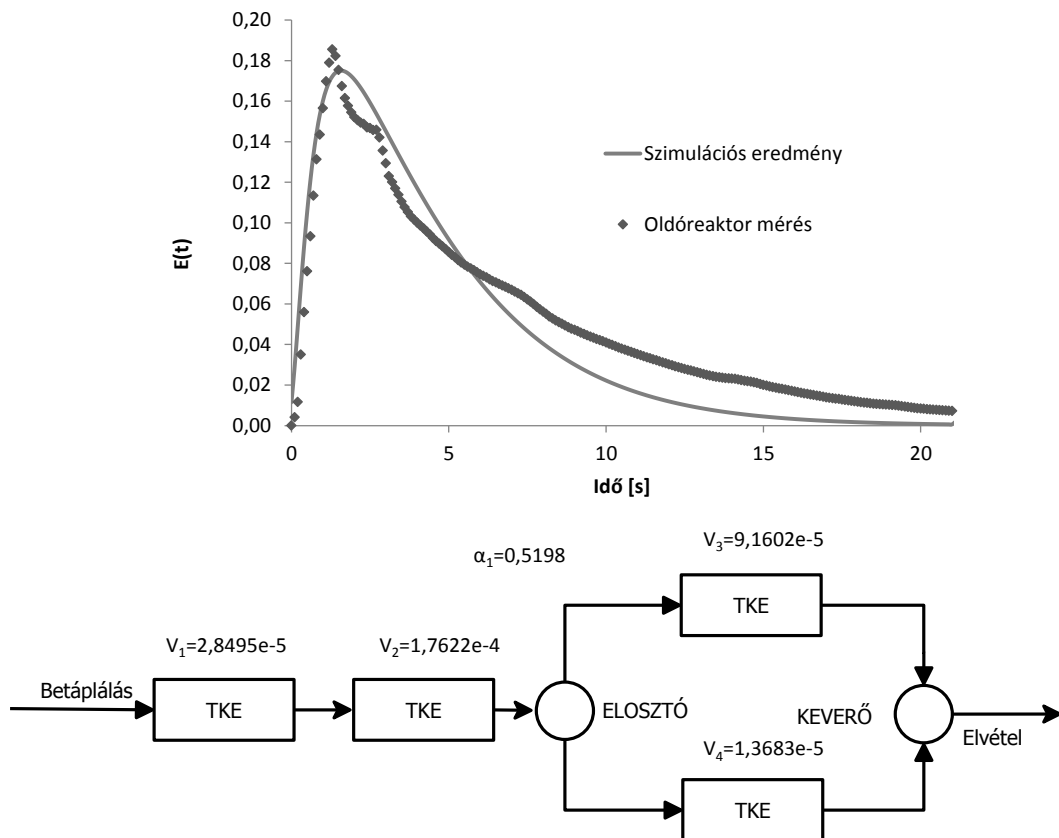


57. ábra a) Holtidő nélküli struktúra identifikáció eredménye b) holtidős struktúra identifikáció eredménye c) az elfogadott modell struktúra és paraméterek

Abban az esetben, ha holtidő nélküli rendszerként identifkáljuk a cellás modellt nem megfelelő eredményt kapunk (57. a ábra), azonban holtidő alkalmazásával az identifkált cellás modell pontossága nagyban növelhető (57. b ábra). Az 57. ábrán a holtidőt tartalmazó cellás modell struktúrája látható.

Az eredményül kapott cellás modell egy párhuzamos ágon egy TKE-t (~2%-elosztási arány), valamint a másik ágon sorba kapcsolt CSŐ-TKE-CSŐ elemet tartalmaz. Megállapítható, hogy a struktúra identifkációs algoritmus alkalmas valós rendszerek validált CFD modelljén végzett 'mérések' feldolgozására, azonban a valós rendszeren tapasztalt holtidővel mindig számolni kell.

Az oldó reaktor esetében konduktometriás mérés segítségével végeztük a tartózkodási idő mérést. 1 ml 1 mol/dm³-es KCl oldatot injektáltunk a rendszerbe 20 ml/min cirkulációs sebesség mellett. Az eredményeket az 58. ábra szemlélteti.



58. ábra Az oldó reaktor tartózkodási idő függvényére végzett struktúra identifkáció eredménye és a kapott cellás struktúra

A kapott struktúra esetében felfedezhetőek hasonlóságok a heurisztikus modellel. Természetesen a heurisztikus modell esetében alkalmazott nagyszámú

cellát ebben az esetben nem lehetséges leképezni, mivel 15 cellára elvégezve a kalkulációt kombinatorikus robbanás lépne fel. Az első két cella megfeleltethető lehet a belépő és a reaktor cellának, míg a két oldalsó cella a párhuzamos eseteknek fogható fel. Az illeszkedés nem olyan pontos, mint a teszt esetekben, vagy a vízmelegítő szimuláció esetén, azonban tekintve, hogy ebben az esetben is számolnunk kell a mérési pontatlansággal és zajjal, elfogadhatónak tekinthető.

6.4 Következtetések

A fejezet első felében egy laboratóriumi léptékű hőcserélő részletes CFD modelljét mutatom be. A fizikai kísérletek alapján, korrekciós faktorok segítségével, pontosítottam a modell paramétereit, majd validáltam a modellt. A fő cél az volt, hogy a fizikai rendszer helyett használjam ezt a modellt adaptív szabályozási feladatok ellátásában. Fekete doboz modellek identifikálásával, majd azok felhasználásával definiáltam összefüggéseket a térfogatáramok valamint elsőrendű holtidős rendszermodellek között, majd ezek segítségével szabályozó paramétereit hangoltam. A tapasztalatok azt mutatják, hogy a CFD modellek alkalmazása megfelelő módszer a költségcsökkentésre azokban az esetekben, amikor nem áll rendelkezésre elég idő vagy erőforrás a fizikai mérésen alapuló adaptív szabályozás megvalósítására.

A fejezet második felében bemutatott kutatás során oldó reaktor hibrid CFD-cellás modelljét képeztem le réz oldási folyamat modellezésére és a berendezés üzemeltetési paramétereinek vizsgálatára. A kifejlesztett módszer alkalmas arra, hogy az identifikált reakciók lejátszódását a fizikai rendszernek megfelelő hidrodinamikai feltételek mellett vizsgálja. A kinetikai identifikálás után a részletes kinetikát beépítettem egy cellás modellbe, aminek struktúráját heurisztikus megfontolások alapján írtam fel. A CFD modell érzékenységvizsgálat eredményeként kapott összefüggések alapján számoltam a cellás modell elosztási arányait, így hozva létre egy olyan hibrid CFD-cellás modellt, amely alkalmas a fordulatszám változás kezelésére. Ezután megvizsgáltam a kiindulási reagens koncentráció, valamint a fordulatszám hatását a részletes modell segítségével optimalizálva a folyamatot. A fejezet zárásaként a két fizikai berendezés esetén bemutatásra került a 4. fejezetben bemutatott struktúra identifikációs algoritmus alkalmazása is.

