



## 结晶过程模拟软件gCRYSTAL培训 班

尊敬的\_\_\_\_\_先生/女士，您好！

结晶过程模拟软件gCRYSTAL培训班将于2016年07月在南京召开。

### 会议通知

关于举办“结晶过程模拟软件gCRYSTAL培训班”的通知

各有关单位：

结晶是一个重要的工艺过程，为数众多的化工产品及中间产品都是以晶体形态出现，通过结晶分离，能从组成复杂的溶液中制得高纯度和外观良好的产品。同时，结晶是一个很复杂的分离过程，包括多组分的传热传质过程，也涉及到表面反应过程，尚有晶体粒度及粒度分布问题，比起其它常见的化工单元操作所涉及的问题数量较多、难度较大。所使用的衡算关系除了物料衡算、能量衡算外，还需要粒数衡算。仅二次成核的机理就提出晶核有许多发源地及脱落方式。至于晶体生长更属于一个机理很复杂的领域，它涉及多相多组元系统中伴有传热的传质过程，也涉及表面反应过程。在结晶模拟领域，目前仅有英国PSE公司的gCRYSTAL软件可以实现相对完整而准确的计算。PSE公司（Process Systems Enterprise）在结晶行业具有超过15年的研发经验，为全球领先的企业提供项目咨询合作。其开发的gCRYSTAL软件可以进行间歇、半连续、连续结晶工艺模拟，包含冷却结晶、蒸发结晶、反溶剂法结晶工艺，在国外该软件被广泛应用到固体颗粒化学、食品、制药、精细化工领域。采用该软件，可帮助客户进行动力学特性分析、工艺设计与优化、中试放大。中国化工企业管理协会将于2016年7月1日-4日在南京市举办“结晶过程模拟软件gCRYSTAL培训班”请各有关单位积极派员参加，现将有关事项通知如下：

### 会议组织

主办单位：中国化工企业管理协会

支持单位：中国化工学会 中国石油和化学工业联合会

### 时间地点：

时间：2016年7月1日-4日（1日全天报到）

地点：南京市（地点确定直接通知报名者）

### 主要培训内容：

- 1、gPROMS软件介绍、gCRYSTAL软件介绍。
- 2、熟悉gCRYSTAL界面、使用gCRYSTAL进行物性验证
- 3、建立结晶实验室间歇过程模型、建立工业结晶间歇过程模型
- 4、估算结晶动力学方程系数、输入工厂运行测得数据并建立回归
- 5、实现降低粒径分布PSD的优化研究
- 6、建立实验室结晶全局定义和间歇过程模型
- 7、建立工业结晶连续过程模型（三级结晶器）

### 培训对象

从事化工、石化、精细化工、轻工等与结晶工艺过程相关的专业技术人员；结晶器设备厂家工艺设计人员；制药厂研发人员；新产品研发人员、各院校、科研院所从事化工设计、化工工艺专业的老师、研究生等

## 培训目标

(1)了解gCRYSTAL软件进行间歇和连续结晶过程模拟；(2)了解gCRYSTAL软件进行基本动态模拟建模的技巧和能力；(3)熟悉gCRYSTAL软件的通用方法；(4)熟练应用gCRYSTAL软件各个功能模块的用法和功能；

## 培训费用

2600元/人（含培训费、会务费、资料费、证书费等）。食宿统一安排，费用自理。参加培训的代表，由主办单位颁发结晶过程模拟软件（gCRYSTAL）工程师培训资格证书，二寸彩色照片2张（背面注明姓名）

## 会议日程

7月1日	报到日期2016年7月1日(全天报到)会议时间：7月1日-4日（南京市）
	课 程 内 容
7月2日 09:00-12:00	<p>一、通用基本介绍： 培训教师项目背景介绍；PSE公司介绍；gPROMS软件介绍；gCRYSTAL软件介绍。</p> <p>二、熟悉gCRYSTAL界面： 定义结晶全局性质，输入结晶体系涉及的物性：结晶溶剂和溶液的密度、粘度、比热、焓、溶解度等。</p>
7月2日 14:30-17:30	<p>三、使用gCRYSTAL进行物性验证 针对已经输入的结晶体系物性，添加物性分析和溶解度分析功能模块，进行分析验证。</p> <p>四、建立结晶实验室间歇过程模型 添加MSMPR间歇结晶实验室模块，定义结晶器的尺寸（容积、搅拌桨直径转速等），定义结晶二次成核动力学，定义结晶器初始晶种和初始状态，添加温度控制TC系统，添加液相组成和粒度分布传感器。</p>
7月3日 09:00-12:00	<p>五、建立工业结晶间歇过程模型 在间歇结晶实验室模型基础上，进行设备放大，添加二次成核及结晶动力学估计值（后续会根据实验数据回归），定义温度控制曲线方案。</p> <p>六、估算结晶动力学方程系数 将实验室测得的不同温度下的液相组成表格（包含快速冷却，缓慢冷却和高浓度晶种3种不同工况下的数据），输入到gCRYSTAL中，建立动力学参数估计模块，回归动力学中的活化能系数、晶体生长速率和过饱和度系数</p>
7月3日 14:30-17:30	<p>七、输入工厂运行测得数据并建立回归 在实验室数据回归基础上，添加工厂运行数据回归，方法和上述一致。</p> <p>八、实现降低粒径分布PSD的优化研究 将上述回归估算出的动力学相关信息重新输入到模型中，将温度控制系统改为自动优化，让软件优化出能够得到低粒径分布的温度控制方案。并添加PSD对比模块，快速比较两种不同方案的PSD粒径分布差别。</p>
7月4日	<p>九、建立实验室结晶全局定义和间歇过程模型 添加MSMPR间歇结晶实验室模块，定义结晶器的尺寸（容积、搅拌桨直径转速等），定义结晶</p>

09:00-12:00	<p>——从我做起，正风肃纪，严明纪律，树立良好形象。</p> <p><b>十 建立工业结晶连续过程模型（三级结晶器）</b></p> <p>在间歇结晶实验室模型基础上，进行设备放大，添加二次成核及结晶动力学估计值（后续会根据实验数据回归），添加另外两个结晶器，添加泵进行液位控制，输入运行持续时间，定义温度控制曲线方案，形成连续结晶。</p>
7月4日 14:00-16:00	<p><b>十一、通过优化对年收益进行最大化</b></p> <p>将上述回归估算出的动力学相关信息重新输入到模型中，温度控制和液位控制系统改为自动优化，通过编写gPROMS语言，定义工厂的年收益各个变量及公式。将小于50毫米的晶体粒径最大化，最终实现工厂的年收益最大化。</p> <p><b>十二、解答交流一些疑难问题</b></p>
备注	<p>请大家在报名表上认真填写问题，以便专家对提出的问题做详细的解答准备，请各参会代表准备好自己在工作中出现的问题，会务组将安排专家“点对点”交流，帮助寻找解决问题的方案或建议，会务组将为每个单位交流内容保密，日程以报到现场为准。</p>

## 会议门票

参会费：2600元/人

含培训费、会务费、资料费、证书费等。

