



Pannon Egyetem
Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet
Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

Kémiai technológiai rendszerek hierarchikus modellezése

(kézirat)

dr. Szeifert Ferenc
dr. Németh Sándor

2019.



Tartalomjegyzék

BEVEZETÉS	5
1. RENDSZERTECHNIKAI ÁTTEKINTÉS	1.13
1.1. A MÉRNÖKI FELADATOSZTÁLYOK	1.13
1.2. RENDSZER DEFINÍCIÓK	1.16
1.3. FORMÁLIS RENDSZERDEFINÍCIÓK	1.20
1.4. A RENDSZEREK ÁLTALÁNOS TULAJDONSÁGAI	1.24
1.5. A DEKOMPOZÍCIÓ-KOORDINÁCIÓ ELVE	1.26
2. RENDSZERMODELLEK.....	2.28
2.1. A MEGKÖZELÍTÉSI MÓD	2.29
2.2. A MEGHATÁROZOTTSÁG MÉRTÉKE	2.31
2.3. TÉRBELI HOMOGENITÁS.....	2.35
2.4. IDŐBELI HOMOGENITÁS	2.36
2.5. IDŐBELI ÖSSZEFÜGGÉS.....	2.38
2.6. IDŐBELI VISELKEDÉS	2.44
2.7. MATEMATIKAI SAJÁTOSság	2.46
2.8. LEÍRÁSI TARTOMÁNY.....	2.47
2.9. RENDSZERTECHNIKAI BESOROLÁS	2.51
3. A VEGYÉSZMÉRNÖKI TUDOMÁNY ALAPJAI.....	3.52
3.1. VÁLTOZÓK ÉS FOLYAMATOK (JELENSÉGEK)	3.52
3.2. MÉRLEGEK.....	3.57
3.3. A MŰVELETI EGYSÉGEK FUNDAMENTÁLIS EGYENLETEI.....	3.62
4. A TECHNOLÓGIAI RENDSZER STRUKTÚRÁJA	4.64
4.1. A TECHNOLÓGIAI OBJEKTUM SAJÁTOSságAI [29]	4.64
4.2. MODELLEZÉSI ALAPELVEK	4.67
4.3. DEKOMPONÁLÁS, KÓDOLÁS	4.68
4.4. A KTR STRUKTÚRÁJA.....	4.75
5. DISZKRÉT RENDSZEREK MODELLEZÉSE	5.77
5.1. DISZKRÉT RENDSZEREK MODELLALKOTÁSA	5.77
5.2. ALAPKAPCSOLATOK	5.81
5.3. ELEMSZÁM CSÖKKENTÉS	5.83
6. FOLYTONOS RENDSZEREK MODELLEZÉSE.....	6.87
6.1. A FÁZIS TÉR	6.87
6.2. AZ ELEMSZÁM SŰRŰSÉG	6.90
6.3. MÉRLEG A FÁZISTÉRBEN.....	6.93
6.4. ESETTANULMÁNY: REAKTOR MODELL	6.96
6.5. MODELL RENDSZER	6.105
6.6. ELEMSZÁM CSÖKKENTÉS	6.110
7. MOLEKULÁKBÓL ÁLLÓ RENDSZEREK.....	7.116

8. TÖBB KOMPONENSŰ RENDSZEREK	8.121
8.1. A TKR MODELLJÉNEK GENERÁLÁSA.....	8.122
8.2. TIPIKUS REAKCIÓK.....	8.126
8.3. MULTI KOMPONENSŰ RENDSZEREK.....	8.128
9. FÁZISELEMEBŐL ÁLLÓ RENDSZEREK	9.134
9.1. A FÁR MODELL GENERÁLÁSA.....	9.135
9.2. HIDRODINAMIKA.....	9.137
9.2.1. Tartózkodási idő és elemszámsűrűség.....	9.137
9.2.2. Hidrodinamikai modellek.....	9.140
9.2.3. Méretnövelés.....	9.145
9.3. INDIVIDUÁLIS ELEMeket TARTALMAZÓ FÁR.....	9.148
10. TÖBBFÁZISÚ RENDSZEREK.....	10.151
11. MAGASABB HIERARCHIA SZINTEK.....	11.156
11.1. A BERENDEZÉSELEM ÉS A BERENDEZÉS SZINTEK.....	11.156
11.2. BERENDEZÉS TÍPUSOK.....	11.160
11.3. SOKELEMŰ BERENDEZÉS FOLYTONOS MODELLJE.....	11.162
12. A MATEMATIKAI MODELLEZÉST TÁMOGATÓ SZOFTVEREK .	12.165
13. A KOMPONENS EGYENSÚLY ÉRZÉKENYSÉG VIZSGÁLATA	13.175
13.1. AZ EGYENSÚLYI MODELL.....	13.176
13.2. AZ ÉRZÉKENYSÉGI MODELL.....	13.179
13.3. ÉRZÉKENYSÉG SZÁMÍTÁS – ALGORITMUS.....	13.182
13.4. ÉRZÉKENYSÉG VIZSGÁLATOK.....	13.185
14. KEVERT REAKTOR MODELLEZÉSE	14.189
14.1. A RENDSZER STRUKTÚRA.....	14.189
14.2. A RENDSZER MODELL.....	14.190
14.3. A KALMAN RENDSZER.....	14.193
14.4. REAKTOR STABILITÁS.....	14.194
14.5. A RENDSZER MŰKÖDTETÉSE.....	14.200
15. TÖBBFÁZISÚ REAKTOR MODELLEZÉSE	15.202
15.1. RENDSZER STRUKTÚRA.....	15.202
15.2. AZ OLDÓDÁS MODELLJE.....	15.203
15.3. A RENDSZER MODELL.....	15.206
15.4. SZÁMÍTÁSI ALGORITMUS.....	15.209
16. HETEROKATALÍTIKUS REAKTOR MODELLEZÉSE.....	16.212
16.1. DEKOMPONÁLÁS ÉS STRUKTÚRA.....	16.213
16.2. A HATÁRFELÜLETI JELENSÉGEK MODELLEZÉSE.....	16.215
16.3. A PÓRUS DIFFÚZIÓS MODELL.....	16.220
16.4. A RADIÁLIS INHOMOGENITÁS VIZSGÁLATA.....	16.229
16.5. A REAKTOR MODELL.....	16.230



16.6. RENDSZERANALÍZIS	16.231
17. MŰANYAGGYÁRTÓ TECHNOLÓGIAI RENDSZER MODELLEZÉSE	17.235
17.1. A POLIMERIZÁCIÓS TECHNOLÓGIÁK JELLEMZÉSE	17.235
17.2. MODELLALKOTÁS	17.242
17.3. SZIMULÁCIÓ	17.252
18. MODELLALAPÚ TECHNOLÓGIAFEJLESZTÉS	18.256
19. ÖSSZEGZÉS.....	19.263
20. JELÖLÉSJEGYZÉK	20.266
21. IRODALOMJEGYZÉK	21.271

Bevezetés

A matematikai modellezés az elmúlt évtizedekben teret hódított a vegyészmérnöki gyakorlatban, és a számítástechnikai eszközök drámai fejlődése és elterjedése következtében a lehetőségek kiaknázásának folyamata jelenleg is intenzív szakaszban van. Nem könnyű pontos fogalmi meghatározást adni a matematikai modellről és modellezésről, manapság már olyan sokszínű, nem könnyű határt vonni a modellező és az elméletalkotó között sem [19, 32, 44, 63], ezért ezzel itt nem is próbálkozunk. A modellt a vegyészmérnöki megismerés eszközének tekintjük, és a konstruktív alkalmazását tartjuk fontosnak. Ma már a korszerű, színvonalas vegyészmérnöki feladatmegoldás többnyire modellezésen, szimuláción alapszik. Feltehető, hogy a kurzus végére mindenkiben rögzül az, ami a modellben, ill. a modellezésben fontos számára.

A témába való bevezetést a vegyészmérnöki modellezés szempontjából legfontosabb „vegyészmérnöki felismerések” vázlatos áttekintésével kezdjük. *Damköhler* a komponenstömeg, az entalpia és az impulzus megmaradásra épülő mérlegegyenleteivel megalkotta a „vegyészmérnöki Maxwell egyenleteket” [25]. *Bird, Stewart, Lightfoot* tankönyvük megírásával jelentősen hozzájárultak ahhoz, hogy ezen egyenletek a mérnöki gyakorlatban is elterjedjenek [15]. A „fundamentális egyenletek” bázisára épülő analógia és hasonlóságelmélet az egyenletekben szereplő paraméterek meghatározására irányult (pl. *Chilton-Colburn* féle j-faktor [22]). *Dancwerts* a tartózkodási idő eloszlás fogalmának bevezetésével a különböző hidrodinamikai modellek definícióját [26], a szegregációval (mikro és makro keveredés) pedig a „fáziselem”-„berendezés” szintek közötti információátvitelt alapozta meg [27]. Ugyancsak az információátvitel lehetőségét ismerte fel *Thiele* [59], illetve vele párhuzamosan *Zeldovich* [65] a heterokatalízisben. *Bowman* mutatott rá először a diszkrét és folytonos kapcsolatára [18], majd *Amundson* általánossá tette azt [2, 66]. *Hulburt* és *Katz* az individuális elemeket tartalmazó fázisok leírására a populációmérleget használja [37], így - ahogyan a termodinamikában is [33] - a vegyészmérnöki gyakorlatban is, mind a térelmélet, mind a korpuszkuláris elmélet egyaránt jelen van. A különböző modelleken alapuló rendszeranalízissel kapcsolatban

már számos szerző nevét kellene megemlítenünk. Csak példaként *Amundson*, aki a vegyészmérnöki tudomány szinte minden – de különösen az egzisztencia, unicitás, és stabilitás – területén nagy matematikai apparátust alkalmazott [5], *Aris* a reaktoranalízisben [6], *Himmelblau* és *Bischoff* a vegyipari rendszeranalízisben [35] alkotott maradandót. A vegyipari folyamatok, jelenségek egyre pontosabb leírása, egyre bonyolultabb modellekhez vezetett. A bonyolultság leküzdése céljából megjelentek a különböző hierarchikus szemléletek. Néhány a sok közül: *Himmelblau* és *Bischoff* a műveleti egységet, mint strata típusú termodinamikai rendszert tekinti [35], *Boreszkov* és *Szlinko* többfázisú reaktorok leírásánál alkalmazza [17], míg *Kafarov* és *Dorohov* általános műveleti egységre értelmezi [41]. A hierarchikus modellezésben még inkább fontossá válik az információátvitel, ahol az alsóbb szintű információk integrálással vihetők át a magasabb szintekre (ld. pl. *Whitaker* ill. *Gray* munkáit [64]).

A vegyészmérnöki tudomány a számítástechnikával szoros kapcsolatban fejlődött, és más egyéb mellett a szimulátorok is a vegyészmérnökök hatékony eszközeivé váltak. Az első digitális szimulátort *Selfridge* publikálta [54], majd sorra jelentek meg a különböző vegyipari szimulátorok. Ez utóbbiak nagy része a technológiát műveleti egységek, mint termodinamikai rendszerek hálózatának tekinti (flow-sheeting, pl. PACER [23]).

A magyarországi vegyészmérnökképzésben meghatározó jelentőségű szerepet töltött be *Benedek Pál* és *László Antal* 1964-ben megjelent könyve „A vegyészmérnöki tudomány alapjai”, amelyet a későbbiekben több világnyelvre is lefordítottak [12]. Ennek a könyvnek a központi eleme a műveleti egység, amely egy termodinamikai rendszerként írható le, a transzport egyenletek megfelelő értelmezésével, a vegyészmérnökséget megalapozó (a villamosságban Maxwell egyenleteivel analóg) *Damköhler* egyenletek kibővítésével. A műveleti egységekből bármelyik technológiai rendszer „összerakható”. Ez a rendszerszemlélettel interpretált megközelítés gyorsan elterjedt az oktatásban és a vegyészmérnöki kutatásokat is inspirálta. A vegyészmérnökök körében a korszerű rendszerszemlélet kialakulását nagyban segítette *Almási Gedeon* munkássága, aki a kutatásokat a Kalman-féle

rendszer fogalom megismertetésével és alkalmazásával gazdagította [3, 4]. A technológia bonyolultsága a műveleti egységek definiálásával áttekinthetőbbé vált, de az ismeretek bővülésével a műveleti egységek is egyre bonyolultabbaknak tűntek. A műveleti egységek „mélyére” nézve a hierarchikus rendszerszemlélet nyújtott segítséget. A hetvenes évek legelejétől a hierarchikus modellezés szemlélete kezdett elterjedni. *Holderith József* a reaktorok hierarchikus modellezését [36], *Árva Péter* a teljes technológiai rendszer hierarchikus modellezését célozta meg [8, 9]. *Blickle Tibor* a teljes technológiai rendszer struktúráját elemezte algebrai módszerekkel [16], amit *Csukás Béla* a strukturális kibernetika [24] mentén továbbfejlesztett. Kevesebb írásbeli dokumentum maradt fenn *Jedlovsky Pál* munkásságáról, aki viszont mindegyik terület aktív és érdemi bírálatával segítette a kutatókat [40].

Ebben a tankönyvben az *Árva Péter* (1938. Balmazújváros - 2006. Veszprém) által megalapozott, az oktatásba és kutatásba bevezetett *hierarchikus modellezési koncepciót* mutatjuk be. A tartalom három fő részből áll. Az **első rész** az előzményeket (1-3. fejezetek, rendszertechnikai és vegyészmérnöki ismeretek) tartalmazza, a **második rész** a hierarchikus modellalkotási koncepciót és a hozzá kapcsolható szimulációs eszköztárat (módszertant, 4-12. fejezetek) mutatja be, a **harmadik rész** pedig esettanulmányok formájában a vegyészmérnöki alkalmazási lehetőségekre világít rá (13-19. fejezetek).

Az *első fejezet* egy rendszertechnikai áttekintést ad, amely a vegyészmérnöki feladat típusokból kiindulva, a legfontosabb rendszer definíciók, tulajdonságok és technikák bevezetésével foglalkozik. A *második fejezet* bemutatja a vegyészmérnök által használt rendszermodellek egy lehetséges csoportosítását, a legfontosabb modellek jellemzését. Abban az időben, amikor a rendszerszemlélet a vegyészmérnökségben kezdett dominánssá válni, ezek az ismeretek külön tantárgy keretében jelentek meg a korábbi tantervekben (*Rendszeranalízis*). Az *a posteriori* modellezés technika részleteit az *irányításelméletben* tanulhatják meg [58].

A „*Kémiai technológiai rendszerek hierarchikus modellezése*” nem a fizikai kémia, a termodinamika és a vegyipari művelettan ismereteinek egy korszerű

megjelenési formája, hanem az e tantárgyakban tanult ismereteknek egy *konzisztens, integrált formában* való hasznosítása a technológiai rendszerek megismerésében, irányításában és tervezésében. A kettő közötti kapcsolatot hivatott megteremteni a *harmadik fejezet*. Ebben kiemeljük a modellekben használt változók (tulajdonságok) típusait, a közöttük lévő összefüggéseket (törvényszerűségek), és az extenzív mennyiségekre vonatkozó mérlegkészítésnek azt a szemléletét, amelyet a hierarchikus modellek megalkotásában is követni fogunk.

A *negyedik fejezet* a technológiai rendszer struktúráját vázolja fel. Ha valami bonyolultnak tűnik számunkra, akkor a *Descartes-i elvet* követve célszerű azt egyszerűbb részeire felbontani, szakszóval kifejezve *dekomponálni*, majd a részek ismeretében a közöttük lévő kapcsolatokat is figyelembe véve, megismerni az egészet. (Megjegyezzük, hogy ez a megismerési technika nem minden tudományterületen használható konstruktívan, a vegyipari technológiák elemzésében viszont hatékony szemléletet jelent.) Itt soroljuk fel azokat az alapelveket is, amelyeket a modellezés során követünk majd. A *kémiai technológiai rendszer* (KTR) bonyolultsága miatt a struktúra pontos megfogalmazása nagy segítséget jelent a modellezés hosszas folyamatában.

Az *ötödik fejezet* a diszkrét rendszerek modellalkotásával foglalkozik. Az additív módon összerakott elemmodelleket a kapcsolatok modelljével kell kiegészíteni. Az erre vonatkozó információkat gyakran mátrix formában adjuk meg. Kitérünk itt a vegyipari technológiák leggyakoribb kapcsolataira és bemutatunk egy lehetőséget a nagyméretű hálózatok egyszerűsített leírására (modell redukció) is.

A *hatodik fejezet* tartalmazza a folytonos rendszerek modellezésére vonatkozó ismereteket. A KTR hierarchikus modellezésének ez a kulcs fejezete számos, nemcsak látszólagos ellentmondás „mérnöki kezelésével”. Az első ellentmondás mindjárt az, hogy a dekompozíció során mindig diszkrét rendszerekhez jutunk. Sok rendszerelem esetén viszont, bizonyos kritériumok teljesülése esetén, mégis megteesszük, hogy egy folytonos fázistérben írjuk le a rendszert. A folytonos fázistérben az elemszámra lehet differenciális mérleget készíteni. Az adott rendszerre ez minden információt magába

foglal, de a számításhoz szükséges input információk általában hiányoznak. Ezért a „túlzott” részletességet képviselő információkat, a fázistér koordinátái szerinti integrálással próbáljuk eliminálni (eltüntetni, kiszűrni), és az integrált rendszerváltozókat tartalmazó autonóm modelleket megalkotni. Itt jelentkezik a következő ellentmondás, nevezetesen az, hogy ezt általában nem lehet megtenni, de mégis megteesszük. Gondoljunk például a termodinamikai fázisra vonatkozó transzport egyenletekre, amelyek az egyes molekulákat jellemző mennyiségeket már nem tartalmazzák, és a molekula szintű leírástól függetlenek. Ezzel az alapvető kérdéssel a *hierarchiaszintek közötti információátvitel* kérdéseként foglalkozunk. Ez világítja meg azt, hogy ugyanannak az objektumnak különböző információtartalmú modelljeiről beszélhetünk.

Kiemeljük, hogy itt az információátvitel *soros* technikáját követjük, azaz a makroszintű modellt függetlenítjük a mikroszinttől. *Lakatos Béla* a szintek közötti *párhuzamos* információátviteli technikát (mikro és makroszint együttes kezelése) alkalmazva dolgozta ki hierarchikus modellezési módszerét [42]. A több fázisú modellezésben érdekes vizsgálati lehetőséget jelent az, amely során a diszperz rendszert folytonosként, a diszpergált rendszert pedig diszkrétként kezeljük. Az ilyen rendszerekre *Ulbert Zsolt* dolgozott ki modellezési technikát [60].

A *hetedik fejezet* az azonos típusú (egy komponensű) *molekulákból álló rendszerek* (MÁR) modellezését tekinti át. Ez a KTR tipikus hierarchia szintjeinek legalsó foka. Ez akár tudománytörténeti áttekintés is lehetne, hiszen ezt *Boltzmann* már a XIX. században leírta, és jelenleg is a statisztikus termodinamika alapját képezi. Ugyanakkor ez segíti a fizikai kémiában megtanult fogalmak alaposabb megismerését és rávilágít arra, hogy a Boltzmann által követett gondolatmenet a hierarchikus modellezési koncepció prototípusa.

A *nyolcadik fejezet* a következő hierarchiaszintet, a *több komponensű rendszerek* (TKR) leírását tartalmazza. Minden egyes komponensosztályra érvényes az előző szintű leírás, amely kibővül a komponensek közötti kölcsönhatás, nevezetesen a *kémiai reakció* és a komponens osztályok átlag sebessége közötti különbségből adódó

diffúzió leírásával. Bemutatjuk a tipikus kémiai reakciókat és azok sajátosságait. Egy polimerizációs esettanulmány keretében a nagyon sok komponenst tartalmazó ún. *multi komponensű rendszerek* (MKR) modellalkotásával is megismerkedünk.

A *kilencedik fejezet a fáziselemekből felépülő rendszerek* (FÁR) modellalkotását tartalmazza. Az előző két szint elsősorban a vegyészek tevékenységének területe, ez a hierarchiaszint viszont már elsősorban a vegyészmérnöki feladatok színtere. Mind a fáziselem, mind a FÁR a termodinamikai fázis tulajdonsággal bír. A nagy elemszám miatt folytonos rendszerként kezelendő. A hierarchia szintre vonatkozó konkrét ismeretek zömét a művelettanban tanulhatják meg. Itt a szintek közötti információátviteli problémák az *áramlástanban* és a *méretnövelésben* jelennek meg. A kristályosítás példájával világítjuk meg azt az esetet, amelynél a rendszer szintű leírásban a rendszerelem egy tulajdonsága is megjelenik.

A *tizedik fejezet a többfázisú rendszerek* (TFR) leírásával foglalkozik. Itt bemutatjuk, hogy a komponens- és hőátadásra vonatkozó ismeretek, melyeket a művelettanban és géptanban elsajátítottak, hogyan integrálhatók a hierarchikus modellezési koncepció keretébe.

A *tizenegyedik fejezet* a magasabb hierarchiaszintek specifikumaival foglalkozik. A *berendezés elem*, ill. *berendezés szintek* azok, amelyeken a vizsgálati idő, ill. a geometriai tér határai véglegesen rögzülnek. Ezek a megkötések adják a kezdeti és peremfeltételeket. Az eddigi fejezetekben egy-két kivételtől eltekintve túlnyomóan a derékszögű koordináta rendszert használtuk. A berendezés (elem) alakja miatt azonban, a szimmetria viszonyok kedvező kihasználása végett, más koordináta rendszert is használhatunk, ezért foglalkozunk a koordináta rendszerek kapcsolatával is. Bár a szinteken felfelé haladva a rendszer elemek száma monoton csökken, de még itt is előfordulhat a folytonos térben való leírás.

A *tizenkettedik fejezetben* a rendszer szimuláció legfontosabb fogalmait és eszközeit tekintjük át, bemutatjuk, hogy tipikus mérnöki feladatok megoldásához (a modellek megoldásához) milyen szoftverek állnak a mérnök rendelkezésére.

A *tizenharmadik fejezetben* egy egyszerű, jól áttekinthető többkomponensű gőz folyadék egyensúlyi modellel nyitjuk az esettanulmányok sorát. A rendszeranalízis eszköztárából itt egy *érzékenységi modell* megalkotását és annak alkalmazását szemléltetjük.

A *tizennegyedik fejezetben* a gyakran használt és a tankönyvekben is a leggyakrabban előforduló kevert reaktor modellalkotását és rendszeranalízisét mutatjuk be. Részletes stabilitásvizsgálatot végzünk és illusztráljuk azt, hogy a legegyszerűbb szerkezetű reaktor, a legegyszerűbb kémiai reakció esetén is dinamikai viselkedésében mennyire „kiismerhetetlen” lehet.

A *tizenötödik fejezetben* az előző fejezet reaktorát annyiban bővítjük, hogy a reakcióban két komponens vesz részt és az egyiket szilárd formában juttatjuk a reaktorba. Ez már a kétfázisú reaktorok világába visz és a komponens átadás problémája sem a megszokott, hiszen itt a folyadék fázis az individuális elemeket tartalmazó szilárd fázissal kerül kölcsönhatásba.

A *tizenhatodik fejezetben* egy egyensúlyi exoterm reakciót magába foglaló, heterokatalitikus, ipari méretű reaktor részletes modellalkotását mutatjuk be, amelyben számos szintet definiálunk és így a hierarchikus modellezés számos elemével találkozunk. Többféle megközelítést is bemutatunk az információátvitel megoldására, amelyben felhasználjuk a témakör szakirodalmának legfontosabb fogalmait, kiemelve a hierarchikus modellezés előnyeit. Az analízis során az *egyensúlyi* és az *optimális hőmérséklet profil*, valamint a *reaktor elfutás* fogalmával megismerkedve, *stabilitás* vizsgálatot is végzünk.

A *tizenhetedik fejezetben* bemutatott műanyaggyártó rendszer modellezése kapcsán foglalkozunk a műanyaggyártó technológiák specifikumaival, tipikus polimerizációs modelleket mutatunk be és rávilágítunk a kereskedelmi szimulációs szoftverek alkalmazhatóságára is.

A *tizennyolcadik fejezetben* azt mutatjuk be, hogy az ismertett modellezési koncepció, az arra épülő infrastruktúra és szoftverrendszer, hogyan alkalmazható egy szakaszos technológia *modell alapú kifejlesztésében*.

Végül a *tizenkilencedik fejezetben* újra összefoglaljuk a hierarchikus modellezés lényegét tömörítő folytonos rendszer modellalkotását, amely egységbe foglalja a művelettanban külön kezelt *Damköhler egyenleteket és populációs modelleket*.

Nem célunk a vegyipari objektumok széleskörű modellezési palettájának a teljes áttekintése, inkább arra törekszünk, hogy a termodinamikai és vegyipari művelettan ismereteket kiegészítve, egy konzisztens modellezési technikát fogalmazzunk meg azokkal a fogalmakkal, gyakran használt elemekkel, és rendszert építő elvekkel, amelyek az összetett rendszerek hatékony modellalkotását megalapozzák. Elsősorban az összefüggések determinisztikus kapcsolatait elemezzük, a statisztikus elemzések, összefüggések módszertanát illetően *Abonyi János* munkásságára utalunk [1]. A modellek analitikus, vagy numerikus megoldásának részletezése, a modell alapú rendszeranalízis kifejtése az előadásokhoz kapcsolódó gyakorlatok témája lesz.

A tankönyv anyagát az eddigi, különböző szakokon megtartott előadások demonstrációs anyagai alapján állítottuk össze (*ennek egy 25 oldalas „sűrítőmánya” a Pannon Egyetem Környezetmérnöki Tudástár [29] része, mely anyag a HEFOP 3.3.1-P.-2004-0900152/1.0 téma keretében készült a Pannon Egyetemen*). Ez az oka annak, hogy minden ábra, táblázat, kép, szövegek közötti összefüggés, néhány eset kivételével, ábra formájában jelenik meg. Ez a szerkesztési forma a lényeg kiemelésén túl a mindenkori előadó órára készülését is segíti.

A változók értelmezése általában a szövegek környezetben megtalálható, az általánosan használt jelöléseket külön is összefoglaltuk. A megjelenő modellek konzisztensek olyan értelemben, hogy invariánsak a mértékegységekre, azaz az alap mennyiségek (tömeg, idő, hosszúság, hőmérséklet, továbbá a hierarchikus modellezésben a számosság) mértékegységeinek tetszőleges rögzítése után, bármely konzisztens mértékegység rendszerrel használhatók.

1. Rendszertechnikai áttekintés

Ebben a részben felvázoljuk a legfontosabb mérnöki feladatosztályokat, foglalkozunk a különböző rendszerdefiníciókkal, érintjük a legfontosabb rendszer tulajdonságokat és végül kiemeljük az összetett rendszerek vizsgálatában használt dekompozíció-koordináció elvét.

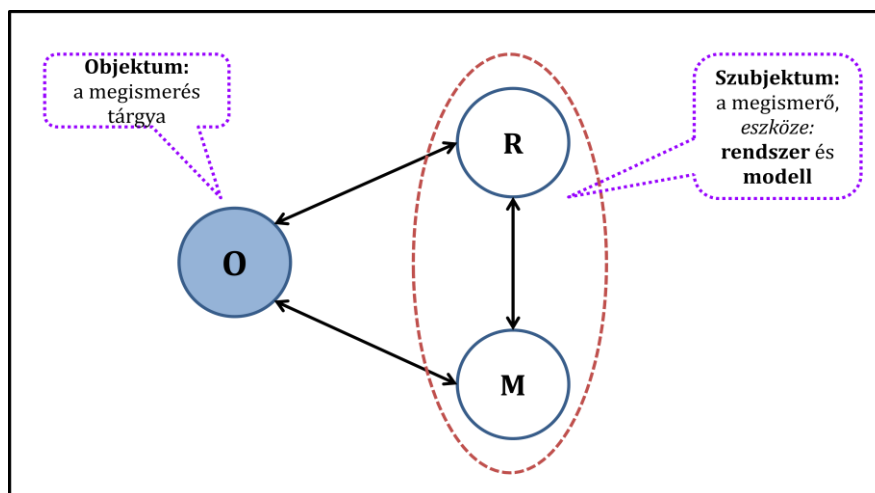
1.1. A mérnöki feladatosztályok

A mérnök munkáját mindig a feladatban meghatározott célok motiválják és a mérnök arra törekszik, hogy a feladatot a rendelkezésre bocsátott erőforrások felhasználásával, a kitűzött határidőre elvégezze, vagy rosszabb esetben bebizonyítsa, hogy az adott feladatnak az adott korlátok között nincs, az elvárásoknak megfelelő megoldása. Ez utóbbi esetben a feladatot pontosítani kell. A mérnöki feladat közvetlenül, vagy közvetve mindig valamilyen technológiai objektumhoz (TO) kötődik és többnyire besorolható az 1.1. ábrán látható osztályokba.

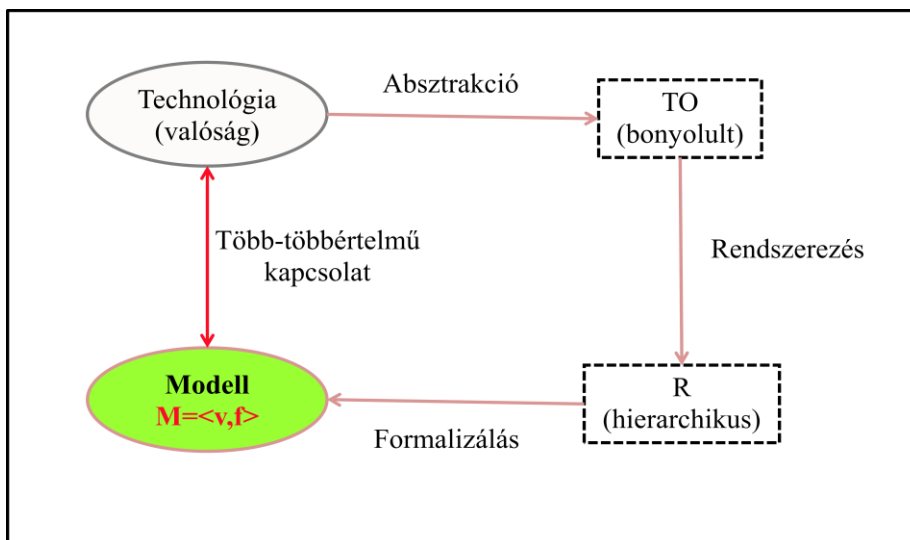
A feladat tárgyát képező objektum *megismerése* minden feladatmegoldás kiinduló pontja. Filozófiai értelemben a megismerés az objektum (O) és szubjektum (S) bonyolult kölcsönhatásában jön létre (1.2 ábra), konstruktív eszköze a modell. A modellalkotás során, a jobb áttekinthetőség végett, a rendszerszemléletet követjük (1.3. ábra). A kiváló számítástechnikai lehetőségek miatt a modell ma már leginkább matematikai modellt jelent. Az objektum tulajdonságait változókká, az érvényesülő törvényszerűségeket pedig összefüggésekké képezzük le. Formálisan a modell a változók és összefüggések halmazainak kettőse. Az 1.3. ábrán látható, hogy a valóság és a modell kapcsolata mindig több-több értelmű, ami azt jelenti, hogy egy objektumnak sokféle modellje lehet, ill. ugyanaz a modell más-más objektumot is visszatükrözhet.

	MEGISMERÉS (modellen keresztül)	IRÁNYÍTÁS (üzemeltetés)	TERVEZÉS (fejlesztés)
A feladat megfogalmazása	<p>Adott: A TECHNOLÓGIAI OBJEKTUM (TO), amit vizsgálunk</p> <p>Meghatározandó: Mely MENNYISÉGEK és TÖRVÉNYSZERŰSÉGEK alkalmasak, az elvégzendő FELADAT szempontjából az OBJEKTUM VISSZATÜKRÖZÉSÉRE?</p>	<p>Adott: A MŰKÖDŐKÉPES TO (M matematikai modell) és a gazdasági célt kitűző CÉLFÜGGVÉNY (G).</p> <p>FELADAT: Az OPTIMÁLIS működés biztosítása</p> <p>Modell analízise: SZABADSÁGI FOK ($n \geq 1$) ↓ IRÁNYÍTÁSI VÁLTOZÓK (U)</p>	<p>Adott: Egy FUNKCIÓ</p> <p>Meghatározandó: TO</p> <p>Probléma: Ugyanazon FUNKCIÓ ellátására számtalan TO alkalmas, minden TO sokféleképpen működhet. A FUNKCIÓ ellátására alkalmas objektumok OPTIMÁLIS ÁLLAPOTAIT kell összehasonlítani (irányított TO) és gazdasági szempontból a legjobbat választani.</p>
Absztrakció	<p>MENNYISÉGEK → matematikai változók (V)</p> <p>TÖRVÉNYSZERŰSÉGEK → matematikai összefüggések (F)</p> <p>MATEMATIKAI MODELL: $M = \langle V, F \rangle$</p>	<p>$\text{extr}_U G(V)$</p> <p>FELTÉTELEK: M</p> <p>FELTÉTELES SZÉLSŐÉRTÉK PROBLÉMA (matematika, számítástechnika)</p>	<p>KOMBINATORIKUS ROBBANÁS (intuíció, próbálgatás, evolúció, tapasztalat)</p> <p>A KOMPLEXITÁS ELLENSZERE: RENDSZERELMÉLET és INFORMÁCIÓTECHNOLÓGIA</p>

1.1. ábra. Mérnöki feladat osztályok.



1.2. ábra. A megismerési folyamat.



1.3. ábra. Modellezési koncepció.

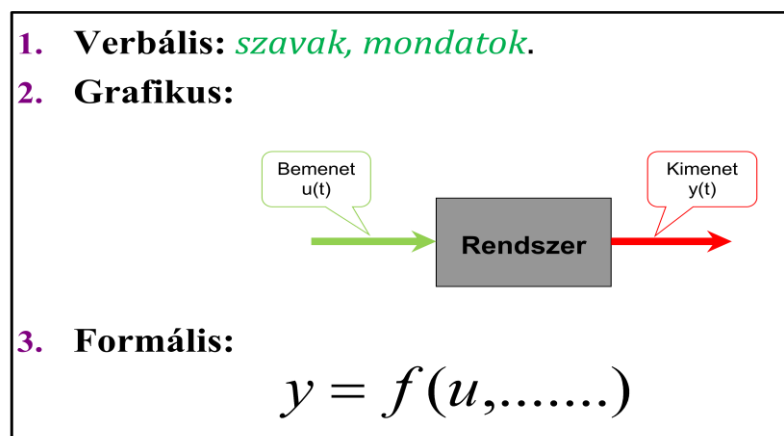
A megismerés létező és nem létező objektumra is irányulhat. A következő feladat osztály az *irányítás* viszont már többnyire létező, esetleg már elképzelt és a modelljén keresztül ismert technológiai objektumra irányul. Az irányítási célt mindig egy vektor skalár függvénnyel formalizáljuk, majd szabadságfok elemzéssel meghatározzuk azon változók körét, amelyekkel az objektum működését befolyásolhatjuk, és amelyek értékét az értelmezési tartományukban variálva, a célfüggvény szélsőértékét keressük. Költség jellegű célfüggvénynél a minimumot, haszon jellegűnél pedig a maximumot keressük. Így az irányítás egy feltételes szélsőérték feladat keresésben formalizálható. (Megjegyezzük, hogy a maximum keresés a célfüggvény előjel váltásával minimum kereséssé alakítható át, ez oka annak, hogy a numerikus szakirodalomban általában minimum kereséssel találkozunk.)

A legösszetettebb mérnöki feladat a TO *tervezése*. Itt adott egy valamilyen termékek előállítását kitűző funkció, amely sokféle nyersanyagból kiindulva, sokféle műveleten keresztül haladva ellátható. Ez szinte megszámlálhatatlanul sok TO-t jelenthet és az optimálisan működtetett (irányított) objektumok közül kell kiválasztani a gazdasági szempontból legjobbat. Ez is egy feltételes szélsőérték feladatban formalizálható, de nem véletlen, hogy ennek megoldásában a logikán túlmenően heurisztikus szabályokat is alkalmazunk. A logikailag elképzelt összes struktúra (ún. *szuper struktúra*,

„kombinatorikus robbanás”) száma heurisztikus szabályok alkalmazásával drasztikusan lecsökkenthető, és ezáltal a tervezési feladat megoldható lesz.

1.2. Rendszer definíciók

A *rendszer szemlélet* alkalmazása ma már a tudomány szinte minden területén elfogadott és a mindennapi életünkben is egyre nagyobb teret nyert, konstruktív alkalmazhatósága vitathatatlan. Az évtizedek során számos rendszer definícióval találkozhattunk, a különböző területeken más és más lehet a hatékonyan alkalmazható megközelítés. Formáját tekintve beszélhetünk *verbális*, *grafikus* és *formális* definíciókról (1.4. ábra). A verbális definíció szavakban, mondatokban, a grafikus pedig ábrákkal, esetleg gráfokkal fejezi ki a rendszer adott területen releváns tartalmát. Ezek elsősorban a menedzsmentben elterjedtek, hiszen ott a rendszerek (szervezetek) részei intelligens emberek, akik a verbális, ill. grafikus nyelvet jól értik. A mérnöki területen ugyanakkor, ahol a számítógép a rendszer része, a formális, algoritmizálható matematikai összefüggések a konstruktívan használható formák.



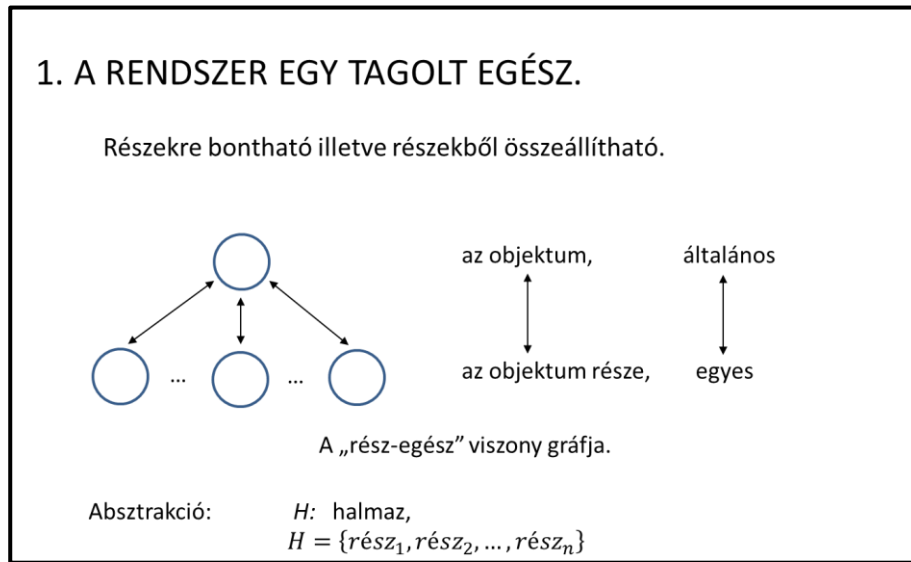
1.4. ábra. Rendszer definíció osztályok.

Egyetlen verbális rendszer definíció helyett a fogalom tartalmát az alábbi kijelentésekkel világítjuk meg:

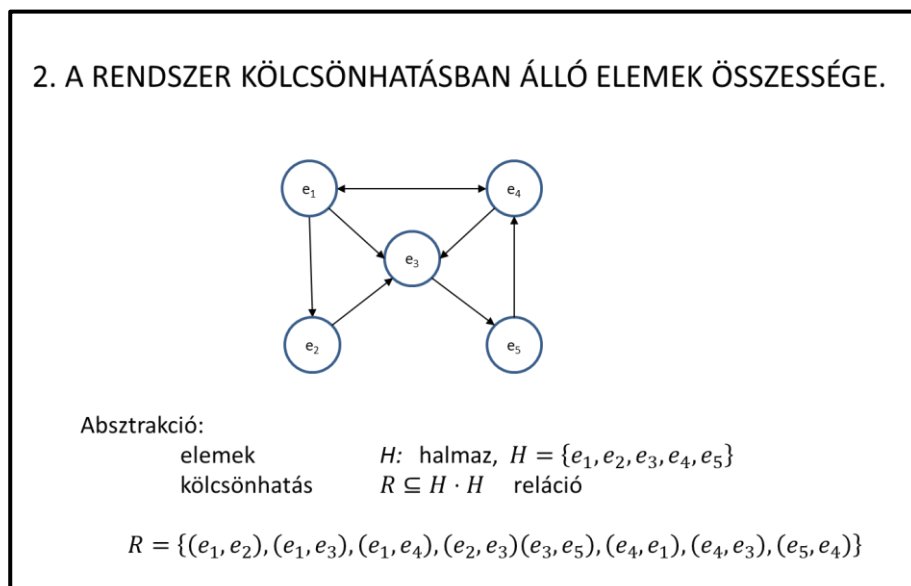
1. A rendszer egy tagolt egész.
2. A rendszer kölcsönhatásban álló elemek összessége.

3. A rendszer egy sajátos egység.
4. A rendszer eleme is rendszer.

Az első két verbális kijelentés tartalmát, az 1.5.-1.6. ábrákon grafikus és formális alakban is megjelenítjük. A grafikus forma egy-egy gráf. Az első kijelentés formalizálva egy halmazt eredményez, a második pedig a halmazon értelmezett relációt adja.

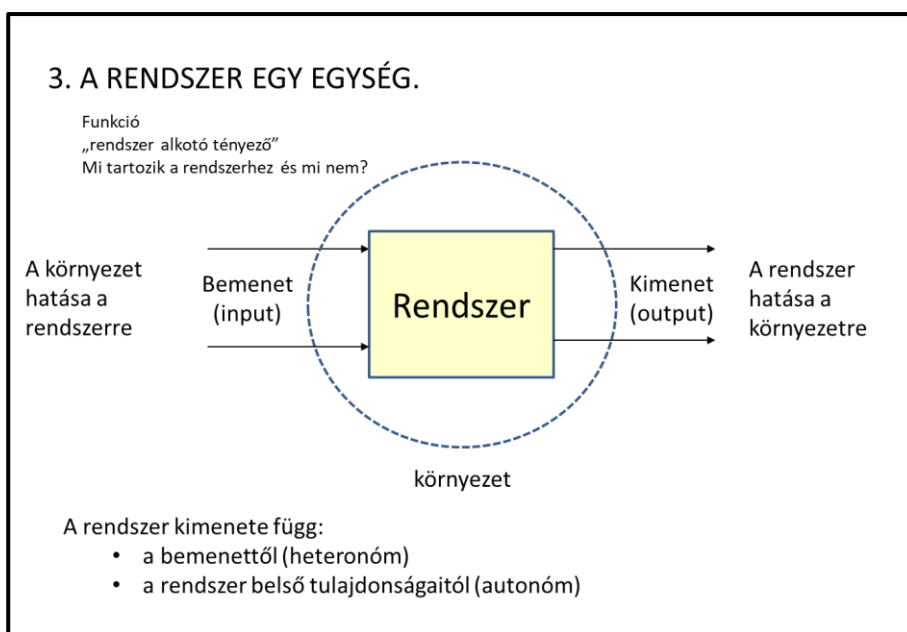


1.5. ábra. A rendszer egy tagolt egész.



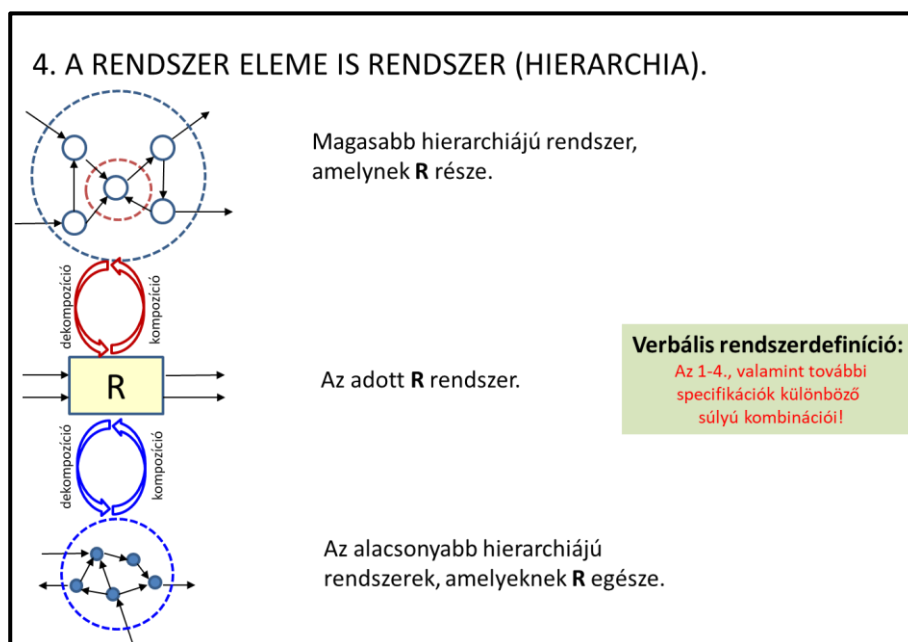
1.6. ábra. Kölcshatásban álló elemek összessége.

A rendszer definíció teljességéhez az is hozzátartozik, hogy a kölcsönhatásban álló elemeket elkülönítsük a „minden mindennel összefügg” bonyolult (holisztikus) világtól. Ezt fejezi ki a harmadik kijelentés (1.7. ábra), amely a rendszert szembeállítja a rendszerhez nem tartozó világgal, a rendszer környezetével. A sajátos egység egy tág értelmezést takar, lehet ez például egy funkció, de egyéb „rendszeralkotó tényező” is. A rendszer és környezete között persze megmarad a kölcsönhatás, amely két nagy csoportba sorolható. Az egyik a környezet hatását fejezi ki a rendszerre, ez lesz a rendszer bemenete (*input*, inger, stb.). A másik a rendszer hatását fejezi ki a környezetre, és ez lesz a rendszer kimenete (*output*, válasz, reakció, stb.). A rendszer vizsgálata során (átmeneti jelleggel) feltételezzük, hogy a rendszeréhez képest a környezet kapacitása végtelen, így a bemenet nem függ a kimenettől. Ez lehetővé teszi, hogy a rendszervizsgálatban a bemenet adott, és csak azt kell vizsgálnunk, hogy a bemenettől, hogyan függ a kimenet.



1.7. ábra. A rendszer egy sajátos egység.

Bonyolult rendszerekre igaz a negyedik kijelentés (1.8. ábra), amely a *hierarchikus rendszer* fogalmához vezet el. A hierarchia a bonyolultság áttekinthetőségének az eszköze. Ez teszi lehetővé a nehezen vizsgálható sokelemű rendszerek elkerülését, ugyanakkor a hierarchiába sorolásnak is megvannak a szükséges feltételei.

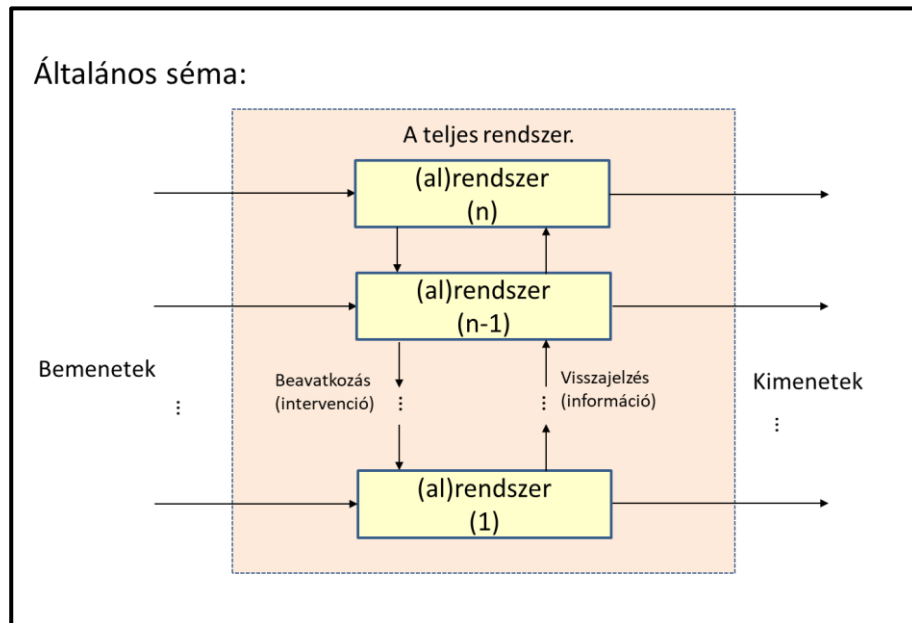


1.8. ábra. A rendszer eleme is rendszer.

A fentiek figyelembevételével kijelenthetjük, hogy a mérnöki területen használható bármelyik verbális definíció megadható az 1-4. kijelentés, valamint (ha szükséges) további specifikációk különböző súlyú kombinációjával.

A hierarchikus rendszerek egy általános sémáját szemlélteti az 1.9. ábra. A különböző hierarchia szintek kapcsolata szerint különböző típusokat különböztetünk meg (1.10. ábra). Tanulmányaink során az alábbi példákkal találkozhatunk:

- *Strata* típusú hierarchikus rendszer: egy technológiai objektum *a priori* jellegű *hierarchikus modell rendszere* (e tankönyv témaköre).
- *Layers* típusú hierarchikus rendszer: egy technológiai objektum *hierarchikus irányítási rendszere* (egy „irányítás” tankönyv [58] témaköre).
- *Echelons* típusú hierarchikus rendszer: egy *hierarchikus szervezet* (menedzser tantárgyak témaköre).



1.9. ábra. Hierarchikus rendszer.

<p>Strata</p> <p>Layers</p> <p>Echelons</p>	<p>a leírás mélysége (részletessége) szerint,</p> <p>a döntés összetettsége szerint,</p> <p>prioritások szerint.</p>
--	--

1.10. ábra. Hierarchikus rendszer osztályok.

1.3. Formális rendszerdefiníciók

A legegyszerűbb formális definíció az *Alfred Tarszki (1901. Varsó – 1983. Berkeley)* nevéhez köthető *relációs rendszer*, amelyet ő a nyelvi kutatásai során fogalmazott meg, de a mérnöki területen is alkalmazható a fogalom. A relációs rendszerek legegyszerűbb formája az alábbi kettős:

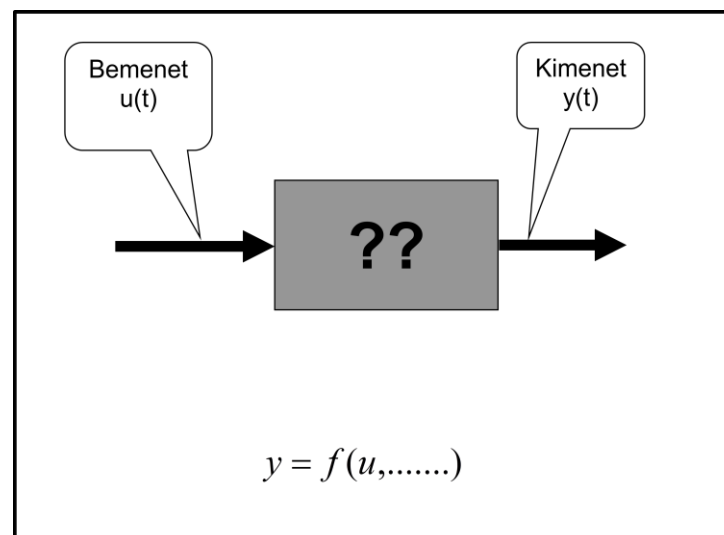
$$S = \langle E, R \rangle$$

ahol: S a relációs rendszer, E az elemek halmaza (eredetileg: egy nyelv *szavainak halmaza*), R a halmazon értelmezett valamilyen reláció (eredetileg: a nyelvre vonatkozó szabályok, a *nyelvtan*).

Ha az R például kettős reláció, akkor az R az E önmagával képzett Descartes szorzat részhalmaza.

A korábban már említett matematikai modell is tekinthető egy ilyen relációs rendszernek. A v változók a rendszer elemei, a változókon értelmezett f összefüggések pedig a relációk.

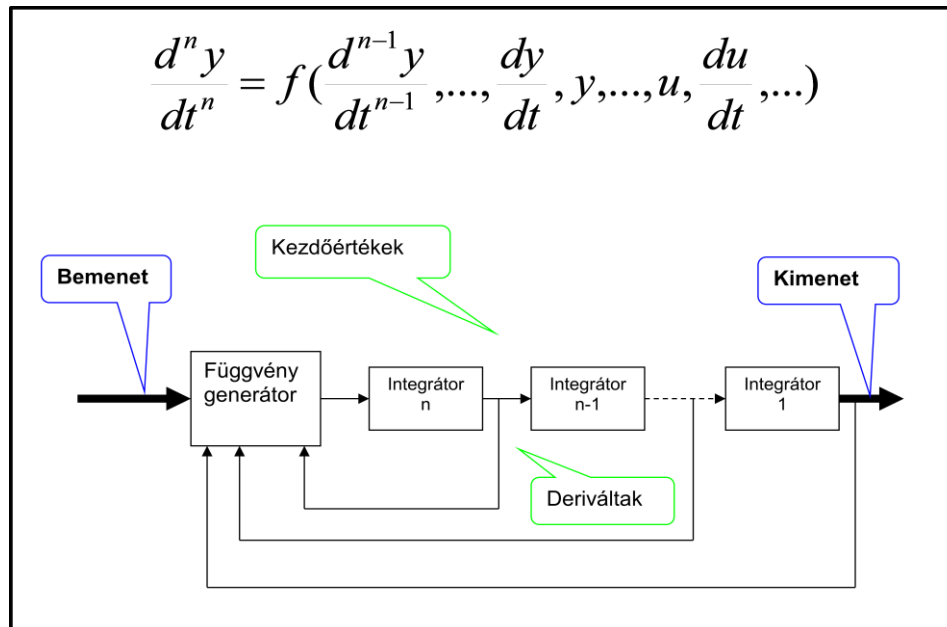
A mérnöki gyakorlatban leggyakrabban használt rendszer fogalmakban a bemenetek (u) és kimenetek (y) időfüggvények (jeleknek is nevezhetjük), a formális definícióhoz pedig hozzátartozik még az f függvény, amely rögzíti, hogy az értelmezett idő tartomány feletti bemenetektől, hogyan számíthatjuk ki az értelmezett idő tartomány feletti kimeneteket (1.11. ábra). Két ilyen alapvető rendszer fogalommal ismerkedünk meg, a bemenet, kimenet jeleket tartalmazó rendszer fogalommal (nevezzük a továbbiakban *bemenet-kimenet rendszernek*) és a *Kalman rendszerrel*.



1.11. ábra. Formális rendszer definíció.

A bemenet-kimenet rendszer definícióját és az összefüggés struktúráját az 1.12. ábra tartalmazza. A definíció szerint a kimenet n -ed rendű deriváltja az alacsonyabb rendű deriváltjainak, a kimenetnek, a bemenetnek és a bemenet különböző rendű deriváltjainak függvénye. A bemenőjel és deriváltjainak ismeretében ez a függvény leképezhető egy *függvénygenerátor* és n darab *integrátor* sorba kapcsolásával. Az integrátor egy olyan számítóelem, amelynek a bemenete egy függvény deriváltja, kimenete pedig maga a függvény. Mivel csupán egy megváltozásból nem számolható ki egy érték, ezért az integrátornak kezdő értéket kell adni. Egy n -ed rendű differenciálegyenlet megoldásához

n darab kezdeti feltételre van szükség. A függvény generátor a bemeneti információkból és a kimenetből valamint a szükséges deriváltjaiból, az f függvénynek megfelelően a kimenet n -ed rendű deriváltját rögzíti.



1.12. ábra. Bemenet kimenet rendszer.

A *Kalman rendszer* definíció ugyancsak a bemeneti és kimeneti jelek kapcsolatát fejezi ki, matematikai igényű definícióval [3]. A lényegét egyszerűen is felvázolhatjuk. A pillanatnyi kimenet nem csak a pillanatnyi bemenettől függ (ezt az előző definícióban a különböző rendű deriváltak fejezik ki), hanem valami mástól is. Ez a valami más a rendszer *belső állapota*, amely az x vektorral formalizálható (1.13. ábra). Így az aktuális kimenet az aktuális állapot és bemenet függvényében egy g algebrai (és nem differenciál) egyenlettel számolható. Ez a Kalman rendszer *kimeneti függvénye*. Az állapotmegváltozást az f ún. *állapot átmeneti függvénnyel* számolja, ugyancsak az aktuális állapot és bemenet felhasználásával. A p a definícióban használt egyéb paramétereket jelöli, amelyekkel a megfelelő valós rendszerhez illeszthetjük a modellt. Mivel az állapot átmeneti függvény egy n egyenletből álló differenciálegyenlet rendszer (DER) ezért n darab kezdeti értéket is specifikálni kell. Míg az előző definíció használata az *egy bemenetű egy kimenetű* (Simple Input Simple Output, SISO) rendszerek esetén előnyös, addig a Kalman rendszerrel a sokváltozós eset is nehézség nélkül kezelhető,


azaz *több bemenetű több kimenetű* (Multiple Input Multiple Output, MIMO) rendszerek esetén is jól használható. A Kalman rendszer struktúráját az 1.14. ábra szemlélteti (az ábra jobb felső részén egy három bemenetű két kimenetű rendszer szimbóluma látható). A központi számító eleme egy n változós integrátor, amelynek bemenete az állapot átmeneti függvény generátor (f) kimenete, a kimenete pedig az állapotváltozók aktuális értékei, ha azok kezdeti értékét előzőleg rögzítettük. A kimeneti függvény generátor (g) számolja az aktuális kimenet értékeket.

Állapot átmeneti függvény: $\frac{dx}{dt} = f(x, p, u)$

Kimeneti függvény: $y = g(x, p, u)$

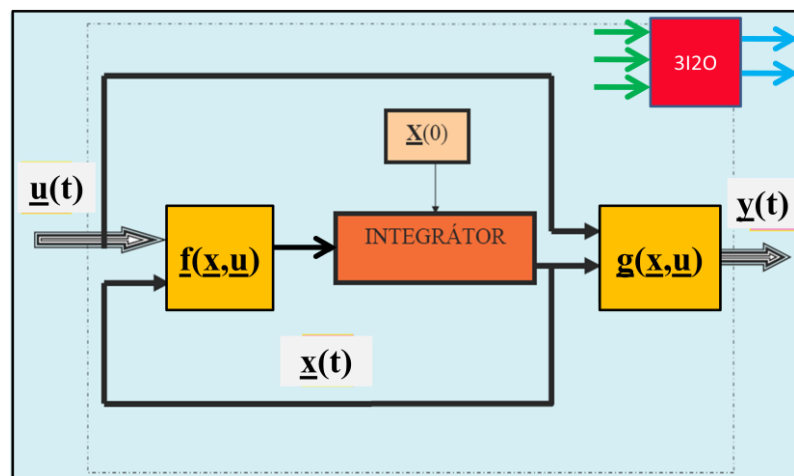
Kezdeti feltétel: $x(0)$ specifikált

Szabadsági fok terhére: bemeneti függvény $u(t)$, paraméter p , specifikált értékek.



*(Budapest, 1930. - Gainesville, 2016.)
Magyar-amerikai villamosmérnök, matematikus, a
műszaki tudományok doktora, a Magyar Tudományos
Akadémia tiszteletbeli tagja.*

1.13. ábra. Kalman rendszer.



1.14. ábra. A Kalman rendszer struktúrája.

1.4. A rendszerek általános tulajdonságai

A rendszerek egyik legfontosabb tulajdonsága a *struktúra* (1.15. ábra). A struktúrára vonatkozóan pontos definíciót adni nem könnyű. Része lehet ennek, hogy milyen elemekből épül fel, milyen jellegű kapcsolatok vannak az elemek között, mi a rendszer működésének célja, s minden olyan dolog, ami a rendszer szempontjából különösen fontos (1.16. ábra). A struktúrát leginkább a rendszer legfontosabb minőségi változóinak részhalmazával definiálhatjuk. A kémiai technológiai objektumok hierarchikus modellezésében erre konkrét példákat is láthatnak. A struktúra formális elemzésére a relációs rendszer fogalom alkalmazása teremt keretet.

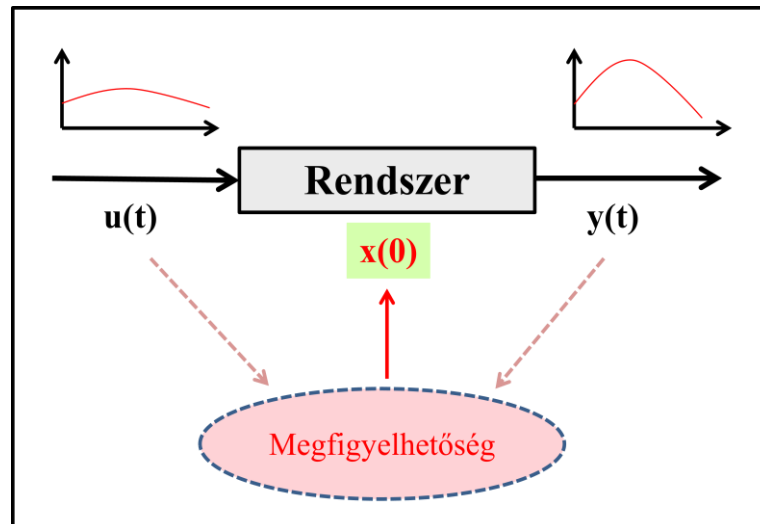
Struktúra
Megfigyelhetőség
Irányíthatóság
Stabilitás

1.15. ábra. Rendszerek általános tulajdonságai.

Minőségi változók halmaza.
Milyen részekből áll?
Milyen kapcsolatok vannak?
Működtetés célja?
Működést jellemző minőségi változók?
stb.

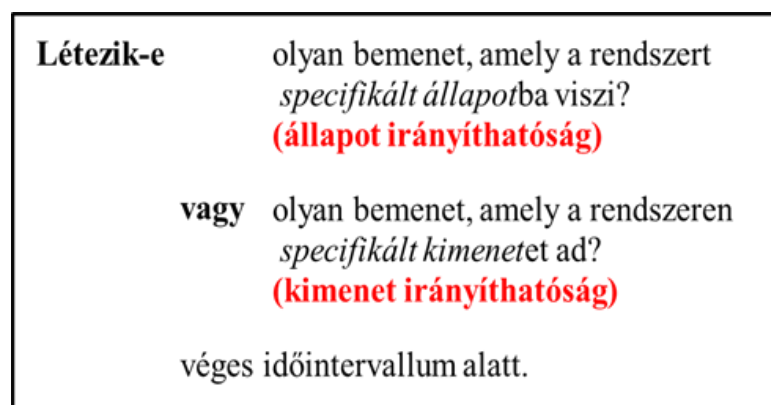
1.16. ábra. A struktúra definícióhoz.

Egy rendszer megismerhetőségével kapcsolatos a *megfigyelhetőség* fogalma. Egy rendszer megfigyelhető, ha a bemeneti és kimeneti adatok véges időintervallum feletti ismeretéből a rendszer kezdeti állapota meghatározható (1.17. ábra). Ez a fogalom parciálisan bármely állapotra, vagy az állapotok együttesére is értelmezhető.



1.17. ábra. A megfigyelhetőség definíciójához.

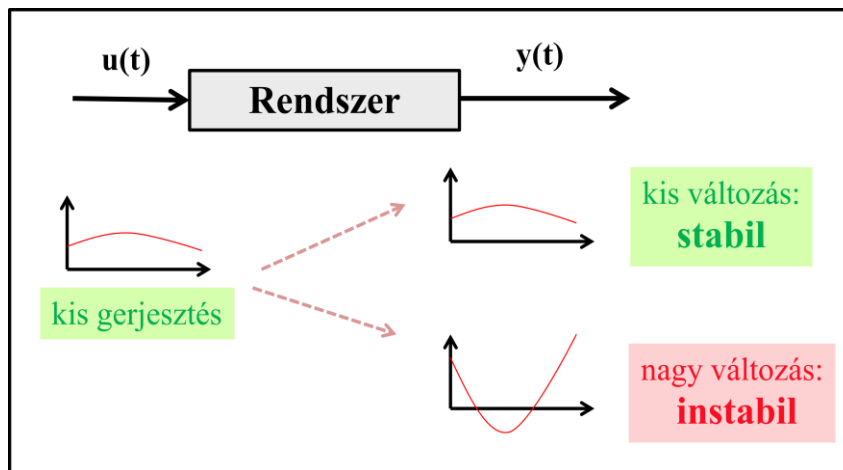
A technológiai rendszerek irányításában különösen fontos szerepet játszik az *irányíthatóság* fogalma (1.18. ábra). Beszélhetünk *állapot irányíthatóságról* és *kimenet irányíthatóságról* egyaránt. Állapot irányítható a rendszer, ha létezik olyan bemenet, amely a rendszert véges idő alatt egy előre specifikált állapotba juttatja. Ehhez hasonlóan kimenet irányítható a rendszer, ha létezik olyan bemenet, amely véges idő alatt az előre specifikált rendszer kimenetet eredményezi. Ezen fogalmak is értelmezhetők parciálisan az egyes tulajdonságokra, vagy azok együttesére. Irányíthatóságról csak akkor beszélhetünk, ha a rendszer legalább egy tulajdonsága irányítható.



1.18. ábra. Az irányíthatóság definíciójához.

Az irányított rendszer legfontosabb tulajdonsága a *stabilitás*, hiszen huzamos időn keresztül csak stabil rendszer működhet. A stabilitás ismérve az, hogy a bemenet

kismértékű változtatásával, a rendszer kimenete sem változik jelentősen. Ha a kismértékű bemeneti inger nagymértékű változást eredményez a kimeneten, akkor a rendszert *instabilnak* tekintjük.



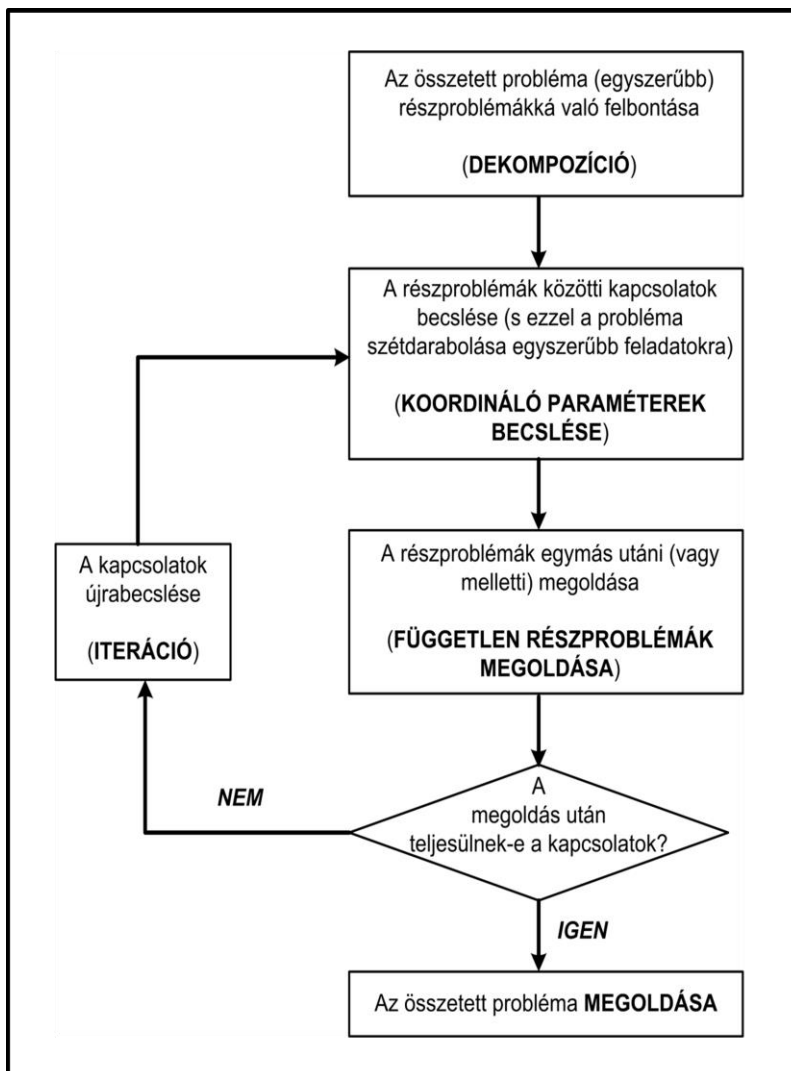
1.19. ábra. A stabilitás definíciójához.

A rendszertulajdonságok kérdésével a későbbiekben több ponton is találkozunk majd.

1.5. A dekompozíció-koordináció elve

A rendszerszemlélet alkalmazása során a bemenetet a környezet határozza meg és a rendszeranalízis keretében azt vizsgáljuk, hogy ennek függvényében a rendszer milyen kimenetet ad. Ezért a rendszermodell egy olyan függvénykapcsolat, amely a rendszer bemenetét a rendszer kimenetére képezi le. A technológiai rendszerrel kapcsolatos mérnöki feladatok összetettek, ezért a megoldásukat segítő „egyszerű rendszerek” definiálása nem triviális. A feladatmegoldásban a *dekompozíció-koordináció elvét* alkalmazzuk (1.20. ábra), amely eredményeként az összetett feladatot (rendszert) könnyebben megoldható részfeladatok (egyszerűbb rendszerek) összehangolt megoldására (számítására) vezetjük vissza. A *koordináló paraméterek* értelmezésével majd becslésével a kölcsönös összefüggést (ideiglenesen) megszüntetjük, a részproblémákat tetszőleges sorrendben egymás után megoldjuk (a részproblémák párhuzamos kezelését sorossá alakítjuk át). A megoldások ismeretében a koordináló

paraméterek becslése pontosabban elvégezhető és újra megoldjuk a részproblémákat. Ezt az iterációs tevékenységet addig folytatjuk, amíg két egymás utáni megoldás az előre definiált hibán belül marad.



1.20. ábra. A dekompozíció-koordináció elve.

2. Rendszermodellek

A mérnöki gyakorlatban a hetvenes évektől kezdődően számos matematikai modell típus honosodott meg. Ezek pontos számbavétele, ill. osztályozása komoly intellektuális kihívást jelent, amire itt nem vállalkozhatunk. Viszont egy, akár szubjektívnek is tekinthető „besorolást” az áttekinthetőség végett, mindenképpen hasznosnak tartunk. A legkülönbözőbb csoportosítási szempontokat figyelembe véve egy ilyen táblázat látható a 2.1. ábrán. Ebben azokat a modelleket emeljük ki, amelyekre a 2.2. ábrán látható specifikumok jellemzőek.

<i>Csoportosítási szempont</i>	<i>Rendszermodell típusok</i>				
<i>1. Megközelítési mód</i>	A priori (fehér doboz, elméleti modell)	A posteriori (fekete doboz, kísérleti modell)			
<i>2. A meghatározottság mértéke</i>	Determinisztikus	Sztocasztikus	Fuzzy	Minőségi	
<i>3. Térbeli homogenitás</i>	Koncentrált paraméterű modell	Elosztott paraméterű modell			
<i>4. Időbeli homogenitás</i>	(homogén)	Inhomogén (diszkrét idejű események)			
		Absztrakt automaták	Petri- hálók	Vezérlő tábla	Létra diagram
<i>5. Időbeli összefüggés</i>	(Időben) folytonos	(Időben) diszkrét			
<i>6. Időbeli viselkedés</i>	Statikus	Dinamikus	Instacioner	Kvázistacioner	Stacioner
<i>7. Matematikai sajátosság</i>	Lineáris	Nem lineáris			
<i>8. Leírási tartomány</i>	Időtartomány	Transzformált tartomány (Átviteli függvény)	Differenciál, illetve differencia - operátorok	Laplace, illetve Z-transzformált	Fourier transzformált
<i>9. Rendszertechnika</i>	Bemenet-kimenet modell (BKM)	Állapotér-modell (ÁTM)	Konvolúciós-modell	Neurális-hálózat (NH)	Genetikus modell

2.1. ábra. A rendszermodellek készlete.

Definitív jelleg (verbális, grafikus, formális)
Konstruktivitás (formalizálás)
Széles spektrum (sokféle modell típus)
Széleskörű alkalmazhatóság (minden leírható)
Kölcsönös átalakíthatóság (több-több értelműség)

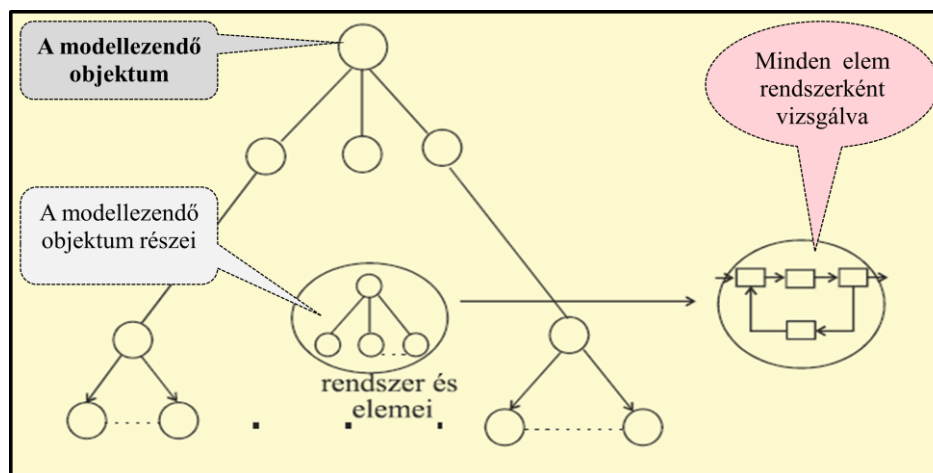
2.2. ábra. A rendszermodellek jellemzése.

A továbbiakban a csoportosítási szempontok szerint haladva mutatjuk be az egyes modell típusokat. (A táblázatban egymás alatt szereplő modellek között nincs megnevezhető reláció.)

2.1. A megközelítési mód

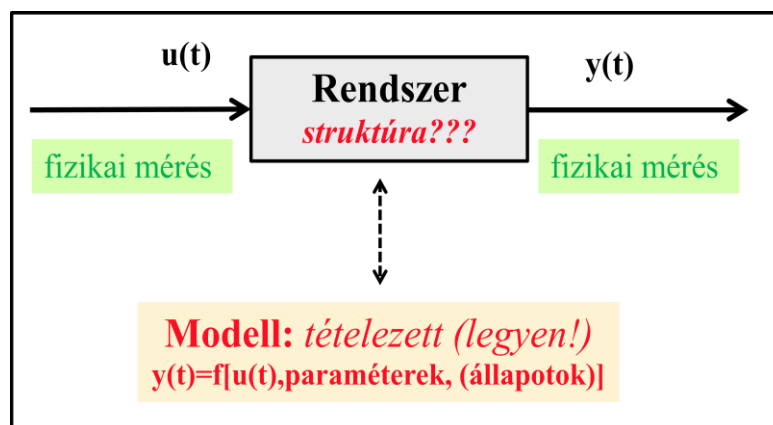
A modellezési „filozófia”, a megközelítési mód szerint az *a priori* és az *a posteriori* modelleket különböztetjük meg.

Az *a priori* jelző valamilyen (pl. adatok rendelkezésre állása előtti) előzetes tudás modellbe való beépítésére utal. Az *a priori* modellekben a valóságot, a rá vonatkozó összes (elsősorban természettudományos) ismereteink alapján olyannak akarjuk megismerni, amilyenek azok a valóságukban. Az *a priori* modellek lényeges tulajdonsága, hogy azok a valós objektum struktúráját is visszatükrözik, milyen elemekből épülnek fel, az elemeknek melyek az elemei, és így tovább (2.3. ábra). A modell minden változója fizikai értelemmel bír, az összefüggések törvényszerűségeket tükröznek vissza. Az *a priori* modellek térben és időben információ átvitelre alkalmasak. Egy jó modell ma is és a jövőben is egyaránt használható, helyben és a világ más pontján is. Az ilyen jellegű modellek megjelölésére más elnevezéseket is használnak, például *elméleti modell* (*first principle model*), *fehér doboz modell* (*white box model*), stb. Tipikus *a priori* modell a kémiai technológiai objektumok hierarchikus modellje. Tervezéshez elsősorban ilyen modellek használhatók.

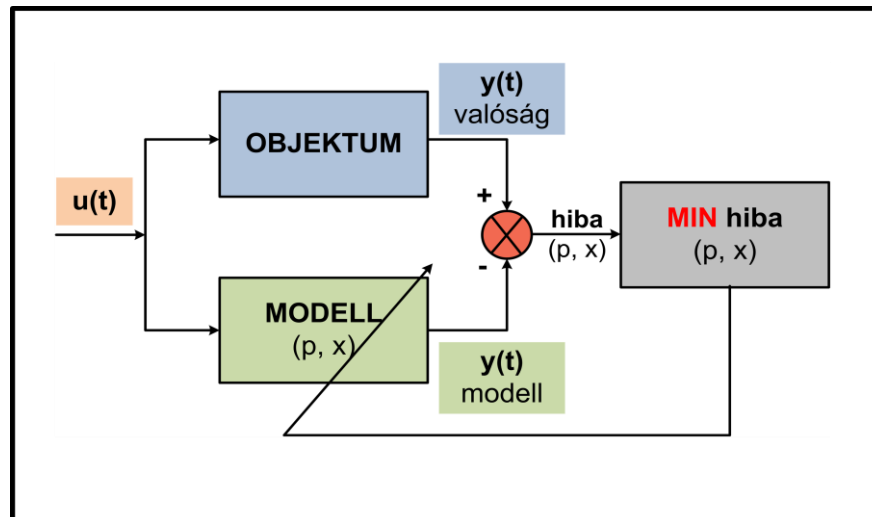


2.3. ábra. *A priori* modellstruktúra.

Az *a posteriori modell* az *a priori* szöges ellentétjeként fogalmazható meg. Az *a posteriori* jelző valami (pl. adatok rendelkezésre állása) utáni ismeret modellbe való beépítésére utal. Az *a posteriori* modellek által a rendszert, csupán a környezetéhez való kölcsönhatásában, funkciójában akarjuk megismerni, a valóság egyéb részletei teljesen rejtve maradnak. Az *a posteriori* modellek lényeges tulajdonsága, hogy azok a valós objektum struktúráját nem tükrözik vissza (2.4. ábra). A modellnek csupán a bemeneti és kimeneti változói bírnak fizikai értelemmel, a bemenet kimenet közötti összefüggések feltételezettek („Legyen ez!”), törvényszerűségeket közvetlenül nem tükröznék vissza. A hiányzó információkat az objektumról gyűjtött mérési adatokkal helyettesítjük. A modellt a fizikai értelemmel nem bíró paramétereinek a variálásával, a valós objektumhoz illesztjük. Ez lesz a *paraméter identifikálás* problémaköre (2.5. ábra). Az adott helyen és időben megalkotott jó modell csak ott, és csak akkor használható, térben és időben, információ átvitelre nem alkalmas. Az ilyen jellegű modellek megjelölésére más elnevezéseket is használnak, például *statisztikai modell* (*statistical model*), *fekete doboz modell* (*black box model*), stb. Az objektumok irányításában, általánosságban ilyen jellegű modelleket fogunk használni.



2.4. ábra. Az *a posteriori* modell jellemzése.



2.5. ábra. Az identifikálás művelete.

Mindkét modell típuson belül további csoportosítások is lehetségesek. Minden tudományterületen kialakultak a jellegzetes *a priori* modellek. Az *a posteriori* modelleken belül klasszikus típus például a *kísérlettervezés*, amelynek funkciója a megfelelő statisztikus modell létrehozása, megfelelő (optimális, minimális számú és/vagy maximális információ tartalmú) mérés elvégzésével. Az utóbbi időben a megnövekedett számítástechnikai kapacitás teret nyitott az *adattányászatnak* [1], és a *mesterséges intelligencia* eszköztára [52] is lényegesen kibővült.

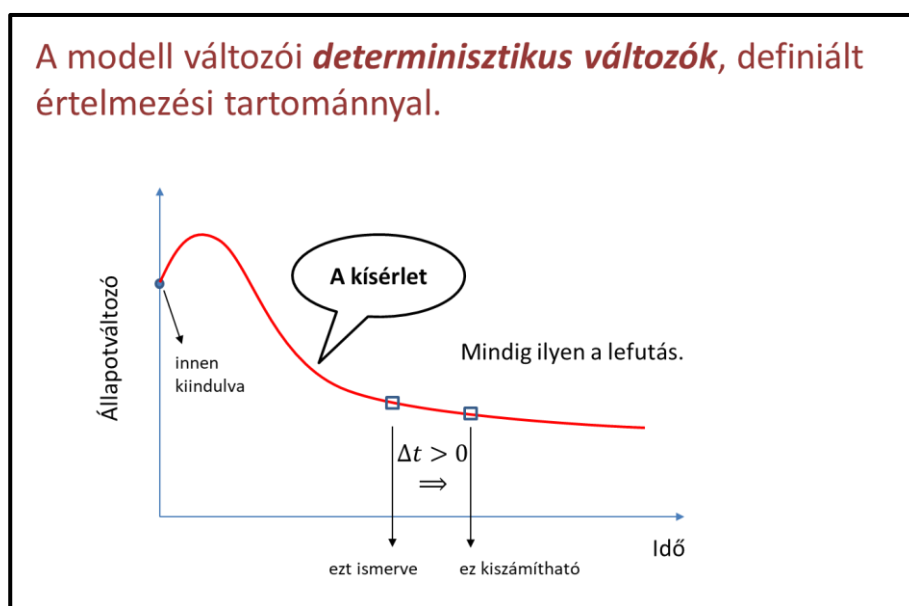
A mindennapi feladat megoldásban a kétféle megközelítés kombinálásával egyéb modell típusok is kialakultak. A *tendencia modell* például a legfontosabb *a priori* elemek megtartásával az *a posteriori* technikát is használja, míg a *szürke doboz modell* (*gray boks model*) az *a posteriori* szemléletet használva *a priori* információkat is beépít. Az alkalmazott modellek ezért a fehértől, a szürke különböző árnyalatain keresztül a feketéig, a teljes spektrumot lefedik.

2.2. A meghatározottság mértéke

A meghatározottság mértéke szerint a *determinisztikus*, a *valószínűségi* (sztochasztikus), a *fuzzy* és a *minőségi modelleket* emeljük ki. A minőségivel szemben az előző három mennyiségi jellegű modell.

Illusztrációként végezzünk el két különböző kísérletet egymás után többször is, az egyik típusú kísérlet eredménye a 2.6. a másiké pedig a 2.7. ábrán látható.

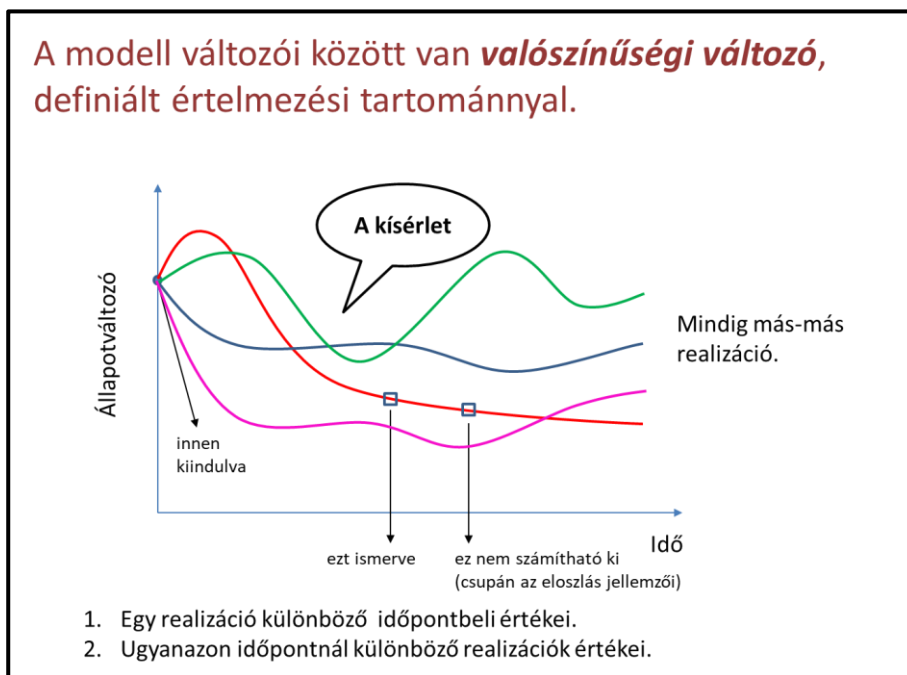
Mivel az elsónél az azonos körülmények között végzett kísérletek, praktikusán ugyanarra az eredményre vezetnek, a vizsgált folyamatot egyértelműen meghatározottnak tekinthetjük, és az ilyen folyamatot, illetve az azt leíró modellt determinisztikusnak mondjuk. A modell változói és a változók közötti összefüggések determinisztikusak. Egy determinisztikus változónak konkrét értéke van, amely egy számérték és a megfelelő mértékegység szorzatával adható meg.



