

Folyamattan

I.

Folyamatszintézis

Dr. Rév Endre  
egyetemi docens  
BME

2004

BME VEBMK KKFT

Az ábrákat a szerző készítette PostScript <sup>®</sup> forrásnyelven.  
A szedést a szerző végezte L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X forrásnyelven.

# Tartalomjegyzék

<b>1. A folyamatszintézis általában</b>	<b>4</b>
1.1. Hierarchikus folyamattervezés . . . . .	4
1.1.1. Szakaszos vagy folyamatos üzem . . . . .	6
1.1.2. Előzetes anyagmérleg . . . . .	6
1.1.3. Reaktor és visszaforgatás . . . . .	10
1.1.4. Szétválasztó rendszer . . . . .	11
1.1.5. Energiavisszanyerő rendszer . . . . .	14
1.2. Ellenőrző kérdések . . . . .	15
<b>2. Energiavisszanyerő rendszerek</b>	<b>17</b>
2.1. Hőcserélő hálózatok . . . . .	17
2.2. Maximális energia-visszanyerés ( <i>energy targeting</i> ) . . . . .	21
2.2.1. Hővonalak és összetett hővonalak . . . . .	21
2.2.2. CC-diagram és pinch . . . . .	23
2.2.3. Összetolt és össze-nem-tolt CC-diagramok . . . . .	26
2.2.4. Fővonal (GCC) diagram . . . . .	26
2.2.5. Hőkaszkád-számítás . . . . .	27
2.2.6. Pinch-szabályok . . . . .	32
2.3. Hőcserélő hálózatok kijelölése . . . . .	33
2.3.1. Minimális felület és "vertikális" hőátadás . . . . .	33
2.3.2. Hagyományos tervezés: gyors algoritmus . . . . .	36
2.3.3. Pinch-tervezés . . . . .	38
2.3.4. A maradék-feladat ellenőrzése és rejtett pinch . . . . .	42
2.4. Előtervezés ( <i>supertargeting</i> ) . . . . .	45
2.4.1. Minimális felület ( <i>area targeting</i> ) . . . . .	45
2.4.2. Összköltség becslése ( <i>supertargeting</i> ) . . . . .	47
2.4.3. Módosítás költségbecslése ( <i>retrofit targeting</i> ) . . . . .	48
2.5. A GCC és az integráció . . . . .	51
2.5.1. Redukált GCC és utility pinch . . . . .	51
2.5.2. Kapcsolat a hőerőművel . . . . .	53
2.5.3. Termikus műveletek a hőkaszkád mentén . . . . .	54
2.5.4. A GCC zsebei . . . . .	58
2.5.5. Hőszivattyúk és hűtőgépek integrálása . . . . .	59

2.6. Ellenőrző kérdések . . . . .	60
<b>3. Komponensviisszanyerő rendszerek</b>	<b>61</b>
3.1. Anyagcsere CC, koncentráció-kaszád és pinch . . . . .	61
3.2. Vízhasználó hálózatok . . . . .	67
3.2.1. Vízvonal, határvonal . . . . .	67
3.2.2. Összetett határvonal (LCC) és pinch . . . . .	69
3.2.3. A vízfogyasztó hálózat kijelölése . . . . .	70
3.2.4. Regenerálás és újrafelhasználás . . . . .	71
3.2.5. Regenerálás és visszaforgatás . . . . .	74
3.3. Elosztott vízkezelés . . . . .	75
3.3.1. A vízkezelő hálózatok szintézisének feladata . . . . .	75
3.3.2. Egyetlen kezelési eljárás esete . . . . .	77
3.3.3. Pinch szabályok . . . . .	80
3.4. Több szennyező esete . . . . .	81
3.5. Ellenőrző kérdések . . . . .	81
<b>4. Folyamatos rektifikáló rendszerek</b>	<b>83</b>
4.1. Szétválasztási sorrendek . . . . .	83
4.1.1. Heurisztikus szabályok és terhelési faktorok . . . . .	85
4.1.2. Sorrend kijelölése diszkrét dinamikus programozással . . . . .	87
4.2. Underwood egyenletei . . . . .	89
4.3. Reverzibilis rektifikálás . . . . .	94
4.3.1. A desztillálás termodinamikai határfoka . . . . .	94
4.3.2. Biner elegy reverzibilis desztillálása . . . . .	95
4.3.3. Többkomponensű elegy reverzibilis desztilláló rendszere . . . . .	97
4.4. Energiatakarékos rektifikáló rendszerek . . . . .	97
4.4.1. Több táp és több elvétel . . . . .	98
4.4.2. Lépcsős hőforgalmazás . . . . .	100
4.4.3. Termikus csatolás . . . . .	101
4.4.4. Energiaintegráció . . . . .	102
4.4.5. Hőszivattyús desztillálás . . . . .	105
4.5. Ellenőrző kérdések . . . . .	107
<b>5. Optimalizálás</b>	<b>109</b>
5.1. Lokális minimumok korlátlan tartományon . . . . .	111
5.2. Egyenlőség-típusú korlátok . . . . .	117
5.3. Egyenlőtlenség-típusú korlátok . . . . .	118
5.4. Dinamikus programozás . . . . .	120
5.5. Globális optimumkeresés . . . . .	123
5.6. Nemfolytonos változók . . . . .	124
<b>6. Javasolt irodalom</b>	<b>132</b>

# 1. fejezet

## A folyamatszintézis általában

A vegyi-, bio- és rokon ipari folyamattervezés komplex tevékenység, melynek célja vagy egy új technológia egészének kidolgozása, vagy meglévő (működő) technológia ill. üzem kiegészítése, feljavítása, vagy a technológia egyes részeinek tervezése. A tervezés mindig optimális tervezést jelent, aminek végső értelme *gazdasági* optimum, de mivel a gazdasági optimum nem mindig fogalmazható meg egyértelműen, ill. mivel abban különböző versengő részcélok, nehezen számszerűsíthető és nehezen megfogalmazható korlátozások érvényesülnek, a részfolyamatok tervezésekor gyakran csak részcélokat optimalizálunk, pl. költséget, kapacitást, minőséget, környezeti terhelést, stb.

A folyamattervezés matematikai értelemben egyszerűen optimalizálási probléma, általában folyamatos és nemfolyamatos döntési változókkal és bonyolult feltételi egyenletrendszerrel. A gyakorlatban ezt különféle szemléletekkel lehet megoldani. Beszélhetünk *heurisztikus tervezésről*, mely mérnöki tapasztalatok alapján hoz döntéseket a tervezés egyes lépéseiben. *Fokozatos fejlesztésről* beszélünk, ha egy akár heurisztikusan megalkotott, akár korábbi tervezés eredményeképpen adott technológiát apró lépésenként javítunk. Részfolyamatok tervezésénél alkalmazhatjuk a vegyes egészértékű programozás (MILP, MINLP, módszereit, melyhez speciális feladatmegfogalmazások társulnak.

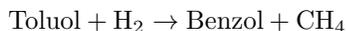
### 1.1. Hierarchikus folyamattervezés

A részletes költségbecslés, beleértve a tervezést, nagyon költséges tevékenység, ezen felül időigényes is. Tapasztalat szerint azonban a beruházási ötleteknek csak kb. 1 százalékát valósítják meg. Ezért nem érdemes minden ötletet és a megvalósítás minden változatát részletesen megtervezni és kiértékelni, hanem olyan döntések sorozatát szokás végrehajtani, melyek már a kezdeti szakaszban kiszűrik a nagyon gazdaságtalannak látszó megoldásokat, és csak az ígéreteseket juttatják el a részletes tervezés és költségbecslés szakaszába.

A folyamattervezés bonyolultságát és döntési szintjeit *Douglas* nyomán a benzol

⇒ toluol hidrodealkilezési folyamat példáján mutatjuk be.

A folyamat lényege a toluol hidrogénezése benzollá és metánná, magas hőmérsékleten és nyomáson. E körülmények között káros mellékreakcióként a benzol dimerizációja is számottevő mértékben játszódik le:



A reakció katalizátor nélkül, homogén gázfázisban játszódik le kb. 35 bar nyomáson, 620 C és 700 C közti hőmérsékleten. Ennél hidegebb közegben a reakció túl lassú, magasabb hőmérsékleten hidrokrakkolódás következik be. A reaktorbeli kokszolódás megakadályozásához 5:1 arányú hidrogénfőlslegre van szükség, a reaktor utáni kokszolódás megelőzésére a reaktorból távozó gázelegyet gyorsan 620 C alá kell hűteni.

A vegyészkutatók adatai szerint a megadott körülmények között a  $\zeta$  konverzió

$$\zeta = \frac{\text{A reaktorban átalakuló toluol molszám}}{\text{A reaktorba táplált toluol molszám}}$$

és az  $S$  szelektivitás

$$S = \frac{\text{Benzol molszám a reaktor kimenetén}}{\text{A reaktorban átalakuló toluol molszám}}$$

között  $\zeta < 0.97$  esetében a következő közelítő összefüggés állapítható meg:

$$S = 1 - \frac{0.0036}{(1 - \zeta)^{1.544}} \quad (1.1)$$

Gyártani szeretnénk 174 t/év benzolt, amihez rendelkezésre áll elegendő mennyiségű tiszta toluol légköri nyomáson és hőmérsékleten, valamint 38 bar nyomású, szobahőfokú, 5 % metán szennyezést tartalmazó hidrogén gáz.

Általában a következő döntési hierarchia vázolható föl:

1. Szakaszos vagy folyamatos üzem
2. Előzetes anyagmérleg
3. Reaktor és visszaforgatás
4. Szétválasztó rendszer általában
  - a. Gázvisszanyerő rendszer
  - b. Folyadékviszanyerő rendszer
5. Energiavisszanyerő hálózat
6. Egyéb segédrendszerek, szabályozás
7. elhelyezés, vezetékek, stb.

A műveleti tervezés nagyjából az első 6 pontot érinti.

### 1.1.1. Szakaszos vagy folyamatos üzem

A folyamatos üzemek a hét minden napján 24 órán keresztül, vagyis elvben megállítás nélkül működnek. Ezt a folyamatos üzemet éves karbantartási időszak, valamint véletlen leállások (üzemhibák) szakítják meg. Általában kb. évi 8400 üzemórával lehet számolni, vagyis a mintafeladatban adott termelési mennyiség kb. 20.7 kg/h, ill. kb. 265 mol/h termelt benzol áramot jelent, amihez megfelelő mennyiségű alapanyagot és segédanyagot folyamatosan táplálni, a melléktermékeket folyamatosan elvezetni kell.

Ezzel szemben a szakaszos üzem egyszerre egy-egy véges adagot dolgoz fel. Az üzem egészét vagy egyes részeit ennek megfelelően periodikusan leállítják, ürítik, tisztítják, töltik és újraindítják.