7. Összefoglalás

A dolgozatban kevert berendezések modellezési eszköztárának bővítési lehetőségeit vizsgáltam. A cellás modell struktúra és paraméterek identifikálásra alkalmas algoritmusok mellett validálási módszereket fejlesztettem. A kapott megfelelő pontosságú modellek működését és felhasználhatóságát mutattam be több alkalmazási példán keresztül.

A cellás modellek esetében identifikálásról struktúra és modell paraméter esetében is beszélhetünk. A cellás struktúra meghatározása után nyílik lehetőség a modell paraméterek meghatározására. A struktúra identifikáció többféleképpen történhet, valamilyen struktúra identifikációs algoritmus, vagy heurisztikák alkalmazásával. Kvalitatív trend analízisen alapuló struktúra identifikációs algoritmust fejlesztettem, amely alkalmas mérési adatsor felhasználásával elfogadható pontosságú cellás modell illesztésére. Az algoritmus működését több teszt adatsoron vizsgáltam, igazolva megfelelő működését, valamint alkalmazhatóságát akár komplex struktúrák egyszerű cellás modellel való leírása területén is.

A modellépítés mellett kiemelt fontosságú a modellek validálása. Videó felvétel alapú validációs módszereket, algoritmusokat, valamint azokat megvalósító programokat fejlesztettem. A CFD modellek többek között keverési idő mérések alkalmazásával validálhatóak valamint szemcsekövetési módszerek felhasználásával jellemezhetőek. Abban az esetben, ha ehhez egy videó felvétel alapú megközelítést társítunk, nagyban megnövekszik a mérések automatizálhatósága és reprodukálhatósága.

Két alkalmazási példán - egy hőcserélő adaptív szabályozása, valamint egy oldó reaktor modellezése kapcsán - mutattam be a megfelelően paraméterezett és validált CFD modellek alkalmazási lehetőségeit. A hőcserélő adaptív szabályozása során igazoltam, hogy CFD modellek alkalmazásával, a tisztán mérésen alapuló adaptív szabályozáshoz hasonló eredmény érhető el, kevesebb mérés felhasználásával

Az oldó reaktor példáján egy összetett mérnöki probléma megoldását mutattam be. A hidrodinamikai modell CFD leképezésével lehetőség nyílt az áramlási kép számítására. Ezután a CFD modelltől nyert sebességi értékek

segítségével cellás modell elosztási arányait definiáltam. Egy rezoldási kinetikát alapul véve, a cellás modellt a megfelelő reakciókkal bővítettem, majd vizsgáltam az üzemeltetési paraméterek hatását a termékkoncentrációra. Mindkét példa jól bizonyítja, hogy a CFD modellek széles körben használhatóak mérnöki feladatok megoldásának támogatására.

A dolgozatban több aspektusból is megvizsgáltam a kevert vegyipari berendezések modellezését. Mind a struktúra identifikáció, mind a validálás területén sikerült olyan eszközöket fejleszteni, amik megkönnyítik a kevert berendezések modellezését. A két alkalmazási példa esetén sikerült olyan új megközelítéseket, valamint technikákat kidolgozni, amik elősegítik az információátvitelt a különböző típusú modellek között.

Új tudományos eredmények

1. Tézis: Bemutattam, hogy kvalitatív módszereket és a valós rendszeren elvégzett hidrodinamikai méréseket alapul véve a javasolt algoritmus alkalmas a rendszer cellás modelljének identifikálására.

- a. Kidolgoztam egy megoldási algoritmust, ami automatikus módon képes kvalitatív epizódokból származtatott egyedi szekvenciák felhasználásával cellás modellek struktúra és paraméter identifikációjára, így megkönnyítve a cellás modellek létrehozását, használatát.
- b. A megfelelő cellás modell struktúra meghatározása során olyan alapvető elvek, megfontolások alkalmazását javasoltam, amelyek megkönnyítik az adott modell struktúra megfelelőségének eldöntését. Ezen elvek és megfontolások helyességét mérnöki megfontolások alapján igazoltam.
- c. A javasolt algoritmus alapján egy programot készítettem, és alkalmazhatóságát szimulációs vizsgálatokkal igazoltam. A kifejlesztett módszer alkalmas a széles körű felhasználásra, azonban korlátot jelent magas cellaszámnál a kombinatorikus robbanás lehetősége.

Kapcsolódó publikációk: 6,9, 14, 24

2. Tézis: Videó feldolgozáson alapuló keverési idő és szemcsekövetési módszerek alkalmazásával olyan módszereket fejlesztettem, melyek alkalmasak kevert berendezések CFD modelljének minősítésére transzparens falú berendezésekben.

- a. Kidolgoztam egy kísérleteken alapuló keverési idő mérési, valamint egy videó felvételen alapuló validálási módszert. Az általam javasolt módszer alkalmas arra, hogy minimális emberi beavatkozás mellett az elkészített felvételeken időben kövesse a kevert elegy homogenitásának változását és ez alapján keverési időt számítson. A módszer megbízhatóságát a szimulációs, valamint a mérési eredmények összehasonlításával igazoltam különböző keverőelem és fordulatszám alkalmazása esetén.
- b. Szemcsekövetés alapú módszert fejlesztettem kevert berendezések CFD modelljének kvalitatív jellemzésére. Videó felvételtől származtatott kétdimenziós szemcse trajektóriákat szinkronizálva, háromdimenziós szemcse trajektóriákat képeztem le. A mérés és a szimulációs vizsgálatok során kapott szemcse trajektóriák hatékony összevetése érdekében, a szemcsék tartózkodási gyakoriságán alapuló vizualizációs technikát javasoltam.

Kapcsolódó publikációk: 2, 4, 5, 8, 10, 12, 13, 15, 16, 20, 25

3. Tézis: Igazoltam, hogy a rendszer részletes CFD szimulátorának megalkotásával olyan eszköz hozható létre, amely hatékonyan alkalmazható mérnöki problémák megoldásában.

- a. Kidolgoztam egy laboratóriumi léptékű, hőcserélő berendezés részletes CFD modelljét. A részletes modell felhasználásával egy adaptív hőmérséklet szabályozási feladat megoldásának példáján

igazoltam, hogy a CFD modellek felhasználása irányítástechnikai alkalmazásokra csökkentheti a szükséges fizikai mérések számát.