2.6. ábra. A kísérlet determinisztikus eredménye.

A másik típusnál a kísérletek lefolyása mindig más és más. A kevésbé egyértelmű meghatározottság sztochasztikus folyamatra utal, amely valószínűségi változó(k) figyelembevételét igényli. A bizonytalanság miatt, a változó konkrét értéke helyett csupán valószínűségekről beszélünk, amelyek az eloszlásfüggvényekkel definiálhatók.

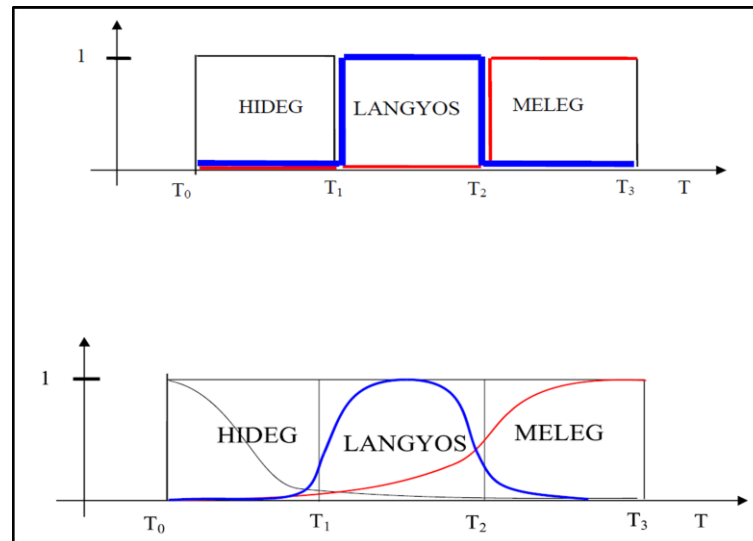
Érdekességként említjük, hogy az első típusú kísérletben is megjelenhet a bizonytalanság. Alkalmazzunk lényegesen finomabb felosztást az ordináta tengelyen. Ekkor már felsejlik, hogy nem esnek egybe a kísérletek lefolyásai. Ez pedig sztochasztikus folyamatra utal.



2.7. ábra. A kísérlet valószínűségi eredménye.

Felmerül a kérdés, hogy akkor most determinisztikus, vagy sztochasztikus folyamatról van szó? Magyarázat erre az, hogy valójában két folyamat van a háttérben. Az egyik az (pl. egy kémiai reakció lefolyása), aminek a vizsgálatára a kísérletet elvégeztük, a másik pedig a mérést zavaró egyéb folyamat. A kémiai reakció determinisztikus, a mérési folyamat pedig sztochasztikus modellel vizsgálható, miközben ugyanarról a mérési adatsorról van szó. A sztochasztikus modellekkel és azok irányításban való alkalmazásával az irányítás tankönyvben [58] részletesen foglalkozunk.

A legkevésbé meghatározott eset az, amelynél a modell változói minőségi változók, és azok között megfelelő relációk érvényesek. Tekintsük példaként a hőmérsékletet, mint minőségi változót, amely a *hideg*, *langyos*, *meleg* minőségeket veheti fel. Amikor a mennyiségi hőmérséklet változóhoz hozzárendeljük e minőségi „értékeket”, döntenünk kell, hogy ezek mely hőmérséklet tartományokat fedik le (lásd a 2.8. ábra felső sorát). Például a „langyos” érték (kék szín), a $[T_1, T_2]$ tartományban teljes mértékben langyos, azon kívül pedig nem langyos (azaz hideg, vagy meleg).



2.8. ábra. A minőségi és a fuzzy változók összehasonlítása.

Egy ilyen minőségi modell alapján elképzelt fürdővíz hőmérséklet beállítási (irányítási) algoritmus az alábbi lehet:

Irányítási cél: Langyos legyen a fürdővíz!

Algoritmus (utasítás):

- Ha a víz langyos, akkor a meleg és hideg csapok legyenek zárva.
- Ha a víz hideg, akkor meleg csap legyen nyitva, a hideg pedig zárva.
- Ha a víz meleg, akkor meleg csap legyen zárva, a hideg pedig nyitva.

Az algoritmus működik, de könnyen belátható, hogy a T_1 és T_2 hőmérsékletek közelében kis „mérési hiba” is hirtelen utasítás váltásokkal jár.

Ezt a problémát „kezeli” például a fuzzy változó alkalmazása (lásd a 2.8. ábra alsó sorát), amely az éles határváltást teljesen kiküszöböli azáltal, hogy a tartományhoz való hozzárendelés nem éles. Minden hőmérséklet érték lehet langyos, de nem teljes mértékben. A szubjektíve langyosnak érzett hőmérséklet egyhez közeli súllyal langyos, a hidegnek és melegnek érzett hőmérséklet pedig zérushoz közeli súllyal langyos. A hozzárendelést az ún. *tagsági függvénnyel* definiáljuk. Mivel a valószínűségi eloszlás a tagsági függvénnyel kapcsolatba hozható a fuzzy változót szubjektív valószínűségi

változónak is tekinthetjük. A fuzzy modellekkel és a fuzzy szabályozással ugyancsak az irányítás tankönyvben [58] foglalkozunk részletesen.

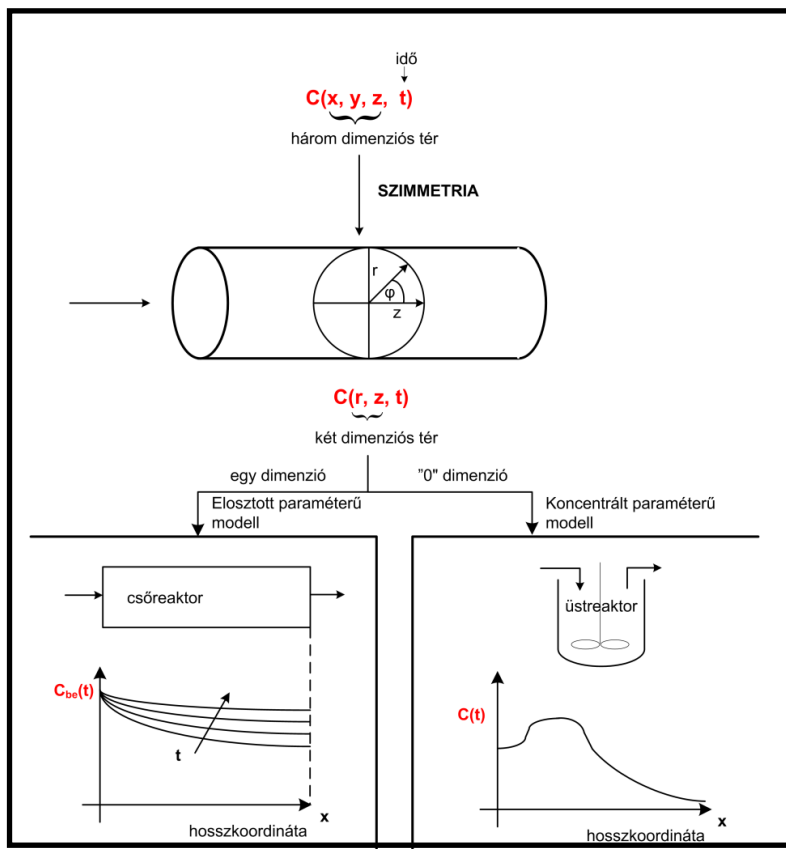
2.3. Térbeli homogenitás

Fizikai ismereteink alapján tudjuk, hogy a különböző dolgok, jelenségek a háromdimenziós geometriai térben és az egydimenziós időben, vagy röviden fogalmazva a négydimenziós téridőben léteznek, illetve mennek végbe. A változás, mozgás ebben a téridőben zajlik. A valós világban az idő a múlt irányából a jövő felé halad, miközben a geometriai térben minden irányban közlekedhetünk. A változások sebessége differenciálhányadosokkal fejezhető ki, ezért a modellek általában parciális differenciálegyenlet-rendszerek. A négydimenziós eset számítási nehézségeket jelent, ezért minden lehetőséget kihasználunk az egyszerűsítésekre.

Csőszerű berendezésekben például henger koordináta rendszert használva (2.9. ábra), a szimmetria viszonyok következtében a szög koordináta mentén a tér homogén. Ez azt jelenti, hogy szög menti változás nincs, ami a koordináta elhagyását teszi lehetővé. Így a négydimenziós téridő háromdimenzióssá vált (a geometriai tér pedig kétdimenzióssá).

További koordináta szám csökkentést jelent az a megfontolás, hogy ha a hossz és sugár aránya kellően nagy, akkor a hossz menti változásokhoz képest a sokkal kisebb sugár menti változás elhanyagolható. Ekkor a rendszer tulajdonságai már csak az idő és a hosszkoordináta függvényei.

Egy jól kevert tartály modellezése során ideális esetben, a tulajdonságok értékei a geometriai tér minden pontjában azonosak, ezzel a tér nulladimenzióssá vált, marad az idő koordináta, a modell pedig közönséges differenciálegyenletté válik. Ekkor a rendszer a geometriai térben homogén és az ilyen rendszert leíró modellt *koncentrált paraméterű modellnek* nevezzük. Az irányításelméletben ezek a leggyakrabban használt modellek, közönséges differenciálegyenlet-rendszer formájában. Bármilyen térbeli inhomogenitás esetén az ún. *elosztott paraméterű modelleket* használjuk, amelyek különböző dimenziójú parciális differenciálegyenlet-rendszerek.

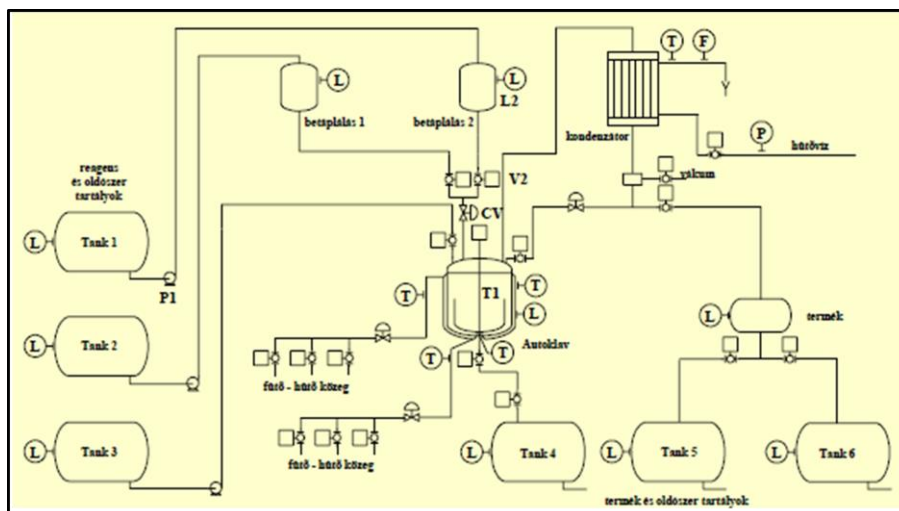


2.9. ábra. A térbeli homogenitás.

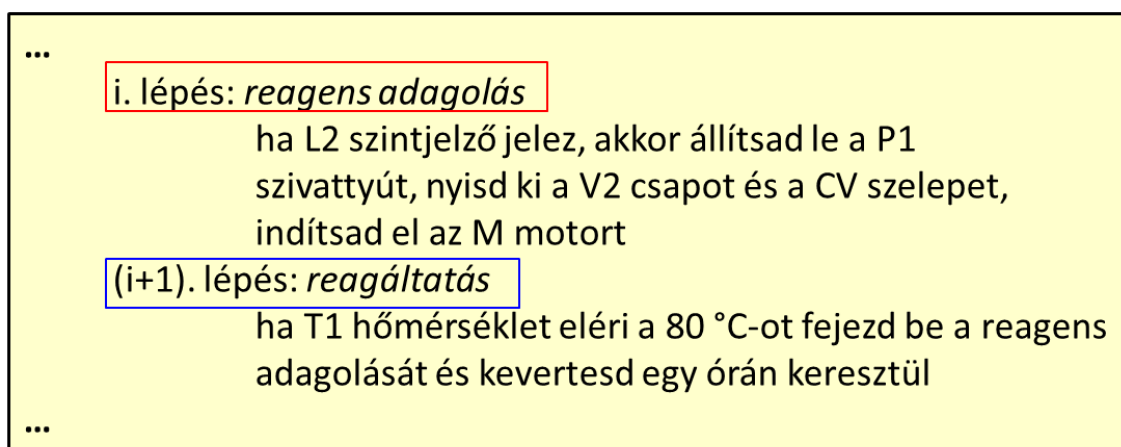
2.4. Időbeli homogenitás

Az előző fejezet térbeli homogenitás vizsgálatánál időbeli homogenitást feltételeztünk. Ez azt jelenti, hogy a tér egy adott pontján lezajló folyamatok a vizsgálat ideje alatt homogének, azaz változatlan törvényszerűséggel jellemezhetők. Például egy kémiai reakció esetén a folyamatot a reakciósebesség jellemzi, amely az időtől a körülményeket definiáló tulajdonságok megváltozása miatt csak közvetetten változhat (a természeti törvényszerűségek idő invariánsak, a leíró differenciálegyenletek autonómok, időben eltolhatók). Az ilyen jellegű modellek időben homogének (amit külön nem is szoktunk hangsúlyozni).

Az előzővel szemben egy szakaszos technológiai rendszer működtetésénél használt modellekre az *időben inhomogén* jelző a megfelelő. Egy ilyen rendszer P&ID dokumentum részlete látható a 2.10. ábrán. A működtetés módját az ún. receptúra tartalmazza, amelynek egy részlete látható a 2.11. ábrán.



2.10. ábra. Szakaszos technológiai rendszer.



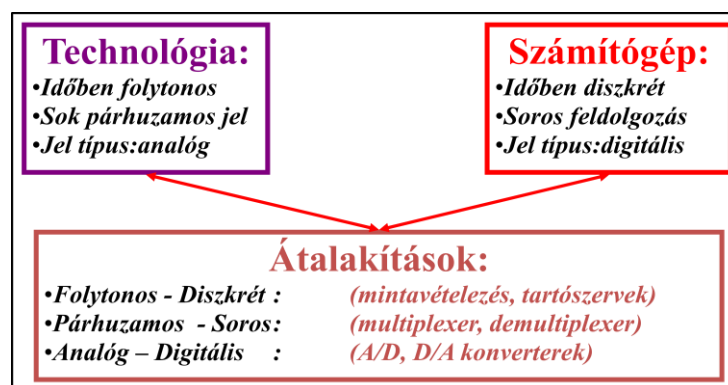
2.11. ábra. Receptúra részlet.

Tekintsük a technológia központi elemét, a fűthető-hűthető kevert autoklávot, illetve annak egy belső pontját. A geometriai tér egy adott pontjának rögzítése után megvizsgáljuk, hogy mi történik az időben. Az előkészítés idejében a tartály üres, majd betöltjük az egyik, majd a másik reagenst. Ezután gőzzel felfűtik a reakcióelegyet, hozzáadják a katalizátort és indul a kémiai reakció, miközben hűteni is kell, és így tovább. Látható, hogy a tér egy adott pontján (vagy annak egy tartományában) mindig más-más esemény a domináns. Ennek az időben inhomogén problémának a kezelésére alkalmas rendszermodellek: *absztrakt automata*, (színezett) *Petri háló*, *vezérlőtábla*, stb.

Az absztrakt automatát, és annak a logikai vezérlésben való alkalmazását az irányítás tankönyvben [58] részletezzük.

2.5. Időbeli összefüggés

A technológiai rendszerek irányításában mind az analóg, mind a digitális technikával egyaránt találkozunk, napjainkban azonban a digitális technika térnyerése zajlik. A digitális számítógép az információt számok formájában tárolja, ami miatt csak időben diszkrét jeleket tud kezelni. A technológiai rendszer többnyire időben *folytonos analóg jeleket* ad, illetve tud fogadni, ezzel szemben a digitális számítógép *időben diszkrét, digitális jeleket* tud egymás után kezelni. A kapcsolat a 2.12. ábrán látható technikai megoldásokkal hozható létre.

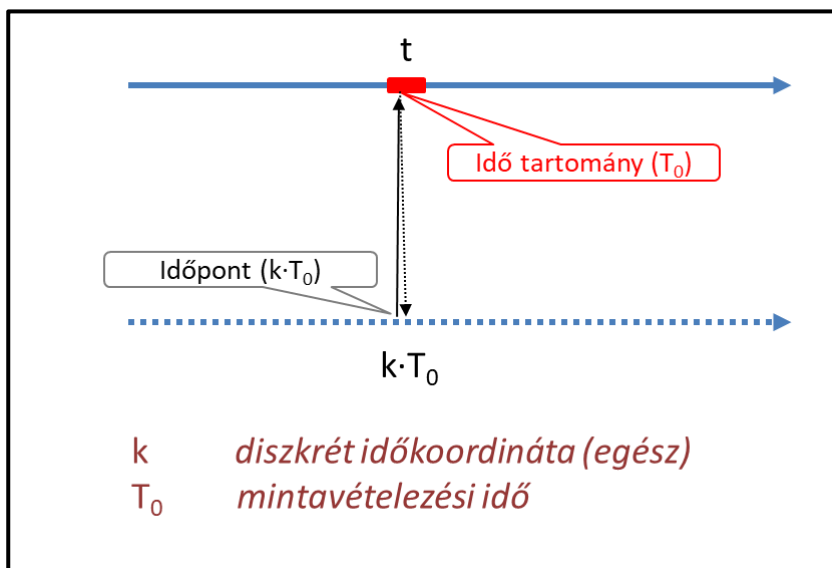


2.12. ábra. A technológia és a folyamatirányító kapcsolata.

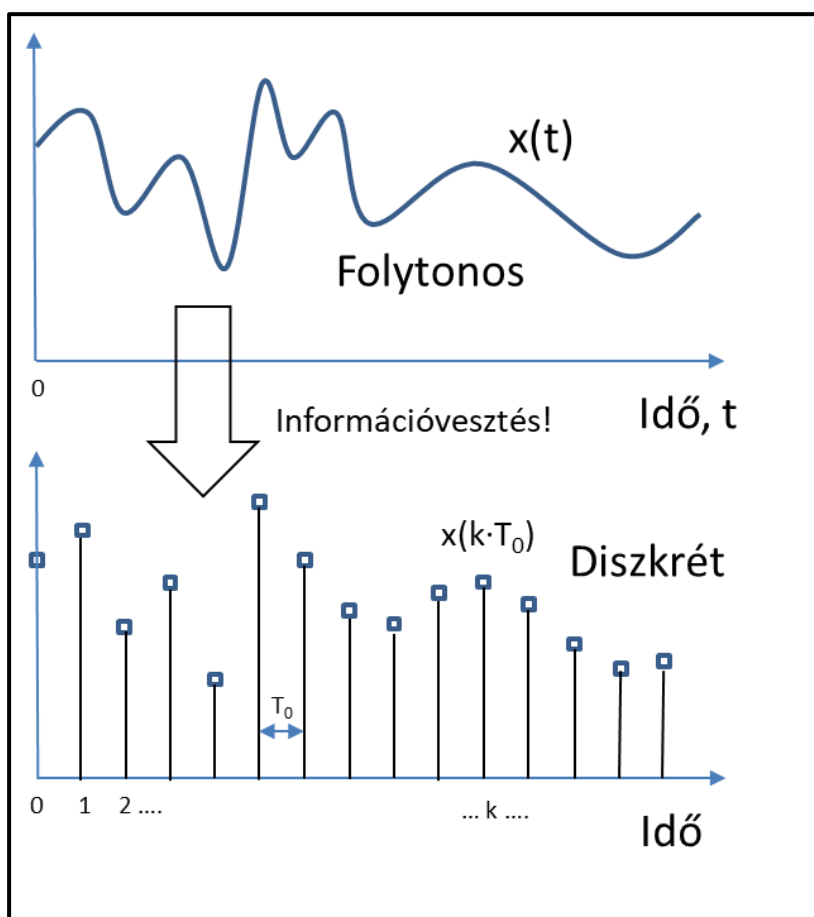
Az időbeli összefüggés alapján tehát megkülönböztethetünk *időben folytonos* és *időben diszkrét modelleket*, és az irányított technológia két eleme (technológiai objektum, irányítórendszer) miatt a két különböző típus egymásba való átalakítása is lényeges.

A mintavételezés

Először a jelek átalakítását vizsgáljuk meg, kiindulva a folytonos jelből. A folytonos időtartományt egy T_0 mintavételezési idővel egyenletesen (ekvidisztáns) felosztjuk (2.13. ábra). Látható, hogy a folytonos egy tartományához a diszkrétben egyetlen diszkrét értéket rendelünk hozzá, ezért a folytonosból diszkrétbe áttérve információvesztéssel kell számolnunk (2.14. ábra). Az információvesztés mértékét a T_0 határozza meg, minél kisebb annál kisebb a veszteség is.

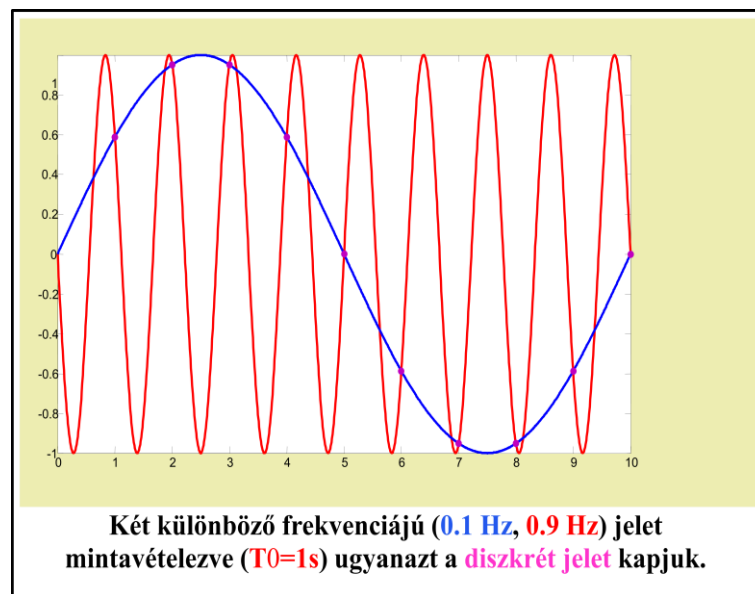


2.13. ábra. A folytonos és a diszkrét idők megfeleltetése.

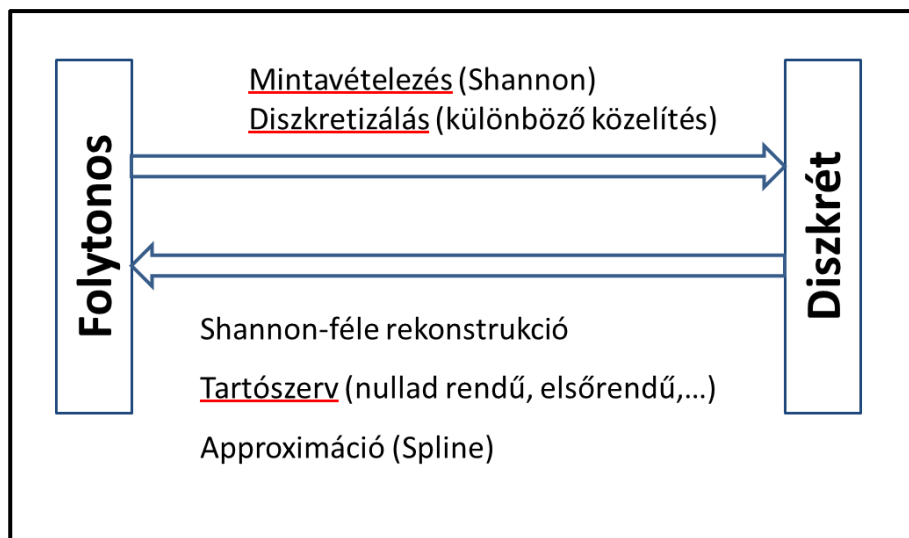


2.14. ábra. A folytonos jel átalakítása.

A T_0 szerepének illusztrálására tekintsük a 2.15. ábrát, amelyen két különböző frekvenciájú (0,1 Hz és 0,9 Hz) szinusz jel látható, amelyeket $T_0 = 1$ s mintavételezéssel diszkretizálunk. Mindkettő ugyanazt a diszkrét jelet eredményezi, amely a nagyfrekvenciás folytonos jelet kevésbé jól reprezentálja (a diszkrétből a nagyfrekvenciás folytonos jel nem reprodukálható). Mi a helyes T_0 érték?



2.15. ábra. A mintavételezési idő szerepe.

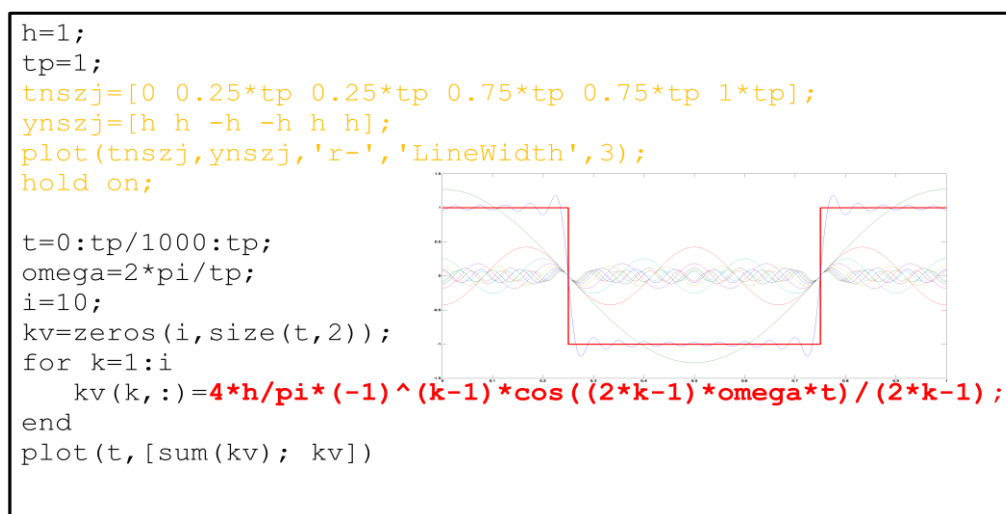


2.16. ábra. Átalakítási lehetőségek.

A T_0 helyes megválasztásához a *Shannon féle mintavételezési szabályt* kell alkalmazni (lásd a 2.16. ábrát is). Ennek megértéséhez tekintsük először egy tetszőleges $f(t)$ jel *Fourier sorral* való közelítését (2.17. ábra). Ahogyan azt a matematikában tanultuk, ez azt fejezi ki, hogy bármely függvény előállítható végtelen számú különböző frekvenciájú szinusz és koszinusz függvények lineáris kombinációjával. Ezt illusztrálja a 2.18. ábra (a megfelelő Matlab programmal), amelyen egy négyszög hullám jel (nehéz eset) közelítése látható néhány trigonometrikus jel lineáris kombinációjával.

$$f(t) = \frac{a_0^*}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} [a_k^* \cos(k\omega t) + b_k^* \sin(k\omega t)]$$
$$\omega = \frac{2\pi}{T}, \quad t \in \left(\frac{-T}{2}, \frac{T}{2}\right)$$
$$a_k^* = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \cos(k\omega t) dt$$
$$b_k^* = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \sin(k\omega t) dt$$

2.17. ábra. A Fourier sor.



2.18. ábra. A négyszög hullám közelítése.

A fentiek alapján megfogalmazható a Shannon féle mintavételezési szabály: A mintavételezési frekvencia (ebből számítható a mintavételezési idő) az átvendő maximális frekvenciájú komponens frekvenciájának kétszeresénél nem lehet kisebb (2.19. ábra). A gyakorlatban ökölszabályként nagyon gyakran a T_0 értékét úgy határozzuk meg, hogy az kisebb legyen, mint a domináns folyamat időállandójának tizede (ezt a bemenet kimenet rendszermodellek tárgyalása során világítjuk meg [58]).

$\omega \in [0, \omega_{\max}]$

$\omega = \frac{2 \cdot \pi}{T}$

A mintavételezés során átvendő maximális frekvencia, az e feletti ZAJ!

SHANNON szabály: $\omega_0 \geq 2 \cdot \omega_{\max}$ $T_0 \leq \frac{T_{\max}}{2}$

Ökölszabály: **a mintavételezési idő legalább egy nagyságrenddel kisebb, mint a jellemző időállandó!**

2.19. ábra. A mintavételezési idő meghatározása.

A folytonos és diszkrét jelek kapcsolata

A mintavételezési idő meghatározása után tekintsük át a folytonos és a diszkrét jelek kapcsolatát. A folytonosból a diszkrét irányába a jelek kapcsolatát a 2.20. a különböző rendű deriváltak kapcsolatát pedig a 2.21. ábra mutatja. Látható, hogy a diszkrét jel megadására három különböző forma is elterjedt, legegyszerűbb az x_k jelölés, de tudnunk kell, hogy a diszkrét időkoordináta miatt a k itt nem index, hanem a diszkrét jel argumentuma a $t = k \cdot T_0$ időnél. Az elsőrendű deriváltaknál a *retrográd*, a *progresszív*, illetve a *centrális differenciákat* is használhatjuk, bár a centrális differenciák használatánál vigyázni kell, nehogy a diszkretizálás a rendszer rendjét megváltoztassa. A d a diszkrét holtidő, nem más, mint a T_0 mértékében kifejezett holtidő, ha az osztásnál nem egész adódik, akkor általában felfelé kerekítünk (az irányításnál ez a rosszabb irányába való elmozdulást jelenti).

Az idő:

$$t \Rightarrow k \cdot T_0 \Leftrightarrow k$$

A jelek:

$$x(t) \Rightarrow x(k \cdot T_0) \Leftrightarrow x(k) \Leftrightarrow x_k$$

Az időeltolás (holtidő):

$$x(t - t_h) \Rightarrow x[(k - d) \cdot T_0] \Leftrightarrow x(k - d) \Leftrightarrow x_{k-d} \rightarrow d = \text{ent}\left(\frac{t_h}{T_0}\right)$$

2.20. ábra. A jelek megfeleltetése.

Elsőrendű derivált:

$$\frac{dx}{dt}(t) \Rightarrow \frac{x_k - x_{k-1}}{T_0}, \text{ vagy } \frac{x_{k+1} - x_k}{T_0}, \text{ vagy } \frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2 \cdot T_0}$$

Másodrendű derivált:

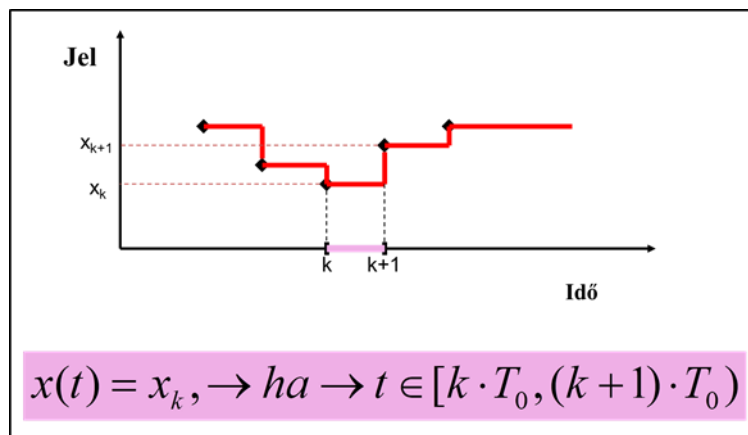
$$\frac{d^2x}{dt^2}(t) \Rightarrow \frac{\frac{x_{k+1} - x_k}{T_0} - \frac{x_k - x_{k-1}}{T_0}}{T_0} = \frac{x_{k+1} - 2 \cdot x_k + x_{k-1}}{T_0^2}$$

Másodrendű derivált holtidővel:

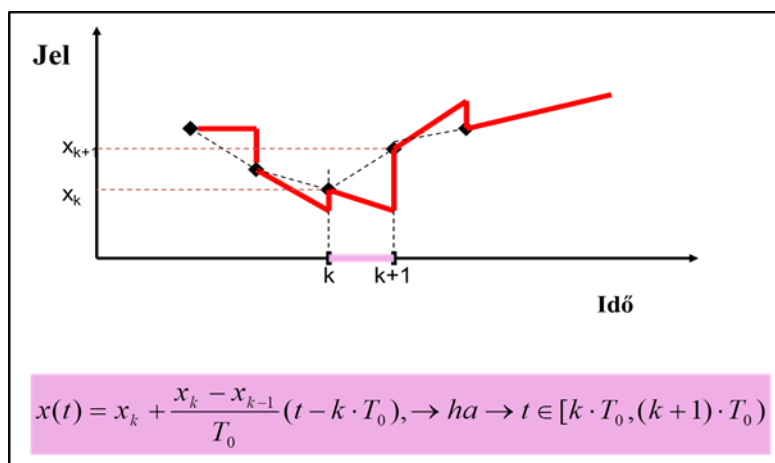
$$\frac{d^2x}{dt^2}(t - t_h) \Rightarrow \frac{x_{k+1-d} - 2 \cdot x_{k-d} + x_{k-1-d}}{T_0^2}$$

2.21. ábra. A deriváltak megfeleltetése.

A diszkrétből a folytonos irányába való átalakítás lehet a *Shannon féle rekonstrukció*, valamilyen matematikai közelítés (pl. *spline*), a technikailag is könnyen megvalósítható megoldást viszont az ún. *tartószervek* jelentik. A *zérórendű tartószerv* az új diszkrét érték megjelenéséig az előző diszkrét pontban kapott értéket tartja (2.22. ábra). Az *elsőrendű tartószerv* az új diszkrét értéken átmenő egyenessel közelít, a meredekséget az új és az előtte lévő adatból számolja (2.23. ábra, az első pont után zéró rendű tartószerv). Elvileg az elsőrendű tartószerv pontosabban közelíti a folytonos jelet, ha azonban a diszkrét jel hibával terhelt, akkor abból a differencia hányados számolásánál jelentős hiba keletkezik. A gyakorlatban ezért elsősorban a zérórendű tartószerv terjedt el.



2.22. ábra. A zérórendű tartószerv.



2.23. ábra. Az elsőrendű tartószerv.

2.6. Időbeli viselkedés

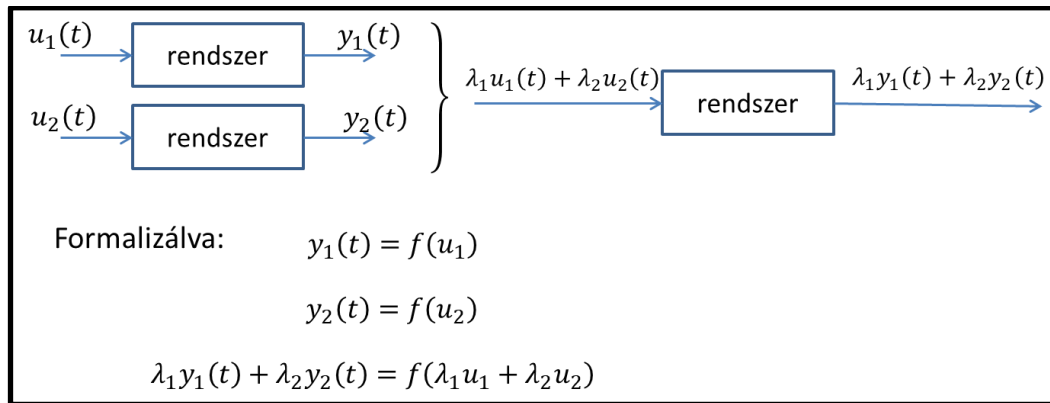
Az időbeli viselkedés szempontjából a rendszereket első közelítésben a *statikus* és *dinamikus* rendszerek csoportjába soroljuk (2.24. ábra).

A *statikus rendszerek* definíciójában az idő sem közvetlenül, és valamely más változón keresztül, közvetetten sem szerepel. Ilyen például a kémiai elemek periódusos rendszere. Ezekkel a rendszerekkel itt a továbbiakban nem foglalkozunk.

A *dinamikus rendszerek* viselkedésük alapján *instacionárius*, *stacionárius* és *kvázistacionárius állapotot* vehetnek fel. A dinamikus rendszer „normális” állapota az *instacionárius*, amely a rendszert érő (állandóan bekövetkező) inger hatására időbeli

változásokban realizálódik. Ha a bemeneti jelek konstans értéket vesznek fel, akkor egy stabil rendszer esetében egy kellően hosszú (elvileg végtelen) idő eltelte után a rendszer kimenete is konstanssá válik. Ez a határérték a rendszer stacionárius állapota. Az időbeli változásokat az állapotváltozók időszerinti differenciálhányadosa fejezi ki, ezért az instacionárius állapotot még a koncentrált paraméterű modell esetén is differenciálegyenlet-rendszerrel lehet leírni (egyébként parciális differenciálegyenletrendszer). A stacionárius állapotban az időbeli deriváltak értéke zérus, ezért a stacionárius modell matematikai struktúráját tekintve mindig egyszerűbb és kezdeti értékek megadására sincs szükség. Más kérdés, hogy bizonyos esetekben több stacionárius állapot is kialakulhat, ami a rendszeranalízist bonyolítja. Ha a bemenetek a rendszer „tehetetlenségéhez” (a változással szembeni ellenállásához) viszonyítva lassan változnak, akkor a rendszer ún. kvázistacionárius állapotba kerül. Ezt azért érdemes megkülönböztetni az instacionárius állapottól, mert a kvázistacionárius állapotban a lassú változások a stacionárius modell megfelelő időpontokban való aktiválásával követhetők, azaz a folyamat egyszerűbb modellel írható le.

Meg kell jegyeznünk, hogy a szakmai gyakorlatban és a különböző tantárgyakban a nomenklátúra nem egységes. Ha a statikus rendszerek kívül esnek a körön, akkor a stacionáriusra a statikus, az instacionáriusra pedig a dinamikus jelzöt is használják. Elterjedt a stacioner, kvázistacioner és instacioner fogalmak használata is. A matematikában a stacionárius helyett inkább az egyensúlyi jelzöt használják, ami a mérnöki gyakorlatban összetéveszthető a termodinamikai egyensúllyal. Ezért ajánljuk az itt felvázolt nomenklatúrát.



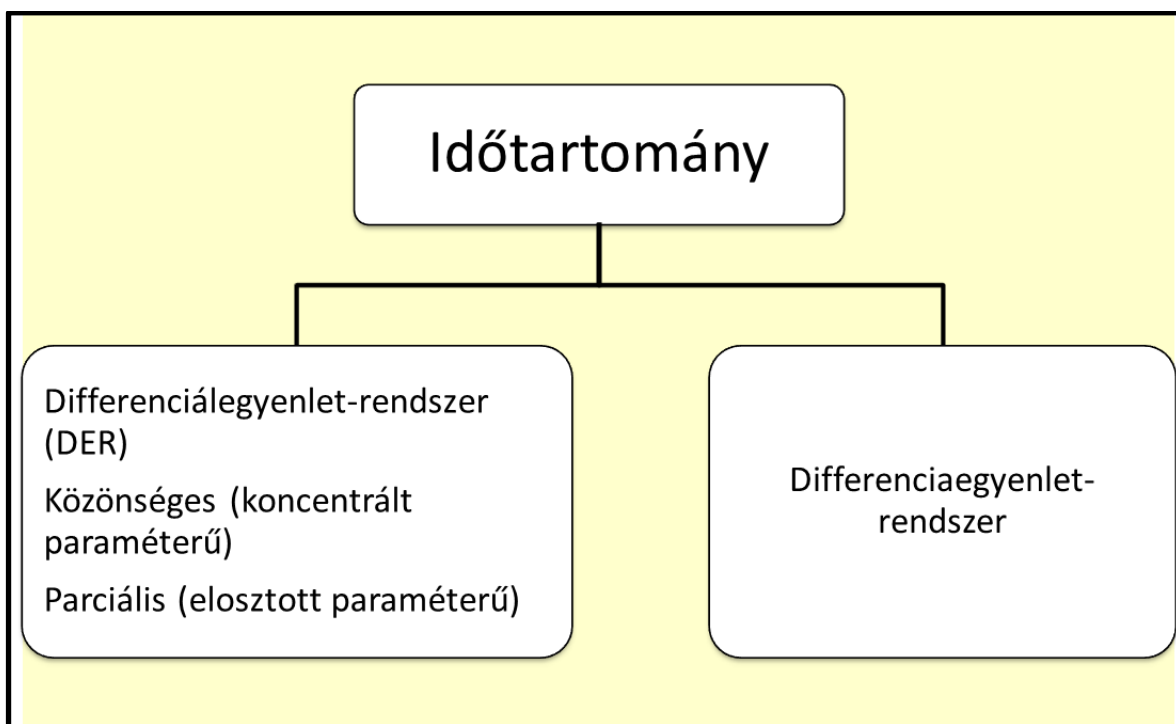
2.25. ábra. A linearitás definíciója.

Rendszermodell:	$y = mx + b$
y_1 számítása:	$y_1 = mx_1 + b$
y_2 számítása:	$y_2 = mx_2 + b$
$y_1 + y_2$ összegzés:	$y_1 + y_2 = m(x_1 + x_2) + 2b$
$x_1 + x_2$ összegzés:	$y_1 + y_2 = m(x_1 + x_2) + b$

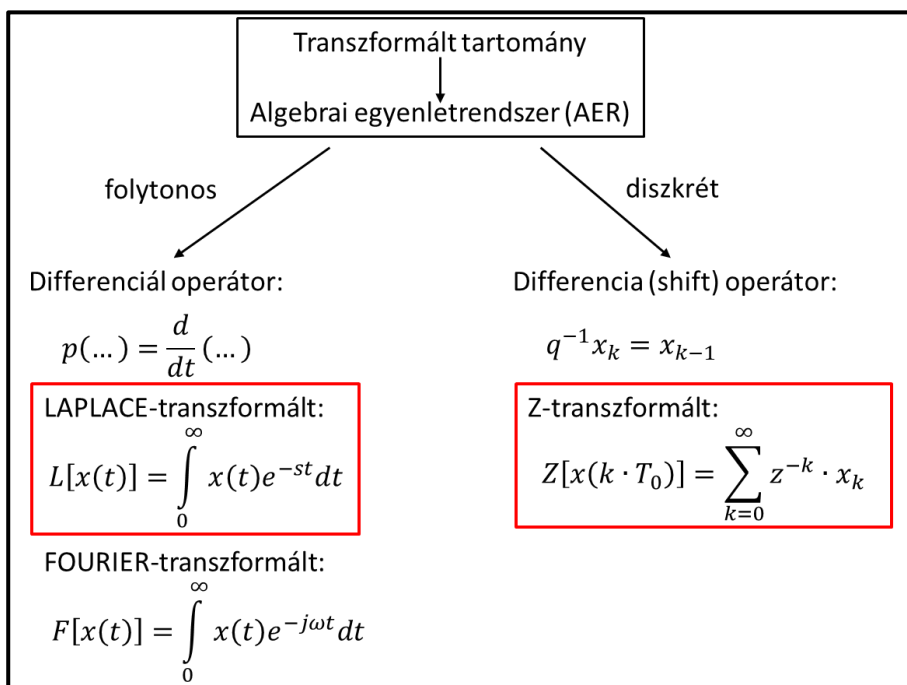
2.26. ábra. A lineáris egyenlet, mint rendszer.

2.8. Leírási tartomány

Az eddigiekben minden esetben időtartományi leírásról volt szó, az említett modellek a 2.27. ábrán bemutatott formákban jelentek meg. A számítástechnika elterjedése előtt a bonyolultabb DER-ek vizsgálata nehézségeket okozott. Felfedezték, hogy a többnyire lineáris DER-ek különböző transzformációkkal algebrai egyenletrendszerekké alakíthatók és a rendszervizsgálatokat a transzformált tartományokban könnyebben el tudták végezni. A folytonos rendszereknél a *differenciál operátor* (p), a *Laplace* és a *Fourier transzformációk*, míg a diszkrét rendszereknél az *eltolási operátor* (q), a *diszkrét Fourier* és a *z-transzformáció* kiválóan használhatók (2.28. ábra) [53]. A transzformált tartományokban a rendszermodell mindig AER formáját veszi fel.



2.27. ábra. Modellformák az időtartományban.



2.28. ábra. A Laplace és a z-transzformáció.

Tétel-szám	$f(t); \begin{cases} f(t) = 0 \\ \text{ha } t < 0 \end{cases}$	$F(s)$	Megjegyzés
1.	$f\left(\frac{t}{a}\right)$	$a \cdot F(a \cdot s)$	Hasonlósági tétel
2.	$f(t-a); \begin{cases} f(t-a) = 0 \\ \text{ha } t < a \end{cases}$	$e^{-a \cdot s} \cdot F(s)$	Eltolás az idő tartományban
3.	$e^{-a \cdot t} \cdot f(t);$	$F(s+a)$	Csillapítási tétel
4.	$\frac{df(t)}{dt}$	$s \cdot F(s) - f(0)$	Differenciális tételek
5.	$\frac{d^n f(t)}{dt^n}$	$s^n \cdot F(s) - s^{n-1} f(0) - s^{n-2} f'(0) - \dots - f^{n-1}(0)$	
6.	$\int_0^t \dots \int_0^t f(t) dt^n$	$s^{-n} \cdot F(s)$	Integrálási tétel
7.	$t^n \cdot f(t) \quad (n > 0)$	$(-1)^n \frac{d^n F(s)}{ds^n}$	Súlyozás az idő hatványával
8.	$t^{-n} \cdot f(t) \quad (n > 0)$	$\int_0^\infty \dots \int_0^\infty F(s) ds^n$	Súlyozás az idő negatív hatványával
9.	$\int_0^t f_1(t-\vartheta) \cdot f_2(\vartheta) d\vartheta$	$F_1(s) \cdot F_2(s)$	Szuperpozíció az idő tartományban
10.	$f_1(t) \cdot f_2(t)$	$\frac{1}{2\pi j} \int_{-j\infty}^{j\infty} F_1(s-p) \cdot F_2(p) dp$	Szuperpozíció az operátor tartományában
11.	$f(0_+) = \lim_{t \rightarrow 0_+} f(t)$	$f(0_+) = \lim_{s \rightarrow \infty} sF(s)$	Kezdeti érték tétel
12.	$f(\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(t)$	$f(\infty) = \lim_{s \rightarrow 0} sF(s)$	Végérték tétel

2.29. ábra. A Laplace transzformáció tulajdonságai.

A Laplace és a Fourier transzformációk formai hasonlósága miatt csupán az előbbi fontosabb tulajdonságait emeljük ki a 2.29. ábrán. A derivált függvény és az irányításban gyakran alkalmazott egységugrás jel Laplace transzformálásának részleteit is látják a 2.30. és a 2.31. ábrákon (az előbbinél a parciális integrálás szabályát kell alkalmazni). Csupán a változókat és a deriváltjaikat tartalmazó lineáris modelleknél a differenciál operátor is hasonlóan használható.

A z transzformáció fontosabb szabályait a 2.32. ábrán foglaltuk össze, ezek a tulajdonságok könnyen ellenőrizhetők is.

$L[f'(t)]$

A definíció alapján adódik

$$L[f'(t)] = \int_0^{\infty} f'(t)e^{-st} dt = \left[f(t) \cdot e^{-st} \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} f(t)(-s)e^{-st} dt = -f(0) + s \cdot \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt = s \cdot L[f(t)] - f(0) = sF(s) - f(0),$$

2.30. ábra. A derivált függvény Laplace transzformáltja.

$f(t) = 1$

Alkalmazva a definíciót a következőt kapjuk.

$$F(s) = \int_0^{\infty} 1 \cdot e^{-st} dt = \left[\frac{e^{-st}}{-s} \right]_0^{\infty} = 0 + \frac{1}{s} = \frac{1}{s}.$$

Tehát $L[1] = \frac{1}{s}$ és az integrál linearitása miatt tetszőleges $c \in \mathbf{R}$ esetén $L[c] = \frac{c}{s}$.

2.31. ábra. Az egység ugrás (Heaviside) függvény Laplace transzformáltja.

$$Z[q^{-n}f] = Z[f(k-n)] = z^{-n}F(z)$$

(right shift – időben vissza)

$$[q^n f] = Z[f(k+n)] = z^n \left[F(z) - \sum_{j=0}^{n-1} f(j) \cdot z^{-j} \right]$$

(left shift – időben előre)

retrográd differencia (backward)

$$Z[f_k - f_{k-1}] = (1 - z^{-1}) \cdot F(z)$$

progresszív differencia (forward)

$$Z[f_{k+1} - f_k] = (z - 1) \cdot F(z) - z \cdot f(0)$$
$$Z[f \cdot g] = Z \left[\sum_{n=0}^{\infty} f(n) \cdot g(k-n) \right] = F(z) \cdot G(z)$$

2.32. ábra. A z transzformáció tulajdonságai.

2.9. Rendszertechnikai besorolás

Rendszertechnikai szempontokat figyelembe véve a *bemenet-kimenet modell* (BKM), az *állapottér modell* (ÁTM), a *konvolúciós modell*, a *neurális hálózati modell* és a *genetikai modell* osztályokat emeljük ki. Az előző négyet az irányítás tankönyvben [58] részletesen is elemezzük. A *genetikus modell* kissé különbözik az eddigiektől, a szélsőérték kereséshez ad egy konstruktívan használható keretet, a technológiai rendszerek tervezésében találkozunk vele.

A kilenc osztályozási szempont szerint bemutatott rendszermodellek a mérnök kezében hatásos eszközt jelentenek különböző feladataik megoldásában. Ugyanaz a modell mindegyik szempont szerint értelmezhető, de az oszlopokban egymás alatt szereplő modellek között nincs rendezési elv. A modell típus kiválasztása mindig az elvégzendő feladattól, az adott mérnök ismereteitől és a rendelkezésre álló információktól függnek.

3. A vegyészmérnöki tudomány alapjai

A kémiai technológiai rendszerek vegyészmérnöki leírását *Damköhler* a múlt század harmincas éveiben alapozta meg. *Benedek Pál* és *László Antal* a vegyészmérnöki tudomány alapjait összefoglaló klasszikus, abban az időben nagyon előremutató tankönyve 1964-ben jelent meg [12]. Ebben a technológiai rendszert műveleti egységek hálózataként definiálják, a középpontban a műveleti egység matematikai modellezése áll. „A műveleti egység a munka tárgyának és valamely speciális és egyedi munkaeszköznek ember által irányított kölcsönhatása, amelynek eredményeképpen a munka tárgya kisebb-nagyobb mértékben átalakul, a munka eszköze kisebb-nagyobb mérvű elhasználódástól eltekintve azonban változatlan marad, az ember pedig valamilyen használati értéket termel, és ezekből munkaerejét megújítja.” [12]. A műveleti egység egy, vagy több fázisú termodinamikai rendszer, amely leírását a transzportelmélet alapozta meg. A vegyészmérnöki tudomány mennyiségei a *hosszúság*, a *tömeg*, az *idő* és a *hőmérséklet* bázis mennyiségek hatványszorzatával generálhatók. Valamely mennyiség dimenzióján az alaplammennyiségeknek azt a hatványszorzatát értjük, amelyben a kitevők pozitív, vagy negatív egész számok, vagy zérusok.

3.1. Változók és folyamatok (jelenségek)

A KTO tulajdonságait és a lejátszódó folyamatokra vonatkozó törvényszerűségeket a természettudományi tárgyakból már nagyrészt megismerték. A modellezésben a KTO tulajdonságait változókká, az érvényesülő törvényszerűségeket pedig összefüggésekké képezzük le. Ennek megfelelően a KTO matematikai modellje a változók v halmaza és a változókon értelmezett függvények f halmazának kettőseként értelmezhető:

$$M = \langle v, f \rangle$$

A KTO modellezése kezdetben a *vegyészmérnöki tudomány alapjaiban* összefoglalt ismeretek alkalmazását jelentette. Ezen ismeretek elsősorban a technológiai rendszer elemeit képező műveleti egységekre, ill. azon belül a termodinamikai fázisokra vonatkoznak. A termodinamikai fázisokra érvényes korábbi tudást pedig a transzportelmélet foglalta magába.

A változók ismertetését az *extenzív* tulajdonságokkal kell kezdenünk. Egy rendszer extenzív mennyisége a rendszer „méretével” kapcsolatos és jellemző rá az *additivitás* (összeadhatóság). Egyes extenzív mennyiségekre *megmaradási törvény* is érvényes, amely esetén a részek extenzív mennyiségének összege az egész extenzív mennyiségét adja. Erre példa a fázis tömege. Azon extenzív mennyiségeknél, amelyekre megmaradási törvény nem érvényesül, az összeadásnál megfelelő korrekciót kell alkalmazni. Itt példaként a fázis térfogatot, vagy kémiai reakció esetében a komponens tömeget említhetjük. A nem extenzív mennyiségek az *intenzív* mennyiségek osztályát adják. Ilyen például a koncentráció, a hőmérséklet és a nyomás is. Egy K db komponensből álló homogén termodinamikai fázis állapota az alábbi $K+2$ független extenzív mennyiséggel jellemezhető:

- fázis tömeg (pl. kg),
- $(K-1)$ db komponens tömeg (pl. kmol), mivel az összes komponens tömege a fázis tömegnek felel meg,
- energia (vagy entalpia, vagy hő pl. kJ),
- impulzus (pl. kgm/s).

Az egyértelmű leíráshoz nem szükséges, hogy minden állapotváltozó extenzív legyen, de egynek mindenképpen extenzívnek kell lennie.

A termodinamikai fázis a geometriai térben (3 dimenzió) és időben (1 dimenzió) létezik, de a négydimenziós téridőt nem egyenletesen tölti ki, ezért az egyértelmű leíráshoz további változókat kell értelmeznünk. Egy adott időpontban a rendszer állapotát az extenzív mennyiségek térbeli sűrűségei definiálják:

- $\rho(t, x, y, z)$ fázis sűrűség,
- $c_i(t, x, y, z)$ az i komponens koncentrációja,
- $[\rho c_p T](t, x, y, z)$ entalpia sűrűség (c_p fajhő, T hőmérséklet),
- $[v\rho](t, x, y, z)$ impulzus sűrűség (v fázis áramlási sebesség).

Az utóbbi két térfogati sűrűség önálló változóként való használata nem terjedt el a szakmában, ezért más meghonosodott változók függvényként jelennek meg. A fázis

áramlása a háromdimenziós térben alakul ki, ezért a fázis áramlási sebessége egy három dimenziós vektor (elemei v_x , v_y , v_z). A térfogati sűrűségek az idő és a térkoordináták függvényei.

A rendszer a környezetével kölcsönhatásban van, ami azt jelenti, hogy a rendszer és környezete extenzív mennyiségeket cserél egymással. Ez az extenzív mennyiségek *áramaival* (időbeli sűrűség) fejezhető ki például a berendezés be- és kilépési pontjain:

- $[B\rho](t)$ fázis tömegáram (B térfogatáram),
- $[Bc_i](t)$ komponens tömegáram,
- $[B\rho c_p T](t)$ entalpia áram,
- $[Bv\rho](t)$ erő.

Nemcsak a rendszer és a környezete közötti kölcsönhatás fejezhető ki az áramokkal, hanem a rendszeren belüli kölcsönhatások is. A kölcsönhatások különböző folyamatok, jelenségek formájában jelennek meg. Ezek lehetnek a teljes térfogatban, vagy a különböző fázisok érintkezési felületén lejátszódó jelenségek. Mennyiségileg ezeket azzal jellemezhetjük, hogy időben mekkora extenzív tulajdonság változást (áramot) indukálnak. Az áramot célszerű a térfogatra (térfogati jelenségek) vagy a felületre vonatkoztatni és az áram térfogati, vagy felületi sűrűségét *áram sűrűségnek* nevezzük.

A technológia egy elemét képező műveleti egységben fázisonként az alábbi jelenségeket észlelhetjük, amelyek a rendszer extenzív mennyiségeit befolyásolják:

1. *Konvektív áramlás.* A berendezéseken átáramló fázisok okozta makroszkópikus áramlás. Formai sajátossága, hogy a fázis egy eleme (pontja) a térkoordinátáját folytonos függvény szerint változtatja. A változás a fázis *átlagos áramlási sebességével* jellemezhető.
2. *Konduktív áramlás.* Az ilyen típusú transzportnak az az oka, hogy a fázis molekulákból épül fel, és az átlagos fázisáramlási sebesség a különböző kémiai komponensek különböző átlagsebességeiből adódik. Így az átlaghoz képest az egyes komponensek különböző sebességekkel áramlanak a berendezésben (mikroszkópikus áramlás: Fick, Fourier, Navier-Stokes törvények). A

térkoordináták ennél a transzport típusnál is folytonos függvény szerint változnak.

3. *Forrás (nyelő)*. Minden, ami nem a térkoordináták menti áramlásként írható le forrásnak tekinthető (pl. kémiai reakciók, „anyagveszteségek”).
4. *Átadás*. Több fázis esetében a forrás egyik típusa.
5. *Lokális megváltozás*. Az extenzív mennyiségeket az 1.-4. jelenségek, mint okok igyekeznek megváltoztatni, és ha nem kompenzálják egymás hatását, akkor okozatként az extenzív mennyiség (ill. annak térfogati sűrűsége) a tér adott pontján időben megváltozik.

A 2-4. jelenségek mennyiségi leírását a fenomenologikus termodinamika szolgáltatja az alábbi formában:

$$j = \gamma * \Delta e \quad (3.1)$$

amely azt fejezi ki, hogy az áramsűrűség homogén lineáris függvénye egy megfelelő *hajtóerőnek* (Δe), a γ pedig a megfelelő *kinetikai konstans*. A hajtóerő a rendszer aktuális állapota, egyensúlytól való eltérésének mértéke. Az egyensúly az ún. *potenciál jellegű mennyiségekkel* fejezhető ki. Illusztrációként tekintsük a gáz és folyadék fázisok között kialakuló komponens egyensúlyt. Az egyensúly feltétele az átadásban résztvevő komponensnek a két fázisban kialakuló kémiai potenciáljának egyenlősége. Az egyensúlyi törvényt (pl. Henry törvény) úgy kapjuk meg, hogy a kémiai potenciálokat koncentrációkra váltjuk:

$$\begin{aligned} \mu^G &= \mu^F \\ \mu_0^G + RT \ln c^G &= \mu_0^F + RT \ln c^F \\ c^G &= \exp\left(\frac{\mu_0^F - \mu_0^G}{RT}\right) \cdot c^F \\ c^G &= H c^F \end{aligned} \quad (3.2)$$

A (3.1) törvénynek megfelelő komponens átadási áram sűrűség az alábbi módon számolható ki:

$$j = \beta(c^G - Hc^F)$$

Egyensúlyban az áramsűrűség zérus (a folyamat makroszkópicusan „leáll”). A számunkra fontos potenciál jellegű mennyiségek az alábbiak:

komponens átadás, kémiai reakció: *kémiai potenciál* (a hőmérséklet és koncentráció függvénye),

hőátadás: *hőmérséklet*,

áramlás: *nyomás*.

A megfelelő potenciálok egyenlőségéből következő egyensúlyi törvényekre az alábbi, korábban tanult, szakma történetileg kialakult példákat említjük: a *tömeghatás törvénye* a kémiai reakciónál; a *Henry törvény* a gáz-folyadék komponens egyensúlynál (lásd előbb); a *Langmuir izoterma*, *BET elmélet*, *Fraundlich izoterma* a gáz-szilárd komponens egyensúlynál; a *Raoult Dalton törvény* a gőz-folyadék egyensúlynál; *Nernst féle megoszlás* a folyadék-folyadék komponens egyensúlynál, stb.

A konduktív áramlásnál a hajtóerő a megfelelő mennyiségek gradiensei: komponensnél a koncentráció, hővezetésnél a hőmérséklet, áramlásnál a sebesség. Illusztrációként a Fick törvényt említjük:

$$j = -D \cdot \text{grad}(c) \quad (3.3)$$

A kinetikai „konstans” általában egy hőmérséklet függvény, elnevezései: a kémiai reakciónál *kinetikai konstans*, komponens és hő átadásnál *átadási tényező*, komponens vezetésnél *diffúziós állandó* (D), hővezetésnél *hővezetési tényező* (Fourier törvény), impulzus vezetésnél *viszkózitási tényező* (pl. Navier Stokes törvény).

A fentiekből látható, hogy a vegyészmérnökség tudománytörténetileg kialakult mennyiségei és törvényszerűségei színes képet mutatnak. Az egyik mennyiségnél a térfogati sűrűség (pl. c), a másikonál a potenciál jellegű mennyiség (pl. T , p) az ami önálló változóként explicite jelenik meg, nem beszélve arról, hogy az egyik közvetlenül mérhető, a másik viszont csak áttételesen számolható. A különböző jelenségek indukálta

áramsűrűségek számítására is sokféle törvényszerűséget kellett felismerni. Az absztrakció szintjén ugyanakkor, a modellezés szempontjából csupán néhány egyszerű homogén (gyakran lineáris) függvény kapcsolatot (3.1-3.3) kell figyelembe vennünk.

3.2. Mérlegek

Egy bankban lévő pénzmennyiség egy adott időponttól kezdődően a kezdeti készlettől és a betéti és hitelezési (és veszteség) aktivitástól függ. Pontos elszámolással a banki pénzmennyiség számolható. Ugyanígy egy raktárkészlet is nyomon követhető a kezdeti készlet, a bevételezés és a kiadás ismeretében. A különböző árukat közben egyik helyről a másikra is rakhatják, ezért a raktáron belüli „tájékozódáshoz” részletesebb leírásra van szükség. A pénz, az árut jellemző mennyiség extenzív jellegű, ezért ezekre mérleget lehet készíteni. A bent levőt a bevétel növeli, az elvét csökkenti.

A bankkal, a raktárral analóg a műveleti egység (berendezés) is, az extenzív mennyiségeire mérleget lehet készíteni. Van betáplálás, elvét, a berendezésen belül makroszkópikus (a fázis átlag sebességével való konvektív) és mikroszkópikus (az átlagostól eltérő sebességgel való konduktív) áramlás és egyéb jelenségek (forrás, átadás). Az alábbiakban a mérlegkészítés technikáját mutatjuk be.

A mérlegkészítésnél a diszkrét és folytonos „problémájába” ütközünk. A közeg „korpuszkuláris jellegű” (diszkrét molekulák alkotják) a leírására pedig a folytonos tér-idő koordináta rendszert használjuk. A koordináta rendszert illetően is két eset lehetséges a rögzített, ill. a mozgó koordináta rendszer. A diszkrét és folytonos kapcsolatát a hierarchikus modellezés kifejtésekor analizáljuk. Itt a folytonos és rögzített háromdimenziós Descartes féle térkoordináta rendszert választjuk. A folyamatok időben (a negyedik koordináta) ugyancsak folytonosan mennek végbe.

Első lépésként jelöljük ki a tér-idő határokat:

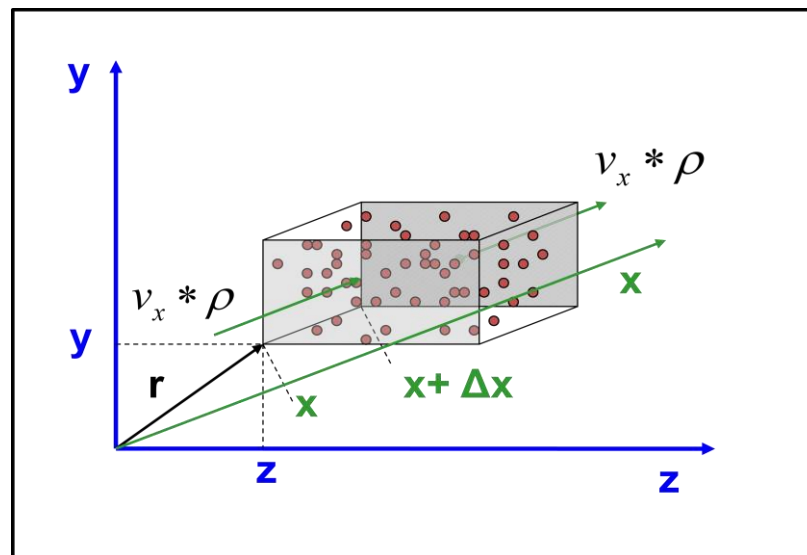
$$t \geq 0, \quad x \in [x_0, x_\infty], y \in [y_0, y_\infty], z \in [z_0, z_\infty]$$

Ezen keretek között készítjük el az extenzív mennyiségekre vonatkozó mérlegeket. Mivel az extenzív mennyiség adott időben a geometriai teret egyenetlenül töltheti ki, a rendszer

differenciált jellemzésére szükséges a térbeli eloszlásának ismerete. A fázis tömeg esetében ez a fázis sűrűség definiálásával biztosítható:

$$\rho(t, x, y, z) = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta m}{\Delta V}, \quad \Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

amely adott időben a tér bármely pontján más-más értékű lehet. Az extenzív mennyiségre vonatkozó mérleget a térfogati sűrűségének felhasználásával készíthetjük el. A 3.1. ábrának megfelelően tekintsük a geometriai tér egy \mathbf{r} vektorral definiált belső pontját, s ebből a pontból kinövő ΔV véges térfogatú téglatestet. Ezen téglatestben lévő fázis tömegre készítünk először mérleget.



3.1. ábra. A leírás tere.

Először a téglatestben lévő fázis tömeget határozzuk meg. A téglatestben is egyenletlen a tömegeloszlás, ezért a fázis sűrűség definíciója alapján a bent lévő fázis tömeg egy térfogati (hármás) integrállal számolható ki:

$$\Delta m(t, x, y, z) = \int_x^{x+\Delta x} \int_y^{y+\Delta y} \int_z^{z+\Delta z} \rho(t, x, y, z) \cdot dz \cdot dy \cdot dx$$

A matematikában tanult *integrál középérték tétel* alapján az előbbi összefüggés az alábbi szorzattal is felírható (a tér egy belső pontjában lévő sűrűség érték szorozva a térfogattal):

$$\Delta m(t, x, y, z) = \rho(t, x + c_1 \cdot \Delta x, y + c_2 \cdot \Delta y, z + c_3 \cdot \Delta z) \cdot \Delta V,$$

ahol $c_i \in [0,1]$.

A bent lévő fázis tömeget a különböző irányokból a be- és a kiáramlás változtathatja meg. Például az x irányból való beáramlás (tömegáram) mértékét a v_x áramlási sebesség határozza meg, és az alábbi felületi (kettős) integrállal számolhatjuk ki:

$$\Delta \dot{m}_x(t, x, y, z) = \int_y^{y+\Delta y} \int_z^{z+\Delta z} [v_x \rho](t, x, y, z) \cdot dz \cdot dy$$

Az integrál középérték tételt itt is alkalmazva:

$$\Delta \dot{m}_x(t, x, y, z) = [v_x \rho](t, x, y + c_4 \cdot \Delta y, z + c_5 \cdot \Delta z) \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

Ugyanígy az eltávozó tömegáram az alábbi lesz:

$$\Delta \dot{m}_x(t, x + \Delta x, y, z) = [v_x \rho](t, x + \Delta x, y + c_6 \cdot \Delta y, z + c_7 \cdot \Delta z) \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

Az x irányhoz hasonlóan az y és z irányú áramok is számolhatók. Ha a fázis tömeget más jelenség nem befolyásolja, akkor mérleget készíthetünk, az előjelesen összegzett áramok eredőjeként a bent lévő fázis tömeg időben megváltozhat:

$$\frac{\partial(\Delta m(t, x, y, z))}{\partial t} = \Delta \dot{m}_x(t, x, y, z) - \Delta \dot{m}_x(t, x + \Delta x, y, z) \pm \dots$$

Ebbe a mérlegbe beírva a megfelelő ρ függvényeket és osztva az egyenlet minden tagját ΔV -vel, az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\frac{\partial(\rho(t, \dots))}{\partial t} = - \frac{[v_x \rho](t, x + \Delta x, \dots) - [v_x \rho](t, x, \dots)}{\Delta x} - \dots$$

A $\Delta V \rightarrow 0$ határátmenettel, a differenciálhányadosok definícióját figyelembe véve megkapjuk a fázis tömegre vonatkozó differenciális mérlegegyenletet:

$$\frac{\partial(\rho(t, x, y, z))}{\partial t} = - \frac{\partial\{[v_x\rho](t, x, y, z)\}}{\partial x} - \dots$$

Teljes egészében, ill. a *div* operátor felhasználásával a kontinuitási egyenletnek nevezett törvény az alábbi formákban is ismert:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(v_x\rho)}{\partial x} + \frac{\partial(v_y\rho)}{\partial y} + \frac{\partial(v_z\rho)}{\partial z} = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v) = 0$$

A (3.4) a fázis tömegre vonatkozó differenciális mérlegegyenlet a négydimenziós tér idő koordináta minden belső pontjára érvényes. Ha számolásra használjuk a megfelelő kezdeti, ill. peremfeltételeket is meg kell adni:

$$\begin{aligned} t = 0, & \quad \rho_t(t, x, y, z) \\ x = x_0, & \quad \rho_x(t, x_0, y, z) \\ y = y_0, & \quad \rho_y(t, x, y_0, z) \\ z = z_0, & \quad \rho_z(t, x, y, z_0) \end{aligned}$$

A komponens tömegre a fentiekhez hasonlóan lehet mérleget készíteni az alábbi kiegészítéseket figyelembe véve:

- A ρ helyett, a komponens térfogati sűrűsége a koncentráció szerepel.
- A komponens transzportban a konvektív mellett a konduktív áramot is figyelembe kell venni.
- Kémiai reakció estén a komponensre a fázisban nem érvénysül a megmaradás.

Ennek megfelelően pl. az x irányú beáramlás az alábbi lesz:

$$\Delta \dot{m}_x(t, x, y, z) = \left[v_x \rho - D \frac{\partial c}{\partial x} \right] (t, x, y + c_8 \cdot \Delta y, z + c_9 \cdot \Delta z) \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

A kémiai reakció a teljes térfogatra vonatkozik, ezért a forrás áram egy hármas integrállal, ill. az integrál középérték tétel alapján, az alábbi módon számolható:

$$\Delta \dot{m}_f(t, x, y, z) = v \cdot r(t, x + c_{10} \cdot \Delta x, y + c_{11} \cdot \Delta y, z + c_{12} \cdot \Delta z) \cdot \Delta V,$$

ahol v a sztöchiometriai koefficiens.

A mérleget a korábbihoz képest a forrás árammal kell kiegészíteni:

$$\frac{\partial (\Delta m(t, x, y, z))}{\partial t} = \Delta \dot{m}_x(t, x, y, z) - \Delta \dot{m}_x(t, x + \Delta x, y, z) \pm \dots + \Delta \dot{m}_f(t, x, y, z)$$

A határátmenet után a komponens tömeg differenciális mérlegegyenlete, ill. a *div* és *grad* operátorokkal felírt szokásos alakja a következő lesz:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (v_x \cdot c)}{\partial x} + \frac{\partial (v_y \cdot c)}{\partial y} + \frac{\partial (v_z \cdot c)}{\partial z} - D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = v \cdot r \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(v \cdot c) + \text{div}(-D \cdot \text{grad}(c)) = v \cdot r$$

A mérlegkészítés az energiára (entalpiára, hőre) és impulzusra is elvégezhető, a rendszerben végbemenő összes folyamat figyelembevételével. Inhomogén térben a mérleget a tér egy pontjára vonatkoztatjuk, emiatt a műveleti egységeket leíró mérleg egyenletek formálisan egy parciális differenciálegyenlet-rendszert eredményeznek. A szükséges peremfeltételeket a rendszer és a környezetének a kölcsönhatása alapján határozzuk meg. A kezdeti feltételek a rendszer kezdeti állapota alapján rögzíthetők.

3.3. A műveleti egységek fundamentális egyenletei

A *Benedek és László* által kibővített *Damköhler* egyenleteket a 3.2. ábra szemlélteti. Ezek a műveleti egységet leíró ún. fundamentális egyenletek. A fázis tömegre felírt mérleg a folytonossági tételt adja. A *K-I* db komponens tömeg, az energia és a vektoriális impulzus mérlegek bal oldala a lokális megváltozást (okozat), jobb oldala pedig rendre a konvektív, a vezetékes, a forrás, ill. az átadás tagokat (okok) tartalmazza. Az alapegyenletek alkalmazása során két nehézség jelentkezik:

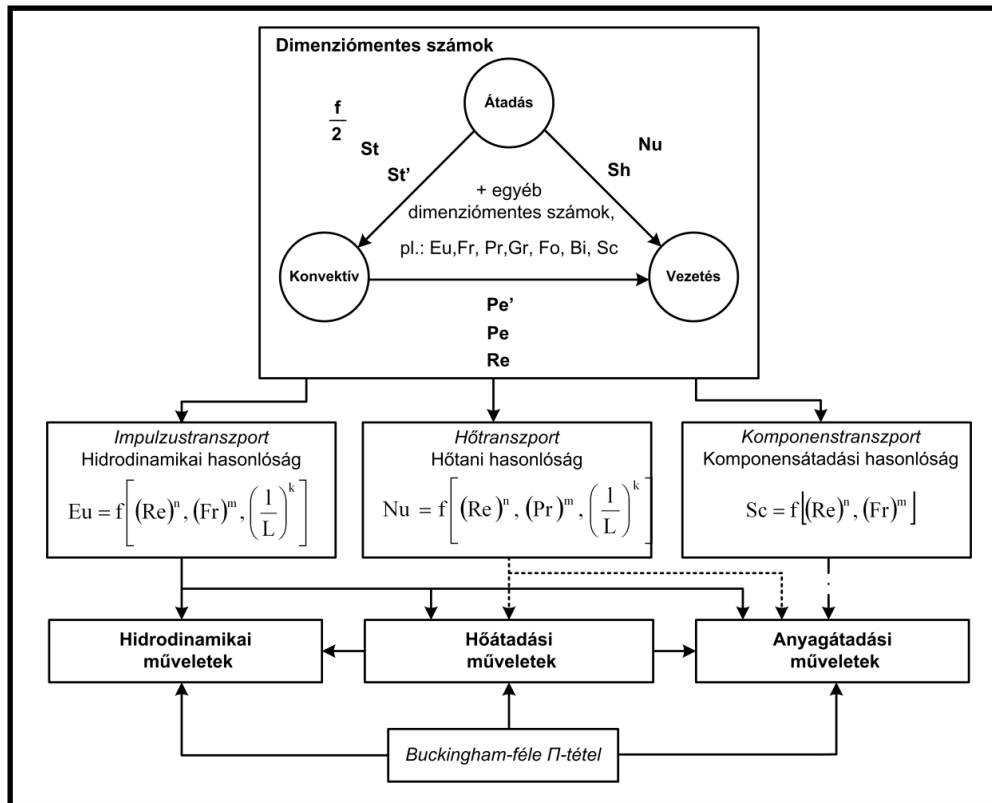
1. Hogyan adhatók meg az egyenletekben szereplő paraméterek, az ún. termodinamikai tulajdonságok (reakció kinetikai konstansok, átadási tényezők, stb.) értékei?
2. Hogyan oldjuk meg a parciális differenciálegyenlet-rendszert?

	Lokális megváltozás	Konvektív tag	Vezetékes tag	Forrástag	Átadási tag
MÉRLEGEK					
fázistömeg:	$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\rho \cdot \underline{v})$				
komponens:	$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\text{div}(c_i \cdot \underline{v}) + \text{div}(D_i \cdot \text{grad } c_i) + v_i \cdot r_v \pm \beta_i \cdot \omega \cdot \Delta c_i$				
hő:	$\frac{\partial (\rho \cdot c_p \cdot T)}{\partial t} = -\text{div}(\rho \cdot c_p \cdot T \cdot \underline{v}) + \text{div}(\lambda \cdot \text{grad } T) + (-\Delta H_R) \cdot r_v + \alpha \cdot \omega_Q \cdot \Delta T$				
impulzus:	$\frac{\partial (\rho \cdot \underline{v})}{\partial t} = -\rho \cdot (\underline{v} \cdot \nabla) \cdot \underline{v} + \text{grad}(\eta \cdot \text{div } \underline{v}) - \text{grad } p + p \cdot \underline{a}$				

3.2. ábra. A műveleti egységek fundamentális egyenletei [12, 31].

A felhasznált paraméterek értékeinek pontossága kulcskérdés a technológiai rendszer modellezésében. Külön szakterület a termodinamikai tulajdonságok számítása, amelyben az alapvető termodinamikai törvényszerűségek mellett az ún. dimenzióanalízis is szerepet kap, megalapozva a tulajdonságok felhasználásával definiált dimenziómentes mennyiségek közötti *analógiákat*, *hasonlóságokat* és összefüggéseket (3.3. ábra), amelyek részleteit a vegyipari műveletek című tantárgy tartalmazza.

A modellek numerikus megoldásához egyre több jól használható mérnöki szoftver (különböző rendeltetésű szimulátor, lásd a 12. fejezetet) áll rendelkezésünkre. Sok esetben pedig a háromdimenziós térben és időben való leírás is egyszerűsíthetünk a modellezendő konkrét objektum sajátosságait figyelembe véve, ahogyan azt a 2.3 (2.9. ábra) és 2.6. (2.24. ábra) fejezetekben elemeztük.



3.3. ábra. A dimenziómentes számok rendszere [12, 31].

4. A technológiai rendszer struktúrája

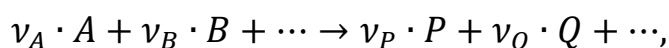
A technológiai rendszernek műveleti egységek hálózataként való leírása az esetek nagy részében hatékonynak bizonyult. Az alkalmazása során viszont nehézségek is jelentkeztek:

1. Nagyszámú elemből álló rendszerek kezelésére nem alkalmas. Ezért a kibővített Damköhler-egyenletek mellett, azoktól függetlenül, a modellezésben megjelentek az ún. populáció mérlegegyenletek (pl. kristályosítás, nagy komponens számú polimerizáció).
2. A műveleti egységek egyre összetettebbek, így egységként való kezelésük körülményes.

Ezen problémák kezelésére a hetvenes évek elején kezdődtek el azok a próbálkozások, amelyekben a technológiai rendszert differenciáltabb struktúrák szerint képzeltek el. Ezek vezettek el a technológiai rendszerek *hierarchikus modellezéséhez*. A hierarchikus modellezés felvázolása előtt gondoljuk át a modellezendő objektum felépítését.

4.1. A technológiai objektum sajátosságai [29]

A technológiai objektumra általában az jellemző, hogy működtetése kapcsolatos valamilyen kémiai komponens átalakításával. A kémiai átalakítást a reakcióegyenlet (sztöchiometriai egyenlet) reprezentálja:



ahol $\{A, B, \dots\}$ a kiindulási, vagy reagáló komponensek, $\{P, Q, \dots\}$ pedig a keletkező komponensek halmaza. A kémiai átalakítást az indokolja, hogy valamilyen $N = \{A, B, \dots\}$ komponenseket tartalmazó nyersanyag(ok) felhasználásával a számunkra értékesebb $T \subseteq \{P, Q, \dots\}$ termék(ek)hez akarunk hozzájutni.

A kémiai reakció, mint folyamat a *molekulák* közötti kölcsönhatások eredménye. A sztöchiometriai egyenletben az $S \in \{A, B, \dots\} \cup \{P, Q, \dots\}$ szimbólumok az azonos *kémiai szerkezetű* molekulák osztályát jelölik. A molekulák közötti kölcsönhatás a termodinamikai fázisban jön létre és ezért a fázis tulajdonságai befolyásolják azt. Mint

minden folyamat időben (kinetika) egy adott irányba (egyensúly) folyik. Az irányt a fizikai-kémiai törvényszerűségek (termodinamika) jelölik ki, míg a megfelelő időt az ember által létrehozott *berendezések* (konkrétan itt a reaktorok) biztosítják. A berendezésekben a „termodinamikai fázis” tulajdonsággal bíró molekulahalmazok, az ún. *fáziselemek* között újszerű kölcsönhatások alakulnak ki (pl. az áramlás során). Ez befolyásolja a fáziselemek tulajdonságait, s ezen keresztül az egész folyamatot is. A fáziselemek jellegüket tekintve igen sokfélék lehetnek. Heterokatalitikus reakciónál például a szilárd fázis elemeit még a reaktoron kívül - a katalizátor készítés során - kialakítják. A fluid fázisok fáziselemei ugyanakkor nagyon gyakran a berendezésben az áramlás során jönnek létre, s közöttük bonyolult kölcsönhatások alakulnak ki (pl. diszperzió-koaleszcencia, keveredés a geometriai térben). A fáziselemek egyes esetekben elkülöníthetők, s individuálisan is megragadhatók (pl. mérés által), más esetekben viszont fizikai elkülönülés nincs (pl. homogén fázisú reaktorban).

A fáziselemek közötti kölcsönhatás (általában az áramlás), a berendezések *berendezéselemeken* keresztüli céltudatos kialakításával, érdekeinknek megfelelően befolyásolható. A berendezéselemekben levő hasonló fáziselemek összessége a *fázis*. A fázis rendelkezik a "termodinamikai fázis" tulajdonsággal, de mint elemeinek - a fáziselemeknek - az összessége, annál több is (pl. diszpergált fázis).

A kémiai reagáltatás, mint művelet (eljárás) mellett egyéb olyan műveletek (eljárások) is léteznek, amelyeknek funkciója lehet, pl. a nyersanyag átalakítása abból a célból, hogy a kémiai reagáltatás hatékonyabb legyen. Lehet ez a kémiai reagáltatás körülményeinek befolyásolása, de lehet a reaktorból távozó anyag további átalakítása is, s így értékesebbé tétele. Ezen további műveletek: a fázisok egyesítése (pl. keverés), a fázisok szétválasztása (pl. szűrés, centrifugálás), fázisok közötti komponens- ill. entalpiacsere (pl. abszorpció, adszorpció, kristályosítás, rektifikálás, hőcsere).

Az így értelmezett vegyipari műveletekre jellemző, hogy funkciójukat nem tudják - érdekeink szerint - tökéletesen ellátni. Ennek, a fizikai-kémiai törvényszerűségekbe ütköző akadályai vannak. Amint azt már említettük, minden folyamat az egyensúly irányába tart, és mint mozgás időben megy végbe. A rendelkezésre álló időt (tartózkodási

idő) a berendezés véges geometriai méretei determinálják. Ezt a gátat úgy tudjuk áthidalni, hogy az adott művelethez „segéd” műveleteket is csatolunk. Ezáltal elemekből egy rendszert hozunk létre, amely az adott funkciót magasabb szinten képes ellátni, mint annak egyik eleme. Erre a rendszerre jellemzőek az alábbiak:

- Az adott művelet a rendszer centrális eleme.
- A kapcsolt „segéd” műveletek a rendszer további elemei.
- A rendszer funkciója, a centrális elem funkciójával azonos.

A rendszer mesterséges (ember által alkotott), a nem centrális elemek kiválasztása és az elemek közötti kapcsolatok kialakítása többnyire műszaki (és csak közvetetten gazdasági) célfüggvény alapján lehetséges. Az elemek közötti kapcsolatok típusai az alábbiak:

- soros,
- párhuzamos,
- visszacsatolós,
- előrecsatolós.