A folyamatos üzem fenntartásához állandó (folyamatos) szabályozásra van szükség. A szabályozórendszer kiépítése és fenntartása komoly költséggel jár. A hosszantartó (megszakítatlan) működés biztosításához a szerkezeti anyagoknak, szelepnek, stb. megbízhatóbban kell működniük, mint a szakaszos üzemben, ahol mód van a berendezések pihentetésére, és esetenként két adag feldolgozása között kisebb karbantartások elvégzésére. A folyamatos üzem az állandó szabályozás következtében alkalmasabb a termékminőség szűk tartományban tartására, de drágább, mint a szakaszos üzem.

Ezért folyamatos üzemet elsősorban akkor építünk, ha a termék éves összértéke elég nagy. Hagyományos vegyipari termékek esetében 50 t/év termelés fölött lehetőséggel folyamatos, és 5 t/év termelés alatt lehetőleg szakaszos üzemet tervezünk. Újabban azonban egészen kis mennyiségek is nagy értéket képviselnek, és az is előfordul, hogy a termék megfelelő minőségének fenntartásához mindenképpen szabályozni kell, ezért érdemes kisebb mennyiséget is folyamatos üzemben gyártani.

Másrészt vannak olyan műveletek, melyek eleve szakaszosak (pl. adszorpció vagy preparatív kromatográfia), és ezek alkalmazásakor nagy termelési érték esetében is szakaszos üzemet kell tervezni.

A Benzol  $\rightarrow$  Toluol mintapéldában ez az eset nem fordul elő, és a termelési mennyiség alapján folyamatos üzemet tervezünk.

### 1.1.2. Előzetes anyagmérleg

Talán fölösleges tűnik föl annak megemlítése, hogy a folyamatban gyártott (kibocsátott) anyagok értékesítéséből származó bevételnek meg kell haladnia a felhasznált anyagok értékét. Azonban egyrészt a technológiai ötleteknek kb. a felét e kezdeti értékelés alapján vetik el (!), másrészt korántsem egyértelmű a technológiai tervezés e korai szakaszában, hogy milyen anyagokat használunk föl, milyen áramokat bocsátunk ki, és ezek milyen értékűek.

A részletes tervezés előtt nem tudjuk, hogy milyen konverzióval és szelektivitással fog működni a folyamat. Nem tudjuk, hogy milyen anyagveszteségeket kell pótolni, milyen segédanyagokat kell esetleg felhasználni a szétválasztó rendszerben. A melléktermékek egy részét esetleg értékesíthetjük vagy égetéssel energiaköltségmentakarítást érhetünk el, de az is előfordulhat, hogy a melléktermék elhelyezése

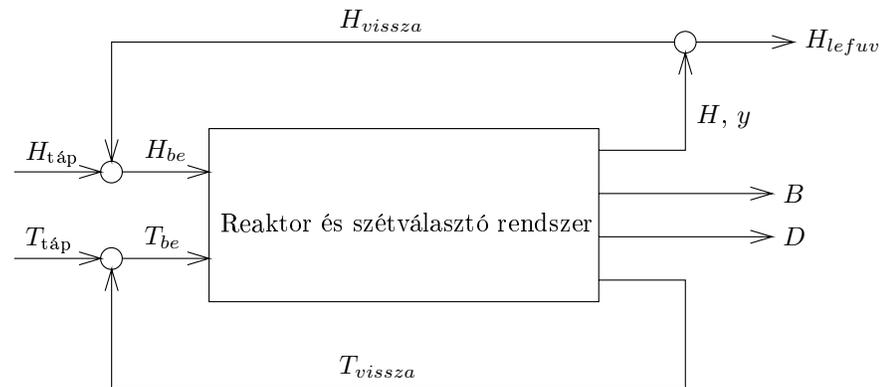
vagy megsemmisítése további költségekkel jár.

Esetünkben az alábbi adatokat sikerült beszerezni az értékeléshez:

Benzol:	89.04 \$/mol
Toluol:	6.4 \$/mol
Hidrogén táp:	1.14 \$/mol
Fűtőenergia:	3.79 \$/MJ
Fűtőérték:	
H <sub>2</sub> :	0.130 MJ/mol
CH <sub>4</sub> :	0.404 MJ/mol
Benzol:	1.49 MJ/mol
Toluol:	1.77 MJ/mol
Difenil:	2.83 MJ/mol

Ezen a szinten nem tudjuk ugyan a majdan tervezett konverziót, de teljes konverzióval sem szabad számolni, ha ismerjük a vegyész kutatók által rendelkezésünkre bocsátott konverzió–szelektivitás összefüggést. Azt is el kell döntenünk, hogy az el nem reagált alapanyagokat melléktermékeknek tekintjük, vagy visszaforgatjuk – vagy legalábbis az egyes alternatívákat külön–külön kell kiértékelnünk, különben hamis becslést kapunk a várható nyereségre.

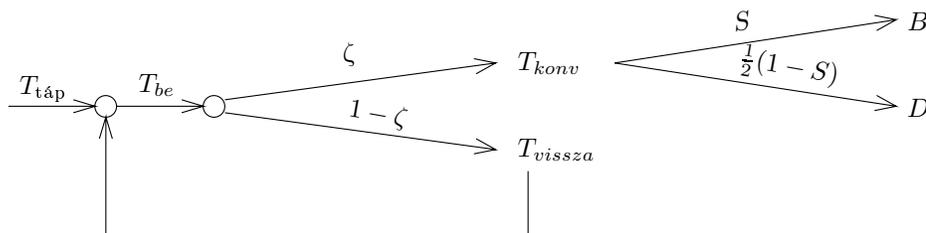
Előzetes becslést kell adnunk arra is, hogy a komponens-szétválasztó vagy -visszanyerő rendszer milyen anyagvesztéssel működhet. Általában e szinten föltehetjük a tökéletes szétválasztást (ami nagyon durva közelítés), de vannak esetek, melyeket kivételként kell kezelnünk. Ezek a *megcsapolás* és a *lefuvatás* esetei, amiket akkor alkalmazunk, ha egyes komponensek visszanyerése vagy kinyerése és eltávolítása bizonyosan nagyon drága. Ilyenkor az eltávolítandó komponensekkel értékes, visszaforgatandó komponenseket is eltávolítunk. Folyadékfázisú áram esetén megcsapolásról, gázfázisú áram esetén lefuvatásról beszélünk.



1.1. ábra. Bemenet–kimenet struktúra értékmérleg készítéséhez

Esetünkben az el nem reagált hidrogént, mint értékes nyersanyagot vissza szeretnénk forgatni, de a hidrogén és a metán szétválasztása nagyon drága lenne. Ha a kettőt együtt vezetjük vissza, akkor a folyamatba bekerült metán onnan nem távozik el, el sem reagál, vagyis a folyamatban feldúsul, végül megakadályozza a folyamat véghezvitelét. Ezért a rendszerből az el nem reagált gázok egy részét el kell vezetni (ez a lefuvatás), mégpedig a gáz összetételétől függően éppen annyit, amennyi metán a hidrogén-táppal a folyamatba bekerül, plusz amennyi a reakcióban keletkezik. Ennek meghatározásához föl kell tételoznünk valamilyen gáztermék összetételét, és ennek megfelelő állandósult állapotot kell számolnunk (**1.1 ábra**).

Az áramok kiszámításához a toluol fogyásának logikáját a **1.2 ábra** mutatja.



1.2. ábra. Toluol konverziója, a szelektivitás és a termékek

Ha  $B$  mol/h (tiszt) benzolt termelünk, akkor  $S$  szelektivitás mellett az elreagált toluol árama  $T_{konv} = B/S$ , a reaktorba kerülő toluol áram pedig  $T_{be} = T_{konv}/\zeta = B/(S\zeta)$ . A képződő difenil mennyisége  $D = \frac{1-S}{2}T_{konv} = \frac{1-S}{2S}B$ . A visszaforgatott (el nem reagált) toluol árama  $T_{vissza} = T_{be}(1-\zeta) = \frac{1-\zeta}{S\zeta}B$ , a szükséges toluol táp pedig  $T_{táp} = T_{be} - T_{vissza}$ .

A hidrogénből a reaktor bemenetén ötszörös fölöslegre van szükség, tehát a  $H_2$  komponensáram a reaktor bemenetén  $H_{2,be} = 5T_{be} = 5B/(S\zeta)$ . A konverzió és a szelektivitás között érvényes a (1.1) összefüggés, vagyis a konverzió függvényében számolhatunk. A rendszer egy további szabadsági foka a lefuvatott áram mennyisége, vagy a visszavezetett áram mennyisége, vagy a lefuvatott áram összetétele. Mivel ez utóbbi egyetlen mólórttel kifejezhető, és az 0 és 1 közötti érték, célszerűen ezt választjuk. Legyen a szétválasztó részrendszer kimenetén a  $H_2-CH_4$  gázelegyenben a  $H_2$  mólórtje  $y$ , a megfelelő  $CH_4$  mólórt  $1-y$ .

Annak alapján, hogy a lefuvatott gázban a metán komponens moláramja állandósult állapotban megegyezik a hidrogén tápban érkező plusz a reakcióban keletkező metán komponens molárammal, meghatározható az összes áram, és ebből kiszámítható a folyamat előzetes anyagmérlegéhez tartozó várható nyereség durva felső korlátja, amit a **1.1 táblázat** foglal össze millió \$/év-ben kifejezve. (A

1.1. táblázat. A haszon durva felső korlátja előzetes anyagmérlegből

$y =$	0.1	0.7	0.9
konverzió			
0.1	3.7	3.4	2.3
0.2	3.4	3.1	2.0
0.3	2.9	2.7	1.6
0.4	2.5	2.2	1.0
0.5	1.8	1.5	0.2
0.6	0.6	0.4	-1.0
0.7	-1.6	-1.8	-3.4

szelektivitás a (1.1) összefüggés szerint a konverzió függvénye.) A haszon ennél jóval kisebb, hiszen sem a beruházási költségeket, sem az egyébként elkerülhetetlen veszteségeket nem vettük figyelembe.

Nagy konverzió mellett a folyamat biztosan veszteséges. A táblázat szerint nulla (!) konverzió mellett működhet a folyamat a legelőnyösebben, de ez biztosan téves értelmezés. Kis konverzió mellett a később figyelembe veendő beruházási költségek és üzemeltetési költségek okoznak majd gondot. A lefuvatott áramot láthatóan célszerű kis hidrogéntartalom (kis hidrogénvesztés) mellett tartani, viszont ez ugyancsak a beruházási és üzemeltetési költségek növekedésével jár. Egyelőre nem tudjuk, hogy a várható költségek mellett is nyereséges lesz-e a technológia. A táblázat ezt nem zárja ki, így érdemes tovább lépni a reaktor és a visszaforgatás együttesének vizsgálatához.

A fenti számítások csak az általános bemenet-kimenet struktúra egyetlen változatának kiértékelését jelentik. Számos alternatívát kellene még megvizsgálni.