- b. Létrehoztam egy valós forgódobos oldó reaktor háromdimenziós, hidrodinamikai modelljét. A térfogatáramok segítségével definiáltam a kapcsolatot a hidrodinamikai modell, valamint a komponensmérleg számítására alkalmas heurisztikus cellás modell paramétereinek között. A cellás modell felhasználásával végzett vizsgálatok alapján javaslatot tettem a berendezés optimális üzemeltetési paramétereire.

Kapcsolódó publikációk: 1, 3, 7, 11, 17, 18, 19, 22, 23

Tovább lépési lehetőségek

A cellás modell struktúra identifikációs algoritmus továbbfejleszthető keresztáramok beiktatásával, valamint az alap cellák köre is bővíthető például holtter cella (áramlás nélküli tér) bevezetésével. A program moduláris felépítése miatt könnyen alkalmazható a bemutatottaktól eltérő felépítésű rendszerek (pl. több bemenet, több kimenet) esetében.

A videó feldolgozási módszerek esetében a CFD modell validációt három keverőelem példáján mutattam be, azonban mindenképpen bővítendő a keverőelemek köre. Ehhez már el is készültek további műanyagból nyomtatott keverőelemek, különböző méretben és bonyolultsággal. A lokális keverési idők számításával nagyobb betekintést nyerhetünk a reaktorok működésébe. Szemcsekövetés területén pedig tovább lépési lehetőség lehet több szemcse bejuttatása a mérés során a reaktorba, majd ezek trajektóriáinak párhuzamos detektálása. Emellett egy optikai cella alapú tartózkodási idő mérő rendszer fejlesztésébe kezdtünk, ami hozzájárulhat a validációs módszerek kiterjesztésére nem transzparens falú reaktorokra.

Tovább lépési lehetőség lehet az adaptív szabályozó hangolási megközelítés tesztelése egy nagyobb léptékű folyamatos berendezésen (pl. félüzemi reaktor), ahol egy összetettebb rendszeren lehetne vizsgálni a módszer működését. Az oldó reaktor esetében pedig több fém egyidejű oldásának modellezésével jobb betekintés nyerhető az elektronikai hulladék újrahasznosítás

technológiai folyamatába. Jelenleg is dolgozunk az oldódó fém geometria változásának időbeli modellezésén. Emellett az ismertetett megközelítés használható lehet félüzemi majd üzemi szintű léptéknövelés támogatására.

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőimnek dr. Varga Tamásnak és dr. Chován Tibornak témavezetésüket, a PhD éveim alatt nyújtott segítségét, és áldozatos munkájukat, mely lehetővé tette azt, hogy elkészüljön az értekezés.

Ezúton szeretném megköszönni dr. Szeifert Ferencnek és dr. Horváth Gézának az értekezéssel kapcsolatos észrevételeiket, tanácsaikat.

Köszönöm továbbá Bárkányi Ágnes, Tóth László Richárd, Rádi György, Szabó László és Balaton Miklós PhD hallgatóknak elméleti és gyakorlati segítségüket, amelyek nagyban megkönnyítették munkámat.

A 6.2 fejezettel kapcsolatos segítségükért köszönet illeti dr. Fogarasi Szabolcsot, Alina Popescut, dr. Imre Árpádot és dr. Ilea Petrut.

Végezetül köszönöm családomnak és barátaimnak a megértésüket, amellyel teljes tanulmányaim alatt viseltettek irányomban valamint mindennemű segítségüket.

8. Publikációk

Folyóiratcikkek:

1. 2013. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor CFD based adaptive control of a tubular electrical heater, Politechnica Periodica (közlésre elküldve)
2. 2013. Molnár Bálint, Egedy Attila, Varga Tamás, Analysis of mixing efficiency of different impeller geometries based on CFD models, Politechnica Periodica (közlésre elküldve)
3. 2013. Egedy Attila, Fogarasi Szabolcs, Varga Tamás, Imre-Lucaci Árpád, Chován Tibor, CFD models in the development of electrical waste recycling technologies, Chemical Engineering Transactions, DOI: 10.3303/CET1335221
4. 2013. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Particle Tracing based model validation for CFD models of stirred reactors, Chemical Engineering Transactions, DOI:10.3303/CET1332239
5. 2013. Molnár Bálint, Egedy Attila, Varga Tamás, CFD Model Based Comparison of Mixing Efficiency of Different Impeller Geometries, Chemical Engineering Transactions, DOI:10.3303/CET1332243
6. 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Compartment model structure identification with qualitative methods for a stirred vessel – Matematical and Computer Modelling of Dynamical Systems, DOI: 10.1080/13873954.2012.700939
7. 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Examination of temperature probe setup using computational fluid dynamics simulators, Politechnica Periodica, DOI: 0.3311/pp.ch.2012-2.04
8. 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Application of models with different complexity for a stirred tank reactor, Hungarian Journal of Industrial Chemistry, ISBN: 0133-0276, 335-339
9. 2011. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Compartment model structure identification of stirred reactors based on qualitative method, Acta Agraria Kaposvariensis, 15, 233-244

Konferenciakiadványban megjelent publikációk:

- 10.* 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, CFD modelling and video based model validation for a stirred reactor, Computer Aided Chemical Engineering, ISBN: 978-0444-59519-0, 1123-1127
- 11.* 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Examination of temperature probe setup using computational fluid dynamics simulators, Műszaki Kémiai Napok 2012. ISBN: 978-615-5044-54-0, 78-84
- 12.* 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Video Based Validation Using Particle Tracing Methods for a Stirred Vessel, V. International Interdisciplinary Technical Conference of Young Scientists, Poznan, ISBN: 978-83-926896-4-5, 49-54
- 13.* 2011. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Investigations on Hydrodynamics in a Stirred Tank for Educational Purposes, COMSOL Conference Stuttgart
- 14.* 2011. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Model Structure Identification Algorithm for Stirred Systems, IV. International Interdisciplinary Technical Conference of Young Scientists, Poznan, ISBN:978-83-926896-3-8, 242-246
- 15.* 2011. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Kevert reaktorok dinamikai viselkedésének vizsgálata, Műszaki Kémiai Napok 2011. ISBN: 978-615-5004-07-6, 231-236
- 16.* 2010. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Kevert bioreaktorok hidrodinamikai modellezése, Műszaki Kémiai Napok 2010. ISBN: 978-963-9696-93-8, 193-198

Előadások, posztterek:

- 17.* 2013. július - Egedy Attila, Fogarasi Szabolcs, Varga Tamás, Imre-Lucaci Árpád, Chován Tibor, CFD szimuláció alkalmazása elektronikai hulladék hasznosítási technológiák fejlesztésében, „Környezetbarát anyagok és technológiák” konferencia, Veszprém
- 18.* 2013. június - Egedy Attila, Fogarasi Szabolcs, Varga Tamás, Imre-Lucaci Árpád, Chován Tibor, CFD modellezés a hulladékhasznosító

technológiák fejlesztésében, „Jubileumi Lóczy Lajos emlékkonferencia 1913–2013” Sekély vizű tavas területek ökológiája, szociológiája és komplex mérnöki elemzése, Kaposvár.