Párhuzamos kapcsolásnál az elemek között nincs (közvetlen) kapcsolat, de az egyes elemek ugyanazt a funkciót látják el. Soros kapcsolásnál a sorban előbb álló hat az utána következőre, míg visszacsatolásnál az egymásra hatás kölcsönös. Az ilyen rendszerek a *műveleti egység* tulajdonsággal bírnak. A műveleti egység tulajdonságú kémiai technológiai objektum, mint elemek maguk is rendszerre szervezhetők. A magasabb hierarchiájú rendszerre szervezés okai az alábbiak:

1. Egy kémiai technológiában más egyéb sztöchiometriai egyenlettel megfogalmazható átalakítás is előfordulhat.
2. A műveleti egységben, mint rendszerben a kémiai reagáltatáson túl, a többi művelet is lehet centrális elem.
3. Az összekapcsolás a gazdaságosságot növeli.

Az így előállított rendszerre jellemző az, hogy több centrális eleme is lehet, s funkciója általában nem azonos egy elemének a funkciójával. Ez is mesterséges, s az elemek

közötti kapcsolat kialakítása már többnyire közvetlenül gazdasági célfüggvény alapján lehetséges. A kölcsönhatást jellemző tömeg- és energiaáramok halmaza főáram és mellékáramok osztályára bontható. A főáramok által kijelölt kapcsolatokra a műveleti egységnél leírtak érvényesek. A mellékáramok kialakítása viszont egyértelműen gazdasági kérdés. Az ilyen rendszereket *technológiai rendszer* tulajdonságúnak tekintjük.

4.2. Modellezési alapelvek

Itt az *Árva Péter* által bevezetett elemszám sűrűségeen alapuló hierarchikus megközelítést mutatjuk be. A modellalkotás során az alábbi alapelveket követjük [9]:

1. A KTO sorozatosan felbontható úgy részekre, hogy egy (rész) objektum sajátosságai autonóm módon feltárhatók azon objektumoktól függetlenül, amely objektumoknak az adott objektum része, ill. amely objektumok az adott objektumnak részei.
2. A sorozatos felbontásnál a céloksági viszonyok mindig megszabják azt a legalacsonyabb szintet, amelynél a felbontás művelete befejezhető, s ezen a legalacsonyabb szinten elhelyezkedő objektumokat ismertként kell tételeznünk.
3. A sorozatos felbontás (dekompozíció) eredményeképpen kapott objektumokat ok-okozati (alulról felfelé ható), ill. céloksági (felülről lefelé ható) kapcsolatok szervezik egészszé. Az ok-okozati viszonyok feltárásánál közvetetten céloksági szempontok is érvényesülnek (a modellezés relativizmusa).
4. Bármely (rész)objektum a közvetlen felbontásából adódó (alacsonyabb hierarchiájú) részobjektumok és e részobjektumok közötti kölcsönhatások analízisén keresztül ismerhető meg.
5. A dekompozíció során eredendően diszkrét rendszerekhez jutunk, bizonyos feltételek teljesülése mellett azonban a diszkrét részekből összetett objektumot folytonos rendszerként kezeljük.
6. A hierarchikusan egymáshoz rendelt két rendszer kapcsolata egy hierarchia paradoxonon nyugszik, amely azt fejezi ki, hogy a felsőbb (hierarchiájú) szint elvileg nem függetleníthető az (alsóbb) hierarchiájú) szinttől, ugyanakkor - a

hierarchia szintek autonómiáját tételezve - a felsőbb szint (önmagában) zárt modelljével számolunk.

7. Egy-egy (rész)objektum megismerésénél érvényesül az addíció elve, amely azt fejezi ki, hogy a korábbi ismeretekhez új ismeretek hozzátehető, ill. elvehető.

A fentiek „szellemében” a technológiai rendszer modell alkotásában az alábbi lépéseket célszerű megkülönböztetni:

1. *Dekomponálás*, amely során a bonyolultat, egyszerűbb elemei rendszerére bontjuk fel.
2. *Kódolás*, amely során a részeket és a kapcsolatokat, egyszerű elveket alkalmazva, elnevezzük.
3. Az *atom pozíciójú*, már kellően egyszerű objektumok modelljeinek kiválasztása, definiálása.
4. A *rendszer pozíciójú* objektumok modelljeinek megalkotása a korábbi lépés(ek)ben már megalkotott, vagy kiválasztott elem modellek ismeretében, a kapcsolatokat leíró összefüggésekkel kiegészítve. A dekomponálás során eredendően diszkrét rendszerek adódnak, a sok elemet és kapcsolatot tartalmazó rendszereket, a leírhatóság végett, mégis folytonosként kezeljük.
5. A *technológiai objektum*, feladat megoldásokat szolgáló, megfelelő információ tartalmú *modellrendszerének* kialakítása.

4.3. Dekomponálás, kódolás

A vizsgálandó Q objektumot egy T_i tulajdonság szerint R_i részekre bontjuk. Egyik R_i sem lehet bonyolultabb a Q -nál. A dekompozíció során az alábbi feltételeknek kell teljesülni:

1. *Lefedés*: azt fejezi ki, hogy az összes rész kiadja az egészet:

$$\bigcup_{i=1}^n R_i = Q$$

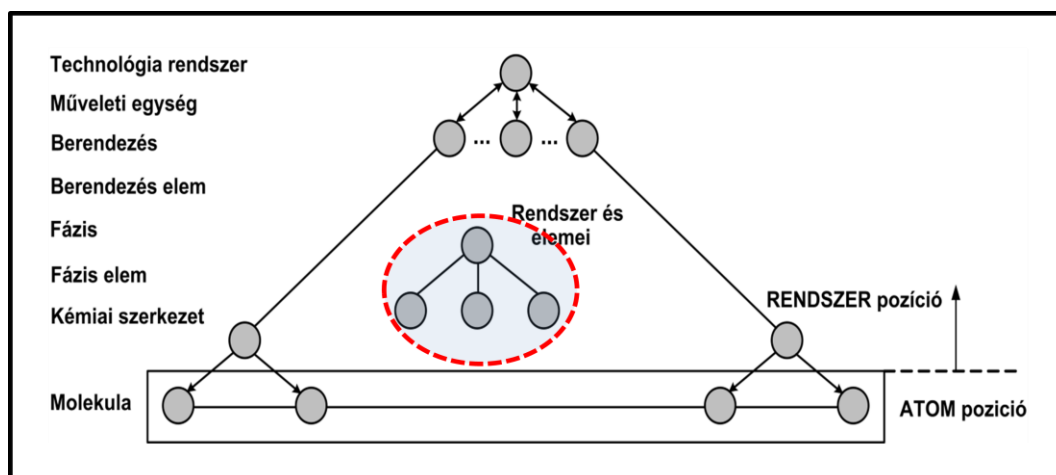
2. *Diszjunkt részek*: azt fejezi ki, hogy a részeknek nincs közös része:

$$R_i \cap R_j = 0 \quad \forall i \neq j \text{ esetében}$$

3. *Homogenitás*: azt fejezi ki, hogy minden elem T_i tulajdonságú, azaz az elemek hasonló komplexitásúak. Pl. egy gáz buborék és egy reaktor nem lehet ugyanannak a rendszernek a közvetlen része.

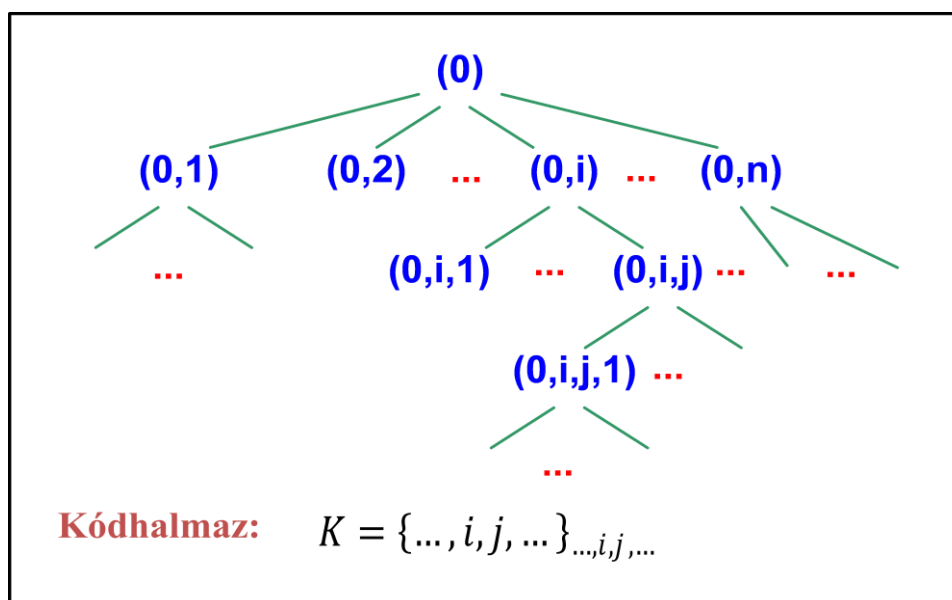
A részek egy T_2 tulajdonság szerint még egyszerűbb elemekre bonthatók, és ha még azok is összetettek, akkor T_3, \dots stb. szerint még tovább bonthatók mindaddig, amíg már kellően egyszerű, ismert modellekkel leírható elemeket kapunk.

A $T = \{T_1, T_2, \dots\}$ (konkrétabban {molekula, kémiai szerkezet, fáziselem, fázis, berendezésem, berendezés, műveleti egység, technológiai rendszer}) halmazon értelmezhető az „ α ” ún. hierarchia szint reláció, az alábbi értelemben: $T_i \alpha T_j$ (másképpen kifejezve $(T_i, T_j) \in \alpha$) akkor és csak akkor, ha a T_j tulajdonságú objektum a T_i ($i \neq j$) tulajdonságú objektum egyszeri, vagy többszöri dekompozíciójából adódott. Az α reláció a T halmazt jól rendezetté teszi $(\langle T, \alpha \rangle)$, amely kifejezi a kémiai technológiai objektumok hierarchikus felépülését (4.1. ábra). A hierarchia szintekbe való besorolásnál különféle szempontok érvényesülhetnek. Ugyanazon objektummal kapcsolatban többféle hierarchikus rendszer is definiálható, mivel a dekompozíció művelete nem egyértelmű. Számos szempont mérlegelésével alakítjuk ki, és az is előfordulhat, hogy a modellezés menetében meg is változtatjuk. A 4.1. ábrán a nyilak a tartalmazásokat reprezentálják. Az alacsonyabb hierarchia szinten levő objektumok a magasabb szintű objektumok dekompozíciójából adódnak. Ez alapján érthető, hogy a KTO (hierarchikus) szerkezetét bemutató 4.1. ábra finomítható. Sőt a vegyészmérnöki tudomány "történetiségéből" adódóan a nomenklatura is sokszínű. Mindegyik "nomenklatura együttes" magán viseli az adott kutatóhely konkrét feladatainak jegyeit, ami a konstruktív, gyors feladatmegoldást korlátozza.

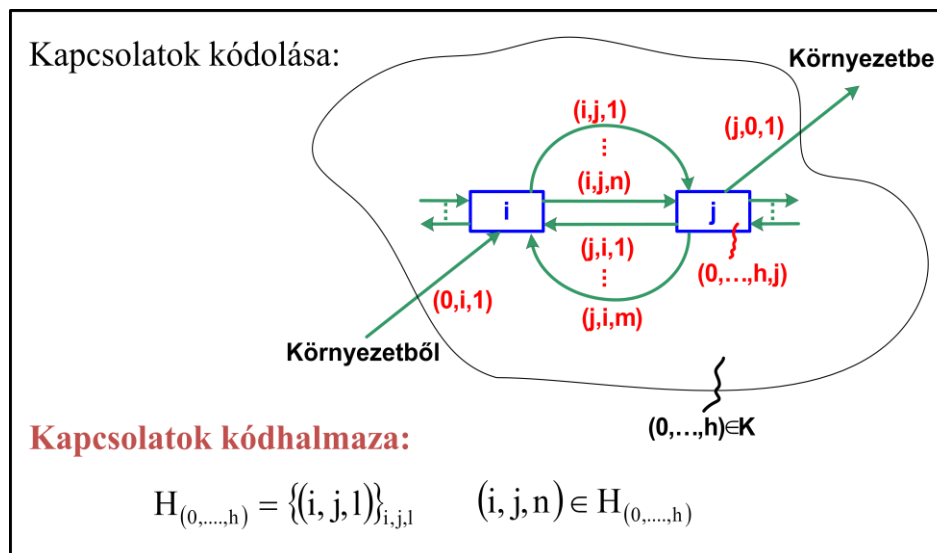


4.1. ábra. A KTO, mint hierarchikus rendszer.

Egy összetett technológiai rendszer esetében a részobjektumok száma nagy, ezért egy olyan konzisztens kódrendszert kell alkalmazni, amellyel az objektumok egy-egy értelműen megjelölhetők. Erre látható példa a 4.2. ábrán. A kód egy hierarchia szintnek megfelelő rendezett n -es. A (0) kód a vizsgált objektumot, a $(0, i)$ rendezett pár pedig az i . elemét jelöli meg. A $(0, i, j)$ rendezett hármas az i . elem j . elemének kódja, és így tovább. Az összes kód halmaza az objektum K kód halmaza. Ez a kódrendszer rövidített használatot is lehetővé tesz. A $(0, i, j)$ kód helyett pl. használhatjuk a (j) kódot is, ha egyértelmű, hogy éppen a $(0, i)$ objektum vizsgálatával foglalkozunk.



4.2. ábra. A dekomponált objektum kódhalmaza.



4.3. ábra. A kapcsolatok kódhalmaza.

Az objektumok elnevezése mellett a részek közötti kapcsolatok kódolását is el kell végeznünk. Erre mutat egy lehetőséget a 4.3. ábra. A kapcsolati kódok egy adott objektumhoz kötődnek, ezért a kapcsolati kódhalmaz indexe az adott objektum kódja. A $H_{(0, \dots, h)}$ a $(0, \dots, h)$ kódú objektum kapcsolati kódhalmaza. Az adott kódú objektumon belül az (i, j, n) rendezett hármas az i és j kódú elem közötti n . kapcsolatot jelöli meg. Ha minden két elem viszonylatában csupán egy kapcsolat létezik, akkor a kódolást rendezett párral célszerű elvégezni.

Az objektumok neveit tartalmazó K kódhalmazon értelmezhető egy ρ *tartalmazási reláció* az alábbi értelemben:

$(k_1, k_2) \in \rho$, ha a k_2 nevű objektum a k_1 objektum közvetlen, vagy közvetett dekompozíciójából adódott ($k_1, k_2 \in K$).

A KTO tartalmazási relációival analóg egy hierarchikus szervezet, „vezető – beosztott” viszonya. Egy halmaz és a halmazon értelmezett relációt korábban már relációs rendszernek neveztük. A 4.4. ábrán bemutatjuk, a KTO, ill. egy szervezet relációs rendszerként való definiálását.

Általánosítás, legyen:

$$S_{\Delta} \langle E, R \rangle,$$

ahol

E a hierarchikus rendszer részeit jelölő kódok halmaza

$R \subseteq E \times E$ tartalmazási reláció

$(e_i, e_j) \in R \Leftrightarrow e_j$ része e_i -nek Műszaki rendszer

$(e_i, e_j) \in R \Leftrightarrow e_j$ beosztottja e_i -nek Szervezet

4.4. ábra. A KTO, ill. a szervezet, mint relációs rendszer.

Az R reláció az E halmazon egy *farendezést* definiál [55], mert a reláció kielégíti a 4.5. ábrán bemutatott tulajdonságokat. A farendezés gráfja a 4.6. ábrán látható. A farendezés helyett gyakran a könnyebben lerajzolható *redukcióját* szoktuk megjeleníteni. Könnyen észrevehető, hogy a redukció a tranzitivitást, összehasonlíthatóságot már elveszíti.

Az E relációs rendszer alkalmas arra, hogy a hierarchikus modellezés során használt fogalmakat pontosan rögzítsük. A különböző szintű objektumok, különböző pozíciókban lehetnek. A leggyakrabban használt pozíciók az alábbiak:

- atom (nem kémiai atomról van szó) pozíció (4.7. ábra),
- rendszer pozíció,
- rendszer és eleme pozíció (4.8. ábra),
- alrendszer és részrendszer pozíció (4.9. ábra).

A fentiek alapján összefoglalhatjuk, hogy a $\langle K, \rho \rangle$ egy farendezés, amelynek maximális eleme a vizsgált rendszer. A legalacsonyabb szintű elemek atom (nem kémiai értelemben) pozícióban, az összes többi objektum pedig rendszer pozícióban van. A rendszer pozíciójú objektum közvetlen dekomponálásával a rendszer eleme pozícióban lévő objektumokat kapjuk. Ebben a struktúrában az atom pozíciójú objektumok a legegyszerűbbek, modelljeiket külső információforrás alapján rögzítjük. A rendszer

pozíciójú objektum modelljét elemei modelljeiből és az elemek közötti kölcsönhatást leíró modellből származtatjuk.

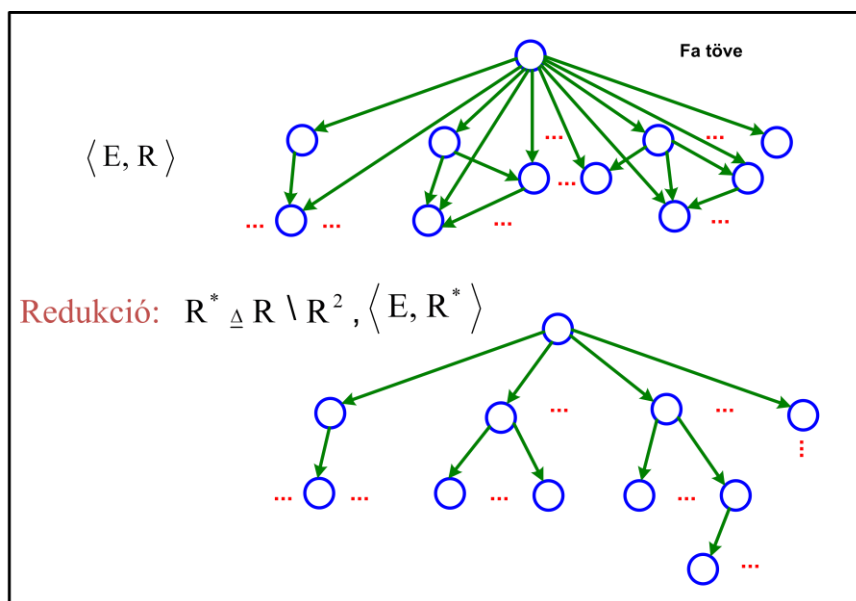
1. **Irreflexív**
 $e \in E, (e, e) \notin R$

2. **Tranzitív**
 $e_i, e_j, e_k \in E$
 Ha $(e_i, e_j) \in R$ és $(e_j, e_k) \in R$, akkor $(e_i, e_k) \in R$

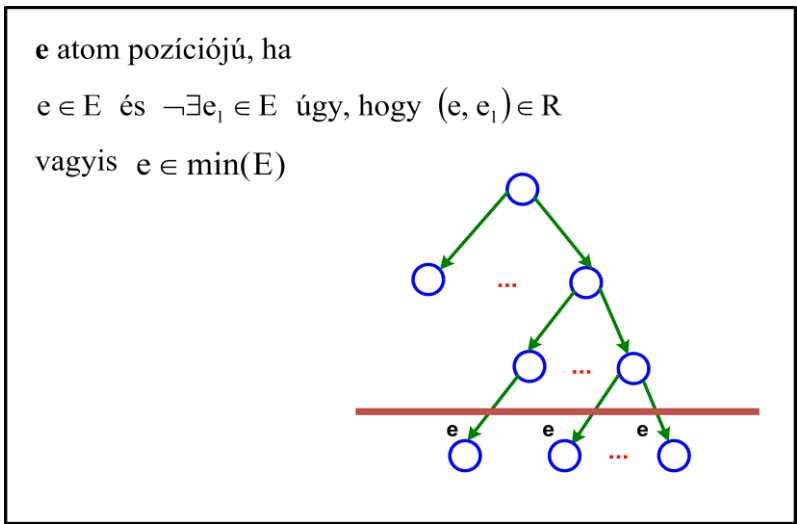
3. **Összehasonlíthatóság**
 Ha $[(e_1, e) \in R] \wedge [(e_2, e) \in R]$ igaz, akkor
 $e_1 \parallel e_2 \triangleq ([(e_1, e_2) \in R] \vee [(e_2, e_1) \in R]) \wedge$
 $\wedge \neg([(e_1, e_2) \in R] \wedge [(e_2, e_1) \in R])$ igaz.

4. A $H \triangleq \langle E, R \rangle$ rendezett halmaznak van **maximális elem**
 $e_0 \in E$ maximális elem $\Leftrightarrow \forall e \in E \setminus \{e_0\} \Rightarrow (e_0, e) \in R$

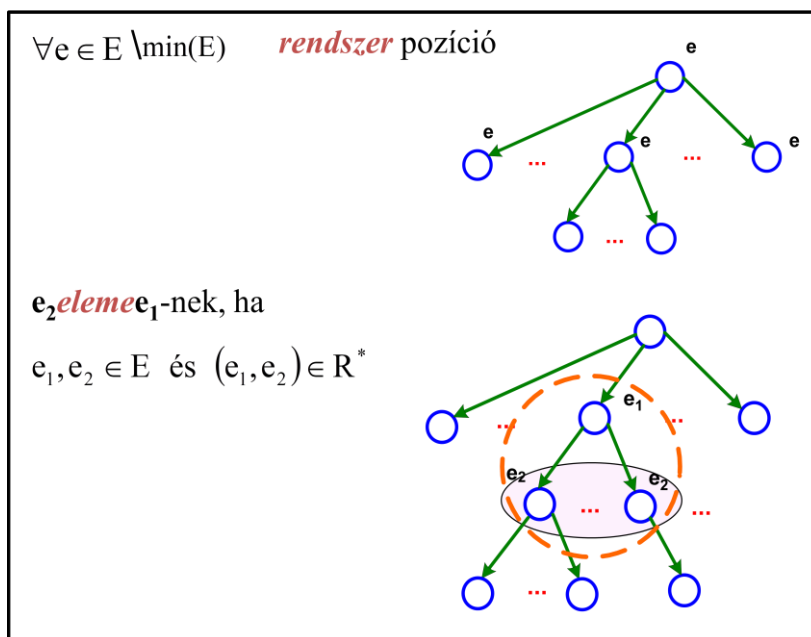
4.5. ábra. A farendezés definíciója.



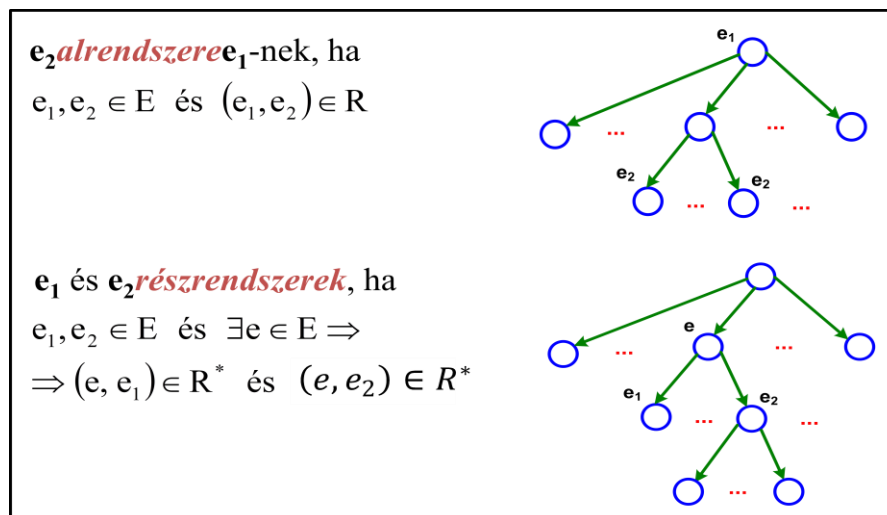
4.6. ábra. A farendezés és redukciójának gráfja.



4.7. ábra. Az atom pozíciójú objektumok.



4.8. ábra. A rendszer és elem pozíciójú objektumok.

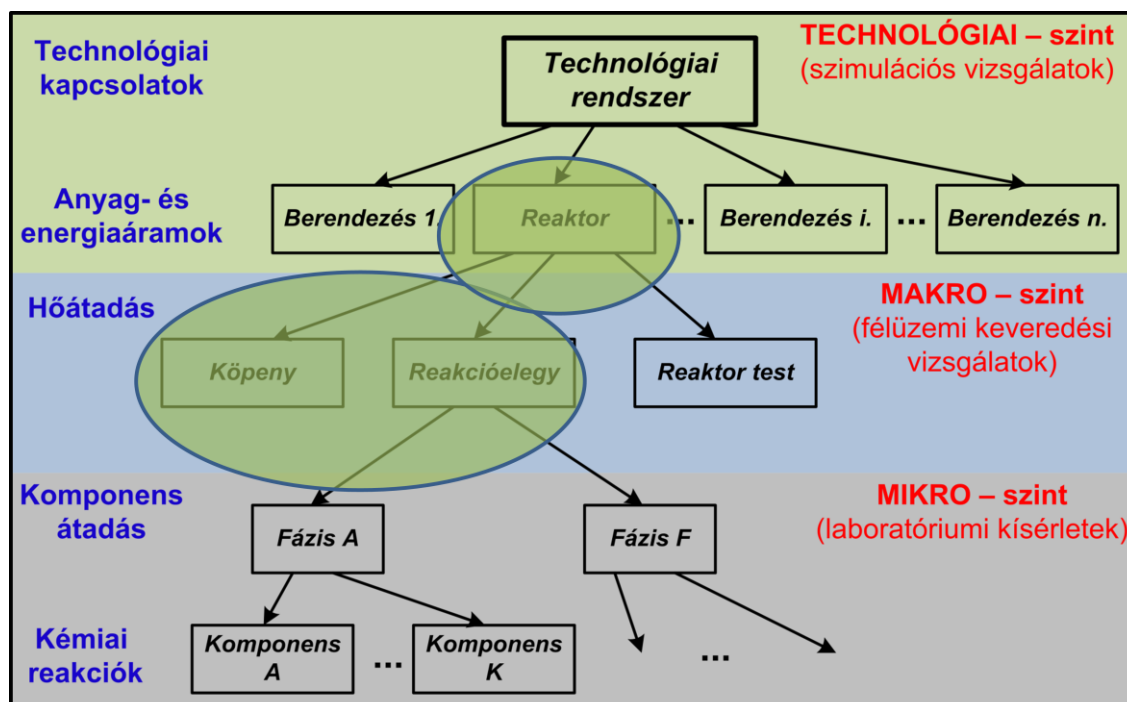


4.9. ábra. Az alrendszer és részrendszer pozíciójú objektumok.

4.4. A KTR struktúrája

Egy objektum struktúrája fontos minőségi tulajdonságainak egy halmazával definiálható. Itt is számos lehetőség kínálkozik, mindig a vizsgálat szempontjai határozzák meg a konkrét definíciót. A 4.1. ábra például tükrözi egy általános KTR struktúráját. A KTR esetében a struktúra fontos eleme lehet a rendezett kódhalmaz, hiszen ez tartalmazza azt, hogy a különböző hierarchia szinteken elhelyezkedő objektumok milyen elemekből épülnek fel.

Példaként egy gyógyszergyári gyártósor vázlatos struktúrája látható a 4.10. ábrán, amelyen a különböző hierarchia szinteken az elemek közötti kölcsönhatások jellegét is bejelöltük (egy kapcsolódó modellt a 14. fejezetben mutatunk majd be).



4.10. ábra Egy KTO struktúrája.

A technológiai objektum, különböző berendezések (köztük a reaktor) csővezetékekkel (anyag és energia áramokkal) összekapcsolt rendszere. A reaktor fő eleme a reakcióelegyet tartalmazó belső tér, amely hőforgalmat bonyolít a környezetével. A reakcióelegyet több fázis alkothatja, komponens átadással összekötve. A fázisok a különböző kémiai komponensek elegye, a közöttük lévő kölcsönhatás a kémiai reakció. A „reakcióelegy rész” gyártási termékeként különböző lehet. A technológia tervezésében külön válik a mikro (laboratóriumi kísérletek „lombikban”) és a makro rész („félüzemi” áramlási kísérletek), amelyeknek a céltudatos méretnövelésben fontos szerepe van. A struktúrával kapcsolatos részleteket a későbbi fejezetekben bemutatott esettanulmányokban bontjuk ki.

5. Diszkrét rendszerek modellezése

A rendszer pozíciójú objektum modellalkotása szempontjából a rendszereket két nagy csoportra oszthatjuk. Az egyik csoport a diszkrét rendszerek osztályát képezi, amelyek modellalkotása viszonylag egyszerű.

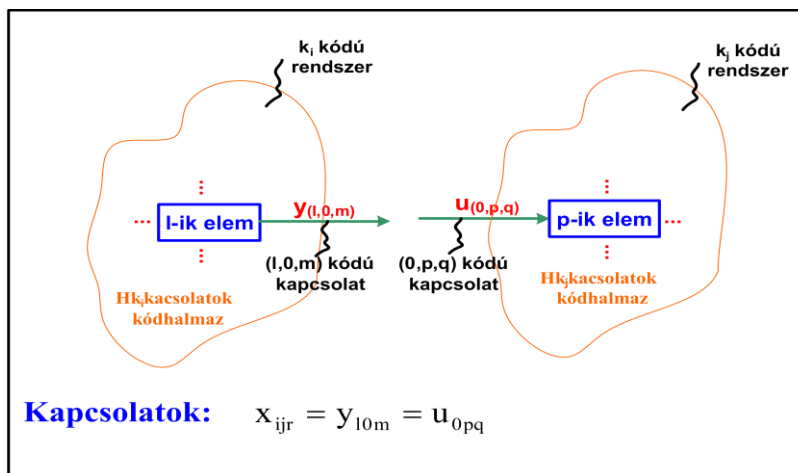
5.1. Diszkrét rendszerek modellalkotása

A diszkrét rendszerekben az elemek megtartják önállóságukat, így a rendszer modellt az elem modellekből „additív” módon képezzük (5.1. ábra), kiegészítve azokat az elemek közötti kapcsolatok leírásával.

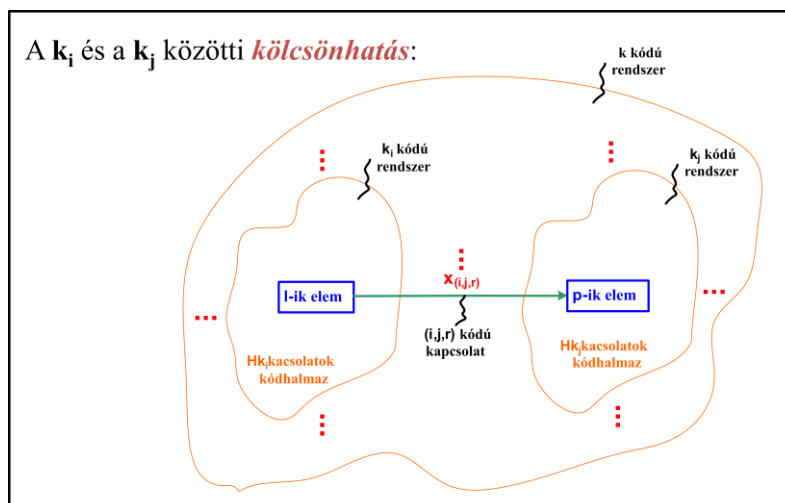
Diszkrét rendszer modellje:	$M_k = \langle v_k, f_k \rangle$
k rendszer	
k_i elemek, ahol $i = 1, 2, \dots, n$	
Elemek modelljei:	M_{k_1}
	M_{k_2}
	\vdots
	$M_{k_i} = \langle v_{k_i}, f_{k_i} \rangle$
	\vdots
	M_{k_n}

5.1 ábra. Diszkrét rendszer: individuális elemek+hálózat.

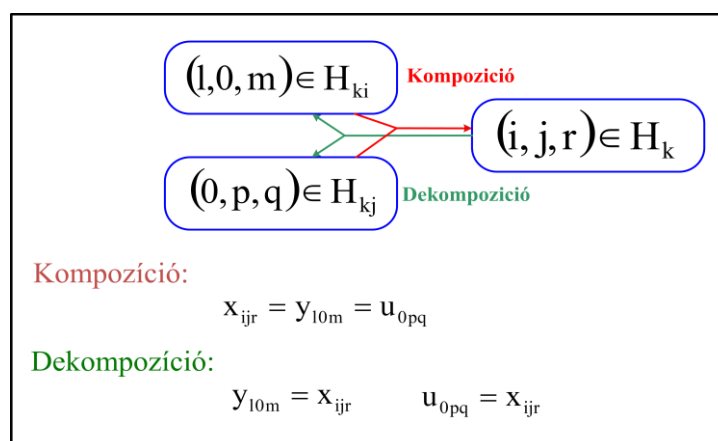
Két elem közötti kapcsolatot szemléltet, a megfelelő kódokkal együtt, az 5.2. és az 5.3. ábra, az összekapcsolás előtt, ill. összekapcsolás után. Az összekapcsolás során az eredetileg kimeneti (y) és bemeneti (u) változók egyetlen belső változóvá (x) válnak. Ugyanakkor ha „elvágnuk” a kapcsolatot, a belső változók helyett, kétszereződve, megjelennek az elemek bemeneti, ill. kimeneti változóit. Ezt szemlélteti az 5.4. ábra is.



5.2. ábra. Két elem összekapcsolás előtt.



5.3. ábra. A két elem összekapcsolás után.



5.4. ábra. A kompozíció és a dekompozíció szemléltetése.

A diszkrét rendszert nagyon gyakran az elemek modelljeit egymás után (mellé) írva adjuk meg, kiegészítve azt egy, a hálózatot definiáló mátrixszal. Gyakran használjuk az *illeszkedési* (a definíciót lásd az 5.5. ábrán) ill. *szomszédsági* (5.6. ábra) mátrixokat. Az *illeszkedési mátrix*, a kódhalmaz és a kapcsolati kódhalmaz Descartes szorzatán értelmezhető. A mátrix sorait az elemek, oszlopait a kapcsolatok definiálják. A megfelelő mezőbe 0 , $+1$, -1 kerül annak függvényében, hogy az adott kapcsolat elkerüli, belépő, vagy kilépő az adott elemből. A *szomszédsági mátrix*, az elemek kódhalmazának önmagával képzett Descartes szorzatán értelmezhető, az 1 a kapcsolatot, a 0 pedig a kapcsolat hiányát jelzi. Ha két elem között több kapcsolatot is szeretnénk egymástól függetlenül definiálni, akkor a szomszédsági mátrix helyett illeszkedési mátrixot használhatunk. Mindkét típusú mátrix nagyon gyakran sok zérus elemet tartalmaz, ilyenkor a mátrix helyett más tömörített formákat használhatunk.

Példaként az 5.7. ábrán egy illeszkedési mátrixszal definiált hálózatot mutatunk, a megfelelő szomszédsági mátrix pedig az 5.8. ábrán látható.

$k \in K$	rendszer
$k_i \in K$	elem, ahol $i=1, \dots, n$
$h_j \in H_k$	kapcsolat, ahol $j=1, \dots, m$
Illeszkedési mátrix: $S_k = [s_{i,j}]_{n,m}$	
$s_{i,j} = \begin{cases} -1, & \text{ha } h_j \text{ } k_i \text{ -ből indul} \\ +1, & \text{ha } h_j \text{ } k_i \text{ -be mutat} \\ 0, & \text{ha nem illeszkedik} \end{cases}$	

5.5. ábra. Az illeszkedési mátrix definíciója.

Szomszédossági mátrix: $\gamma \subseteq \{k_i\}_i \times \{k_i\}_i$

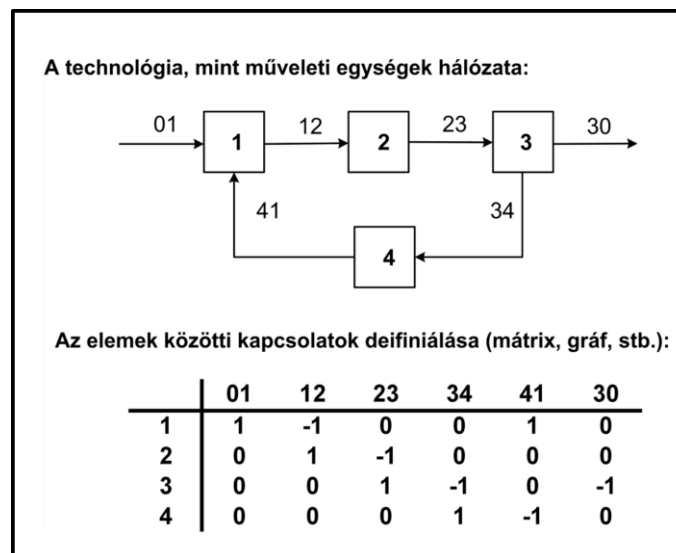
ahol $i = 0, 1, \dots, n$; k_0 a környezet; γ logikai mátrix

$$L_k = [l_{i,j}]_{n+1,n+1}$$

$$l_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{ha } k_i \text{ nincs kapcsolatban } k_j \text{ - vel} \\ 1, & \text{ha } k_i \text{ kapcsolódik } k_j \text{ - hez} \end{cases}$$

Egyértelmű, ha az elemek között egy kapcsolat van.

5.6. ábra. A szomszédossági mátrix definíciója.



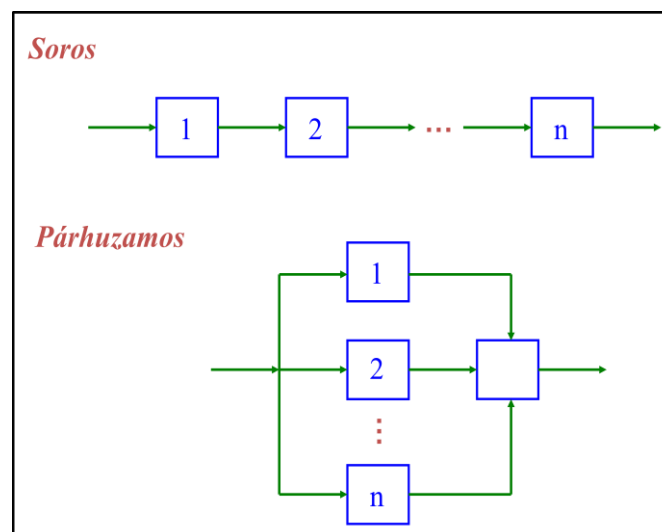
5.7. ábra. Diszkrét rendszer leírása illeszkedési mátrixszal.

$$L_k = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

5.8. ábra A diszkrét rendszer szomszédossági mátrixa.

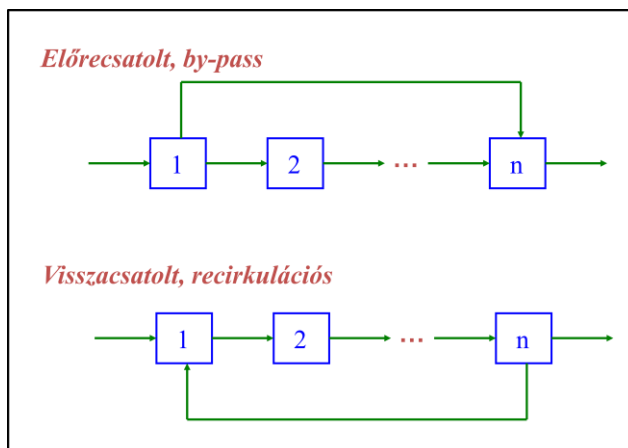
5.2. Alapkapcsolatok

A diszkrét rendszerekben az elemek a legkülönbözőbb módon kapcsolódhatnak egymáshoz, mégis célszerű azonban néhány alapkapcsolat kiemelése. A legegyszerűbb a *soros kapcsolat* (5.9. ábra felső rész), amelynél a sorban elől álló elem kimenete a következő elem bemenete. A vizsgálatok szempontjából ez azt jelenti, hogy a rendszeranalízis az elemek kapcsolat szerinti sorrendjét követve, visszavezethető az elemek egymás utáni vizsgálatára. Igaz ez a *párhuzamos kapcsolások* esetében is (5.9. ábra alsó rész). Ennél bizonyos elemek (csoportjai) egymáshoz képest párhuzamos viszonyban állnak.



5.9 ábra. A soros és a párhuzamos kapcsolat.

Az *előreccatolás* (5.10. ábra felső rész) sem bonyolítja el a rendszeranalízist, mert a kapcsolat determinált sorrendben, a rendszer analízise az elemek egymás utáni analízisére vezethető vissza. A fentiekkel ellentétben viszont a *visszacsatolás* (5.10. ábra alsó rész) megnehezíti a rendszeranalízist. A környezet hatásának ismeretében egyik elem analízise sem kezdhető el, mert mindegyiknek van legalább egy ismeretlen bemenete. Ilyen esetben a 2. fejezetben bemutatott dekompozíció koordináció elve segít az iterációs megoldásban. Az ilyen kapcsolást tartalmazó rendszereknél érvényesül az a gyakori kijelentés, hogy a rendszer több mint elemeinek (mechanikus) összessége.

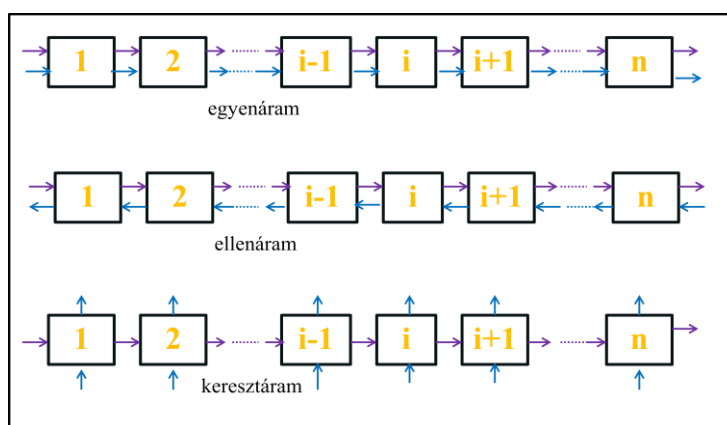


5.10. ábra. Előre- és visszacsatolás.

A vegyipari technológiákban az alap kapcsolatok mindegyike nagy számban előfordul, példaként,

- soros: a különböző műveleti egységek egymás utánisága,
- párhuzamos: kapacitásbővítés,
- előre- és by-pass: segédenergiával való ellátás,
- visszacsatolás: energia csatolások, az el nem reagált nyersanyag visszavezetése.

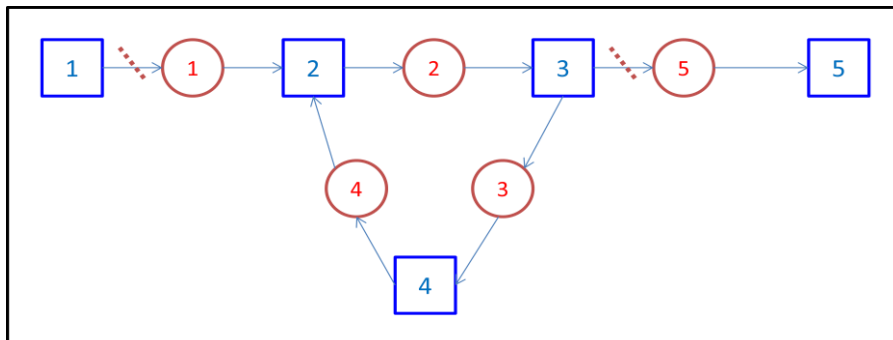
Két fázis áramlását tekintve, általában *egyen- és ellenáramú* berendezésekről beszélünk (5.11. ábra). Ritkábban előfordul a *keresztirányú áramlás* is.



5.11. ábra. Két fázis áramlási irányai.

5.3. Elemszám csökkentés

A nagy elemszámú diszkrét rendszerek modellezésében előfordulhat az is, hogy a nagyméretű modell használata nem „gazdaságos”. Ilyen esetben a rendszer működését alapvetően nem torzítva, megpróbáljuk a kisebb elemszámú diszkrét rendszerrel való közelítést. Ezt egy egyszerű konstruált példával illusztráljuk.



5.12. ábra. A vizsgált reakció séma.

Tekintsük az 5.12. ábrán látható un. kétoldalú gráffal reprezentált irreverzibilis monomolekuláris (elsőrendű reakciókkal leírt) reakció mechanizmust. A gráfpontok közül a négyzetek kémiai komponenseket, a körök pedig kémiai reakciókat jelentenek, míg a gráfélek „az adott komponens részt vesz (keletkezik, vagy fogy) az adott reakcióban” relációkat adják meg. A fizikai kémiában tanultak szerint a reakció kinetikai modell az alábbi:

$$\frac{dc}{dt} = J \cdot c \quad (5.1)$$

ahol: $c = [c_1, c_2, \dots, c_5]^T$ a koncentrációk oszlop vektora,

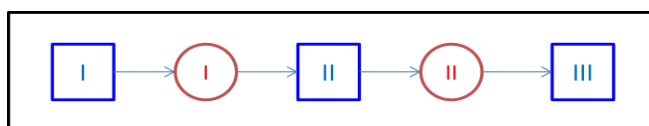
$$J = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 & k_4 & 0 \\ 0 & k_2 & -(k_3 + k_k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 & -k_4 & 0 \\ 0 & 0 & k_5 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ Jacobi mátrix}$$

$k_i, \quad i=1,2,\dots,5$ reakció kinetikai konstans,
 $t=0, \quad c = c_0$ kezdeti értékek.

Az (5.1)-es differenciálegyenlet-rendszer a kinetikai konstansok és a kezdeti értékek ismeretében megoldható. Egy összetett reakciórendszer gyakran szélsőségesen gyors és lassú reakciókat is magába foglal. Ez lehetőséget ad a mechanizmus „egyszerűsítésére”. Amennyiben a kinetikai konstansokra érvényesül a $\max\{k_1, k_5\} \ll \min\{k_2, k_3, k_4\}$ feltétel, akkor a 2, 3, 4 komponenseket gyors reakciók kötik össze és kvázi egy komponensként kezelhetők. Ennek megfelelően az adott „komponensre lassú reakciókat kihúzva”, az 5.12. ábrán látható gráf három részre bomlik, az $\{1\}, \{2, 3, 4\}, \{5\}$ komponens osztályokra. Rendeljük ezekhez a I, II, III „kvázi komponens neveket”. Az egyszerűsített struktúra az 5.13. ábrán látható. Mondhatjuk azt, hogy az eredeti mikroszint helyett, makroszinten három komponens és közöttük két kémiai reakciót „látunk”.

A kérdés az, hogy az (5.1) ún. mikroszintű modell ismeretében, hogyan határozható meg a makroszintű modell?

Általános megoldás erre a problémára nem lehetséges. A konkrét rendszer sajátosságait kihasználva, közelítő megoldások értelmezhetők, de az esetek túlnyomó többségében információtorzulással kell számolnunk (ennek részleteit a folytonos rendszerek hierarchia szintek közötti információátvitelénél tárgyaljuk).



5.13. ábra. A redukált modell.

Vizsgáljuk konkrétan az információátvitel lehetőségét. Az új rendszerváltozók (makroszint) értelemszerűen az alábbiak lesznek:

$$c_I = c_1 \tag{5.2}$$

$$c_{II} = c_2 + c_3 + c_4$$

$$c_{III} = c_5.$$

A makroszintű modell a makroszintű mechanizmust (5.13. ábra) figyelembe véve az alábbi lesz:

$$\frac{dc_I}{dt} = -k_I c_I, \quad (5.3)$$

$$\frac{dc_{II}}{dt} = k_I c_I - k_{II} c_{II},$$

$$\frac{dc_{III}}{dt} = k_{II} c_{II}.$$

Az (5.1) mikroszintű modelltől, csupán formális átalakításokat végezve, az (5.2) és az (5.3) makroszintű modell nem vezethető le (annak ellenére, hogy homogén lineáris rendszermodellről van szó). A mikroszintű modell további konkrét sajátosságait kihasználva, közelítéseket kell alkalmaznunk. A közelítés alapja a gyors reakciókkal összekötött komponensek kvázi stacionaritása. A {2, 3, 4} komponensek kvázi stacionaritása a (5.1) modell Jacobi mátrixának a J(2, 2), J(3, 3), J(4, 4) elemeitől függ, minél nagyobb a negatív visszacsatolás, annál gyorsabban beáll a kvázi stacionárius állapot. Ha a $k_2 < \min\{(k_3 + k_5), k_4\}$ feltétel is fennáll, akkor az alábbi közelítéseket használhatjuk:

$$k_2 c_2 - (k_3 + k_5) c_3 = 0 \quad (5.4)$$

$$k_3 c_3 - k_4 c_4 = 0$$

$$c_2 + c_3 + c_4 = c_{II}$$

Ezeket a közelítéseket figyelembe véve, az (5.3) makroszkópikus modell kinetikai konstansai az (5.1) mikroszkópikus modell kinetikai konstansainak alábbi függvényeként értelmezhetők:

$$k_I = k_1, \quad (5.5)$$

$$k_{II} = k_5 \frac{1}{1 + \frac{k_3 + k_5}{k_2} + \frac{k_3}{k_4}}$$

Ezzel az (5.3) és az (5.5) makroszkópikus modell komplett, zárt modellé vált, a mikroszintű modelltől függetlenül használható.

Gyakorlásképpen végezzünk el egy gondolat kísérletet. Tételezzük fel, hogy a valóságot az (5.1) modellel szimuláljuk és a számolt c_I , c_{II} , c_{III} koncentrációkat, mint mérési adatokat tekintjük. Ezeket a „mérési adatokat” az (5.3) és az (5.5) makroszintű leírással jó (de nem teljes) pontossággal modellezhetjük. Azt is megtehetjük, hogy az (5.3) modell k_I , k_{II} paramétereit a mérési adatokra identificaljuk. Érdekes módon a makroszintű modell pontossága ezzel még tovább javítható (ugyanazt tapasztaljuk majd a 16. fejezet esettanulmányában is).

6. Folytonos rendszerek modellezése

A rendszer pozíciójú objektumok másik nagy csoportja a folytonos rendszerek osztálya. A folytonos rendszerek modellalkotása jelenti a modellezés egyik legösszetettebb lépését. A dekompozíció során eredendően mindig diszkrét rendszert kapunk. Nagyszámú elem esetében viszont a diszkrét rendszerre vonatkozó, előző részben bemutatott leírás nem hatékony, gyakran lehetetlen (pl. egy folyadék csepp 10^{23} db nagyságrendű molekulából álló rendszernek tekinthető). Ilyen esetekben az eredendően diszkrét rendszert - a természettudományokban máshol is alkalmazott módszerhez hasonlóan - folytonos rendszerként írjuk le. A folytonos rendszerként való leírásnál az alábbi feltételeknek kell teljesülnie:

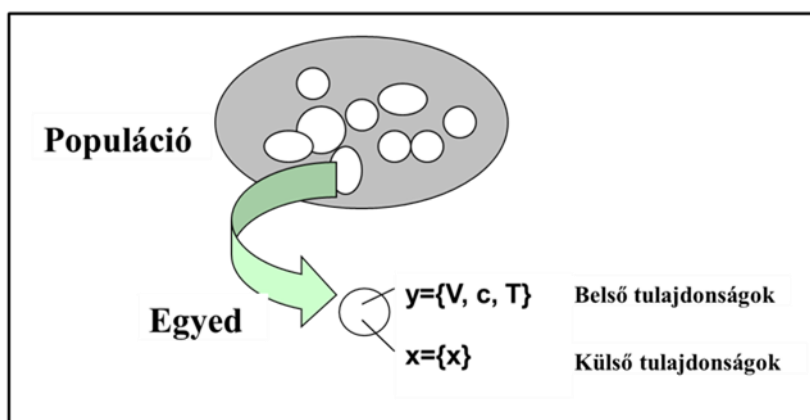
- Kellően nagyszámú elem és kapcsolat.
- Az elemek modelljei izomorfak és a kapcsolatok is homogének (ugyanolyan törvényszerűséggel írhatók le) a kapcsolatok terében.

Hogy ezek pontosan, hogyan értelmezhetők, a folytonos rendszer leírása után érthetőbb lesz.

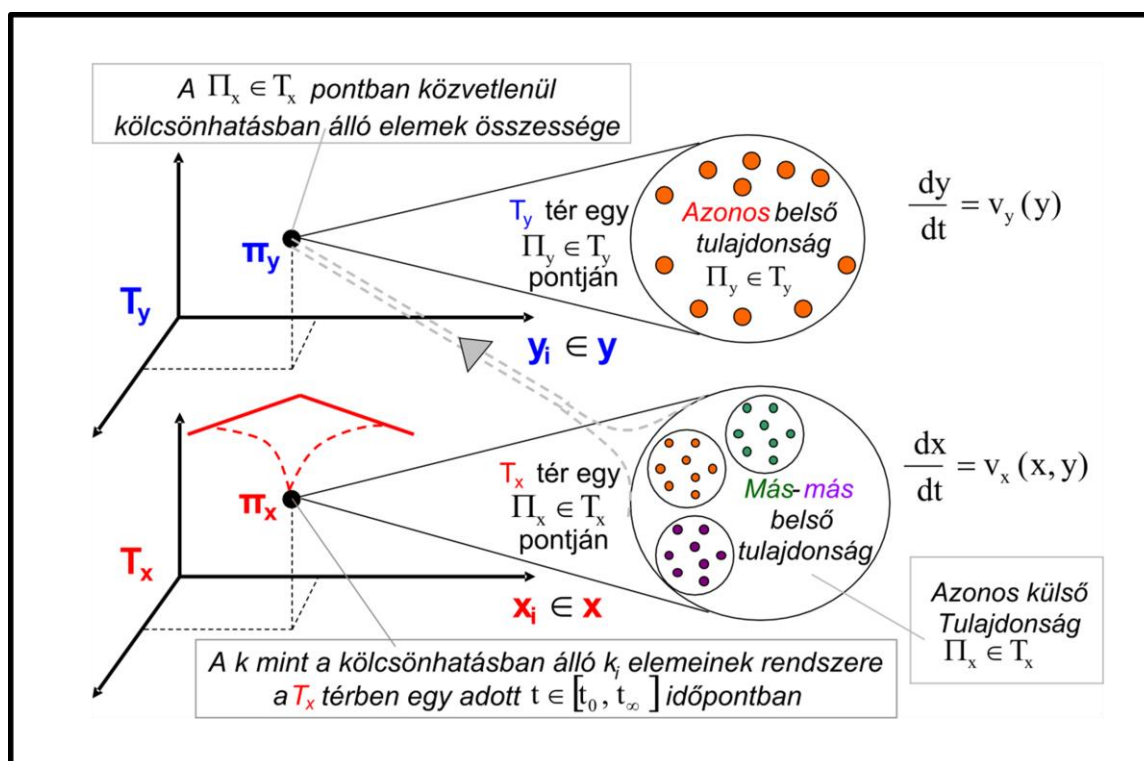
6.1. A fázis tér

Először a fázis tér fogalmával ismerkedünk meg. A sokelemű rendszert a 6.1. ábrának megfelelően egy populációnak tekintjük. A populáció egy tetszőleges elemét az ún. *belső tulajdonságaival* (y) jellemezzük. Az y halmaz elemeit úgy kell kiválasztani, hogy a modellezési szempontokat figyelembe véve egyértelműen írják le a rendszer bármely elemét (termodinamikai ismereteink szerint legalább egy tulajdonság extenzív jellegű). A belső tulajdonságok, mint koordináták definiálják az elemek állapotának folytonos T_y -terét (6.2. ábra). A tér egy $\pi_y \in T_y$ pontján egyéb méretüktől függetlenül, azonos állapotú (tulajdonságaik alapján megkülönböztethetetlen) elemek helyezkednek el. Például, ha a rendszer elem egy folyadék csepp (maga a rendszer egy diszpergált fázis), az jellemezhető a térfogatával (V , extenzív), a benne lévő komponens koncentrációjával (c), esetleg hőmérsékletével (T), stb. Ekkor a belső tulajdonságok

halmaza $y = \{V, c, T\}$. A valós objektum továbbá a modellezési célok és lehetőségek szabják meg, hogy mely tulajdonságok kerülnek az y halmazba.



6.1. ábra. A rendszer, mint egy populáció



6.2. ábra. A T_x és a T_y terek kapcsolata.

Az elemek közötti kölcsönhatásokat az ún. *külső tulajdonságaival* (x) jellemezhetjük. A külső tulajdonságok, mint koordináták definiálják a kölcsönhatások folytonos T_x -terét.

Két elem akkor és csak akkor van kölcsönhatásban, ha az adott időben, a T_x -tér azonos $\pi_x \in T_x$ pontján helyezkedik el. A valós fizikai kölcsönhatás mindig a háromdimenziós geometriai térben jön létre a T_x vizont ettől eltérő is lehet, ezért nem biztos, hogy a modellbeli kölcsönhatás tényleges, valós kölcsönhatást is jelent. Például, ha a folyadék cseppek egy reaktoron keresztül áramlanak, a külső tulajdonságok a háromdimenziós geometria teret definiálják. Ugyanakkor, ha a geometriai teret csupán a hosszkoordinátával definiáljuk egy csőreaktorban, akkor a hosszkoordináta adott pontján lévő cseppek, a modellben akkor is kölcsönhatásban állnak egymással, ha fizikailag nem is érintkeznek (a csőreaktor egy adott keresztmetszetében helyezkednek el, de közvetlenül nem érintkeznek).

A rendszer pozíciójú objektum modelljének megalkotásakor az elemek modelljét a modellezés egy előző fázisában megalkottuk (elem modell), ezért már ismert:

$$\frac{dy}{dt} = v_y(y) \quad (6.1)$$

Bármelyik rendszerelemet, a rendszerbeli kapcsolatoktól függetlenül, a belső tulajdonságai egyértelműen jellemzik, természetesen az y állapotváltozók értékeikben különböznek. Mindegyik elem modellje hasonló (izomorf). A v_y függvény az állapotváltozók időbeli megváltozásait definiálják, általános értelemben sebesség jellegű mennyiségek és közvetlenül csak a belső tulajdonságoktól függenek. Amint azt korábban láttuk két, vagy több rendszerelem között akkor jön létre kölcsönhatás, ha adott időben a T_x tér azonos pontjában vannak. A kölcsönhatások modellje (kapcsolati modell) azt írja le, hogy a kölcsönhatás eredményeként, hogyan változnak meg az elem külső tulajdonságai (azaz milyen mozgást végez a T_x térben):

$$\frac{dx}{dt} = v_x(x, y) \quad (6.2)$$

A kölcsönhatás nemcsak attól függ, hogy a T_x tér mely pontján alakul ki, hanem az elemek állapotváltozói is befolyásolhatják. A kapcsolatok leírása, a diszkrét rendszerek leírásától (egy mátrix) teljesen eltérően, az elem modellekhez hasonlóan, egy differenciálegyenlet-rendszer formájában jelenik meg.

Egyesítsük a belső és külső tulajdonságokat, $z = x \cup y$ és hozzuk létre az ún. folytonos T_z , $n=s(z)$ (s a z halmaz elemeinek számát jelenti) dimenziós *fázis teret*. A fázis tér egy $\pi_z \in T_z$ pontjában az azonos belső és külső tulajdonsággal bíró elemek helyezkednek el (fizikai méretüktől függetlenül „elférnek” a tér egy zérus térfogatú pontján, erre a későbbiekben még visszatérünk).

6.2. Az elemszám sűrűség

Az elemek belső és külső tulajdonságain túlmenően a rendszer leírására a fázistérben értelmezzük az *elemszám sűrűséget*. Ez a fázistér egy $\pi_z \in T_z$ pontjára vonatkozóan az alábbiak szerint értelmezhető:

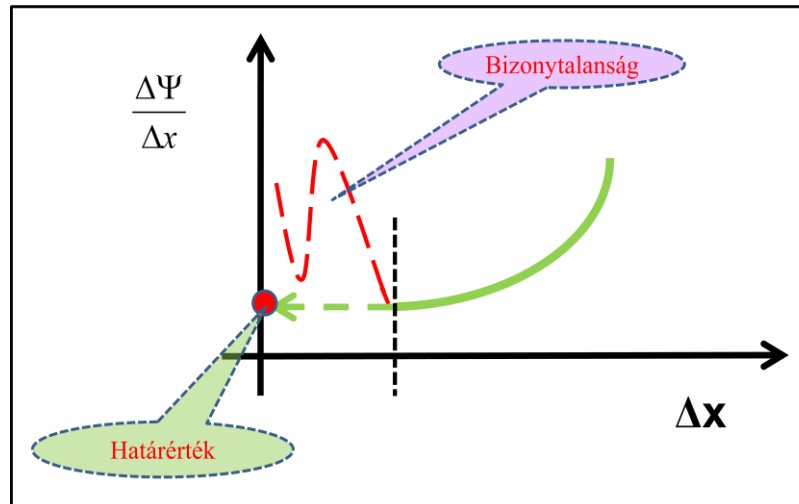
$$\Psi_z(t, z) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta z} \quad (6.3)$$

ahol Δz a T_z -tér egy körbehatárolt véges részének $s(z)$ dimenziós térfogata,

ΔN a körbehatárolt térrészben lévő elemek száma.

Az elemszám sűrűséget a teljes fázis térre integrálva a rendszer elemeinek a számát kapjuk.

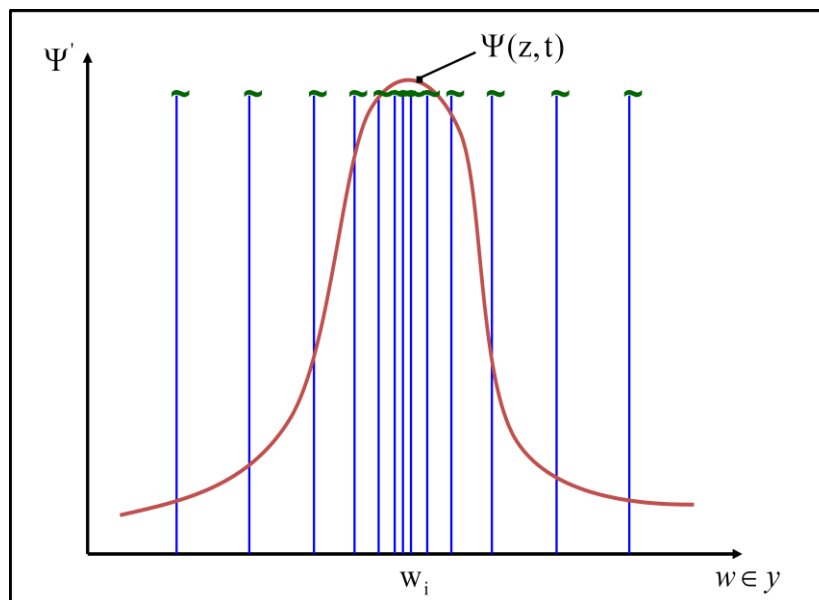
Ez az a pont, ahol visszatérhetünk az eredendően diszkrét rendszer folytonosként való leírásának ellentmondásához. Tekintsük először az elemszám sűrűség „viselkedését” a külső koordináták mentén, gondolhatunk itt a háromdimenziós geometriai térre is. A (6.3) definícióegyenletet figyelembe véve, induljunk ki egy viszonylag nagyobb térrészből (6.3. ábra), majd egyre csökkentjük a térfogatot. A kisebb térfogatban egyre kevesebb rendszerelem helyezkedik el, és a hányados kis mértékben állandóan változhat (mert a teret a rendszerelemek nem egyenletesen töltik ki). A csökkentés során eljutunk egy olyan térfogathoz, amelybe már csak kevés rendszerelem fér el. Itt a hányados lépésről lépésre ingadozik, sőt egyre nehezebb eldönteni, hogy egy adott elem a térrészben van, vagy nincs. Ezért a tér adott pontjához a 6.3. ábrának megfelelően egy határértéket rendelünk, ugyanakkor mindig emlékeznünk kell arra, hogy a folytonos térben megfogalmazott modell ilyen kis léptékben már nem lehet a valós objektum hű képe. Ez jelenti azt a határt is, amely a folytonost a diszkréttől megkülönbözteti.



6.3. ábra. Az elemszám sűrűség a külső koordináták mentén.

Nem egyszerűbb a helyzet a belső tulajdonságok mentén sem. Tekintsük a $\Psi_w(t, w)$ sűrűséget, ahol $w \in y$ (pl. a koncentráció) és legyen m db különböző w_i értékű elem és a w_i értékűből legyen n_i db elem (ennyi elem koncentráció értéke w_i). Ebben az esetben az elemszám sűrűség a Dirac függvénnyel írható le (ld. még 6.4. ábra):

$$\Psi'_w(w, t) = \sum_{i=1}^m n_i \cdot \delta(w - w_i)$$



6.4 ábra. Az elemszám sűrűség a belső koordináták mentén.

A természettudományokban tanultak szerint ezt a „tüskés” függvényt egy folytonos és folytonosan deriválható „sima” függvénnyel közelíthetjük, amire az alábbi feltétel teljesül:

$$\int_{w_i - \frac{w_i - w_{i-1}}{2}}^{w_i + \frac{w_{i+1} - w_i}{2}} \Psi'_w(w, t) dw = n_i$$

Ez a közelítés is csak akkor tehető meg, ha az elemek száma kellően nagy.

A Ψ_z elemszám sűrűség determinisztikus jellegű a rendszerre (populációra) nézve, de valószínűségi jellegű a rendszer egy elemére vonatkozóan. Legyen $u \subseteq z$ és Ψ_u a T_u térbeli elemszám sűrűség. A valószínűség alapját képező kísérlet során a sokaságból kiválasztunk egy elemet, és kérdés az, mi a valószínűsége annak, hogy az elem $u \in [u_0, u_\infty]$ tulajdonságú.

A gyakoriságokat figyelembe véve a valószínűségi eloszlás sűrűség és eloszlás függvényei az elemszám sűrűségből az alábbiak szerint számolhatók:

$$\varphi(u) = \frac{\Psi(u)}{\int_{u_0}^{u_\infty} \Psi(u) du}$$

$$\varphi(u) \geq 0, \quad \text{ha } u \in [u_0, u_\infty]$$

$$\int_{u_0}^{u_\infty} \varphi(u) du = 1$$

$$F(u) = \frac{\int_{u_0}^u \Psi(u) du}{\int_{u_0}^{u_\infty} \Psi(u) du}$$

$$F(u_\infty) = 1$$

A fenti összefüggésekben az integrálok az u halmaz $s(u)$ számossága szerinti többszörös integrálást jelentenek.

6.3. Mérleg a fázistérben

Az elemszám extenzív mennyiség, ezért az elemszámra mérleget lehet felírni ugyanúgy, ahogyan mérleget készítettünk a fázis tömegre, a komponens tömegre, az energiára és az impulzusra. A fázistérben az elemszám megváltozására ható konkrét jelenségek két nagy csoportra oszthatók:

1. A $z_i \in z$ koordináta menti áramlás, hasonlóan a geometriai koordináta menti konvektív áramláshoz. Az áramlás mértékét a (6.1) és (6.2) $v_z(z)$ függvények adják meg. Például folyadék cseppek rendszerében, a cseppben lejátszódó kémiai reakció a koncentrációváltozás által egy c koordináta menti „konvektív” áramot indukál. Erre az jellemző, hogy az elemek koordinátái kis idő alatt kis mértékben változnak.
2. *Forrás*. Minden egyéb olyan jelenség (ok), amely nem tartozik az előző osztályba, de hat az elemszámra. A forrás (ill. a negatív forrás a nyelő) mértékét a $q_z^S(z)$ elemszám forrassűrűség függvénnyel írjuk le. Az S felső index a számosságra, a z alsó index a fázistérre utal. Például a folyadék cseppek összetapadása, vagy „szétesése” során a tér egy adott pontjáról eltűnnek, egy teljesen más pontján pedig megjelennek új fáziselemekként. Ez azt jelenti, hogy egy elem koordinátái kis idő (akár zérus) alatt nagymértékben megváltoznak.
3. *Lokális megváltozás*: Az elemek számát (egy körbe határolt részben) az 1-2. pontban felsorolt jelenségek, mint okok igyekeznek megváltoztatni, és ha nem kompenzálják egymás hatását, okozatként az elemek száma (ill. annak fázistérbeli sűrűsége) időben megváltozik.

A fázistérben a rendszerelemek eloszlása általában inhomogén, ezért jelöljük ki a z vektorral a tér egy pontját és az arra illeszkedő $\Delta z = \Delta z_1 \cdot \Delta z_2 \cdot \dots \cdot \Delta z_i \cdot \dots \cdot \Delta z_n$ térfogatú, n (a fázistér koordinátáinak száma) dimenziós téglateetet. Erre írjuk fel a mérleget a kontinuitási egyenlet levezetésénél alkalmazott technikával (integrál középérték tétel felhasználása). Az alábbiakat kell figyelembe venni (lásd 6.5. ábra):

1. A téglatestben bent lévő rendszer elemek száma:

$$\Psi_z \cdot \Delta z \quad \text{db,}$$

2. A $z_i = z_i$ felületen beáramló elemek száma:

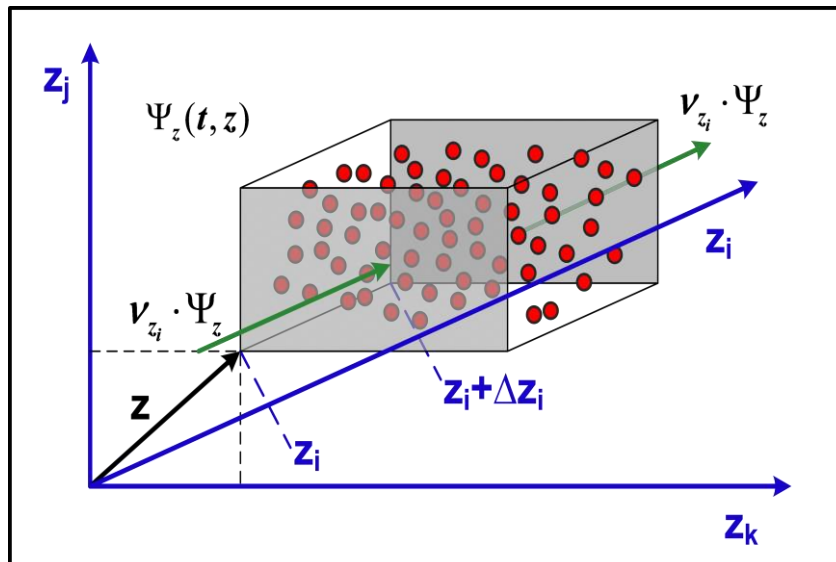
$$(v_z \cdot \Psi_z)(\Delta z / \Delta z_i) \text{ db/idő,} \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

3. A $z_i = z_i + \Delta z_i$ felületen kiáramló elemek száma:

$$(v_z \cdot \Psi_z) / (\Delta z / \Delta z_i) \quad \text{db/idő,} \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

4. A téglatestben keletkező/eltűnő elemek száma:

$$q_z^S \cdot \Delta z \quad \text{db/idő.}$$



6.5. ábra. Mérleg a fázistérben.

Az 1. és 4. egy n -szeres térfogati integrál, a 2. és 3. pedig $(n-1)$ -szeres felületi integrál, amelyeket az integrál középérték tételt alkalmazva az 1-4. szorzatokkal számolunk ki. Az egyes függvényeket a térfogat, ill. felületek megfelelő belső pontján kell venni. Amennyiben a 2-4. okok nem kompenzálják egymás hatását, akkor a bent lévő elemek száma időben megváltozik:

$$\frac{\partial(\Psi_z \Delta z)}{\partial t} = \dots + [v_z \Psi_z](\dots, z_i, \dots) \frac{\Delta z}{\Delta z_i} - [v_z \Psi_z](\dots, z_i + \Delta z_i, \dots) \cdot \frac{\Delta z}{\Delta z_i} \pm \dots + q_z^S \Delta z$$

Ezt az egyenletet Δz -vel elosztva és a $\Delta z \rightarrow 0$ határátmenetet elvégezve az elemszámra vonatkozó differenciális mérlegegyenlet az alábbi alakban írható fel:

$$\frac{\partial \Psi_z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (v_z \cdot \Psi_z) = q_z^S \quad (6.4)$$

ahol:

$$\frac{\partial}{\partial z} (v_z \cdot \Psi_z) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial z_i} (v_{z_i} \Psi_z)$$

Ha a matematikából ismert div operátort kiterjesztjük a T_z térre, akkor a (6.4) kompakt formája az alábbi lesz:

$$\frac{\partial \Psi_z}{\partial t} + div(v_z \cdot \Psi_z) = q_z^S$$

Sőt ha a fázisteret kibővítjük az időkoordinátával (*fázistér idő*, ekkor a z halmaz az időt is magába foglalja) és a div operátort ebben a kibővített térben értelmezzük, akkor a differenciális mérlegegyenlet még kompaktabb formája:

$$div(v_z \cdot \Psi_z) = q_z^S$$

A „fázistér időben” csak konvektív (koordináták menti „látható”) mozgások és forrás típusú jelenségek értelmezhetők. Itt az idő koordináta menti sebesség értelemszerűen $v_t = I$.

A (6.4) differenciális mérlegegyenlet az n db koordináta irányában a „konvektív (makroszkópikus) áramlásokat” és a forrást, mint okokat tartalmazza, amelyek ha nem kompenzálják egymás hatását, akkor okozatként az elemek száma időben megváltozik (lokális megváltozás). A definiált rendszerben a $\Psi_z(t, z)$ teljes fázistérbeli ismerete jelenti a „teljes tudást”, amiből a rendszer egyéb tulajdonságai származtathatók. Ha például $V \cdot c$ (ahol $V, c \in z$) egy folyadékcséppben jelenti az adott komponens tömegét, akkor a $V \cdot c \cdot \Psi_z(t, z)$ szorzat a komponens tömeg fázistérbeli eloszlását adja. Az integrált mennyiségek is értelmezhetők, például az $\mathfrak{S}_y(V \cdot c \cdot \Psi_z)$ mennyiség a komponens tömeg T_x -térbeli eloszlását adja. (Az $\mathfrak{S}_y(f)$ integrál operátor az f függvény integrálját jelenti az y elemei szerint, azok teljes értelmezési tartománya felett.) Ha a T_x a

geometriai tér és a folyadékcseppek a teret teljesen kitöltik, akkor az $\mathfrak{S}_y(V \cdot c \cdot \Psi_z) / \mathfrak{S}_y(V \cdot \Psi_z)$ mennyiség egyben a folyadék fázis koncentrációját adja.

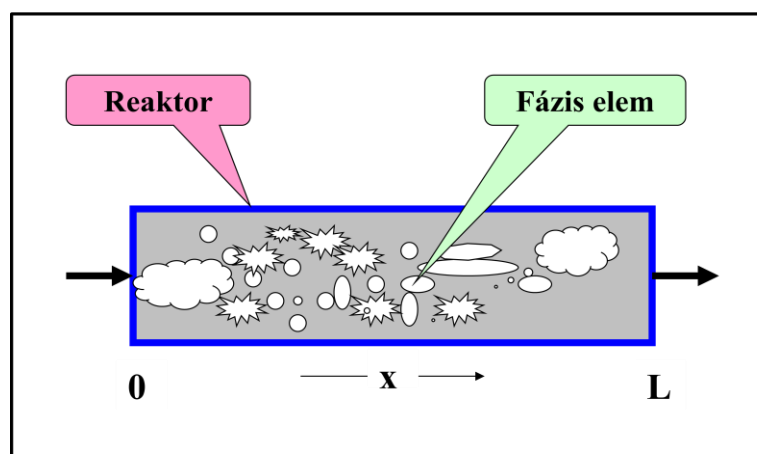
A (6.4) parciális differenciálegyenlet a megfelelő kezdeti és peremfeltételek mellett elvileg megoldható, azonban két súlyos nehézség is adódik:

- Az egyenletben szereplő függvények és paraméterek korrekt megadása (tartalmi nehézség).
- A több változó szerinti parciális differenciálegyenlet megoldása (formai nehézség).

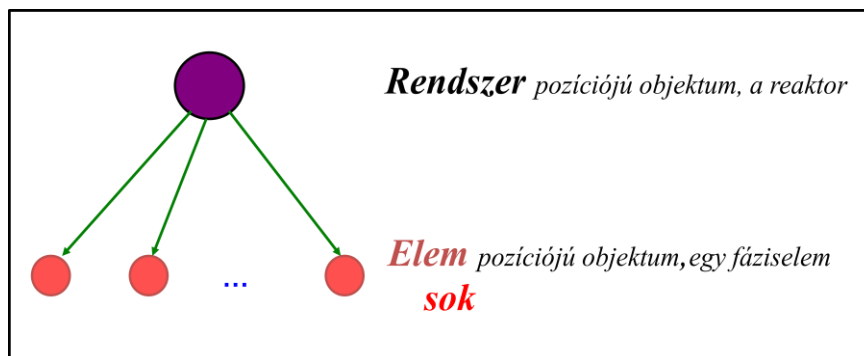
Az ezekkel kapcsolatos problémákat a későbbiekben fejtjük ki, előtte azonban az eddigieket egy konkrét példával is illusztráljuk.

6.4. Esettanulmány: reaktor modell

A fogalmak könnyebb megértése végett gondoljuk át egy csőreaktor leegyszerűsített modelljének megalkotását. Az objektum sémáját a 6.6. ábra szemlélteti. Az átalakítandó komponens folyadékfázisban áramlik a reaktoron és közben kémiai reakció játszódik le. A folyadék nem egy homogén tömbként áramlik, hanem egyedként, nem beazonosítható fáziselemek (együtt mozgó molekula halmazok) formájában. A rendszer és elemei viszonyát a 6.7. ábra szemlélteti.



6.6. ábra. A reaktor sémája.



6.7. ábra. A rendszer és elemei.

A reaktort, mint fáziselemekből álló fázist, az 6.1. ábrának megfelelően, egy populációnak tekintjük, és folytonos fázisként írjuk le. Amint azt korábban kifejtettük, a modell a kellően sok fáziselem méretét meghaladó léptékben lesz adekvát. Az egyszerűség végett a fázis- és komponens tömeg mérlegekre koncentrálna, legyen $y = \{c, V\}$, $x = \{x\}$, azaz a folyadék fáziselem (pl. csepp) állapotát a térfogatával (extenzív) és komponens koncentrációjával definiáljuk (belső tulajdonságok), a változásokat a hossz koordináta (egy dimenzió, x) mentén vizsgáljuk. Mindegyik elem modellje, a modellezés egy előző fázisából már ismert:

$$\frac{dV}{dt} = v_V(V, c, \dots)$$

$$\frac{dc}{dt} = v_c(V, c, \dots)$$

A v_V függvény a különböző jelenségek hatásaként (pl. párolgás, kondenzáció, ha lehetséges), a fázis elem térfogatának változását írja le. Ugyanígy a v_c , a koncentráció változását (reaktorban ez elsődlegesen a kémiai reakció, ekkor a v_c a reakció sebességet jelenti).

Ez kiegészítendő a fáziselemek közötti kölcsönhatás leírásával, ami a kapcsolatok modellje:

$$\frac{dx}{dt} = v_x(x, V, c, \dots)$$

A v_x a hossz koordináta menti áramlási sebességnek felel meg. Két fáziselem akkor és csak akkor kerül kapcsolatba egymással, ha ugyanabban az időben a hossz koordináta ugyanazon pontjában vannak. Ebből jól látható, hogy az egy dimenziós modellben két fáziselem akkor is „kölsönhatásban van”, ha a valós háromdimenziós térben nem is érintkeznek. (Ha ez problémát jelent akkor modell struktúrát kell váltani.)

Az idő és a fázistér határai legyenek az alábbiak:

$$t \geq 0$$

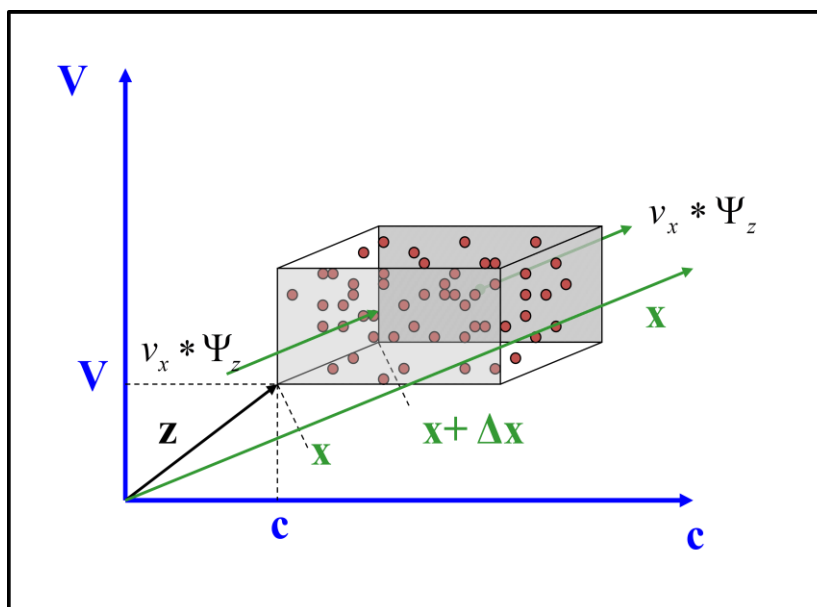
$$x \in (0, L)$$

$$V \in (V_0, V_\infty)$$

$$c \in (c_0, c_\infty)$$

A korábbiaknak megfelelően definiáljuk a fázistérben az elemszám sűrűséget:

$$\Psi(t, x, V, c,) = \lim_{\Delta x, \Delta V, \Delta c \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta x \cdot \Delta V \cdot \Delta c}$$



6.8 ábra. Mérlegkészítés.

Az elemszámra vonatkozó differenciális mérleget, a 6.8. ábra szerint, a korábban bemutatott lépésekkel, készíthetjük el:

$$\frac{\partial \Psi_z}{\partial t} + \frac{\partial(v_x \Psi_z)}{\partial x} + \frac{\partial(v_V \Psi_z)}{\partial V} + \frac{\partial(v_c \Psi_z)}{\partial c} = q_z^S \quad (6.5)$$

Ez a parciális differenciálegyenlet írja le a folytonos rendszert. A bal oldali 2., 3. és 4. tag a fázistér koordinátái mentén a (konvektív) áramlást jelenti, a jobb oldali tag pedig az elemszám forrassűrűség. Ezek, mint okok a lokális megváltozást (bal oldali első tag) okozzák.

Ahhoz, hogy ezzel a modellel számolni tudjunk, ismernünk kell az „áramlási” sebességek és a forrassűrűség függvényeket. Fontos kiemelni, hogy a fázistérbeli „áramlás” nem csak a megszokott geometriai térbeli áramlásokat jelenti. A c koordináta menti áramlást például a kémiai reakció okozza, hiszen annak eredményeként változik a fáziselemben a koncentráció és formálisan ez hasonló a hossz koordináta menti mozgással. Ugyancsak fontos kiemelnünk, hogy a fázistérbeli jelenségek két csoportba bonthatók. Az elsőbe éppen a koordináták menti áramlások sorolhatók. Ez azon jelenségeket foglalja magába, amelyek egy fáziselem koordinátáját kis idő alatt kis mértékben, azaz folytonosan változtatják meg. Azok a jelenségek, amelyek nem esnek ebbe a kategóriába, forrásnak tekintendők. Ezek a jelenségek, a fázis elem koordinátáját kis (akár zérus) idő alatt is drasztikusan megváltoztatják, akár úgy is, hogy eltűnnek a rendszerből, vagy a „semmiből” megjelennek. Ilyen jelenség pl. két, vagy több fáziselem összetapadása egyetlen fáziselemmé, vagy egy fáziselem szétesése két, vagy több fáziselemmé. A fázis térbeli leírásban ez a kétféle jelenség fordulhat elő. Ennek az a következménye, hogy a (6.5) parciális differenciálegyenlet csak elsőrendű differenciálhányadosokat tartalmaz. A v_x megadása áramlástani, a v_c megadása pedig reakció kinetikai kérdés, és különösebb megszorítást nem jelent a $v_V = 0$ rögzítése sem. A folyadékfázis áramlása során az egyedi fáziselemek nem detektálhatók, így a forrás sűrűségfüggvény definiálása szinte lehetetlen, így a (6.5) modell direkt használata sem lehetséges. Felhasználhatjuk azonban az elemszám sűrűséget és a (6.5) modellt arra, hogy a folytonos rendszert jellemző „új” tulajdonságokat és e tulajdonságok közötti „új”

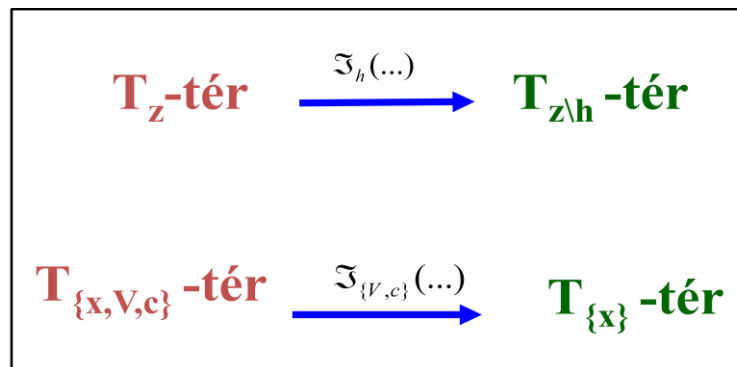
összefüggéseket generáljunk, és így a reaktor számítások alapjául szolgáló modellhez jussunk.