Így például a táppal bejövő szennyeződések a folyamat elején vagy végén, szakaszolható folyamat esetében közbenső terméknel is el lehet távolítani. A kis-mennyiségű szennyezést esetleg érdemes átengedni a reaktoron, mert utána úgymint szükség lesz komponens-szétválasztásra, vagy esetleg a szennyezővel azonos vagy hozzá hasonló melléktermék úgymint keletkezik a folyamatban. Ez ellen hat néhány egyéb megfontolás. Minél több anyagot engedünk át a készülékeken, annál nagyobb térfogatúnak kell lenniük, ami többletköltséggel jár. A szennyezés lehet katalizátorméreg, ebben az esetben valószínűleg a reaktor előtt kell eltávolítani, hacsak nem olcsóbb a katalizátor cseréje. Az is előfordulhat, hogy a szennyező komponens vagy a nyersanyagokkal, vagy valamelyik termékkel azeotrop elegyet képez, vagy egyéb ok miatt nehezen szétválasztható elegyet képez, ekkor a folyamat egy másik pontján kell elválasztani.

Előfordulhat, egyes el nem reagált nyersanyagokat (reagenseket) olcsóbb elengedni, mint visszaforgatni. Például ilyen anyag lehet a levegő (oxidációs reakcióban), vagy olcsóbb egy bizonyos szerves anyag megsemmisítése az egyéb káros melléktermékekkel együtt, mint azokból való kinyerése, vagy esetleg az elégetésével kapott

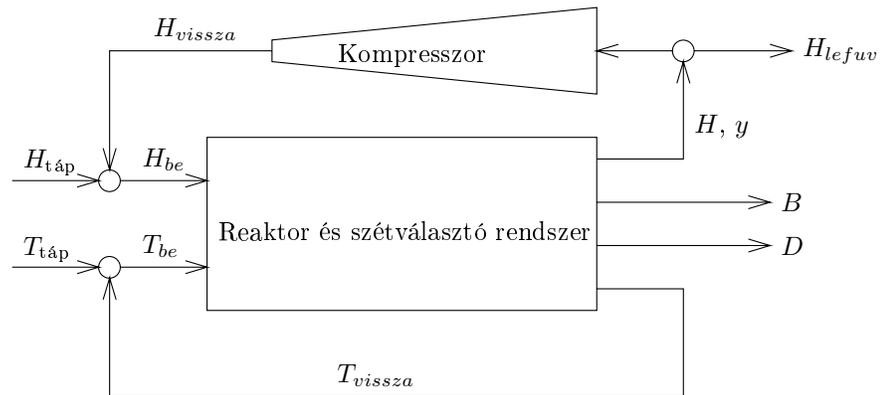
energia értékesebb, mint a kinyert anyag, ha a kinyerési költséget levonjuk.

A vizsgált változatban a difenilt, mint káros mellékterméket elégetjük, és fűtőértékét hasznosítjuk. Azonban a difenil reverzibilis reakcióban képződik, tehát esetleg érdemes kinyerni és visszavezetni. A difenil nem halmozódik fel az ilyen folyamatban, mert ha túl sok van belőle, akkor a reakció visszafelé játszódik le. Állandósult állapotban a reverzibilis reakció egyensúlyi koncentrációjának megfelelő difenil forog a folyamatban, a konverzió pedig a *folyamat egészére nézve* csaknem 100%-os lesz. (Azért "csaknem", mert a szétválasztó rendszerben is vannak veszteségek.)

Végül, a metán és a hidrogén is szétválsztható, tehát vizsgálni kellene annak gazdaságosságát a lefuvatással szemben.

### 1.1.3. Reaktor és visszaforgatás

A visszaforgatandó komponensekről külön döntést kell hozni. Példánkban ilyen döntés a difenil sorsa: az égéshőjét hasznosítjuk vagy reverzibilis reakcióban visszaforgatással egyensúlyba hozzuk. Ha ez a döntés megszületett, vagy ha egy ilyen döntési alternatívát vizsgálunk, akkor a visszaforgatási áramok számát az alkalmazott szétválasztó műveletek alapján határozhatjuk meg. Ha két visszaforgatandó komponens a többi komponensstől együtt is elválasztható, anélkül, hogy kettejüket egymástól is el kellene választani, akkor őket együtt vezetjük vissza. Ilyen eset például desztilláció alkalmazásakor két olyan komponens, melyek szomszédosak az illékonyági sorban. Ha közülük ékelődött egy termék komponens, akkor eggyel több visszavezetett árammal kell számolni.



1.3. ábra. Reaktor és visszaforgatás

A visszavezetett áramok növelik a reaktor méretét és befolyásolják (javítják vagy rontják) a konverziót és a szelektivitást. A visszavezetett áramok hőtartalma befolyásolja az exoterm vagy endoterm reaktor működését. A visszavezetés törté-

het a reaktor elé vagy közbelső pontba is. Komplex reakciómechanizmusok esetén több, különböző reaktortest bonyolultan kapcsolódhat, köztük hőközlés, elegyítés és komponensek szétválasztása is megvalósulhat. A visszaforgatott áramok mennyisége és összetétele, illetve a konverzió mértéke befolyásolja a reaktor költségeit. Például, minél kisebb a konverzió, annál több anyagot kell áthajtani a reaktoron azonos mennyiségű termék eléréséhez. Közel nulla konverzió mellett (ami a **1.1 táblázat** látszólag legkedvezőbb esete) közel végtelen nagy reaktor kellene.

A folyadékáramok visszaforgatásához általában szivattyúkat használunk, melyek költsége ezen a szinten nem számottevő. Figyelembe kell azonban venni a gázviszavezetés költségeit, mert az egyesítő – előmelegítő – reaktor – hűtő – szétválasztó rendszer sorban bizonyosan csökken a nyomás, és a gázt a folyamat elejére csak az eredeti nyomás visszaállításával lehet eljuttatni, amihez viszont nagy beruházási és üzemeltetési költségű kompresszorra van szükség (**1.3 ábra**). A kompresszió közel ideális gáz esetében könnyen számítható, reális gázok esetében állapotegyenletet kell használni.

A durván megtervezett reaktorok és kompresszorok költsége pl. *Guthrie* módszerével becsülhető. A beruházási költségeket valamilyen értékcsökkenési leírás módszerrel 1 évre vetítve, ahhoz az éves anyag- és energiaköltségeket hozzáadva a várható éves haszon újabb durva, de az előzőnél finomabb felső korlátjához jutunk, amit a **1.2 táblázat** foglal össze.

1.2. táblázat. A haszon durva felső korlátja visszaforgatás alapján

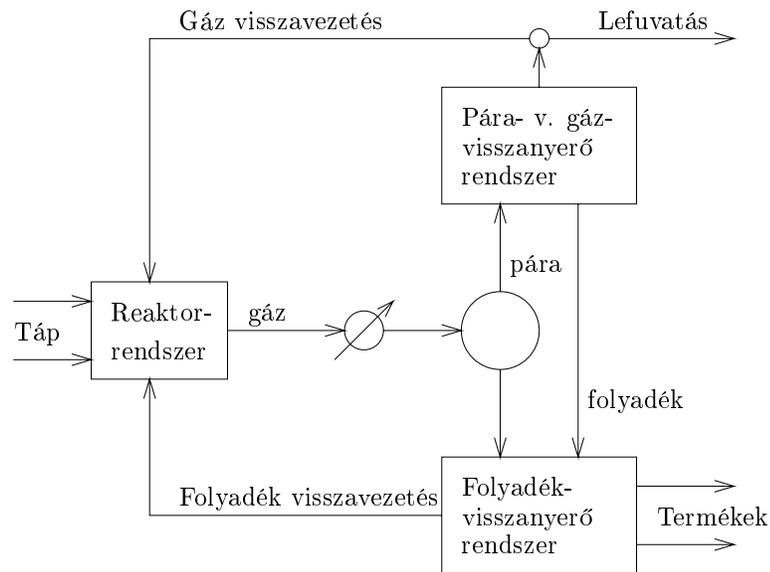
$y =$	0.2	0.4	0.6	0.8
konverzió				
0.1	0.97	0.95	0.30	-1.70
0.2	1.90	1.75	1.55	0.50
0.3	1.90	1.75	1.73	1.00
0.4	1.65	1.50	1.49	0.97
0.5	1.10	1.00	0.85	0.50
0.6	0.05	-0.02	-0.28	-0.47
0.7	-1.90	-1.91	-2.25	-2.29

A felső korlát adott lefuvatási összetétel mellett most már legalább minőségileg helyes, a konverzió függvényében maximumos görbét mutat. A maximum helye  $y$  növekedésével magasabb konverzióértékek felé tolódik el. Ez a táblázat még nem veszi figyelembe a szétválasztó rendszer és az energiaközlő rendszer költségeit.

#### 1.1.4. Szétválasztó rendszer

Szétválasztani csak azokat a komponenseket kell, melyeket máshová vezetünk. Ha pl. két melléktermék komponenst is égetésre szánunk, akkor azokat egymástól nem kell szétválasztani, hacsak a többi komponens kinyeréséhez nincs erre szükség.

Ugyanígy, a visszavezetett komponenseket sem kell szétválasztani.

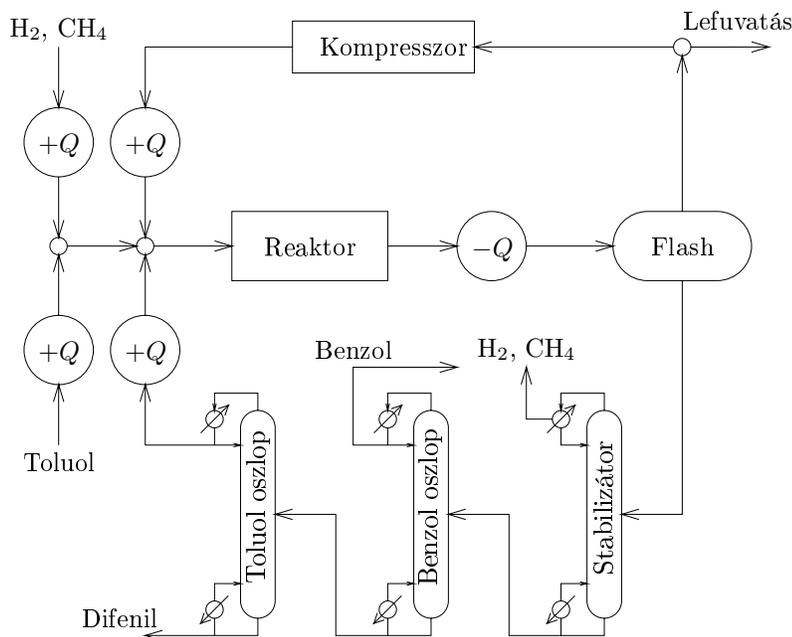


1.4. ábra. Szétválasztó rendszer általában

Ha a vizsgálatból (az egyszerűbb tárgylás kedvéért) kizárjuk a szilárd anyagokat, akkor a komponens-szétválasztó rendszer általában olyan alakú lehet, amit a **1.4 ábra** mutat. Szükség esetén (mint a toluol dealkilezési példában is) a forró gázokat először lehűtjük ("quench"), ekkor a gázok egy része folyadékként lecsapódik. Ezután célszerű a gáz- és folyadékfázist különválasztani egy egyszerű egyensúlyi készülékben ("flash"). A kapott gázt és folyadékot külön érdemes feldolgozni. Számos komponens-szétválasztó művelet ismert, például: átkristályosítás, abszorpció, adszorpció, bepárlás, centrifugálás (mint ülepítés), dekantálás, derítés, desztilláció, dialízis, elektroforézis, elektrolízis, extrakció, extraktív desztillálás, filmbepárlás, flotálás (úsztatás), fordított ozmózis, habflotálás, habfrakcionálás, hiperszűrés, ioncsere, iszapolás, kifagyasztás, kisózás, klatrálás, a kromatográfia nagyszámú változata, mágneses szétválasztás, membránszűrés, molekuláris desztilláció, ozmolízis, perforálás, perkolálás, pervaporálás, porlasztásos szárítás, rezolválás, szárítás, szél-fajtázás, szűrés, szublimáció, termodiffúzió, zónaolvasztás.

