

# Többdimenziós Populáció Mérleg Egyenletek Alkalmazása és Megoldómódszerek Összehasonlító Vizsgálata

## Application of Multidimensional Population Balance Equations and Comparison of Solution Methods

Balogh László<sup>1</sup>, Egedy Attila<sup>1</sup>, Bárkányi Ágnes<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Process Engineering, Faculty of Engineering, University of Pannonia, Egyetem u.10, 8200, Veszprém, Hungary,

\*Elérhetőség: [balogh.laszlo@mk-uni.pannon.hu](mailto:balogh.laszlo@mk-uni.pannon.hu)

### ABSTRACT

As the pharmaceutical and chemical industry continues to develop, the importance of continuously operating crystallization processes is increasing. It is difficult to imagine this equipment's design and operation without the equipment model. Multidimensional population balance equations can be used for needle-like or plate-like crystals. Here, the task is to solve a partial differential and ordinary differential mixed equation system. Various solution methods are available, but we must consider their limitations. In our work, we compare the method of moments with the Monte Carlo method. As a case study, we present the solution of a model describing the size distribution of a needle crystal system produced in mixed equipment with a cooling jacket on an industrial scale using the mentioned methods. The used model can calculate the equipment's macroscopic properties and the crystals' microscopic properties. The example presents the advantages, disadvantages, and limitations of the examined solving methods.

**Keywords:** crystallization, population balance equation, method of moments, Monte Carlo simulation

### ÖSSZEFOGLALÓ

A gyógyszer- és vegyipar folyamatos fejlődésével a folyamatos üzemű kristályosító eljárások egyre inkább előtérbe kerülnek. Ezek tervezése és üzemeltetése szinte elképzelhetetlen a berendezéseket leíró modellek nélkül. Olyan esetekben, amikor a rendszerben tű-, vagy lapkristályos anyagokat kell leírunk többdimenziós populációs mérleget alkalmazhatunk, így egy parciális differenciálegyenletből és közönséges differenciálegyenletek kevert rendszerét kapjuk. A modell megoldása során számos megoldómódszer közül választhatunk ugyanakkor figyelembe kell venni a megoldómódszerek korlátait és az esetleges információvesztést, amit egyes megoldómódszerek okoznak. Munkánk során a momentumok módszerét hasonlítjuk össze a Monte Carlo módszerrel. Esettanulmányként egy ipari méretű, hűtőköpennyel ellátott kevert berendezésben keletkező tűkristályos rendszer méret eloszlását leíró modell megoldását mutatjuk be az említett módszerekkel. Az alkalmazott modell megfelelően képes mind a makroszkopikus, berendezés szintű mind a mikro szintű, kristály tulajdonságok számítására. A példán keresztül bemutatjuk a vizsgált megoldó módszerek előnyeit-hátrányait és lehetséges korlátait.

**Kulcsszavak:** kristályosítás, populáció mérleg modell, momentum módszer, Monte Carlo szimuláció