A tömör leírhatóság végett először formálisan is definiáljuk az előző részben már felhasznált integrál operátort:

$$\mathfrak{I}_h(\dots) = \dots \int_{h_{i,0}}^{h_{i,\infty}} \dots (\dots) \dots dh_i \dots \quad / h_i \in h$$

$$h_i \in [h_{i,0}, h_{i,\infty}] \subseteq R$$

Ez azt fejezi ki, hogy a zárójelben lévő kifejezést a h halmazban lévő változók szerint integráljuk a változók teljes értelmezési tartománya felett. Ha egy változó szerint a teljes értelmezési tartományára vonatkozó integrálást végzünk, akkor az a változó „eltűnik” a modelltől. Ha ezek a változók a fázistér koordinátái, akkor ez azt jelenti, hogy a teljes fázistér helyett annak altereit hozzuk létre. A 6.9. ábra azt szemlélteti, hogy ha a T_z térben a h elemei szerinti integrálást végzünk, akkor a $T_{z \setminus h}$ térbeli leírásokat generáljuk. A konkrét modellünkben a $h=y=\{V, c\}$ választással a T_x hossz koordináta által definiált teret kapjuk.



6.9. ábra. A különböző terek kapcsolata.

A T_z térben, ha ki tudnánk számolni az elemszám sűrűséget, akkor az alábbi információk állnának rendelkezésünkre:

$\Psi_z(t, x, V, c)$ a fázis elem szám eloszlás a T_z térben,

$[V\Psi_z](t, x, V, c)$ a fázis elem térfogat eloszlás a T_z térben,

$[Vc\Psi_z](t, x, V, c)$ a fázis elem komponens tömeg eloszlás a T_z térben.

A definiált folytonos rendszerben ez jelentené a „teljes tudást”. A már említett nehézségek miatt ezt nem tudjuk biztosítani. Mondjunk le a „teljes tudás” igényéről, elégedjünk meg egy kevésbé differenciált tudással.

A T_x térben pl. az alábbi integrált jellegű mennyiségek értelmezhetők:

$[\mathfrak{S}_y(V\Psi_z)](t, x) = a$ a fázis elemek (össz)térfogatának T_x térbeli eloszlása,

$[\mathfrak{S}_y(Vc\Psi_z)](t, x) = aC$ a fázis elemek (össz)komponens tömegének T_x térbeli eloszlása.

Az első mennyiség, ha a folyadékfázis teljesen kitölti a reaktort, a cső „a” keresztmetszetét adja. A keresztmetszet a három-, ill. egydimenziós geometriai tér váltó mennyisége. A második mennyiség önálló változóként nem terjedt el a szakmában, hiszen a komponens tömeg geometriai térbeli sűrűsége, azaz a C fázis koncentráció az, amit használunk. Az egy, ill. a három geometriai térdimenzió váltója itt is a keresztmetszet. A V , a Vc egyaránt extenzív mennyiség, az integrálás során ezek additív jellegét használjuk ki.

Az integrálást az összes koordináta szerint is elvégezhetjük, ekkor jutunk a $T_{(0)}$ térbeli változókhöz (a koncentrált paraméterű modellekben):

a rendszerben lévő összes fázis elem szám:

$$N(t) = \int_0^L \int_{V_0}^{V_\infty} \int_{c_0}^{c_\infty} \Psi_{\{x,V,c\}} \cdot dc \cdot dV \cdot dx$$

operátorral kifejezve:

$$N(t) = \mathfrak{S}_z(\Psi_z)$$

a teljes fázis térfogata:

$$V(t) = \int_0^L \int_{V_0}^{V_\infty} \int_{c_0}^{c_\infty} V \cdot \Psi_{\{x,V,c\}} \cdot dc \cdot dV \cdot dx$$

operátorral kifejezve:

$$V(t) = \mathfrak{I}_z(V\Psi_z)$$

a teljes fázis tömege:

$$M(t) = \int_0^L \int_{V_0}^{V_\infty} \int_{c_0}^{c_\infty} V \cdot \rho \cdot \Psi_{\{x,V,c\}} \cdot dc \cdot dV \cdot dx$$

operátorral kifejezve:

$$M(t) = \mathfrak{I}_z(V\rho\Psi_z)$$

A reaktorral kapcsolatos feladataink megoldásában legtöbbször az integrált jellegű mennyiségek ismerete is elegendő, ezért felmerül a lehetősége annak, hogy a (6.5) modell használatával kapcsolatban a fent említett nehézségeket megkerüljük. Ehhez olyan modelleket kell értelmeznünk, amelynek változói az integrált jellegű mennyiségek.

Vajon létrehozható-e a (6.5) modellből az integrált változók közötti összefüggéseket tartalmazó, önállóan használható, *zárt modell*? (A zárt modell azt jelenti, hogy az autonóm módon, minden más kiegészítő összefüggés nélkül használható. Nem tévesztendő össze a *zárt rendszer* fogalmával, amely a környezetével nincsen kapcsolatban.) Ezt vizsgáljuk meg az alábbiakban.

Próbáljuk meg előállítani a T_x térben értelmezett mennyiségekre vonatkozó modellt. Szorozzuk meg a (6.5) modellt egy fáziselem tömegével ($V\rho$) és integráljuk az y elemei szerint a teljes értelmezési tartományuk felett. A független változók szerinti műveletek sorrendje felcserélhető, ezért a lokális megváltozás átalakítása az alábbi:

$$\mathfrak{I}_y \left(V\rho \frac{\partial \Psi_z}{\partial t} \right) \equiv \frac{\partial \left(\mathfrak{I}_y(V\rho\Psi_z) \right)}{\partial t} \equiv \frac{\partial(a\rho)}{\partial t}$$

A második tag átalakítása során egy újabb integrált jellegű mennyiséget is értelmezünk (\hat{v}_x : a fázis elemek x irányú átlagos sebessége, amely az eliminált belső tulajdonságoknak már nem függvénye):

$$\mathfrak{S}_y \left(V\rho \frac{\partial(v_x \Psi_z)}{\partial x} \right) \equiv \frac{\partial \left(\mathfrak{S}_y(V\rho v_x \Psi_z) \right)}{\partial x} \equiv \frac{\partial(a\rho \hat{v}_x)}{\partial x}$$

A harmadik és a negyedik tagok átalakításánál a parciális integrálás tételét használjuk fel figyelembe véve, hogy a belső tulajdonságok értelmezési határain nincs ki- és beáramlás, így a tagok zérussá válnak. A negyedik tagnál pl. az alábbi adódik:

$$\int_{V_0}^{V_\infty} \left(\int_{c_0}^{c_\infty} V\rho \frac{\partial(v_c \Psi_z)}{\partial c} dc \right) dV \equiv \int_{V_0}^{V_\infty} (V\rho [v_c \Psi_z]_{c=c_0}^{c=c_\infty}) dV \equiv 0$$

Az ötödik tag a fáziselemek összetapadásából és széteséséből adódó fázis tömegforrást jelentik. A tömeg megmaradási tétel miatt, az átalakítás végeredménye zérus. A fentieket összegezve az egydimenziós kontinuitási egyenletet kapjuk, amely a fázis tömegre vonatkozó differenciális mérlegegyenlet:

$$\frac{\partial(a\rho)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v}_x a\rho) = 0 \quad (6.6)$$

Ez az egyenlet a (6.5) modelltől függetlenül használható, nem szükséges annak előzetes megoldása. Itt egyedül a konvektív áramlás az, amely lokálisan a fázistömeg értékét változtatja. Felhívjuk a figyelmet az x koordináta menti két sebesség különbözőségére. A fáziselem aktuális v_x sebessége a T_z tér bármely pontján más és más lehet, a T_x térbeli átlag (\hat{v}_x) viszont az időn túl csak az x -től függ és az egyes elem sebessége ettől kisebb, vagy nagyobb is lehet.

A komponens tömeg differenciális mérlegegyenletét úgy kapjuk, hogy a (6.5) mérleg mindegyik tagját szorozzuk a fáziselemben levő komponens tömeggel (Vc) és integráljuk az y elemei szerint. A fentiekhez hasonló formális átalakítások után az alábbiakat kapjuk:

$$\frac{\partial(aC)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v}_x aC) + \frac{\partial}{\partial x} \mathfrak{S}_y(\tilde{v}_x Vc\Psi_z) = \mathfrak{S}_y(v_{Vc}\Psi_z) + \mathfrak{S}_y(Vcq_z^S) \quad (6.7)$$

amelynél az elem x irányú sebességét az átlagra és egy ingadozásra bontjuk:

$$v_x(z) = \hat{v}_x(x) + \tilde{v}_x(z)$$

A v_{vc} a komponenstömeg megváltozási sebességét jelöli. A fázis elemek összetapadása, ill. szétválása az (összes) komponenstömeget nem befolyásolja, ezért a (6.7) utolsó tagja zérus. A bal oldali harmadik tagban és a jobb oldali első tagban megmaradt az elemszám sűrűség, bár mindkét esetben az integrál operátor mögött. Emiatt a (6.7) egyenlet nem függetleníthető a (6.5)-től. Akár közelítések árán is ezt mégis meg kell tennünk, mert másképpen az integrált mennyiségekre vonatkozó modell nem válik autonómmá. A közelítések (ez az információ átvitel problémája) hierarchiaszint specifikusak. Az itt szükséges megfontolásokat a fázis elemekből álló rendszerek bemutatásánál részletezzük. A harmadik tag kérdése az áramlástani modellek, a jobboldali első tag kérdése pedig a méretnövelés problémakörként jelenik majd meg. Az ottani eredményeket megelőlegezve a komponenstömeg differenciális mérlege a T_x térben az alábbi:

$$\frac{\partial(aC)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\hat{v}_x aC) + \frac{\partial}{\partial x}\left(-aD_{ax} \frac{\partial c}{\partial x}\right) = avr \quad (6.8)$$

Néhány formai kapcsolatot emeljünk ki:

- Az eredeti fázistérben csak a konvektív áramlás és a forrás az, ami lokális megváltozást eredményez.
- A „lebutított” T_x térben megjelenik a konduktív áramlás, ami abból adódik, hogy az x menti sebességek az y koordinátáktól is függenek, de ez a függés nem vehető figyelembe a „lebutított” T_x térben.
- Az integrálás során eliminált koordináták menti konvektív áramok forrássá válnak.
- A csőreaktor (6.6) és (6.8) modelljében szereplő paraméterek már jól becsülhetők, az autonóm modell a (6.5) modelltől függetlenül használható a mérnöki

számításokban. Vessék össze ezt a modellt a 3. fejezetben bemutatott kibővített Damköhler egyenletekkel.

6.5. Modell rendszer

Ebben az alfejezetben általánosítjuk az előző részben bemutatott gondolatmenetet. Tekintsük a 6.9. ábra felső sorát. A továbbiakban legyen $u=z \setminus h$, és a teljes (differenciált) T_z tér és az integrált T_u térben értelmezett modellek kapcsolatát vizsgáljuk. Az előző részben a h halmaz az y belső tulajdonságokkal egyezett meg. Az általánosítás során a h a z hatványhalmazának bármelyik eleme lehet:

$$h \in P(z)$$

A hatványhalmaz a teljes halmazt, az üres halmazt és a z mindegyik részhalmazát magába foglalja. Értelmezzük úgy, hogy az üres halmaz az eredeti fázisteret, a teljes halmaz a zérus dimenziójú teret (koncentrált paraméterű modellek) generálja. Legyen $\varphi(y)$ a rendszerelem egy extenzív tulajdonsága. Mivel a belső tulajdonságok y halmaza legalább egy extenzív mennyiséget mindig tartalmaz, az elem bármelyik extenzív tulajdonsága előállítható. A $\varphi\Psi(z)$ szorzat a rendszer elemek adott extenzív mennyiségének T_z térbeli sűrűségét adja. Az extenzív tulajdonságok additivitását felhasználva az alábbi rendszer szintű változókat értelmezhetjük:

$$\Phi_u(t, u) = \{\varphi(Y) = \mathfrak{J}_h[\varphi(y)\Psi_z(t, z)]\}, \quad h \in P(z) \quad (6.9)$$

A $\Phi_u(t, u)$ a megfelelő extenzív mennyiség T_u térbeli sűrűségét jelenti, amely a (6.9) definícióegyenlet alapján kiszámítható. Mivel a h a $P(z)$ hatványhalmaz bármely eleme lehet, a változó a különböző részletességű modellekben jelenhet meg. Kiszámításához azonban az elemszám-sűrűség fázistérbeli ismeretére lenne szükség, ami viszont a rá vonatkozó (6.4) modell „információ éhsége” miatt, amint azt korábban már kifejtettük, nem ismert. Emiatt az előző részben bemutatott gondolatmenetet követve, a (6.4) modellt a (6.9) rendszer szintű változók közötti összefüggések generálására használjuk fel. Az elvégzendő műveletek lépéseit a 6.10. ábrán foglaltuk össze. Az elemszám sűrűsége vonatkozó fázistérbeli differenciális mérlegegyenletből indulunk ki, egy elem megfelelő extenzív elem mennyiségével szorozva az egyenlet mindegyik tagját, majd az

eliminálandó változók szerint elvégezzük a teljes értelmezési tartomány felett az integrálást.

Kiindulás:

$$\frac{\partial \Psi_z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (v_z \Psi_z) = q_z^S$$

Transzformáció:

$$\mathbf{T}_z \rightarrow \mathbf{T}_u \quad u = z \setminus h$$

Az átalakítás műveletei:

1. Szorzás $\varphi_i(y) \in \varphi$ extenzív mennyiséggel.
2. Integrálás a h elemei szerint.
3. Zárt modell a \mathbf{T}_u -térben.

6.10. ábra. A rendszer változókra vonatkozó mérleg levezetése.

A h halmazba tartozó változók eliminálása miatt, a rendszer szinten értelmeznünk kell a T_u térbeli átlagsebességeket, és a T_z térbeli tényleges sebességeket az átlag és egy ingadozás összegeként tekintjük:

$$v_u(t, z) = \hat{v}_u(t, x) + \tilde{v}_u(t, z) \quad (6.10)$$

Ezt is figyelembe véve, a független változókra vonatkozó műveletek felcserélhetősége miatt és a parciális integrálási szabály alkalmazásával, formális átalakításokkal az alábbiakat kapjuk.

Az első tag átalakítása:

$$\mathfrak{I}_h \left(\varphi_i \frac{\partial \Psi_z}{\partial t} \right) \equiv \frac{\partial (\mathfrak{I}_h(\varphi_i \Psi_z))}{\partial t} \equiv \frac{\partial \Phi_i}{\partial t}$$

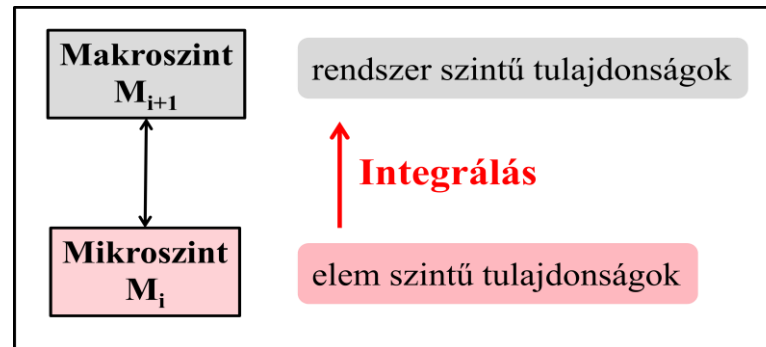
Az u-s tagok átalakítása:

$$\begin{aligned} \mathfrak{I}_h \left(\varphi_i \frac{\partial}{\partial u} (v_u \Psi_z) \right) &\equiv \frac{\partial}{\partial u} (\mathfrak{I}_h(\varphi_i v_u \Psi_z)) \equiv \frac{\partial}{\partial u} (\mathfrak{I}_h(\varphi_i (\hat{v}_u + \tilde{v}_u) \Psi_z)) \equiv \\ &\equiv \frac{\partial}{\partial u} (\mathfrak{I}_h(\varphi_i \hat{v}_u \Psi_z)) + \frac{\partial}{\partial u} (\mathfrak{I}_h(\varphi_i \tilde{v}_u \Psi_z)) \equiv \frac{\partial}{\partial u} (\hat{v}_u \Phi_i) + \frac{\partial}{\partial u} (\mathfrak{I}_h(\varphi_i \tilde{v}_u \Psi_z)) \end{aligned}$$

A h -s tagok a T_u térben forrássá válnak. Összegzésképpen formális átalakítással az alábbi T_u térre vonatkozó differenciális mérlegegyenletekhez jutunk:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Phi_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial u} (\hat{v}_u \Phi_i) + \frac{\partial}{\partial u} (\mathfrak{S}_h(\varphi_i \tilde{v}_u \Psi_z)) = \\ & = \mathfrak{S}_h(v_{\varphi_i} \Psi_z) + \mathfrak{S}_h(\varphi_i q_z^S) + \sum_{y_i \in h} [\mathfrak{S}_{h \setminus \{y_i\}}(\varphi_i v_{y_i} \Psi_z)]_{y_i=y_{i,0}}^{y_i=y_{i,\infty}} \quad (6.11) \\ & \forall \Phi_i \in \Phi_u \end{aligned}$$

A (6.11) a rendszer φ_i jellegű extenzív mennyiségének T_u térbeli sűrűségére ($\Phi_i(t,u)$) vonatkozó differenciális mérlegegyenlet, a T_u tér egy belső pontján. Az egyenlet első tagja a különböző folyamatok okozta lokális megváltozás. A második tag (amely valójában $s(u)$ számú tag összege) a T_u térbeli „konvektív” (makroszkópikus) áramlásokat írja le, a megfelelő átlag sebességekkel. A (6.10) összefüggés jól mutatja a T_z térbeli v_u elem sebesség és a T_u térbeli elemek átlagsebessége (\hat{v}_u) közötti különbséget. Ezen különbség (ingadozás) eredményezi az egyenlet harmadik tagját (ez ugyancsak $s(u)$ számú tag összege). Míg az első két tag csak rendszer szintű (T_u térben értelmezett) változókat tartalmaz, a harmadik tag elemei - bár integrál operátor mögött - T_z térbeli változókat is magukba foglalnak. A jobb oldali első tag (a második sorban) az elem adott extenzív mennyiségének megváltozását rendszer szintre transzformálja. Formai érdekessége, hogy a T_z térbeli konvektív áramból, a T_u térben forrás lesz. A második tag az elemszám forrásból adódó extenzív mennyiség forrását jelenti a T_u térben. A harmadik tag az eliminált koordináták határain bekövetkező be- és kiáramlások adta forrásokat jelenti (ha a rendszer zárt az eliminált koordinátákra, akkor ezek értéke zérus). A jobb oldali tagok is T_z térbeli változókat tartalmaznak, ugyancsak integrál operátor mögött. Ennek az a következménye, hogy a (6.11) modell nem autonóm, a teljes fázistérre vonatkozó elemszám sűrűség ismeretét is feltételezi. Itt találjuk szembe magunkat újra a posztulátumok között említett hierarchia paradoxonnal. A (6.11) nem függetleníthető a (6.4)-től, de a használhatóság végett mégis megtesszük.



6.11. ábra. A hierarchia szintek kapcsolata.

Tekintsük a 6.11. ábrát, amelynél az alsó un. *mikroszintet* a (6.4) modell (M_i modell) definiálja, és a modell maga a rendszerrel kapcsolatos teljes (legrészletesebb) tudást képviseli. A hierarchiában felette áll az un. *makroszintű* modell, amely a (6.11) autonómmá tételével előállított M_{i+1} modell, amely az integrált jellegű mennyiségek számítására, az M_i -től függetlenül alkalmas. A függetlenítés műveletét hierarchia szintek közötti *információátvitelnek* nevezzük. Az információátvitelt az alábbiakkal jellemezhetjük [57]:

- A függetlenítés végett különböző közelítéseket is alkalmaznunk kell, ami információvesztést, információtorzulást okoz.
- Új törvényszerűségeket és új „anyagi” tulajdonságokat kell értelmezni, amelyek értékét ismerni kell.
- Az új törvényszerűségek és tulajdonságok tartalmi (intuíció, tudománytörténet) és formai oldalról (matematikailag) közelítve identifikálhatók.
- Az információátvitelre általános megoldás nem ismeretes, a közelítések hierarchia specifikusak.

Az információátvitel konkrét eseteket a tipikus hierarchia szintek tárgyalásánál mutatjuk be. A fázis elemekből álló rendszerek szintjén az információátviteli probléma megoldásával a (6.11) az alábbi formára hozható:

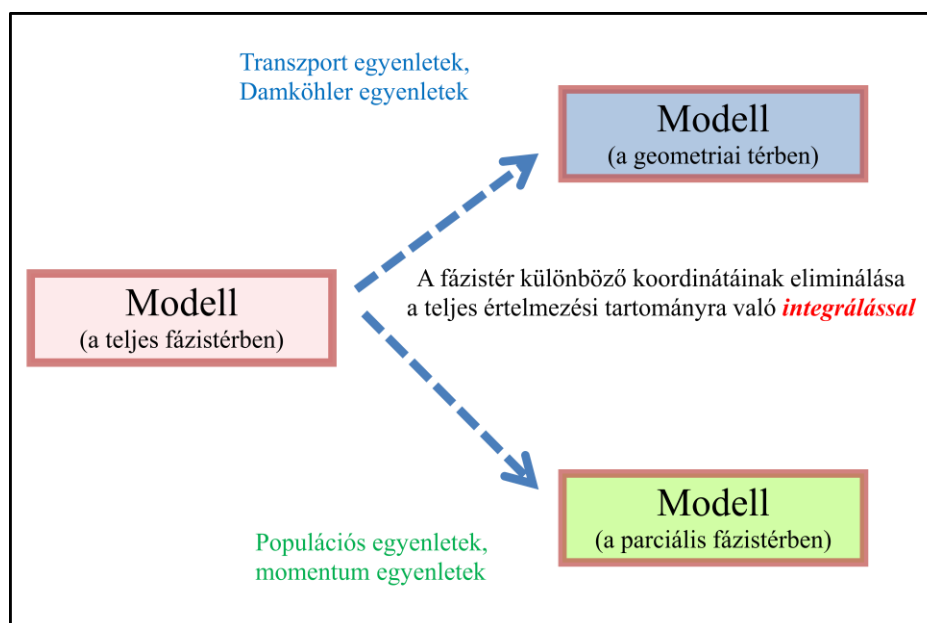
$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial u} (\hat{v}_u \Phi_i) + \frac{\partial}{\partial u} \left(-a_u \frac{\partial \Phi_i}{\partial u} \right) = q_u^{\Phi_i}, \quad \forall \Phi_i \in \Phi_u \quad (6.12)$$

A (6.12). mérlegegyenlet tagjaival kapcsolatban az alábbiakat kell hangsúlyoznunk:

1. Konvekció a T_u -térben. A mikroszint u koordináták menti konvektív áramából adódik, \hat{v}_u átlagokkal számolva.
2. Kondukción a T_u -térben. A mikroszint u koordináták menti konvektív áramából adódik, \hat{v}_u átlagoktól való eltérések miatt (ld. Fick, Fourier, Navies-Stokes törvények a komponens tömeg, hő és impulzus transzportnál).
3. Forrás a T_u -térben. A mikroszint h koordináták menti konvektív áramából és az elemszám forrassűrűségéből adódik.
4. Lokális megváltozás a T_u -térben. Amennyiben az (1-3.) jelenségek nem kompenzálják egymás hatását, akkor a Φ_i mennyiség (T_u -térbeli sűrűség) értéke időben megváltozik.

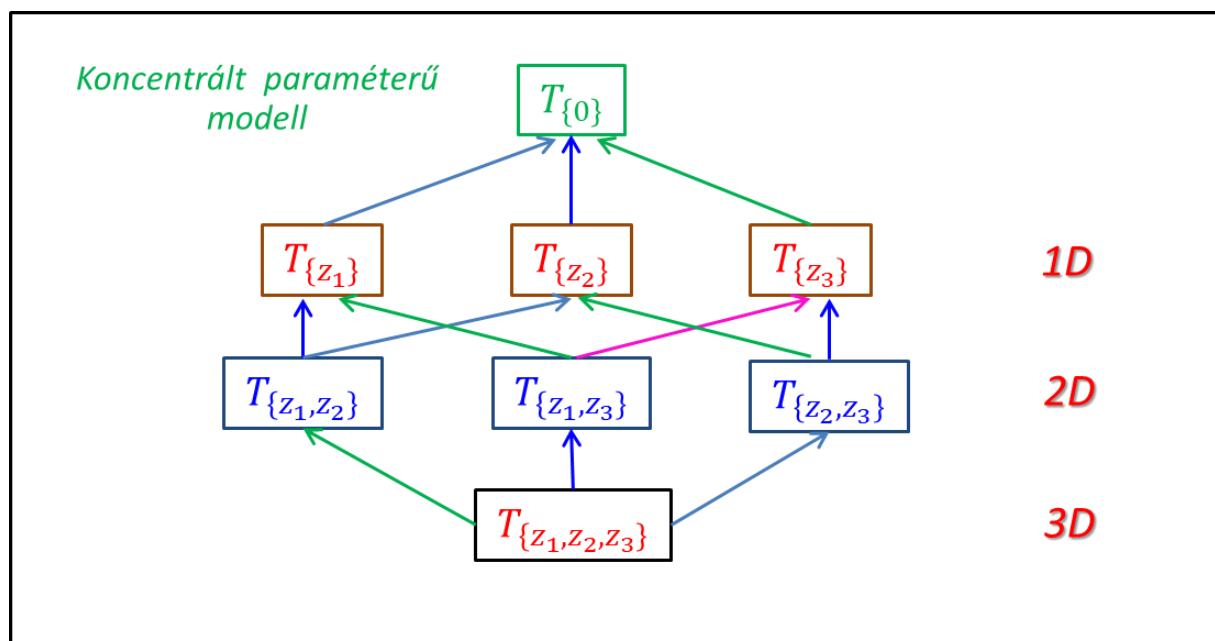
A modell változóinak definiálásánál úgy kell eljárunk, hogy a független (6.12) modell alkalmas legyen az eredeti mérnöki feladat megoldásához, és a megoldásához szükséges információk is rendelkezésünkre álljanak.

A (6.12) rendszermodell a változók megfelelő kiválasztásával lefedik a 2. fejezet fundamentális egyenleteit, de generálhatók a különböző problémák szakma történetileg kialakult populációs mérlegei is (6.12. ábra).



6.12. ábra. A populációs és Damköhler egyenletek kapcsolata.

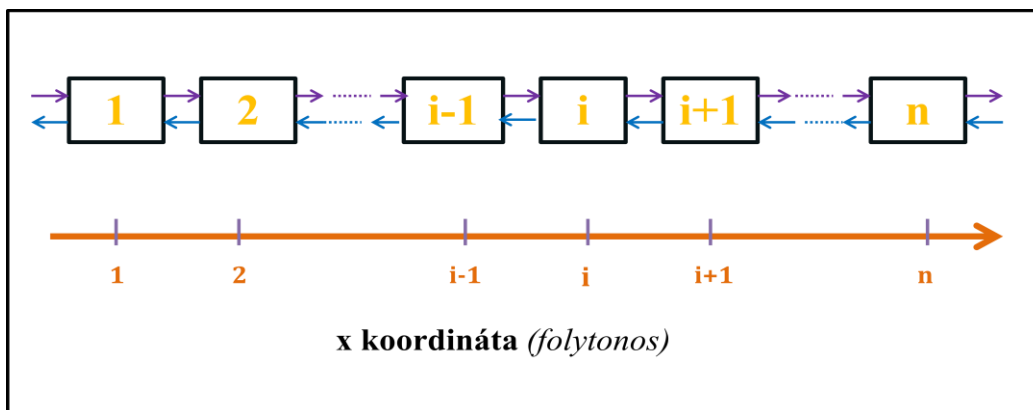
A (6.9) alapján definiált integrált mennyiségek különböző dimenziójú terekben írják le az adott rendszert. A több dimenzió nagyobb információ tartalmú modellt eredményez. Ugyanazon rendszer, különböző információ tartalmú modelljeinek rendszerét, *modell rendszernek* nevezhetjük. Egy háromdimenziós fázis térből kiindulva a 6.13. ábrán látható tereket definiálhatjuk, az adott térhez tartozó modellekkel együtt. A legrészletesebb modell a $T_{\{z_1, z_2, z_3\}}$ térben írja le a rendszert, míg a legkevésbé differenciált modellben már csak az idő jelenti a független változót ($T_{\{0\}}$ tér, koncentrált paraméterű modell, pl. egy tökéletesen kevert üst reaktor leírása).



6.13. ábra. A különböző információ tartalmú modellek kapcsolata.

6.6. Elemszám csökkentés

Az eddigi fejezetekben a folytonos rendszerekre vonatkozóan semmiféle megkötést nem tettünk. Gyakorlati feladataink során előfordulnak olyan esetek is, amelyeknél a kellően nagyszámú elem között speciális kapcsolatok érvényesülnek. Ilyen például a 6.14. ábrán látható sémával jellemzett rendszer is.



6.14. ábra. A speciális rendszer sémája.

Jellemezzük a rendszert az alábbiakkal:

- Kellően sok elemet és kapcsolatot tartalmaz ($n \gg 1$).
- Az elemek és a kapcsolatok izomorfak (hasonló modellekkel definiálhatók).

A speciális jelző, amely az általánostól való különbözősége utal, jelentse a következőket. Az elemek speciális alakú modellje:

$$\frac{dy}{dt} = (u_1 + u_2) - (v_1 + v_2) + f(y)$$

ahol y az elemek belső tulajdonságai (állapotváltozók),

u_1, u_2 bemenetek,

v_1, v_2 kimenetek.

A kimenetek a rendszer koncepciónak megfelelően megadhatók a belső tulajdonságok függvényeként:

$$v_i = \varphi_i(y), \quad i = 1, 2$$

A kölcsönhatásokra vonatkozóan: Rendeljük az elemekhez az i sorszám koordinátát úgy, hogy az i és az $(i+1)$ sorszámú elemek közötti kölcsönhatás megadható legyen az „ i és az $(i+1)$ elem között visszacsatolásos kapcsolat van” kifejezéssel. A 0 és az $(n+1)$ elem a környezetet jelöli. A speciális alakú kölcsönhatás modell az alábbi:

$$u_1(i) = v_1(i-1),$$

$$u_2(i) = v_2(i+1), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

ahol i az elemekhez rendelt sorszám [$u(i)$, $v(i)$, $y(i)$ az i „sorszám koordináta” diszkrét függvényei],

$u_1(0)$ és $u_2(n+1)$ a 6.14. ábrán látható rendszer bemenetei (itt adott értékű paraméterek).

Az f , φ_1 , φ_2 függvényekre semmilyen tartalmi megszorítást nem teszünk, de folytonosak és differenciálhatók. Ezt is figyelembe véve a rendszer kellő részletességgel definiált.

A definiált rendszer, mint diszkrét rendszer, egy olyan modellben formalizálható, amely magába foglalja az elemek és a kapcsolatok modelljét, az alábbi differenciálegyenlet rendszer (DER) formájában:

$$\frac{dy(i)}{dt} = \varphi_1(y(i-1)) - \varphi_1(y(i)) + \varphi_2(y(i+1)) - \varphi_2(y(i)) + f(y(i)) \quad (6.13)$$

ahol: $i=1,2,\dots,n$, $\varphi_1(y(0))$ és $\varphi_2(y(n+1))$ paraméterek.

Legyen $\Delta i = 1$, és a különböző differenciálhányadosokat tekintve, alakítsuk át a fenti egyenletet differenciaegyenlet rendszerré. Kiegészítésekkel az alábbi lehetőségek adódnak.

Retrográd differencia hányadossal:

$$\frac{dy(i)}{dt} = - \frac{[\varphi_1(y(i)) - \varphi_2(y(i))] - [\varphi_1(y(i-\Delta i)) - \varphi_2(y(i-\Delta i))]}{\Delta i} +$$
$$+ \frac{\varphi_2(y(i+\Delta i)) - 2\varphi_2(y(i)) + \varphi_2(y(i-\Delta i))}{(\Delta i)^2} + f(y(i)).$$

Progresszív differencia hányadossal:

$$\frac{dy(i)}{dt} = - \frac{[\varphi_1(y(i+\Delta i)) - \varphi_2(y(i+\Delta i))] - [\varphi_1(y(i)) - \varphi_2(y(i))]}{\Delta i} +$$
$$+ \frac{\varphi_1(y(i+\Delta i)) - 2\varphi_1(y(i)) + \varphi_1(y(i-\Delta i))}{(\Delta i)^2} + f(y(i)).$$

Centrális differencia hányadossal:

$$\frac{dy(i)}{dt} = - \frac{[\varphi_1(y(i + \Delta i)) - \varphi_2(y(i + \Delta i))] - [\varphi_1(y(i - \Delta i)) - \varphi_2(y(i - \Delta i))]}{2\Delta i} + \frac{1}{2} \frac{\sum_{j=1}^2 [\varphi_j(y(i + \Delta i)) - 2\varphi_j(y(i)) + \varphi_j(y(i - \Delta i))]}{(\Delta i)^2} + f(y(i)).$$

Mind a háromnál: $i=1,2,\dots,n$, $\varphi_1(y(0))$ és $\varphi_2(y(n + \Delta i))$ paraméterek.

Abban az esetben, ha az n elegendően nagy, azaz a $\frac{\Delta i}{n}$ elegendően kicsi, akkor a fenti differencia egyenletek egy-egy parciális DER-hez tartozó differenciaegyenlet rendszernek tekinthetők. A megfelelő DER-ek rendre az alábbiak.

Retrográd differencia hányadossal:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\varphi_1(Y) - \varphi_2(Y)] - \frac{\partial^2 \varphi_2(Y)}{\partial x^2} = f(Y).$$

Progresszív differencia hányadossal:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\varphi_1(Y) - \varphi_2(Y)] - \frac{\partial^2 \varphi_1(Y)}{\partial x^2} = f(Y).$$

Centrális differencia hányadossal:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\varphi_1(Y) - \varphi_2(Y)] - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [\varphi_1(Y) + \varphi_2(Y)]}{\partial x^2} = f(Y).$$

A fenti egyenletekben: $Y(t,x)=y(i)$, ha $x=i$,
 x a „folytonos” sorszám koordináta.

A definiált rendszernek a (6.13) a diszkrét modellje, míg a fenti parciális differenciál egyenletek külön-külön ugyanazon rendszer folytonos modelljének tekinthetők.

Vessük össze először a diszkrét és a folytonos modellek változóit. Fontos kiemelni azt, hogy a két különböző modell között nem létesíthető egy-egy értelmű kapcsolat, így információ tartalmukban is különböznek. Ez analóg a mikro- és makroszintű leírások információtartalmabeli különbségével, amit az összehasonlításoknál nem szabad

figyelman kívül hagyni. Az $y(i)$ és $Y(t, x)$ között, a már bemutatott mellett az alábbi közelítések is érvényesülhetnek.

Retrográd differencia hányadosnál:

$$y(i) \cong \int_{i-\Delta i}^i Y(t, x) dx .$$

Progresszív differencia hányadosnál:

$$y(i) \cong \int_i^{i+\Delta i} Y(t, x) dx .$$

Centrális differencia hányadosnál:

$$y(i) \cong \int_{i-\frac{1}{2}\Delta i}^{i+\frac{1}{2}\Delta i} Y(t, x) dx .$$

A kétféle közelítés azt fejezi ki, hogy a diszkrét tulajdonság, mint a folytonos kitüntetett pontbeli értéke, ill. mint integrál középérték jelenik meg. Az n darabszám növelésével a diszkrét és a három folytonos modell közötti eltérés egyre kisebb lesz, miközben a diszkrét és folytonos közötti elvi különbség mindig megmarad. Az eltérések mértéke és az elemszám (n) közötti összefüggésnek a vizsgálata matematikai probléma, míg a vegyészmérnöki gyakorlatban konkrét rendszerekre végeztek vizsgálatokat.

A tartalmi oldalát tekintve a parciális DER-ek az eredendően diszkrét rendszer folytonosként való kezelését jelentik. A folytonos x („sorszám”) koordináta, mint a kölcsönhatásokra jellemző külső tulajdonság jelenik meg. A rendszerelemek be- és kimenetei a folytonos változatokban x -menti mikroszkópikus (konduktív) és makroszkópikus (konvektív) áramlások formájában mutatkoznak. A retrográd, ill. progresszív differenciáknál a visszacsatolást megszüntetve ($\varphi_2 = 0$, ill. $\varphi_1 = 0$) a konduktív áramlás eltűnik. Ebben az esetben a két modell minőségi különbözősége szembetűnő (az egyik egy másodrendű differenciálhányadosal több tagot tartalmaz, mint a másik), a modell megoldások eltérése viszont az n minden határon túli növekedésével zérushoz tart. A φ_1 és φ_2 átsorszámozásával és egyidejű $x=n-x$ koordináta

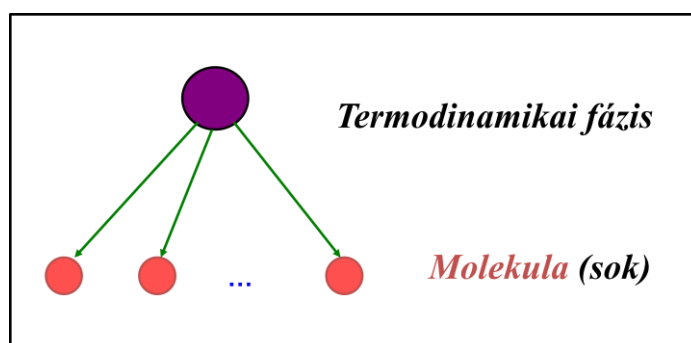


transzformációval a két modell kölcsönösen átalakítható egymásba. A centrális differencián alapuló folytonos modellnél a rendszerelemek közötti soros kapcsolat esetén is változatlan a modellstruktúra, konvektív és konduktív áramlással. Az egyidejű átsorszámozásra és koordináta transzformációra a modell invariáns. Bár numerikus összehasonlításoknál a modellek hasonlóan viselkednek, szimmetria tulajdonsága miatt célszerű ez utóbbi modellt előnyben részesíteni.

Ezen speciális folytonos rendszer modellt a 8.3. fejezetben a multi komponensű rendszerek, a 11.3. fejezetben pedig sokelemű berendezések modellezésében alkalmazzuk.

7. Molekulákból álló rendszerek

A folytonos rendszerek jellemző prototípusa a molekulákból álló rendszerek (MÁR), amelyek mennyiségi leírását Boltzmann már a XIX. század második felében megadta, megalapozva a mérnöki tudományok statisztikus termodinamikáját. A MÁR szerkezete a 7.1. ábrán látható, az elemek nagy száma (10^{23} nagyságrend) miatt, leírása csak folytonos rendszerként képzelhető el. A rendszer eleme a molekula, amely a geometriai térben mechanikus mozgást végez, a rendszer pedig a termodinamikai fázis.



7.1. ábra. A rendszer szerkezete.

Az elemek és a kapcsolatok modelljeit a 7.2. ábrán foglaltuk össze. Az elemek belső tulajdonsága, mint extenzív tulajdonság, lehetne az impulzus ($m \cdot v$). Ugyanakkor mindegyik molekula tömege m konstans, ezért ezzel egyenértékű a három sebesség komponens megadása. A kölcsönhatások tere a háromdimenziós geometriai tér, a térkoordináták megváltozását a sebesség, a sebesség koordináták megváltozását pedig a molekulák *gyorsulása* adja. A hatdimenziós fázistérben értelmezhető elemszám sűrűséget, Boltzmann tiszteletére, a szakirodalomban Boltzmann függvénynek (f) nevezik, amelyre felírható a differenciális-mérlegegyenlet (7.3. ábra). Az elemszám forrassűrűséget az ún. *ütközési integrállal* adják meg, amelynek meghatározására különböző modelleket alkottak.

Elem (molekula) modell:

változók:

$$x = \{x_1, x_2, x_3\} \quad \text{- külső}$$

$$y \equiv v = \{v_1, v_2, v_3\} \quad \text{- belső}$$

összefüggések:

$$\frac{dx}{dt} = v \quad \text{- kapcsolat}$$

$$\frac{dv}{dt} = a(x, v) \quad \text{- elem}$$

7.2. ábra. Az elemek és kapcsolatok modellje.

Elemszám sűrűség:

$$\Psi = \Psi(t, x_1, x_2, x_3, v_1, v_2, v_3)$$

Boltzmann:

$$f \equiv \Psi_z$$

Mérlegegyenlet (elemszám sűrűsége) \longleftrightarrow **Boltzmann-egyenlet**

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (v \cdot f) + \frac{\partial}{\partial v} (a \cdot f) = q_{\text{ütök}}$$

ütökési integrál (elemszám forrassűrűség)

7.3. ábra. Elemszám mérleg (mikroszkópikus modell).

Így a statisztikus termodinamikában, a molekulákból álló rendszer 7.3. ábrán látható *mikroszintű modellje*, a megfelelő kezdeti és peremfeltételekkel kiegészítve, direkt módon is használható. A mérnöki gyakorlatban azonban a belső tulajdonságok eliminálásával értelmezhető *makroszintű modellnek*, az ún. *transzport egyenleteknek* van megalapozó szerepe.

Értelmezzük először a rendszer (fázis) szintű tulajdonságokat, a 7.4. ábrának megfelelően.

$$\begin{aligned} \text{sűrűség:} \quad \rho &= \mathfrak{I}_v(m \cdot f) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (m \cdot f) dv_1 dv_2 dv_3 \\ \text{lineáris áramlási sebesség:} \quad \hat{v} &= \frac{\mathfrak{I}_v(v \cdot m \cdot f)}{\mathfrak{I}_v(m \cdot f)} = \frac{1}{\rho} \cdot \mathfrak{I}_v(v \cdot m \cdot f) \\ \text{energia sűrűség:} \quad e &= \mathfrak{I}_v\left(\frac{1}{2} m \cdot v^2 \cdot f\right) \\ \text{impulzus sűrűség:} \quad i_v &= \mathfrak{I}_v(m \cdot v \cdot f) = \rho \cdot \hat{v} \\ \text{származtatott:} \\ \text{kinetikus energia sűrűség:} \quad e_k &= \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot \hat{v}^2 \\ \text{belső energia (fajlagos):} \quad u &= \frac{1}{\rho} \cdot (e - e_k) \\ \text{nyomás:} \quad p &= \frac{1}{3} \cdot \mathfrak{I}_v(m \cdot \tilde{v}^2 \cdot f) \quad \text{Ingadozás: } \tilde{v} = v - \hat{v} \\ \text{hőmérséklet:} \quad T &= \frac{2U}{3R} \quad (R: \text{gáz-állandó}) \quad \text{(ritka gáz!)} \end{aligned}$$

7.4. ábra. Rendszer szintű (makroszkópikus) változók.

A belső tulajdonságok teljes értelmezési tartománya feletti integrálással közvetlenül definiálhatjuk a termodinamikai fázis tömegsűrűségét, a mozgásból adódó (kinetikai) energiasűrűségét és az impulzussűrűségét. A geometriai térben való makroszkópikus mozgást a fázis lineáris áramlási sebességével jellemezhetjük (a molekula tömegre átlagolt érték). A termodinamikai gyakorlatban további származtatott mennyiségeket is használunk, ilyenek a fázis kinetikai energiasűrűsége (a fázis lineáris áramlási sebességével kifejezve), a belsőenergia sűrűsége (az elemek kinetikai energia összeg sűrűségének és a fázis kinetikai energia sűrűségének különbsége), nyomása és hőmérséklete. Itt is felhívjuk a figyelmet arra, hogy nem homogén lineáris függvények esetében az operációk (integrálás, ill. a függvényképzés) sorrendje nem felcserélhető. Az e és e_k esetében éppen az operáció sorrendjében van különbség, ezért a belső energia sűrűség nem zérus. Sőt azt is tudnunk kell, hogy a molekulával kapcsolatban annak kinetikus energiáján túlmenően más energiák is léteznek (a molekulák elemeit összetartó belső energiák, forgási energia, stb.), amelyek a mérlegben nem szerepelnek.

A folytonos rendszerek modellezésénél bemutatott gondolatmenet szerint a rendszerszintű változókat tartalmazó modellt (transzport egyenletek) az elemszám differenciális mérlegegyenletből (Boltzmann egyenlet) integrálással generáljuk. Az elem megfelelő extenzív tulajdonságával szorozva, majd a sebességek szerint integrálva, formális átalakításokkal a 7.5. ábrán látható összefüggésekig jutunk (ahol az \circ az ún. *tenzorszorzás* jele [12]).

$$\text{Formális átalakítások: } = \left\{ m, \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2, m \cdot v \right\}, \quad \mathfrak{I}_v, \dots$$
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v} \cdot \rho) = \mathfrak{I}_v(m \cdot q_{iik})$$
$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v} \cdot e) + \frac{\partial}{\partial x} \mathfrak{I}_v \left(\frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 \cdot \tilde{v} \cdot f \right) = \mathfrak{I}_v(m \cdot v^T \cdot a \cdot f) + \mathfrak{I}_v \left(\frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 \cdot q_{iik} \right)$$
$$\frac{\partial (\rho \cdot \hat{v})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v} \circ \rho \cdot \hat{v}) + \frac{\partial}{\partial x} \mathfrak{I}_v (\tilde{v} \circ \rho \cdot \tilde{v} \cdot f) = \mathfrak{I}_v(m \cdot a \cdot f) + \mathfrak{I}_v(m \cdot v \cdot q_{iik})$$

7.5. ábra. A formális átalakítások után.

Ezekben az összefüggésekben elsősorban a rendszerszintű változók szerepelnek, de megtalálhatók bennük a mikroszintű modell változói is, bár ez utóbbiak mindig az integrál operátor mögött. Itt is a szintek közötti információ átviteli problémát kell megoldani, hogy a 7.6. ábrán összefoglalt transzport egyenleteket a Boltzmann függvénytől függetlenül (pontosabban autonóm módon) tudjuk használni.

TÖMEG:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v} \cdot \rho) = 0$$

ENERGIA:
$$\frac{\partial \left(\rho \cdot u + \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot \hat{v}^2 \right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\hat{v} \cdot \left(\rho \cdot u + \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot \hat{v}^2 \right) \right] + \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

IMPULZUS:
$$\frac{\partial (\rho \cdot \hat{v})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v} \circ \rho \cdot \hat{v}) + \frac{\partial P}{\partial x} = 0$$

ahol

$$q = \mathfrak{I}_v \left[\frac{1}{2} \cdot m \cdot (v - \hat{v})^2 \cdot \tilde{v} \cdot f \right] \quad \text{TERMILKUS ÁRAM}$$

$$P = [P_{ij}]_{3,3} = \mathfrak{I}_v (m \cdot \tilde{v} \circ \tilde{v} \cdot f) \quad \text{NYOMÁS TENZOR}$$

7.6. ábra. Rendszer szintű (makroszkópikus) modell.

A molekulák össztömege az ütközés következtében nem változik, így a tömeg megmaradási törvény miatt a fázis tömegre vonatkozó differenciális mérleg (a kontinuitási törvény), minden további meggondolás nélkül adódik (7.6. ábra első összefüggése). Az energia mérlegben a q az ún. *termikus áram*, az impulzus mérlegben pedig a P az ún. *nyomás tenzor* jelenti azon mennyiségeket, amelyeket az információátviteli probléma megoldása során, rendszerszintű változók függvényeként kell megadnunk. A szakmatörténetileg kialakult közelítések, *Fourier*, ill. *Navier Stokes törvényekként* ismertek (7.7. ábra). A Boltzmann függvény ismeretének hiánya „új anyagi tulajdonságok” (hővezetési tényező, viszkozitási tényező) bevezetésével kompenzálható (közelíthető).

$$q = -\lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \quad \text{FOURIER}$$

Hővezetési tényező

$$P_{ij} = p + \left(\frac{2}{3} \cdot \eta + \chi \right) \cdot \frac{\partial \hat{v}}{\partial x} \cdot \delta_{ij} - \eta \cdot \left(\frac{\partial \hat{v}}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{v}}{\partial x_j} \right)$$

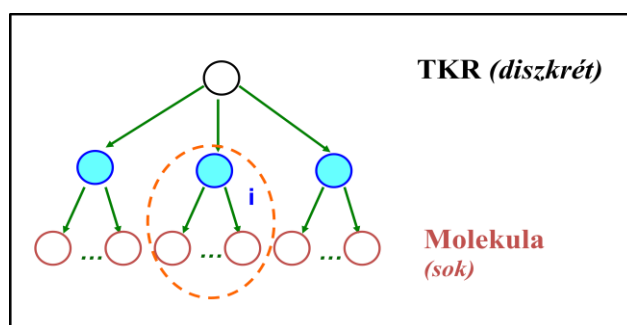
nyírási viszkozitás térfogati viszkozitás Kronecker-delta

7.7. ábra Függetlenítés a mikroszkópikus modelltől.

8. Több komponensű rendszerek

Az azonos molekulákból álló rendszerekhez képest a *több komponensű rendszerek* (TKR) abban különböznek, hogy különböző minőségű molekulákat is magukba foglalnak. Az ilyen rendszerek struktúráját a 8.1. ábra szemlélteti. A dekompozíció során először a kémiai szerkezet alapján osztályozunk, majd az osztályokon belül a molekulák lesznek a rendszer elemei. A kémiai komponensek szintjén ugyancsak két esetet különböztetünk meg:

- Néhány kémiai komponens esetén a TKR-t diszkrét rendszerként kezeljük. Szűkebb értelemben ezeket nevezzük TKR-nek.
- Megszámlálhatatlanul sok komponens esetén a TKR-t folytonos rendszerként írjuk le. Megkülönböztetésképpen az ilyen rendszereket *multi komponensű rendszereknek* (MKR) is nevezzük.



8.1. ábra. A rendszer szerkezete.

A TKR maga fázis, vagy fáziselem szintű rendszer. A közbülső szint elemei a molekulákból álló rendszerek, rájuk az előző fejezetben bemutatott modell érvényes. Új folyamatként jelenik itt meg a kémiai komponensek közötti kölcsönhatás, a kémiai reakció.

8.1. A TKR modelljének generálása

A TKR-nek, mint diszkrét rendszernek az elemei, molekulákból álló rendszerek, amelyek modelljeit a 8.2. ábra reprezentálja, ahol az i index az i komponens osztályra vonatkozik. Ebből indulhatunk ki a rendszermodell generálásához.

Tulajdonságok:

$$f_i(t, x, v)$$
$$m_i, \rho_i, \hat{v}_i, e_i, i_i$$
$$i = 1, 2, \dots, n$$

Összefüggések: ld. MÁR!

8.2. ábra. Az elemek modellje.

A 8.3. ábrán foglaltuk össze a rendszer szintű változók definícióját.

Diszkrét rendszerről lévén szó, a rendszer szintű változókat az extenzív elem változók összegzésével értelmezzük. Az előző fejezethez képest új típusú változó a koncentráció (a kémiai komponens tömeg térfogati sűrűsége), amely a fázison belül a különböző típusú kémiai komponensek tömeg megoszlását méri. A rendszer szintű változók definícióját (diszkrét rendszerről lévén szó integrálás helyett összegzés) figyelembe véve, összegzéssel a 8.4. ábrán látható modell vezethető le. Ez a MÁR-hoz hasonlóan tartalmazza a q termikus áramot és a P nyomástenzort, amelyeket az ott bemutatott módon közelíthetünk.

sűrűség:	$\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i$
koncentráció:	$c_i = \frac{1}{M_i} \cdot \rho_i$ <p style="text-align: right;">molekula tömeg [kg/kmol]</p>
lineáris áramlási sebesség:	$\hat{v} = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{v}_i \cdot \rho_i)}{\sum_{i=1}^n \rho_i}$
energia sűrűség:	$e = \sum_{i=1}^n e_i$
impulzus sűrűség:	$\dot{i} = \sum_{i=1}^n \dot{i}_i$
fajlagos belső energia:	$u = \frac{1}{\rho} \cdot \left[e - \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot \hat{v}^2 \right]$
nyomás:	$p = \frac{1}{3} \cdot \text{trace } P$
hőmérséklet:	$T = \frac{2}{3} \cdot \frac{U}{R} \quad (\text{ritka gázra!})$

8.3. ábra. Rendszer (fázis) szintű változók.

fázis tömeg:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v} \cdot \rho) = 0$$

komponens tömeg:
$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\hat{v} \cdot c_i) + \frac{\partial d_i}{\partial x} = q_i$$

$$i = 1, 2, \dots, n-1$$

energia:
$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \cdot u + \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot \hat{v}^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\hat{v} \cdot \left(\rho \cdot u + \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot \hat{v}^2 \right) \right] + \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

impulzus:
$$\frac{\partial (\rho \cdot \hat{v})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\hat{v} \cdot (\rho \cdot \hat{v})] + \frac{\partial P}{\partial x} = 0$$

8.4. ábra. A TKR modellje.

A komponens tömegre vonatkozó mérlegben megjelenik a d_i diffúziós áramsűrűség, amely abból adódik, hogy az egyes komponens osztályok molekuláinak átlagsebességei egymástól is és a fázis átlagsebességétől is különböznek. Az áramsűrűséget a Fick I. törvény alapján közelítjük. A diffúziós áramok közelítését az 8.5. ábra szemlélteti.

A nyomástenzorra (P) és a termikus áramra (q):
(A MÁR-nál megismertek érvényesek!)

Fick I. törvénye:

$$d_i = -D_i \cdot \frac{\partial c_i}{\partial x}$$

8.5. ábra. A diffúziós áramsűrűségek közelítése.

A komponens tömegré, a kémiai reakció miatt, nem érvényesül megmaradás, ezt a mérlegegyenletekben a q_i (térfogati) forrassűrűséggel vesszük figyelembe. Ennek leírására a fizikai kémia reakció kinetika fejezetében tanultak érvényesek. A tanultak összefoglalását illusztrálja a 8.6. ábra. A mérlegegyenletek ezen kiegészítését *konstitutív egyenleteknek* is nevezik. Az i komponens osztály forrassűrűségét a sztöchiometriai koefficienssel ($\nu_{j,i}$) súlyozott, azon kémiai reakciók sebességeinek összege adja, amely reakciókban az adott komponens részt vesz (fogyó komponensre negatív, keletkező komponensre pozitív). A $H_{1,i}$ azon kémiai reakciók kódhalmaza, amely reakciókban az i komponens részt vesz. Az r_i az i irreverzibilis reakció reakciósebessége (lásd 3. fejezet), amely általánosan a fogyó komponens koncentrációk hatvány függvényével fejezhető ki (az egyensúlyi reakció két ellentétes irányú irreverzibilis reakció eredőjeként értelmezhető). A $H_{2,i}$ az i reakcióban fogyó komponensek kód halmaza. A k_i az Arrhenius egyenlettel számolható reakció kinetikai konstans.

forrás: $q_i = \sum_{j \in H_{1,i}} \nu_{j,i} \cdot r_j$

kémiai reakciók kódhalmaza

reakciósebesség: $r_i = k_i \cdot \prod_{j \in H_{2,i}} c_j^{n_{i,j}}$

fogyó komponensek kódhalmaza

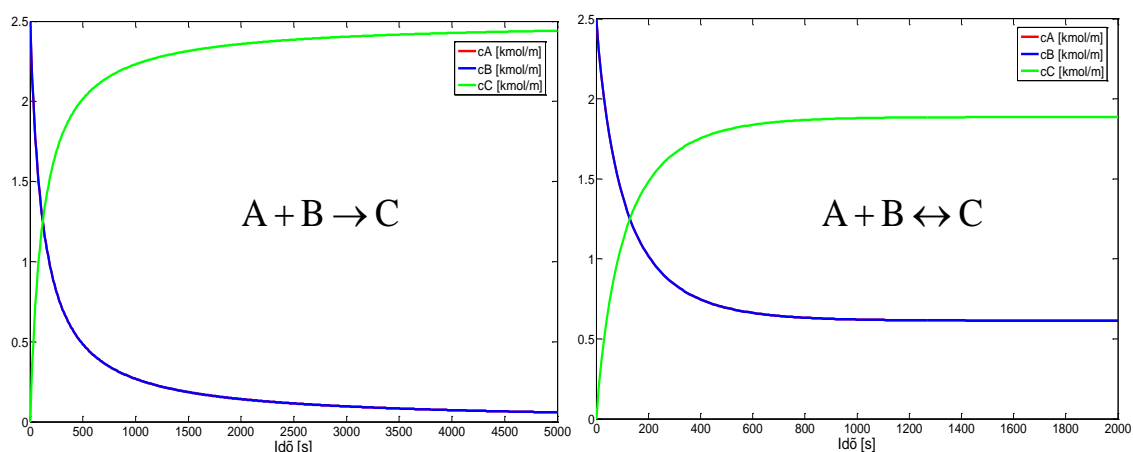
8.6. ábra. Konstitutív egyenletek.

A fázis tömegré, az $(n-1)$ komponens tömegré, az energiára és az impulzusra (ez három egyenletet jelent) vonatkozó mérlegegyenletek, a termikus áram és nyomás tenzor számítását adó közelítések, valamint a komponens forrassűrűségek konstitutív egyenletei a TKR autonóm modelljét adják.

8.2. Tipikus reakciók

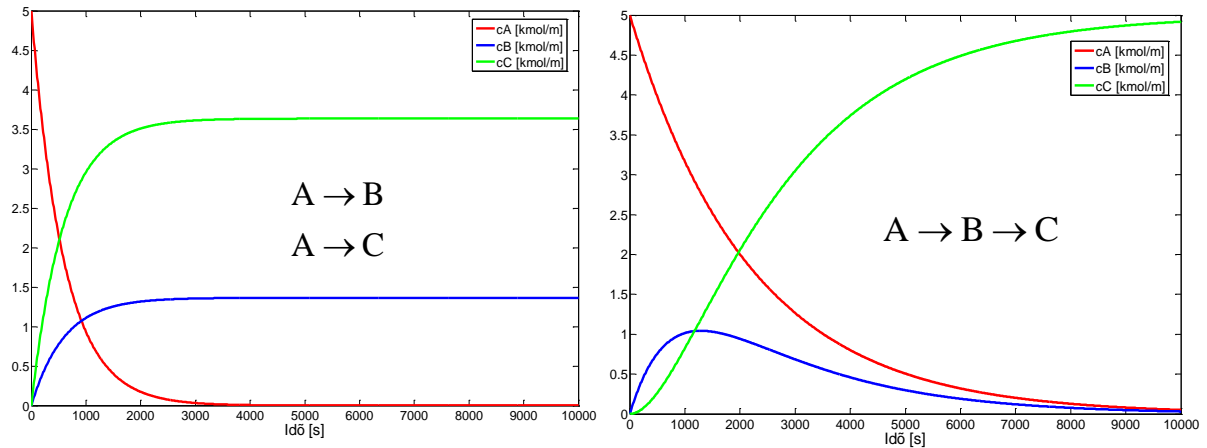
A kémiai reakciók vizsgálatának legegyszerűbb módja, ha azokat temperált kevert lombikban végezzük. Ekkor a modell a komponensmérlegekre szűkül, és a kémiai reakciókon kívül, csak a lokális megváltozást kell figyelembe vennünk (koncentrált paraméterű modell).

A 8.7. ábrán egy nem egyensúlyi és egy egyensúlyi másodrendű reakció időbeli lefutása látható. A kiindulási komponensek kezdeti koncentrációi megegyeznek, és a sztöchiometriai arányok miatt, minden időben egyenlők maradnak. Az irreverzibilis reakciónál a fogyó komponensek idővel teljesen elfogynak, az egyensúlyi reakciónál a komponensek stacioner koncentráció értékeiből kiszámítható az egyensúlyi állandó értéke.



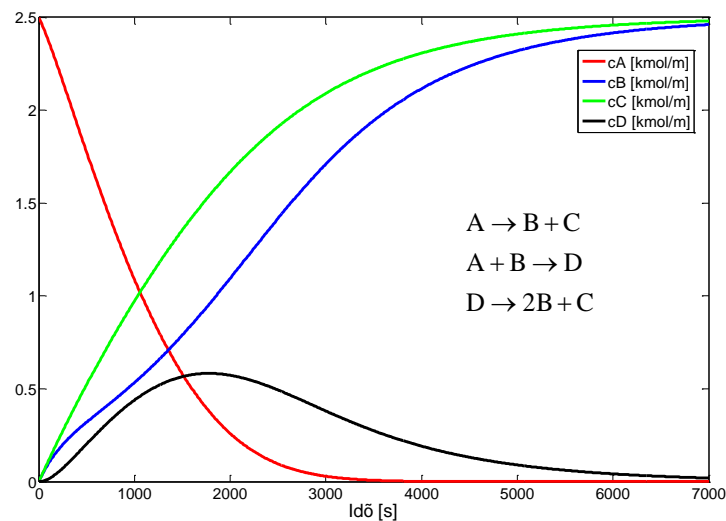
8.7. ábra. Másodrendű irreverzibilis és reverzibilis reakciók.

A 8.8. ábra a párhuzamos és soros reakciók példája. Az utóbbira jellemző a közbülső komponens maximális koncentrációja. Ha ez a termék, akkor a reaktortervezésnél, a maximális koncentrációhoz tartozó idő a tartózkodási idő.

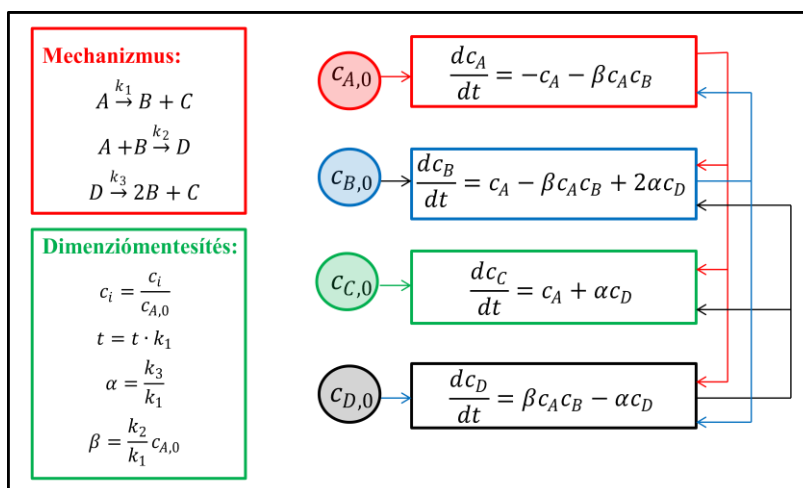


8.8. ábra. Kompetitív és konszekutív reakciók.

A 8.9. ábrán egy összetett reakció mechanizmus szerinti példa látható. Alapvetően itt az A komponens bomlik B és C komponensekre, de a keletkező B a második és harmadik reakción keresztül gyorsítja a bomlást (autokatalitikus hatás). A 8.10. ábra dimenziómentesítés után a szimulációs algoritmus kialakítását szemlélteti.



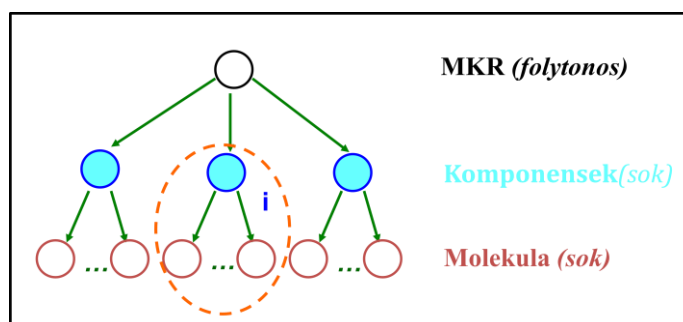
8.9. ábra. Összetett reakciók.



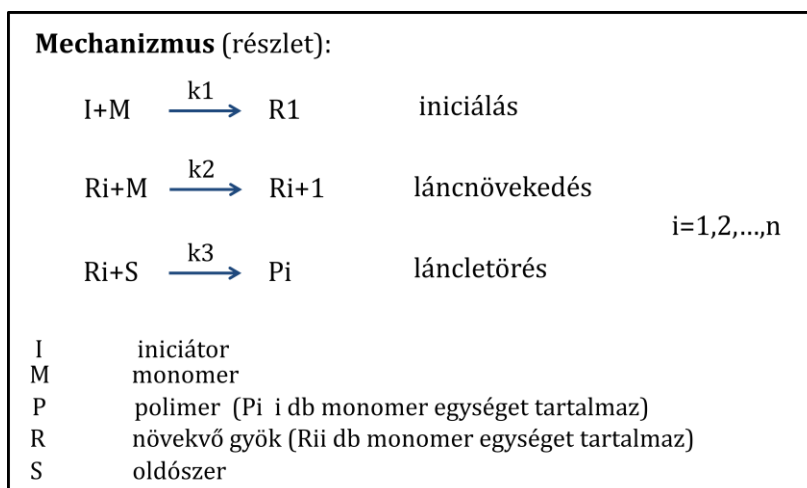
8.10. ábra. Algoritmus az összetett reakciók számítására.

8.3. Multi komponensű rendszerek

Multi komponensű rendszerek (MKR) azok, amelyeknél olyan sok komponens van, hogy a komponens osztályokat is érdemes folytonosként kezelni. Itt a 6.6. fejezetben bemutatott módszert használhatjuk. Az MKR struktúráját a 8.11. ábra szemlélteti. A MKR modellalkotását egy egyszerű polimerizációs folyamat modellalkotásával illusztráljuk.



8.11. ábra. Az MKR struktúrája.



8.12. ábra. Reakció mechanizmus.

Tekintsünk egy kevert laboratóriumi reaktort (akár egy temperált lombikot), amelyben a polimerizációs folyamatok a 8.12. ábrán látható mechanizmus szerint mennek végbe. A *polimer* monomer egységekből felépülő makromolekula. A növekvő képes polimer a *gyök*, amely *monomerrel* reagálva a *láncnövekedési reakcióban* növekszik. Többek között az oldószer molekulákkal is ütközve a gyök elveszíti aktivitását és a szűkebb értelemben vett polimert adja (lezárt polimer lánc). A legkisebb méretű gyök az *inicializálási reakcióban* keletkezik. Minden reakció legyen másodrendű. A mechanizmus alapján a komponens forrassűrűségeket a 8.13. ábrán foglaltuk össze.

A rendszer egyszerűsége miatt a komponens mérlegek a forrást és a lokális megváltozást tartalmazzák. A komponensek száma $2n+3$, ami azt jelenti, hogy egy $2n+3$ egyenletből álló közönséges differenciálegyenlet rendszert kell megoldani, kezdeti feltételekkel. Az állapotváltozók csak az idő függvényei. Ez a komponensek diszkrét rendszere. Ezzel kapcsolatban két probléma merül fel, egyrészt az n száma általában nem ismert és időben is változik, valamint az értéke igen nagy is lehet. Ilyen esetben célszerű a sorszám (itt inkább *polimerizációs fokszám*nak hívjuk) folytonossá tétele. Ebből a szempontból a komponensek két csoportba sorolhatók az $i \in \{I, M, S\}$ egyszerű kémiai komponensek osztályába, ill. az összetett kémiai komponensek osztályába ($\{R_i\}_i, \{P_i\}_i$).

$$\begin{aligned}q_I &= k_1 \cdot c_I \cdot c_M \\q_M &= -k_1 \cdot c_I \cdot c_M - k_2 \cdot c_M \cdot \sum_{i=1}^n c_{R_i} \\q_S &= -k_3 \cdot c_S \cdot \sum_{i=1}^n c_{R_i} \\q_{R_1} &= k_1 \cdot c_I \cdot c_M - k_2 \cdot c_{R_1} \cdot c_M - k_3 \cdot c_{R_1} \cdot c_S \\q_{R_i} &= k_2 \cdot c_M (c_{R_{i-1}} - c_{R_i}) - k_3 \cdot c_{R_i} \cdot c_S \quad i = 2, 3, \dots, n \\q_{P_i} &= k_3 \cdot c_{R_i} \cdot c_S \quad i = 2, 3, \dots, n\end{aligned}$$

8.13. ábra. Komponens forrásúrságok.

Az összetett komponenseket az összetartozó komponensek összes koncentrációjával ($c_P(t)$, $c_R(t)$), ill. a csoporton belül a polimerizációs fokszám szerinti eloszlás sűrűségfüggvényével ($\varphi_P(t, y)$, ill. $\varphi_R(t, y)$) jellemezzük. A diszkrét és a folytonos rendszerbeli koncentrációk között az alábbi összefüggések érvényesek:

$$\sum_{i=k}^m c_{P_i} = c_P \int_k^m \varphi_P(y) dy$$

$$\sum_{i=k}^m c_{R_i} = c_R \int_k^m \varphi_R(y) dy$$

ahol $m > k$.

A speciális folytonos rendszereknél bemutatott módszerrel, degresszív differenciákat alkalmazva, az összetett komponens osztályokra vonatkozó $2n$ db közösleges differenciálegyenlet helyett az alábbi két parciális differenciál egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial(c_P \varphi_P)}{\partial t} = k_3 c_S c_R \varphi_R$$

$$\frac{\partial(c_R \varphi_R)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (k_2 c_M c_R \varphi_R) = k_1 c_I c_M \delta(y-1) - k_3 c_S c_R \varphi_R$$

A második egyenletben Dirac-delta függvény szerepel, jelezve azt, hogy az iniciálás során R_I gyök keletkezik (egy monomer molekulából álló gyök). A diszkrét rendszer $2n+3$ egyenlete helyett, a folytonos leírásban öt egyenlet szerepel (igaz ebből kettő parciális DE). A Dirac-delta eliminálható a leírásból és y szerinti kezdeti feltétellel alakítható, ha a mérlegegyenletet az $y=1$ „körül” integráljuk:

$$\frac{\partial(c_R \varphi_R)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (k_2 c_M c_R \varphi_R) = -k_3 c_S c_R \varphi_R$$

$$\varphi_R(1) = \frac{k_1 c_I}{k_2 c_R}$$

Ezek alapján a teljes folytonos modellt a 8.14. ábrán foglaltuk össze. A c_P és c_R összes koncentrációkra vonatkozó mérlegeket, a parciális differenciálegyenletek y teljes értelmezési tartományra való integrálásával kapjuk. Így a modell öt közönséges és két parciális differenciálegyenletet tartalmaz, amely a kezdeti és peremfeltételekkel numerikusan (pl. y szerinti diszkretizálással) megoldható.

$$\frac{dc_i}{dt} = q_i, \quad i \in \{I, M, P, R, S\}$$
$$q_I = -k_1 \cdot c_I \cdot c_M$$
$$q_M = -k_1 \cdot c_I \cdot c_M - k_2 \cdot c_M \cdot c_R$$
$$q_S = -k_3 \cdot c_S \cdot c_R$$
$$q_R = k_1 \cdot c_I \cdot c_M - k_3 \cdot c_S \cdot c_R$$
$$q_P = k_3 \cdot c_S \cdot c_R$$
$$\frac{\partial(c_P \cdot \varphi_P)}{\partial t} = k_3 \cdot c_S \cdot c_R \cdot \varphi_R$$
$$\frac{\partial(c_R \cdot \varphi_R)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (k_2 \cdot c_M \cdot c_R \cdot \varphi_R) = -k_3 \cdot c_S \cdot c_R \cdot \varphi_R$$
$$t > 0, \quad y \in (1, n)$$
$$\varphi_R(t, 1) = \frac{k_1 \cdot c_I}{k_2 \cdot c_R},$$
$$\varphi_R(0, y) = \varphi_{R,0}(y), \quad \varphi_P(0, y) = \varphi_{P,0}(y), \quad c_i(0) = c_{i,0}, \quad i \in \{I, M, P, R, S\}$$

8.14. ábra. A polimerizáló reaktor folytonos modellje.

Ezt a folytonos modellt tekinthetjük egy mikroszintű leírásnak is, amely alapján értelmezhetjük a kisebb információ tartalmú makroszintű modellt. A rendszer szintű változók a polimerizáció szakirodalmában, az eloszlások különböző momentumai. Egy zárt formában megadott sűrűségfüggvény annyi számú momentummal egyenértékű, ahány paramétere van a sűrűségfüggvénynek. Például a normális eloszlásnak két paramétere van (az átlag és a szórás) ezért ennek sűrűség függvényét az első és a második momentum megadásával is helyettesíthetjük.

Egy tetszőleges eloszlás elvileg végtelen számú momentummal ekvivalens, mégis azt mondhatjuk, hogy a gyakorlatban néhány momentum ismerete már jó közelítést jelent. Definiáljuk tehát a rendszerszintű változókat az alábbiak szerint:

$$\mu_{i,m} = \mathfrak{I}_y(y^m \varphi_i), \quad i \in \{P, R\}, \quad m = 1, 2, \dots$$

Célszerű annyi momentumot definiálni, amellyel a sűrűségfüggvények megfelelő pontossággal közelíthetők. A polimer eloszlásra vonatkozó mérleget az y^m -mel szorozva, majd y szerint integrálva a teljes értelmezési tartománya felett, az integrálás és az időszerinti deriválás sorrendjét felcserélve (megtehető, mert független változóról van szó) az m -ik momentumra vonatkozó mérleget kapjuk (8.15. ábra első sora). Ebben az m -ik momentum megváltozásának számításához a koncentrációkon kívül csupán az m -ik momentum szükséges, azaz ez az egyenlet a többi momentumtól függetlenül kezelhető. Ugyanez igaz a gyökök első momentumára is, a második momentumtól kezdődően pedig az m -ik momentum mérlegben az $(m-1)$ -ik momentum szerepel. (Az integrálásnál a parciális integrálok módszerét használhatjuk.) Ez azt jelenti, hogy bármennyi is az m értéke, a koncentrációk ismeretében a 8.15. ábrán látható momentum mérlegek zártak, nincs további információátviteli probléma. A két parciális differenciálegyenlet helyett $2m$ közösleges differenciálegyenlet adódik. A makroszintű modell a mikroszintű redukált formájának is tekinthető.

$$\frac{\partial(c_P \cdot \mu_{P,m})}{\partial t} = k_3 \cdot c_S \cdot c_R \cdot \mu_{R,m}; \quad m = 1, 2, \dots$$

$$\frac{\partial(c_R \cdot \mu_{R,1})}{\partial t} = k_I \cdot c_I \cdot c_M + k_2 \cdot c_M \cdot c_R - k_3 \cdot c_S \cdot c_R \cdot \mu_{R,1}$$

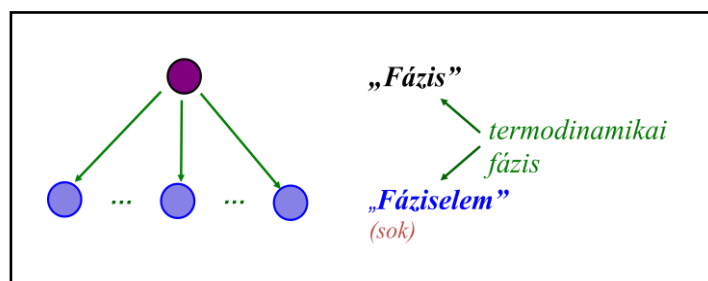
$$\frac{\partial(c_R \cdot \mu_{R,m})}{\partial t} = k_I \cdot c_I \cdot c_M + m \cdot k_2 \cdot c_M \cdot c_R \cdot \mu_{R,m-1} - k_3 \cdot c_S \cdot c_R \cdot \mu_{R,m}; \quad m = 2, 3, \dots$$

8.15. ábra. Momentum mérlegek (makroszint).

9. Fáziselemekből álló rendszerek

A molekulákból álló rendszerekre, a termodinamikai fázisra a termodinamika, a transzport egyenletek, mérnöki szemmel pedig a kibővített Damköhler egyenletek adják az adekvát ismereteket. A fáziselemekből álló rendszerek (FÁR), mint egy önálló új hierarchia szint bevezetése azért szükséges, mert a különböző fázisok nem egy homogén tömbként áramlanak keresztül a különböző berendezésekben. Bár az áramlástan, a hidrodinamika ismeretkörei is erre vonatkoznak, de ez nem magyarázza meg teljes mértékben azt, hogy a lombikban lejátszódó kémiai reakció, miért „torzul” az ipari méretű reaktorokban. Ez a vegyipari műveletten nehezen megválaszolható méretnövelési problémaköréhez vezet. Az átfogó szemléletet a hierarchikus modellezés adja a FÁR értelmezésén keresztül.

A berendezésben áramló fázis elemei a *fáziselemek*, termodinamikai értelemben mind a fáziselem, mind a FÁR egyaránt termodinamikai fázis. A művelettenban ez utóbbit *diszpergált fázisnak* is nevezik, abban az esetben, ha a fáziselemek fizikailag is elkülönülnek egymástól, azaz egy elem individuálisan is megragadható. Ilyenek például a buborékok (gáz fázis elemei), cseppek (folyadék), ill. a szemcsék (szilárd) is. Ugyanakkor FÁR-ról beszélhetünk akkor is, ha például egy folyadékfázis áramlik egy csőreaktorban. Ennél az egyedi folyadék fáziselemek nem detektálhatók, a hatásuk eredménye viszont kikövetkeztethető. A FÁR struktúrája a 9.1. ábrán látható, ami teljesen hasonló a MÁR struktúrához, azzal a kiegészítéssel, hogy az elemszámban sok nagyságrendi különbség van.



9.1. ábra. A FÁR struktúrája.

9.1. A FÁR modell generálása

Ennek a fejezetnek a lényegi tartalmát a folytonos rendszerek bemutatásánál egy esettanulmány keretében (6.4. fejezet) már tárgyaltuk. A fáziselemek modelljét a 9.2. ábra mutatja. A külső tulajdonságok gyakran a geometriai tér koordinátái, a belső tulajdonságok pedig az elemek állapotváltozói. Az összefüggések a fázistér (*Vigyázat: a fázistér és a fázis két különböző fogalom, nincs közük egymáshoz!*) koordinátáinak az időbeli változásait definiálják. A FÁR-t a T_z fázisterében definiáljuk az elemszámsűrűséggel, amely változására differenciális mérlegegyenlet írható fel (9.3. ábra). Ez adja a FÁR mikroszintű modelljét. A folytonos rendszerek értelmezésénél láttuk, hogy adott keretek között ez adja a legrészletesebb leírást a rendszerről, viszont „információ éhsége” olyan nagy, hogy az a közvetlen gyakorlati alkalmazását szinte lehetetlenné teszi. Ezért ezt a modellt a kisebb információ tartalmú makroszintű modellek generálására használjuk.

Változók:	
$x \in \{x_1, \dots\}$	külső
$y \in \{V, c \dots\}$	belső
Összefüggések:	
$\frac{dx}{dt} = v_x(x, y)$	hidrodinamika
$\frac{dy}{dt} = v_y(y)$	kinetika

9.2. ábra. Az elemek modellje.

Elemszám differenciális mérleg:
$z = x \cup y, \quad T_z, \quad \Psi_z(t, z)$
$\frac{\partial \Psi_z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (v_z \Psi_z) = q_z^S$
fáziselemek „ütközési integrálja”

9.3. ábra. A mikroszintű modell.

A makroszintű változókat az elemek extenzív tulajdonságait felhasználva definiáljuk (9.4. ábra). A $\varphi_i(y)$ a fáziselem egy extenzív tulajdonsága a T_z fázistérben, a $\Phi_i(t, u)$ makroszintű változó pedig a megfelelő extenzív tulajdonság T_u térbeli sűrűsége. A fázistömegre átlagolt sebesség lesz a fázis sebessége. A folytonos rendszereknél bemutatott átalakítással előállítjuk a makroszintű modellt (9.4. ábra), amely azonban csak a 9.5. ábrán kiemelt információátvitel megoldása után válik autonómmá. Itt kihasználjuk az extenzív mennyiségekre vonatkozó megmaradást.

Rendszer tulajdonságok:

$$\Phi_i = \mathfrak{J}_{h \in P(y)}(\varphi_i(y) \Psi_z)$$

Fáziselem extenzív tulajdonsága

Mérlegegyenlet:

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial u}(\hat{v}_u \Phi_i) + \frac{\partial}{\partial u}(\mathfrak{J}_h(\varphi_i \tilde{v}_u \Psi_z)) = \mathfrak{J}_h(v_{\varphi_i} \Psi_z) + \mathfrak{J}_h(\varphi_i q_z^S)$$

Átlagsebesség:

$$\hat{v}_u = \frac{\mathfrak{J}_h(\varphi_i v_u \Psi_z)}{\mathfrak{J}_h(\varphi_i \Psi_z)}$$

Sebesség ingadozás:

$$\tilde{v}_u(t, z) = v_u(t, z) - \hat{v}_u(t, x)$$

9.4. ábra. Makroszintű modell

φ_i **extenzív megmaradás:** $\mathfrak{J}_h \cdot (\varphi_i \cdot q_z) = 0$

Probléma:

$\frac{\partial}{\partial u} \mathfrak{J}_h(\tilde{v}_u \cdot \varphi_i \cdot \Psi_z) = ?$ 1. Hidrodinamika - **KEVEREDÉS**

$\mathfrak{J}_h(v_{\varphi_i} \cdot \Psi_z) = ?$ 2. Törvényszerűségek varianciája
MÉRETNÖVEELÉS

9.5. ábra. Információátviteli problémák

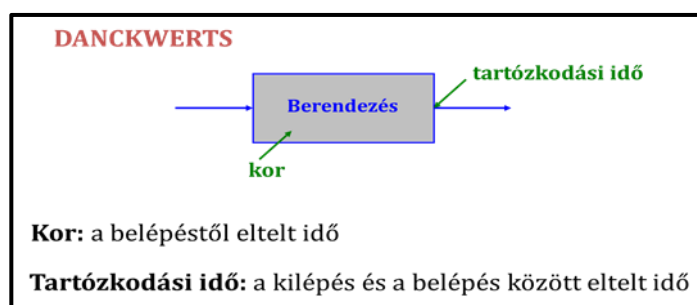
Ezen túl azonban két súlyosabb probléma is megmarad. Az első problémacsoport: a fáziselem mozgási sebessége a T_u térben eltér a fázis átlag sebességétől. Ezt az információátviteli problémát a következő fejezetben fejtjük ki. A második probléma csoport: a fáziselemben lejátszódó jelenség, hogyan írható le a T_u -térben? Ez tartalmazza a méretnövelés problémájának megoldását.

9.2. Hidrodinamika

Ebben a fejezetben először megteremtjük a kapcsolatot a művelettanban tanult tartózkodási időeloszlások és az elemszámsűrűség között, majd ismertetjük a gyakorlatban használt legfontosabb hidrodinamikai modelleket.