Folyadékok és gázok szétválasztásához ipari méretekben általában előnyben részesítjük a fázisegyensúlyi megoszláson alapuló szétválasztó eljárásokat, bár újabban a membránműveletek is egyre inkább elterjednek.

A gázkomponensek kinyerése legegyszerűbben az adott nyomáson frakcionáló cseppfolyósítással történhet, esetleg szelektív abszorpcióval. Mindkét esetben folyadékterméket is kapunk, amit tovább kell dolgozni. Ezért a szétválasztó rendszer ter-

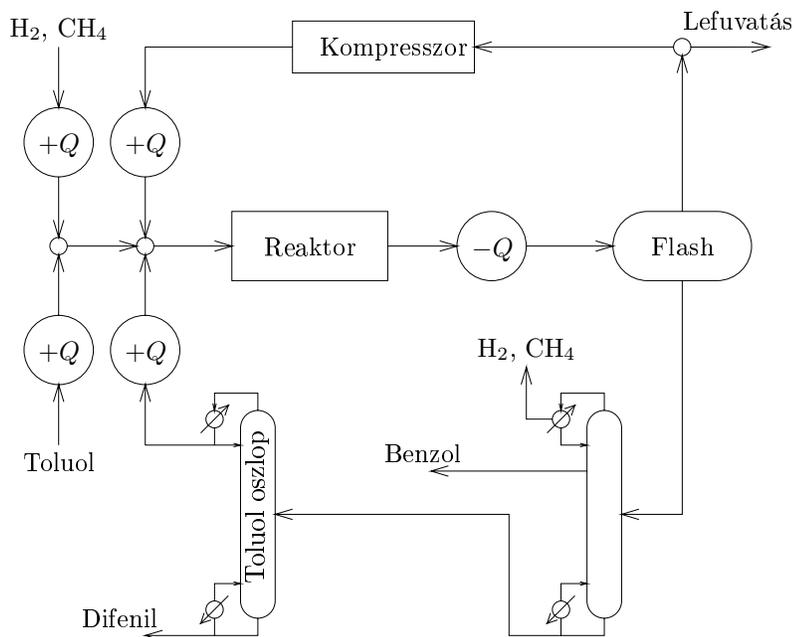


1.5. ábra. Hidrodealkilező rendszer, 1. változat

vezését célszerű a gázvisszanyerő résszel kezdeni.

A folyadékvisszanyerő részben a desztilláció és folyadékextrakció a legegyszerűbb, legismertebb, és gyakran a legolcsóbb megoldás. A toluol dealkilezésének folyamata *első közelítésben* a **1.5 ábra** szerinti lehet. A reagenseket előmelegítjük, a reaktor után gyors hőelvonást alkalmazunk. A flash egységben a komponensek szétválása messze nem elég éles, de a párába került benzolt és toluolt nem nyerjük vissza, gázvisszanyerő rendszert nem alkalmazunk, hanem lefuvatunk. A szokásos ún. *stabilizáló* oszlopban a folyadékfázisban oldott gázkomponensektől szabadulunk meg. Ezt követi legkönnyebb komponensként a benzol, mint főtermék kinyerése. A harmadik oszlop fejében visszanyerjük az el nem reagált toluolt, és fenéktermékként kapjuk a melléktermék difenilt.

A folyadékkomponensek tisztítása és visszavezetése többféle is lehet, vagyis a **1.5 ábrához** képest alternatív megoldásokat is ki kell értékelni. Lehetőségünk van többtermékes oszlopok alkalmazására, például a második két oszlop összevonásával, de még inkább az első két oszlop összevonásával (**1.6 ábra**), amire a könnyű gázok és a benzol illékonyága közti különbség lehetőséget biztosít. Lehetőség van, mint már említettük, a difenil visszavezetésére, mivel az reverzibilis reakcióban visszaalakul. Ekkor a difenil–toluol elegyet nem kell szétválasztani, és a harmadik oszlop elhagyható (**1.7 ábra**). A desztilláció, extrakció, abszorpció, kiforrálás, stb. műveleteinek közelítő modellezése és tervezése a vegyipari műveletek



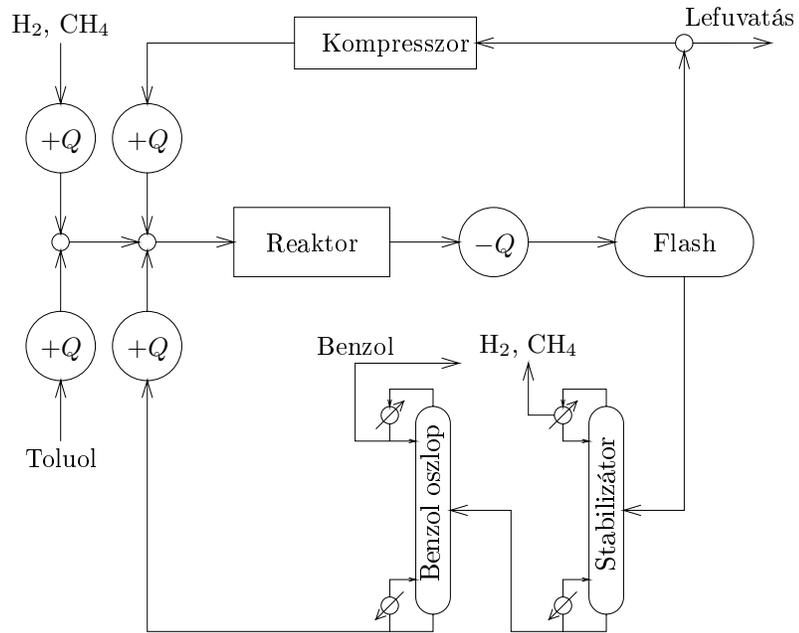
1.6. ábra. Hidrodealkilező rendszer, összevont oszlop változat

tárgykörébe tartozik. Az ilyen elemekből álló rendszerek tervezését, a desztilláció energiatakarékos megvalósítását, az azeotrop elegyek szétválasztó rendszereinek kijelölését a *III. Részben* tárgyaljuk.

### 1.1.5. Energiavisszanyerő rendszer

A toluol hidrodealkilezési példájában a végső (de még mindig egyszerűsített) technológiai folyamatára a **1.8 ábrához** hasonló lehet. A tápot ellenáramban a reakciótermékkel előmelegítjük és kemencében a reakció hőmérsékletére hevítjük. A desztilláló oszlopokat is a reakciótermékkel forraljuk ki, illetve integráljuk a toluol oszlop kondenzátorát a benzol oszlop kiforralásával. Az e folyamatábrának megfelelő folyamat állandósult állapotát kiszámítani, az egyes egységeket alkalmasan méretezni nem triviális feladat (ez a tulajdonképpeni flowsheeting). Ugyanezt a feladatot el kell végezni az összes ígéretes változatra is.

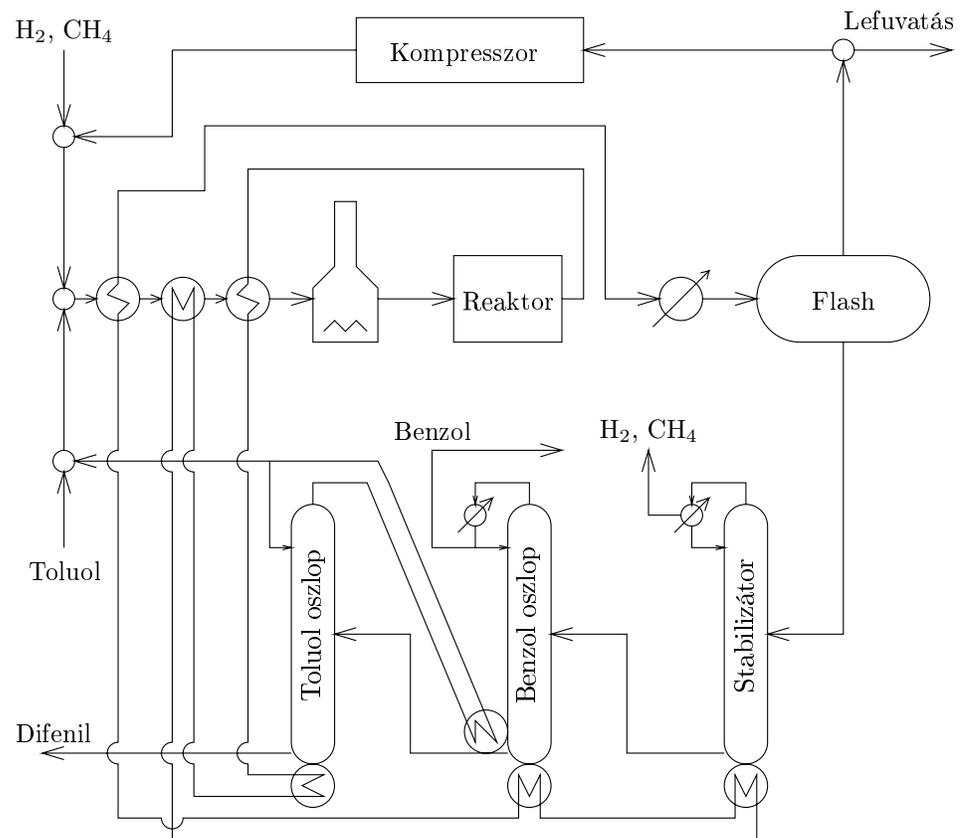
A hőcserélők, kemencék, hűtőrendszerek, hőszivattyúk, stb. a vegyipari műveletek tárgykörébe tartoznak. Az energiavisszanyerő rendszerek tervezését a *II. Részben* tárgyaljuk.



1.7. ábra. Hidrodealkilező rendszer, difenil–visszavezetéses változat

## 1.2. Ellenőrző kérdések

1. Milyen költségbecslő módszereket ismer? Melyik mikor alkalmazható?
2. Ismertesse a hierarchikus folyamattervezés döntési szintjeit! Jellemezze azokat!
3. Milyen összefüggés van a reaktorban lejátszódó folyamat konverziófoka és szelektivitása és a teljes folyamat konverziófoka (és kitermelés) között?
4. Miért alkalmazunk lefuvatást és/vagy megcsapolást?
5. Ismertesse a szétválasztó rendszer általános alakját! Milyen sorrendben tervezné részeit? Milyen szétválasztó eljárásokat ismer?