- 19.** 2013. április – Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, CFD model based adaptive control of tubular electrical heater, Műszaki Kémiai Napok 2013., Veszprém, Magyarország
- 20.** 2012. november – Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor: Fermentációs reaktor vizsgálata numerikus áramlástanai módszerekkel, XVIII. Nemzetközi Vegyészkonferencia, Félixfürdő, Románia
- 21.** 2012. november - Rádi György, Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor: Katalizátor ágy üres keresztmetszeti tényező radiális eloszlásának vizsgálata, XVIII. Nemzetközi Vegyészkonferencia, Félixfürdő, Románia
- 22.** 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, CFD Model Based Control Algorithm Development of a Laboratory Water Heater, CAPE Forum 2012, Veszprém, Magyarország
- 23.** 2012. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, CFD Modelling and Validation of a Laboratory Water Heater, IX. Meeting of Young Chemical Engineers, Zágráb, Horvátország
- 24.** 2011. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Struktúra identifikáció kevert tankokban cellás modellek és kvalitatív módszerek alkalmazásával, IX. Alkalmazott Informatikai konferencia, Kaposvár, Magyarország
- 25.** 2010. Egedy Attila, Varga Tamás, Chován Tibor, Kevert bioreaktorok hidrodinamikai modellezése, IV. Szent-Györgyi Albert Konferencia, Budapest, Magyarország

Jelölésjegyzék

Jelölés	Meghatározás	Mértékegység
2-4. fejezet		
Re	Dimenziómentes Reynolds szám	1
d	Egyenértékű átmérő	m
v	Sebesség	m/s
ν	Kinematikai viszkozitás	P
N	Fordulatszám	1/s
ρ	Sűrűség	kg/m ³
η	Dinamikai viszkozitás	Pas
Eu	Dimenziómentes Euler szám	1
p	Nyomás	Pa
g	Gravitációs állandó	m/s ²
M	Nyomaték	W/m
C(t)	Koncentrációfüggvény	mol/m ³
E(t)	Tartózkodási idő eloszlás sűrűség fgv.	1
F _{out,i}	Kilépő térfogatáram	m ³ /s
F _{in,i}	Belépő térfogatáram	m ³ /s
c _{out,i}	Kilépő koncentráció	mol/m ³
c _{in,i}	Belépő koncentráció	mol/m ³
α	Elosztási arány	1
V	Térfogat	m ³
5. fejezet		
p	Nyomás	Pa
ρ	Sűrűség	kg/m ³
u	Sebességvektor	m/s
μ	Dinamikai viszkozitás	Pas
μ_t	Turbulens viszkozitás	Pas
k	Turbulens kinetikai energia	m ² /s ³
ε	Energia disszipációs arány	m ² /s ²
C _{ε}	Konstans	1.3
C _{$\varepsilon 1$}	Konstans	1.44
C _{$\varepsilon 2$}	Konstans	1.92
C _{μ}	Konstans	0.09
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	Konstans	1
r _{bp}	Sugár	m

I	Egységmátrix	
ω	Szögelfordulás	rad
w	Szögsebesség	rad/s
t	Idő	s
∇	Differenciáloperátor	
F	Erő vektor	N
P_k	Feszültségi tenzor	
c_i	Koncentráció	mol/m ³
D_i	Diffúziós állandó	m ² /s
T	Hőmérséklet	
λ	Hővezetési tényező	1
Q	Hőforrás, nyelő	
u	Sebesség	
Q_{vh}	Hővesztesség	m/s
W_h	Nyomásból fakadó munka	m/s
n	Egységvektor	1
u_w	z irányú sebesség	m/s
x	x irányú elmozdulás	m
u_τ	Fal melletti sebesség	m/s
δ_w^+	Fal melletti réteg vastagsága	m
u_{tang}	Tangenciális sebesség	m/s
κ_v		
τ_p	Csúsztatófeszültség	
m_p	Szemcse tömege	kg
F_t	A szemcsére ható erők eredője	N
v		
ρ_p	Szemcsesűrűség	kg/m ³
d_p	Szemcseátmérő	m
6.1 fejezet		
J	Vezető sűrűség	A/m ²
Q_j	Forrástag	W/m ³
σ	Ellenállás	S
E	Elektromos térerősség	V/m
ϵ_0	Vákuum permittivitása	F/m
ϵ_r	Relatív permittivitás	
D_r	Töltésátlépés	C/m ²
U	Feszültség	V

ρ	Sűrűség	kg/m^3
c_p	Hőkapacitás	$\text{J}/(\text{molK})$
T	Hőmérséklet	K
λ	Hővezetési tényező	$\text{W}/(\text{mK})$
Q	Hőforrás, nyelő	W
u	Sebesség	m/s
α'	Korrigált hőátadási tényező	$\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$
α	Hőátadási tényező	$\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$
A_K	Hőátadási tényező korrekciós faktor	
λ'	Korrigált hővezetési tényező	$\text{W}/(\text{mK})$
λ_K	Hővezetési tényező korrekciós faktor	1
Pr	Dimenziómentes Prandtl szám	1
μ	Dinamikai viszkozitás	Pas
Nu	Dimenziómentes Nusselt szám	1
L	Hossz	m
D	Átmérő	m
B	Térfogatáram	l/h
V_0	Kezdeti feszültség	V
n	Egységvektor	
T_f	Fluid hőmérséklet	K
T_s	Szilárd hőmérséklet	K
T_i	Hőmérséklet	K
T_{f0}	Belépő folyadék hőmérséklet	K
6.2 fejezet		
c_i	Mólkoncentráció	mol/m^3
m_i	Tömegkoncentráció	g/m^3
M_i	Molekulatömeg	kg/mol
k	Reakciósebességi állandó	
r_i	Reakciósebesség	$1/\text{min}$
u	Sebesség	m/s
u_0	Betáplálási sebesség	m/s
u_w	z irányú sebesség	m/s
x	x irányú elmozdulás	m