9.2.1. Tartózkodási idő és elemszámsűrűség

A műveleti áramlástanban *Danckwerts* vezette be a fáziselemek *kora* és *tartózkodási ideje* fogalmakat (9.6. ábra). Egy fáziselem korának a berendezésbe való belépésétől eltelt időt nevezte, míg a tartózkodási idő a berendezésben való tartózkodás ideje. Egy adott időben a berendezésben tartózkodó elemek kora más és más lehet, s ugyanígy mindegyik éppen kilépő elem tartózkodási ideje is más és más lehet. Mindkét tulajdonság valószínűségi változó. A valószínűségi változók az eloszlásuk sűrűség-, vagy eloszlásfüggvényeivel jellemezhetők. A koreloszlásra az $I(t)$ sűrűségfüggvény használható, míg a tartózkodási idő eloszlására mind a sűrűségfüggvényt ($E(t)$) mind az eloszlásfüggvényt ($F(t)$) egyaránt használják (9.7. ábra). Az eloszlás függvények kapcsolatát az ugyancsak valószínűségi jelleget is hordozó elemszámsűrűséggel a 9.8. ábrán látható értelmezés teremti meg.



9.6. ábra. Kor és tartózkodási idő

Koreloszlás: $I(t)$ sűrűség függvény

Tartózkodási időeloszlás: $E(t)$ sűrűség függvény

$F(t)$ eloszlás függvény

$$F(t) = \int_0^t E(\tau) d\tau$$

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = 1$$

9.7. ábra. A valószínűségi eloszlás függvények.

A berendezésben lévő fázis elemeket a korokkal, a tartózkodási idejükkel és a térfogatukkal jellemezzük, amelyek egyformán belső tulajdonságoknak tekinthetők. A kor is, a tartózkodási idő is az idővel együtt halad, a térfogatokat pedig tekintsük változatlanoknak. A koreloszlás sűrűségfüggvényét a tartózkodási idő és a térfogat eliminálásával (integrálás az értelmezési tartomány felett) majd normálással kapjuk. Ugyanígy a tartózkodási idő sűrűségfüggvényét a kor és a térfogat eliminálásával majd normálással kapjuk meg. Ebből kiindulva, a koreloszlásra vonatkozó mérleg a 9.9. ábrán látható, amely alapján értelmezhetjük a kor és a tartózkodási idő közötti, művelettanban jól ismert összefüggést. Megjegyezzük, hogy a tartózkodási idő sűrűségfüggvénye nem más, mint a Dirac-delta gerjesztő függvényre adott válaszfüggvény (az irányításelméletben ezt *súlyfüggvénynek* nevezik [58]). Az eloszlásfüggvénye pedig az egységugrás függvényre adott válasz (irányításelméletben ez az *átmeneti függvényt* jelenti).

x = 0 (legyen!)

$y = \{\alpha, \lambda, V\}$

kor
↑ tartózkodási idő
térfogat

Elem modell:

$$\frac{d\alpha}{dt} = 1 \quad \frac{d\lambda}{dt} = 1 \quad \frac{dV}{dt} = 0$$

Mérleg:
$$\frac{\partial \Psi_z}{\partial t} + \frac{\partial \Psi_z}{\partial \alpha} + \frac{\partial \Psi_z}{\partial \lambda} = q_z$$

$$I(\alpha) = \frac{\mathfrak{I}_{\{\lambda, V\}}(V \cdot \psi_z)}{\mathfrak{I}_z(V \cdot \psi_z)} \quad E(\lambda) = \frac{\mathfrak{I}_{\{\alpha, V\}}(V \cdot \psi_z)}{\mathfrak{I}_z(V \cdot \psi_z)}$$

Térfogat: $V_R = \mathfrak{I}_z(V \cdot \psi_z)$

Formális átalakítás után:

$$\mathfrak{I}_{\{V, \lambda\}}(V \cdot q_z) = \underbrace{B \cdot \delta(\alpha)}_{\text{betáplálás}} - \underbrace{B \cdot E(\alpha)}_{\text{elvétel}}$$

9.8. ábra. Kapcsolat az elemszám sűrűséggel.

Mérleg koreloszlásra:

$$\frac{\partial(V_R \cdot I)}{\partial t} + \frac{\partial(V_R \cdot I)}{\partial \alpha} = B \cdot (\delta(\alpha) - E(\alpha))$$

$$\alpha = 0 \quad I = 0$$

$$t = t_0 \quad I = I(t_0, \alpha)$$

Stacioner esetre, integrálás után:

$$\frac{V_R}{B} \cdot I(\alpha) = 1 - F(\alpha)$$

Dimenziómentes idő: $\Theta = \frac{t}{\bar{t}}$

Átlagos tartózkodási idő: $\bar{t} = \frac{V_R}{B}$

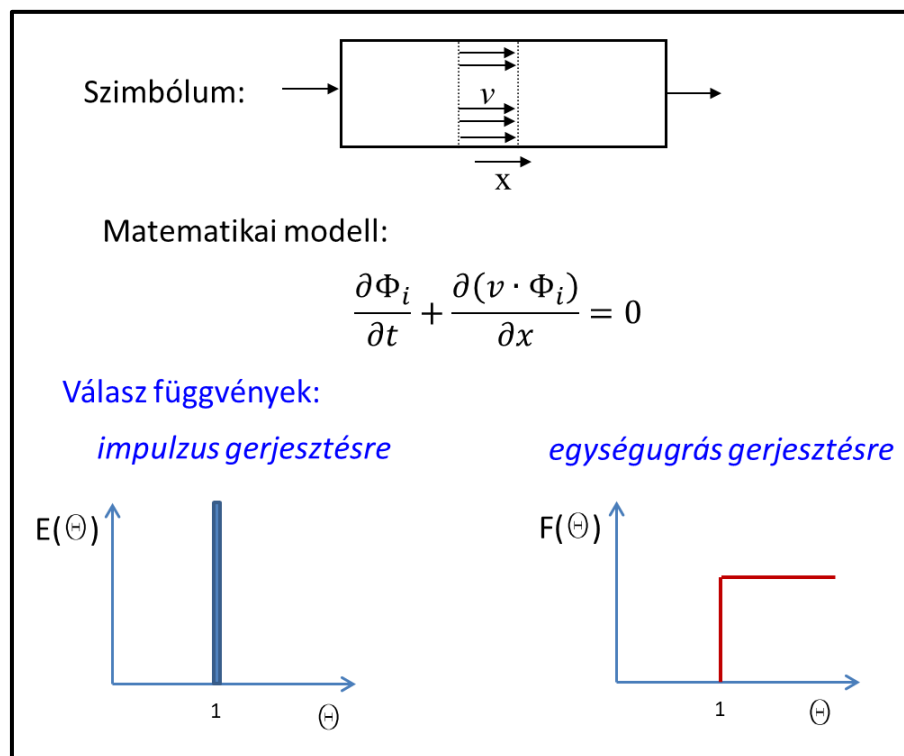
$$I(\Theta) = 1 - F(\Theta)$$

9.9. ábra. Mérleg a koreloszlásra.

9.2.2. Hidrodinamikai modellek

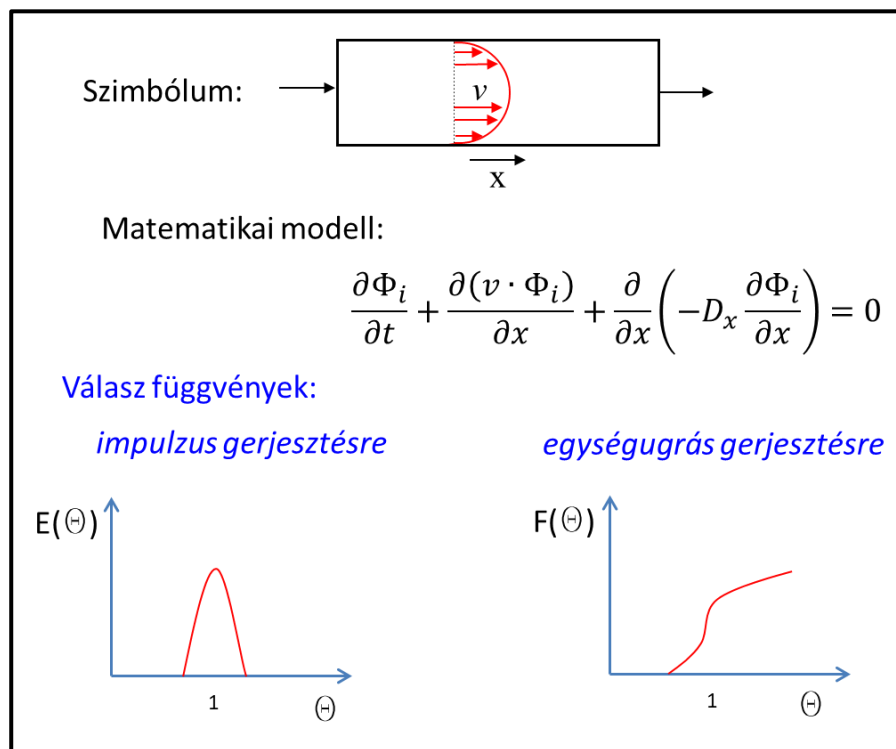
A fáziselemek sebességének a fázis átlagsebességétől való eltérése a konvektív transzporthoz képest egy újabb transzport jelenséget okoz, a konduktív transzportot. Az itt jelentkező információátviteli probléma megoldását, az ún. *hidrodinamikai modellek* jelentik.

A csőszerű berendezéseken való átáramlás legegyszerűbb modellje az *ideális kifolyási modell*, amelyet a gépészeti szakirodalomban általában „*dugattyú áramlásnak*” nevezik. A dinamikus modellt a 9.10. ábra tartalmazza. Itt az a feltétel, hogy a fáziselemek sebességei azonosak és az természetesen egyenlő a fázis átlag sebességével is, így a konduktív transzport zérus. A Dirac-delta gerjesztésre a válaszfüggvény a tartózkodási időeloszlás sűrűségfüggvénye, amely ennél a modellenél a tartózkodási idővel eltolt Dirac-delta (az időt általában az átlagos tartózkodási idő mértékében mérjük, ill. dimenziómentesítjük). Ugyanígy az eloszlásfüggvénye pedig az egységvel eltolt egységugrás. A modell két tagja a konvektív áramot és a lokális változást méri. A valós rendszert ez a modell akkor közelíti a legjobban, ha abban az áramlás *turbulens*.



9.10. ábra. Az ideális kifolyási modell.

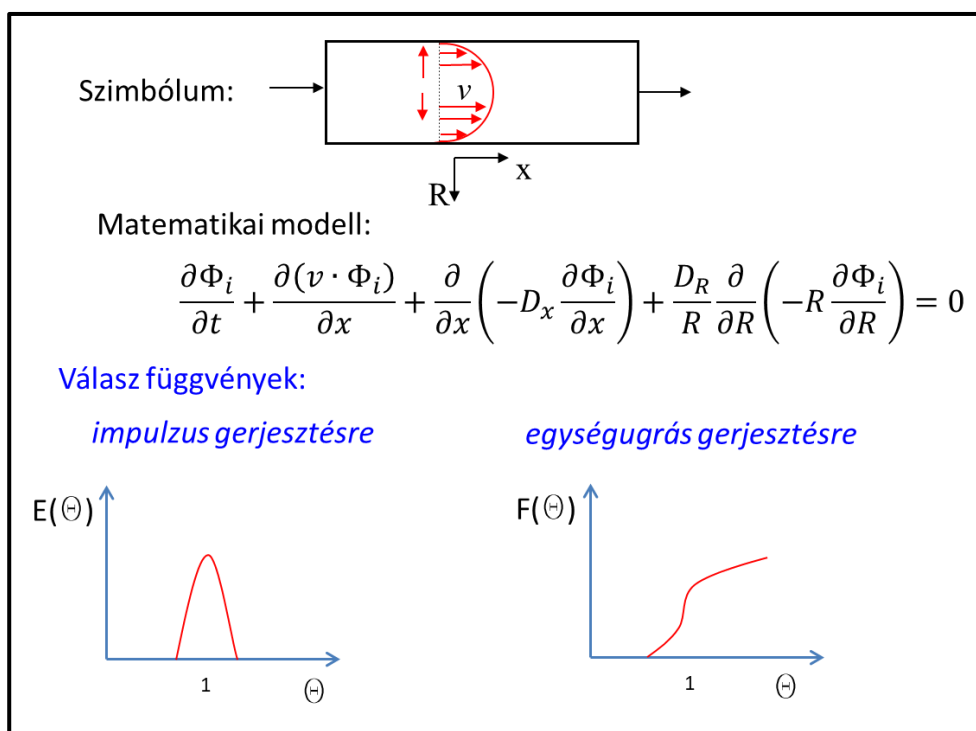
Minél nagyobb a fáziselemek sebességeinek eltérése egymástól és a fázis átlagsebességétől (pl. *lamináris áramlás* esetén), annál kevésbé használható az ideális kifolyási modell. Itt analóg a helyzet a molekulákból álló rendszerekkel, amelynél az ilyen típusú információátviteli problémát a Fick I. törvényt alkalmazva oldjuk meg. A konduktív áramot itt is hasonlóan közelíthetjük, s ez vezet az *axiális keveredési modellhez* (9.11. ábra).



9.11. ábra. Az axiális keveredés modellje.

Ez sokkal „hatékonyabb”, mint a molekuláris diffúzió (a fáziselemek 10^{23} nagyságrendű molekulákból állnak, a fáziselemek száma sok nagyságrenddel kisebb), ami azt jelenti, hogy a D_x *axiális keveredési tényező* értéke több nagyságrenddel nagyobb, mint a diffúziós állandó értéke. A modell a konduktív áramot leíró taggal bővül. Konduktív áram lehet a fáziselemben és a FÁR-ban egyaránt, a rendszer szintű áramot azonban az előbbi kevésbé befolyásolja. Ha igen, azt az információátvitel során kell figyelembe venni. A gyorsabb fáziselemek tartózkodási ideje kisebb, a lassabbaké pedig nagyobb, ezért a sűrűségfüggvény a Dirac deltához képest „elkenődik”.

A fáziselemek keveredésének jelensége a geometriai tér minden irányában fennáll, ezért egy részletesebb modellben ez is figyelembe vehető. Szimmetria viszonyok miatt a csőszerű berendezésnél henger koordináta rendszer használata célszerű (a koordináta rendszerek egymásba való átalakíthatóságát később mutatjuk be) amelyben az **axiális és radiális keveredési modell** a 9.12. ábrán látható formában definiálható. Az előzőhöz képest a modell a radiális (sugár irányú) keveredési taggal bővül. Nagy hossz/sugár arány mellett az axiális irányú keveredés a jelentősebb. Az előzőhöz képest az eloszlásfüggvényekben minőségi különbség kevésbé észrevehető.

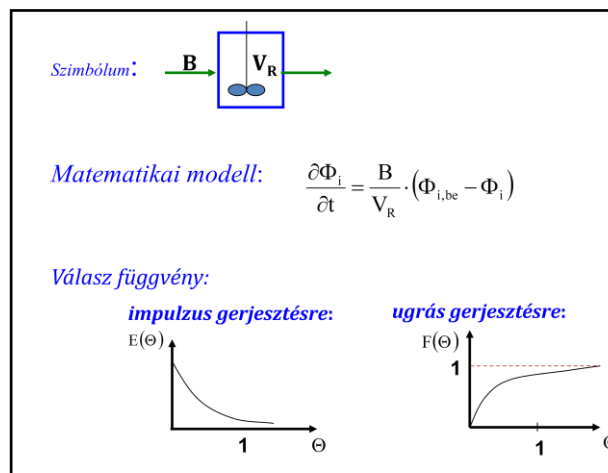


9.12. ábra. Az axiális és radiális keveredés modellje.

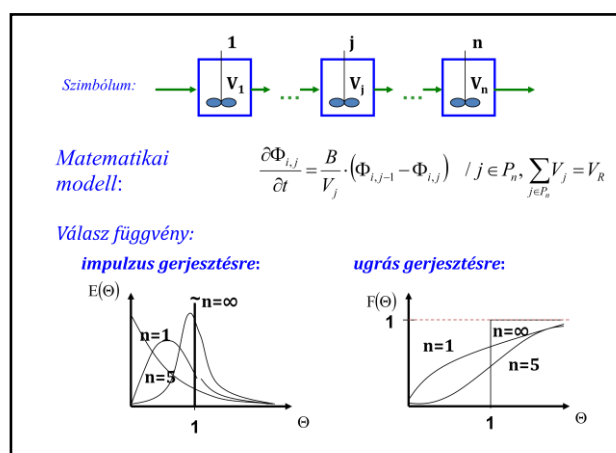
A kevert, tartály alakú berendezésben való átáramlás legegyszerűbb modellje a **tökéletesen kevert üst modell** (9.13. ábra). A tökéletes keveredés azt jelenti, hogy az intenzív tulajdonságok a tér minden pontján egyenlők, így nincs szükség a tér pontjainak megkülönböztetésére (amint korábban láttuk ez egy koncentrált paraméterű modell), az állapotváltozók csak az idő függvényei. Az ideális kifolyási modellhez képest ez is a konvektív áramot (itt forrás) és a lokális megváltozást foglalja magába, a különbség az, hogy előbbi a T_x -tér egy adott pontjára vonatkozó differenciális mérleg, utóbbi pedig a teljes térfogatra vonatkozó (integrált) mérleg. A teljes keverttség miatt a bent lévő

bármelyik, különböző korú fáziselem ugyanolyan valószínűséggel lép ki. A tartózkodási időeloszlás egy exponenciálisan lecsengő függvény (az irányításelméletben egy elsőrendű bemenet kimenet modell súlyfüggvénye).

A térfogat megosztásával és tökéletesen kevert elemek sorba kapcsolásával kapjuk az ún. **kaszkád modellt**, amely a 9.14. ábrán látható. (*Vigyázat:* a hidrodinamikai kaszkád modell, a reaktor kaszkád és az irányításelméleti kaszkád szabályozás különböző fogalmakat takar!)



9.13. ábra. A tökéletesen kevert üst modellje.



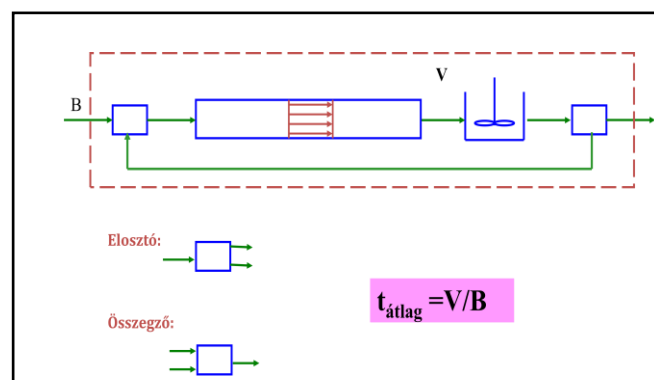
9.14. ábra. Kaszkád modell.

A kaszkád modell paramétere az n kaszkádszám. Az n növelésével az egyes elemek térfogata csökken úgy, hogy az elemek térfogatainak összege mindig a kevert egység térfogatával egyenlő. Az eloszlás függvényeket tekintve, az $n=1$ eset a tökéletesen kevert

üst modelljét adja, az n -nel végtelenhez tartva (ekkor egy egység térfogata zérus lesz) pedig az ideális kifolyás modelljét közelítjük. Közepes nagyságú n értékek esetén az axiális keveredési modellhez hasonlítható. Sőt a sűrűség függvények illesztésével, az n és a D_{ax} paraméterek között függvénykapcsolat is létesíthető.

A modellek közötti speciális összefüggés a numerikus számítások szférájában is kimutatható. Az ideális kifolyási modell egy parciális differenciálegyenlet. Ha ezt numerikusan akarjuk megoldani, az egyik lehetőség az, hogy az x koordináta mentén diszkretizálunk, s a differenciális forma éppen egy kaszkád modell lesz. Ezek a kapcsolatok a kaszkád modell rugalmas alkalmazhatóságára is rámutatnak.

A fenti modellek, mint elemek összetett áramlástani modellek leképezését is lehetővé teszik. A 9.15. ábrán példaként egy összetett hidrodinamikai modell sémája látható. Ennél a belépő fázis egy térfogat nélküli keverőbe (összegző) kerül, amely a visszacirkuláló áramot tökéletesen (zérus idő alatt) hozzákeveri a belépőhöz. A struktúrában egy sorba kapcsolt ideális kifolyási rész, egy tökéletesen kevert üst és végül egy térfogat nélküli osztó következik. Az osztóból a belépési tömegárammal (folyadéknál térfogatáram is lehet) megegyező rész a környezetbe kerül, a felesleg pedig visszacirkulál. A tartózkodási időeloszlás sűrűségfüggvényénél a csőben való tartózkodásig (t_1) nincs jel (zérus), majd következik a tökéletesen kevert üstre jellemző lefutás úgy, hogy $k \cdot t_1$ időnként (k egész szám) egyre csökkenő ugrás is megfigyelhető a válaszfüggvényen. Bármilyen is a modell belső szerkezete, és ha nincs holttér, akkor egy átáramló folyadék fázisnál az átlagos tartózkodási idő mindig az össztérfogat és a térfogatáram hányadosa, **a belső cirkuláció nem befolyásolja azt.**



9.15. ábra. Összetett hidrodinamikai modell.

9.2.3. Méretnövelés

A méretnövelés során az áramlási kép is különbözik a két különböző geometriai méretű berendezésben és a fáziselemekben lejátszódó jelenségek (pl. kémiai reakció) is torzulhatnak a FÁR szinten. Erre már Danckwerts is felhívta a figyelmet, a *mikro-* és *makrokeveredés* értelmezésével. Vizsgáljunk egy kevert üst reaktort és tételezzük fel, hogy a fázis elkülönülő fáziselemek formájában áramlik keresztül a reaktoron, azaz a fáziselemek teljesen szegregáltak. Ezt nevezte *makrokeveredésnek* (9.16. ábra, a fázis a fáziselemek szintjén keveredik). A reaktorból kilépő C_1 koncentráció számításához először kiszámíthatjuk, hogy hogyan változik időben a koncentráció egy fáziselemben, majd ezt átlagoljuk a tartózkodási időeloszlás sűrűségfüggvénye szerint. A *mikrokeveredést* ezzel szemben úgy értelmezte, hogy a reaktorban molekuláris szinten teljes a kevertség (9.17. ábra). A reaktorból kilépő C_2 koncentráció ebben az esetben a tökéletesen kevert üst reaktor modelljével számolható. Ha nem homogén lineáris függvénnyel írható le a reakciókinetika, akkor a két koncentrációérték különbözik egymástól. A két szélső eset közötti átmenetet (amely a valós rendszereket jobban közelíti) a *szegregációs fok* bevezetésével értelmezte.

MAKRO KEVEREDÉS (szegregáció):
Keveredés szintje: fáziselem

Koncentráció számítás (CSTR):

Fázis elemben: $\frac{dc}{dt} = -k \cdot c^n \quad t = 0, c(t=0) = c_0$

Megoldás: $c(t)$

Fázis koncentráció (stacioner):

$$C_1 = \int_0^{\infty} c(t) \cdot E(t) dt$$

9.16. ábra. Makro keveredés (Fáziselemek szegregációja).

MIKRO KEVEREDÉS (nincs szegregáció) :
Keveredés szintje: **molekulák**
Koncentráció számítás a reaktorban (CSTR, stationer) :

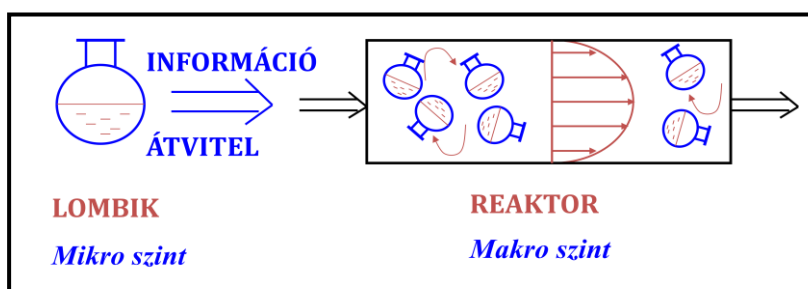
$$\frac{dC_2}{dt} = \frac{B}{V_R} \cdot (c_0 - C_2) - k \cdot C_2^n = 0$$

Különbség : $C_1 \neq C_2$, akkor, ha $n \neq 0$
 $n \neq 1$

Valóság: a kettő között SZEGREGÁCIÓS FOK

9.17. ábra. Mikro keveredés.

A hierarchikus szemlélettel a méretnövelés a következőképpen interpretálható. A reaktor méretnövelése kapcsán tételezzük fel, hogy a reakciókinetikát laboratóriumi mérésekkel (lombikban, molekuláris szintű kevertség) határozzuk meg. A folyadékfázis az ipari reaktorban akár lombik méretű fáziselemek formájában áramlik, amit a 9.18. ábra szemléltet. A hidrodinamikai modellje az ipari reaktornak autonóm feladatként meghatározható.



9.18. ábra. A méretnövelés szemléltetése.

A reakcióval kapcsolatos információátviteli probléma megfogalmazása a 9.19. ábrán látható. A kinetikai törvényszerűség megváltozását az ún. információátviteli tényezővel (χ_c) vesszük figyelembe. A definíció háttérben valójában két művelet sorrendjének felcserélése húzódik meg. A számlálóban a fáziselem koncentrációját először hatványra emeljük (képezzük a reakciósebességet) majd (a fázis szintre) átlagoljuk, a nevezőben a

fáziselem koncentrációját először a (fázis szintre) átlagoljuk (ez lesz a fázis koncentráció), majd hatványra emeljük (képezzük a fázis szintű reakciósebességet). A reakciósebesség képzés és az átlagolás műveleteit cseréljük fel.

Elem és kapcsolati modell:

$$x = \dots \quad \frac{dV}{dt} = 0 \quad \frac{d(V \cdot c)}{dt} = v_{\varphi_i} \equiv v \cdot k \cdot c^n \cdot V$$

$y = \{V, c\}$

Fázistérfogat T_x -térbeli sűrűsége: $\varepsilon = \mathfrak{J}_y(V \cdot \psi_z)$

FÁR koncentráció: $C = \frac{\mathfrak{J}_y(V \cdot c \cdot \psi_z)}{\varepsilon}$

Új tulajdonság: Információátviteli tényező: $\chi_C = \frac{\mathfrak{J}_y(V \cdot c^n \cdot \psi_z)}{\varepsilon \cdot C^n}$

FÁR modell (részlet):

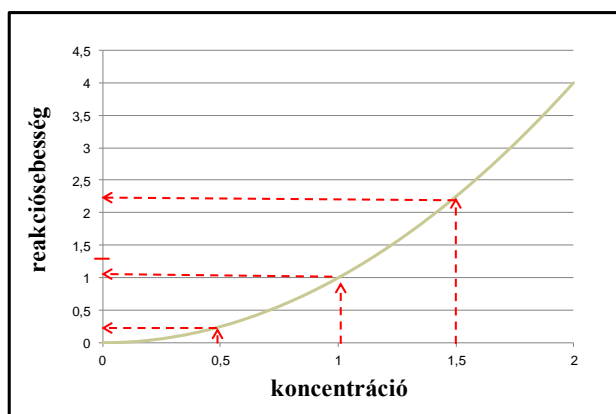
$$\frac{\partial(\varepsilon \cdot C)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(B \cdot C) + \frac{\partial}{\partial x}\left(-D \cdot \varepsilon \cdot \frac{\partial C}{\partial x}\right) = \chi_C \cdot v \cdot \varepsilon \cdot k \cdot C^n$$

9.19. ábra. Méretnövelés hierarchikus szemlélettel.

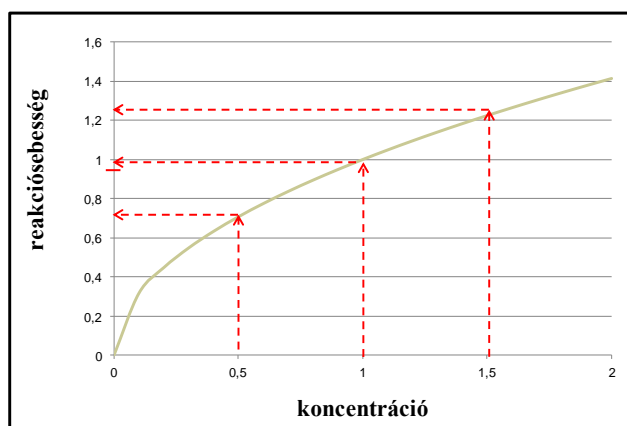
Ha a két operáció közül az egyik nem (homogén) lineáris, akkor az információátviteli tényező egytől különböző lesz. Az is lényeges, hogy nagyobb, vagy kisebb az értéke. Ezt a 9.20-9.21. ábrákkal érzékeltetjük.

Képzünk el két azonos térfogatú fáziselemet, legyenek a koncentrációk 0,5, ill. 1,5 és így az átlag koncentráció 1,0. A lejátszódó kémiai reakció kinetikai állandója legyen 1, azaz a fázis szintű reakciósebesség is egy lesz. Másodrendű reakció esetén a fáziselemekben a reakciósebesség 0,25, ill. 2,25, aminek az átlaga 1,25 lényegesen magasabb az előzőnél. Az információátviteli tényező értéke tehát itt 1,25 (a 9.20. ábrán piros vonallal jelzett). Az ábra alapján érzékelhető az is, hogy ha a szintek között átvendő törvényszerűség (itt a kémiai reakciósebesség) karakterisztikája alulról konvex, az információátviteli tényező értéke egynél nagyobb lesz. Ugyanígy elemezhető a 9.21. ábra is, amelynél a kinetikai kitevő $\frac{1}{2}$, a karakterisztika alulról konkáv, az információátviteli tényező értéke pedig egynél kisebb lesz.

Az információátviteli tényezők becslésére egy későbbi esettanulmány kapcsán térünk majd vissza.



9.20. ábra Reakciósebesség másodrendű reakciónál.



9.21. ábra. Reakciósebesség $\frac{1}{2}$ rendű reakciónál.

9.3. Individuális elemeket tartalmazó FÁR

A rendszerek egy csoportjánál a fáziselemek individuálisan is elkülöníthetők. Ilyen eset például a kristályokból álló szilárd fázis. Illusztráljuk a modellezést egy kristályosító modell egyszerű részletének bemutatásával. Ez egy kétfázisú művelet (szilárd és folyadék fázisok), de itt csak a szilárd fázis leírásával foglalkozunk.

A szilárd fázis modelljét a 9.22. ábrán foglaltuk össze. A fáziselem itt egy szemcse lesz, amelyet az m tömegével (vagy egyéb más jellemző mérettel, belső tulajdonság) jellemezhetünk, a külső tulajdonság halmaz pedig legyen az üres halmaz (pl. tökéletesen

kevert üstről van szó). Folytonos rendszerként írjuk le, ekkor a $T_{\{m\}}$ fázistér egydimenziós, az elemszám sűrűsége vonatkozó mérleg egy parciális differenciálegyenlet. A fázistérbeli konvektív mozgást a szemcse méretének változása adja, kristályosodásnál pozitív, oldódásnál negatív (*kristálynövekedési kinetika*). A v_m függvényre, mint elem modellre a művelettanban, ill. a fizikai kémiában tanultak érvényesek. A függvények kipontozott helyén a folyadék fázis tulajdonságai szerepelnek. A kristálynövekedési kinetikában szerepel az m hatványa (általában a felületet kell figyelembe venni).

Forrásként a gócképződés és a kristályok töredezése, összetapadása (agglomeráció) jelenségeit kell számba venni. A gócképződés egy Dirac-delta függvénnyel vehető figyelembe, mert csak egy adott méretű szemcse válik ki a folyadékfázisból. Két szemcse összetapadása egy konvolúciós integrállal írható le, miközben a szemcseszám felére csökken. A 9.22. ábrán illusztrált modell a rendszer teljes leírása a fázistérben. A kristályosítás vizsgálatában ezt a gyakorlatban is használhatjuk a *szemcseméret eloszlás* számítására. A valószínűségi eloszlás sűrűségfüggvényét az elemszám sűrűségfüggvény normálásával (osztjuk az összes szemcseszámmal) kapjuk meg. Ugyanakkor a töredezés, összetapadás pontos számbavétele itt sem problémamentes, ezért itt is értelme van a kisebb információ tartalmú modellek használatának (makroszintű modell, 9.23. ábra).

A makroszintű modellben a szemcseméret eloszlás helyett, annak néhány momentumát használhatjuk. A nulladik momentum a szemcseszámot, az első és a nulladik momentumok hányadosa az átlagos szemcse tömeget adja, és így tovább. Sőt tört hatványú momentumoknak is van értelme. Gömbszerű szemcséknél a $2/3$. és a nulladik momentumok hányadosa a felülettel arányos. A mérlegegyenlet minden tagját m^n -nel szorozva, majd az m szerint integrálva a teljes értelmezési tartományon a momentumokra vonatkozó mérlegegyenleteket kapjuk. Ha a növekedési kinetikában szereplő β értéke nulla, vagy egy, akkor a momentum mérlegegyenletek zártak lesznek, minden más esetben viszont itt is jelentkezik az információátviteli probléma. A β értéke gyakran $2/3$ (a felülettel arányos), ekkor a momentum mérlegeket zárttá kell tenni. A zárttá tétel részleteit itt nem tárgyaljuk.

Belső tulajdonság: $y = \{m\}, \quad (x = 0 \text{ legyen!})$

Populáció mérleg: $\frac{\partial \psi_z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial m} (v_m \cdot \psi_z) = q_z$

Kristálynövekedési kinetika: $\frac{dm}{dt} = v_m(m, \dots) \approx \alpha(\dots) \cdot m^\beta$

„Ütközési integrál”: $q_z = v_g \delta(m - m_0) + v_a$
Gócképződési kinetika

Agglomeráció kinetika: $v_a \approx \gamma(\dots) \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \int_0^m \psi_z(m - m') \cdot \psi_z(m') dm' - \psi_z \cdot \int_0^\infty \psi_z dm \right]$

9.22. ábra. Kristályosító modellje (mikroszint, részlet)

Rendszer szintű változók (momentumok):

$$\mu_n = \int_{m_0}^{m_z} (m^n \cdot \psi_z) dm \quad n=0,1,2,\dots$$

Momentum mérlegek:

$$\frac{d\mu_n}{dt} = n \cdot \alpha \cdot \mu_{n-1+\beta} + m_0^n \cdot v_g +$$

$$+ \gamma \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} \cdot \mu_i \cdot \mu_{n-i} - \mu_n \right]$$

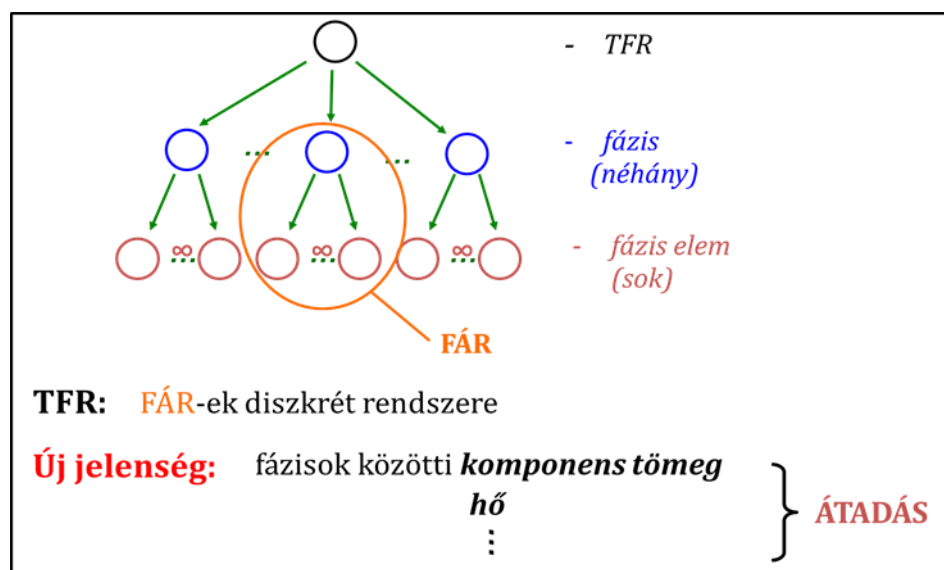
$n = 0, 1, 2, \dots$ **ZÁRTSÁG?!**

9.23. ábra. Makroszintű modell.

10. Többfázisú rendszerek

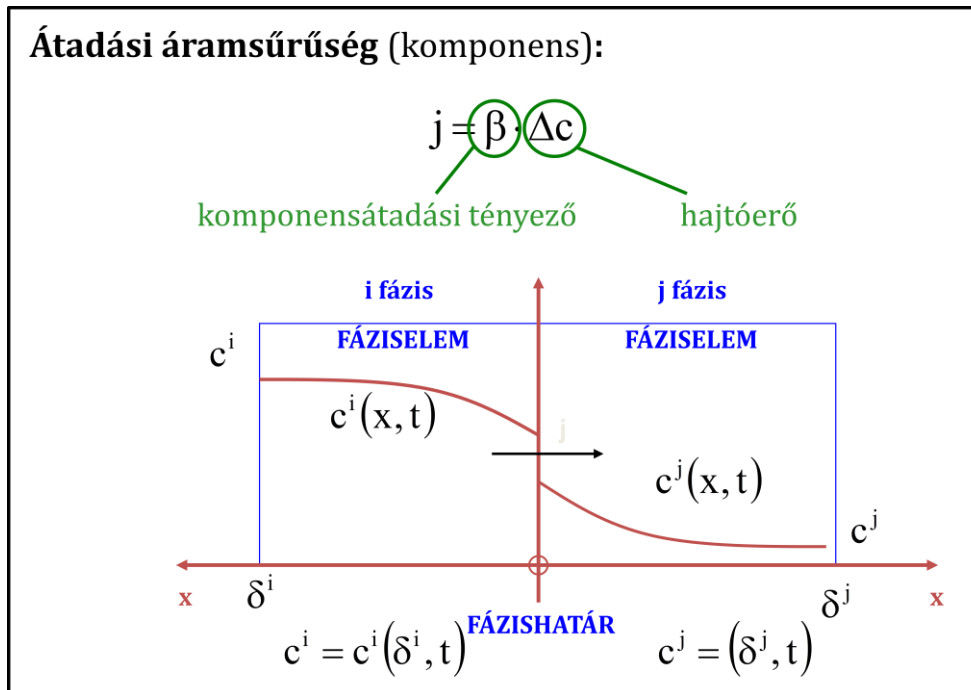
A többfázisú rendszerek (TFR) struktúráját az 10.1. ábra szemlélteti. Általában két-három fázist foglalnak magukba, az egyes fázisok pedig FÁR-ként értelmezhetők. A többfázisú rendszerekben új tulajdonság a fázisok térfogataránya lehet. Modellezés technikai szempontból itt két eset lehetséges. Ha a két fázis geometriailag teljesen elkülönült térben mozog, akkor a fázisarány szerepeltetése elkerülhető (pl. csöves hőcserélő), ellenkező esetben szerepelni fog (pl. komponens átadási műveleteknél).

Új jelenség a fázisok közötti komponens, hő, és impulzus átadás. A konvencionális hőátadás részleteit a hőtanban (géptan), a komponens átadásét pedig a művelettanban tanulják. Itt csupán a tanult ismereteknek a hierarchikus modellezés keretébe való beillesztését mutatjuk be. A konvencionálistól eltérő komponensátadásra a többfázisú reaktorok modellezésében mutatunk példát.



10.1. ábra. A többfázisú rendszer struktúrája.

Az átadás a különböző fázisok fáziselemei között alakul ki. A 10.2. ábra az i és j fázisok elemei között kialakuló komponensátadást szemlélteti. Az érintkezési felület a fázisok határa.



10.2. ábra. Fáziselemek kölcsönhatása.

A 3. fejezetben láttuk, hogy a komponens átadási áramsűrűség a hajtóerő és a komponens átadási tényező (ami a hőmérséklet függvénye) szorzataként írható le. A hajtóerő az egyensúlytól mért távolságot méri, az egyensúlyban az értéke nulla. A hajtóerő bármelyik fázis koncentrációjával kifejezhető, és mivel az áramsűrűség értéke ugyanaz, ezért az átadási tényező is kétféle lehet (10.3. ábra). A hajtóerő tehát az alábbi lehet:

- Az i fázis aktuális koncentrációjából (c_i) kivonjuk a j fázis aktuális koncentrációjának megfelelő egyensúlyi koncentrációt (c_j^*), azaz $\Delta c = c_i - c_j^*$. Az ehhez tartozó i fázis koncentrációval kifejezett komponens átadási tényező a β^i .
- Az i fázis koncentrációjával egyensúlyban lévő koncentrációból (c_i^*) kivonjuk a j fázis aktuális koncentrációját (c_j), azaz $\Delta c = c_i^* - c_j$. Az ehhez tartozó j fázis koncentrációval kifejezett komponens átadási tényező a β^j .

Az egyensúlyi összefüggést általában egy homogén lineáris függvénnyel adjuk meg (α egyensúlyi állandó), amely a 3. fejezetben említettek szerint a legkülönbözőbb neveken ismert a szakirodalomban. A különböző átadási elméletekben általában feltételezik, hogy a határfelületen mindig beáll az egyensúly (az ellenállás zérus). A

kétféle komponens átadási tényező között az egyensúlyi állandó teremt kapcsolatot (10.4. ábra). A komponens átadási tényező mindkét fázistól függ, az ún. részleges átadási tényezőkön (β_r) keresztül. (A reciprok összeg azzal kapcsolatos, hogy a sorba kötött ellenállások összeadódnak.).

Komponensátadási áramsűrűség:

$$j = \beta^i \cdot \Delta c^i = \beta^j \cdot \Delta c^j$$

Hajtóerő:

$$\Delta c^i = c^i - f^i(c^j)$$

$$\Delta c^j = f^j(c^i) - c^j$$

Egyensúly:

$$c^j(0, t) = \alpha \cdot c^i(0, t) \quad (\text{homogén lineáris})$$

(pl. Henry-törvény)

10.3. ábra. Komponens átadási áramsűrűség.

Komponensátadási tényezők közötti kapcsolat:

$$\beta^i = \beta^j \cdot \alpha$$

Részleges komponensátadási tényezők:

$$\frac{1}{\beta^i} = \frac{1}{\beta_r^i} + \frac{1}{\alpha \cdot \beta_r^j}$$

$$\frac{1}{\beta^j} = \frac{1}{\beta_r^j} + \frac{\alpha}{\beta_r^i}$$

10.4. ábra. Az átadási tényezők kapcsolata.

A részleges komponens átadási tényezőket a határfelületen kialakuló viszonyok modellezésével értelmezik. A leggyakrabban használt a művelettanban tanult *kétfilm elmélet*, amely a határ felületen kialakuló stacioner diffúzió alapszik. A modell analitikus megoldásából a részleges átadási tényező, a diffúziós állandó és a határréteg vastagság hányadosaként adódik (10.5. ábra).

Lewis-Whitman kétfilm elmélete:

$$\beta = \frac{D}{\delta}$$

Higbie penetrációs elmélete:

$$\beta = \sqrt{\frac{4 \cdot D}{\pi \cdot t^*}} \quad \text{--- tartózkodási idő}$$

Danckwerts felület-megújulási elmélete:

$$\beta = \sqrt{D \cdot s} \quad \text{--- felület-megújulási frekvencia}$$

10.5. ábra. Átadási elméletek.

Az instacionárius diffúzió alapszik Higbie, ill. Danckwerts elmélete. Az előbbi feltételezése az, hogy a fázis elemek egy adott tartózkodási ideig érintkeznek, utóbbié pedig az, hogy egy (exponenciális) valószínűségi eloszlás szerint. Mindkettő végeredménye hasonló, nevezetesen a részleges átadási tényező a diffúziós állandó négyzetgyökével arányos. Mindegyik elmélet kísérletileg is alátámasztható. Az átadási áramsűrűséget a lejátszódó kémiai reakció alapvetően befolyásolja. Ebben az esetben a 10.2. ábrán vázolt rendszerre felírt modellbe a kémiai reakciót is be kell vonni, amely lényegesen megnövelheti a komponens átadási tényező értékét.

A komponens átadáshoz képest a hőátadás abban különbözik, hogy a hőmérséklet, amint azt a 3. fejezetben láttuk, potenciál jellegű mennyiség. Így a hajtóerő egyszerűen a két fázis hőmérséklet különbsége lesz (az „egyensúlyi állandó” értéke egy). A teljes átadási tényező (κ) reciproka itt is a részleges átadási tényezők reciprok összege (falra való hőátadásnál a fal ellenállás is hozzáadódik).

A fáziselemek közötti átadás, a kémiai reagáláshoz hasonlóan a fáziselemek állapotváltozóira hat, ezért az átadási törvényszerűség FÁR, ill. TFR szintre való átvitele a kémiai reakció átvitelével egyezik meg.

A TFR komplett modelljét két ellenáramban mozgó fázis közötti komponens átadással (10.6. ábra), ill. hőátadással (10.7. ábra) illusztráljuk. Mindegyik fázis áramlására az ideális kifolyás modelljét alkalmazzuk. Az x hosszkoordináta dimenziómentes. Az ε az adott fázis térkitöltési tényezője (*hold-up*), mint a TFR egy új

állapotváltozója jelenik meg a komponensmérlegekben. A hőmérlegben ez nem jelenik meg, mert ott a fázisok külön térben áramlanak. A 2-2 parciális differenciálegyenlet rendszer a kezdeti és perem feltételek megadásával numerikusan megoldható.

$$\frac{\partial(V \cdot \varepsilon^i \cdot c^i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(B^i \cdot c^i) = -\beta^i \cdot \omega \cdot V \left(c^i - \frac{c^j}{\alpha} \right)$$
$$\frac{\partial(V \cdot \varepsilon^j \cdot c^j)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}(B^j \cdot c^j) = \beta^j \cdot \omega \cdot V \left(c^i - \frac{c^j}{\alpha} \right)$$
$$t = 0, \quad c^i(0, x), \quad c^j(0, x) \quad \text{adott,}$$
$$x = 0, \quad c^i(t, 0), \quad \text{adott,}$$
$$x = 1, \quad c^j(t, 1) \quad \text{adott}$$

10.6. ábra. Ellenáramú komponensátadás.

$$\frac{\partial(V \cdot \rho^i \cdot c_p^i \cdot T^i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(B^i \cdot \rho^i \cdot c_p^i \cdot T^i) = -\kappa \cdot F(T^i - T^j)$$
$$\frac{\partial(V \cdot \rho^j \cdot c_p^j \cdot T^j)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(B^j \cdot \rho^j \cdot c_p^j \cdot T^j) = \kappa \cdot F(T^i - T^j)$$
$$t = 0, \quad T^i(0, x), \quad T^j(0, x) \quad \text{adott,}$$
$$x = 0, \quad T^i(t, 0), \quad \text{adott,}$$
$$x = 1, \quad T^j(t, 1) \quad \text{adott}$$

10.7. ábra. Ellenáramú hőcserélő modellje

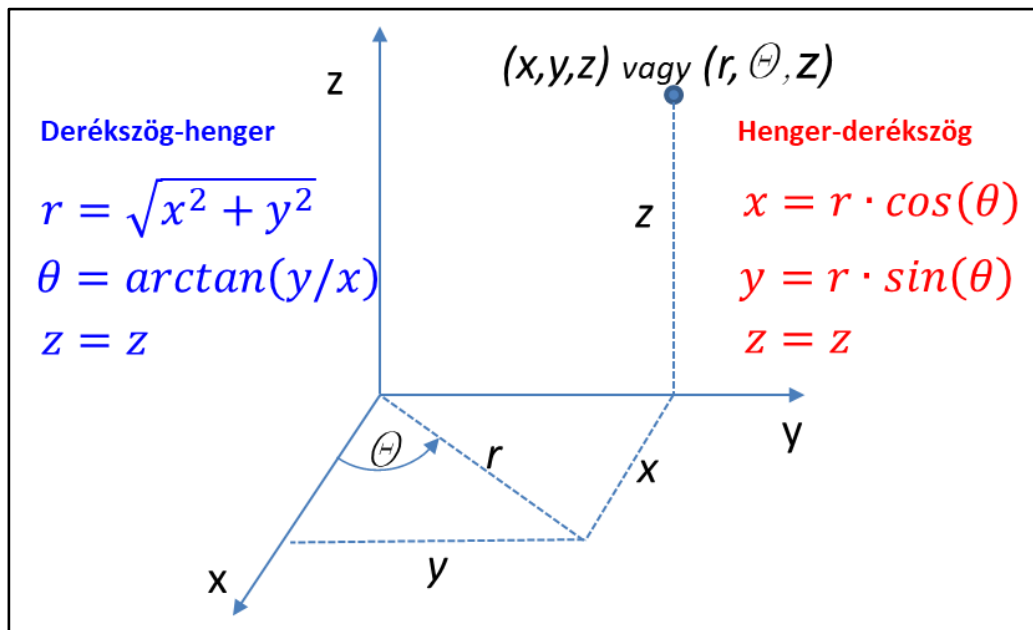
11. Magasabb hierarchia szintek

A hierarchiaszinteken felfelé haladva, egyre inkább csökken a rendszerelemek száma, így egyre inkább a diszkrét leírás válik dominánssá. Ezen szinteken is előfordul azonban, hogy a számos rendszerelem miatt modellezés technikailag célszerű a folytonos modell alkalmazása.

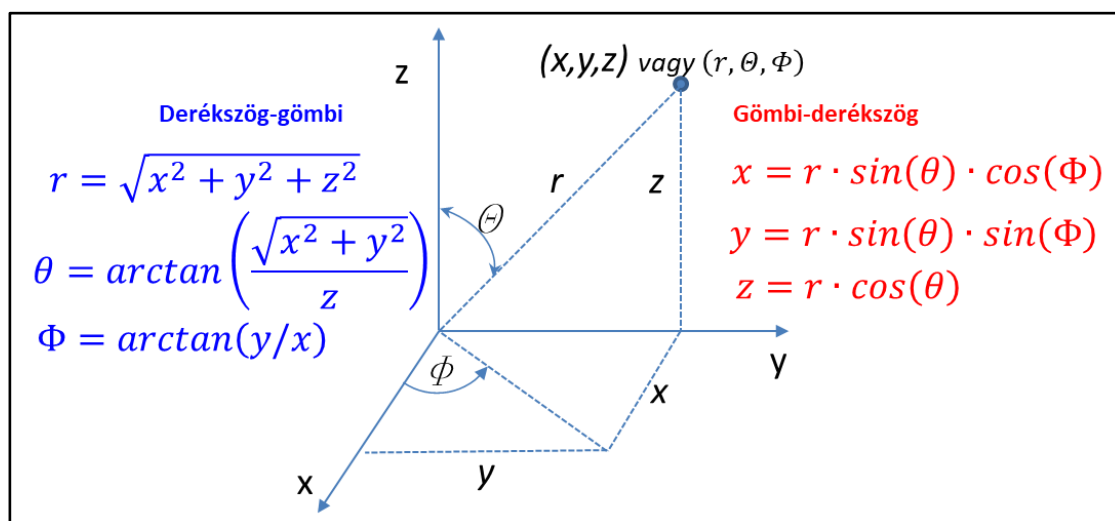
11.1. A berendezéselem és a berendezés szintek

A berendezéselem és a berendezés szintek között éles, elvi határvonalat húzni nem könnyű, inkább modellezés technikai okokból célszerű mindkettő használata. Ezek a szintek azok, amelyeken a tér és idő konkrét tartalmat nyer. Rögzülnek a tér-idő határok és lehetőség adódik a legalkalmasabb koordináta rendszer kiválasztására.

A 2.3. fejezetben már foglalkoztunk azzal a kérdéssel, hogyan lehet szimmetria viszonyok kihasználásával, ill. bizonyos egyszerűsítésekkel a tér-idő dimenzió számát csökkenteni. Az eddigiekben mindenütt (kivéve a radiális keveredést tartalmazó hidrodinamikai modellt) a derékszögű (Descartes) koordináta rendszert alkalmaztuk, ebben értelmeztük a differenciális mérlegegyenleteket. Csőszerű berendezésekben a szimmetria viszonyokat ugyanakkor a *henger koordináta rendszer* alkalmazásával tudjuk kihasználni. A derékszögű és henger koordináta rendszerek közötti egyszerű geometriai kapcsolat a 11.1. ábrán látható. A koordináták értékei kölcsönösen átszámíthatók egymásba. A gömb alakú fáziselemek esetében pedig a *gömbi koordináta rendszer* alkalmazása előnyös. A derékszögű és a gömbi koordináta rendszerek közötti egyszerű geometriai kapcsolat a 11.2. ábrán látható. A koordináták értékei ennél is kölcsönösen átszámíthatók egymásba.



11.1. ábra. A derékszögű és a henger koordináta rendszerek kapcsolata



11.2. ábra. A derékszögű és a gömbi koordináta rendszerek kapcsolata

A következő kérdés most már az, hogy a modelleket illetően, hogyan teremthető meg a kapcsolat a különböző koordináta rendszerek között? Két út kínálkozik erre:

- A differenciális mérleg egyenleteket az új koordináta rendszerben vezetjük le.
- A derékszögű koordináta rendszerben megalkotott modellt a koordináta rendszerek közötti kapcsolatot figyelembe véve az új koordináta rendszerbe transzformáljuk.

Itt az utóbbi módszert követjük, így nem kell a derékszögűtől eltérő koordináta rendszerekben a mérlegkészítéssel foglalkozni. Jelentse a derékszögű koordináta rendszerben f bármelyik állapotváltozót, az \bar{f} pedig ugyanazt a másik koordináta rendszerben. A transzformációnál a kiindulási pont az, hogy az állapotváltozó értéke az adott pontban koordináta rendszer független ($f = \bar{f}$). A henger koordináta rendszer viszonylatában ez a 11.3. ábrán látható. Ebből következik a transzformáció összes további lépése. A differenciális mérlegegyenletekben a pusztán állapotváltozókon kívül szerepelnek azok első (konvektív áram) és másod (konduktív áram) rendű deriváltjai is. A deriválásnál az összetett függvények deriválására vonatkozó egyszerű szabályokat kell használni. A 11.3. ábrán az elsőrendű derivált átalakítása látható, a 11.4. ábrán pedig a konkrét kapcsolatok. A derékszög és gömbi koordináták szerinti elsőrendű deriváltak kapcsolatait a 11.5. ábra tartalmazza. A másodrendű deriváltak kapcsolatait az elsőrendű deriváltak újbóli deriválásával vezethetik le.

Megkötés:

$$f(x, y, z) = \bar{f}(r, \theta, z)$$

Kapcsolat:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{y,z} = \left. \frac{\partial \bar{f}}{\partial r} \right|_{\theta,z} \cdot \left. \frac{\partial r}{\partial x} \right|_{y,z} + \left. \frac{\partial \bar{f}}{\partial \theta} \right|_{r,z} \cdot \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{y,z} + \left. \frac{\partial \bar{f}}{\partial z} \right|_{r,\theta}$$

11.3. ábra. Az állapotváltozók a derékszögű és a henger koordináta rendszerekben.

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{-\sin(\theta)}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + 0 \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos(\theta)}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + 0 \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = 0 \frac{\partial}{\partial r} + 0 \frac{\partial}{\partial \theta} + 1 \frac{\partial}{\partial z}$$

11.4. ábra. Az állapotváltozók deriváltjai a derékszög és henger koordináta rendszerekben.

$$\frac{\partial}{\partial x} = (\sin(\Theta) \cdot \sin(\Phi)) \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{\cos(\Theta) \cdot \cos(\Phi)}{r}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial \Theta} + \left(\frac{-\sin(\Phi)}{r \cdot \cos(\Theta)}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial \Phi}$$
$$\frac{\partial}{\partial y} = (\sin(\Theta) \cdot \sin(\Phi)) \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{\cos(\Theta) \cdot \sin(\Phi)}{r}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial \Theta} + \left(\frac{\cos(\Phi)}{r \cdot \sin(\Theta)}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial \Phi}$$
$$\frac{\partial}{\partial z} = -\cos(\Theta) \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{-\sin(\Theta)}{r}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial \Theta} + (0) \cdot \frac{\partial}{\partial \Phi}$$

11.5. ábra. Az állapotváltozók deriváltjai a derékszög és gömbi koordináta rendszerekben.

Illusztrációként tekintsünk egy fázis egy komponensére vonatkozó komponens tömegmérleget, amelyben a geometriai térbeli konvektív és konduktív áramlást és egy kémiai reakciót veszünk figyelembe. A három különböző koordináta rendszerben való leírást a 11.6. ábra tartalmazza. Mindhárom koordináta rendszer háromdimenziós, ezért a mérlegekben szereplő tagok száma megegyezik. Az áramlási tagok bonyolultsága a derékszögű, henger, gömbi irányban talán kissé nő, de a csörszerű, gömbszerű térben, szimmetria viszonyok miatt a szög jellegű koordináták menti változások zérussá válnak. Ekkor a bonyolultság iránya ellentétessé válik, s ebben az esetben válik célszerűvé az utóbbi koordináta rendszerek használata.

A differenciális mérlegegyenletek megoldásához megfelelő kezdeti és peremfeltételek szükségesek. A kezdeti feltételek rögzítése az egyszerűbb feladat. Általában a vizsgálat kezdetétől számítjuk az időt, és a $t=0$ időnél lehet megadni az állapotváltozók térbeli eloszlását. Ez azt jelenti, hogy kezdeti koncentrációt, hőmérsékletet, stb. kell rögzíteni a tér minden belső pontjában.

A tér koordináták szerint, ha konduktív áramlás is van (másodrendű), akkor két, ha nincs akkor egy feltétel szükséges. Ez utóbbi esetben, általában a belépési pontnál ismert az adott állapotváltozó. Konduktív áramnál a belépési és kilépési felületre való integrálással tudjuk a megfelelő peremfeltételeket rögzíteni. A rendszerbe lépő áram értéke adott (rendszer szemlélet!), és szükséges még az az információ is, hogy a kilépési

felületen az állapotváltozó értéke már nem változik. A sugár és szög jellegű koordináták zérus pontjaiban minden áram értéke zérus, hiszen negatív irányba a rendszer zárt.

Derékszögű koordináta rendszer:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) - D_{AB} \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) = R_A$$

Henger koordináta rendszer:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) - D_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) = R_A$$

Gömbi koordináta rendszer:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \cdot \sin(\theta)} \frac{\partial c_A}{\partial \phi} \right) - D_{AB} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial c_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \phi^2} \right) = R_A$$

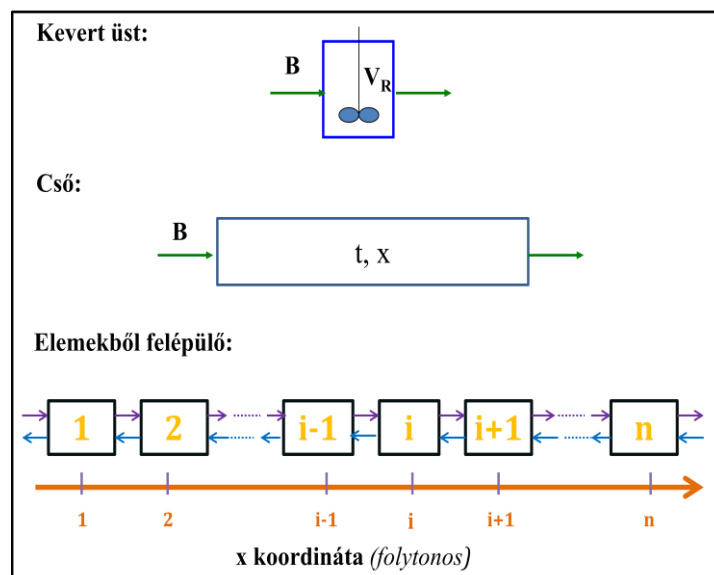
11.6. ábra. Komponens tömegmérleg különböző koordináta rendszerben.

11.2. Berendezés típusok

A berendezéselemekben, berendezésekben lejátszódó jelenségek a tér-időben változtatják az extenzív mennyiségek eloszlását. A berendezések, alakjuk alapján, általában besorolhatók a 11.7. ábrán látható három nagy csoportba:

- kevert üst,
- cső,
- elemekből felépülő.

Az egyes csoportokat jellemző modellformákat a 11.8. ábrán foglaltuk össze. A legbonyolultabb modell a négydimenziós tér-időre vonatkozó négy változó szerinti első és másodrendű differenciálhányadosokat tartalmazó parciális differenciál egyenletrendszer (PDER). Természetesen, ha egy makroszintű modellben valamely elem belső tulajdonsága is szerepel, akkor ezzel nő a független változók (és a dimenzió) száma. Ugyanakkor, amint azt az előzőekben láttuk, a szimmetriaviszonyok miatt a dimenziószám pedig csökken.



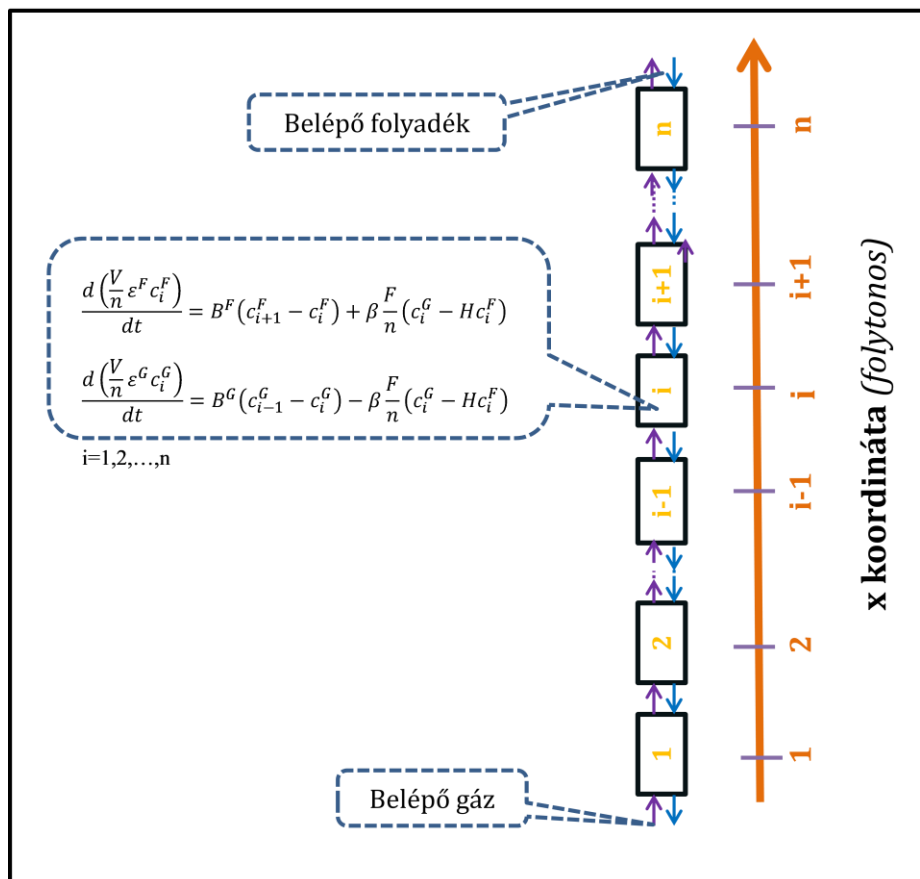
11.7. ábra Berendezés típusok.

Kevert üst:	
<i>Stacioner:</i>	algebrai ER (lineáris vagy nem lineáris)
<i>Instacioner:</i>	közönséges DER
Cső (egy dimenziós):	
<i>Stacioner:</i>	közönséges DER
<i>Instacioner:</i>	parciális DER
Cső (két és több dimenziós):	
<i>Stacioner:</i>	parciális DER
<i>Instacioner:</i>	parciális DER
Elemekből felépülő:	
<i>Stacioner:</i>	algebrai ER mindegyik elemre (sorszám)
<i>Instacioner:</i>	közönséges DER mindegyik elemre (sorszám)

11.8. ábra. Berendezés típusok modell formái.

11.3. Sokelemű berendezés folytonos modellje

Éles komponens szétválasztáshoz a mai technológiák gyakran tartalmazznak, akár száznál is több egységből felépülő oszlopokat. Ilyen esetben már meggondolandó a 6.6. fejezetben (speciális rendszerosztály) bemutatott „folytonossá tételi technika” alkalmazása. Ezt egy ellenáramú abszorber példájával illusztráljuk.



11.9. ábra. Tányéros abszorber diszkrét modellje.

A tányéros abszorber sémája és diszkrét modellje a 11.9. ábrán látható. A vizsgált rendszer egy n darab tányért tartalmazó ellenáramban működtetett oszlop. A jó abszorpciós hatások végett az n elegendően nagy szám. Az abszorpciós hő jelentéktelen, ezért a művelet izotermnek tekinthető. Az átadott komponens a belépő gázban kis koncentrációban van jelen és emiatt a fázisok térfogatváltozását elhanyagoljuk. A következőkben alakítsuk át a diszkrét modellt folytonossá, a 6.6. fejezetben bemutatott módszert alkalmazva. A diszkrét rendszer $c_i(t)$, ahol $i=1,2,\dots,n$ koncentrációi helyett a folytonos $c(t,x)$ koncentráció eloszlás jelenik meg. A folytonos rendszermodellt a

11.10. ábrán foglaltuk össze. A $2n$ elemből álló közönséges DER helyett egy két egyenletből álló PDER adódott. A modell megoldásához a paraméterek ismeretén túlmenően szükség van a kezdeti és perem feltételekre is. A $t=0$ időben a koncentrációk $c(x)$ eloszlását kell rögzíteni. Az x -menti másodrendű deriváltak miatt két peremfeltétel megadása szükséges. Ezek a differenciális mérlegegyenletek belépési felületekre való integrálásával értelmezhetők, azzal a kiegészítéssel, hogy a belépő komponens tömegáramok ismertek, a kilépési felületen pedig az állapotváltozók értéke nem változik meg. Ebből a 11.10. ábrán látható ún. Danckwerts féle peremfeltételek adódnak.

Modell (komponens mérlegek):

$$\frac{\partial \left(\frac{V}{n} \varepsilon^F c^F \right)}{\partial t} - B^F \frac{\partial c^F}{\partial x} - \frac{B^F}{2} \frac{\partial^2 c^F}{\partial x^2} = \beta \frac{F}{n} (c^G - H \cdot c^F)$$

$$\frac{\partial \left(\frac{V}{n} \varepsilon^G c^G \right)}{\partial t} + B^G \frac{\partial c^G}{\partial x} - \frac{B^G}{2} \frac{\partial^2 c^G}{\partial x^2} = -\beta \frac{F}{n} (c^G - H \cdot c^F)$$

Kezdeti feltételek:

$$c^F(0, x) = c^{F,0}(x) \quad c^G(0, x) = c^{G,0}(x)$$

Peremfeltételek ($x=0$):

$$\frac{\partial c^F(t, 0)}{\partial x} = 0$$

$$c^G(t, 0) = c^{G,be}(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial c^G(t, 0)}{\partial x}$$

Peremfeltételek ($x=n$):

$$c^F(t, n) = c^{F,be}(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial c^F(t, n)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial c^G(t, n)}{\partial x} = 0$$

11.10. ábra. Tányéros abszorber folytonos modellje.

A modell érdekessége az, hogy a fázisok leírásában megjelent a fáziskeveredés anélkül, hogy a fázisok (tányéronként) visszakeverednének. A diszkrét és folytonos modellek numerikus összehasonlításából belátható, hogy kellően nagy tányérszám esetén a megoldások eltérése kellően kicsi. Ez azt jelenti, hogy a sok elemből felépülő kolonnák folytonos modellel is leírhatók.



A diszkrét és folytonos kapcsolatának vizsgálati eredményei a szakirodalomban többnyire arra vonatkoznak, hogy hogyan lehet a folytonost diszkrétel közelíteni. Példák erre a különböző DER megoldó módszerek. Itt a fordított reláció került előtérbe. Mindkét irányú kapcsolat pontos ismerete modellezés technikai jelentőséggel bír, kihangsúlyozva azt is, hogy a diszkrét-folytonos átalakítás, egyben egy modellredukciós módszer alapja is.

12. A matematikai modellezést támogató szoftverek

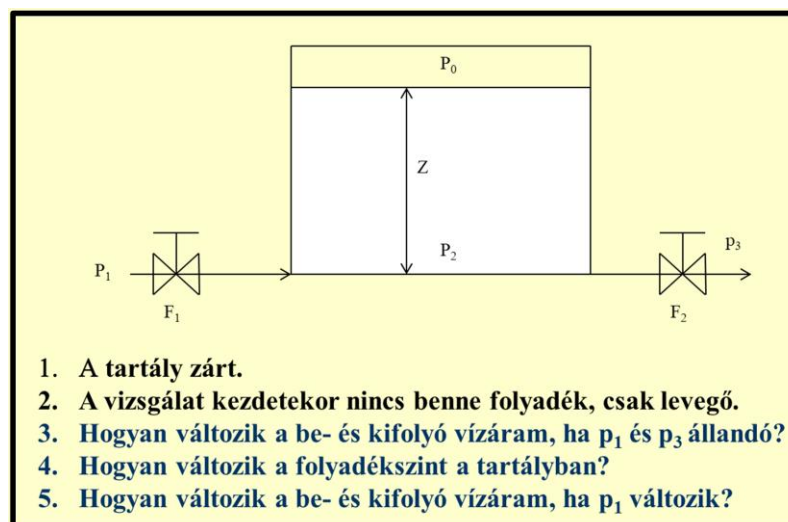
Az előző fejezetekben bemutatott modellezési módszertant követve előállíthatjuk a vizsgálandó objektum különböző részletességű matematikai modelljeit. A modellek különböző típusú matematikai összefüggésekből állnak, amelyek megoldásával állíthatjuk elő a számítási eredményeinket, tanulmányozhatjuk a rendszer működését. Összetett matematikai modell megoldása önmagában is bonyolult feladat, azonban a megoldáshoz számos mérnöki munkát támogató szoftver áll rendelkezésünkre. Ebben a fejezetben röviden összefoglaljuk azokat az eszközöket, amelyekkel hatékonyan tudjuk elvégezni a számítási feladatainkat.

A rendelkezésre álló szoftvereket, szimulátorokat az alábbi táblázatban látható módon csoportosítottuk.

12.1. táblázat. A szoftverek funkcionális csoportosítása.

Funkció	Szoftver
Általános célú szoftverek	<i>MS Excel, GoogleSheets, Open Office Calc, Quattro Pro, ...</i>
	<i>Matlab/Simulink, Mathematica, ...</i>
CFD szimulátorok	<i>Fluent, Comsol, Ansys, SimFlow, ...</i>
Technológiai szimulátorok	<i>AspenPlus, AspenHysys, ChemCad, Pro-II, UniSim Design, ...</i>
	<i>AspenPlus Dynamics, AspenHysys Dynamics, ChemCad Dynamics, UniSimOperation, ...</i>
Méretezést támogató szoftverek	<i>AspenExchanger Design &Rating, SimSciHextran, ...</i>
	<i>KG-Tower, Sulzer-SulCol, ...</i>
	<i>The EngineeringToolBox – Valve, Pipe</i>
Folyamatirányító szoftverek	<i>ABB, Emerson, Honeyweel, Siemens, Yokogava</i>
SCADA szoftverek	<i>LabView, ...</i>
Biztonsági rendszer tervezése, elemzése	<i>AspenFlare, HAZOP, LOPA, ESD, SIL, SIF, SIS, ...</i>
Ellátólánc optimalizálás	<i>AspenSupplyChainPlanner, ...</i>
Költségelemzés	<i>Aspen Icarus, ...</i>
Molekula modellezés	<i>Avogadro, MacroModel, Visual MolecularDynamics ...</i>

Az általános célú szimulátorok között kell megemlítenünk a különböző táblázatkezelő szoftvereket. Ezek a programok egyszerűbb mérnöki számítások elvégzésére is felhasználhatók, a beépített függvényeik, numerikus módszereik adatfeldolgozáson, paraméteridentifikáláson keresztül algebrai és differenciálegyenletek megoldását is támogatják. Az eredmények táblázatokon és különböző típusú diagramokon jeleníthetők meg. Példaként egy zárt tartállyal kapcsolatos feladat megoldását mutatjuk be Ms Excel táblázatkezelővel.



12.1. ábra. A vizsgált zárt tartály.

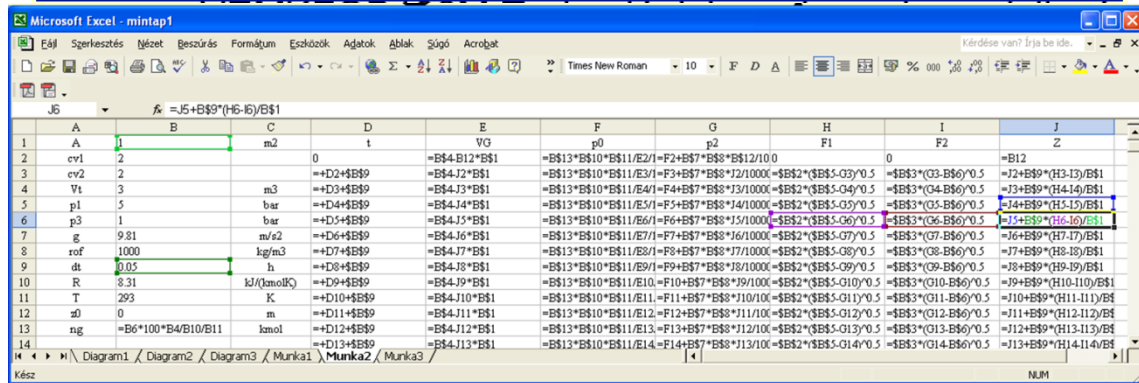
A 12.1. ábrán látható a rendszer sémája és a feladat megoldása során megválaszolendő kérdések. A modell felírásától most eltekintünk, csak arra mutatunk példát, hogy a dinamikus modell hogyan képezhető le Excelben. Ez látható az 12.2. ábrán, ahol mutatjuk a beírt összefüggéseket és a számítási eredményeket is.

Az általános célú szoftverek közé soroltuk azokat a programokat, amelyek jellemzően különböző numerikus módszereket tartalmaznak. Ezeknél a programoknál is a felhasználónak kell a vizsgált rendszer modelljét elkészíteni, kódolni az adott program nyelvén és összekapcsolni, jellemzően függvényhívásokkal, a megfelelő numerikus módszerrel.

A 12.3. ábrán egy összetett reakciórendszer Matlab szimulációs programja látható. A bal oldali ábrán látható a főprogram, míg a jobb oldalin a modell egyenletei egy

függvénybe leképezve, amelyet a főprogramból a numerikus megoldón keresztül érünk el.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	A	1	m2	t	VG	p0	p2	F1	F2	Z
2	cv1	2		0	3	1	1	0	0	0
3	cv2	2		0.05	3	1	1	4	0	0.2
4	Vt	3	m3	0.1	2.8	1.0714286	1.0910486	3.9542137	0.6034851	0.3675364
5	p1	5	bar	0.15	2.6324636	1.1396169	1.1756722	3.9111777	0.8382654	0.521182
6	p3	1	bar	0.2	2.478818	1.2102543	1.2613822	3.8671011	1.0225111	0.6634115
7	g	9.81	m/s2	0.25	2.3365885	1.2839231	1.3490038	3.821516	1.1815309	0.7954108
8	rof	1000	kg/m3	0.3	2.2045892	1.3607977	1.4388275	3.7742138	1.3248812	0.9178774
9	dt	0.05	h	0.35	2.0821226	1.4408374	1.5308811	3.7251141	1.4572318	1.0312715
10	R	8.31	kJ/(kmolK)	0.4	1.9687285	1.5238262	1.6249939	3.6742379	1.5811312	1.1359269
11	T	293	K	0.45	1.8640731	1.6093789	1.7208134	3.6217049	1.6980146	1.2321114
12	z0	0	m	0.5	1.7678886	1.6969395	1.8178096	3.567739	1.8086566	1.3200655
13	ng	0.1232119	kmol	0.55	1.6799345	1.7857839	1.9152824	3.5126728	1.9134078	1.4000288
14				0.6	1.5999712	1.8750337	2.0123765	3.4569486	2.0123385	1.4722593
15				0.65	1.5277407	1.963684	2.1081126	3.40111	2.1053386	1.5370479



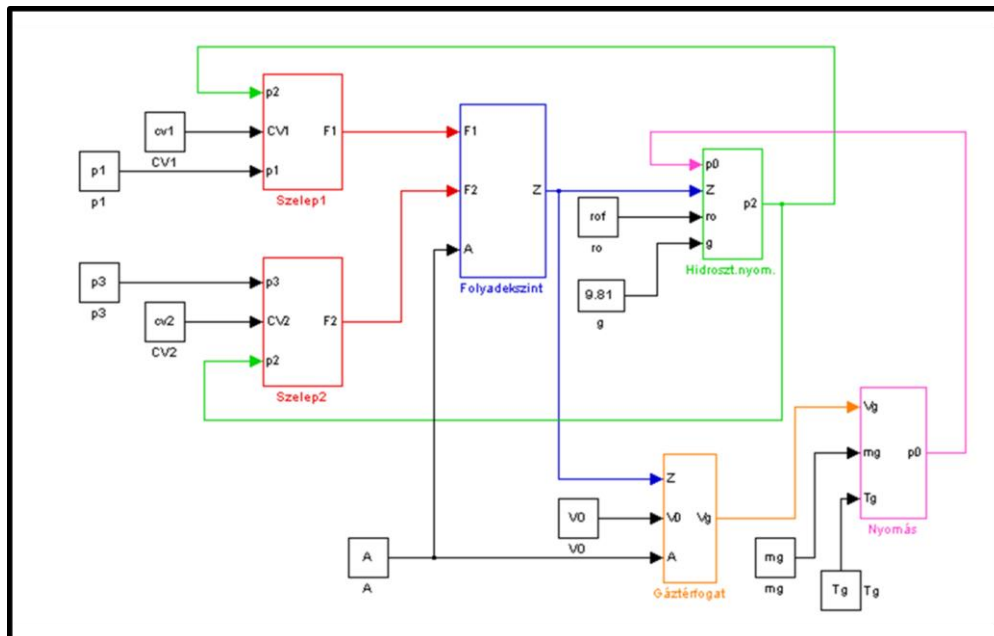
12.2. ábra. Dinamikus modell leképezése Ms Excelben.

```
1 % Memória teljes törlése
2 clear all
3 % Globális minden olyan változó amit
4 % függvényben is használunk
5 global k;
6 % Értékkadás
7 % Reakció sebességi állandók
8 % (sorvektor)
9 % k1 k2 k3
10 k=[0.01 0.01 0.02];
11 % Kezdeti koncentrációk
12 % (oszlopvektor)
13 % CB CC CD kezdeti feltétel
14 c0=[1 0 0]';
15 % Integrálási horizont
16 Tszam=[0 500];
17 % Numerikus megoldás előállítás
18 [t c]=ode23s('merlegegy_kinmp',Tszam,c0);
19 % Számított eredmények kirajzolása
20 figure(1); %Ábra nyitása
21 subplot(3,1,1)
22 plot(t,c); %Diagram rajzolás
23 grid on %Rácsvonalak bekapcsolása
24 title('Koncentráció vs. Idó');
25 ylabel('Koncentráció (mol/l)'); %X tengely felirat
```

```
1 function dc_dt=merlegegy_kinmp(t,c);
2 % xdot oszlopvektort adja vissza a fv.
3 % t az a változo ami szerint integralunk, ido
4 % c oszlop vektor, amit integralunk, koncentracio
5 global k;
6 % globalis változo a foprogramban kapott értéket
7
8 %lefoglalunk egy negy elemu oszlopvektort es nullazzuk
9 dc_dt=zeros(3,1);
10
11 %Merlegegyenletek
12 dc_dt(1)=-k(1)*c(1)+k(2)*c(2)-k(3)*c(1);
13 dc_dt(2)=k(1)*c(1)-k(2)*c(2);
14 dc_dt(3)=k(3)*c(1);
15
```

12.3. ábra. Reakciórendszer vizsgálata Matlab program segítségével.

A Matlab programcsomag része a Simulink, amelynek fő előnye, hogy a modelleket grafikus módon tudjuk leképezni. Az 12.4. ábrán a korábban bemutatott zárt tartály (12.1. ábra) szimulációs programját láthatjuk Simulink-ben.

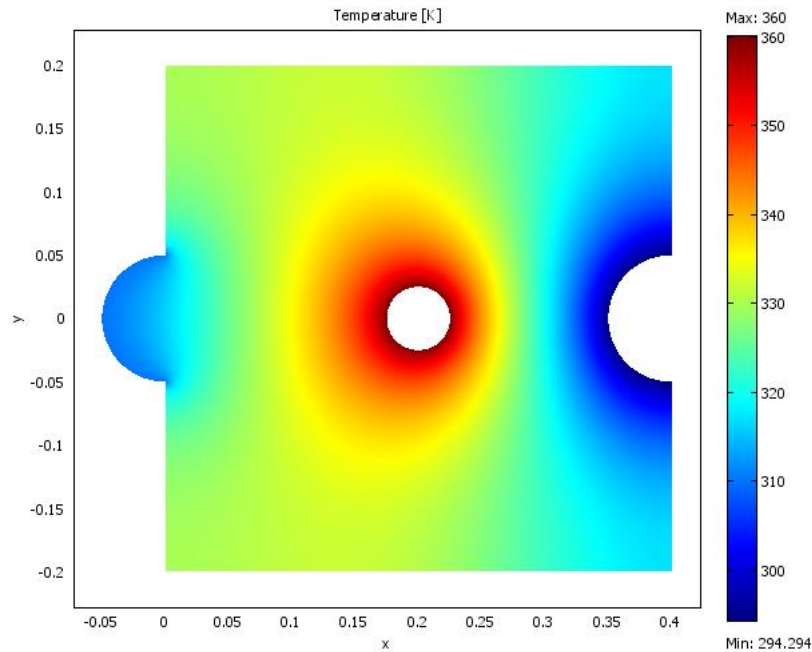


12.4. ábra. A zárt tartály modelljének Simulink programja.

További lehetőségek rejlenek abban, hogy az ilyen típusú szoftverek, mint pl. a Matlab/Simulink tartalmaznak ún. Toolbox-okat is. Ezek a szoftverelemek műszaki és tudományos feladatok megoldására szolgáló módszereket integráltan tartalmazzák, nem a felhasználónak kell az elemi algoritmusokból felépítenie a programját, hanem komplexen használhatja a toolboxot a feladata megoldására. Ilyen modulok pl. a Control System Toolbox, Neural Network Toolbox, Optimization Toolbox, Signal Processing Toolbox, stb.