1.8. ábra. Hidrodealkilező rendszer, integrált változat

## 2. fejezet

# Energiavisszanyerő rendszerek

### 2.1. Hőcserélő hálózatok

Az energiavisszanyerő rendszerek folyamatszintézis-feladatai közül a hőcserélő hálózatok kijelölése fogalmazható meg a legegyszerűbben. Ennek is egyszerűsített változata az az eset, mikor kizárólag fázisváltozás nélküli hőcseréket tekintünk. A feladatot a következő adatokkal írjuk elő:

1. A felmelegítendő (azaz "hideg") áramok száma:  $N$
2. A lehítendő (azaz "meleg") áramok száma:  $M$
3. A hideg áramok adatai: ( $i = 1, 2, \dots, N$ )
  - (a) A kiindulási hőmérséklet:  $t_i^{\circ}$
  - (b) A célhőmérséklet:  $t_i^*$
  - (c) Hőkapacitás-áram:  $c_i$
4. A meleg áramok adatai: ( $j = 1, 2, \dots, M$ )
  - (a) A kiindulási hőmérséklet:  $T_j^{\circ}$
  - (b) A célhőmérséklet:  $T_j^*$
  - (c) Hőkapacitás-áram:  $C_j$

A *hőkapacitás-áram*, vagy röviden *hőkapacitás* az áram [mennyiség/idő] és a fajhő [energia/(mennyiség×hőfok)] szorzata, vagyis dimenziója [energia/(hőfok×idő)]. Ezek az adatok meghatározzák a kívánt hőforgalom nagyságát és áramonkénti eloszlását, valamint a spontán hőátadás lehetőségét az egyes áramok között az adott hőmérsékleteken. Az egyes áramok kívánt fűtési vagy hűtési igénye egy-egy szorzással számítható:  $(t_i^* - t_i^{\circ}) \times c_i$ , ill.  $(T_j^{\circ} - T_j^*) \times C_j$ .

5. A segédközegek hőtani adatai és megengedett elértéktelenedésük. Például a hűtővíz belépési hőfoka és maximális kilépési hőfoka (valamint fajhője), az alkalmazható fűtőgőzök nyomása, hőfoka és párolgáshője, stb.
6. A segédközegek és a munkaközegek (áramok) hőátadást befolyásoló tulajdonságai (viszkózitás, sűrűség és hővezetési tényező a hőmérséklet függvényében, lerakódási készség).
7. A hőátadó egységek (fűtők, hűtők, hőcserélők) típusa és a típus hatása a hőátbocsátásra (falvastagság, hővezetési tényező, módosító tényező a nem tiszta ellenáramú elrendezés figyelembe vételére pl. a járatszám és a terelőlemezek számától függően), valamint a várható nyomásesés függése ezekről.
8. A hőátadó egységek költsége a névleges hőátbocsátási felület függvényében.
9. A segédközegek fajlagos költsége (pl. Ft/m<sup>3</sup> hűtővíz).
10. A gazdasági környezet adatai, pl. az éves értékcsökkenési leírás mértéke vagy a kívánt megtérülési idő.

Az optimális hőcserélő hálózat kijelölése még így is nagyon bonyolult feladat, ezért legtöbbször az alábbi közelítő feltételezésekkel élünk:

1. A hőkapacitások konstansok vagy szakaszonként konstansok.
2. Az alkalmazott hőátadó egységeket ellenáramú hőcserélőként számítjuk, és az ellenáramtól való eltéréseket az átlagos hőmérséklet-különbség módosításával vesszük figyelembe. A hőteljesítmény számítására az alábbi általános összefüggést használjuk:

$$Q = kA\Delta T_{\text{át1}}$$

$$\Delta t_{\text{át1}} = f_{\text{mod}} \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

ahol a módosító tényező után álló kifejezés a jól ismert logaritmikus átlaghőfokkülönbség.  $\Delta T_1$  és  $\Delta T_2$  a hőcserélő egy-egy végén mért hőfokkülönbség, azaz a belépő meleg áram és a kilépő hideg áram hőfokkülönbsége és a kilépő meleg áram és a belépő hideg áram hőfokkülönbsége.

3. A  $k$  hőátbocsátási tényező részletes hidraulikai és transzport-számításai helyett vagy
  - (a) átlagos közelítő konstans  $k$  értéket használunk, vagy
  - (b) külön közelítő konstans  $k$  értékeket használunk egyes típus-kapcsolásokhoz (pl. külön érték a hűtőkre, külön a gőzfűtésre, külön a közepes sűrűségű szerves anyagok egymás közti hőcseréjére, stb.), vagy

(c) a hőátbocsátási tényezőt az alábbi egyszerűsített képlettel számítjuk:

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}$$

ahol az egyes áramokhoz rendelt közelítő konstans  $\alpha$  hőátadási tényezők értékében figyelembe vettük a fal és a lerakódások ellenállását is.

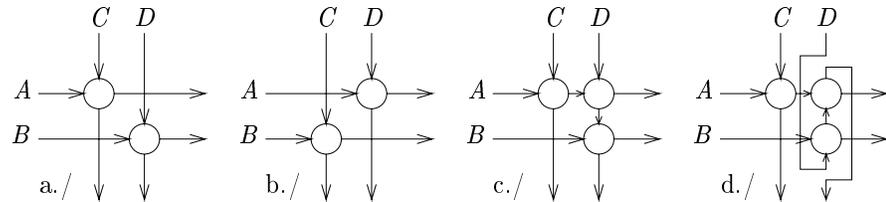
4. Az egyes hőátadó egységek beruházási költségét a következő képlettel becsüljük:

$$K = c + aA^b$$

ahol  $A$  a hőátbocsátó felület,  $a$ ,  $b$  és  $c$  konstansok. Általában  $c = 0$ , a  $b$  kitevő pedig 1-nél kisebb szám. Legtöbbször egy-egy melegáram-hidegáram csatolási ponthoz egyetlen ilyen hőátadó egységet tervezünk, és annak költségét vesz-szük figyelembe, de eljárhatunk úgy is, hogy az egyes csatolásokon szabvány hőcserélő egységekkel valósítjuk meg a kívánt hőcserét, és így egy-egy csatoláshoz több szabvány hőcserélő tartozhat. Ez utóbbi esetben a  $b$  kitevő értéke 1.

Tapasztalat szerint a hőcserélő hálózat gazdaságosságára döntő hatással van a kapcsolási rend. A kapcsolási rendet tekintve a következő változatokat kell figyelembe vennünk:

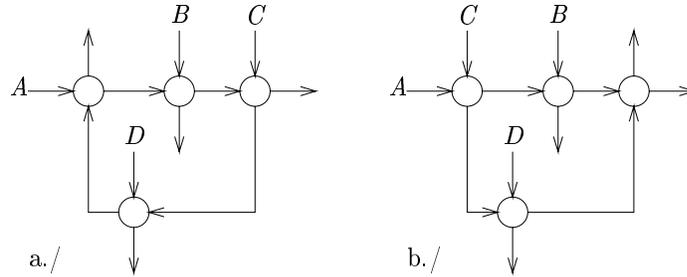
**Párosítások.** Ezek a legegyszerűbb alternatívák, amiket az **2.1 a./ és b./ ábra** illusztrál: Az  $A$  és  $B$  áramokat vagy a  $C$  és  $D$ , vagy a  $D$  és  $C$  áramokkal csatoljuk.



2.1. ábra. Párosítások és csatolási sorrendek

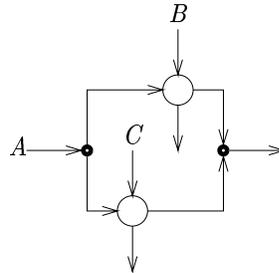
**Csatolási sorrendek.** Lehetőség van arra is, hogy egy-egy áramot több vagy kevesebb más típusú árammal csatoljunk. Ekkor a különböző csatolási sorrendek különböző hálózatokat jelölnek ki. Ilyen alternatívákat mutat a **2.1 c./ és d./ ábra**. A  $D$  áram az  $A$  és  $B$  áramokkal különböző sorrendekben találkozhat.

**Többszörös csatolások.** Ugyanaz a hidegáram-melegáram pár egy hálózatban többször is találkozhat. Ennek természetesen csak akkor van értelme, ha más csatolások ékelődnek közbe. Ilyen esetet mutat a **2.2 ábra**, két különböző csatolási sorrenddel.



2.2. ábra. Párosítások és csatolási sorrendek

**Elágaztatások.** Egy-egy áramot elágaztatva több kisebb kapacitású, de ugyanolyan anyagi tulajdonságú, kiindulási hőfokú és ugyanolyan előírt célhőmérsékletű áramot avagy *ágot* kapunk. Az egyes ágak különböző áramokkal csatolhatók. Elágazó rendszert mutat a **2.3 ábra**. Az ágak tovább ágaztathatók és tetszés szerint egyesíthetők is. Az elvben figyelembe veendő kapcsolási rendek számáról képet kaphatunk, ha



2.3. ábra. Hálózat elágazó árammal

felmérjük az adott  $N$  és  $M$  áramok és egy-egy fűtő- és hűtőközeg közötti, **többszörös csatolást és elágazást nem tartalmazó** kapcsolási rendek számát. Ez viszonylag egyszerű kombinatorikai feladat, ha feltesszük, hogy a hőátadó egységek minimális száma:

$$MIN = (N + 1) + (M + 1) - 1$$

Ez jó közelítő kváziminimum, amit ugyancsak kombinatorikai módon lehet igazolni. A különböző lehetséges csatolások száma viszont:

$$MAX = (N + 1)(M + 1) - 1$$

mivel a segédközegek között nem tervezünk hőcserét. A lehetséges kombinációk száma:

$$\binom{MAX}{MIN} = \frac{MAX!}{MIN!(MAX - MIN)!}$$

Ez a kifejezés már mérsékelt számú műveleti áram esetén is igen nagy értéket ad. A többszörös csatolásokkal a kapcsolási rendek száma sokszorosára nő. Mivel pedig a lehetséges elágaztatások és egyesítések száma gyakorlatilag végtelen, a *lehetséges kapcsolási rendek száma általában csillagászati szám*. Ezek közül kell valamilyen módszerrel kiválasztani az optimális vagy közel optimális kapcsolási rendeket.

## 2.2. Maximális energia-visszanyerés (*energy targeting*)

Tapasztalat szerint a minimális energiaköltségű, illetve maximális energiavisszanyerést megvalósító hálózatok gazdasági szempontból is *közel* optimálisak. Ezért is, de a műszaki-termodinamikai korlátok felderítése céljából is érdemes megkeresni az energiavisszanyerés maximumát.