Ábrajegyzék

1. ábra Egy lehetséges struktúra és a hozzá tartozó cellás modell	17
2. ábra Az alkalmazott primitív epizódok	18
3. ábra Példák az adatsorok kvalitatív elemzésére	18
4. ábra Tartózkodási idő eloszlás sűrűség függvény számítása impulzus gerjesztésnél	22
5. ábra A keverési idő mérésére szolgáló mérőrendszer	30
6. ábra (a) A kísérleti berendezés (üvegreaktor, két kamera különböző szögből, IKA keverő). (b) A háromdimenziós szemcsetrajektória meghatározásának elve	30
7. ábra A hőcserélő berendezés sematikus ábrája	31
8. ábra A modellezett forgódobos oldó reaktor	33
9. ábra A fejlesztett algoritmus folyamatábrája	37
10. ábra Lehetséges párhuzamos struktúrák egy cellakombinációhoz. (E-elosztó, K-Keverő, and TKE-reaktor)	39
11. ábra Többféle struktúra egy cellakombinációhoz. (1: Elosztó, 2: Keverő, 3: TKE, 4: CSŐ).....	40
12. ábra (a) Szűrt és összes kombinációk száma (b) időtáblázat az egyes lépések időigénye a maximális cellaszám függvényében	44
13. ábra A dinamikus szimuláció eredménye	45
14. ábra Lehetséges szekvenciák megoszlása	46
15. ábra Az első teszt adatsor kiértékelése, szimulációs eredmény és az elfogadott cellás struktúra	47
16. ábra A második teszt adatsor kiértékelése, szimulációs eredmény és az elfogadott cellás struktúra	48
17. ábra A harmadik példánál használt teszt struktúra.....	49
18. ábra Komplex struktúra kiértékelése.....	49
19. ábra A horgonykeverő 150 1/min fordulatszámú mérésnél tapasztalt színintenzitás értékek 2 s, 22 s és 42 s után	54

20. ábra Az indikátorinjektálás modellezéséhez használt modell geometria a keverési idő alapú validációs módszer esetében [m] pengekeverő, horgonykeverő és turbinakeverő esetén	55
21. ábra Adatgyűjtési lehetőségek változatai	60
22. ábra Átlagsebességek számítása a különböző keverőelemeknél (a) pengekeverő, (b) horgonykeverő (c) turbinakeverő	61
23. ábra Hibaváltozás időben és homogenitási paraméter vizsgálat (horgonykeverő)	62
24. ábra A kialakult sebességi mező a reaktorban horgonykeverő és 100 1/min fordulatszám esetén	63
25. ábra Hőmérséklet eloszlás a reaktorban (horgonykeverő), (a) 5,5 s, (b) 10 s (c) 30 s, (d) 50 s időpillanatokban	64
26. ábra CFD mérés alapú vizsgálat (horgonykeverő)	64
27. ábra Mért és számított keverési idők	65
28. ábra A detektált mozgó élek, a háttér részeként	68
29. ábra A detektált szemcse a reaktorban	68
30. ábra z koordináta értékek szinkronizálás előtt (a), és után (b).	70
31. ábra Szemcsetrajektóriák a kísérleti esetben pengekeverő esetén különböző nézetekből	70
32. ábra Szemcsetrajektóriák a szimulációs esetben pengekeverő esetén	71
33. ábra Kiindulási szemcsepozíció hatása a szemcsetartózkodásra (párhuzamos háló szintek 1-3)	72
34. ábra Szemcsesűrűség vizsgálata (800 kg/m^3 , 1600 kg/m^3 , 2200 kg/m^3 , 2800 kg/m^3)	73
35. ábra Peremfeltétel vizsgálata ((a) megáll, (b) visszapattan)	74
36. ábra A szemcse trajektóriák statisztikai analízise mérés(bal) és szimuláció (jobb) alapján különböző keverőelemeknél	75
37. ábra Sebességi mező a hőcserélőben [m/s]	79
38. ábra A hőcserélőben kialakuló áramlási tér áramvonalakkal szemléltetve (m/s)	79
39. ábra Az alkalmazott fűtési program	82
40. ábra A hőmérséklet [K] változása a fűtőszálban (50,350 s)	82

41. ábra A hőmérséklet [K] eloszlása a hőcserélőben.....	83
42. ábra Elektromos vezetés korrekciós faktor kiválasztása	84
43. ábra A hőátadási tényező korrekciója	85
44. ábra Szimulációs és mért adatsorok összehasonlítása modell validáció céljából 120 l/h (a) és 180 l/h (b) térfogatáramoknál.....	86
45. ábra Összefüggés a térfogatáram és a fekete doboz paraméterek között (a) CFD alapú összefüggés, (b) mérés alapú összefüggés.....	86
46. ábra (a) Egy ponton hangolt PI szabályozó (b) CFD alapú adaptív hőmérséklet szabályozás (c) mérés alapú adaptív hőmérséklet szabályozás	88
47. ábra Réz oldódási kinetika paramétereinek meghatározása FeCl ₃ oldószer esetén.....	90
48. ábra Sebességi tér [m/s] az oldó reaktorban.....	92
49. ábra A sebességvektorok kigyűjtéséhez használt határfelületek és a reaktor felosztása.....	93
50. ábra A fordulatszám és betáplálási sebesség hatása a belépő cella elosztási arányaira.....	94
51. ábra A fordulatszám és furatátmérő hatása a belépő cella elosztási arányaira	96
52. ábra Furatszám hatása a belépési cella elosztási arányaira	96
53. ábra A leképezett cellás modell struktúra	97
54. ábra Az elosztási arányok számítása a cellás modellben	98
55. ábra A cellás modell validálása különböző üzemeltetési paraméterek esetén ..	99
56. ábra A fordulatszám és a reagens koncentráció hatása (a) 10 ml/min b) 20 ml/min c) 30 ml/min d) 40 ml/min térfogatáram	99
57. ábra a) Holtidő nélküli struktúra identifikáció eredménye b) holtidős struktúra identifikáció eredménye c) az elfogadott modell struktúra és paraméterek	100
58. ábra Az oldóreaktor tartózkodási idő függvényére végzett struktúra identifikáció eredménye és a kapott cellás struktúra.....	101