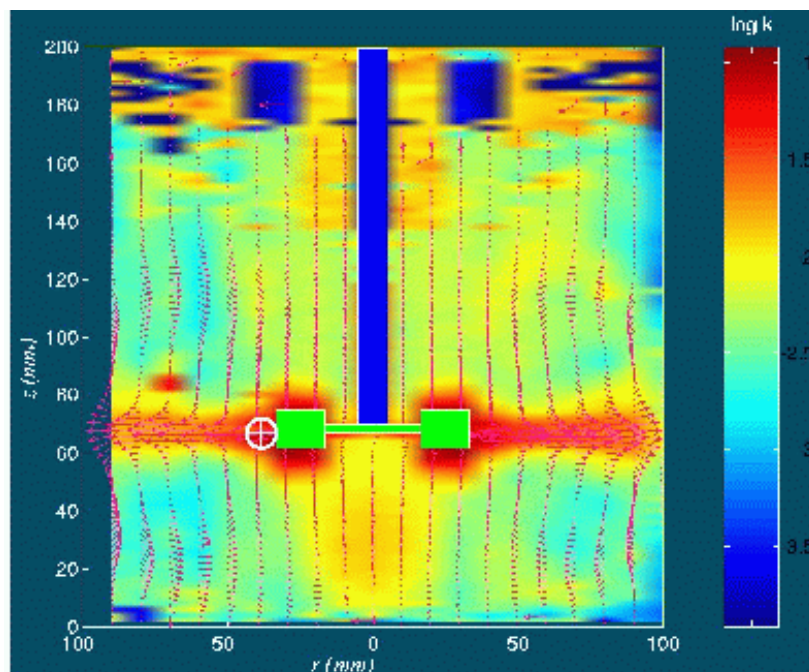
A CFD (Computational Fluid Dynamics) szoftvereket az áramlási folyamatok numerikus modellezésére és számítására fejlesztették ki. Napjainkban minden olyan iparágban alkalmazzák ahol az áramlásnak kitüntetett szerepe van (pl. járműipar, épületgépészet, vegyipar, energetika, elektronika, stb.). A szoftver elterjedését egyrészt a számítástechnika, másrészt a numerikus megoldó módszerek fejlődése tette lehetővé. Az áramlási folyamatokat leíró mérlegegyenletek, sebességi egyenletek jellemzően parciális differenciálegyenletek, amelyeknek analitikus megoldásai csak néhány speciális esetben léteznek. A parciális differenciálegyenletek diszkrétizálásával nagyszámú pontban kell a függvények értékeit meghatározni és tárolni, ami jelentős számítási kapacitást igényel. Ezen a szakterületen a numerikus megoldó módszerek közül a *véges elemek* és a *véges térfogatok módszere* terjedt el. A modell megoldásához először a geometriai teret kell felbontani elemi részekre, amelyet egy ún. hálógenerátor program segítségével is elvégezhetünk. Definiálni kell a határoló felületeket (peremeket), illetve a forrás tagokat is. A szoftverek tartalmaznak különböző típusú áramlási modelleket, amelyek közül kiválaszthatjuk az adott feladat megoldására alkalmasat. A szimulátorok dinamikus és stacionárius áramlási folyamatok számítására is alkalmasak. Az eredmények különböző típusú diagramokon szemléltethetők (pl. felületi tulajdonságok változása, különböző metszetek mentén a tulajdonságok változása, átlag tulajdonságok egy adott felületre, stb.)

Az 12.5. ábrán egy kétdimenziós felületen vizsgáljuk a hő terjedését. A jobb oldali színskálán a hőmérséklettartomány látható.



12.5. ábra. Hővezetési probléma vizsgálata CFD-vel.

A 12.6. ábrán pedig egy kevert berendezésben láthatjuk a számított áramlási képet. A szín ezen az ábrán a keverés intenzitásával van kapcsolatban, a tartályban megfigyelhető kis nyilak pedig a sebesség vektor irányát jelölik.



12.6. ábra. Keverési probléma vizsgálata CFD-vel.

A *technológiai szimulátorok* napjainkra a mérnöki tervező és fejlesztő munka nélkülözhetetlen eszközeivé váltak. Segítségükkel lehetővé vált komplex technológiai rendszerek stacionárius és dinamikus állapotának a számítása, berendezések főbb paramétereinek becslése, a technológia gazdasági potenciáljának a meghatározása különböző műszaki és gazdasági feltételek mellett. A technológiai szimulátorok az alábbi főbb elemekből épülnek fel:

- *felhasználóbarát felület*: amelyen keresztül a felhasználó definiálni tudja a feladatát, elvégezheti a számításokat és megjelenítheti a számítási eredményeket,
- *komponens adatbázis*: valós rendszerekben a konkrét anyagokkal, komponensekkel kell elszámolni. Ehhez szükségesek a komponens adatbázisok, amelyek tartalmazzák a kémiai komponens tulajdonságait (pl. molekulatömeg, kritikus állandók, stb.), illetve a hőmérséklettől és nyomástól függő tulajdonságok számítására szolgáló modellek paramétereit (pl. párolgáshő, fajhő, felületi feszültség, stb.),
- *termodinamikai modellkészlet*: A mérlegegyenletek megoldáshoz ismernünk kell az adott anyagi rendszer tulajdonságait, azok változásait a hőmérséklet, a nyomás és az összetétel függvényében. A valós anyagi rendszer leírásához megfelelő termodinamikai modellt kell kiválasztani a készletből (állapotegyenletek, aktivitási koefficiens számító modellek, stb.), úgy, hogy a számítási eredmények minél pontosabban visszatükrözzék a valóságot. Itt jegyezzük meg, hogy a technológiai szimulátor által számított eredmények pontosságát alapvetően befolyásolja a kiválasztott tulajdonságbecslő módszer.
- *berendezés modellek*: A vegyipari folyamatok különböző típusú készülékekben mennek végbe ezek számítására különböző információtartalmú modellek érhetők el a szimulátorokban. A berendezés modelleket csoportosíthatjuk az alábbi módon:
 - *tervező, vagy shortcut modellek*: a berendezések főbb paramétereinek a meghatározására használjuk. Desztillációs oszlopok esetében az ilyen típusú modellekkel jellemzően az elméleti és a minimális

tányérszámot, a minimális és a tényleges refluxarányt, kiforralási arányt, a betáplálás helyét és a hőterheléseket határozzuk meg.

- *részletes (rigorous) szimulációs modellek*: a műveleti egység részletes stacionárius, vagy dinamikus vizsgálatára használható modellek. Desztillációs oszlop esetén az ilyen típusú modellekkel meghatározható az oszlop hossza mentén a hőmérséklet, koncentráció, gőz- és folyadékterhelés profilja.
- *méretező modellek*: adott berendezéstípus részletes gépészeti tervezésére, méretezésére szolgáló modellek. Desztillációs oszlop esetében adott típusú tányér, vagy töltet esetében meghatározható pl. az oszlop átmérője és magassága, a nyomásesés, az elárasztási tényező, stb.
- *gazdasági modellek*: A technológia rendszer gazdasági potenciáljának meghatározásához szükségesek olyan modellek, amelyek segítségével becsülhetők a beruházási és üzemeltetési költségek a technológia gazdasági potenciáljai, a különböző megtérülési mutatók változó műszaki és gazdasági körülmények mellett a technológia teljes életciklusára vonatkozóan.

Az általános célú szimulátorok mellett a piacon elérhetők olyan speciális szoftverek is, amelyet egy-egy termék (pl. hőcserélő, töltet) előállítója fejlesztett ki, és amelyekbe beépítette saját speciális tervezési szakértelmét, tapasztalatát is. Néhány ilyen szoftver bizonyos korlátozásokkal az Interneten keresztül is elérhető. Az ilyen típusú szoftvereknek egy hasznos és jól felhasználható gyűjteménye található a *The Engineering Toolbox* portálon a <https://www.engineeringtoolbox.com/> címen.

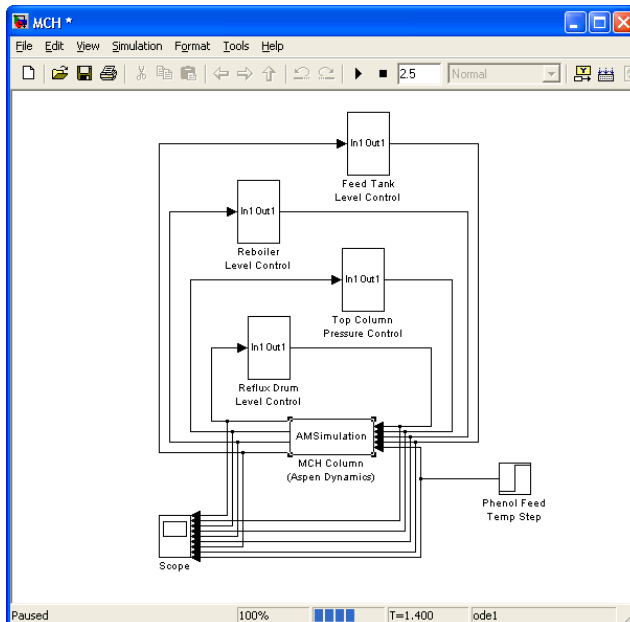
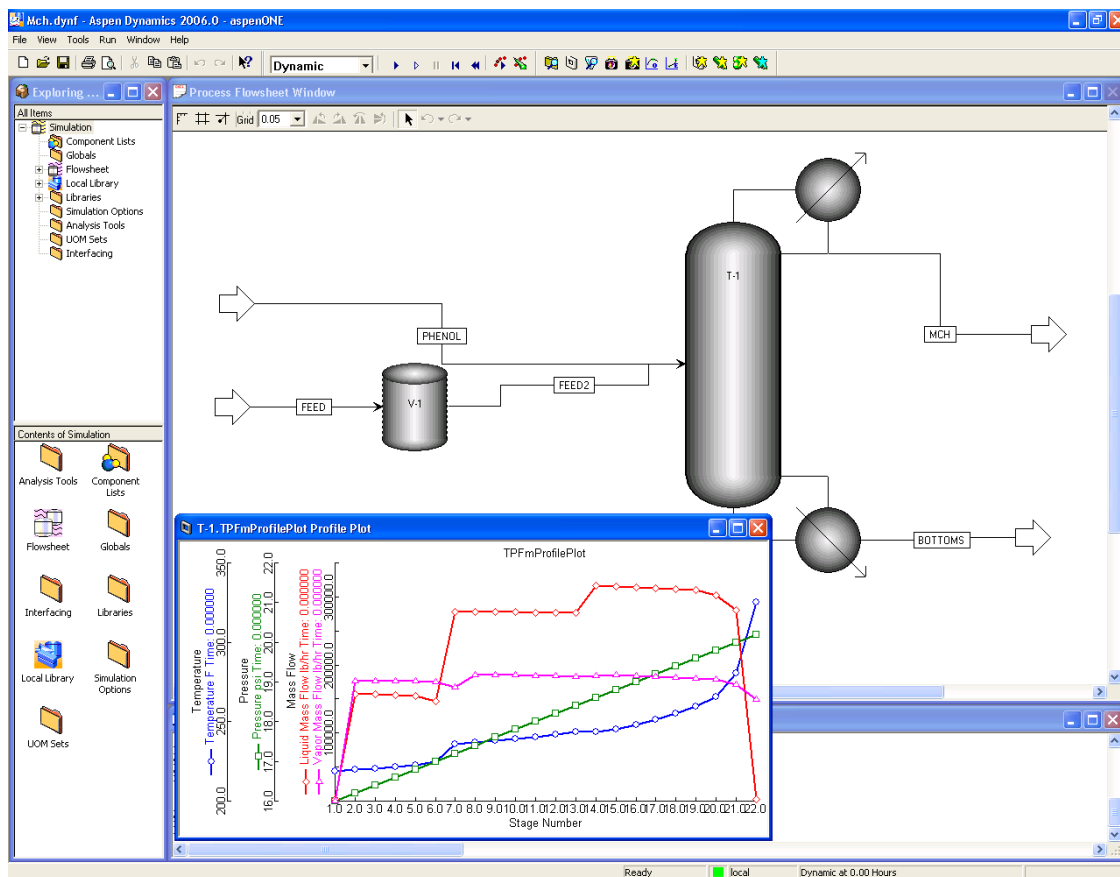
A *folyamatirányító szoftverek* általában ún. DCS (Distributed Control System) rendszereken futnak. Ezen rendszereken keresztül lépnek kapcsolatba az operátorok a technológiával. A DCS rendszerekbe érkeznek a mérési jelek és az operátori utasítások. A DCS-ben rövid, jellemzően néhány hónap időintervallum hosszúsági adatmennyiséget tárolnak a rövid ciklusú elemzések elvégzése céljából. A DCS-ben, PLC-ben (Programmable Logic Controller), vagy esetleg intelligens terepi műszerekben futnak a

lokális szabályozási feladatok. Az APC (Advanced Process Control) általában a DCS-sel kapcsolatban álló külön számítógépen fut, ahogy az *adattárházhoz* tartozó szoftver is, amely lehetővé teszi több éves adatsorok tárolását, elemzését.

A vegyipari rendszereknél a biztonság mindent megelőző szempont kell, hogy legyen. Ezért már a tervezés első, korai fázisában is foglalkoznak biztonsági kérdésekkel, amelyekhez gyakran szimulációs vizsgálatok is kapcsolódnak. Ezen mérnöki munkákat is számos szoftver támogatja. Röviden csak a főbb feladattípusokat foglaljuk össze:

- HAZOP elemzés (Hazard and Operation Analysis), a technológia működésének elemzése, potenciális vészhelyzetek feltárása,
- LOPA (Layer of Protection Analysis) biztonsági védelmi rétegek elemzése,
- ESD (Emergency Shut Down System) a vészleállító rendszer elemzése,
- SIL (Safety Integrity Level) az integrált biztonsági rendszer szintje, stb.

A mérnöki munka során a különböző típusú szoftvereket gyakran célszerű integráltan alkalmazni, hogy mindegyik szoftver előnyös tulajdonságait maximálisan ki tudjuk használni. Az 12.7. ábrán az Aspen Dynamics és a Simulink integrált alkalmazására mutatunk be egy példát. Az Aspen Dynamics-ban számítjuk a technológiát, amely a példánkban egy keverőtartályból és egy desztillációs oszlopból áll. Az Aspen Dynamics tartalmazza ezen berendezések modelljeit, a technológiában lévő komponensek tulajdonságait, illetve a fázisegyensúly, entalpiamérlegek és egyéb termodinamikai tulajdonságok számítására szolgáló modelleket. A Simulink-ben ilyen modellek nincsenek. A Simulink előnye viszont, hogy könnyen leképezhetők benne egyszerűbb modellek, mint pl. különböző irányítási algoritmusok. Ebben a példában az ApsenTech munkatársai a szint- és a nyomásszabályozási algoritmusokat a Simulink-ben képezték le. Az alsó ábrán látható „*AMSimulation*” doboz reprezentálja a felső ábrán lévő technológiai szimulátort. A két szoftver on-line kapcsolatban van egymással, így együttes alkalmazással hatékonyan lehet pl. szabályozó algoritmusokat fejleszteni, tesztelni.



12.7. ábra. Aspen Dynamics és Simulink integrált alkalmazása [10].

13. A komponens egyensúly érzékenység vizsgálata

Az eddigi fejezetekben a hierarchikus modellezési módszer fogalmait tanulták meg, és betekintést kaptak a szimulációs eszköztárba is. A most következő fejezetekben, egy-egy esettanulmány keretében, a konkrét modellek elkészítésével és a modellek mérnöki munkában való alkalmazásával, rendszeranalízissel foglalkozunk. Ebben a fejezetben a *paraméterérzékenység* fogalmával és alkalmazási lehetőségével ismerkednek meg.

A modellezési gyakorlatban nagyon gyakran felmerülő kérdés az, hogy a modell egyik változója milyen mértékben függ egy másik változójától, vagy másképpen fogalmazva mennyire érzékeny az egyik, a másik megváltozására. Paraméter identifikációnál például, mennyire érzékeny a megoldás a paraméter megváltozására, vagy irányításnál mennyire érzékeny a szabályozott jellemző a beavatkozó jelre? Mennyire érzékeny a profit a munkapont változásra?

Mindezen kérdésekre a mennyiségi választ az *érzékenység* fogalmának bevezetésével adhatjuk meg (13.1. ábra). Az *abszolút érzékenység* az egyik változó másik szerinti differenciálhányadosával (teljes és nem parciális!) definiálható. Ezek értéke viszont még a mértékegység megválasztásától is függ, ami a *relatív érzékenység* használatával kiküszöbölhető. A sokoldalúan használható érzékenység fogalmának alkalmazását egy egyszerű, többkomponensű gőz folyadék egyensúlyi modell példájával illusztráljuk.

<p>Modell:</p> $M = \langle v, f \rangle, \rightarrow y, x \in v$ <p>Abszolút érzékenység:</p> $e_{yx} = \frac{dy}{dx}$ <p>Relatív érzékenység:</p> $E_{yx} = \frac{x}{y} \frac{dy}{dx}$

13.1. ábra. Az érzékenység definíciója.

13.1. Az egyensúlyi modell

Induljunk ki 1 kmol N db komponenst tartalmazó elegyből, amelynek összetétele $u_1, \dots, u_i, \dots, u_N$ (moltört) adott. Ugyancsak adottak, mint paraméterek, a gőz folyadék egyensúly $K_1, \dots, K_2, \dots, K_N$ egyensúlyi állandói. Ezek alapján felírhatók a globális komponens tömegmérlegek és a fázisok közötti komponens egyensúlyi összefüggések, továbbá a koncentrációkra vonatkozó megkötések:

$$\begin{aligned}u_i &= n \cdot y_i + (1-n) \cdot x_i, \\y_i &= K_i \cdot x_i, \\ \sum_{i=1}^N x_i &= 1, \\ \sum_{i=1}^N y_i &= 1,\end{aligned} \tag{13.1}$$

ahol: $i=1, 2, \dots, N$,
 n a gőztérben lévő komponensek tömege (kmol),
 x, y a folyadék-, ill. gőztér összetétele (moltört).

A (13.1) modell a komponens tömeg mérlegekből és egyensúlyi összefüggésekből áll. Bizonytalanság csupán az egyensúlyi állandók számításában lehet. A modellben adott a kiindulási összetétel (u_i) és tételezzük fel, hogy a különböző termodinamikai tulajdonság számító módszerekkel a nyomás, hőmérséklet és összetétel függvényében számíthatók az egyensúlyi állandók (K_i). Ekkor a modellben szereplő ismeretlenek az $n, x_i, y_i, /i=1, \dots, N$, összesen $2N+1$ változó. Ennek meghatározására a mérlegek, az egyensúlyi kapcsolatok és a koncentrációk közötti egyik megkötés (a másik következmény) adja a feltételeket.

Formailag a modell egy nemlineáris egyenletrendszer, amely egyszerű átalakításokkal, egy egyváltozós nem lineáris egyenletté alakítható. Ennek iterációs megoldásában tételezzük fel, hogy az n értéke már ismert, írjuk be a mérlegbe az egyensúlyi összefüggést és rendezzük az egyenletet a folyadék koncentrációkra:

$$x_i = \frac{u_i}{(K_i - 1) \cdot n + 1}. \tag{13.2}$$

Ebből számoljuk a gőzkoncentrációkat, amelyekre alkalmazzuk a megkötést:

$$f(n) \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{K_i \cdot u_i}{(K_i - 1) \cdot n + 1} \right) - 1 = 0. \quad (13.3)$$

Ez az egyváltozós nemlineáris egyenlet n -re csak az input adatoktól függ. Newton módszerrel oldható meg, egy iterációs művelettel (rekurzív összefüggés):

$$n^{i+1} = n^i - \frac{f(n^i)}{\frac{\partial f}{\partial n}(n^i)}, \quad (13.4)$$

ahol
$$\frac{\partial f}{\partial n} = - \sum_{i=1}^N \frac{K_i \cdot (K_i - 1) \cdot u_i}{[(K_i - 1) \cdot n + 1]^2}.$$

A (13.3-13.4) megfelelő kezdőértékkel gyorsan konvergál, és a pontos n ismeretében már könnyen kiszámíthatók a koncentrációk.

Az n a $[0, 1]$ tartományból veszi fel az értékét. Az egyensúlyi állandók az anyagi tulajdonságoktól függő paraméterek, de a (13.1) modellben egymástól függetlenek, ahogyan a kezdeti elegy összetétel is független input információ. Ha ezek között mégis

érvényesül a $\sum_{i=1}^N (K_i \cdot u_i) = 1$ megkötés, akkor $n=0$, csak folyadék fázis van jelen, ha pedig

a $\sum_{i=1}^N \left(\frac{u_i}{K_i} \right) = 1$ megkötés érvényesül, akkor $n=1$, csak gázfázis van jelen. Ha bármelyik

összeg kisebb egynél, akkor nincs megoldás, nem értelmezhető a gőz-folyadék egyensúly. Az összegekre vonatkozó korlátokat az alábbiak szerint láthatjuk be.

Tételezzük fel, hogy a kiindulási elegy teljes mértékben a folyadék fázisba kerül, ekkor $x_i = u_i$, és az egyensúlyi összefüggést is figyelembe véve $\sum_{i=1}^N (K_i \cdot u_i) = 1$ kell, hogy

legyen. Ha $\sum_{i=1}^N (K_i \cdot u_i) \geq 1$, akkor a nagyobb egyensúlyi állandójú komponensek

gőzfázisba menetelével ki tud alakulni a $\sum_{i=1}^N (K_i \cdot x_i) = 1$. Ha $\sum_{i=1}^N (K_i \cdot u_i) \leq 1$ nem tud

kialakulni két fázis.

Tételezzük fel, hogy a kiindulási elegy teljes mértékben a gőzfázisba kerül, ekkor $y_i = u_i$, és az egyensúlyi összefüggést is figyelembe véve $\sum_{i=1}^N (u_i / K_i) = 1$ kell legyen. Ha

$\sum_{i=1}^N (u_i / K_i) \geq 1$, akkor a kisebb egyensúlyi állandójú komponensek folyadék fázisba menetelével ki tud alakulni a $\sum_{i=1}^N (y_i / K_i) = 1$. Ha $\sum_{i=1}^N (u_i / K_i) \leq 1$ nem tud kialakulni két fázis.

A fentiek a modell összefüggéseit használva formálisan is könnyen beláthatók. A (13.1) modell első egyenletét szorozzuk be K_i -vel, használjuk fel az egyensúlyi törvényt is, majd összegezzük i -re és alkalmazzuk a koncentrációk összegére vonatkozó megkötést. Az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\sum_{i=1}^n (K_i u_i) = n \cdot \sum_{i=1}^n (K_i y_i) + 1 - n.$$

Mivel a gőzfázisban a nagyobb K_i értékkel rendelkező komponensek nagyobb koncentrációban lesznek jelen, ezért érvényes az alábbi reláció:

$$\sum_{i=1}^n (K_i u_i) \leq \sum_{i=1}^n (K_i y_i).$$

Ezt beírva az előzőbe, majd rendezve adódik az input adatokra vonatkozó alábbi megkötés:

$$\sum_{i=1}^n (K_i u_i) \geq 1.$$

Hasonló gondolatmenettel a (13.1) modell első egyenletét elosztjuk K_i -vel, felhasználjuk az egyensúlyi törvényt is, majd összegezzük i -re és alkalmazzuk a koncentrációk összegére vonatkozó megkötést. Az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\sum_{i=1}^n (u_i / K_i) = n + (1 - n) \cdot \sum_{i=1}^n (x_i / K_i).$$

Mivel a folyadék fázisban a kisebb K_i értékkel rendelkező komponensek nagyobb koncentrációban lesznek jelen, ezért érvényes az alábbi reláció:

$$\sum_{i=1}^n (u_i / K_i) \leq \sum_{i=1}^n (x_i / K_i).$$

Ezt beírva az előzőbe, majd rendezve adódik az input adatokra vonatkozó másik megkötés:

$$\sum_{i=1}^n (u_i / K_i) \geq 1.$$

Ha tehát mindegyik összeg nagyobb egynél, akkor $n \in (0,1)$, folyadék és gőz fázis együttesen van jelen, és ez az eset az, amit vizsgálunk.

A (13.1) modellt a megfelelő gáztörvénnyel (állapotegyenlettel) és a folyadék sűrűség számítására alkalmas összefüggéssel, továbbá a hőmérleggel kiegészítve, a modell a komplett gőz-folyadék egyensúly számítására lesz alkalmas. A (13.1) modell ugyanakkor önmagában is alkalmas arra, hogy kiszámíthassuk az egyensúlyi állandók becslési hibáinak hatását a megoldásra. Ehhez az *érzékenységi modellt* érdemes értelmezni.

13.2. Az érzékenységi modell

Az érzékenységi változók definíciójánál abból indulunk ki, hogy az egyensúlyi állandók (K_1, K_2, \dots, K_N bemenetek) hatását vizsgáljuk a megoldásra ($n, x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N$ kimenetek). Az érzékenységi változók a kimenetek bemenetek szerinti (teljes) differenciálhányadosai (összességében egy Jacobi mátrix), vagy az ezek alapján értelmezett relatív érzékenységek. Ennek megfelelően a konkrét érzékenységi változók definíciója az alábbi:

differentiálhányadosok:

$$\begin{aligned}e_i &= \frac{dn}{dK_i} \\f_i &= \frac{d(1-n)}{dK_i} \equiv -e_i \\p_{ij} &= \frac{dx_i}{dK_j} \\q_{ij} &= \frac{dy_i}{dK_j} \\i, j &= 1, \dots, N\end{aligned}\tag{13.5}$$

relatív differentiálhányadosok:

$$\begin{aligned}E_i &= \frac{K_i}{n} \frac{dn}{dK_i} \\F_i &= \frac{K_i}{n-1} \frac{d(1-n)}{dK_i} \equiv -\frac{n}{n-1} E_i \\P_{ij} &= \frac{K_j}{x_i} \frac{dx_i}{dK_j} \\Q_{ij} &= \frac{K_j}{y_i} \frac{dy_i}{dK_j} \\i, j &= 1, \dots, N\end{aligned}\tag{13.6}$$

Az f és az F a folyadék fázis tömeghez (kmol) kötődő érzékenység.

A definíciókat figyelembe véve, deriválásokkal kialakítható az érzékenységi modell. Deriváljuk a (13.3) egyenletet, K_i szerint, figyelembe véve, hogy az n is függvénye K_i -nek, és ezáltal kifejezhető az e_i illetve E_i is:

$$\begin{aligned}\frac{df(K_i, n(K_i))}{dK_i} &= \frac{\partial f}{\partial K_i} + \frac{\partial f}{\partial n} \cdot e_i = 0, \\ \frac{\partial f}{\partial K_i} &= \frac{(1-n) \cdot u_i}{[(K_i-1) \cdot n+1]^2} \equiv (1-n) \cdot \frac{x_i^2}{u_i}, \\ \frac{\partial f}{\partial n} &= -\sum_{i=1}^N \frac{K_i \cdot (K_i-1) \cdot u_i}{[(K_i-1) \cdot n+1]^2} \equiv -\sum_{i=1}^N K_i \cdot (K_i-1) \frac{x_i^2}{u_i}, \\ e_i &= (1-n) \cdot \frac{x_i^2}{u_i} \cdot \frac{1}{\sum_{i=1}^N K_i \cdot (K_i-1) \frac{x_i^2}{u_i}}, \\ E_i &= \frac{(1-n) x_i^2}{n u_i} \cdot \frac{K_i}{\sum_{i=1}^N K_i \cdot (K_i-1) \frac{x_i^2}{u_i}},\end{aligned}\tag{13.7}$$

ahol $i=1, 2, \dots, N$.

Deriváljuk a (13.2) egyenletet, K_i szerint, figyelembe véve, hogy az n is függvénye K_i -nek és ezáltal kifejezhető a p_{ii} , illetve P_{ii} is:

$$\begin{aligned}p_{ii} &= \frac{\partial x_i}{\partial K_i} + \frac{\partial x_i}{\partial n} \frac{dn}{dK_i} \equiv -\frac{n \cdot u_i}{[(K_i-1) \cdot n+1]^2} - \frac{(K_i-1) \cdot u_i}{[(K_i-1) \cdot n+1]^2} \cdot e_i, \\ p_{ii} &= -n \cdot \frac{x_i^2}{u_i} - (K_i-1) \cdot \frac{x_i^2}{u_i} \cdot e_i, \\ P_{ii} &= -n \frac{y_i}{u_i} - n \cdot (K_i-1) \cdot \frac{x_i}{u_i} \cdot E_i,\end{aligned}\tag{13.8}$$

ahol $i=1, 2, \dots, N$.

Ha az i és a j különbözik, akkor az x_i csak az n -en keresztül függ K_j -től:

$$\begin{aligned}p_{ij} &= \frac{\partial x_i}{\partial n} \frac{dn}{dK_j} = -(K_i-1) \cdot \frac{x_i^2}{u_i} \cdot e_j, \\ P_{ij} &= -n \cdot (K_i-1) \cdot \frac{x_i}{u_i} \cdot E_j.\end{aligned}\tag{13.9}$$

A gőzfázisbeli koncentrációkkal kapcsolatos érzékenységek az egyensúlyi összefüggések alapján a folyadék fázisbeli érzékenységekből könnyen kiszámíthatók:

$$\begin{aligned}q_{ii} &= x_i + K_i p_{ii}, \\Q_{ii} &= 1 + P_{ii}, \\i &\neq j \\q_{ij} &= K_i \cdot p_{ij}, \\Q_{ij} &= P_{ij}.\end{aligned}\tag{13.10}$$

Az érzékenységeket is számoló algoritmus az alábbi lesz:

- A K és u ismeretében a (13.4) iterációban meghatározzuk n értékét.
- A (13.2) alapján x_i , majd ebből az egyensúlyi összefüggéssel y_i értéke adódik.
- Az előbbieket ismeretében e_i , E_i , f_i , F_i majd p_{ij} , P_{ij} , q_{ij} és Q_{ij} a fenti összefüggések alapján számolható.

Az $[e, f, p, q]$ illetve az $[E, F, P, Q]$ hipermátrixok a gőz-folyadék egyensúly megoldásainak az egyensúlyi állandók bizonytalanságától függő hibáit jellemzik, a hibabecsléshez mennyiségileg is felhasználhatók. A fenti modell alapján elkészített algoritmust foglaljuk össze a következő részben, majd az alkalmazását példával illusztráljuk.

13.3. Érzékenység számítás – algoritmus

Tartalom: Egy N komponensből álló elegy gőz-folyadék egyensúlyát határozza meg.

Input adatok:

$u = [u_1, u_2, \dots, u_i, \dots, u_N]$,	(moltört)	összetétel vektor,
$K = [K_1, K_2, \dots, K_i, \dots, K_N]$,	(moltört/moltört)	egyensúlyi állandók vektora,
$n^0 \in (0,1)$,	(gőzfázis hányada)	iterációs kezdőérték,
ε	(relatív hiba)	az iteráció vége.

Az összetétel a szétválasztandó komponenselegy összetétele. Közbülső tányér esetében a belépő gőz és folyadék elegy keverékének összetétele. Fontos feltétel, hogy minden u_i nagyobb, mint nulla és kisebb, mint egy!

A megoldás feltétele:

$$\sum_{i=1}^N (K_i \cdot u_i) \geq 1 \text{ és } \sum_{i=1}^N (u_i / K_i) \geq 1.$$

Az egyensúlyi gőz hányad iterációs számítása:

$$n^{i+1} = n^i - \frac{f(n^i)}{\frac{\partial f}{\partial n}(n^i)},$$

ahol

$$f(n) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{K_i \cdot u_i}{(K_i - 1) \cdot n + 1} \right) - 1,$$
$$\frac{\partial f}{\partial n} = - \sum_{i=1}^N \frac{K_i \cdot (K_i - 1) \cdot u_i}{[(K_i - 1) \cdot n + 1]^2},$$

Az iteráció vége:

$$\left| \frac{n^{i+1} - n^i}{n^{i+1}} \right| \leq \varepsilon$$

A koncentrációk számítása ($i=1, 2, \dots, N$):

$$x_i = \frac{u_i}{(K_i - 1) \cdot n + 1}.$$

$$y_i = K_i \cdot x_i,$$

A gőzhányad érzékenységi vektor számítása ($i=1, 2, \dots, N$):

$$e_i = -(1 - n) \cdot \frac{x_i^2}{u_i} \cdot \frac{1}{\frac{\partial f}{\partial n}}.$$

A folyadék hányad érzékenységi vektor számítása ($i=1, 2, \dots, N$):

$$f_i = -e_i.$$

A folyadék koncentrációk érzékenységi mátrixának számítása ($i, j=1, 2, \dots, N$):

$$p_{ij} = -(K_i - 1) \cdot \frac{x_i^2}{u_i} \cdot e_j.$$

A főátlóbeli elemek korrekciója ($i=1, 2, \dots, N$):

$$P_{ii} = P_{ii} - \frac{x_i^2}{u_i} \cdot n.$$

A gáz koncentrációk érzékenységi mátrixának számítása ($i, j=1, 2, \dots, N$):

$$q_{ij} = K_i \cdot p_{ij}.$$

A főátlóbeli elemek korrekciója ($i=1, 2, \dots, N$):

$$q_{ii} = q_{ii} + x_i.$$

A fázis hányadok relatív érzékenységi vektorainak számítása ($i=1, 2, \dots, N$):

$$E_i = \frac{K_i}{n} \cdot e_i,$$
$$F_i = \frac{K_i}{(1-n)} \cdot f_i.$$

A folyadék koncentrációk relatív érzékenységi mátrixának számítása ($i, j=1, 2, \dots, N$):

$$P_{ij} = -n \cdot (K_i - 1) \cdot \frac{x_i}{u_i} \cdot E_j.$$

A főátlóbeli elemek korrekciója ($i=1, 2, \dots, N$):

$$P_{ii} = P_{ii} - n \frac{y_i}{u_i}.$$

A gáz koncentrációk relatív érzékenységi mátrixának számítása ($i, j=1, 2, \dots, N$):

$$Q_{ij} = P_{ij}.$$

A főátlóbeli elemek korrekciója ($i=1, 2, \dots, N$):

$$Q_{ii} = Q_{ii} + 1.$$

Output eredmények:

n

$x = [x_1, x_2, \dots, x_N]$

gőzhányad,

folyadék koncentráció vektor,

$$y=[y_1, y_2, \dots, y_N]$$

$$e=[e_1, e_2, \dots, e_N]$$

$$f=[f_1, f_2, \dots, f_N]$$

$$p=[p_{ij}]_{N,N}$$

$$q=[q_{ij}]_{N,N}$$

$$P=[P_{ij}]_{N,N}$$

$$Q=[Q_{ij}]_{N,N}$$

gőz koncentráció vektor,

gőzhányad érzékenységi vektor,

folyadék hányad érzékenységi vektor,

folyadék koncentráció érzékenységi mátrix,

gáz koncentráció érzékenységi mátrix,

folyadék koncentráció relatív érzékenységi mátrix,

gáz koncentráció relatív érzékenységi mátrix.

13.4. Érzékenység vizsgálatok

Számításainkat az előző fejezetben bemutatott algoritmus szerint végezhetjük el. Az első vizsgálatunkban egy három komponensű rendszert tekintettünk, amelyben az input változók legyenek a következők: $u=[0,33, 0,33, 0,34]$, $K=[20, 0,9, 0,1]$. Ez összetételben egy kiegyensúlyozott eset, a második komponens egyensúlyi állandója egy körüli, míg a másik kettő egy nagyságrenddel nagyobb, illetve kisebb.

A $\sum_{i=1}^3 (K_i \cdot u_i) = 6,931$, illetve a $\sum_{i=1}^3 \left(\frac{u_i}{K_i}\right) = 3,783$, azaz adottak a feltételek a gőz-folyadék egyensúly kialakulásához. A modell alapján elvégzett számítási eredményeket a 13.1. táblázatban foglaltuk össze. Az eredmények alapján az alábbi megállapításokat tehetjük:

- Az e_i mindegyik komponensnél pozitív, azaz mindegyik K_i növelésével nő a gőzfázis tömege. A K_1 már eléggé nagy, a változása alig hat a fázistömegre, egy 1%-os relatív változás, a fázis tömegben kevesebb, mint 0,06%-os változást idéz elő. A K_2 okozza a legnagyobb változást, de ez is csupán 0,33%-os. Egy ilyen munkapontban a K_i -k számításának bizonytalansága kevésbé hat a fázistömeg arányokra.
- Az f_i következésképpen mindegyik komponensnél negatív lesz, azaz bármelyik K_i növelésével csökken a folyadékfázis tömege.
- Érdekes a K_i hatása a koncentrációkra. Intuitív szabálynak gondolhatnánk azt, hogy a K_i növelésével nő az y_i és csökken az x_i , de a nemlinearitás ezt „felülírja”. Az első komponensnél K_1 növelésével mindkét koncentráció csökken, a

harmadiknál pedig mindkettő nő. A középső komponensnél figyelhető meg a „normális” viselkedés.

- A K_I hatása az összes állapotváltozóra elenyésző, ezért ha nagy hibával becsülhető is, a megoldás pontosságát kevésbé befolyásolja. Ellentmond ennek a P_{11} értéke, amely relatíve nagy változást jelez. A relatív hiba egy az egyben megjelenik az x_1 számításában. Ez a „jelenség” minden kis értékű állapotváltozónál jelentkezik. A fentiek következményei annak, hogy a K_I értéke kellően nagy, kis csökkentés, vagy további növelés a megoldást csak kevésbé változtatja.
- A relatív érzékenységek csak a legkisebb értékű állapot változóknál (x_1, y_3) érik el az egyet.

Az érzékenységeket hibabecsléshez is felhasználhatjuk az alábbi összefüggések alapján:

$$\Delta n = \sum_{i=1}^3 e_i \Delta K_i,$$

$$\Delta x_i = \sum_{j=1}^3 p_{ij} \Delta K_j,$$

$$\Delta y_i = \sum_{j=1}^3 q_{ij} \Delta K_j,$$

ahol Δ a megfelelő abszolút hibát jelenti.

Ennek megfelelően, ha a K_i értékeket 5%-os hibával számoljuk, akkor például az y_2 becsült hibája az alábbi lesz:

$$0,0000489 \cdot 1 + 0,188 \cdot 0,045 + 0,0188 \cdot 0,005 = 0,00845, \text{ azaz } y_2 = 0,3127 \pm 0,0085.$$

Ez 2,75% relatív hibának felel meg.

A második kísérletnél sokkal illékonyabb és feleslegben lévő komponenssel számoltunk (modellezve pl. egy magas illékony komponens tartalmú elegyet), amelyben az input változók legyenek a következők: $u = [0,7, 0,2, 0,1]$, $K = [100, 3, 0,1]$.

A $\sum_{i=1}^3 (K_i \cdot u_i) = 70,61$, illetve a $\sum_{i=1}^3 \left(\frac{u_i}{K_i}\right) = 1,074$, azaz adottak a feltételek a gőzfolyadék egyensúly kialakulásához, bár az összegekben lévő nagy különbség előre jelzi a kiegyensúlyozatlanságot. A számítások eredménye a 13.2. táblázatban látható. Az alábbi megállapítás tehető:

A kapcsolatok itt is hasonlóak az előzőhöz, a lényeges különbség a kis mennyiségű folyadék fázis.

A folyadék fázis tömege (mol): $(1-n)=0,008896\pm 0,005546$, a relatív hiba 62,3 %.

A fentiek jól illusztrálják azt, hogy az állapotváltozók kis értékeinél az egyensúlyi állandók becslési hibája nagyobb pontatlanságot eredményez. Vagy mindezt megfordítva, ha kis értékeket pontosan akarunk meghatározni, ahhoz nagyon jól becsült egyensúlyi állandókra van szükségünk.

Ez a modell a részletes egyensúlyi modell alkalmazása esetén is használható a szimulációs eredmények hibabecslésére.

13.1. táblázat. Kiegyensúlyozott input adatok

Állapóváltozók:

1-n	n	x ₁	x ₂	x ₃	y ₁	y ₂	y ₃
0,496969	0,503031	0,031257	0,347479	0,621264	0,625142	0,312731	0,062126

Érzékenységek:

	n-1	n	x ₁	x ₂	x ₃	y ₁	y ₂	y ₃
K ₁	-0,00149	0,001486	-0,00157	5,44E-05	0,001519	-0,0002	4,89E-05	0,000152
K ₂	-0,18368	0,183681	-0,01033	-0,17733	0,187663	-0,20665	0,187882	0,018766
K ₃	-0,56989	0,569892	-0,03206	0,020851	0,011206	-0,64115	0,018766	0,622384

Relatív érzékenységek:

	n-1	n	x ₁	x ₂	x ₃	y ₁	y ₂	y ₃
K ₁	-0,05981	0,059093	-1,00642	0,00313	0,048885	-0,00642	0,00313	0,048885
K ₂	-0,33264	0,328633	-0,29751	-0,4593	0,27186	-0,29751	0,540699	0,27186
K ₃	-0,11467	0,113292	-0,10256	0,006001	0,001804	-0,10256	0,006001	1,001804

13.2. táblázat. Túlsúlyban levő illékony komponens

Állapóváltozók:

1-n	n	x_1	x_2	x_3	y_1	y_2	y_3
0,008896	0,991104	0,007062	0,067064	0,925873	0,706219	0,201193	0,092587

Érzékenységek:

	n-1	n	x_1	x_2	x_3	y_1	y_2	y_3
K_1	-9,2E-06	9,21E-06	-7,1E-05	-4,1E-07	7,11E-05	-5,9E-06	-1,2E-06	7,11E-06
K_2	-0,00291	0,002908	-2,1E-05	-0,02242	0,022439	-0,00205	-0,00019	0,002244
K_3	-1,1087	1,108704	-0,00782	-0,04987	0,057686	-0,78205	-0,1496	0,931642

Relatív érzékenységek:

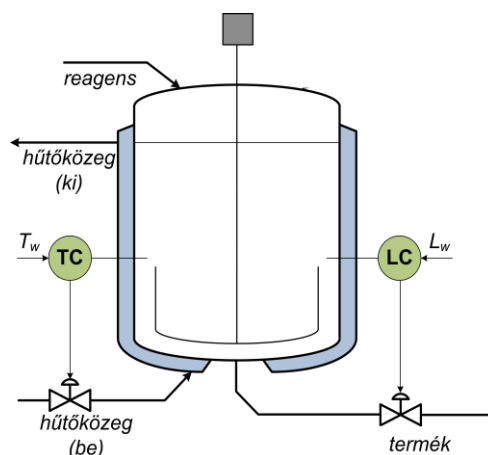
	n-1	n	x_1	x_2	x_3	y_1	y_2	y_3
K_1	-0,10359	0,00093	-1,00083	-0,00062	0,007679	-0,00083	-0,00062	0,007679
K_2	-0,98086	0,008804	-0,00871	-1,00287	0,072708	-0,00871	-0,00287	0,072708
K_3	-12,4634	0,111866	-0,11074	-0,07435	0,00623	-0,11074	-0,07435	1,00623

14. Kevert reaktor modellezése

Ebben a fejezetben a legegyszerűbb szerkezetű reaktorral, a benne lejátszódó legegyszerűbb kémiai reakcióval illusztráljuk a modellalkotást és a modell alapján elvégezhető rendszeranalízist. Amint azt látni fogjuk, az egyszerű reakció és reaktorszerkezet ellenére a reaktor dinamikus és stacionárius viselkedése nagyon is összetettnek tűnik.

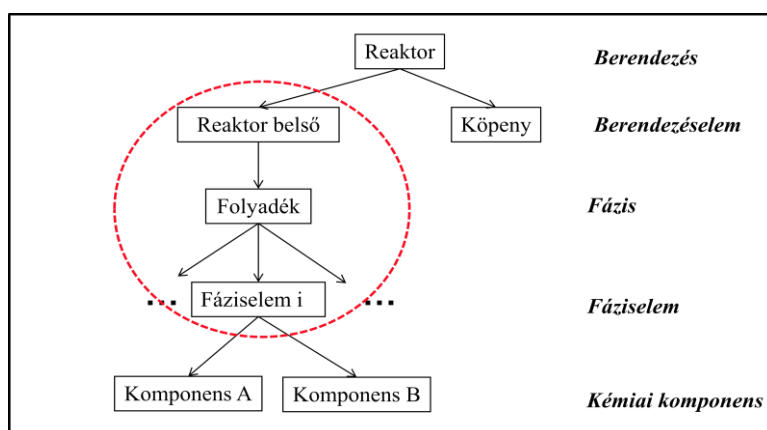
14.1. A rendszer struktúra

Legyen a reaktor egy kevert autokláv, amelynek a sémája a 14.1. ábrán látható. A reaktorban lévő folyadékfázisban egy $A \rightarrow B$ irreverzibilis, exoterm kémiai reakció játszódik le. A fázist egy keverő homogenizálja, a folyadékszintet és a hőmérsékletet szabályozóval kézben tarthatjuk. Az egyszerű reakció és reaktor ellenére egy ilyen objektum funkcionálisan sokoldalúan használható, többek között a technológiafejlesztésben a méretnövelés egyik kísérleti eszköze is lehet. Ezt tükrözi a 4.10. ábrán látható részletes struktúra (a 4. fejezetben mutattuk be). Maga a reaktor egy összetett technológiai rendszer része, amely három elemre dekomponálható. A reaktor testnek (nagy tömegű vas) akkor van szerepe, ha a reaktor hőmérséklet szabályozását elemezzük. Általánosságban, az autoklávban több fázis is kialakulhat, és fázisonként több kémiai komponens is lehet benne. A különböző szinteket a különböző folyamatok jellemzik, a fejlesztésben jól elkülöníthető a mikro- és makroszint.



14.1. ábra. A reaktor sémája.

A modellezés folyamatában gyakori eset az, hogy a rendelkezésünkre álló információk feldolgozása során megváltoztatjuk a struktúrát. Jelen vizsgálatunkban például a reaktort, mint a reakcióelegy (folyadékfázis, fáziselemek, A és B komponensek) és a köpeny részek rendszerére egyszerűsítjük (14.2. ábra). Sőt ha a folyadékfázisra a tökéletesen kevert üst áramlási modelljét használjuk, akkor a modellben a berendezésem, fázis, fáziselem szintek a berendezésem szintjén „egybecsúsznak”.



14.2. ábra. A modell struktúra.

14.2. A rendszer modell

A fázis és komponens tömegmérlegek felírása általában nem okoz problémát, a tömeg egyértelműen definiált és a megmaradásra vonatkozóan is egyértelműek a feltételek, a berendezés jól definiált pontjain van a környezettel tömegcsere. Az energiára vonatkozóan már nem ilyen egyszerű a helyzet. Először is többféle energiáról beszélhetünk, és ezek egymásba való átalakulása sem mindig kezelhető jól. Különböző okok miatt a kémiai technológiai rendszerek modellezésében leggyakrabban az entalpia mérlegből indulunk ki. A kevert reaktorra vonatkozóan a komponensmérlegeket a 14.3. ábra első sora mutatja. Az áramlásra a tökéletesen kevert üst modellt használjuk, a megváltozást a források adják, amelyek rendre a betáplálás, az elvétel és a kémiai reakció. A következő sor az entalpiamérleg, amely struktúrája hasonló a komponensmérleghez, azzal a különbséggel, hogy a kémiai reakció izoentalpiás folyamat, tehát az entalpia forrassűrűsége zérus! Más kérdés az, hogy az entalpiamérleget

nem ebben a formában szoktuk használni, hanem hőmérleggé alakítjuk át, amely a 14.3. ábra harmadik sora. Az átalakításnál a szorzat deriválás szabályát kell alkalmaznunk különböző átrendezésekkel együtt. A mérleg utolsó tagja a reakcióforrás, a benne szereplő szumma kifejezés a reakcióhő.

$$\begin{aligned} \frac{d(Vc_i)}{dt} &= B_{be,i}c_{be,i} - Bc_i + v_i V_r, \quad i = 1, \dots, n \\ \frac{d}{dt} \left\{ V \sum_{i=1}^n \left[c_i \left(h_{S,i} + \int_{T_S}^T c_{p,i} dT \right) \right] \right\} &= \\ &= B_{be} \sum_{i=1}^n \left[c_{be,i} \left(h_{S,i} + \int_{T_S}^{T_{be}} c_{p,i} dT \right) \right] - B \sum_{i=1}^n \left[c_i \left(h_{S,i} + \int_{T_S}^T c_{p,i} dT \right) \right] \\ V \sum_{i=1}^n (c_i c_{p,i}) \frac{dT}{dt} &= B_{be} \sum_{i=1}^n \left(c_{be,i} \int_{T_S}^{T_{be}} c_{p,i} dT \right) - \sum_{i=1}^n \left[v_i \left(h_{S,i} + \int_{T_S}^T c_{p,i} dT \right) \right] V_r \end{aligned}$$

14.3. ábra. Az entalpiamérleg és a hőmérleg kapcsolata.

A konkrét reaktor modellalkotásánál az alábbi feltételezésekből indulunk ki:

- Csak a fogyó komponensre írunk tömegmérleget (egy reakció esetén a többi komponens koncentrációja ebből algebrai egyenlettel kiszámítható), a reakcióelegyre és a köpenyre pedig hőmérleget. A köpenynél is a tökéletesen kevert üst áramlási modelljét használjuk.
- A fázissűrűség és a fajhők konstans értékek, a kémiai reakció elsőrendű, exoterm (az analízis során az exoterm reakciók mutatnak összetettebb képet).
- A szintszabályozó tökéletesen működik, ezért a be- és kilépő térfogatáramok (kis közelítéssel) megegyeznek.

A fentieknek megfelelően a reaktor modellje a 14.4. ábrán láthatóra egyszerűsödik. A modellek alapján végzett rendszervizsgálatok során gyakran alkalmazunk dimenziómentesítést, illetve ha lehetséges további egyszerűsítéseket is. Ezzel a vizsgálatokban variálandó paraméterek és az elvégzendő vizsgálatok számát csökkenthetjük, továbbá a dimenziómentes paraméterek lehetséges értelmezési tartománya is könnyebben megbecsülhető. A modell alapján megfigyelhető, hogy a **B**

komponens koncentrációja csak a B -re felírt mérlegegyenletben szereplő be- és kiáramlást befolyásolja, a többi jelenségre nem hat. A rendszeranalízishez ezért elegendő az, ha csak az A komponens tömegmérleget vesszük figyelembe (a c_A továbbiakban c). Természetesen a reaktor szimulációját a teljes modellre kell alapozni. Egy lehetséges dimenziómentesítést mutat az 14.514.4. ábra. (Vigyázat: dinamikus deklaráció, a baloldali változó már dimenziómentes!) A koncentrációt célszerű a belépő koncentráció stacionárius értékében mérni, ekkor stacionárius állapotban a koncentráció csak a $[0, 1]$ tartományba eshet. A hőmérsékletnél kissé bonyolultabb a helyzet, a hőmérséklet értékével kapcsolatban sokkal több „hétköznapi” tapasztalatunk van, és nem is érdemes minden esetben dimenziómentesíteni. Az időt általában az átlagos tartózkodási időre vonatkoztatjuk. A dimenziómentesített redukált reaktor modellt a 14.6 ábra mutatja.

$$\begin{aligned}\frac{d(Vc_A)}{dt} &= B(c_{A,be} - c_A) - Vr \\ \frac{d(Vc_B)}{dt} &= B(c_{B,be} - c_B) + Vr \\ V\rho c_p \frac{dT}{dt} &= B\rho c_p (T_{be} - T) + (-\Delta H_R)Vr - \alpha F(T - T_H) \\ (V\rho c_p)_H \frac{dT_H}{dt} &= (B\rho c_p)_H (T_{H,be} - T_H) + \alpha F(T - T_H) \\ r &= k_0 \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A\end{aligned}$$

14.4. ábra. A reaktor modellje.

Dimenziómentesítés (S index a stacionárius állapotot jelzi):

$$c = \frac{c}{c_{be,S}} \quad T = \frac{T}{T_{be,S}}$$

A szintszabályozás tökéletes:

$$V = \text{áll.} \quad t = \frac{t \cdot B_S}{V} \quad B = \frac{B}{B_S}$$

14.5. ábra. Dimenziómentesítés.

$$\frac{dc}{dt} = B(c_{be} - c) - \beta \cdot \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right) \cdot c$$
$$\frac{dT}{dt} = B(T_{be} - T) + \beta \cdot \delta \cdot \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right) \cdot c - \alpha(T - T_H)$$
$$\varepsilon \frac{dT_H}{dt} = B_H(T_{H,be} - T_H) + \alpha \cdot \varphi(T - T_H)$$

Dimenziómentes mennyiségek: $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon, \varphi$

14.6. ábra. A dimenziómentesített modell.

14.3. A Kalman rendszer

A Kalman rendszer definíción alapuló állapotér modellt a rendszertechnikai áttekintésben, mint egy *a posteriori* modellt mutattuk be. A rendszer vizsgálata során számos előnye van annak, ha az eredetileg *a priori* modellt is ilyen formára hozzuk, hiszen akkor az általános rendszeranalízis eszköztárát is közvetlenül alkalmazhatjuk.

Hogyan lehet a reaktor modellt állapotér modellé alakítani? Nagyon lényeges, hogy ez a kapcsolat nem egy-egy értelmű. Mindig a vizsgálat célja és a rendelkezésre álló egyéb információ szabja meg a definíciót.

Ha a reaktort, mint működő objektumot tekintjük és egy dinamikus szimulátorra alapozott vizsgálatokat akarunk végezni, akkor a 14.7. ábrán látható állapotér struktúra kialakítása célravezető. A térfogatáramok adják a bemenetet, a koncentráció, a reaktor és a köpeny hőmérséklet az állapotokat, a megfigyelésünk pedig (kimenet) a reaktorbeli koncentrációra és hőmérsékletre irányul. Az állapot átmeneti függvényt a 14.6. ábra differenciál egyenletei adják. Legyen ez az R_I rendszer.

Csökkenhető az állapotér modell rendűsége, ami a vizsgálatok egyszerűbbé tételét is jelenti, ha feltételezzük, hogy a köpeny hőmérséklet szabályozását (pl. egy slave köri) szabályozó tökéletesen elvégzi. Ekkor a vizsgálat a reakció elegy részre szűkíthető, a rendszer bemenete a reakció elegy térfogatárama és a köpeny hőmérséklete, az állapot

pedig a reaktorbeli koncentráció és hőmérséklet (14.8. ábra). Az állapot átmeneti függvény a 14.6. ábra első két differenciálegyenlete lesz. Ez az R_2 definíciója.

$$\begin{aligned} u &= [B, B_H], && \text{Bemenet} \\ x &= [c, T, T_H], && \text{Állapot} \\ y &= [c, T], && \text{Kimenet} \\ p &= [c_{be}, T_{be}, T_{H,be}, \alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon, \phi], && \text{Paraméterek} \\ x(0) &= [c(0), T(0), T_H(0)] && \text{Kezdeti állapot} \end{aligned}$$

14.7. ábra. A harmadrendű állapotter modell értelmezéséhez (R_1).

$$\begin{aligned} u &= [B, T_H], && \text{Bemenet} \\ x &= [c, T], && \text{Állapot} \\ y &= [c, T], && \text{Kimenet} \\ p &= [c_{be}, T_{be}, \alpha, \beta, \gamma, \delta], && \text{Paraméterek} \\ x(0) &= [c(0), T(0)] && \text{Kezdeti állapot} \end{aligned}$$

14.8. ábra. A másodrendű állapotter modell értelmezéséhez (R_2).

14.4. Reaktor stabilitás

Az egyik legfontosabb rendszer tulajdonság a stabilitás, csak stabil rendszer képes huzamos időn keresztül működésre. Stabilitásról többféle értelemben is beszélhetünk. A művelettanban tanult reaktor stabilitás a stacionárius munkapont körüli működésre vonatkozik. Vizsgáljuk az egyszerűbb R_2 rendszert, amelynek a stacionárius működését a 14.9. ábrán látható modell írja le. Ez a modell egy két ismeretlenes nemlineáris egyenletrendszer, amelynek grafikus megoldását a 14.11. ábra szemlélteti, a grafikus megoldáshoz szükséges algoritmust pedig a 14.10. ábra adja. (A matematikában az *egzisztencia vizsgálat* foglalkozik azzal, hogy van-e megoldás, az *unicitás vizsgálat* pedig azzal, hogy egy megoldás van-e?)

$$0 = B \cdot (c_{be} - c) - \beta \cdot \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right) \cdot c$$

Komponens mérleg

$$0 = B \cdot (T_{be} - T) + \beta \cdot \delta \cdot \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right) \cdot c - \alpha \cdot (T - T_H)$$

Hőmérleg

14.9. ábra. A stacionárius modell.

$$c(T) = \frac{c_{be}}{1 + \frac{\beta}{B} \cdot \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right)}$$

Komponens mérlegből

$$Q_R(T) = \beta \cdot \delta \cdot \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right) \cdot c$$

Reakció hőáram

$$Q_K(T) = B(T - T_{be}) + \alpha(T - T_H)$$

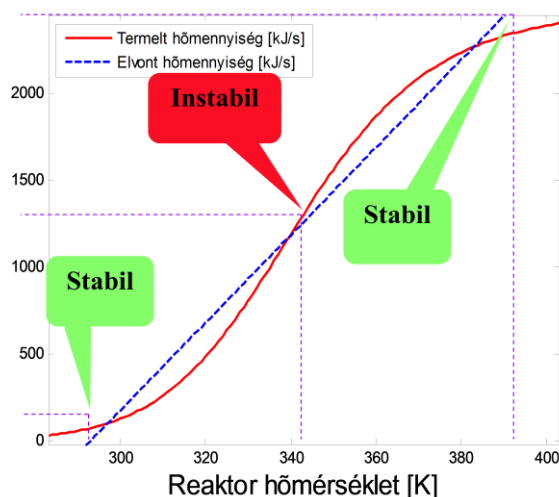
Átadási hőáram

Konvekcióval elvitt hőáram

Megoldás: $Q_R(T) = Q_K(T)$

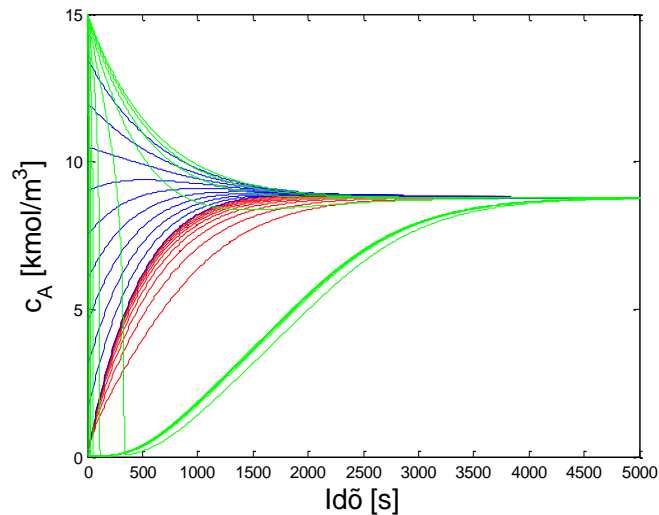
14.10. ábra. Algoritmus a grafikus megoldáshoz.

A 14.11. ábrán a reakció által termelt (Q_R) valamint a konvekcióval és átadással elvitt (Q_K) hőáramokat ábrázoljuk a hőmérséklet függvényében. A stacionárius munkapontra vonatkozó megoldást a metszéspontok adják. Érdekesség, hogy a legegyszerűbb reaktorban a legegyszerűbb kémiai reakcióval három fizikailag lehetséges megoldás is adódik. A klasszikus értelemben vett reaktor stabilitás e munkapontok stabilitás vizsgálatát jelentik. Képzeljük el az alsó munkapont körüli működést, miközben egy véletlenszerű zavarás következtében megnő a hőmérséklet. Ekkor az elvitt hőáram (Q_K) nagyobb a reakció által termelt hőáramnál (Q_R), ezért a zavarás megszűnte után a reaktor visszahűl az eredeti stacionárius hőmérsékletre. Ha a hőmérséklet a stacionárius pontban zavarás miatt csökken, a fordított relációk miatt, a megszűnte után visszamelegszik. Ezért az alsó munkapontban stabil a rendszer. Ugyanezzel a gondolatmenettel a felső munkapont stabilitása is kimutatható. Ezekkel szemben viszont a középső munkapont instabil, mivel magasabb hőmérsékleten a reakciós hőáram a nagyobb (és a reaktor tovább melegszik), alacsonyabb hőmérsékleten pedig kisebb (és a reaktor kihűl).

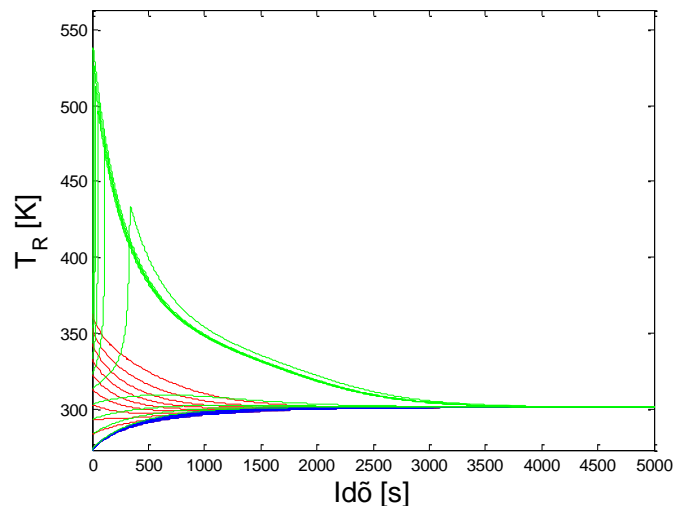


14.11. ábra. A grafikus megoldás illusztrálása (három megoldás).

Látjuk tehát, hogy ugyanazon input adatok mellett a reaktornak, akár háromféle kimenete is lehet. Az a kérdés, hogy a valóságban melyik realizálódik. Ez egyértelműen a reaktor kezdeti állapotától függ, és az állapotváltozók időbeli lefutásán követhető (lásd 14.12. és 14.13. ábrák). A különböző kezdő állapotokból indítva, különböző időbeli trajektóriák mentén közelít a megfelelő stacionárius pontba. A fázissíkon ($T - c$ diagram) kijelölhetők a stacionárius pontokhoz tartozó vonzás tartományok. A dinamikus rendszer sohasem tart az instabil stacionárius pontba, sőt ha a rendszert ebből indítjuk, kezdetben lassan, majd egyre gyorsulva távolodik attól, és végül újra lelassulva valamelyik stabil pontba kerül. A hőmérséklet lefutásokon megfigyelhető az „elfutás” jelensége is (inflexió pont a hőmérséklet emelkedés szakaszában), amit majd a heterokatalitikus reaktorok modellezésében részletezünk.

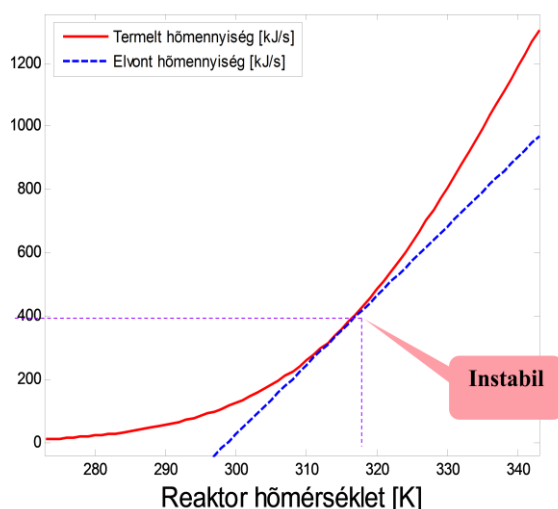


14.12. ábra. A koncentrációváltozás különböző kezdőértékekkel.

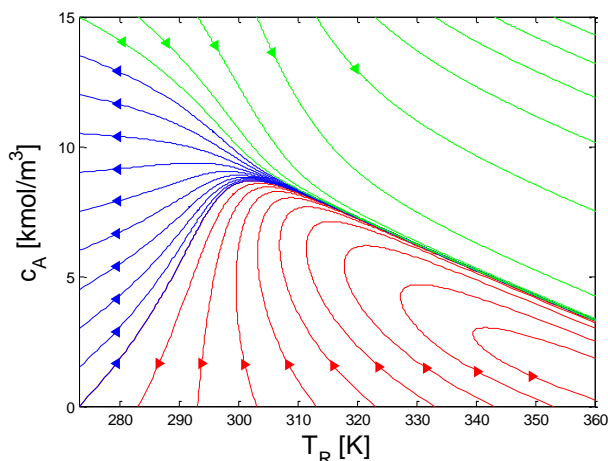


14.13. ábra. A hőmérsékletváltozás különböző kezdőértékekkel.

Más-más paraméter értékeknél a két hőáram viszonya más és más. Előállhat a 14.14. ábrán látható eset is. Mivel itt a Q_R mindig nagyobb egyenlő a Q_K -nál, ez egy instabil stacionárius munkapontot jelent. A fázissíkon (14.15. ábra) jól látható, hogy nincs stacionárius munkapont a hőmérséklet monoton nő (a lehetséges fizikai határig).



14.14. ábra. A grafikus megoldás illusztrálása (egy megoldás).



14.15. ábra. Ábrázolás a fázissíkban (egy stacionárius megoldás).

A stabilitás vizsgálatot elvégezhetjük, bármilyen bonyolult rendszer esetén, a matematikában tanult *Ljapunov stabilitási kritériumok* alapján is. Ehhez az R_2 állapot átmeneti függvényének Jacobi mátrixát, majd annak a sajátértékeit kell meghatározni. A Jacobi mátrix, a függvények állapotváltozók szerinti parciális deriválásával adható meg (14.16. ábra).

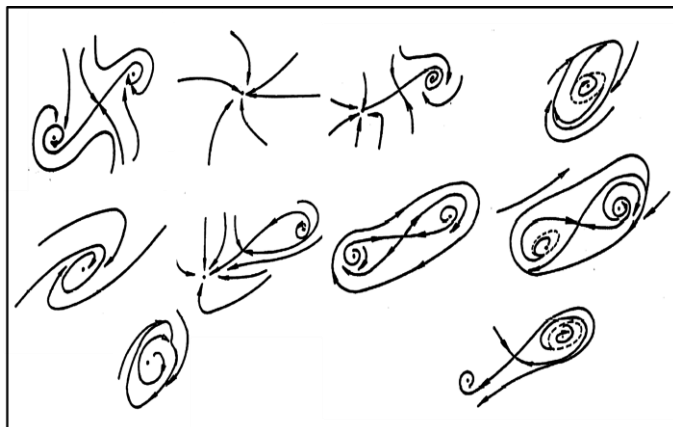
Az adott munkapont stabilitásának feltétele, hogy a sajátértékek a komplex számsík bal oldalára essenek (a valós részeknek negatívnak kell lenniük). A sajátérték számítására szolgáló másodfokú egyenlet baloldali utolsó tagja mindig pozitív, ezért negatív valós

rész akkor lesz, ha az elsőfokú tag együttthatója is pozitív. Ez adja a kritériumot, amely tartalmilag is jól értelmezhető. A baloldal a reaktor hűtési képességeit jelenti, a konvekcióval és a hűtéssel elvitt hő valamint a kémiai reakció hőtermelő képességének csökkenése. Ezzel szemben a jobboldalon a kémiai reakció hőtermelési képessége áll. Ha az előbbi a nagyobb, akkor a rendszer stabil. A stabil dinamikus rendszer viselkedése a munkapont körül a sajátértékek jellegétől függ. Valós sajátérték esetén az időbeli trajektóriát egy exponenciális függvény, komplex sajátérték esetén pedig a koszinusz és exponenciális függvények szorzata jelöli ki.

Jacobi mátrix:	$J = \begin{bmatrix} -\left(B + \frac{\partial r}{\partial c}\right) & -\frac{\partial r}{\partial T} \\ \delta \frac{\partial r}{\partial c} & \delta \frac{\partial r}{\partial T} - (B + \alpha) \end{bmatrix}$
Sajátérték számítás:	$\lambda^2 + \left[\alpha + B \left(\frac{\partial r}{\partial c} + 1\right) - \delta \frac{\partial r}{\partial T}\right] \lambda + \delta \frac{\partial r}{\partial c} \frac{\partial r}{\partial T} = 0$
Stabilitási kritérium:	$\alpha + B \left(\frac{\partial r}{\partial c} + 1\right) > \delta \frac{\partial r}{\partial T}$
Reakciósebesség megváltozása:	$\frac{\partial r}{\partial c} = \beta \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right)$
	$\frac{\partial r}{\partial T} = \beta \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right) c \frac{\gamma}{T^2}$

14.16. ábra. A Ljapunov féle stabilitás vizsgálathoz.

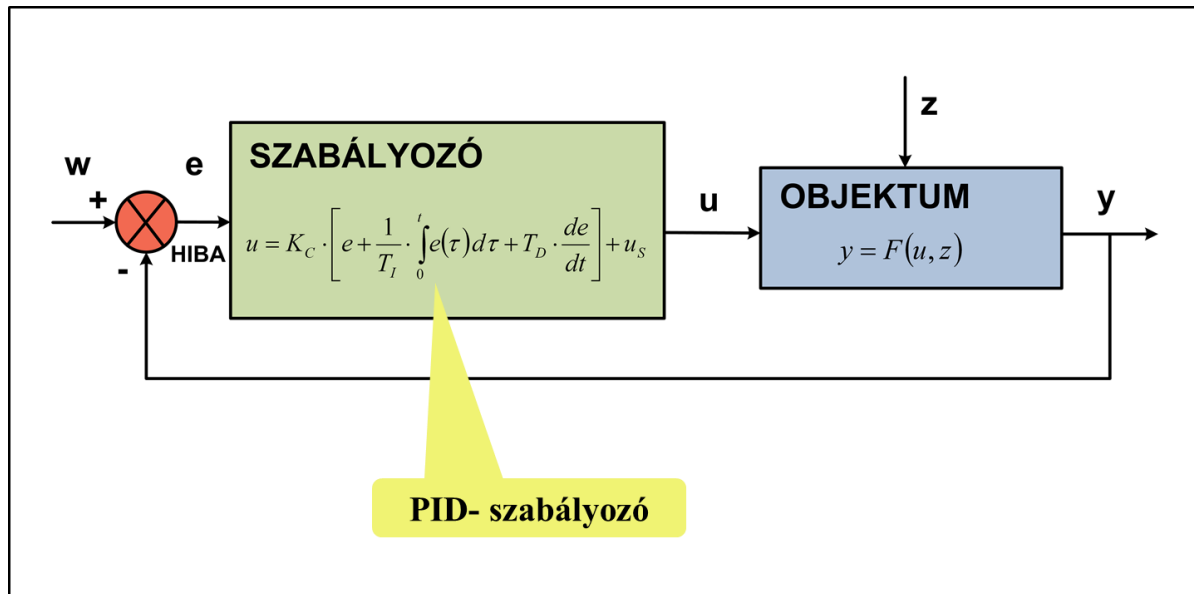
A legegyszerűbb reaktor, a legegyszerűbb kémiai reakcióval, a stacionárius munkapont környezetében a 14.17. ábrán látható tízféle „viselkedést” mutathatja a fázissíkon. Ez rávilágít arra, hogy miért tűnik szinte „kiismerhetetlennek” a kémiai reaktorok viselkedése. Másrészt viszont az a szerencsénk, hogy nem túlságosan bonyolult modellek segítségével mégis megismerhetjük, és érdekeinknek megfelelően racionálisan üzemeltethetjük azokat.



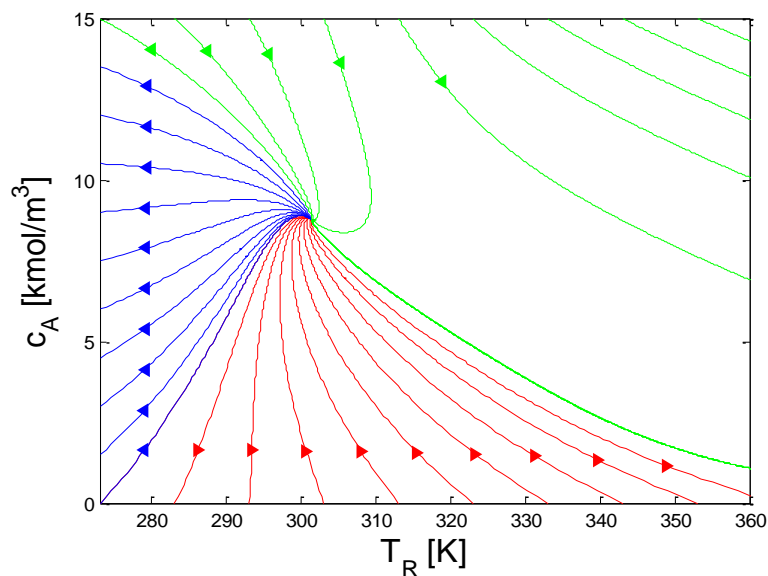
14.17. ábra. Lehetséges viselkedés a stacioner munkapont környezetében [61].

14.5. A rendszer működtetése

A stabilitásvizsgálat után néhány üzemeltetési tényezőre is felhívjuk a figyelmet. Mint ismert az üzemeltetéshez különböző szabályozókat használunk. A legegyszerűbb szabályozó is alapvetően megváltoztathatja a dinamikus rendszer tulajdonságait. A 14.18. ábrán a reaktor hőmérséklet szabályozását emeljük ki (az y szabályozott jellemző a T reaktor hőmérséklet, az u beavatkozó jellemző pedig a T_H hűtőközeg hőmérséklet, amit egy slavekörü szabályozó a hűtőközeg térfogatáramát meghatározó szeleppel biztosít). Alkalmazzunk csupán egy egyszerű (masterkörü) P-szabályozót, és a 14.14. ábrával illusztrált instabil rendszer máris stabillá válik. A 14.19. ábra alapján látható, hogy bárhonnán indítva a rendszert a szabályozó az alapjelenként megadott hőmérséklet környezetébe viszi a rendszert (a P szabályozó maradó szabályozási hibát eredményezhet [58]).



14.18. ábra. Stabilizálás hőmérséklet szabályozással.



14.19. ábra. A stabilizált munkapont.

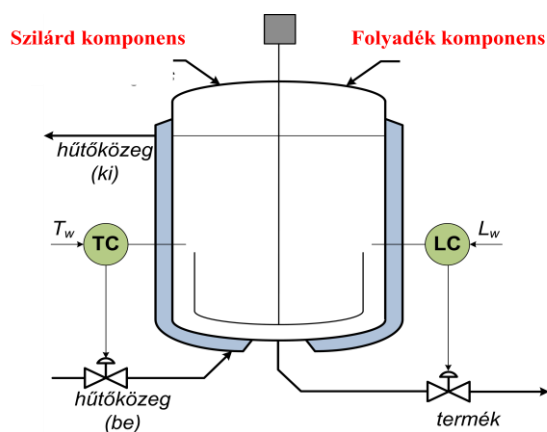
A lehetséges munkapontok közül, mindig a számunkra gazdaságosot kell választani, ezért a rendszer indításakor biztosítani kell a reaktor kiválasztott munkapontba való juttatását. Ezt a technológia tervezés során a hőmérséklet szabályozóval kiegészített R_I modell alapján végzett dinamikus szimulációval ellenőrizhetjük.

15. Többfázisú reaktor modellezése

Ebben a fejezetben a már megismert jól kevert üstreaktorban egy olyan reakció játszódik le, amelyhez az egyik komponenst folyadék a másik komponenst pedig szilárd fázisban visszük be. A szilárd fázisú komponens, oldódással kerül a folyadék fázisba, ahol a kémiai reakció lejátszódik.

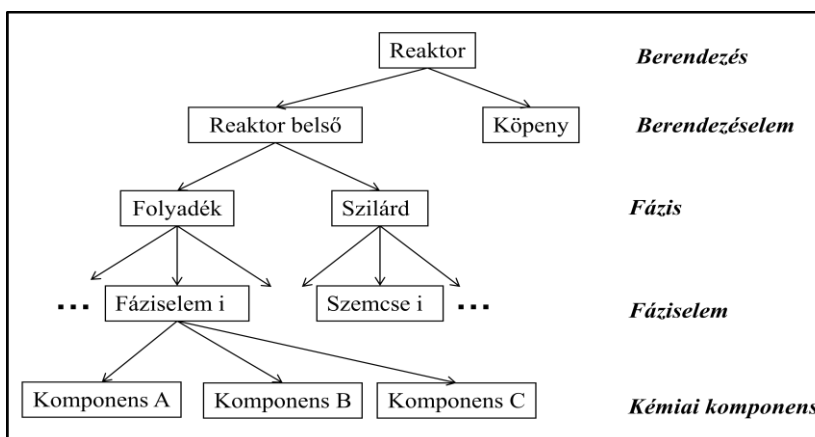
15.1. Rendszer struktúra

Legyen a reaktor egy kevert hűthető és fűthető autokláv, amelynek a sémája a 15.1. ábrán látható. A reaktorban, folyadékfázisban egy $A + B \rightarrow C$ irreverzibilis kémiai reakció játszódik le. A fázist egy keverő homogenizálja, a folyadék szintet és a hőmérsékletet, szabályozókkal tartjuk kézben.



15.1. ábra. A kétfázisú reaktor sémája.

A rendszer struktúráját a 15.2. ábra tükrözi. A reaktort a köpenyre és a reaktor belső terére dekomponáljuk. Az előbbire az előző fejezetben elmondottak érvényesek, az utóbbit pedig ugyancsak két részre, a folyadék, illetve a szilárd fázisokra bontjuk. A szilárd fázist a nagyszámú szemcséből álló szemcsehalmaz adja, amely modellezésére a 9.3. fejezetben már utaltunk.



15.2. ábra. A rendszer struktúrája.

A berendezéselemek között hőátadás, a fázisok között komponens- és hőátadás alakul ki. A folyadékfázisban az **A**, **B** és **C** komponensek különböztethetők meg, amelyek között kémiai reakció megy végbe. A direkt érintkező fázisok között a hőátadás olyan intenzív, hogy a két fázis hőmérsékletét nem különböztetjük meg. A reaktorban mindkét fázisra a tökéletesen kevert üst hidrodinamikai modelljét használjuk.

15.2. Az oldódás modellje

Először a rendszer változóival kapcsolatban kell, az eddigiekhez képest, kiegészítő megjegyzéseket tennünk. Az oldódási folyamat vizsgálata során a szilárd fázist populációként kezeljük és első lépésként a fáziselem (a szemcse) belső tulajdonságát kell definiálni. A kristályosítás szakirodalmában a szemcsét leggyakrabban gömbnek tekintik és az r sugárral (vagy az átmérővel) definiálják. Ha a szemcse a gömbtől fizikailag jelentősen eltér, akkor annak hatását az ún. *alaktényezővel* kompenzálják (és marad a gömb feltételezés). A populációként kezelt szilárd fázis és a homogénként leírt folyadék fázisok között kialakuló komponensátadást eddig még nem elemeztük. Ehhez szükségünk van a reaktorbelőben lévő szilárd fázis $T_{\{r\}}$ fázistérbeli modelljére, amely csupán az oldódási folyamatot tartalmazza:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} (v_r \Psi) = 0 \quad , \quad r \in [r_0, r_\infty]$$

Az r alsó határát a lehető legkisebb szemcseméret, a felső határát pedig az a pont jelenti, amelynél az elemszám sűrűség értéke zérus és nagyobb szemcse a rendszerben

már nincs. Ez praktikusan a beadagolt szilárd fázisban lévő legnagyobb szemcsénél egy kissé nagyobb értéket jelent.

A kristályosítás szakirodalmában használt sűrűségfüggvény és az elemszám sűrűség között, amint azt korábban már láttuk, az alábbi összefüggés érvényes:

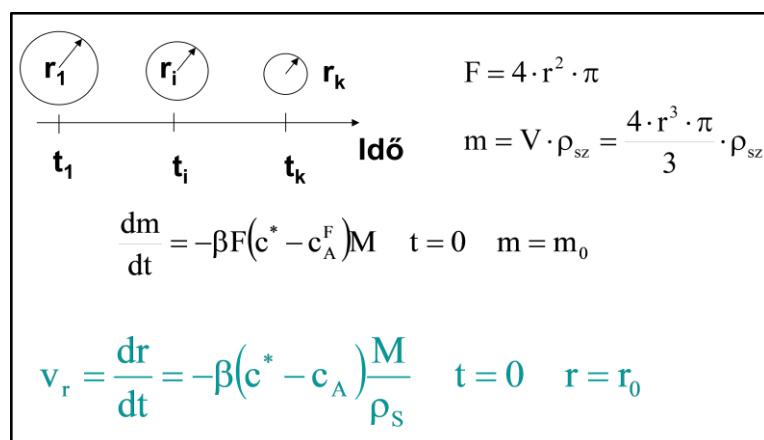
$$\varphi(t, r) = \frac{\Psi(t, r)}{\mathfrak{S}_{\{r\}}(\Psi)}$$

A sűrűségfüggvények momentumai legyenek az alábbiak:

$$\mu_i = \mathfrak{S}_{\{r\}}(r^i \varphi), \quad i = 1, 2, \dots$$

$$m_i = \mathfrak{S}_{\{r\}}(r^i \Psi), \quad i = 0, 1, \dots$$

A populációs mérlegben az elem modell a v_r sebességben jelenik meg. Ez az oldódási sebesség, amely az r koordináta (vigyázat ez nem a henger koordináta!) menti konvektív áramlást jelenti és az értelmezését a 15.3. ábra szemlélteti. Az oldódás hajtóereje a folyadékfázisban kialakuló koncentrációnak az egyensúlyi koncentrációtól való eltérése. Egykomponensű szilárd fázis esetén az egyensúlyi koncentráció a folyadékfázisban kialakuló állapotváltozók függvénye (gyakran csak a hőmérséklettel számolunk). A komponensátadási tényező számítását illetően a művelettanban tanultakra hivatkozunk (15.4. ábra). Ebből az látszik, hogy a komponens átadási tényező a sugárnak is lehet függvénye.



15.3. ábra. A szemcse modell.

Oldódási kinetika:

$$Nu = 2 + C \cdot \sqrt{Re} \cdot \sqrt[3]{Pr} \quad 0.3 \leq C \leq 1$$
$$Nu = \frac{\beta 2r}{D}; \quad Re = \frac{2rv_{cs}}{v}; \quad Pr = \frac{v}{D}; \quad v_{cs} = \frac{4r^2 \pi g (\rho_s - \rho_f)}{18v\rho_f};$$
$$\beta = \frac{D}{r} + K\sqrt{r} \quad K = \frac{C \cdot D}{3v} \sqrt{\frac{\pi g (\rho_s - \rho_f)}{\rho_f}} \cdot \sqrt[3]{\frac{v}{D}}$$

15.4. ábra. Paraméter meghatározás.

Végül arra a kérdésre is megadhatjuk a választ, hogy mennyi lesz a komponens átadási áram (I) a szilárd és folyadék fázis között, mert az a komponens tömeg, ami a szilárd fázisból kikerül, az maradéktalanul a folyadék fázisba kerül. A meghatározáshoz először az m_3 momentumra (rendszerváltozó) vonatkozó mérleget kell előállítani. A már tanultak alapján megszorozzuk a populációs egyenlet mindegyik tagját r^3 -nal, majd r szerint integrálunk a teljes értelmezési tartományra. A parciális integrálás módszerét alkalmazva az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\frac{dm_3}{dt} = r_0^3 [v_r \Psi](t, r_0) + 3\mathfrak{I}_{\{r\}}(r^2 v_r \Psi)$$

Az első tag az r_0 méretű szemcsék azonnali beoldódását jelenti a folyadék fázisba, a második tag pedig a méretcsökkenésből adódó beoldódást írja le. Ez az összefüggés láthatóan nem független az elemszám sűrűségtől, bár az első tag csak az alsó határon vett értékét, a második pedig egy integrálját jelenti. Az első tag nem fejezhető ki momentumok függvényeként, számításához az elemszám sűrűség ismerete szükséges. A második tagot akkor tudjuk a populációs mérleg megoldásától függetleníteni, ha a v_r arányos az r^i ($i=-2, -1, 0, 1$) hatvánnyal. Minden más esetben ennél is egy információátviteli problémát kell megoldani. A fentieket figyelembe véve a komponens átadási áram az alábbi módon definiálható:

$$I = \frac{4\pi Q_S}{3M} \{r_0^3 [v_r \Psi](t, r_0) + 3\mathfrak{I}_{\{r\}}(r^2 v_r \Psi)\}$$

Ezzel tisztáztuk a modellben szereplő változókat, a szemcse modellt és a fázisok közötti komponens átadás leírását, következhet a reaktor komplett modelljének az összeállítása.

15.3. A rendszer modell

A sort a reaktor belső szilárd fázisára vonatkozóan kezdjük. Az elemszám sűrűsége felírható differenciális mérlegegyenletet látjuk a 15.5. ábra első sorában. A mérlegegyenletben szerepelnie kellene a belépő \vec{N} szemcseszám áramnak, amelyet direkt formában azonban nem használunk. Helyette a szilárd térfogatáramot használjuk, a kettő kapcsolata az átlagos szemcsetérfogat felhasználásával az alábbi lesz:

$$\vec{N} = \frac{3B_S}{4\pi\mu_{3,be}}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} (v_r \Psi) &= \frac{3B_S}{4\pi\mu_{3,be}} \varphi_{be} - \frac{B}{V} \Psi, \quad r \in [r_0, r_\infty) \\ \Psi(t, r_\infty) &= 0, \quad \Psi(0, r) = \Psi_0(r) \text{ adott} \\ v_r &= -\beta [c^*(T) - c_A] \\ I_A &= \frac{4\pi Q_S}{3M_A} \{ r_0^3 [v_r \Psi](t, r_0) + 3 \mathfrak{I}_{\{r\}}(r^2 v_r \Psi) \} \end{aligned}$$

15.5. ábra. A szilárd fázis modellje.