A másik véglet, vagyis a nulla energiavisszanyerés könnyen számítható, ugyanis ekkor minden fűtési igényt külső fűtéssel, minden hűtési igényt külső hűtéssel elégítünk ki:

$$H_0 = \sum_{j=1}^M (T_j^o - T_j^*) C_j$$

$$F_0 = \sum_{i=1}^N (t^* - t_i^o) c_i$$

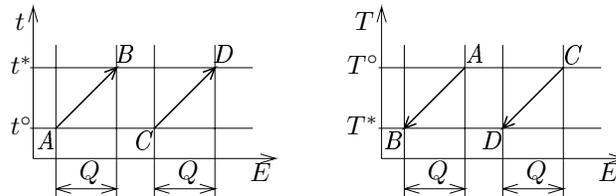
Alkalmas hőfokviszonyok esetén a maximális energiavisszanyerés a két érték minimuma lenne. Ha  $F_0 < H_0$ , akkor a maximális visszanyerés  $F_0$ , a minimális hűtés  $H_0 - F_0$ , fűtésre pedig nem lenne szükség. Ellenkező esetben a fűtés és a hűtés felcserélésével szimmetrikus tükörképet kapunk.

A maximális energiavisszanyerés azért kevesebb ennél, mert az adott hőfokok korlátozzák a spontán energiaátadást a meleg és a hideg áramok között. Ezeket a korlátokat veszi figyelembe az alább tárgyalt *pinch technika* az aktuális maximum meghatározásához.

### 2.2.1. Hővonalak és összetett hővonalak

Az egyes hideg áramok fűtési igényeit a pinch technika céljaira legegyszerűbben  $t - E$  diagramon ábrázolhatjuk ( $E$ : energia). Ilyen diagramot mutat a **2.4 ábra**.

A  $t$ -tengelyen az előírt  $t_i^\circ$  kiindulási és  $t_i^*$  célhőmérsékletet tüntettük fel. Az  $E$ -tengelyen  $Q$ -val jelöltük az áram fűtési igényét. A vizsgált hideg áram összetartozó hőmérséklet- és energiaváltozását egy irányított vonallal jelölhetjük, jelen esetben ez éppen az  $A$  és  $B$  pontokat összekötő vonal. Mivel az energia nullpontja definíció kérdése, illetve tetszőleges hőmérséklettől számíthatjuk a melegedés által okozott energiaváltozást, az  $A$  (vagy a  $B$ ) pontot tetszőleges energiaérték fölé tehetjük. Úgyis csak az  $A$  és  $B$  közti entalpiaváltozás (vagyis  $Q$ ) az, amit ábrázolni kívánunk. Az  $AB$  vonal egyenes, mert a hőkapacitás konstans (független a hőmérséklettől). A



2.4. ábra. Hálózat elágazó árammal

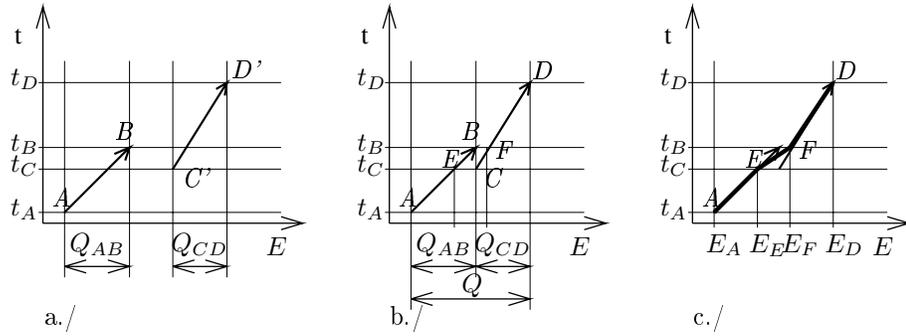
vonal meredeksége a hőkapacitás reciprokával arányos. Általános esetben a fajhő, és így a kapacitás nem konstans, ekkor az áramot görbe vonal jellemzi. Ennek tárgyalásától azonban itt eltekinthetünk.

Mivel csak a  $Q$  szakasz hossza az érdekes, ugyanazt az áramot különböző kezdőpontokból felmérhetjük, csak a hőfokoknak és a lefedett szakasz  $Q$  hosszának kell megegyezőnek lenniük. A **2.4 ábrán** a  $CD$  vonal ugyanazt az áramot, vagy pedig ugyanolyan adatokkal jellemzett áramot ábrázol, mint az  $AB$  vonal.

A meleg áramokat ugyanígy ábrázolhatjuk, csak a vonal irányítása ellenkező. A **2.4 ábrán** az  $AB$  és a  $CD$  vonalak ugyanazt a meleg áramot ábrázolják.

Az összes ( $N$ ) hideg áram együttes fűtési igényét egy *összetett áramot jellemző vonallal*, az ún. **összetett vonallal** (angol: *composite curve*) ábrázolhatjuk a hőfokok függvényében. Az összetett hideg áram vonalának meredeksége minden hőfokon megegyezik az adott hőfokon jelen levő hideg áramok hőkapacitásainak összegével.

Az összetett vonal szerkesztésének lépéseit a **2.5 ábrán** követhetjük nyomon. A **2.5 a./ ábrán** két hideg áramot mutatunk. Ezek az  $AB$  és a  $C'D'$  vonalakkal jellemzett áramok. Az áramok a  $[t_C, t_B]$  hőfokintervallumban átfednek. Ez alatt az összetett áram meredeksége szükségszerűen megegyezik az  $AB$  áram meredekségével, fölötte pedig a  $CD$  áram meredekségével. Az átfedő hőfokintervallumban kell új meredekségű vonalat szerkeszteni. Első lépésként a két áramot az energiatengely mentén úgy toljuk el, hogy a lefedett ( $Q$ -) szakaszok egymás mellé kerüljenek. Ezt mutatja a **2.5 b./ ábra**. Az eltolás után kialakul az összetett áram közös, megszakítatlan  $Q$  vetülete ( $E_A - E_D$ ) aminek hossza természetesen azonos az egyes áramok  $Q$ -hosszainak összegével. Így az összetett áram kezdőpontja az  $E_A$  kezdőenergia és a legkisebb,  $t_A$  hőmérséklet koordinátapárral jellemzett



2.5. ábra. Összetett vonal szerkesztése

A pont, végpontja pedig az  $E_D$  végenergia és a legmagasabb,  $t_D$  hőmérséklet koordinátapárral jellemzett  $D$  pont. Az összetett áram vonala  $A$ -ból  $D$ -be mutat, de nem egyenes, hanem tört vonal mentén.

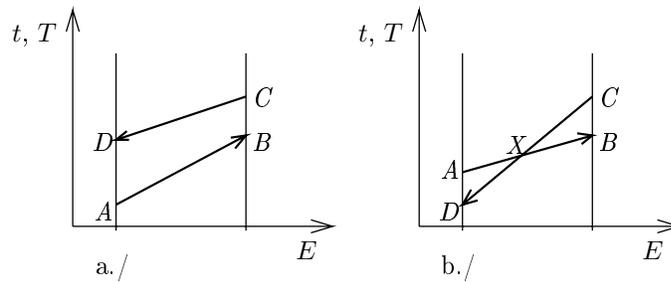
Második lépésként kijelöljük azokat a hőmérséklet- és energia-intervallumokat, melyekhez a törtvonal egyenes szakaszai tartoznak. Ezeket a rögzített hőfokok jelölik ki. Így kapjuk a **2.5 b./ ábrán** az  $E$  és az  $F$  pontokat, és a **2.5 c./ ábrán** a megfelelő  $E_E$  és  $E_F$  vetületeket.

A következő lépésben intervallumonként megszerkesztjük megfelelő meredekségű vonalat. Ez nagyon egyszerű: adott a lefedett hossz ( $Q$ ), illetve a megfelelő  $E$ -szakasz, és adott a két hőmérséklet. A kapott téglalapba húzott átló lehet csak a kívánt meredekségű egyenes vonal.

A  $[t_A, t_C]$  alsó intervallumban ez az  $AE$  vonal, ami az eredeti  $AB$  vonal mentén fut, a  $[t_B, t_D]$  felső intervallumban pedig az  $FD$  vonal, ami az eredeti  $CA$  vonal mentén fut. Az átfedő  $[t_C, t_B]$  intervallumban az  $EF$  átlót húzzuk meg. Ennek meredeksége szükségszerűen megfelel a két hőkapacitás összegének, különben a két hőfok között nem fedné le az  $[E_E, E_F]$  energiaszakaszt, azaz nem teljesülne az energiamérleg. Végül az egyes külön áramok eredeti vonalait elhagyva kapjuk az összetett áram vonalát, ami az  $A E F D$  vonal. Ugyanígy szerkeszthető meg a meleg áramok összetett vonala is.

### 2.2.2. CC–diagram és pinch

Egy-egy meleg és hideg áram vagy áram-szakasz közti hőcserét, azaz a megfelelő áramok vagy áram-szakaszok együttes hőfokváltozását is  $t$ – $E$  diagramon ábrázolhatjuk. Ellenáramú hőcserét ábrázol a **2.6 a./ ábra** két vonala. A lefedett  $E$ -szakaszok hossza is azonos, a két vonalat egymás alá (fölé) rajzoljuk. Az azonos lefedett  $E$ -szakasz biztosítja a hőcsere energiamérlegét. A II. Főtétele teljesülését az biztosítja, hogy a meleg áram minden ponton melegebb a hideg áramnál. A



2.6. ábra. Lehetséges és lehetetlen ellenáramú hőcsere vonalai

**2.6 b./ ábra** irreális hőcsere-t mutat. A hőmérséklet teljesül, de az  $X$  ponttól balra a meleg áram hidegebb a hideg áramnál, így a hőátadás a kívánt irányban nem valósítható meg.

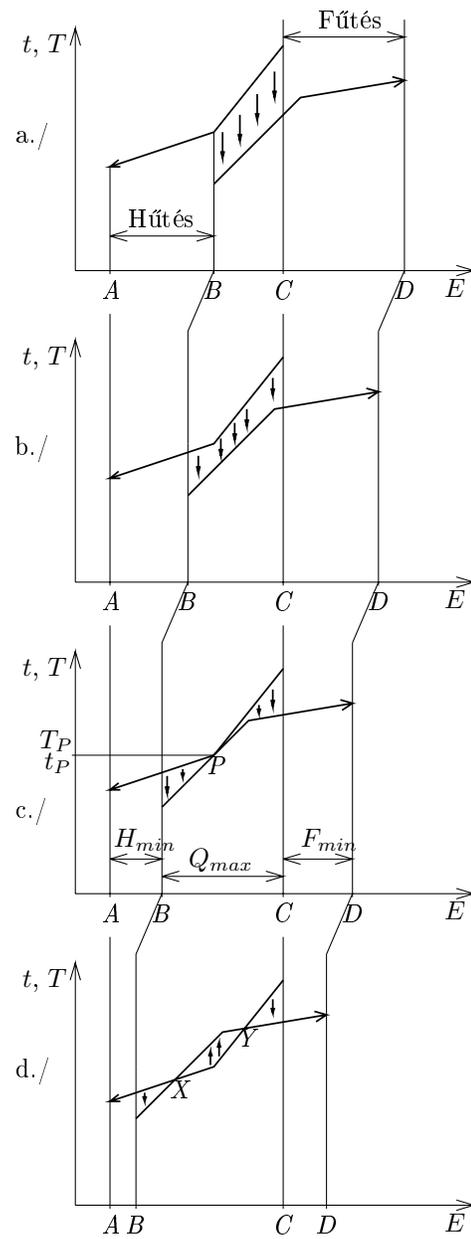
Mivel az összetett vonalakat az egyes hőfokokhoz szerkesztettük, ugyanez az elv alkalmazható a meleg és a hideg összetett vonalak egymáshoz illesztésére is. A megfelelően átfedő szakaszok energia-visszanyerésre alkalmas szakaszokat jelentenek.