Irodalomjegyzék

- [1] E. Marden Marshall, Computational Fluid Mixing, Fluent Inc., 2003.
- [2] Z. Fonyó és G. Fábry, Vegyipari művelettani alapismeretek, Budapest: Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., 2004, 213.
- [3] G. Fejes, Ipari keverőberendezések, Budapest: Műszaki Tankönyvkiadó, 1970, 13.
- [4] S. Claudel, C. Fonteix, L. J.P. és L. H.-G., „Application of the possibility theory to the compartment modelling of flow pattern in industrial processes,” *Chemical Engineering Science*, 58, pp. 4005-4016, 2003.
- [5] S. Alves, J. Vascolenos és J. Barata, „Alternative compartment models of mixing in tall tanks agitated by multi-rushton turbines,” *Chemical Engineering Research*, 75, pp. 334-338, 1997.
- [6] H. Znad, V. Bales és Y. Kawase, „Modeling and scale up airlift bioreactor,” *Computers and Chemical Engineering*, 28, pp. 2765-2777, 2004.
- [7] A. H. Alexopoulos, D. Maggioris és C. Kiparissides, „CFD analysis of turbulence non homogeneity in mixing vessel A two compartment model,” *Chemical Engineering Science*, 57, pp. 1735-1752, 2002.
- [8] I. Iliuta, F. Larachi, D. Desvigne, J. Anfray, N. Dromard és D. Schweich, „Multicompartment hydrodynamic model for slurry bubble columns,” *Chemical Engineering Science*, 63, pp. 3379-3399, 2008.
- [9] E. Palazzi, F. Curro és B. Fabiano, „n-Compartment mathematical model for transient evaluation of fluid curtains in mitigating chlorine releases,” *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 20, pp. 135-143, 2006.
- [10] A. Milewska és E. Molga, „CFD simulation of accidents in industrial batch stirred tank reactors,” *Chemical Engineering Science*, 62, pp. 4920-4925, 2007.
- [11] K. R. Westerterp és E. J. Molga, „Safety and runaway prevention in batch and semibatch reactors - A review,” *Chemical Engineering Research and Design*, 84, pp. 543-552, 2006.
- [12] J. Aubin és C. Xuereb, „Design of multiple impeller stirred tanks for the mixing of highly viscous fluids using CFD,” *Chemical Engineering Science*, 61, pp. 2913-2920, 2006.
- [13] A. R. Khopkar és P. A. Tanguy, „CFD simulation of gas-liquid flows in stirred vessel equipped with dual rushton turbines: influence of parallel, merging and diverging flow configurations,” *Chemical Engineering Science*, 63, pp. 3810-3820, 2008.
- [14] A. Delafosse, F. Delvigne, M.-L. Collignon, P. Thonart és D. Crine, „Stochastic modeling of a micro-organism displacements in a stirred-tank bioreactor,” *CHISA conference*, Poster, 2010.
- [15] D. L. Marchisio és A. A. Barresi, „CFD simulation and reaction the relevance of the micro-mixing model,” *Chemical Engineering Science*, 58, pp. 3579-3587, 2010.

- [16] T. J. Kumaresan és B. Joshi, „Effect of impeller design on the flow pattern and mixing in stirred tanks,” *Chemical Engineering Journal*, 115, pp. 173-193, 2006.
- [17] T. Yang és K. Takashi, „Flow characteristics in a Horizontal stirred vessel,” 2010.
- [18] C. Laquerbe, J. Laborde, P. Floquet és L. D. S. Piboleau, „Identification of parametric models based on RTD theory: Application to safety studies in ventilated nuclear enclosures,” *Computers and Chemical Engineering*, 22, pp. 347-353, 1998.
- [19] D. L. Penry és P. A. Jumars, „Chemical Reactor Analysis and Optimal Digestion,” *Bioscience*, 36, pp. 310-315, 1986.
- [20] D. Kundu és A. Mitra, „Estimating the parameters of the linear compartment model,” *Journal of Statistical Planning and Interference*, 70, pp. 317-334, 1997.
- [21] C. Cobelli, A. Lepschy és G. Romanin Jacur, „Identifiability of Compartmental Systems and related Structural Properties,” *Mathematical Biosciences*, 44, pp. 1-18, 1977.
- [22] E. Lin, G. Ding, D. Zhao, Y. Liao, N. Yu és J. Yamashita, „Dynamic model for multi-compartment indirect cooling household refrigerator using Z-transfer function based cabinet model,” *International Journal of Thermal Sciences*, 50, pp. 1308-1325, 2011.
- [23] D. Maggioris, A. Goulas, A. H. Alexopoulos, E. G. Chatzi és C. Kiparossides, „Use of CFD in Prediction of Particle Size Distribution in Suspension Polymer Reactors,” *Computers and Chemical Engineering*, 22, pp. 315-322, 2008.
- [24] B. Csukás és S. Balogh, „Combining genetic programming with generic simulation models in evolutionary synthesis,” *Computers in Industry*, %1. szám36, pp. 181-197, 1998.
- [25] J. T. Cheung és G. Stephanopoulos, „Representation of process trends. Part I: A formal representation framework,” *Computers and Chemical Engineering*, 14, pp. 495-510, 1990.
- [26] T. Varga, F. Szeifert, J. Réti és J. Abonyi, „Decision tree based qualitative analysis of operating regimes in industrial production processes,” *Computer Aided Chemical Engineering*, 25, pp. 1039-1044, 2008.
- [27] Y. H. Wong, A. B. Rad és Y. K. Wong, „Qualitative Modeling and Control of Dynamic Systems,” *Engineering Application of Artificial Intelligence*, 5, pp. 429-439, 1997.
- [28] R. F. Vianna és C. McGreavy, „Qualitative modelling of chemical processes – A weighted digraph (WDG) approach,” *Computers and Chemical Engineering*, 19, pp. 375-380, 1995.
- [29] R. Badard és T. Pontet, „Continuous interpolation logic and qualitative modeling of flows,” *Fuzzy sets and systems*, 85, pp. 355-371, 1997.
- [30] L. Rudniak, P. M. Machniewski, A. Milewska és M. E., „CFD modelling of stirred tank chemical reactors: homogeneous and heterogeneous reaction systems,” *Chemical Engineering Science*, 85, pp. 5233-5239, 2004.