Az elemszám forrása a szilárd fázis betáplálása és a zagy elvétele. Az oldódási sebességben szereplő egyensúlyi koncentráció, amint azt korábban is említettük, általánosságban a folyadék fázis állapotváltozóinak függvénye, de elsősorban a hőmérsékletnek. Erre vonatkozóan a szakirodalomban fenomenologikus összefüggések (termodinamikai megfontolásokra épülő mérési adatokra illesztett statisztikus összefüggések) állnak rendelkezésre. Az A komponens szilárd és folyadék fázisok közötti komponens átadási árama számolható a 15.5. ábra utolsó sorában lévő összefüggéssel.

Az elemszám momentum mérlegei láthatók a 15.6 ábrán. Sajnos ezek formális átalakításokkal nem függetleníthetők az elemszám mérlegtől, elsősorban a sűrűség függvény határon vett értéke miatt, amely az átadási áram számításához szükséges. Az információátviteli probléma megoldása a bevezetett szilárd fázis szemcse eloszlásától is függ, ezért valamennyire is általánosítható megoldás nem valószínű. Ugyanakkor szerencsére az adott parciális differenciálegyenlet numerikus megoldása nem jelent nehéz feladatot. A sűrűségfüggvény ismeretében a momentumok definíció szerint számolhatók, vagy a 15.6. ábra differenciálegyenlet rendszere numerikusan is megoldható.

$$\frac{dm_0}{dt} = \frac{3B_S}{4\pi\mu_{3,be}} - \frac{B}{V}m_0 + [v_r\Psi](t, r_0)$$
$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{3B_S\mu_{i,be}}{4\pi\mu_{3,be}} - \frac{B}{V}m_i + r_0^i[v_r\Psi](t, r_0) + i\mathfrak{S}_{\{r\}}(r^{i-1}v_r\Psi)$$
$$i = 1, 2, \dots$$

15.6. ábra. Momentum mérlegek.

A reaktor belsőre felírt teljes tömegmérleget mutatja a 15.7. ábra első sora. A szilárd fázis térfogata az m_3 momentumból közvetlenül számítható, a V a gyors szintszabályozás következtében konstans, ezért a szilárd térfogatarány is közvetlenül számolható. Mindezek miatt a tömegmérlegből a B kilépő térfogatáram határozható meg.

A B elvét ismeretében a 15.8. ábrán látható komponens tömegmérlegek a folyadék fázisbeli koncentrációk számítására használhatók.

Végül a 15.9. ábra foglalja magába a reaktor belsőre és a köpenyre vonatkozó hőmérlegeket (lásd a kevert üst reaktor modelljét), amelyekből a reaktor és a köpeny hőmérséklete meghatározható. A mérlegekben szereplő paraméterek (fázis tömegsűrűség, fajhő, reakcióhő, oldáshő, stb.) a fázisok állapotváltozóinak függvénye, bizonyos feltételek mellett egyesek konstansnak tekinthetők.

$$\frac{d[V_S \rho_S + (1 - \varepsilon)V \rho_F]}{dt} = B_S \rho_{S,be} + B_{be} \rho_{F,be} - B[\varepsilon \rho_S + (1 - \varepsilon)\rho_F]$$
$$V_S = \frac{4\pi}{3} m_3$$
$$V = V_F + V_S$$
$$\varepsilon = \frac{V_S}{V}$$

15.7. ábra. Tömegmérleg, térfogatok, térfogatarány.

$$\frac{d(V_F c_A)}{dt} = B_{be} c_{A,be} - B(1 - \varepsilon)c_A - V_F r + I_A$$
$$\frac{d(V_F c_B)}{dt} = B_{be} c_{B,be} - B(1 - \varepsilon)c_B - V_F r$$
$$\frac{d(V_F c_C)}{dt} = B_{be} c_{C,be} - B(1 - \varepsilon)c_C + V_F r$$
$$r = k(T)c_A c_B$$

15.8. ábra. Komponens tömegmérlegek.

$$(V_S \rho_S c_{p,S} + V_F \rho_F c_{p,F}) \frac{dT}{dt} = B_S \rho_S c_{p,S} (T_S - T) + B_{be} \rho_F c_{p,F,be} (T_{F,be} - T) -$$
$$- \alpha F (T - T_H) + V_F k c_A c_B (-\Delta H_r) + I_A M_A (-\Delta H_{old})$$
$$(V \rho c_p)_K \frac{dT_H}{dt} = (B \rho c_p)_H (T_{H,be} - T_H) + \alpha F (T - T_H)$$

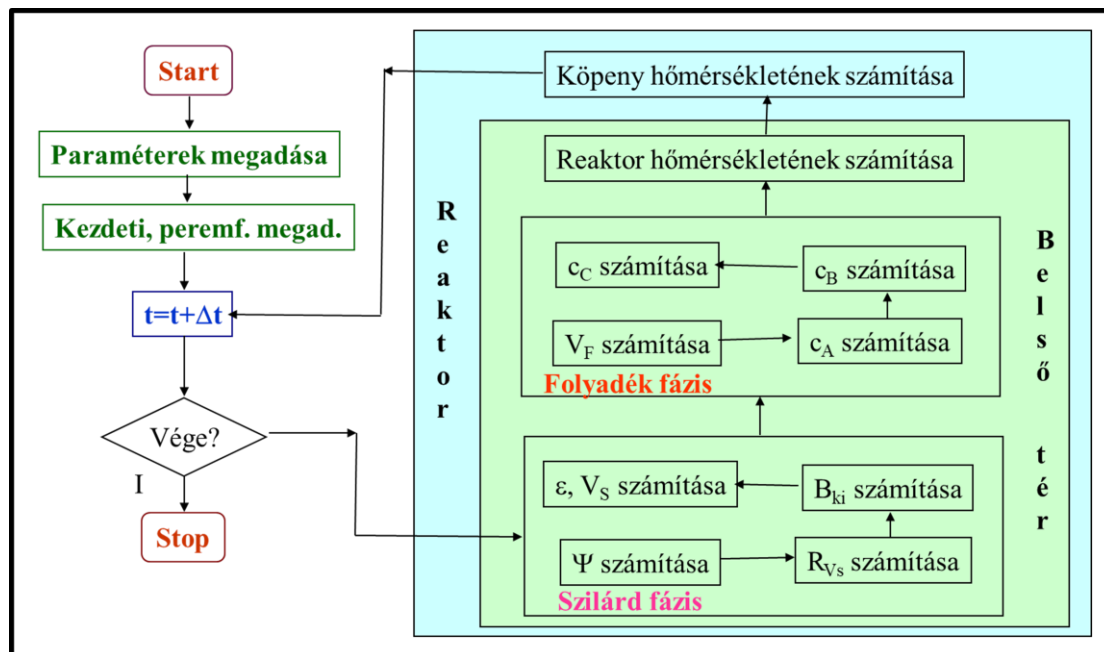
15.9. ábra. Hőmérlegek.

15.4. Számítási algoritmus

Amint azt korábban már láttuk, egy szimulációs algoritmus input adatai általában az alábbiak lehetnek:

- A belépő áramokra vonatkozó információk (a differenciál egyenletek peremfeltételeihez is).
- A modell paramétereinek értékei.
- A kezdeti értékekre vonatkozó információk.
- A modell zárttá tételét biztosító egyéb paraméter.

A modell alapján elkészített algoritmus sémája a 15.10. ábrán látható, amely figyelembe veszi a rendszer szintszabályozó adta sajátosságát is.



15.10. ábra. A szimulációs algoritmus sémája.

Feltételezve, hogy a rendelkezésre álló felhasználói szoftver alkalmas közös differenciálegyenlet rendszer megoldására, itt csak a parciális egyenlet megoldására térünk ki. Ehhez az r koordináta értelmezési tartományát n egyenlő részre osztjuk:

$$\Delta r = \frac{r_{\infty} - r_0}{n},$$

az osztópontokban a koordináta értéke:

$$r_i = r_0 + (i - 1) \cdot \Delta r, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Az elemszám mérleg diszkretizálásával, progresszív differenciákat használva, az alábbi közönséges differenciálegyenlet rendszert kapjuk:

$$\frac{d\Psi_i}{dt} = -\frac{v_r(r_{i+1})\Psi_{i+1} - v_r(r_i)\Psi_i}{\Delta r} + \frac{3B_S}{4\pi\mu_{3,be}}\Psi_{be,i} - \frac{B}{V}\Psi_i, \quad i = 1, \dots, n$$
$$\Psi_{n+1} = 0$$

Ezt megoldva az átadási áram és a különböző momentumok is számolhatók:

$$I_A = \frac{4\pi Q_S}{3M_A} \left\{ r_0^3 [v_r(r_1)\Psi_1] + 3 \sum_{i=1}^n [r_i^2 v_r(r_i)\Psi_i] \right\},$$

$$m_j = \sum_{i=1}^n [r_i^j v_r(r_i)\Psi_i], \quad i = 0, 1, \dots$$

Az eltávozó termék térfogatárama a teljes tömegmérleg és az m_3 momentum mérleg figyelembevételével a 15.11. ábrán bemutatott algoritmus szerint számolható.

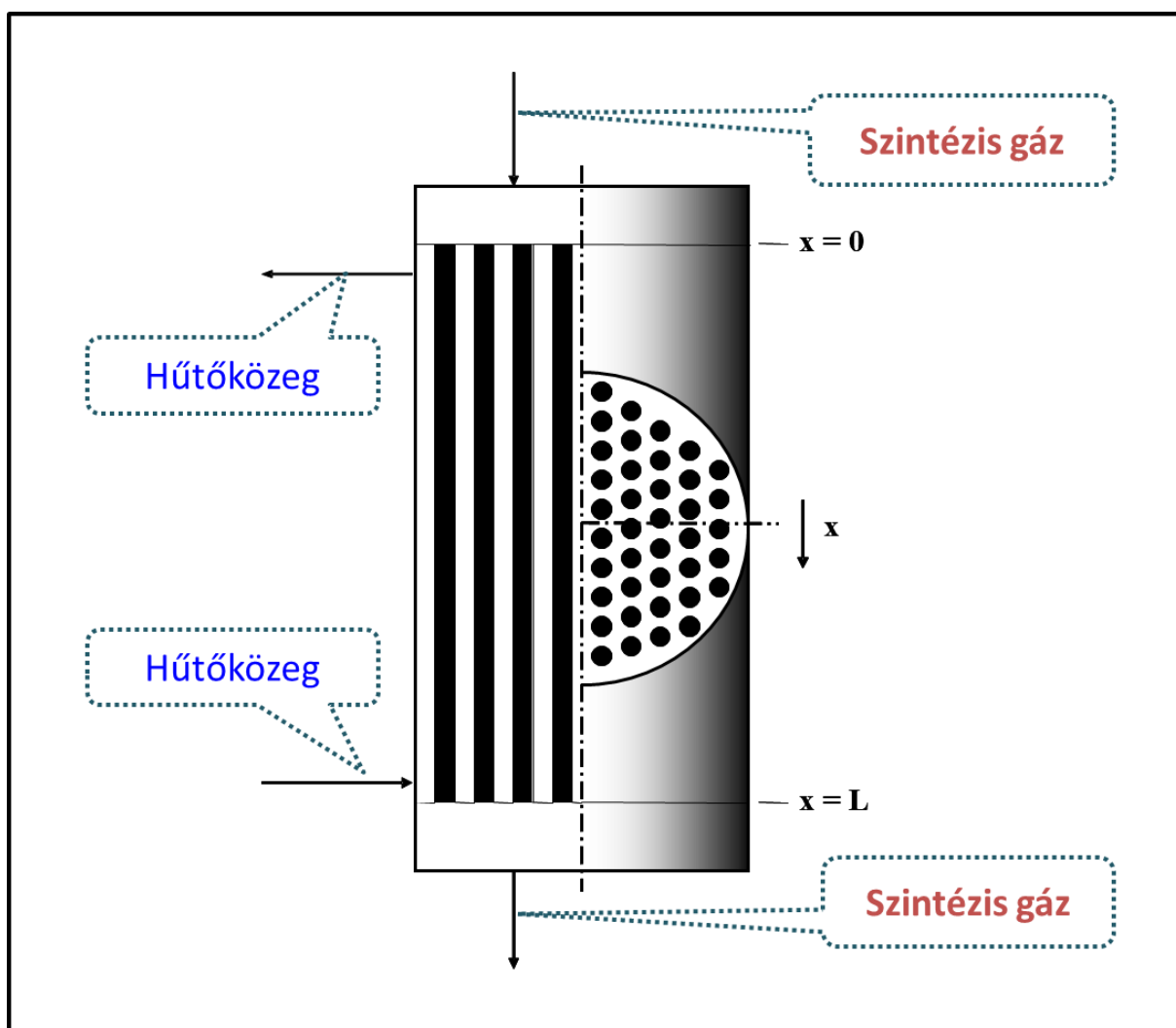
A bemutatott szimulációs algoritmus felhasználható a reaktor tervezéséhez, vizsgálatához, illetve irányítási rendszerének a kialakításához.

$$B = \frac{ad - b}{a \frac{m_3}{V} - c}$$
$$a = \frac{4\pi}{3} (\varrho_S - \varrho_F)$$
$$b = B_S \varrho_S + B_{be} \varrho_{F,be}$$
$$c = \varepsilon \varrho_S + (1 - \varepsilon) \varrho_F$$
$$d = \frac{3B_S}{4\pi} + r_0^3 v_r(r_1) \Psi_1 + 3 \sum_{i=1}^n [r_i^2 v_r(r_i) \Psi_i]$$

15.11. ábra. A térfogatáram számolása.

16. Heterokatalitikus reaktor modellezése

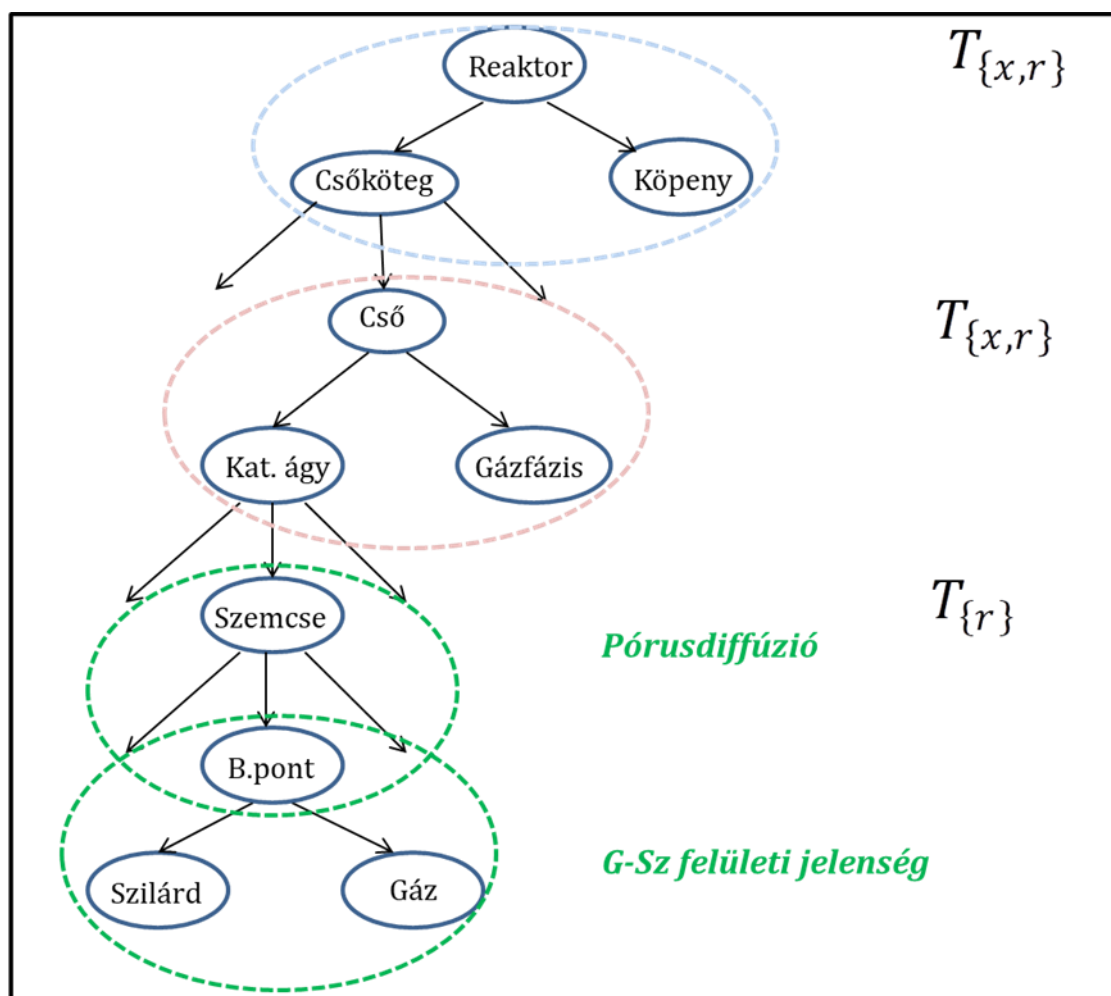
A hierarchikus modellezés fogalmainak, módszereinek alkalmazását egy összetettebb példán is bemutatjuk. A vizsgálandó technológia egy ipari méretű heterokatalitikus reaktor, amelynek sémája a 16.1. ábrán látható. A reaktorban, szintézisgázból (H_2 és CO) metanolt állítunk elő. A reaktor csököteges, a csövekben álló katalizátorágy van, a csövek között áramlik a hűtőközeg. A rendszerre és a lejátszódó reakcióra vonatkozó teljes adatlista egy korábban definiált esettanulmányban elérhető, ill. az alkalmazott modellezés technika is publikált [14, 20, 56, 57, 62].



16.1. ábra. A reaktor sémája.

16.1. Dekomponálás és struktúra

A modellalkotás első lépése a dekomponálás, amelyet a 16.2. ábra szemléltet. A dekomponálás, amint azt korábban már kifejtettük, egy összetett kevésbé egyértelmű művelet, viszont alapvetően meghatározza a kialakuló modell adekvátságát. A rendszert először két fő részre bontjuk, a csövek közötti részre (*köpeny*) és a katalizátort tartalmazó csövekre (*csőköteg*). A két rész fallal elválasztott, közöttük csak hőátadás értelmezhető. Ez a kétfázisú rendszer a sok cső miatt egy folytonos térben, a szimmetria viszonyok miatt pedig a $T_{\{x,r\}}$ (r itt a reaktor sugár) henger koordináta rendszerben írható le. A szintézisgázt a csövek között egyenletesen osztják el és terelő lemezekkel a hűtőfolyadék is egyenletesen áramlik keresztül a köpeny részen, ezért nem okoz nagy hibát, ha a sugár menti változást elhanyagoljuk. Ezzel a kétdimenziósból az egy dimenziós modellé ($T_{\{x\}}$ geometriai tér) való átalakítás információátviteli problémáját elimináljuk.



16.2. ábra. A rendszer dekompozíciója.

A *köpeny* részre hőmérleget kell készíteni, amelyben a hőátadást kell figyelembe venni és elegendő az ideális kifolyási áramlástanai modell alkalmazása. A dekomponálás során ezen az ágon további teendő nincs.

A *csőköteg* számos párhuzamosan kapcsolt *csőből* áll. Mindegyik cső környezete a $T_{(x)}$ térben ugyanaz, a szintézis gáz is egyenletesen elosztott a csövek között, ezért mindegyik *cső* modellje teljesen megegyezik, közöttük semmiféle direkt kölcsönhatás nincs.

A *cső* az álló *katalizátor ágyra* és a rajta keresztül áramló *gázfázisra* bontható fel. A kettő bonyolult kölcsönhatásban van egymással, amely egyetlen, de számos elemi részfolyamatot magába foglaló bruttó kémiai reakcióval is definiálható. A *gázfázisra* felírt $T_{(x,r)}$ (r itt a cső sugár) térbeli differenciális mérlegek ezt a bruttó reakciót, mint forrást tartalmazzák. (Kihangsúlyozzuk: ez az r koordináta a csőre, a fentebbi szint r koordinátája pedig a reaktor térére vonatkozik!).

A kétdimenziós geometriai tér itt is átalakítható egydimenzióssá, de ez egy külön információátviteli problémát jelent, amit egy CFD szimulációval vizsgálunk. A dekomponálás során ezen az ágon további teendő nincs.

A katalizátor ágy az egyes *katalizátor szemcsékre* dekomponálható. A *katalizátor szemcsében* és környezetében elemi folyamatok bonyolult rendszere alakul ki. Ennek részleteiről a fizikai kémiában, művelettanban, és a különböző technológia tantárgyakban tanulhattak. A modellezéshez itt absztrakcióra van szükség.

A gázfázisban lévő komponensek és a szilárd fázis közvetlen kapcsolata a szemcse felületén, a belső repedésekben (pórusokban), stb. alakul ki. A direkt kémiai reakción kívül, gázfázisú és különböző mechanizmusú szilárdfázisú diffúzióval is számolhatunk. A heterokatalitikus kémiai reakció egy olyan összetett folyamatot takar, amely egyszerűbb folyamatok eredőjeként jelenik meg. Egy absztrakció során, mindezt úgy képzeljük el, hogy a szemcsét egy homogén entitásnak tekintjük, aminek egy belső pontjában végbemegy a bruttó kémiai reakció, és a szemcsében a transzportot a komponensek (molekuláris és azon feletti) diffúziója végzi. A katalizátor szemcse modellezéséhez a szemcse alakjától függő megfelelő koordináta rendszert használunk.

Gyakoriak a gömb közeli alakzatok (gömbi koordináta rendszer), és a szimmetria viszonyokat is figyelembe véve a $T_{\{r\}}$ (r itt a szemcse sugár) térbeli mérlegeket tekintjük, amelyben a konduktív (vezetéses) áramlás és a kémiai reakció szerepel. Mivel a felsőbb szintű modellben a gömbi koordináta nem szerepel, ezért itt is jelentkezik egy információátviteli probléma, amit részleteiben tárgyalunk, analitikus és numerikus (CFD) számításokat is felhasználva.

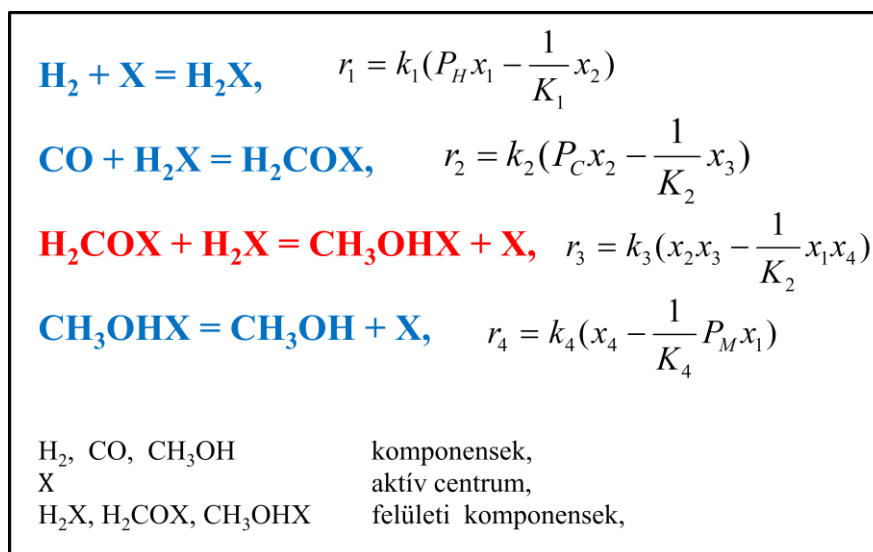
A szemcse egy *belső pontján* az elemi jelenségek rendszerét a bruttó reakcióba foglaljuk, amely ugyancsak egy információátvitelt jelent. Alulról felfelé haladva tehát itt jelentkezik az *első információátviteli probléma* (gáz-szilárd felületi jelenség), amely eredménye a katalizátor szemcse belső pontján érvényes reakciósebességi összefüggés. Hogyan lesz ebből a katalizátor szemcse egészére vonatkozó reakciósebesség, amely már a cső egy belső pontjára lesz érvényes? Ez adja a *második információátviteli problémát* (pórusdiffúzió). Ha a teljes csőre egy egydimenziós modellt akarunk használni, akkor a sugár menti inhomogenitást kell megbecsülni. Elhanyagolható ez, vagy egy újabb, *harmadik információátviteli problémát* kell megoldani? A további részekben ezeknek a részleteit mutatjuk be, különböző modellezés technikai „fogásokat” alkalmazva és integrálva a heterokatalízis szakirodalmának klasszikus fogalmait is [59].

16.2. A határfelületi jelenségek modellezése

A katalizátor szemcse egy belső pontjában, a gáz-szilárd felület egy kis környezetében, akár mások mellett, a 16.3. ábrán látható jelenségek valószínűsíthetők. A szintézis gáz komponensei a katalizátor „aktív” pontjain (X) megkötődnek és aktivált állapotú „közbülső” komponenseket adnak. Ez újabb gáz komponenst tud befogni, és az aktivált komponensek között kémiai reakció is lejátszódik, amelyben aktivált metanol keletkezik és egy aktív hely is felszabadul. A felületi jelző kapcsán tudnunk kell, hogy a felületen komponens adódhat át, de komponens és kémiai reakció is csak véges térfogatban létezhet. Ez is jelzi, hogy az ábrabeli „reakció mechanizmus” elemi reakciólépéseken túli összetettebb folyamatokat takar. Ennek ellenére tekinthetjük azt egy „kvázi” reakció mechanizmusnak, és a reakciókinetikában tanultaknak megfelelően reakció sebességeket rendelhetünk hozzá (ez is egy absztrakció).

Az ábrán a szintézis gáz komponensek és a metanol aktivitását a parciális nyomással (p) (lehetne a c moláris koncentrációval is, az átváltás a gáztörvény alapján bármikor megtehető) fejeztük ki, az aktivált komponensek pedig molört koncentrációval (x) szerepelnek (n az összes mol).

Mindegyik folyamatot egyensúlyinak tekintjük, és az egyensúlyra a tömeghatás törvénye érvényesül. A gáz-szilárd felületi jelenségek koncentrált paraméterű modelljét a 16.4. ábrán foglaltuk össze.



16.3. ábra. Határfelületi jelenségek.

$\frac{dC_H}{dt} = -r_1,$	$\frac{dC_C}{dt} = -r_2,$	$\frac{dC_M}{dt} = r_4$
$\frac{d(nx_1)}{dt} = -r_1 + r_3 + r_4,$	$\frac{d(nx_2)}{dt} = r_1 - r_2 - r_3$	
$\frac{d(nx_3)}{dt} = r_2 - r_3,$	$\frac{d(nx_4)}{dt} = r_3 - r_4$	

16.4. ábra. Komponens mérlegek (mikroszint).

Nyilván való, hogy a magasabb hierarchia szintű modellekben az „aktivált komponensek” nem szerepelhetnek, ezért a teljes modellből (mikroszint) ezek eliminálandók. Ez egy információátviteli probléma, és közelítésre van szükség. A kiegészítő információ itt az, hogy a katalizátor végig a reaktorban van és a kezdeti átmenettől eltekintve a szilárd fázisban egy kvázistacionárius állapotnak kell kialakulnia. (Ez nem jelenti azt, hogy pl. a katalizátor öregedése ne jelentene egy dinamikus változást, de annak az időállandója lényegesen nagyobb.) Ezen kiegészítéssel a mikroszintű modell analitikusan átalakítható a 16.5. ábrán látható makroszintű modellé, amely már csak a bruttó reakció komponenseit és reakció sebességét (lásd 16.6. ábra, a koncentrációkat a jobb áttekinthetőség végett indexekkel jelölve) tartalmazza. Az eredményt a „felületi” komponens koncentrációk fokozatos eliminálásával kapott másodfokú egyenlet megoldásával kapjuk meg. A két megoldás közül csak az egyiknél lesz zérus a reakciósebesség értéke egyensúly esetén. Ez azt jelenti, hogy az átalakítás egyértelmű.

Feltételek: kvázi stacioner állapot

$$\frac{d(nx_i)}{dt} = 0, \quad i = 1, \dots, 4$$

Bruttó reakció: $2\text{H}_2 + \text{CO} = \text{CH}_3\text{OH}$

Makro szintű komponens mérleg:

$$\frac{dC_H}{dt} = -2r,$$
$$\frac{dC_C}{dt} = -r,$$
$$\frac{dC_M}{dt} = r$$

16.5. ábra. Komponens mérlegek (makroszint).

$$r = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$a = K_1 K_2 K_3 \left\{ \frac{\frac{1}{k_4} - \left(\frac{2K_1(1+K_2C)}{k_1} + \frac{K_2}{k_2} \right)}{1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4}} H + \frac{2}{k_1} \right\} \left\{ K_1 \left[\frac{\frac{1}{k_4} - \left(\frac{2K_1(1+K_2C)}{k_1} + \frac{K_2}{k_2} \right)}{1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4}} H + \frac{2}{k_1} \right] C + \frac{1}{k_1} \right\} +$$

$$+ \left\{ \left[\frac{\frac{1}{k_4} - \left(\frac{2K_1(1+K_2C)}{k_1} + \frac{K_2}{k_2} \right)}{1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4}} \right] \left[\frac{\left(\frac{2K_1(1+K_2C)}{k_1} + \frac{K_2}{k_2} \right) \frac{M}{K_4} + \frac{1+K_1H+K_1K_2HC}{k_4}}{1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4}} \right] \right\}$$

$$-b = \frac{1}{1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4}} \left[K_1 K_3 H \left[2K_1 K_2 \left[\frac{\frac{1}{k_4} - \left(\frac{2K_1(1+K_2C)}{k_1} + \frac{K_2}{k_2} \right)}{1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4}} H + \frac{2}{k_1} \right] C + \frac{1}{k_2} \right] + \right. \\ \left. + 2 \frac{\left(\frac{2K_1(1+K_2C)}{k_1} + \frac{K_2}{k_2} \right) \frac{M}{K_4} + \frac{1+K_1H+K_1K_2HC}{k_4}}{1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4}} - \frac{1}{k_4} \right] + \frac{K_3}{k_3}$$

$$c = \frac{KH^2C - M}{K_4 \left(1 + K_1H + K_1K_2HC + \frac{M}{K_4} \right)^2}$$

16.6. ábra. Analitikus reakciósebesség.

Bár analitikusan számíthatjuk a reakció sebességét, de az összetettsége miatt a használata mégsem praktikus. Gyakori fogás a reakciókinetikában az, hogy csak az ún. *sebesség meghatározó folyamatokat* tekintik végesnek, míg a többit végtelenül gyorsnak feltételezik. (Vigyázat: sohasem a reakciósebesség végtelen, vagy zérus, hanem a sebességi állandó tart végtelenhez, a hajtóerő pedig zérushoz, miközben a kettő szorzata véges marad!) Itt a k_1 értékéhez viszonyítva a k_4 egy nagyságrenddel, a k_2 és k_3 pedig több nagyságrenddel nagyobb.

A 16.7. ábrán két esetet is bemutatunk, hogy érzékeltesük a feltételek egyszerűsítő hatását. Ha csupán a k_1 véges, akkor az $r^{(1)}$ már kellően egyszerű, jól látható, hogy egyensúlyban zérus, és a nevezőben lévő plusz tagok pedig jelzik a heterokatalitikus folyamatokra jellemzően, a reakció összetettségét. Az egyensúlyi paramétereken túl csak

az első folyamat kinetikai konstansa szerepel benne. Csak a nevező bővül, ha a negyedik részfolyamat végességét is figyelembe vesszük ($r^{(2)}$).

Sebesség meghatározó: 1. részfolyamat:

$$r^{(1)} = \frac{1}{2} k_1 \frac{P_H - \frac{1}{K_1 \sqrt{K_2 K_2 K_4}} \sqrt{\frac{P_M}{P_C}}}{1 + \frac{1}{\sqrt{K_2 K_2 K_4}} \sqrt{\frac{P_M}{P_C}} + \sqrt{\frac{K_2}{K_2 K_4}} \sqrt{P_M P_C} + \frac{P_M}{K_4}}$$

Sebesség meghatározó: 1. és 4. részfolyamat:

$$r^{(2)} = \frac{1}{2} k_1 \frac{P_H - \frac{1}{K_1 \sqrt{K_2 K_2 K_4}} \sqrt{\frac{P_M}{P_C}}}{1 + \frac{1}{\sqrt{K_2 K_2 K_4}} \sqrt{\frac{P_M}{P_C}} + \sqrt{\frac{K_2}{K_2 K_4}} \sqrt{P_M P_C} + \frac{P_M}{K_4} + \frac{1}{2} \frac{k_1}{k_4} \left(P_H - \frac{1}{K_1 \sqrt{K_2 K_2 K_4}} \sqrt{\frac{P_M}{P_C}} \right)}$$

16.7. ábra. Egyszerűsített reakciósebességek.

Mindkét sebességi egyenlet pontosságát ellenőrizhetjük, ha az eredetihez hasonlítjuk. A 16.8. ábrán az első két sor a modellek átlagos hibáit (%) és szórásait mutatják. Meglepően nagy hibákat látunk, a sebességi állandók több nagyságrendi különbsége ellenére. Ez nyilván valóan elfogadhatatlan, ezért egy kiegészítést teszünk.

Modell (i)	Átlagos hiba (%)	Szórásnégyzet	Illeszthető paraméterek száma
1	68,6	0,783	0
2	37,5	0,736	0
3.1	16,4	1,084	1(2)
3.2	18,8	0,418	1(2)
4	2,8	0,527	2(4)

16.8. ábra. Az egyszerűsített reakció sebességek pontossága.

Tekintsük az $r^{(2)}$ kinetikai konstansát „illeszthető” paraméternek. Ez azt jelenti, hogy az Arrhenius összefüggés két paraméterét nem a mikroszintű modellből vesszük, hanem

a pontos sebességi adatokhoz illesztve határozzuk meg azok értékeit. Ez egy feltételes szélsőérték feladat megoldását jelenti, amelyet paraméter identifikációnak nevezünk.

Az $r^{(4)}$ számításánál a nevezőt is leegyszerűsítjük, de itt is alkalmazunk egy Arrhenius típusú illeszthető paramétert. A 16.8. ábrán látható $r^{(3.1)}$ az illesztett $r^{(3)}$ -ra vonatkozik, az $r^{(3.2)}$ -nél pedig egy egyszerűsített (dekomponált) paraméter identifikációt végeztünk, amellyel az identifikáció egyszerűsítésének az „árát” becsültük meg. A tanulság az, hogy az egyszerűsített identifikáció csak kevésbé ront a pontosságon. A legpontosabb megoldást az $r^{(4)}$ adja, szinte elenyésző hibával. Ez egyszerű, tartalmilag is jól áttekinthető, ezért a szint információátviteli megoldásának a reakciósebesség e formáját tekintjük.

Illesztett paraméter: $k'(T)$

$$r^{(3)} = k'(T)r^{(2)}$$

Illesztett paraméter: $k'(T), C(T)$

$$r^{(4)} = k'(T) \frac{p_H - \frac{1}{\sqrt{K}} \sqrt{\frac{p_M}{p_C}}}{1 + C(T)p_M}$$

16.9. ábra. Illesztett reakciósebességek.

A fenti elemzés eredménye más szintekre is általánosítható. Az információátvitel során a makroszintű modell pontossága makroszintű illeszthető paraméterek definiálásával jelentősen növelhető (az általános részben erre, mint makroszinten definiált új anyagi tulajdonságra utaltunk).

16.3. A pórus diffúziós modell

Ebben az alfejezetben megvizsgáljuk azt, hogyan lehet a katalizátor egy belső pontjára vonatkozó kinetikából, a katalizátorágy egy pontjára (a katalizátor szemcse egészére) vonatkozó reakciósebességet meghatározni. A pórusdiffúzióra vonatkozóan a szakirodalom is gazdagnak tekinthető. Amint azt korábban már láttuk, a katalizátor szemcsét egy homogén gömbnek tekintjük, amelyben kémiai reakció játszódik le, és a

komponensek (bonyolult, önmagában is összetett) diffúzióval transzportálódnak. A gömbi koordináta rendszerben felírt, a szimmetria viszonyokat figyelembe vevő stacionárius modell a 16.10. ábrán látható. A másodrendű differenciálhányados miatt állapotváltozókként két peremfeltétel szükséges. Az $r=R$ felületen az állapotváltozók a környezeti értékükkel adóttak, az $r=0$ középpontban pedig a gradiensük zérus, hiszen az $r<0$ irányba nem lehet kiáramlás. A komponensek között egy kémiai reakció van, ezért ilyen esetben lehetőség van arra, hogy egy differenciál egyenlettel számoljunk valamelyik komponens koncentrációját, a többi komponensét pedig egy algebrai egyenlettel. Sőt itt a hőmérség struktúrája is olyan, hogy a hőmérséklet is egy algebrai egyenlettel számolható. Az átalakított modell a 16.11. ábrán látható. A paraméter szám minimalizálása végett gyakori az analízisben dimenziómentes változók alkalmazása (16.12. ábra).

Differenciális mérlegek:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \left(-D_i \frac{dc_i}{dr} \right) \right] = v_i \mathfrak{R},$$

$$i \in \{H, C, M\}$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \left(-\lambda \frac{dT}{dr} \right) \right] = (-\Delta H_r) \mathfrak{R},$$

Perem feltételek:

$$r = 0, \frac{dc_i}{dr} = 0, \frac{dT}{dr} = 0$$

$$r = R, c_i = c_i^0, T = T^0$$

16.10. ábra. A pórus diffúziós modell.

Differenciális mérleg a szénmonoxidra:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \left(D_C \frac{dc_C}{dr} \right) \right] = \mathfrak{R},$$

Perem feltételek: $r = 0, \frac{dc_C}{dr} = 0,$
 $r = R, c_C = c_C^0.$

Algebrai összefüggések:

$$c_H(r) = c_H^0 - \frac{2D_C}{D_H} [c_C^0 - c_C(r)]$$

$$c_M(r) = c_M^0 + \frac{D_C}{D_M} [c_C^0 - c_C(r)]$$

$$T(r) = T^0 + \frac{(-\Delta H_R)D_C}{\lambda} [c_C^0 - c_C(r)]$$

16.11. ábra. Az átalakított modell.

Differenciális mérleg a szénmonoxidra:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \left(\frac{dy_C}{dr} \right) \right] = \frac{R^2}{D_C c_{C0}} \mathfrak{R},$$

Perem feltételek: $r = 0, \frac{dy_C}{dr} = 0,$
 $r = 1, y_C = y_C^0.$

Algebrai összefüggések:

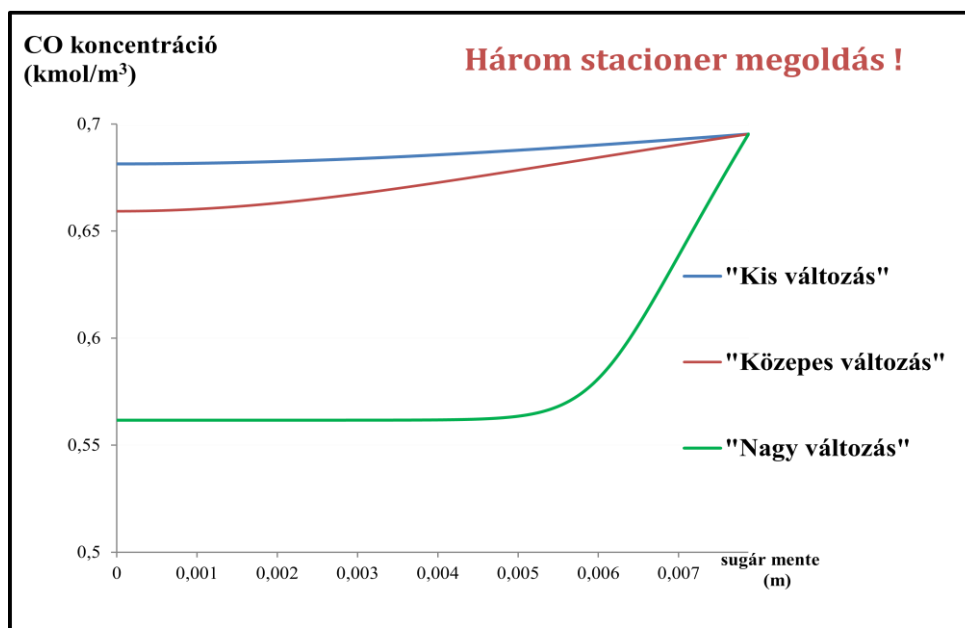
$$y_H(r) = y_H^0 - \frac{2D_C}{D_H} [y_C^0 - y_C(r)]$$

$$y_M(r) = y_M^0 + \frac{D_C}{D_M} [y_C^0 - y_C(r)]$$

$$T(r) = T^0 + \frac{(-\Delta H_R)D_C c_{C0}}{\lambda} [y_C^0 - y_C(r)]$$

16.12. ábra. A dimenziómentesített modell.

Bizonyos paraméter értékek mellett a modell CFD megoldása a 16.13. ábrán látható. Érdekes, hogy nem is egy, hanem három fizikailag lehetséges megoldás is látható. Hogy a valóságban melyik érvényesül, az a kezdeti állapottól függ és a dinamikus modellel számolható.



16.13. ábra. A modell CFD megoldása.

Az információátviteli probléma megoldásánál a szakirodalomban is használt ún. *hatásossági tényező* fogalmára támaszkodhatunk (16.14. ábra). Ez nem más, mint a szemcsében kialakuló átlagsebesség és a felületi állapotváltozókkal számolt reakciósebesség hányadosa. A szemcsében csak diffúzió és reakció van, ezért az átlagsebesség a felületi diffúziós árammal is kifejezhető (16.14. ábra alsó sor). A katalizátorágy modelljében majd a felületi állapotváltozók és a szemcsébeni átlagsebesség (rendszerszintű változók) szerepelnek. Az átszámítást ezért a hatásossági tényező jelenti, és még az ún. ε *üres keresztmetszeti tényezőt* (a szemcse tere és a katalizátorágy tere közötti átváltás) is figyelembe kell venni (16.15. ábra felső sor). A hatásossági tényezőt egy analitikusan számolt rész és egy torzítási tényező szorzatára bontjuk (16.15. ábra alsó sor) a következőkben vázolt információátviteli technika szerint.

Hatásossági tényező:

$$\eta = \frac{\hat{\mathcal{R}}}{\mathcal{R}^0},$$

átlag
felületi

$$\hat{\mathcal{R}} = \frac{4\pi \int_0^R r^2 \mathcal{R}(r) dr}{4\pi \int_0^R r^2 dr} \equiv \frac{3}{R^3} \int_0^R r^2 \mathcal{R}(r) dr$$

$$\hat{\mathcal{R}} = \frac{3D_C}{R} \frac{dc_C}{dr}(R)$$

16.14. ábra. A hatásossági tényező.

Üres keresztmetszeti tényező

$$\mathcal{R} = (1 - \varepsilon) \eta \mathcal{R}^0$$

Analitikus hatásossági tényező

$$\mathcal{R} = (1 - \varepsilon) \sigma \eta_A \mathcal{R}^0$$

Torzítási tényező

16.15. ábra. Reakciósebesség a katalizátorágyon (makroszint).

A hatásossági tényezőt a pórúsdiffúziós modell megoldásával számolhatjuk ki. A pórúsdiffúziós modelltől való függetlenítést itt az alábbiak szerint végezzük el:

- Különböző egyszerűsítő feltételek mellett megoldjuk a modellt analitikusan (η_A a 16.16. ábrán, a DE egy $c_M=f/r$ transzformációval oldható meg analitikusan). Az analitikus hatásossági tényező már csak a felületi állapotváltozók függvénye lesz.
- A tényleges és az analitikus hatásossági tényezők arányát *torzítási tényezőnek* (σ) nevezzük el.
- A torzítási tényezőre egy illesztett empirikus összefüggést határozunk meg.

Az empirikus összefüggés meghatározásánál egy négydimenziós statisztikai térben kell az illesztést elvégezni. Mivel a reaktorban egy domináns reakció szerepel, a konverzió értelmezésével a dimenziószámot kettőre csökkenthetjük (konverzió, hőmérséklet, lásd a 16.17. ábrán).

Feltételek:

- A szemcse izoterm.
- A reakciósebesség a felületi állapotváltozók környezetében linearizálva.

$$\eta_A = \frac{1}{\phi} \frac{3\phi \coth(3\phi) - 1}{3\phi}$$
$$\phi = \sqrt{\frac{\gamma R^2}{9D_M}}$$

Thiele modulus

$$\gamma = \frac{k(T)}{1 + C(T)c_M} \left[\frac{2D_M}{D_H} + \frac{B(T)}{2} \sqrt{\frac{c_M}{c_C} \left(\frac{D_M}{D_C} \frac{1}{c_C} + \frac{1}{c_M} \right)} + \frac{C(T)}{k(T)} \Re^0 \right]$$

16.16. ábra. Az analitikus hatásossági tényező számítása.

Konverzió:

$$x = \frac{c_{C0} - c_C}{c_{C0}}$$

Koncentrációk:

$$c_C^0 = c_{C0} (1 - x),$$

$$c_H^0 = c_{H0} - 2c_{C0}x,$$

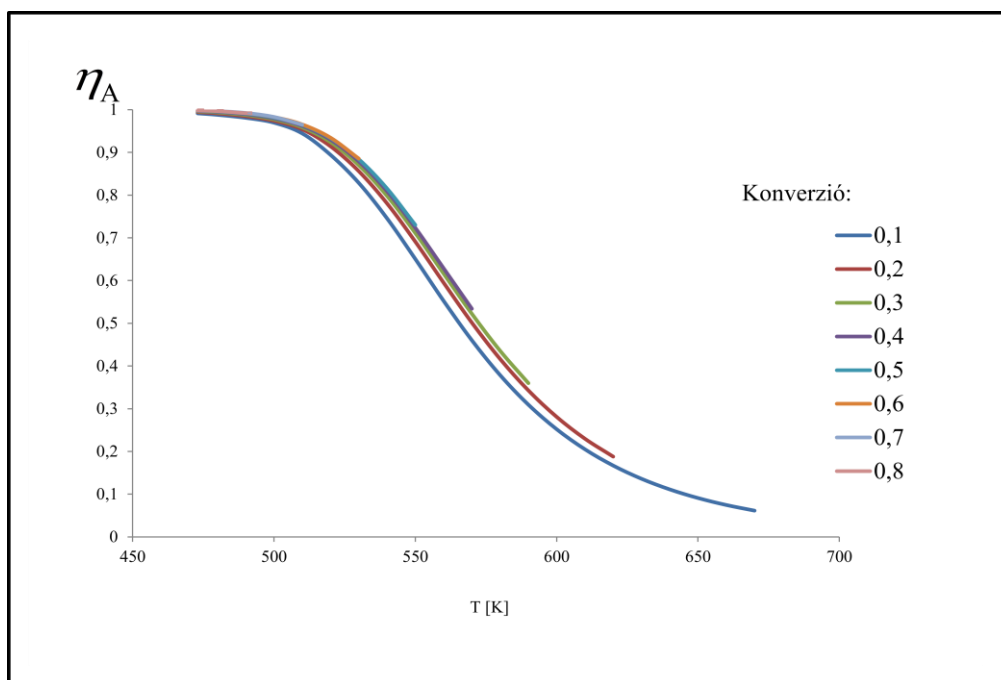
$$c_M^0 = c_{M0} + c_{C0}x.$$

Két dimenziós tér:

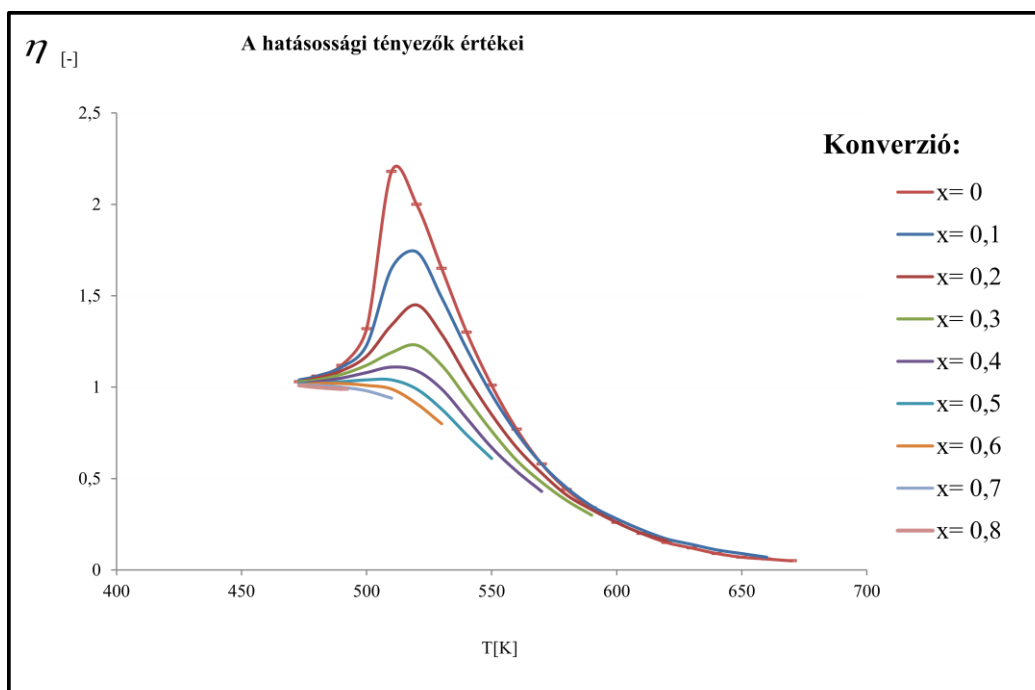
- konverzió
- hőmérséklet

16.17. ábra. A konverzió értelmezése.

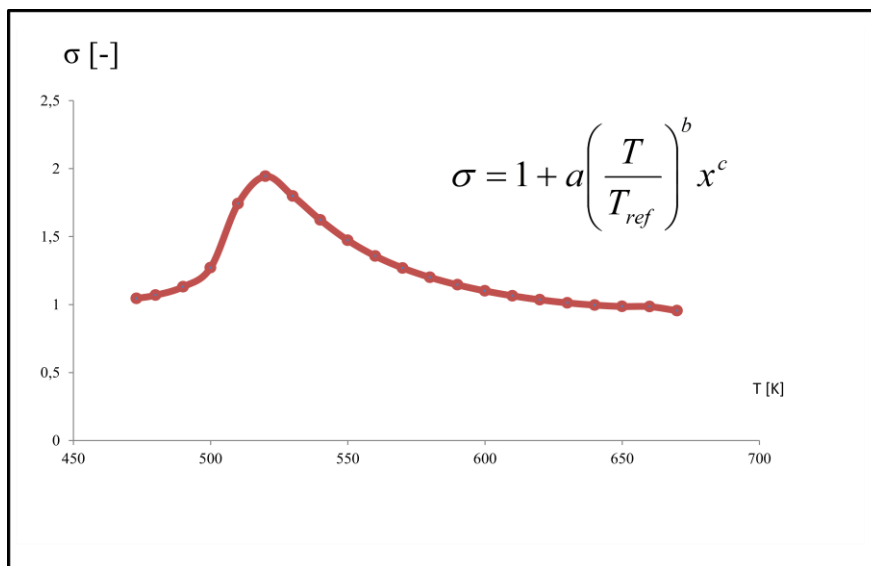
Ebben a kétdimenziós statisztikai térben az analitikus és tényleges hatásossági tényező értékek a 16.18. és a 16.19. ábrákon láthatók. Az utóbbi érdekessége az, hogy egynél nagyobb értékek is lehetségesek. Ennek oka az, hogy exoterm reakcióról lévén szó, a szemcsén belüli magasabb hőmérséklet, a kisebb reagens koncentrációk ellenére, nagyobb reakciósebességet eredményez. A torzítási tényezőre a 16.20. ábrán látható empirikus összefüggés illeszthető (a , b , c paraméterek). Az illesztés és az információátvitel pontosságát a 16.21. ábrán látjuk, jól érzékelhető az információátvitel torzító hatása.



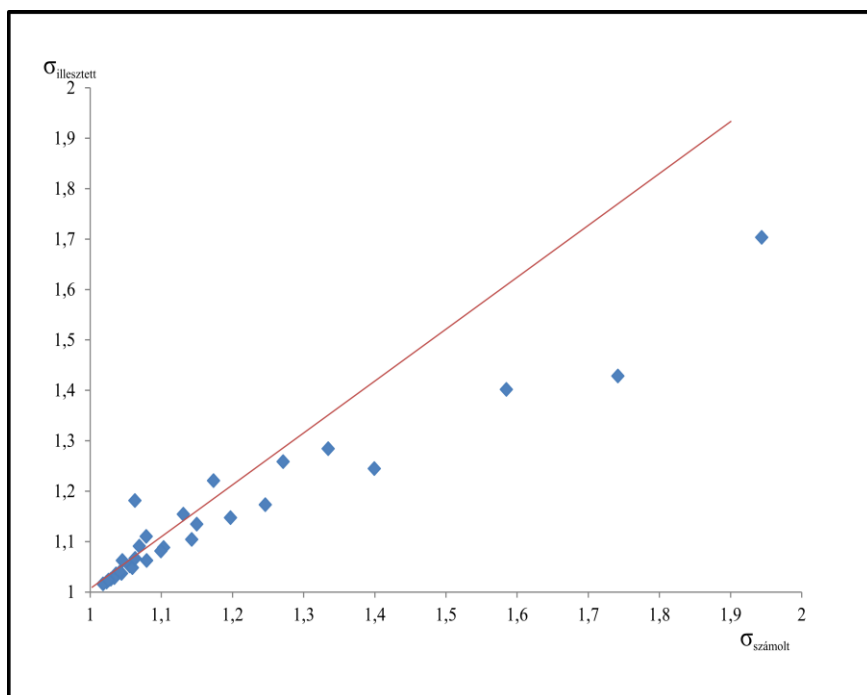
16.18. ábra. Az analitikus hatásossági tényező értékei.



16.19. ábra. A hatásossági tényező értékei.



16.20. ábra. A torzítási tényező illesztése.



16.21. ábra. A torzítási tényező illesztési hibája.

16.4. A radiális inhomogenitás vizsgálata

Az előző fejezetben meghatároztuk a katalizátorágy egy pontjára vonatkozó reakciósebességet, ebben a fejezetben pedig a teljes cső modelljét vizsgáljuk. A $T_{(x,r)}$ térre vonatkozó stacionárius modell a 16.22. ábrán látható. A szimmetria viszonyok kihasználása végett henger koordináta rendszert használunk. A gáz és szilárd fázisok közötti kölcsönhatást a kémiai reakció jelenti, az előző fejezetekben kialakított reakciósebességgel, az áramlásban radiális irányú keveredést veszünk figyelembe (ennek a hatását akarjuk megbecsülni). Az $x=0$ helyen a rendszerbe belépő áram állapotváltozóit adottak. Az $r=0$ helyen nincs kiáramlás, ezért a gradiensek zérus értékűek. Ez utóbbi feltétel az $r=R$ helyen a komponensekre igaz csupán, mivel falon keresztüli hőátadás kialakul, a hőmérséklet a környezeti (hűtőközeg oldali) hőmérséklettel lesz egyenlő.

Komponens mérlegek:

$$\frac{\partial(vc_H)}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_H \frac{\partial c_H}{\partial r} \right) = -2\mathfrak{R},$$
$$\frac{\partial(vc_C)}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_C \frac{\partial c_C}{\partial r} \right) = -\mathfrak{R},$$
$$\frac{\partial(vc_M)}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_M \frac{\partial c_M}{\partial r} \right) = \mathfrak{R},$$

Hőmérleg:

$$v\rho c_p \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) = (-\nabla H_r)\mathfrak{R},$$

$x=0$, v , c_H , c_C , c_M , T adott értékek

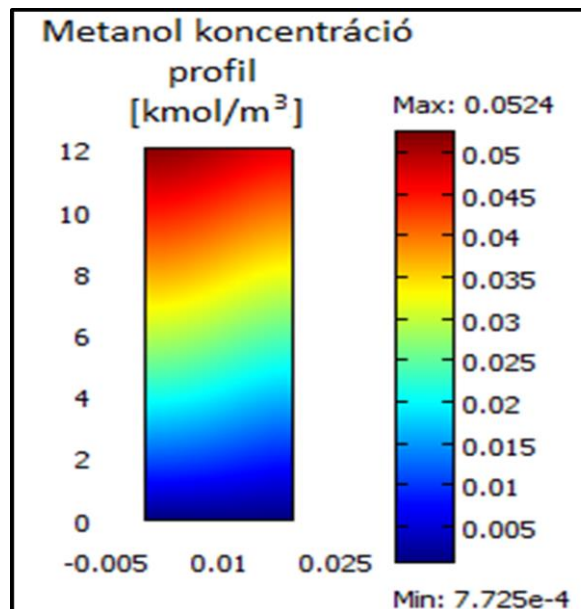
$r=0$ helyen: $\frac{\partial c_H}{\partial r} = 0$, $\frac{\partial c_C}{\partial r} = 0$, $\frac{\partial c_M}{\partial r} = 0$, $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$,

$r=R$ helyen: $\frac{\partial c_H}{\partial r} = 0$, $\frac{\partial c_C}{\partial r} = 0$, $\frac{\partial c_M}{\partial r} = 0$, $T = T_K$.

16.22. ábra. A cső stacionárius modellje.

A modell szerinti CFD szimuláció képi megjelenítését illusztrálja a 16.23. ábra. Széleskörű paraméter tartományban vizsgálva, a pórusdiffúzióhoz viszonyítva a radiális irányú inhomogenitás nem jelentős, ezért a reakciósebesség, a szintváltás során érdemben nem változik. Más esetekben viszont a sugár menti inhomogenitás is lehet jelentős. Ezen

probléma kezelésére is ismert olyan módszer, amely kis torzítással alkalmas az információátvitelre, amely eredményeképpen a fenti kétdimenziós modell egydimenzióssá alakítható [20].



16.23. ábra. CFD szimuláció (illusztráció).

16.5. A reaktor modell

Az előző fejezetek vizsgálati eredményeként kialakult a reaktor egy belső pontján érvényesülő reakciósebesség. Ezt felhasználva a reaktor $T_{[x]}$ terében felírhatjuk a megfelelő differenciális mérlegegyenleteket. A metanol reaktor teljes stacionárius modellje az x dimenziómentes hely koordinátával a 16.24. ábrán látható. A viszonylag nagy hossz átmérő arány miatt az ideális kifolyási áramlási modell használható. A három komponens tömegmérleg mellett, szerepelnek a csőköteg és köpeny részek hőmérlegei, amelyeket a hőátadás kapcsol össze. Az impulzus mérleget a nyomás számítására alkalmas fenomenologikus (az elméleti és az empirikus közötti átmenet) összefüggés helyettesíti, a benne szereplő f súrlódási tényezővel, amely a művelettanból ismert *Ergun egyenlettel* számolható. A konvektív áramlások elsőrendű differenciál hányadosai miatt a kezdeti (pontosabban perem) feltételeket a belépő állapotváltozó értékek jelentik. A modellben szereplő paraméterek rögzítésével a reaktor szimuláció, a megfelelő szimulációs környezetben elvégezhető.

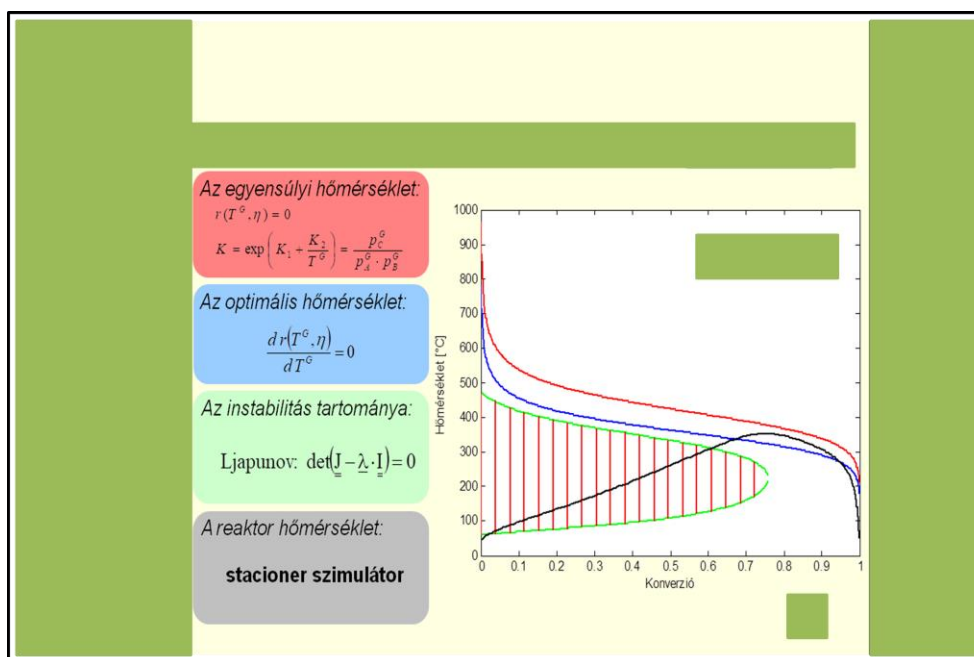
$$\begin{aligned}\frac{d(Bc_H)}{dx} &= -2V\mathcal{R} \\ \frac{d(Bc_C)}{dx} &= -V\mathcal{R} \\ \frac{d(Bc_M)}{dx} &= V\mathcal{R} \\ B\rho c_p \frac{dT}{dx} &= (-\Delta H_R)V\mathcal{R} - \alpha F(T - T_K) \\ (B\rho c_p)_K \frac{dT_K}{dx} &= \alpha F(T - T_K) \\ \frac{dp}{dx} &= -2fL \frac{\rho \left(\frac{B}{a}\right)^2}{d_p} \\ x=0 \quad c_H, c_C, c_M, T, T_K, p &\text{ adott}\end{aligned}$$

16.24. ábra. A metanol reaktor modellje.

16.6. Rendszeranalízis

A modellezés nem öncélú tevékenység, mindig valamilyen mérnöki feladat megoldásának az eszköze. Ezért a modellalkotás bár nagyon fontos, de csupán az első lépés a feladat megoldása során. A valós reaktor analízisét a modellen keresztül végezhetjük el.

Ha a reaktorban egy bruttó reakció játszódik le és a köpenyben a hűtőközeg árama nagy (a hőmérséklet változása elenyésző), akkor a rendszer portrét a fázis síkban célszerű megrajzolni, amelyben az abszcissza a konverzió az ordináta pedig a hőmérséklet (16.25. ábra, itt a példa a metanol reaktorhoz teljesen hasonló foszgén előállító reaktor [62]).



16.25. ábra. Elemzés a fázissíkon.

Az alapvető tulajdonságokat a kémiai reakció tulajdonságai szabják meg. Egyensúlyra vezető reakcióknál definiálhatjuk az *egyensúlyi hőmérsékletet*. Adott összetétel mellett az egyensúlyi hőmérsékleten a reakciósebesség értéke zérus. Ez a fázis síkot kettéosztja (piros vonal), attól függően, hogy a felső vagy az alsó nyíl mentén halad-e a reakció.

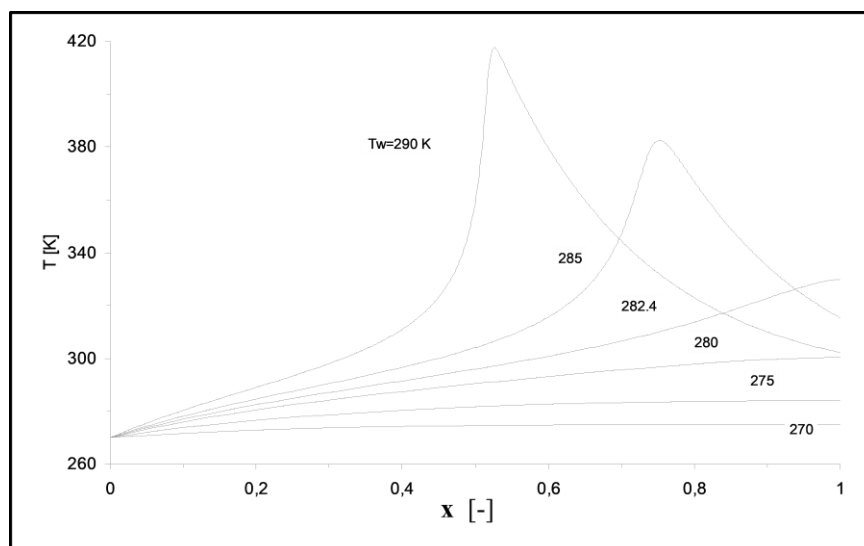
A reaktortervezés szempontjából egyik legfontosabb fogalom az *optimális hőmérséklet*. A különböző folyamatok sebessége a hőmérséklettel nagyon gyakran monoton nő. Kivételt képeznek az exoterm egyensúlyi folyamatok, amelyek sebessége a hőmérséklettel először nő, majd egy maximum után csökken. Ez annak a következménye, hogy a kinetikai konstans szigorúan monoton nő, a hajtóerő pedig a Le Chatelier Braun (a legkisebb kényszer) elv szerint csökken. A maximális reakciósebességhez tartozó hőmérséklet az optimális hőmérséklet. A reaktorban az optimális hőmérséklet profilt (kék vonal az ábrán) biztosítva, kapjuk a legkisebb reaktor térfogatot (ez a gazdaságos megoldás). Az optimális profiltól mindkét irányba távolodva egyre kisebb reakciósebesség adódik.

A fázissíkot a *stabilitás* szempontjából is kettéoszthatjuk, stabil, illetve instabil tartományra (függőleges piros vonalakkal jelölve). A stabilitási kritérium

meghatározásánál a reaktorbeli konverzió és a hőmérséklet megváltozások Jacobi mátrixainak sajátértékeit kell kiszámolni. Stabil a rendszer, ha mindegyik sajátérték a komplex számsík bal oldalára esik. Az instabil tartományban ez nem érvényesül. A reaktor modelljét megoldva, az összetartozó konverzió-hőmérséklet pontok összessége adja a *munkavonalat* (az ábrán fekete vonal).

Egy ideálisan kialakított rendszernél a munkavonal az optimális hőmérséklet profilt közelítené. Látható, hogy egy csököteges reaktor igen távol áll az ideálistól. Sőt az is feltűnő, hogy a reaktor bizonyos pontokban instabil állapotban van. A reaktorok többségénél ez nemkívánatos üzemállapotot jelent, amit az ún. *reaktor elfutás* is jelez. Az elfutást általában úgy értelmezzük, hogy a működtetésben bekövetkező kis változás az állapotváltozók (leginkább a hőmérséklet, mert ez érzékelhető a legkönnyebben) nagy megváltozását eredményezik.

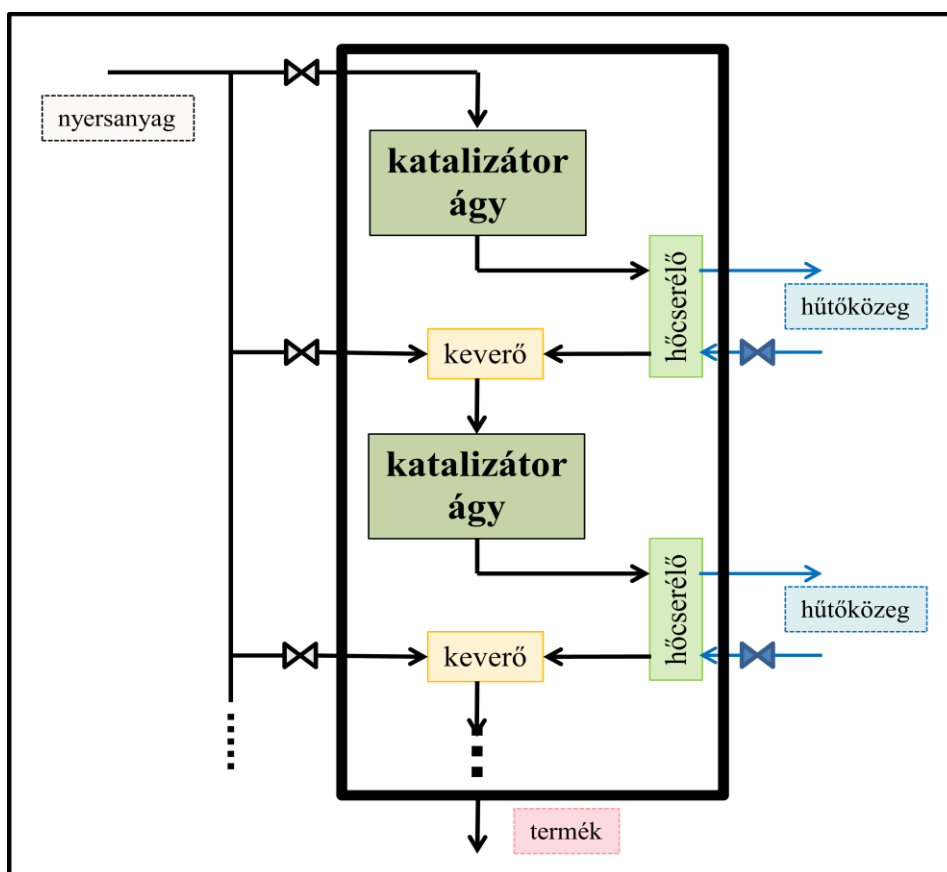
Ezt szemléletesen már a hosszkoordináta (x) és hőmérséklet (T) függvényen követhetjük (16.26. ábra). A hűtőközeg hőmérsékletének néhány fokos változása, a reaktorhőmérséklet jelentős változását eredményezi. Az elfutás meghatározására a szakirodalomban számos kritérium ismert, gyakran a hőmérséklet függvény inflexiós pontjával definiálják (az instabilitással mindenképpen kapcsolatban áll).



16.26. ábra. A reaktor elfutás szemléltetése.

A heterokatalitikus reaktorok belső szerkezete gépészetileg bonyolult, ami annak a következménye, hogy az optimális hőmérséklet profilt igyekeznek minél jobban közelíteni [50].

A korszerű irányítási lehetőségeket is figyelembe véve, a legjobb közelítés a katalizátor ágy több részre osztásával, közbülső hőcserével, és ágyanként friss nyersanyag bevezetésével érhető el (16.27. ábra).



16.27. ábra. Reaktor konstrukció az optimális hőmérséklet közelítésére.

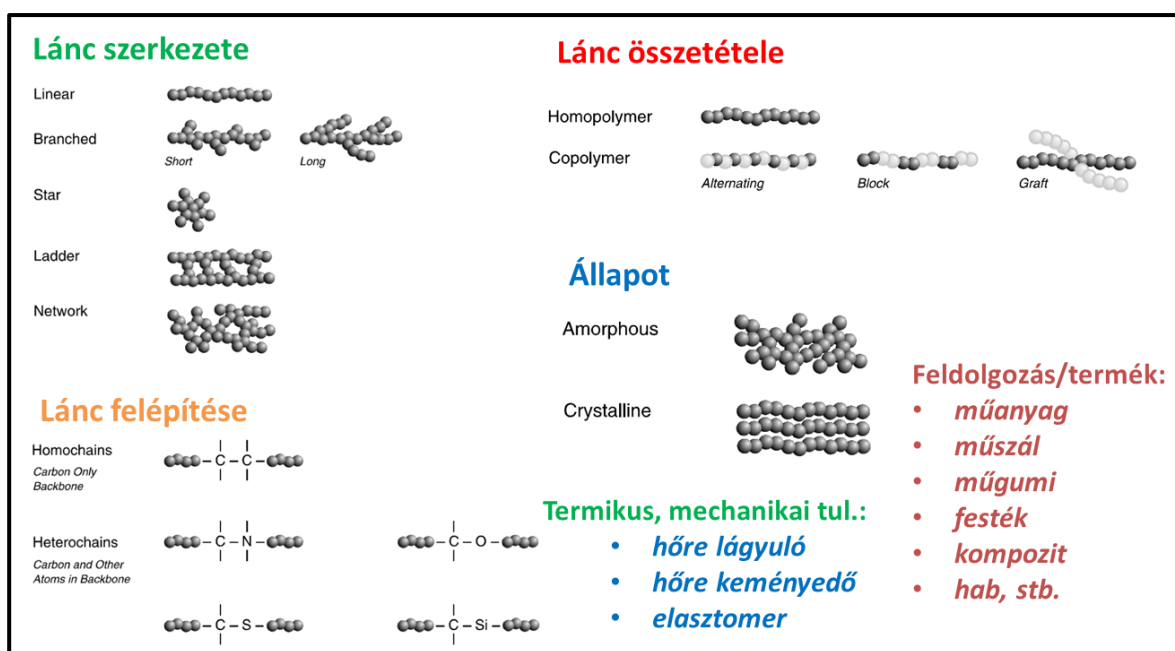
17. Műanyaggyártó technológiai rendszer modellezése

Ebben a részben a polimerizációs reaktorok modellezésének néhány aspektusát mutatjuk be. A polimerizációs iparág évről-évre jelentős fejlődésen megy át, amelyet nagymértékben a polimer termékekkel szembeni követelményeknek való megfelelés iniciál. A polimer termékek felhasználói tulajdonságai szigorú gyártáskörülmények betartását feltételezik. Másrészt viszont a gyártás során lejátszódó folyamatok megismerése lehetőséget biztosít a gyártási körülmények (technológiai paraméterek) pontosítására, technológia-, illetve termékfejlesztésre. A bonyolult, összetett reakciórendszer megismerése csak modell bázison valósítható meg hatékonyan, ezáltal célszerű a technológia- és a termékfejlesztést is modellbázison elvégezni. A polimerizációs reakciók, reaktorok, technológiák azonban sokfélék, így értelem szerűen e folyamatokat és berendezéseket leíró matematikai modellkészlet is sok elemből áll. Nem célja ennek az összeállításnak teljes körűen áttekinteni a polimerizáció modelljeit. Célunk, hogy a korábban megismert modellezési technikák alkalmazhatóságát bemutassuk a polimerizációs reaktorok modellezésére. Összefoglaljuk a különböző polimerizációs reakciókat, azok jellemzőit, elkészítünk egy konkrét reakció sémát feltételezve a polimerizációs reakció részletes, illetve redukált modelljét. Mintapéldával illusztráljuk a modell felhasználását. A modell megoldásához az Aspen Polymers Plus szoftvert használtuk fel.

17.1. A polimerizációs technológiák jellemzése

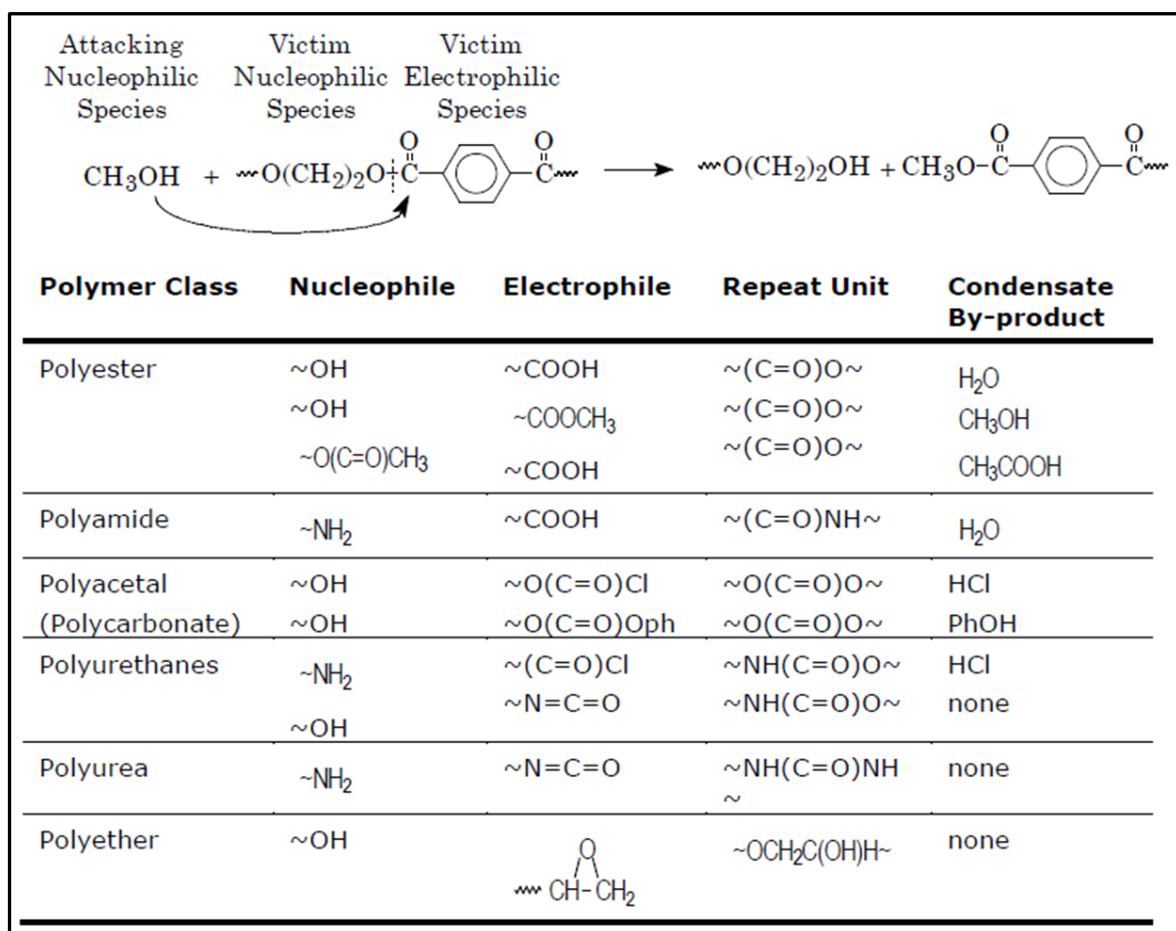
A polimer molekula egy olyan makromolekula, amely sokszor ismétlődő, egymáshoz kapcsolódó egységekből épül fel. Az, hogy e monomer egységek milyen típusú molekulák és ezek hogyan kapcsolódnak egymáshoz meghatározzák a termék alapvető felhasználási tulajdonságait. A több mint 100 millió tonna éves kapacitású iparág rengetegféle terméket állít elő. A polimer termékeket sokféleképpen lehet csoportosítani. A polimer lánc lehet: egyenes, elágazásos (hosszú, rövid leágazásokkal), térhálós, stb. Megkülönböztethetjük a polimer molekulákat a szerint is, hogy milyen monomer molekulák vannak a láncban: egyféle (homopolimer), vagy többféle (kopolimer) monomerekből épül fel a lánc. A polimer szemcse lehet kristályos szerkezetű, vagy amorf.

A termék fontos tulajdonsága, hogy hogyan viselkedik hő hatására, illetve, hogy milyen területen használják fel (17.1. ábra).



17.1. ábra. A polimerizáció jellemzése [11].

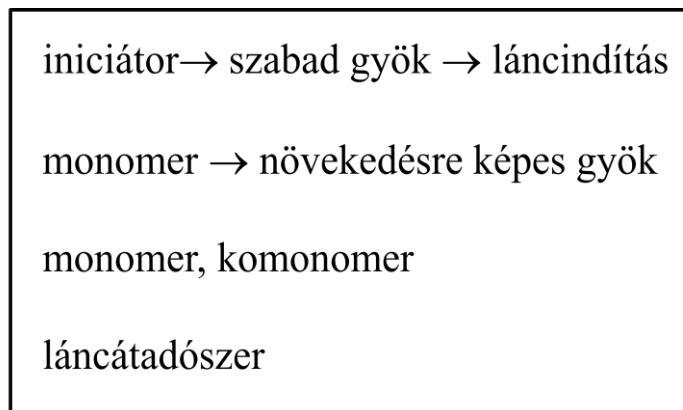
A polimerizációs reakciók egyik főbb csoportja a *polikondenzáció*. Ennél a típusnál a monomermolekulák elektrofil (pl. $-\text{COOH}$, $-\text{COOCH}_3$, $-\text{COCl}$, $-\text{NCO}$) és nukleofil (pl. $-\text{OH}$, $-\text{NH}_2$) funkciós csoportjai reagálnak egymással, szubsztitúciós, és/vagy addíciós reakciókban. Ezen fő reakciók mellett azonban számos egyéb elemi reakció is lejátszódik, amelyek befolyásolják a termék tulajdonságait, pl. monomer addíció, polimer láncok összekapcsolódása, depolimerizáció, gyűrűzáródás, gyűrű nyitás, láncátrendeződés, gyűrű lehasadás, stb. (17.2. ábra).



17.2. ábra. A polikondenzáció (funkciós csoportok) [11].

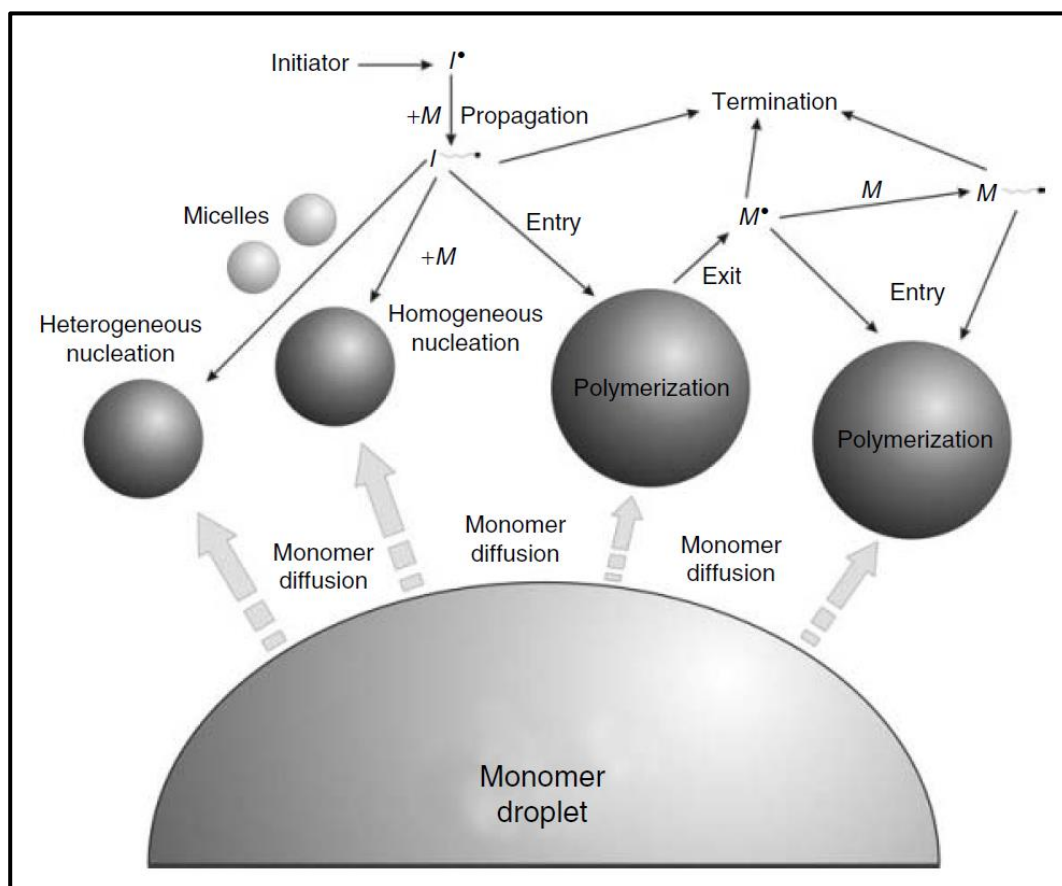
Polikondenzáció esetében az eltérő elektronaffinitású funkciós csoportok biztosítják a reakciók lezajlását. Azon molekulákat (pl. olefinek), amelyek nem rendelkeznek ilyen reakcióképességgel *iniciátor*, vagy *katalizátor* alkalmazásával kell „aktiválni”. Az egyik lehetőség, hogy könnyen bomló komponenst (pl. azo, peroxo vegyületek) alkalmazunk iniciátorként. Az iniciátor bomlástermékeként keletkező szabad gyök képes a monomer molekulával reagálni, amely reakció terméke egy szabad gyököt tartalmazó növekedésre képes láncc. Ehhez a lánchoz további monomer, komonomer molekulák tudnak kapcsolódni. A *gyökös mechanizmusú polimerizáció* esetében is számos olyan reakció lezajszódik, amely a polimer termék tulajdonságait befolyásolja. Ezek egy részét direkt az üzemeltető idézi elő, pl. a lánccátadás koncentrációjának változtatásával tudja szabályozni a polimer láncc hosszát. Az elemi reakciók más része spontán lezajszódik pl. letörés, monomerre átadás. Ezek egymáshoz képesti sebességét az üzemeltetési

körülményekkel (pl. hőmérséklet) lehet befolyásolni). Ilyen polimerek a polisztirol (PS), a poli-metil-metakrilát (PMMA), a kis sűrűségű polietilén (LDPE), stb. (17.3. ábra).