A **2.7 a./ ábrán** a  $CA$  meleg és  $BD$  hideg összetett áramok  $E$ -átfedő  $BC$  szakasza felel meg az energia-visszanyerésnek. A "fedetlen"  $CD$  szakasz a hideg áramok maradék fűtési igényének felel meg. Az ugyancsak pár nélküli  $BA$  szakasz viszont a meleg áramok maradék hűtési igényének felel meg. Az ilyen diagramot (a vetítő vonalakkal vagy anélkül) az *összetett vonalak diagramjának*, eredeti angol nevén *Composite Curve (CC) -diagramnak* nevezzük.

Ha a két összetett vonalat közelebb toljuk egymáshoz (amire lehetőségünk van, mert az egyes meleg vagy hideg szakaszok  $Q$  hossza nem változik), akkor az átfedő szakasz hossza megnő, a maradék szakaszok hossza megrövidül (**2.7 b./ ábra**). Ez az energiavisszanyerés növekedésének és a szükséges fűtés és hűtés csökkenésének felel meg. Hogy milyen hőcsere-elő rendszer képes ezt megvalósítani, arról még nincs tudomásunk, de a kívánt energiavisszanyerés biztosan megvalósítható, mert a feltételek teljesülnek.

Ha a két összetett vonalat még tovább toljuk egymás felé, akkor azok metszik egymást, ahogy az a **2.7 d./ ábrán** látható. Az  $XY$  szakaszon a meleg áramok a hideg áramok alá kerülnek, vagyis az így kijelölt energia-visszanyerés irreális, megvalósíthatatlan.

Az energia-visszanyerés maximumát az a helyzet jelöli ki, melyben a két összetett áram éppen érinti, de nem metszi egymást. Ezt a helyzetet mutatja a **2.7 c./ ábra**. A  $P$  érintési pontot nevezzük **pinch pontnak**, a megfelelő hőmérséklet a *pinch hőfok*. Az ábráról leolvasható az energiavisszanyerés elméleti maximuma ( $Q_{max}$ ), valamint a szükséges külső fűtés és hűtés elméleti minimuma ( $F_{min}$  és  $H_{min}$ ).

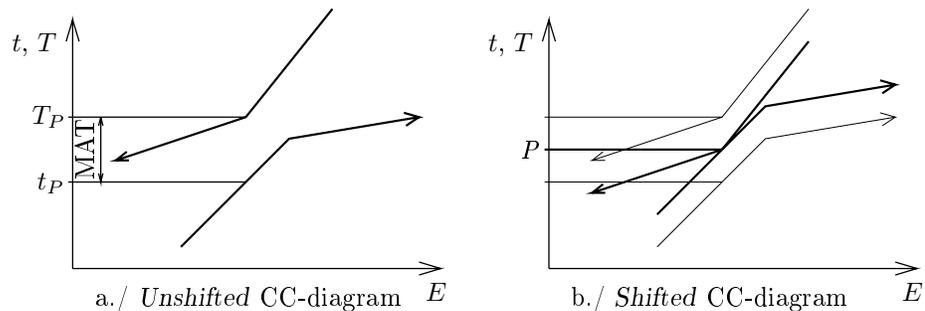


2.7. ábra. CC-diagram és pinch

### 2.2.3. Összetolt és össze–nem–tolt CC–diagramok

A 2.7 c./ ábra energia-visszanyerése is irreális, mert a hőközléshez pozitív hőfokkülönbség kell. Nem alkalmazható tetszőlegesen kicsiny hajtóerő a tervezésnél, mert a megvalósított rendszerekben előre nem számítható ellenállások csökkentik a hőátadást. A gyakorlatban a tervezéshez előírnak egy rögzített, véges, minimális hőfokkülönbséget, melyet a továbbiakban MAT-tal (angol: *minimum approach temperature*) jelölünk.

A pinch-helyzetű CC-diagramot ekkor a 2.8 a./ ábra mutatja. A pinch ebben az esetben egy pontpár, vagyis egy közös energia-értékhez tartozó hőfokpár. Ekkor beszélhetünk külön meleg és hideg pinch-hőmérsékletről. Ennek még jelentősége lesz a későbbiekben. Részben technikai okok miatt, részben a következő alfe-



2.8. ábra. CC-diagram és pinch

jezetben tárgyalt GCC megszerkeszthetősége céljából szokás a szerkesztést úgy egyszerűsíteni, hogy a meleg és hideg áramok hőfokait MAT-tal közelítjük egymáshoz. Például a meleg áramok hőfokait a MAT felével csökkentjük, a hideg áramok hőfokait a MAT felével növeljük, azaz az áramokat a  $t$ -tengely mentén toljuk egymáshoz közelebb, a 2.8 b./ ábra szerint. Ez csak technikai módosítás, valódi áramok esetén az áramok tulajdonságait (pl. fajhő) az eredeti hőmérsékleten kell számítani. Az így kapott diagramot "összetolt", azaz (angol:) *shifted CC*-diagramnak hívják. A *shifted CC* esetén a pinch valódi összeérést jelent, mintha termodinamikai, elméleti szélsőértéket határoznánk meg.

### 2.2.4. Fővonal (GCC) diagram

A pinch technika általánosabb alkalmazásainál nagy szolgálatot tesz a CC alapján értelmezhető és megszerkeszthető GCC, azaz *Grand Composite Curve*, mely kifejezés magyar megfelelője a "Fővonal".

A GCC egy olyan  $t$ - $E$  diagram, mely egyenértékű a *shifted CC*-vel, s belőle származtatható. Minden hőmérsékleten leolvassuk a hideg és a meleg összetett

vonala adott pontjához tartozó energia-értéket, s ezek különbségét mérjük föl a  $Q$ -tengelyre. Úgy is felfoghatjuk, hogy minden hőmérsékleten kiszámítjuk az aktuális meleg  $\Rightarrow$  hideg hőforgalmat.

Hogy megkönnyítsük a következő alfejezetben tárgyalt *hőkaszkád-számítás* megértését, szemléltetésül egy olyan *shifted* CC-ből indulunk ki, melynek magas hőmérsékletű végpontjait azonos energiaponthoz illesztettük. Azért tettük ezt, mert esetleg az összegzett hőkínálat nagyobb az összegzett igénynél, s így szerencsés esetben nem kell külső fűtést alkalmazni. A jelen esetben, amit a **2.9 a./-CC ábra** mutat, nem vagyunk ilyen szerencsések, a külső fűtés mellőzése irreális. A **2.9 a./-GCC ábra** mutatja a megfelelő GCC-t.

Mivel a jobboldalakat illesztettük, a GCC-n az  $A$  pont a  $Q = 0$  helyen van. Az  $F$  pontban  $Q$  pozitív, ami reális hőcserét jelent. A két CC metszéspontjának a nulla hőcsere felel meg. A felső metszésponttól az alsó metszéspontig a meleg áramok összetett vonala a hideg alatt fut, ennek megfelelően  $Q$  negatív. Ez a negativitás az, ami irreális. A negatív hőátadást csak úgy értelmezhetjük, hogy a szokásossal ellenkező irányú hőátadás történik. Az (irreális) nulla fűtéshez tartozó hűtést az energiamérleg egyértelműen meghatározza. Ezt a CC-diagramon a  $D$  és a  $C$  pontok energiáinak különbségeként, a GCC-diagramon viszont egyszerűen a  $D$  ponthoz tartozó  $Q$  értéként olvashatjuk le.

A **2.9 c./-CC és c./-GCC ábrák** a reális energiavisszanyerést mutatják a *shifted* CC és a hozzátartozó GCC diagramon. A GCC alakja nem változott, az egész vonal annyival tolódott jobbra, amennyivel a két összetett vonalat széttoltuk. Az aktuális fűtés és az aktuális hűtés az  $A$  és a  $D$  pontoknál olvasható le a  $t$ -tengelytől mért távolságként.

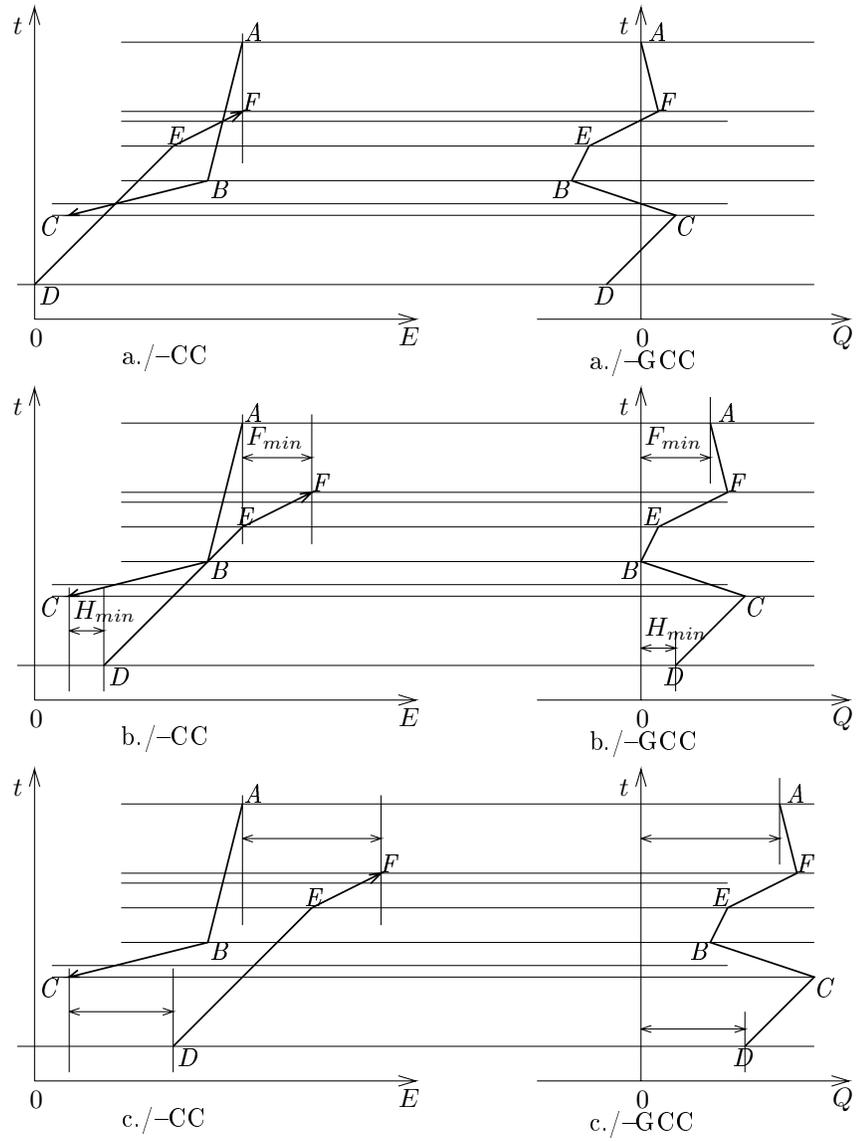
A **2.9 b./-CC és b./-GCC ábrák** mutatják a maximális energiavisszanyerést, azaz a minimális külső energiaforgalom esetét. A CC-beli *pinch* pontnak a GCC esetében a  $t$ -tengely érintése felel meg. Az érintési pont itt a  $B$  pont. Ha az összetett görbéket közelebb, azaz a GCC-t balra tolnánk, akkor megjelenne a negatív hőközlés, ami irreális. Ha az összetett görbéket széttolnánk, azaz a GCC-t jobbra tolnánk, akkor fölös fűtést és hűtést kapnánk.