- [31] H. Wei, „Computer-aided design and scale up of crystallization processes: Integrating approaches and case studies,” *Computer-aided design and scale up of crystallization processes: Integrating approaches and case studies*, 88, pp. 1377-1380, 2010.
- [32] V. V. Ranade, Computational flow modelling for chemical reactor engineering, Academic Press, San Diego, 2002.
- [33] A. M. E. Milevska, „Safety aspects in modelling and operating of batch and semibatch stirred tank chemical reactors,” *Chemical Engineering Research and Design*, 88, pp. 304-319, 2010.
- [34] T. Lajos, Áramlástan alapjai, Budapest: Műegyetemi kiadó, 2009.
- [35] D. Dynamics, „Laser Doppler Anemometry”; www.danctecdynamics.com, [Online].
- [36] A. Melling, „Tracer particles and seeding for particle image velocimetry,” *Measurement Science and Technology*, 8, pp. 1406-1416, 2007.
- [37] E. L. Paul, Handbook of Industrial Mixing Science and Practice, John Wiley & Sons, 2004.
- [38] A. K. Sahu, P. Kumar, A. W. Patwardhan és J. B. Joshi, „Sahu A. K., Kumar P., Patwardhan A. W., Joshi J. B.,” *Chemical Engineering Science*, 54, pp. 2285-2293, 1999.
- [39] A. H. John, W. Bujalski és A. W. Nienow, „The performance of a photo-fermenter containing independently-driven dual impellers in a draft tube (IDDIDT): mixing times,” *Trans IchemE Part C*, 76, 1998.
- [40] L. Manna, „Comparison between physical and chemical methods for the measurement of mixing times,” *Chemical Engineering Journal*, 67, pp. 167-173, 1997.
- [41] G. Delaplace, R. Thakur, L. Bouvier, C. Andre és C. Torrez, „Dimensional analysis for planetary mixer: Mixing time and Reynolds numbers,” *Chemical Engineering Science*, 62, pp. 1442-1447, 2007.
- [42] S. U. Ahmed, P. Raganathan, A. Pandey és S. Sivaraman, „Computational fluid dynamics modeling of gas dispersion in multi impeller bioreactor,” *Journal of Bioscience and Bioengineering*, 109, pp. 588-597, 2010.
- [43] N. K. Nere, A. W. Patwardhan és J. B. Joshi, „Liquid-phase mixing in stirred vessels: turbulent flow regime,” *Industrial Engineering Chemistry and Research*, 42, pp. 2661-2698, 2003.
- [44] R. B. MacMullin és M. Weber, „The theory of short-circuiting in continuous flow mixing vessels in series and the kinetics of chemical reactions in such systems,” *Transactions of American Institute of Chemical Engineers*, 31, pp. 409-458, 1935.
- [45] H. S. Fogler, Elements of Chemical Reaction Engineering, Pearson Education Inc., 2006.
- [46] F. Cabaret, S. Bonnot, L. Fradette és P. Tanguy, „Mixing time analysis Using colorimetric methods and image processing,” *Industrial Engineering Chemistry and Research*, 46, pp. 5032-5042, 2007.
- [47] O. Visuri, M. Laakkonen és J. Aittamaa, „A digital imaging technique for the

- analysis of local inhomogenities from agitated vessels,” *Chemical Engineering Technology*, 30, pp. 1692-1699, 2007.
- [48] M. Gyimesi, V. Zhulin és D. Ostergaard, „Particle trajectory tracing in ANSYS,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 427, pp. 408-411, 1999.
- [49] H. Han, Y.-S. Ding, K.-R. Hao és X. Liang, „An evolutionary particle filter with the immune genetic algorithm for intelligent video target tracking,” *Computers and Mathematics with Applications*, 62, pp. 2685-2695, 2011.
- [50] F. Tauro, C. Pagano, M. Porfiri és S. Grimaldi, „Tracing of shallow water flows through buoyant fluorescent particles,” *Flow Measurement and Instrumentation*, 26, pp. 93-101, 2012.
- [51] G. Karniadakis, A. Beskok és N. Aluru, *Microflows and Nanoflows*, Springer, 2005.
- [52] J.-P. Torré, D. Fletcher, T. Lasuye és C. Xuereb, „An experimental and CFD study of liquid jet injection into a partially baffled mixing vessel: A contribution to process safety by improving the quenching of runaway reactions,” *Chemical Engineering Science*, 63, pp. 924-942, 63 924-942 2008.
- [53] A. Tamburini, L. Gentile, A. Cipollina, G. Micale és A. Brucato, „Experimental investigation of dilute solid-liquid suspension in an unbaffled stirred vessels by a novel pulse based image analysis technique,” *Chemical Engineering Transactions*, 17, pp. 531-536, 2009.
- [54] A. Busciglio, F. Grisafi, F. Scargiali, M. Davi és A. Brucato, „Vortex Shape in Unbaffled Stirred Vessels: Experimental Study via Digital Image Analysis,” *Chemical Engineering Transactions*, 24, pp. 1387-1392, 2011.
- [55] Y. Behjat, S. Shahosseini és M. A. Marvast, „CFD analysis of hydrodynamic, heat transfer and reaction of three phase riser reactor,” *Chemical Engineering Research and Design*, 89, pp. 978-989, 2011.
- [56] Z. Sha, P. Oinas, M. Louhi-Kultanen, G. Yang és S. Palosaari, „Application of CFD simulation to suspension crystallization—factors affecting size-dependent classification,” *Powder Technology*, 121, pp. 20-25, 2001.
- [57] S. K. Dahikar, M. J. Sathe és J. B. Joshi, „Investigation of flow and temperature patterns in direct contact condensation using PIV, PLIF and CFD,” *Chemical Engineering Science*, 65, pp. 4606-4620, 2010.
- [58] M. A. Bhutta, N. Hayat, M. H. Bashir, A. R. Khan, K. Ahmad és S. Khan, „CFD applications in various heat exchangers design: A review,” *Applied Thermal Engineering*, 32, pp. 1-12, 2012.
- [59] S. M. Mousavi, S. Shojaosadati, J. Golestani és F. Yazdian, „CFD simulation and optimization of effective parameters for biomass production in a horizontal tubular loop bioreactor,” *Chemical Engineering and Processing*, 49, pp. 1249-1258, 2010.
- [60] S. H. Yang, L. Yang és C. H. He, „Improve safety of industrial processes using dynamic operator training simulators,” *TransIchem*, 79, pp. 329-338, 2001.
- [61] H. V. Hristov, R. Mann, V. Losse és S. D. Vlaev, „A simplified CFD for