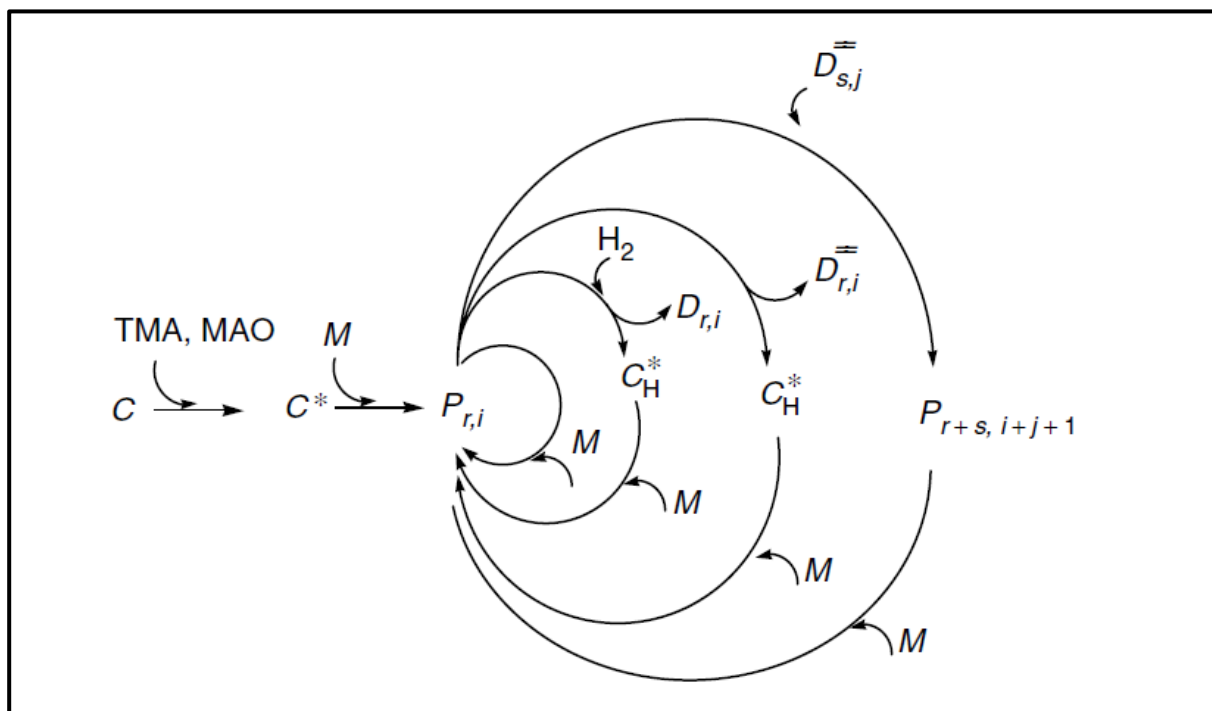
17.3. ábra. Gyökös mechanizmus (PS, PVC, PMMA, LDPE)

Az *emulziós polimerizációt* általában vizes diszperz rendszerben végzik el. Ebben az esetben a gyökös mechanizmusú reakciók egymástól elszigetelt elemi részecskékben játszódnak le. Így a letörési reakciók visszaszorulnak, azaz nagy molekulatömegű polimer előállítására használható fel. A polimerizáció egyik fő lépése monomer-víz rendszerből egy megfelelő méretű cseppeket tartalmazó emulzió előállítása. Ezt a rendszer keverésével, illetve különféle emulgeátorokkal érik el. Az alkalmazott iniciátor vízoldható vegyület (17.4. ábra).



17.4. ábra. Emulziós polimerizáció (festék, szintetikus gumi, PVC) [11].

A *Ziegler-Natta (ZN) mechanizmusú polimerizációval* polietilént és polipropilént állítanak elő legnagyobb mennyiségben. A ZN típusú katalizátorok általában Ti tartalmú vegyületek, amelyeket hordozóra (pl. SiO_2) visznek fel. A polimerizációs reakciók indításához szükséges, hogy a katalizátorban lévő potenciálisan aktív helyek aktívvá váljanak. A ZN katalizátor esetében ez gyors folyamat, amelyet kokatalizátor alkalmazásával is segítenek. Formálisan ebben az esetben is a láncindítási, növekedési, átadási, elágazási, deaktiválódási és inhíbiós reakciókat különböztethetünk meg (17.5. ábra).



17.5. ábra. A Ziegler-Natta mechanizmus (PP, HDPE, LLDPE) [11].

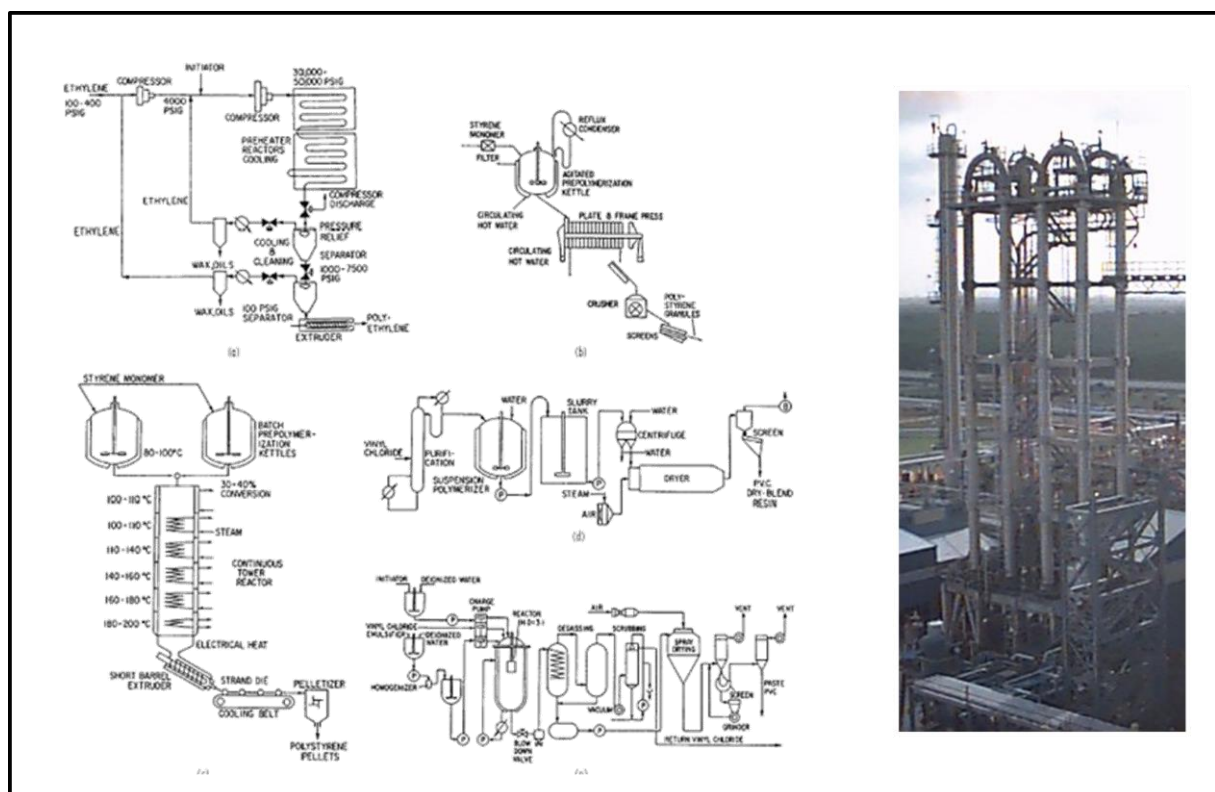
A 17.5. ábrán látható jelölések: C : katalizátor; TMA és MAO : kokatalizátorok; C^* : aktív hely; M : monomer; $P_{r,i}$: r hosszúságú növekvő polimer lánc i db rövid elágazással; c_H^* : fémhidrát hely; H_2 : hidrogén, láncátadószer; $D_{r,i}$: lezárt (telített) polimer lánc; $D_{r,i}^=$:vinil végű lezárt polimer lánc (makromonomer).

Az előzőekben láttuk, hogy sokféle polimer molekulát, polimerizációs reakciót és polimerizációs mechanizmust különböztethetünk meg. Ennek megfelelően a gyártástechnológiák is különbözőek. A 17.6. ábrán ötféle polimerizációs technológia látható. Az első LDPE előállítására szolgál. Az etilént oxigén, vagy peroxid iniciátor segítségével kb. 40 mm átmérőjű és 1 km hosszúságú csőreaktorban polimerizálják 2000-3000 bar nyomás tartományban. A reaktorból kilépő elegyet több fokozatban expandáltatják, hogy az etilént elválasszák a polimertől. Az el nem reagált etilént hűtik majd recirkuláltatják, a polimert pedig extrudálják.

A második és a harmadik technológia polisztirol előállítására szolgál. A második technológiánál folyamatos kevert reaktorban végzik a polimerizációt, ahol kb. 20%-os konverziót érnek el és utána kerül a reakcióelegy az ún. *tálcás reaktorba*. A harmadik technológiánál szakaszos üzemű kevert reaktorban játszódik le a polimerizáció kb. 20%-

os konverzióig, majd csőreaktorban szabályozott hőmérséklet profil mellett folytatódik a folyamat. Mindkét esetben úgynevezett *tömb polimerizációról* van szó, azaz csak monomer és polimer van jelen a reaktorban, nagy mennyiségben. Előnye ennek a technológiának a tisztaság, hátránya viszont, hogy a polimer képződésével a reakcióelegy viszkozitása megnő.

Az utolsó két technológia a szuszpenziós és emulziós PVC előállítását mutatja. A jobb oldali ábra egy hurokreaktort mutat, amit gyakran alkalmaznak polimerizációs iparban. Ezt egy önmagában záródó csőnek kell elképzelni, amelyben a reakcióelegyet nagy sebességgel vezetik körbe, ezáltal jó keveredést tudnak biztosítani. További előnye a kevert üstszerű reaktorhoz képest a nagyobb és szabadon változtatható felület-térfogat arány.

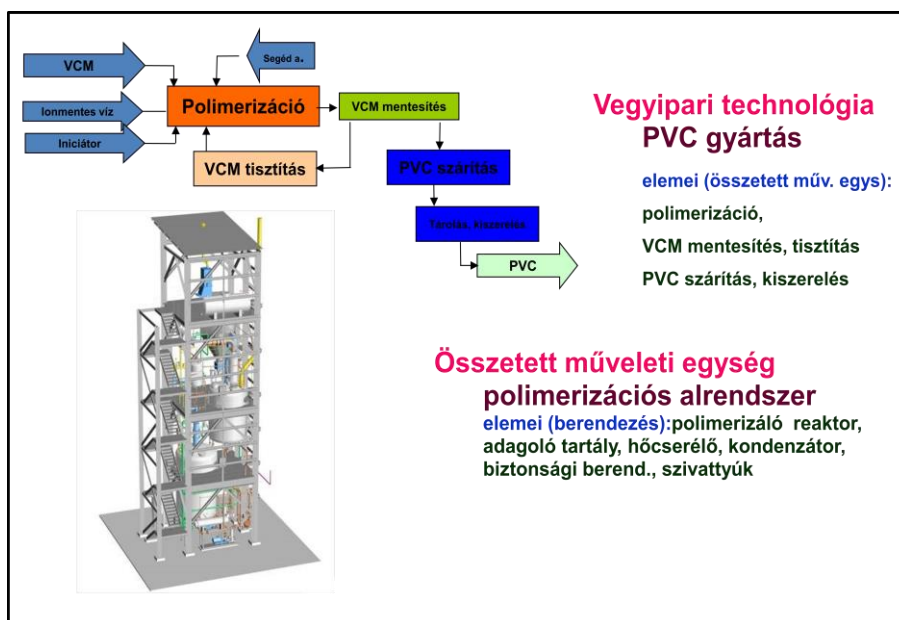


17.6. ábra. Polimerizációs technológiák.

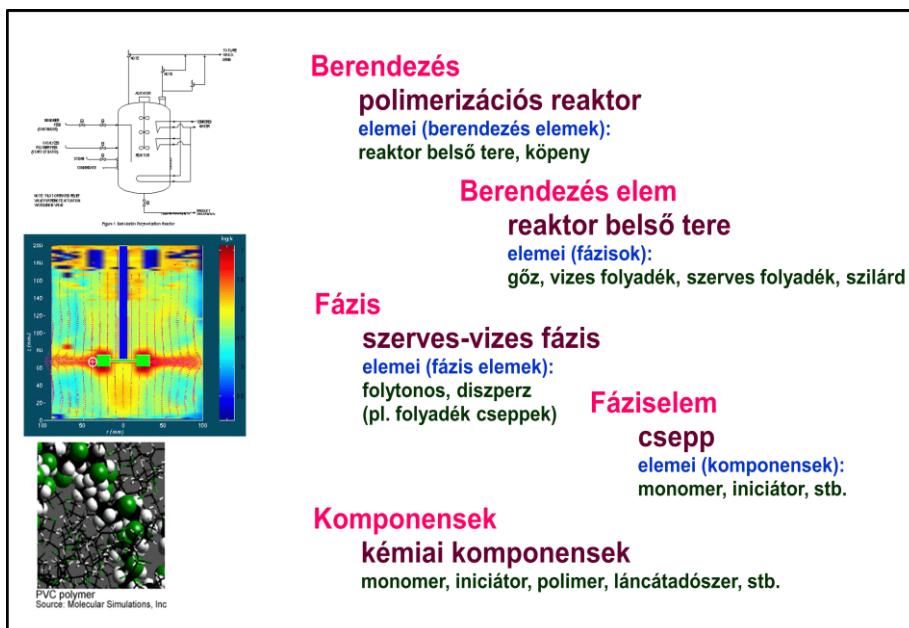
17.2. Modellalkotás

Egy konkrét műanyaggyártó technológiai rendszer modellalkotásának részletes dokumentációja nyilván meghaladja a kereteinket, ezért a korábbiakra hivatkozva csak a modellezés általános és lényegi elemeit emeljük ki a teljes részletek mellőzésével, egy PVC gyártó technológia modelljeinek kialakításával.

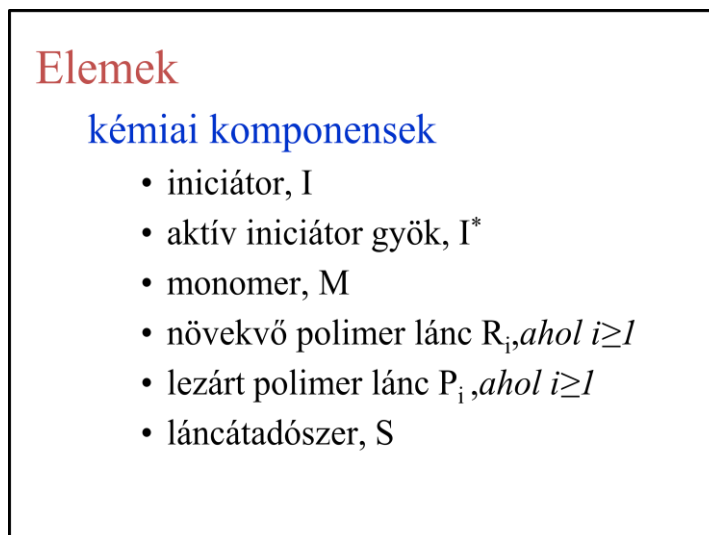
A rendszer áttekintő *struktúráját* a 17.7-17.11. ábrásor szemlélteti, amelyen látható a rendszer dekompozálása (17.7-17.8. ábra), a definiált kémiai komponensek (17.9. ábra), a komponensek közötti kölcsönhatások (a reakció mechanizmus, 17.10. ábra), a 17.11. ábra pedig az összetett reakciók áttekintését szolgálja.



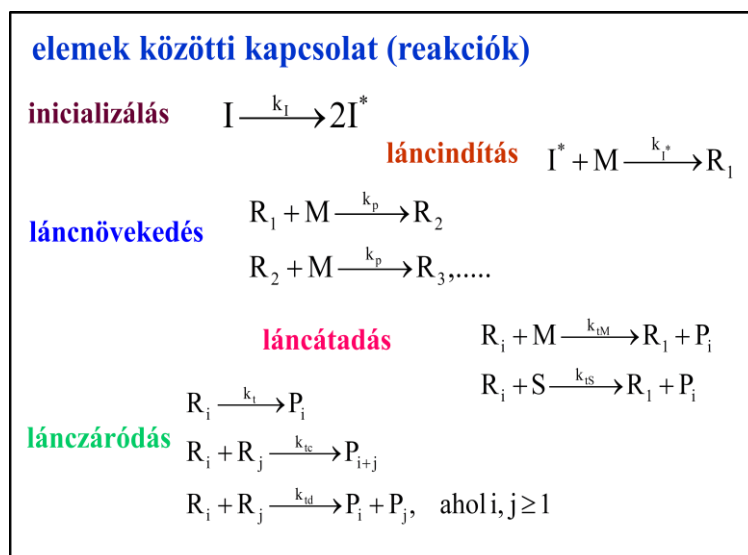
17.7. ábra. Dekompozíció I.



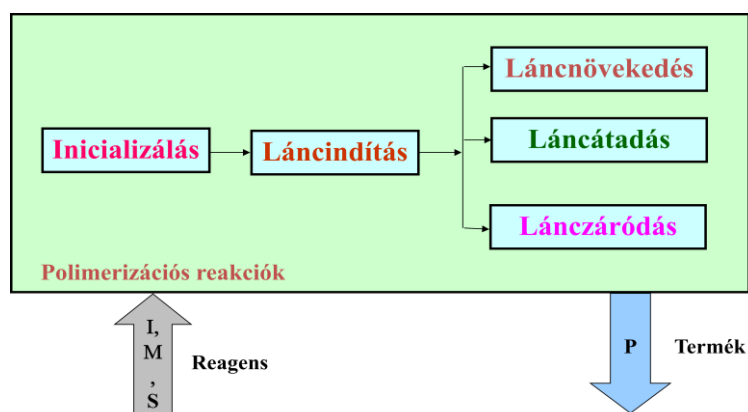
17.8. ábra. Dekompozíció II.



17.9. ábra. A polimerizáció kémiai komponensei.



17.10. ábra. A reakció mechanizmus.

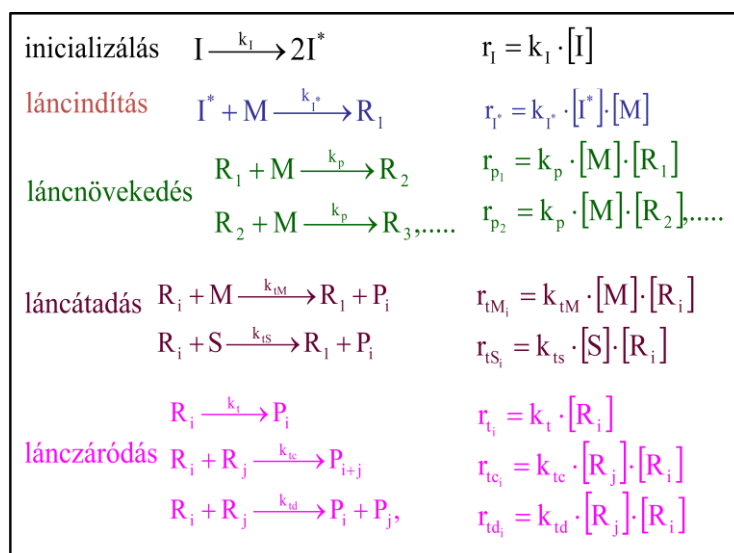


17.11. ábra. A folyamatok áttekintése.

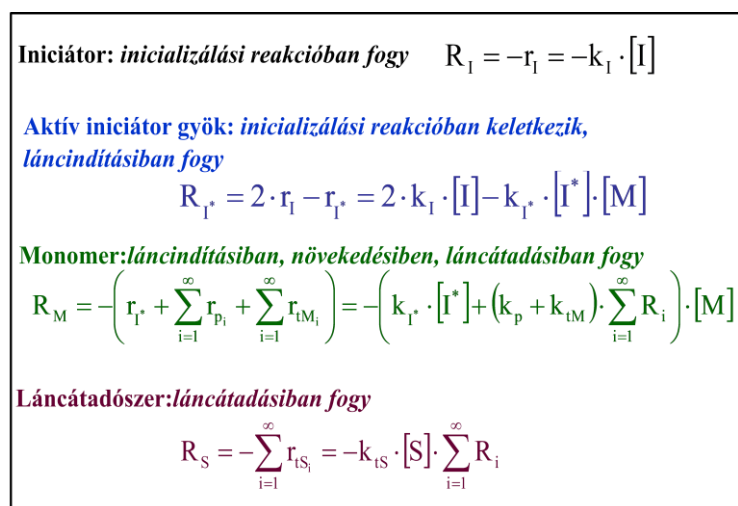
A rendszer struktúrája alapján a 17.16. ábrán látható részletes modellt állíthatjuk össze az alábbiak figyelembevételével:

- Csak a reaktor belső terének a leírására koncentrálnunk (a köpennyel való hőcserét a Q hőárammal jellemezzük, számításához a köpeny modellje is szükséges).
- A reaktort tökéletesen kevert egységnek tekintjük (hidrodinamikai modell).
- Fázistömeg, komponens tömeg és hőmérlegeket értelmezzünk. Itt figyelembe kell venni, hogy a komponensek száma szinte kezelhetetlenül nagy.

- A kémiai reakciók sebességi egyenleteit a 17.12. ábrán foglaltuk össze (a $[i]$ szimbólum az i kódú komponens koncentrációját jelöli).
- A reakció mechanizmust figyelembe véve a komponens forrás függvényeket a 17.13-17.15. ábrásor tartalmazza.



17.12. ábra. Sebességi egyenletek.



17.13. ábra. Komponens források I.

Növekvő lánc:

R₁ (láncindítási, láncátadási:keletkezik, növekedési, letörési fogy)

$$R_{R_1} = r_{I^*} + \sum_{j=2}^{\infty} (r_{IM_j} + r_{IS_j}) - r_{P_1} - r_{I_1} - r_{IC_1} - r_{ID_1} =$$

$$= k_{I^*} \cdot [I^*] \cdot [M] + \sum_{j=2}^{\infty} (k_{IM} \cdot [R_j] \cdot [M] + k_{IS} \cdot [R_j] \cdot [S]) - [R_1] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_t + (k_{IC} + k_{ID}) \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right)$$

R₂ (növekedési:keletkezik, láncátadási, növekedési, letörési fogy)

$$R_{R_2} = r_{P_1} - r_{P_2} - r_{IM_2} - r_{IS_2} - r_{I_2} - r_{IC_2} - r_{ID_2} =$$

$$k_p \cdot [M] \cdot [R_1] - [R_2] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{IM} \cdot [M] + k_{IS} \cdot [S] + k_t + (k_{IC} + k_{ID}) \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right)$$

R_k (növekedési:keletkezik, láncátadási, növekedési, letörési fogy)

$$R_{R_k} = r_{P_{k-1}} - r_{P_k} - r_{IM_k} - r_{IS_k} - r_{I_k} - r_{IC_k} - r_{ID_k} =$$

$$k_p \cdot [M] \cdot [R_{k-1}] - [R_k] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{IM} \cdot [M] + k_{IS} \cdot [S] + k_t + (k_{IC} + k_{ID}) \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right)$$

17.14. ábra. Komponens források II.

Lezárt lánc:

P₁ (láncátadási, letörési :keletkezik)

$$R_{P_1} = r_{IM_1} + r_{IS_1} + r_{I_1} + r_{ID_1} = [R_1] \cdot \left(k_{IM} \cdot [M] + k_{IS} \cdot [S] + k_t + k_{ID} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right)$$

P₂ (láncátadási, letörési :keletkezik)

$$R_{P_2} = r_{IM_2} + r_{IS_2} + r_{I_2} + \frac{1}{2} r_{IC_1} - r_{ID_2} = [R_2] \cdot \left(k_{IM} \cdot [M] + k_{IS} \cdot [S] + k_t + k_{ID} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right) + \frac{1}{2} k_{IC} [R_1] \cdot [R_1]$$

P_k (láncátadási, letörési:keletkezik)

$$R_{P_k} = r_{IM_k} + r_{IS_k} + r_{I_k} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{k-1} r_{IC_j} + r_{ID_k} =$$

$$= [R_k] \cdot \left(k_{IM} \cdot [M] + k_{IS} \cdot [S] + k_t + k_{ID} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} [R_j] \right) + \frac{1}{2} k_{IC} \sum_{j=1}^{k-1} [R_j] \cdot [R_{k-j}]$$

17.15. ábra. Komponens források III.

Részletes modell

Komponensmérleg:

$$\frac{dV \cdot [X]}{dt} = BE \cdot [X]_{be} - KI \cdot [X] + V \cdot R_X \quad t=0, \quad V \cdot [X] = (V \cdot [X])^*$$

Tömegmérleg:

$$\frac{dG}{dt} = BE_G - KI_G \quad t=0, \quad G = G^*$$

Hőmérleg:

$$V \cdot \rho \cdot c_p \frac{dT}{dt} = \sum BE_i \cdot \rho_{BE,i} \cdot c_p^{BE,i} (T_{BE,i} - T) + \sum_j V \cdot r_j \cdot \Delta H_j \pm Q \quad t=0, \quad T = T^*$$

Ha TKE a fázis(ok) áramlási modellje!

17.16. ábra. A polimerizációs rendszer modellje (M-1 diszkrét modell).

A 17.16. ábrán látható teljes modell a szinte megszámlálhatatlan számú komponens miatt közvetlenül nem használható. A használhatóvá tételre két út kínálkozik.

Az egyik út az, amint azt a multi komponensű rendszerek fejezetében bemutattunk, a megfelelő komponens osztályok kialakításával, az eredetileg diszkrétnek tekinthető rendszert folytonossá alakítjuk. Ezzel a nagy elemszámú közönséges differenciálegyenlet rendszert jóval kisebb elemszámú parciális differenciálegyenlet rendszerré alakítjuk, amelyben az új folytonos koordináta a polimerizációs fokszám lesz.

A diszkrét rendszer átalakítása nélkül egy másik út is lehetséges használható modell kialakítására. Egy-egy komponens osztályon belül a polimerizációs fokszám szerinti diszkrét eloszlás teljes ismerete helyett vezessük be az eloszlás különböző rendű momentumait (17.17. ábra).

A nulladik momentum a komponens osztály koncentrációját adja, a további momentumok pedig a polimerizációs fokszám szerinti eloszlást jellemzik. Tartalmi megfontolásokból is következik, hogy az eloszlás nem egy akármilyen tetszőleges függvény, hanem általában néhány illeszthető paramétert tartalmazó zárt függvénnyel is közelíthető. Ez azt is jelenti, hogy a teljes eloszlás is az eloszlás függvény néhány momentumával közelíthető. Ezt elfogadva a 17.16. ábrán látható M-1 modell a megfelelő összegzésekkel a 17.22. ábrán látható, feladat megoldásokban használható M-2 modellé

redukálható. A mérlegegyenletekben szereplő forrásfüggvényeket a 17.18-17.21. ábrásor tartalmazza. További információátviteli probléma megoldására nincs szükség, mivel az M-2 zárt modellt képez. A momentumok alapján számolhatók a gyakorlati életben használt átlagos polimer tulajdonságok is (17.23. ábra).

- R_i i . polimerizációs fokú növekvő lánc
- P_i i . polimerizációs fokú lezárt lánc
- $1 \leq i \leq \infty$ (nagy szám!!)
- Momentumok:

$$v_j = \sum_{i=1}^{\infty} i^j \cdot R_i \quad \text{és} \quad \mu_j = \sum_{i=1}^{\infty} i^j \cdot P_i$$

17.17. ábra. A momentumok definíciója.

$$R_{R_1} = k_{I^*} \cdot [I^*] \cdot [M] + \sum_{j=2}^{\infty} (k_{tm} \cdot [R_j] \cdot [M] + k_{ts} \cdot [R_j] \cdot [S]) - [R_1] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right)$$
$$R_{R_2} = k_p \cdot [M] \cdot [R_1] - [R_2] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{tm} \cdot [M] + k_{ts} \cdot [S] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right)$$
$$R_{R_k} = k_p \cdot [M] \cdot [R_{k-1}] - [R_k] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{tm} \cdot [M] + k_{ts} \cdot [S] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right)$$

$$R_{v_0} = k_{I^*} \cdot [I^*] \cdot [M] - v_0 \cdot (k_t + (k_{tc} + k_{td}) v_0)$$

17.18. ábra. Növekvő lánc, nulladik momentum.

$$\begin{aligned}
 1^1 \cdot R_{R_1} &= 1^1 \cdot \left\{ k_{I^*} \cdot [I^*] \cdot [M] + \sum_{j=2}^{\infty} (k_{tM} \cdot [R_j] \cdot [M] + k_{tS} \cdot [R_j] \cdot [S]) - [R_1] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right) \right\} \\
 2^1 \cdot R_{R_2} &= 2^1 \cdot \left\{ k_p \cdot [M] \cdot [R_1] - [R_2] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [S] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right) \right\} \\
 k^1 \cdot R_{R_k} &= k^1 \cdot \left\{ k_p \cdot [M] \cdot [R_{k-1}] - [R_k] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [S] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right) \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{v_1} &= k_{I^*} \cdot [I^*] \cdot [M] + k_p \cdot [M] \cdot v_0 + \\
 &+ (k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [S]) \cdot (v_0 - v_1) - v_1 \cdot (k_t + (k_{tc} + k_{td}) v_0)
 \end{aligned}$$

17.19. ábra. Növekvő lánc, első momentum.

$$\begin{aligned}
 1^2 \cdot R_{R_1} &= 1^2 \cdot \left\{ k_{I^*} \cdot [I^*] \cdot [M] + \sum_{j=2}^{\infty} (k_{tM} \cdot [R_j] \cdot [M] + k_{tS} \cdot [R_j] \cdot [S]) - [R_1] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right) \right\} \\
 2^2 \cdot R_{R_2} &= 2^2 \cdot \left\{ k_p \cdot [M] \cdot [R_1] - [R_2] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [S] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right) \right\} \\
 k^2 \cdot R_{R_k} &= k^2 \cdot \left\{ k_p \cdot [M] \cdot [R_{k-1}] - [R_k] \cdot \left(k_p \cdot [M] + k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [S] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} R_j \right) \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{v_1} &= k_{I^*} \cdot [I^*] \cdot [M] + k_p \cdot [M] \cdot (v_0 + 2 \cdot v_1) + \\
 &+ (k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [S]) \cdot (v_0 - v_2) - v_2 \cdot (k_t + (k_{tc} + k_{td}) v_0)
 \end{aligned}$$

17.20. ábra. Növekvő lánc, második momentum.

$$R_{\mu_0} = \left(k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [M] + k_t + \left(\frac{k_{tc}}{2} + k_{td} \right) v_0 \right) v_0$$
$$R_{\mu_1} = \left(k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [M] + k_t + (k_{tc} + k_{td}) v_0 \right) v_1$$
$$R_{\mu_2} = \left(k_{tM} \cdot [M] + k_{tS} \cdot [M] + k_t + k_{td} \cdot v_0 \right) v_2 + k_{tc} \cdot (v_0 \cdot v_2 + v_1^2)$$

17.21. ábra. Lezárt lánc, 0.,1. és 2. momentum.

komponens mérlegek
iniciátor
iniciátor gyök
monomer
láncátadószers

momentum mérlegek
0., 1., 2. momentum növekvő láncre
0., 1., 2. momentum lezárt láncre

tömegmérleg
hőmérleg
állapot egyenletek

$$\frac{d(\cdot)}{dt} = Be \cdot (\cdot)_{be} - Ki \cdot (\cdot) + V \cdot R_{(\cdot)}$$

Modell-2
12 db. mérlegegyenlet
+ állapotegyenletek

17.22. ábra. A rendszer modell.

Polimerizációs fok:

$$\text{növekvő lánc: } \langle l^* \rangle = \frac{\nu_1}{\nu_0} \quad \langle l_w^* \rangle = \frac{\nu_2}{\nu_1}$$

$$\text{lezárt lánc: } \langle l_p^* \rangle = \frac{\mu_1}{\mu_0} \quad \langle l_{p,w}^* \rangle = \frac{\mu_2}{\mu_1}$$

Molekulatömeg :

$$\text{db. átlag: } M_n = \frac{\nu_1 + \mu_1}{\nu_0 + \mu_0} \cdot M_{W, \text{mon}}$$

$$\text{tömeg átlag: } M_w = \frac{\nu_2 + \mu_2}{\nu_1 + \mu_1} \cdot M_{W, \text{mon}}$$

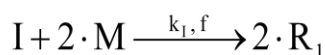
17.23. ábra. Átlagos polimer tulajdonságok.

Bizonyos tartalmi elemek figyelembe vételével, közelítésekkel az M-2 modell is tovább egyszerűsíthető. Erre példa az M-3 (17.24. ábra) és az M-4 (17.25. ábra) modellek.



$$I^* \ll I \ll M$$

$$k_{I^*} \gg k_I$$



$$r \approx k_I \cdot [I]$$

$$R_{R_1} = 2 \cdot f \cdot k_I \cdot [I] + \dots$$

$$\frac{d(\cdot)}{dt} = B_e \cdot (\cdot)_{be} - K_i \cdot (\cdot) + V \cdot R_{(\cdot)}$$

Modell-3
11 db. mérlegegyenlet
+ állapotegyenletek

17.24. ábra. A modell átalakítása I.

növekvő gyök koncentráció: $v_0 = [R] = \sum_{i=1}^{\infty} R_i \ll [I] \ll [M]$

$$R_{v_0} = 2 \cdot f \cdot k_1 \cdot [I] - v_0 \cdot (k_t + (k_{tc} + k_{td})v_0) \quad \text{gyors}$$

$$\frac{dV \cdot v_0}{dt} = Be \cdot v_{0,be} - Ki \cdot v_0 + V \cdot [2 \cdot f \cdot k_1 \cdot [I] - k_t \cdot v_0 - (k_{tc} + k_{td}) \cdot v_0^2]$$

0

$$0 = Be \cdot v_{0,be} - Ki \cdot v_0 + V \cdot [2 \cdot f \cdot k_1 \cdot [I] - k_t \cdot v_0 - (k_{tc} + k_{td}) \cdot v_0^2]$$

Szakaszos üzemeltetés: $0 = [2 \cdot f \cdot k_1 \cdot [I] - k_t \cdot v_0 - (k_{tc} + k_{td}) \cdot v_0^2]$

Modell-4
10+1 db. mérlegegyenlet
+ állapotegyenletek

ha $k_t=0 \rightarrow v_0 = \sqrt{\frac{2 \cdot f \cdot k_1 \cdot [I]}{(k_{tc} + k_{td})}}$

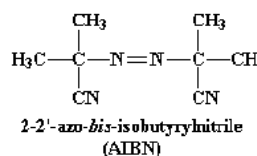
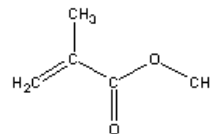
17.25. ábra. A modell átalakítása II.

17.3. Szimuláció

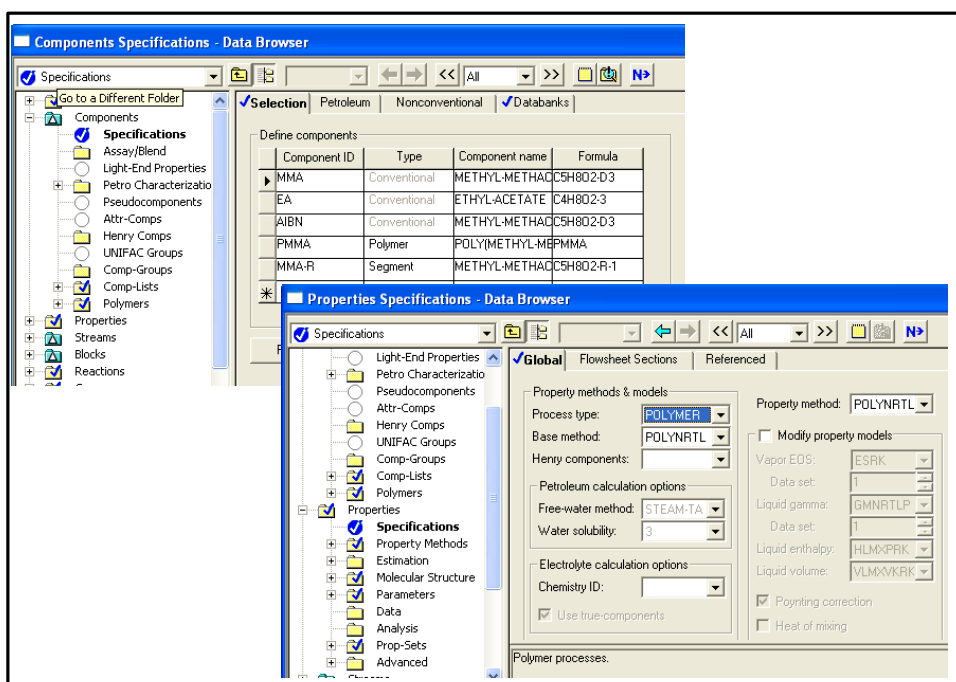
A műanyag gyártó rendszerek modellezésénél használható szimulátorok közül az *Aspen Polimer Plus* alkalmazását mutatjuk be egy rövid, áttekintő feladat megoldás keretében. Ezt az alábbi ábrákkal demonstráljuk:

- a feladat megfogalmazása (17.26. ábra),
- a komponensek és a komponensek tulajdonságait számító modell definiálása (17.27. ábra),
- a reakciók definiálása és a reakciósebesség számításához szükséges paraméterek megadása (17.28. ábra),
- a technológiai rendszer definiálása, berendezés modellek kiválasztása és a berendezések közötti kapcsolat megadása (17.29. ábra),
- az üzemeltetési paraméterek definiálása (17.30. ábra),
- a fontos állapotváltozók megjelenítése (17.31. ábra).

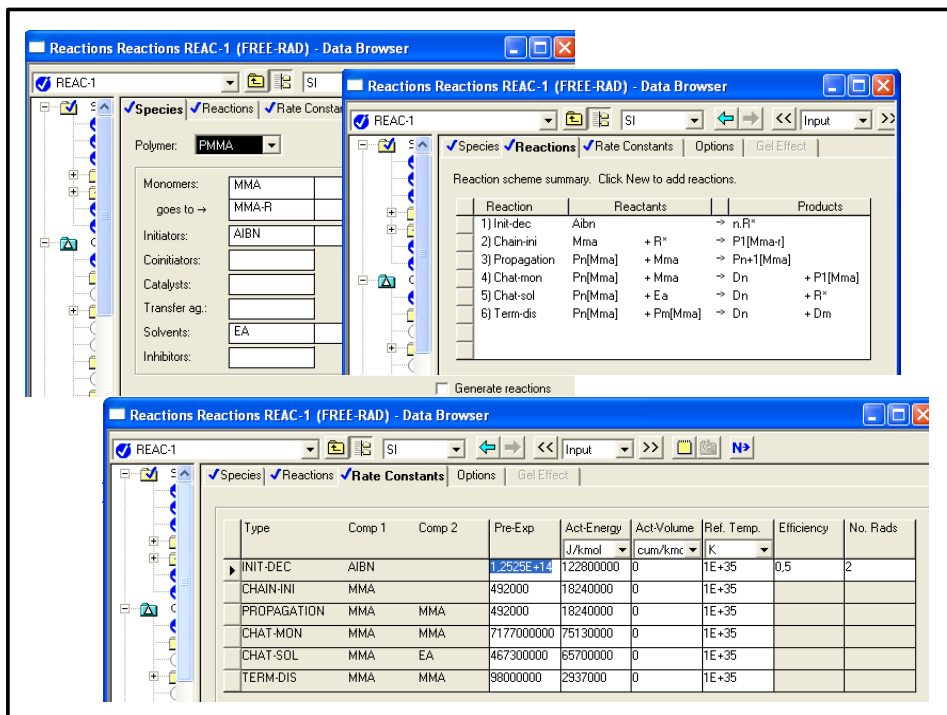
- metil-metakrilát szakaszos, oldószeres polimerizációja
- oldószer: etilacetát
- iniciátor: AIBN
- gyökös mechanizmus



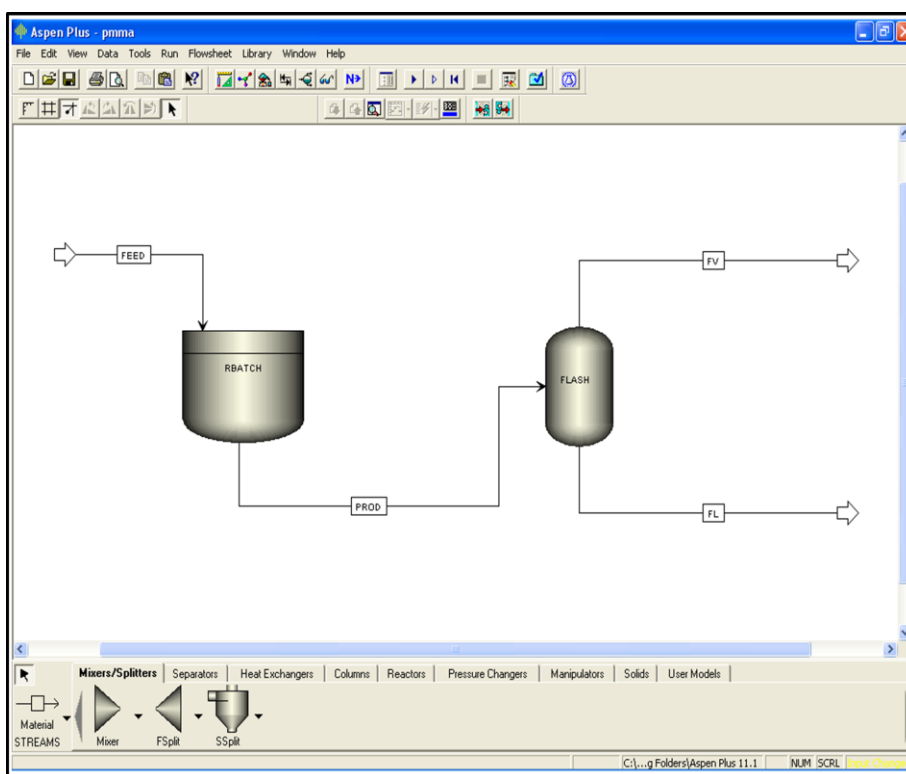
17.26. ábra. A feladat.



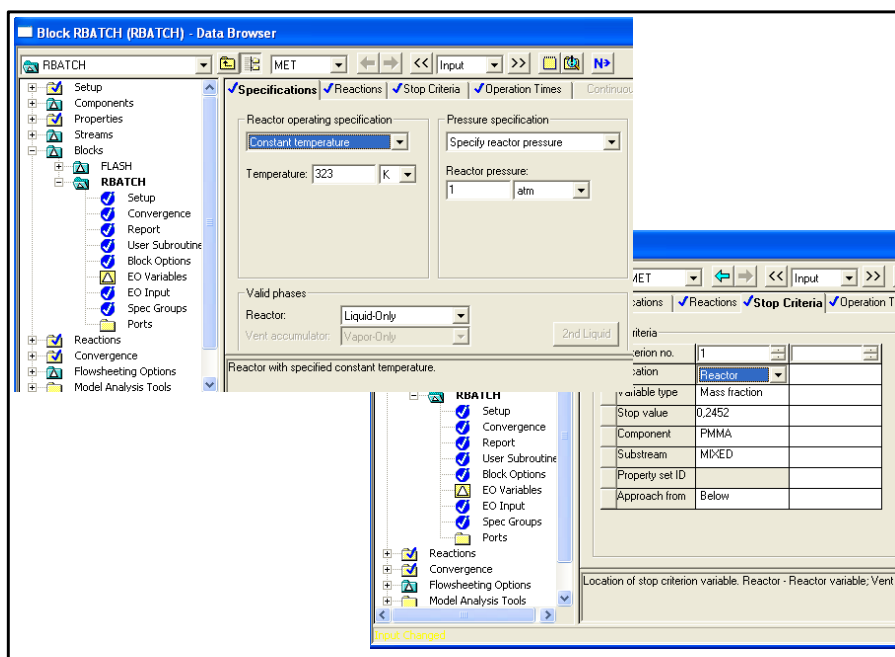
17.27. ábra. A komponensek definiálása.



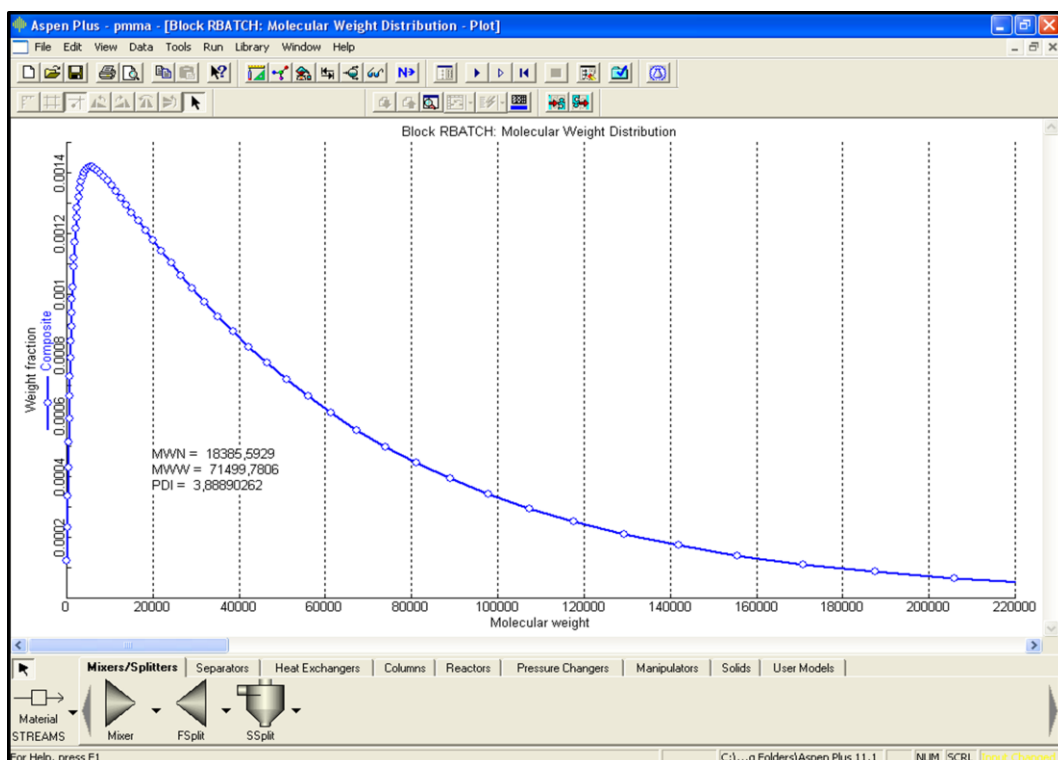
17.28. ábra. A reakciók definiálása.



17.29. ábra. A technológiai rendszer.



17.30. ábra. Üzemeltetési paraméterek megadása.



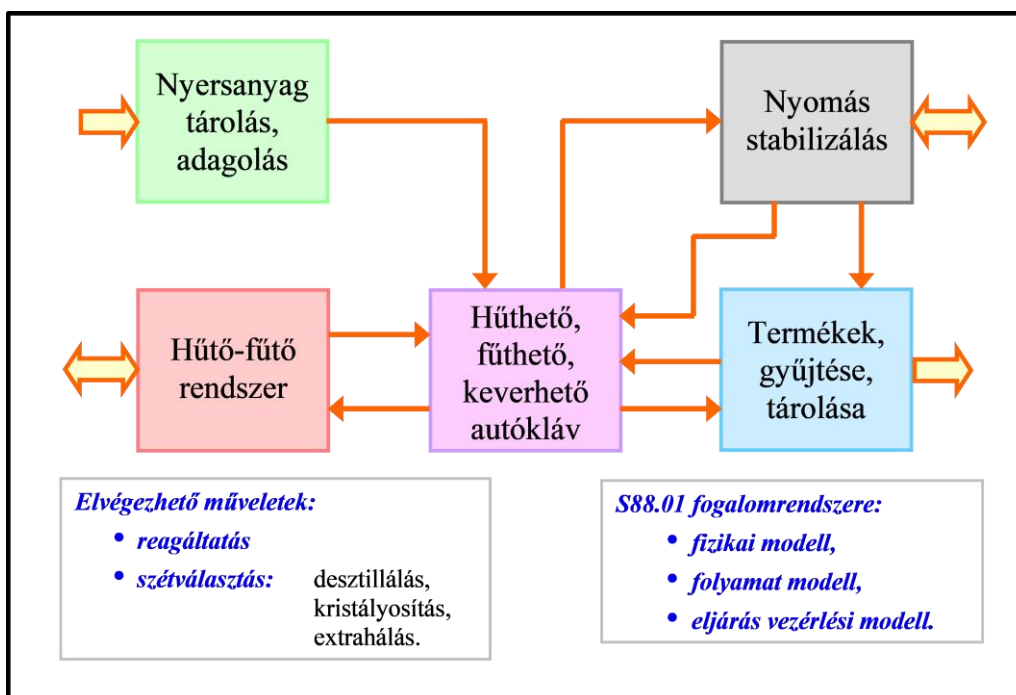
17.31. ábra. Polimerizációs fokszám szerinti eloszlás.

18. Modellalapú technológiafejlesztés

A nagy mennyiségeket előállító, folyamatosan működő technológiákat (pl.: petrokémiai ipar) többnyire specializálódott multinacionális gyártók szakemberei tervezik. A kismennyiségű, de nagy értékű anyagokat előállító, többnyire szakaszos technológiák kialakításával viszont leginkább az adott vállalat szakemberei foglalkoznak, többnyire a méretnövelés klasszikus útját követve. Ezzel szemben a méretnövelés megoldására egy olyan új modell-bázisú módszer is alkalmazható, amely a tervezést és irányítást integráltan kezeli és alkalmazza a modellezés technika és információs technológia korszerű eszközeit. A különböző funkciókra olyan eszközök is ismertek, amelyek alkalmazásával a méretnövelés, ill. tágabb értelemben a teljes technológiafejlesztés egy zárt információs láncként értelmezhető.

Számos ipari vállalatnál dolgoznak a finomkémiai üzletágak kiépítésén, ill. fejlesztésén. Technológiai oldalról tekintve ez, a piaci igények gyors változásait követni képes, rugalmas gyártórendszer(ek) (Multi Purpose Plant, MPP) kiépítését, s az ehhez szervesen illeszkedő fejlesztési infrastruktúra kialakítását jelenti, amelyekre alapozva létrehozható a minőségbiztosított fejlesztés, illetve gyártás.

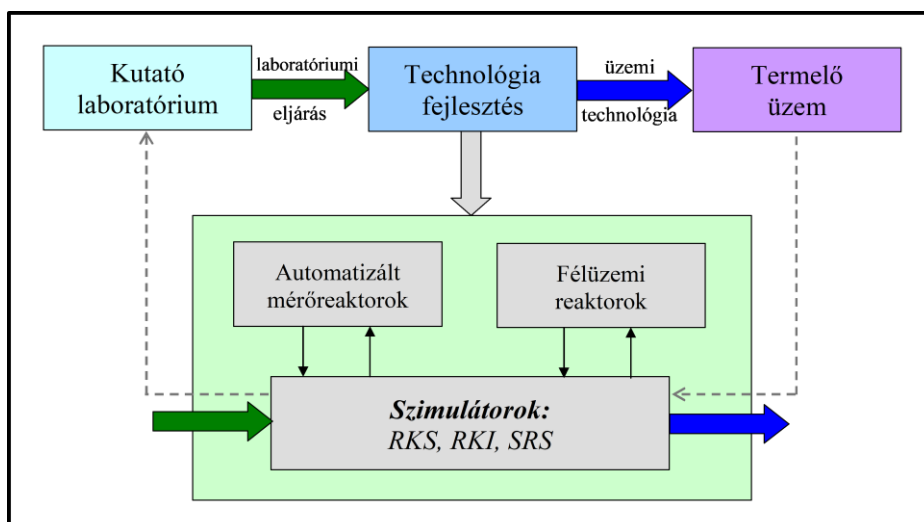
A finomkémiai, gyógyszergyári, élelmiszeripari rugalmas technológiák tipikus eleme az adagolókkal, szedőkkel és kondenzátor feltéttel ellátott fűthető-hűthető autokláv, amely megfelelő rugalmassága által egy sor művelet (termikus műveletek, reagáltatás, kristályosítás, extrakció, stb.) elvégzésére alkalmas. Egy ilyen rendszer struktúráját láttuk a 4.10. ábrán, a rugalmas gyártórendszer koncepcionális sémáját pedig a 18.1. ábra szemlélteti [21, 46].



18.1. ábra. A gyártórendszer sémája.

A piaci igények állandó változása (a termékre, a mennyiségre, illetve a termékminőségre vonatkozóan), valamint a dokumentáltság iránti igények növekedése egyre inkább kikényszerítik e technológiák automatizálását. A technológiatervezést és az irányítást integráltan célszerű kezelni. Ennek eszköze az objektum modellje, illetve a *batch automatizálás S88.01 szabványának* fogalom rendszere is hatékonyan alkalmazható. A tervezési és irányítási problémák megoldására egy részletes vegyészmérnöki modellen alapuló módszert mutatunk be. A részletes vegyészmérnöki modell az adott technológia minden lényeges tulajdonságát magába foglalja, illetve időben "összegyűjti" (időben bővülő ismeretek, információk konzisztens halmaza).

A technológiafejlesztés egy részletes információs modelljét a 18.2. ábra szemlélteti [21, 46].



18.2. ábra. A technológiafejlesztés sémája.

A technológiafejlesztésnek az alábbi három nagyobb területe alakult ki:

- **Kémiai kutatás:** Elsősorban a gyártás kémiai körülményeit tárják fel, s a gyártás alapvető műveleteit határozzák meg. Az eredményeket egy *laboratóriumi előiratban* (vagy más hasonló dokumentumban) rögzítik. Ennek fontosabb részei: a termék és a felhasznált anyagok fizikai kémiai tulajdonságai, az elképzelt reakciómechanizmus, a reagáltatás feltételei (nyomás), hőmérséklet, az eljárásvázlat és az eljárás kivitelezése, a gyártáskori ellenőrzések, kísérleti tapasztalatok, anyagmérleg, a veszélyességre, illetve gazdaságosságra vonatkozó alapadatok, stb.
- **Technológiafejlesztés:** Cél a *gyártási receptura* kidolgozása a laboratóriumi előiratban megadott adatok felhasználásával. Az alapadatokat kaloriméterrel, illetve kis és közepes méretű kísérleti reaktoron végzett mérésekkel egészítik ki. Meghatározzák a technológiai lépések és fázisok kockázatát is.
- **Gyártás:** A fejlesztés által szolgáltatott gyártási receptura esetleges korrigálása a gyártási tapasztalatok figyelembevételével, a gyártás elvégzése.

A klasszikus megközelítésre jellemzőek az egyirányú kapcsolatok, a fejlesztés minden fázisában a teljes technológiai megvalósíthatóságnak van prioritása. Számos *laboratóriumi* és *féltüzemi kísérlet* sorozatra van szükség, az információátvitel az egyes

szintek között esetleges és soha sem teljes. A berendezések keverése, s a fázisok keveredése jelenti az egyik legnehezebb problémát. A modell-bázisú fejlesztésre a dekompozíció-koordináció elvének az alkalmazása jellemző, amely lehetővé teszi a visszacsatolásokat, s az összetett probléma megoldását egyszerűbb probléma megoldások sorozatára vezeti vissza. Minden fázisban az adott részprobléma megoldásának van prioritása, s a megoldásra vonatkozó információk, a modelleken keresztül veszteség nélkül továbbvihetők. Az automatizált laboratóriumi és félüzemi reaktorokon elvégzett fizikai mérések az üzemi reaktorban lejátszódó mikro folyamatok modelljének pontosítását szolgálják, és a keverés, ill. a keveredés problémaköre is többnyire jól elkülöníthető.

Az információátvitel (itt nem hierarchia szintek közötti!) eszköze a modell, így az végigkíséri a technológiát annak teljes életciklusán (*life-cycle model*). Mind a tervezésben, mind a modellalkotásban nagy szerepe van a dekompozíciónak, illetve a koordinációnak. Ennek megfelelően a méretnövelésnél, a laboratóriumi és a közbülső szinteken nem a kialakítandó végső technológiai megoldás szempontjait, hanem a dekomponált technológia egyes részfolyamataira vonatkozó információszerzés szempontjait kell szem előtt tartani. A laboratóriumi szinten a technológia mikro folyamatainak (kémiai reakció, kristályosítási gócképződés, szemcseméret növekedés, stb.) sebességi egyenleteit kell identifikálni. A közbülső szintek az áramlástan modellek meghatározását szolgálják. Az alsóbb szinteken fizikai mérésekkel alátámasztott ismeretek a technológia modellben szintetizálhatók, amely a gyártási receptura tervezésének is az alapja.

A technológiafejlesztés, méretnövelés kísérleti háttérének biztosítása, számos problémát vet fel. Ezek egy része a gyártási folyamat leírásához, illetve tervezéséhez szükséges kísérleti – elsősorban kinetikai jellegű – információk megszerzése. Az ilyen célra alkalmazható rendszerek alapvetően két nagy csoportba sorolhatók:

- **automatizált laboratóriumi reaktorok:** melyek jól definiált és reprodukálható kísérletek elvégzésére, és így kísérleti úton történő eljárás optimalizálására

nyújtanak lehetőséget, illetve ezen keresztül, megfelelő analitikai mérésekkel kiegészítve, kinetikai információk meghatározását teszik lehetővé.

- **reakció kaloriméterek** (pl.: Mettler RC-1): olyan automatizált reaktorok, melyekben a kinetikai, illetve technológiai (pl.: biztonságtechnikai) információk megszerzése alapvetően a rendszer hőáramainak mérése alapján számított hőmérlegekből történik.

A Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék laboratóriumában kifejlesztett 1 literes automatizált reaktorrendszer az alábbi fő egységekből áll [46]: reaktorállvány, üveggészülék tartozékokkal, kiegészítő berendezések, műszerszekrény, irányító számítógép szoftverrel, kriosztát.

A reaktorrendszer vezérlésére készült szoftver feladata a laboratóriumi kísérletek előírt program szerinti vezetése, a kísérleti körülmények és adatok gyűjtése valamint a reaktorrendszer állapotának megjelenítése. A szakaszos eljárás receptura formájában adható meg. Irányítási szempontból lényeges, hogy a reaktor hőmérsékletének szabályozására a speciális igényeknek megfelelő algoritmust használjuk. A szoftver az Advantech GeniDAQ szoftverére épül. A receptura vezérlés, a szabályozási algoritmus és a reakcióhő becslés leképezésére Visual Basic modulokat alkalmazunk. A receptura *off-line szerkesztésére* egy külön program áll rendelkezésre. A mérő és beavatkozó eszközök, műszerek illesztését az Ethernet hálózatra csatlakozó ADAM5000 adatgyűjtő és vezérlő egység biztosítja.

A makro folyamatok (keveredés, áramlási viszonyok, stb.) fizikai vizsgálata céljából félüzemi méretű készülékek kiépítése szükséges. Ennek prototípusát (gyártó cella) tapasztalatszerzés céljából, a laboratóriumunkban is kialakítottuk. Ennek struktúrája, irányítási rendszere teljes mértékben megegyezik a laboratóriumi rendszerével, ezáltal lehetőség nyílik a zárt információátvitelre. Sőt, mivel ez a gyártórendszernek is prototípusa a zárt információátvitel a gyártórendszer irányába is kialakítható.

A tervezési munkákat a különböző programcsomagok integrált használata segíti. Vannak kereskedelmi forgalomban vásárolható szoftverek (Aspen, ChemCad, BatchCAD, EASYFLOW, stb.), tapasztalataink szerint azonban gazdasági és a konkrét

igények szempontjait is figyelembe véve, saját fejlesztésű programokra is szükség lehet. Az elmúlt időszakban a tanszéken az alábbi ilyen programcsomagok születtek [21, 46]:

- SRS (Szakaszos rendszer szimulációja): A reaktor struktúráját visszatükröző szimulátor, amely alkalmas a reaktoron elvégzett mérésekhez kísérlettervezésre, illetve a mérési adatok feldolgozására. A kémiai reakciók szimulálására az RKS-sel együtt használható.
- RKS (Reakció kinetikai szimulátor): Definiált reakció mechanizmus alapján tetszőleges reakciórendszer szimulálására alkalmas. A reakció kinetikai modell meghatározását szolgálja. Autonóm módon az SRS alrendszerétől függetlenül is, illetve azzal együttesen is használható.
- RKI (Reakció kinetika identifikáló): A reakció kinetika szimulátor megfelelő szélsőérték kereső eljárással kiegészített változata. A mérési adatok (reakció hőáram, analitikai mérések, stb.) alapján sebességi állandók, aktiválási energiák, rendűségek és reakcióhő számítására használható.
- PoliSim (Laboratóriumi méretű polimerizációs rendszer szimulációja): Termékfejlesztés támogatására fejlesztettük ki a szoftvert, amely tartalmazza a részletes polimerizációs kinetikai modellt, a rendszer adagoló, hűtő, fűtő és irányító rendszerének a szimulációját. Kísérleti adatokra alapozva támogatja a modell paramétereinek az identifikálását is.

A különböző funkciójú rendszerek (laboratóriumi reaktor, pilot plant, gyártó rendszer) irányítására egy egységes modell alapú hierarchikus irányítási koncepciót célszerű alkalmazni [46]. A legalsó szinten a közvetlen mérések és beavatkozások találhatók (legkisebb) mintavételezési idővel. A közvetlenül mért jelekből, a megfelelő modell (részlet) ismeretében más jelek is kiszámíthatók. Például: egyensúlyi gőzhőmérséklet, jellemző köpeny hőmérséklet stb. Ezen a szinten, ha szükséges, folytatódhat a jelfeldolgozás. Például: az a priori modell alapján hihetőség vizsgálat vagy „közönséges” szűrés, stb. A slave szinten helyezkednek el, a különböző üzemmódoknak megfelelő, slave-köri algoritmusok. Ezek funkciója a master szintről érkező alapjelnek megfelelően, a jellemző köpenyhőmérséklet tartása. A slave szintre szuperponálódik a

master szint, amelynek eleme a master szintű modell alapú algoritmus, a koordináló szintről érkező reaktor hőmérséklet alapjel függvényében számolja a slave-köri köpenyhőmérséklet alapjelet (s a köpeny üzem módnak megfelelő slave-köri algoritmus válik aktívvá). A master szintre épül az irányítás koordináló szintje, amelynek eleme a megfelelő *alaplévelet algoritmus*, gyors felfűtés meleg vízzel vagy gőzzel, gyors lehűtés hidegvízzel vagy más hűtőfolyadékkal, vezetett alapjelű melegítés gőzzel vagy meleg vízzel, vezetett alapjelű hűtés hidegvízzel vagy más hűtőfolyadékkal. A szintek közötti kapcsolatok lényeges elve, hogy a slave szint felett a mintavételezési idő a slave-köri egész számú többszöröse is lehet. Ez a megfelelő szinkronizálást igényli: mintavételezés (integrálás), tartószerv. Az irányítás fenti szintjei „mögé” képzelendő az irányított technológia a priori modellje, a konkrét rendszer adatbázisával (geometriai méretek, fázis töltetek, termodinamikai tulajdonságok, üzemeltetési adatok stb.) együtt. Ez biztosítja a megfelelő tervezési egyenletek konzisztenciáját és a megfelelő információátvitelt. Ez teszi lehetővé a teljes rendszer tesztelését, a megfelelő részekre való felbontáson, s az egyes részek tesztelésén keresztül. A modell az alapja a gyártások közötti információátvitelnek is. Itt arról van szó, hogy a gyártás közben gyűjtött adatok alapján az irányítási algoritmus(ok) paraméterei újra számolhatók, s azok a következő gyártásban hasznosíthatók (*tanuló szabályozás*).

19. Összegzés

A fizikai valóság jelenségeinek leírására a háromdimenziós geometriai térből és időből álló négydimenziós (kiegészített) teret használhatjuk. Ebben a négydimenziós térben az E extenzív mennyiségekre mérleget készíthetünk. A vegyipari művelettanban egy termodinamikai fázist a komponens tömegekkel (az egyik komponenstömeg helyett választhatjuk a fázis tömeget), az energiával és az impulzussal jellemzünk. Az extenzív mennyiségek a teret egyenetlenül töltik ki, ezért differenciális mérleget írunk fel, amely a tér bármely pontján érvényesül. Az adott extenzív mennyiségre vonatkozó differenciális mérlegkészítésnél azokat a jelenségeket kell figyelembe venni, amelyek hatással vannak az adott extenzív mennyiségre. Az egyik jelenség a koordináta menti („szemmel látható”, makroszkópikus) mozgás. Az idő koordináta menti „mozgást” lokális megváltozásnak, a tér koordináták mentit pedig konvektív áramlásnak nevezzük. Az extenzív mennyiségekre ható másik jelenség osztály a koordináta menti („szemmel nem látható”, mikroszkópikus) konduktív mozgásokat foglalja magába, amely abból adódik, hogy a fázis, különböző sebességgel mozgó részecskékből (molekulákból) tevődik össze és jellemzésükre csak egy átlagsebesség áll rendelkezésre. Ezen jelenségek leírására a szakmatörténetileg kialakult fenomenologikus formákat használjuk (Fick, Fourier, Navies-Stokes törvények). A két koordináta menti mozgással kapcsolatos jelenségek osztályába nem sorolható jelenségek, a források osztályát képezik. Ennek megfelelően az E extenzív mennyiségre felírt differenciális mérleg alakja az alábbi:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(v_x e) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y e) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z e) + \frac{\partial}{\partial x}\left(-a_x \frac{\partial e}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(-a_y \frac{\partial e}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(-a_z \frac{\partial e}{\partial z}\right) = q_{\{x,y,z\}}^E$$

- ahol: e az E extenzív tulajdonság geometriai térbeli sűrűsége,
 v_i a konvektív áramlás sebessége az i koordináta mentén,
 a_i a konduktív áramlási tényező az i koordináta mentén,
 q a forrás sűrűség.

A mérleg a megfelelő kezdeti és perem feltételekkel kiegészítve adja az adott fázis leírását. Ezek jelentik a „klasszikus művelettan” fundamentális egyenleteit.

A hierarchikus modellezésben az adott szintű modellt az elemek modelljeiből és a kapcsolatok leírásából származtatjuk. A sok elemű rendszert populációként írjuk le az idő és a fázistér koordinátái által definiált kiterjesztett „téridőben”. A fázistér koordinátáit az elemek tulajdonságai (az elemek belső tulajdonságai) és az elemek közötti kapcsolati tér koordinátái (az elemek külső tulajdonságai) adják meg. A fentihez hasonlóan a rendszer elemek számára, mint extenzív mennyiségre differenciális mérleg írható fel az idő és a fázistér koordinátái által definiált térben. Mivel itt az elemek tulajdonságait is számba vesszük, ebben a téridőben csak a koordináta menti („szemmel látható”) mozgás (lokális megváltozás és a fázistér koordináták menti konvektív mozgás) és a forrás típusú jelenségek figyelhetők meg. Az elemszámra vonatkozó differenciális mérleg az alábbi:

$$\frac{\partial \Psi_z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (v_z \Psi_z) = q_z^S$$

ahol: Ψ_z az elemszám sűrűség (a fázistérben),

v_i a konvektív áramlás sebessége az i koordináta mentén,

q az elemszám forrás sűrűség.

A $\Psi_z(t, z)$ elemszám sűrűség az adott elemekből álló rendszerre minden lényeges információt magába foglal, a fenti modell megoldásával kapcsolatban azonban két alapvető nehézség is felmerül:

1. A $v_z(z)$ és $q_z^S(z)$ függvények, ill. a benne szereplő paraméterek pontos megadása az adott megismerési folyamat kereteit általában meghaladják.
2. A sok változó szerinti parciális differenciálegyenlet numerikus megoldása is sokszor meghaladja a lehetőségeinket.

A nehézségeket ugyanakkor enyhíti az, hogy a mérnöki feladat megoldása nem is igényli az elemszám sűrűség nyújtotta teljes információ mennyiségét. Ez az oka annak, hogy a fenti modellt „csupán” arra használjuk fel, hogy ebből kiindulva a mérnöki feladat által megkövetelt információ tartalmú modellt (vagy modelleket) generáljuk.

Az extenzív mennyiségek additív tulajdonságát kihasználva először integrálással a rendszer szintű mennyiségeket definiáljuk:

$$\Phi_u(t, u) = \{\varphi(Y) = \mathfrak{S}_h[\varphi(y)\Psi_z(t, z)]\}, \quad h \in P(z)$$

ahol h az integrálással eliminált koordináták halmaza,

$u=z \setminus h$ a fázistér megmaradt koordinátáinak halmaza.

A különböző információ átviteli problémák megoldása után kapjuk a rendszer szintű változókra vonatkozó differenciális mérlegeket a T_u térben:

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial u} (\hat{v}_u \Phi_i) + \frac{\partial}{\partial u} \left(-a_u \frac{\partial \Phi_i}{\partial u} \right) = q_u^{\Phi_i}, \quad \forall \Phi_i \in \Phi_u$$

Ezen mérlegek adják a rendszer szintű modellt, amely zárt olyan értelemben, hogy autonóm módon megoldható. Ha az u a geometriai koordinátákat tartalmazza, akkor a művelettan klasszikus Damköhler egyenleteit kapjuk, ha viszont elem tulajdonságot is magába foglal, akkor populációs modellt eredményez. Így ezzel a modellezési szemlélettel, a teljes modellezési készletet lefedjük.

20. Jelölésjegyzék

Itt csak az általánosan, ill. gyakran használt jeleket, jelöléseket soroljuk fel, a többi változó értelmét lokálisan adjuk meg. A tananyagban megjelenő modellek invariánsak a konzisztens mértékegység rendszerekre. Konzisztens mértékegység rendszert az öt alapmennyiség (számosság, tömeg, hossz, idő, hőmérséklet) mértékegységeinek rögzítésével kapunk. A változók, függvények alapértelmezésként több változósak, a vektort, mátrixot csak akkor jelöljük aláhúzással, ha azt ki akarjuk hangsúlyozni.

a aktivitás, gyorsulás, keresztmetszet,

B térfogatáram,

C rendszer szintű koncentráció

c koncentráció,

c_p fajhő,

D diffúziós, ill. keveredési tényező,

$dz = dz_1 dz_2 \dots dz_i \dots$, $z_i \in \mathbb{Z}$,

E aktiválási energia,

e energiasűrűség, extenzív mennyiség térbeli sűrűsége,

f Boltzmann függvény,

f_c mértékegységváltó,

h fajlagos entalpia,

$(-\Delta H_R)$ reakcióhő,

$[h_0, h_\infty] \ni h$, $[h_0, h_\infty] \subseteq \mathbb{R}^{s(h)}$ h értelmezési tartománya,

i impulzussűrűség,

I index halmaz,

$$\mathfrak{I}_h(\dots) = \dots \int_{h_{i,0}}^{h_{i,\infty}} \dots (\dots) \dots dh_i \dots \quad / h_i \in h \quad \text{integrál operátor,}$$

J Jacobi mátrix,

j áramsűrűség,

K kódhalmaz,

k kód, kinetikai konstans,

L reaktorhossz,

M molekulatömeg, a mikro modell formális átalakításával kapott modell,

M_i, M_{i+1} mikro, ill. makro modell,

m molekulatömeg,

$P_n = \{1, 2, \dots, n\}$, az első n pozitív egész szám

$\mathcal{P}(h)$ a h halmaz hatvány halmaza,

p parciális nyomás,

Pe Peclet szám,

q_z^S elemszám forrassűrűség a T_z térben,

R sugár, egyetemes gázállandó, valós számok halmaza,

s(h) a h halmaz számossága,

T hőmérséklet, tulajdonság halmaz,

T_h a h halmaz elemei által definiált tér,

t idő koordináta,

x az elemek külső tulajdonsága, koordináta, konverzió,

y az elemek belső tulajdonsága, koordináta, mólórt ill. dimenziómentes
koncentráció,

V térfogat,

- v sebesség,
(v, f) rendezett kettős, matematikai modell (v változók, f összefüggések),
 v_z a T_z térbeli mozgás sebességeinek halmaza,
z a (teljes) tulajdonság halmaz,

Görög betűk:

- α konstans, hőátadási tényező, kor
 β konstans, komponens átadási tényező,
 Γ felület,
 γ konstans, átadási felület (eloszlás),
 δ konstans, film vastagság,
 ε konstans, fázis visszatartás (hold-up), porozitás,
 Φ rendszer szintű extenzív mennyiség eloszlás,
 φ extenzív elem tulajdonság,
 η hatásossági tényező,
 κ konstans, elemek közötti kapcsolat, információátviteli tényező,
 λ tartózkodási idő,
 μ momentum,
 ν sztöchiometriai együttható,
 Θ dimenziómentes idő,
 τ tartózkodási idő, tekervényességi tényező,
 ρ fázis tömegsűrűség, tartalmazási reláció
 σ torzítási tényező,
 $\Psi_z(t, z)$ elemszámsűrűség a T_z térben.

Indexek:

A	analitikus,
b	forrásponti,
C	kritikus, szénmonoxid
G	gáz, gőz,
H	hidrogén
i	i komponens,
K	környezet,
L	folyadék,
M	metanol
o	szemcse felület,
S	standard,
<i>megf</i>	megfigyelhető.

Rövidítések:

DE(R)	differencegyenlet (rendszer),
FÁR	fáziselemekből álló rendszer,
KTO	kémiai technológiai objektum,
KTR	kémiai technológiai rendszer,
MÁR	molekulákból álló rendszer,
MIMO	több bemenetű több kimenetű rendszer
MKR	multi komponensű rendszer,
PDER	parciális DER,
SISO	egy bemenetű egy kimenetű rendszer



TFR többfázisú rendszer,

TKR többkomponensű rendszer,

Egyéb:

$h \setminus \dots$ a $h \dots$ tulajdonsága,

$[\dots]_{x=L}, (\dots)_{x=L}$ a \dots mennyiség az $x=L$ helyen,

$\langle \dots \rangle,$ \wedge \dots mennyiség átlaga,

\sim ingadozás

21. Irodalomjegyzék

- [1] Abonyi, J.: Cluster Analysis for Data Mining and System Identification, Amazon (2007)
- [2] Acrivos, A., Amundson, N., R., Chem. Eng. Sci., 4, 29 (1949)
- [3] Almásy G.: A Kalman féle rendszermodell és a rendszerek osztályozásának néhány szempontja, Kézirat, Veszprém, (1975)
- [4] Almásy G., Nagy D.: Vegyipari rendszertan, Kézirat, Veszprém, (1974)
- [5] Aris., R., Varma, A. (ed.): The Mathematical Understanding of Chemical Engineering Systems, Pergamon Press, Oxford, (1980)
- [6] Aris, R.: Introduction to the Analysis of Chemical Reactors, Prentice-Hall, Englewood Cliff, N.Y. (1965)
- [7] Aris, R.: Mathematical Modeling: A Chemical Engineer's Perspective, Academic Press, New York, (1999)
- [8] Árva P.: Hung. J. Ind. Chem, 5, 447-458, (1977)
- [9] Árva P., Szeifert F.: Kémiai technológiai rendszerek matematikai modellezése, Magy. Kém. Lapja, 36, 648 (1981).
- [10] AspenTech Case Study, Aspen Dynamics (2006)
- [11] Asua, J. M.: Polymer Reaction Engineering, Blackwell Publ, Oxford, UK, (2007)
- [12] Benedek P., László A.: A vegyészmérnöki tudomány alapjai, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, (1964)
- [13] Bequette, B. W.: Process Dynamics: Modeling, Analysis and Simulation, Prentice Hall, Upper Sadle River, NJ, (1998)
- [14] Berty, J., M.: Experiments in Catalytic Reaction Engineering, Elsevier, Amsterdam, (1999)
- [15] Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N.: Transport Phenomena, Wiley, New York, (1960)
- [16] Blickle T.: A műszaki kémiai rendszerek algebrai leírása, Akadémiai Kiadó, Budapest, (1973)

- [17] Borezskov, Szlinko, Chem. Eng. Sci., 14, 259 (1961)
- [18] Bowman, J.,R., Ind. Eng. Chem. 41, 2004 (1949)
- [19] Cameron, I.,T., Hangos, K.: Process Modeling and Model Analysis, Academic Press, New York, (2001)
- [20] Chemical Engineering Communications, Vol. **76** (1989)
- [21] Chován, T.: Kinetikai modellek a szakaszos technológiák fejlesztésében, PhD értekezés, Pannon Egyetem, Veszprém, (2006)
- [22] Colburn, A., P.: Trans. Amer. Inst. Chem. Engrs, **29**, 174 (1933)
- [23] Crowe, C.,M., Hamielec, A.,E., Hoffman, T.,W., Johnson, A.,I., Shannon, P.,T., Woods, D.,R.: Chemical Plant Simulation, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, (1971)
- [24] Csukás, B.:A strukturális kibernetika és vegyész)mérnöki alkalmazásai, Pannon Egyetem, Veszprém, (1994)
- [25] Damköhler, G.: Z. Elektrochem. 42, 846 (1936)
- [26] Danckwerts, D.V., Chem. Eng. Sci. **2**, 1 (1953)
- [27] Danckwerts, D.V., Chem. Eng. Sci. **8**, 93 (1958)
- [28] Dimian, A., C.: Integrated Design and Simulation of Chemical Processes, Elsevier, Amsterdam, (2003)
- [29] Domonkos E. (sorozat szerkesztő): Környezetmérnöki Tudástár, 6. kötet: Környezetvédelmi műszaki technológiák (Szerkesztő: Horváth G.), 2. javított kiadás – (2011) Első kiadás: (2008) Veszprém Pannon Egyetem
- [30] Finlayson, B., A.: Introduction to Chemical Engineering Computing, Wiley, NJ, (2006)
- [31] Fonyó Zs., Fábry Gy.: Vegyipari művelettani alapismeretek, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt. Bp. (2004)
- [32] Galán, M.,A, del Valle, E., M.: Chemical Engineering, Trends and Developments, Wiley, NJ, (2005)

- [33] Gyarmati, I.: Nemegegyensúlyi termodinamika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, (1967)
- [34] Henson, M.,A., Seborg, D.,E.: Nonlinear Process Control, Prentice Hall, Upper Sadle River, NJ, (1997)
- [35] Himmelblau, D.,M., Bischoff, K., B.: Process Analysis and Simulation: Deterministic Systems, Wiley, N.Y., (1968)
- [36] Holderith J.: Magy. Kém. Folyóirat, 83, 69, (1977)
- [37] Hulburt, H.,M., Katz, S., Chem. Eng. Sci., 19, 555 (1964)
- [38] Ingham, J., Dunn, I.,J., Heinzle, E., Prenosil, J.,E., Snape, J., B.: Chemical Engineering Dynamics, Wiley-VCH, (2007)
- [39] Jakobsen, H., A.: Chemical Reactor Modeling, Multiphase Reactive Flows, Springer, Berlin, (2008)
- [40] Jedlovsky P.: Rektifikáló kolonnák matematikai modellezése, kandidátusi értekezés, MTA, Budapest, (1975)
- [41] Kafarov, V.,V., Dorohov, I.,N.: Szisztémij analiz processzov khimicseszkoj technologii, Nauka, Moszkva, (1976)
- [42] Lakatos, B.G.: Multilevel modeling of heterogeneous catalytic reactors. Chemical Engineering Science, 56, 659-666 (2001)
- [43] Luyben, W., L.: Chemical Reactor Design and Control, Wiley, NJ, (2007)
- [44] Marquardt, W.: Trends in Computer-Aided Modeling, Comput. Chem. Engng. **20**, 591 (1996)
- [45] Meyer, T, Keurentjes, J.: Handbook of Polymer Reaction Engineering, Wiley-VCH, (2005)
- [46] Nagy L.: Szakaszos reaktorok szimulációja és irányítása, PhD értekezés, Veszprém, (2005)
- [47] Németh S.: Polimerizációs folyamatok és reaktorok modellezése, PhD értekezés, Veszprém, (2005)
- [48] Németh S., Abonyi J., Árva P., Feil B.: Monitoring Process Transitions by Kalman Filtering Time-Series Segmentation, Computer Aided Chemical Engineering, 18, CD, (2004)

- [49] Németh S., Thyron F. C.: Study of the Runaway Characteristics of Suspension Polymerization of Styrene, Chem. Engng. Technol. 18, 315-323, (1995)
- [50] Perry, R., H. (Late Ed.), Green, D., V. (Ed.): Perry's Chemical Engineers' Handbook, 7-th ed. McGraw-Hill, (1997)
- [51] Ramirez, W., Fred: Computational Methods for Process Simulation, Butterworths Series in Chem. Eng. (1989)
- [52] Russel, S.,J., Norvig, P.: Mesterséges intelligencia modern megközelítésben, Panem Könyvkiadó, Budapest, (2000)
- [53] Seborg, D.,E., Edgar, T.,F., Mellichaps, D.,A.: Process Dynamics and Control, 2-nd Ed., Wiley, (2004)
- [54] Selfridge, R., G.: Coding a General-Purpose Digital Computer to Operate as a Differential Analyzer, Proc. (1955). Western Join Computer Conference (IRE)
- [55] Srejder, J., A.: Egyenlőség, hasonlóság, rendezés, Gondolat, Budapest, (1975)
- [56] Szeifert, D.: CFD szimulátor alkalmazása a heterokatalitikus reaktorok modellezésében, Diplomadolgozat, Pannon Egyetem, Veszprém, (2011)
- [57] Szeifert, F.: Információátviteli problémák a kémiai technológiai rendszerek modellezésében, kandidátusi értekezés, MTA, (1990)
- [58] Szeifert F., Nagy L., Chován T.: Technológiai rendszerek irányítása, Pannon Egyetem, kézirat, Veszprém, (2019)
- [59] Thiele, E.,W., Industrial and Engineering Chemistry, 31, 916 (1939)
- [60] Ulbert Zs. , Lakatos B.G.: Dynamic simulation of crystallization processes: Adaptive finite element collocation method, AIChE Journal 53 : 12 pp. 3089-3107., 19 p. (2007)
- [61] Vajda S.: Vegyipari folyamatok dinamikája és irányítása, Tudományszervezési és Informatikai Intézet, Budapest, (1984)
- [62] Varga T.: Folyamatmodellek és adatbányászati eszközök alkalmazása technológiai rendszerek biztonságos üzemeltetési tartományainak feltárására és jellemzésére, PhD értekezés, Pannon Egyetem, Veszprém, (2009)
- [63] Weisberg, M.: Who Is a Modeler?, The British Journal for the Philosophy of Science, Vol. 58, No. 2 (Jun., 2007), pp. 207-233



- [64] Whitaker, S., Chem. Eng. Sci., 28, 139 (1973)
- [65] Zeldovich, B., Zhur. Fiz. Khim. **13**, 163 (1939)
- [66] Zeman, R., Amundson, N.,R., A.I.Ch.E. Journ., 9, 279 (1963)