- three-dimensional analysis of fluid mixing, mass transfer and bioreaction in a fermenter equipped with triple novel geometry impellers,” *Food and Bioproducts Engineering*, 82, pp. 21-34, 2004.
- [62] Q. Meng, Y. Wang, X. Yan és Z. Li, „CFD assisted modelling for control system design: A case study,” *Simulation Modelling Practice and Theory*, 17, pp. 730-742, 2009.
- [63] M. A. Rizzo, M. A. Santillo, A. K. Padthe, J. B. Hoagg, S. Akhtar, K. Powell és D. S. Bernstein, „CFD Based Adaptive Flow Control Using ARMAKOV Disturbance Rejection,” *Proceedings of the 2006 American Control Conference*, pp. 3783-3788, 2006.
- [64] Y. Yang, M. A. Reuter és D. T. M. Hartman, „CFD Modelling fo control of hazardous waste incinerator,” *Control Engineering Practice*, 11, pp. 93-101, 2003.
- [65] S.-Y. Wong, W. Zhou és J. Hua, „Designing process controller for continuous bread baking process based on CFD modelling,” *Journal of Food Engineering*, 81, pp. 523-534, 2007.
- [66] A. Baba, F. Adekola és D. Ayodele, „Study of metals dissolution from a brand of mobile phone waste,” *Association of Metallurgical Engineers of Serbia*, 2010.
- [67] J. Yang, Y. Wu és J. Li, „Recovery of copper particles from metal components of waste printed circuit boards,” *Hydrometallurgy*, , összesen: %2121-124, pp. 1-6, 2012.
- [68] F. Habashi, „A generalized kinetic model for hydrometallurgical processes,” *Chemical Product and Process Modelling*, 2, pp. 1-22, 2007.
- [69] H. Van Parys, E. Tourwé, B. T. M. Fepauw, J. Deconick és A. Hubin, „Modeling of mass and charge transfer in an inverted rotating disc electrode (IRDE) reactor,” *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 622, pp. 44-50, 2008.
- [70] E. P. Rivero, P. Granados, F. F. Rivera, M. Cruz és I. González, „Mass transfer modelling and simulation at a rotating cylinder electrode (RCE) reactor under turbulent flow for copper recovery,” *Chemical Engineering Science*, 65, pp. 3042-3049, 2010.
- [71] S. Martinez-Delgado, H. Mollinedo-Ponce, V. Mendoza-Escamilla, C. Gutiérrez-Torres, J. Jiménez-Bernal és C. Barrera-Diaz, „Performance evaluation of an electrochemical reactor used to reduce Cr(VI) from aqueous media applying CFD simulations,” *Journal of Cleaner Production*, 34, pp. 120-124, 2012.
- [72] J. L. C. Santos, V. Geraldes, S. Vlizarov és J. G. Crespo, „Characterization of fluid dynamics and mass transfer in an electrochemical oxidation cell by experimental and CFD studies,” *Chemical Engineering Journal*, 157, pp. 379-392, 2010.
- [73] A. Frias-Ferrer, I. Tudela, O. Luisnard, V. Saez, M. D. Esclapez, M. I. Díez-García, P. Bonete és J. González-García, „Optimized design of an electrochemical filter-press reactor using CFD methods,” *Chemical Engineering Journal*, 169, pp. 270-281, 2011.

- [74] D. Guha, M. P. Dudukovic, P. A. Ramachandran, S. Mehta és J. Alvare, „CFD based compartmental modelling of single phase stirred tank reactors,” *AIChE Journal*, 52, pp. 1836-1846, 2006.
- [75] S. K. Bermingham, H. J. M. Kramer és G. M. van Rosmalen, „Towards on scale crystallizer design using compartmental models,” *Computers and Chemical Engineering*, 22, pp. 355-362, 1998.
- [76] H. J. M. Kramer, J. W. Dijkstra, P. J. T. Verheijen és G. M. van Rosmalen, „Modeling of industrial crystallizers for control and design purposes,” *Powder Technology*, 108, pp. 185-191, 2000.
- [77] V. Alopaeus, J. Koskinen, J. Keskinen és J. Majander, „Simulation of the population balances for liquid-liquid systems in a nonideal stirred tank. Part 2 - parameter fitting and the use of the multiblock model for dense suspensions,” *Chemical Engineering Science*, 57, pp. 1815-1825, 2002.
- [78] V. Kulikov, H. Briesen és W. Marquardt, „A framework for the simulation of mass crystallization considering the effects of fluid dynamics,” *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 45, pp. 886-899, 2006.
- [79] M. Liiri, H. Hatakka, J. Kallas, J. Aittamaa és V. Alopaeus, „Modelling of crystal growth of KDP in a 100 dm³ suspension crystallizer using combination of CFD and multiblock model,” *Chemical Engineering Research and Design*, %1. szám88, pp. 1297-1303, 2010.
- [80] H. L. Le, J. Jeong, J.-C. Lee, B. D. Pandey, J.-M. Yoo és T. H. Huynh, „Hydrometallurgical process for copper recovery from waste printed circuit boards,” *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review*, 32, %1. szám2, pp. 90-104, 2011.
- [81] E. Rudnik, L. Burzynska és W. Gumowska, „Hydrometallurgical recovery of copper and cobalt from reduction-roasted copper converter slag,” *Minerals Engineering*, 22, pp. 88-95, 2009.
- [82] T. Oishi, K. Koyama, S. Alam, M. Tanaka és J.-C. Lee, „Recovery of high purity copper cathode from printed circuit boards using ammoniacal sulfate of chloride solutions,” *Hydrometallurgy*, 89, pp. 82-88, 2007.
- [83] A. Agrawal, M. Perween, S. Pramanik és K. K. Sahu, „Recovery of copper from PCB leach solution by solvent extraction,” *Proceedings of the XI. International Seminar on Mineral Processing Technology*, pp. 1189-1194, 2010.
- [84] A. J. B. Dutra, G. P. Rocha és F. R. Pombo, „Copper recovery and cyanide oxidation by electrowinning from a spent copper-cyanide electroplating electrolyte,” *Journal of Hazardous Materials*, 152, pp. 648-655, 2008.
- [85] S.-H. Chang, K.-S. Wang, P. I. Hu és I.-C. Lui, „Rapid recovery of dilute copper from a simulated Cu_SDS solution with low-cost steel wool cathode reactor,” *Journal of Hazardous Materials*, 163, pp. 544-549, 2009.
- [86] K. Koyama, M. Tanaka és J. Lee, „Copper leaching behavior from waste printed circuit board in ammoniacal alkaline solution,” *Material Transactions*, 47, pp. 1788-1792, 2006.
- [87] H. M. Veit, A. M. Bernardes, J. Z. Ferreira, J. A. S. Tenorio és C. F. Malfatti, „Recovery of copper from printed circuit board scraps by mechanical

- processing and electrometallurgy,” *Journal of Hazardous Materials*, B137, pp. 1704-1709, 2006.
- [88] L. Cifuentes, J. M. Castro és G. Crisóstomo, „Modelling a copper electrowinning cell based on reactive electro dialysis,” *Applied Mathematical Modelling*, 31, pp. 1308-1320, 2007.
- [89] J. Jocedal és S. J. Wright, *Numerical Optimization*, New York: Springer, 2006.
- [90] G. Montante, M. Mostek, M. Jahoda és F. Magelli, „CFD simulations and experimental validation of homogenisation curves and mixing time in stirred Newtonian and pseudoplastic liquids,” *Chemical Engineering Science*, 60, pp. 2427-2437, 2005.
- [91] MATWEB, „www.matweb.com,” [Online].
- [92] T. Varga, A. Király és J. Abonyi, „Improvement of PSO algorithm by memory based gradient search application in inventory management,” *Swarm Intelligence and Bio Inspired Computation: Theory and Application*, 2013.