A hőmérleg következtében a fölös fűtés mennyisége mindig azonos a fölös hűtés mennyiségével!

### 2.2.5. Hőkaszkád-számítás

A hőkaszkád számítás a pinch pont és a minimális külső hőforgalom numerikus meghatározása. Részletes magyarázat helyett konkrét példán mutatjuk be a hőkaszkád számítását (**2.1. táblázat**).

Első lépésként *shifted* adatokat számítunk, vagyis az áramok hőfokait MAT-tal közelítjük egymáshoz. Ha fele-fele arányban tesszük ezt a meleg és a hideg áramokkal, akkor a meleg áramok hőfokait 10 fokkal csökkentjük, a hidegeket ugyanannyival növeljük. Így kapjuk a **2.2. táblázat** adatait. Ezután meghatározzuk a jellemző hőfokokat (vagyis a *shifted* CC és a GCC töréspontjainak hőfokait). Ezek csökkenő sorrendben: 140, 135, 110, 80, 50, 35, 30. Az intervallumok határ-



2.9. ábra. CC-diagram és pinch

2.1. táblázat. Mintapélda adatai

Áram	Kapacitás	Be hőfok	Célhőfok
	kW/C	C	C
A	2	150	60
B	8	90	60
C	2.5	20	125
D	3	25	100
MAT=20 C			

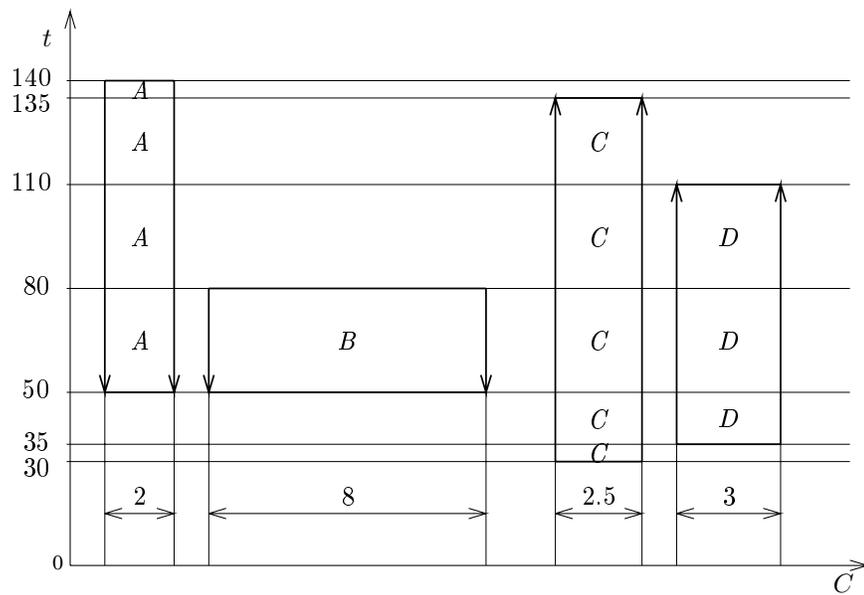
2.2. táblázat. Mintapélda összetolt adatai

Áram	Kapacitás	Be hőfok	Célhőfok
	kW/C	C	C
A	2	140	50
B	8	80	50
C	2.5	30	135
D	3	35	110
MAT=0 C			

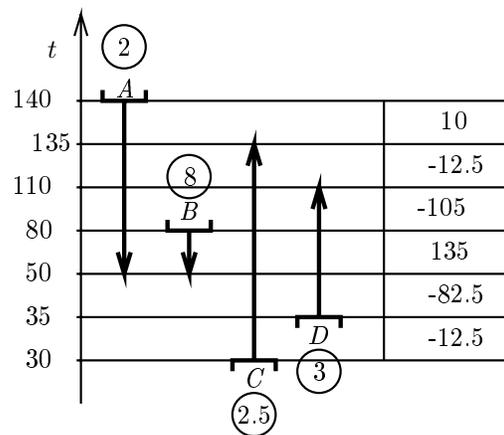
pontjainak ismeretében meghatározhatjuk az egyes hőfok-intervallumokban jelenlevő áramokat, és kiszámíthatjuk az intervallum hőkínálatát. Ennek módját a **2.10. ábra** magyarázza, és a **2.11. ábra** vázolata segíti.

A **2.10. ábra** egy ún. *hőtartalom diagram*, melynek egyik tengelyén az áramok hőmérséklete szerepel, a másik tengely mentén pedig az áramok hőkapacitását ábrázoljuk intervallum-skálán. Az egyes áramokat olyan idomok (konstans hőkapacitás esetén téglalapok) ábrázolják, melyek szélessége arányos a hőkapacitással. Ennek következtében az idomok területe éppen a kívánt áram hőkínálatát vagy fűtési igényét képviseli. Bármely meleg áram terület hozzárendelhető ugyanolyan nagyságú hideg áram területhez, és ha a hideg áram hőfokai kisebbek a meleg áram megfelelő hőfokainál, akkor ez az összerendelés egy adott hőteltjesítményű hőcserének felel meg.

Ha a hőtartalom diagramon a "shifted" hőmérsékletek szerepelnek, akkor a hőcsere feltétele formálisan nem a pozitív, hanem a nemnegatív hőfokkülönbség. Az azonos "shifted" hőfokú meleg és hideg áram között éppen megvan a kívánt minimális hőfokkülönbség (MAT), így azok egymáshoz rendelhetők. Az azonos hőfok-intervallumban szereplő meleg és hideg áramok között minden hőfokon (minden végtelenül kicsiny intervallumban) teljesül ez a feltétel. Ezért az azonos intervallumba tartozó meleg és hideg áramok közti maximális hőcserét megkapjuk, ha a két idomot maximálisan fedésbe hozzuk. A le nem fedett meleg áram terület az intervallum fölös (összegzett) hőkínálata. Ha a hideg áramból (hideg áramokból) marad le nem fedett terület, akkor az fűtési igény, avagy negatív hőkínálat.



2.10. ábra. Hőtartalom diagram



2.11. ábra. Hőkaskád-számítás - 1.

A **2.11. ábra** vázlatán berajzoltuk az áramok által befutott hőfoktartományokat. Bár a függőleges "tengely" nem arányos változású, azonnal látható, hogy az egyes intervallumokban mely áramok vannak jelen.

Az összegzett kínálatot úgy számítjuk, hogy (1) összegezzük az áramok kapacitásait (a meleg áramok kapacitásait pozitívnak, a hidegeket negatívnak véve), és (2) az így kapott algebrai összeget megszorozzuk az intervallum hosszával. Ekkor a **2.11. ábra** jobb oldalán feltüntetett számokat kapjuk.

Ha az egyes intervallumok maximális energiavisszanyerése után megmaradó hőkínálatokat így meghatároztuk, akkor a GCC szerkesztésekor alkalmazott gondolatmenetet követve számíthatjuk a hőkaskádót.

Első lépésként feltesszük, hogy nincs szükség külső fűtésre. Ez megfelel annak, hogy az összetett vonalak felső pontjait azonos entalpia-értékhez illesztettük, vagyis nulla  $Q$  értékhez illesztettük a GCC felső pontját (**2.9. a./ ábra**). Az egyes intervallumok maximális belső visszanyerését már kimerítettük. Most meghatározzuk az intervallumok közti maximális visszanyerést. Ez könnyű feladat, hiszen az intervallumok egymás alatt helyezkednek el. Nem kell mást tennünk, mint a felső szintről szintenkénti lépésekben "lecsorgatni" a fölös kínálatot. Ha a kínálat negatív, akkor negatív kínálatot "csorgatunk le", ami fordított irányú, irreális hőközlést jelent.

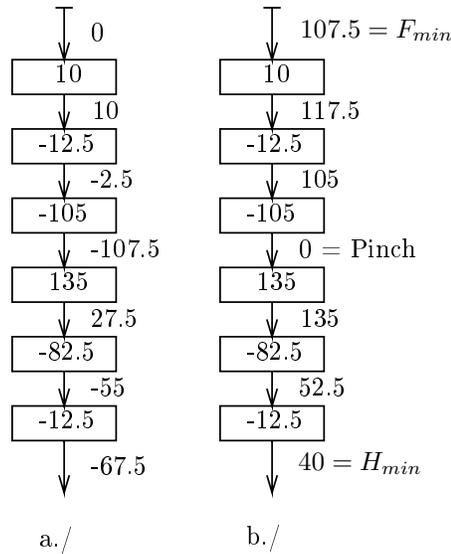
Ezt a számítási lépést, illetve ennek eredményét a **2.12. a./ ábra** mutatja. Az egyes intervallumokat dobozok jelképezik. A doboz belsejébe írtuk az intervallum összegzett (maradék) hőkínálatát. A legfelső (első) intervallum 10 kW értékű kínálata felhasználható bármely lejjebb eső intervallumban az igények fedezésére. A maximális visszanyerés kiszámításának érdekében azonban szintenként haladunk, hogy minden lehetőséget kihasználjunk. A 10 kW kínálatot felhasználja a második intervallum, sőt, a 10 kW még kevés is igényeinek kielégítéséhez. A második intervallum -12.5 kW negatív kínálatából így kisebb negatív kínálat, -2.5 kW marad. Formálisan ezt a "kínálatot" továbbítjuk a harmadik intervallumnak, és így tovább. Eredményül a 0, 10, -2.5, -107.5, 27.5, -55, -67.5 kW intervallumközi hőátadásokat kapjuk. Ezek közül a legfelső 0 kW a fűtés hiánya, a legalsó -67.5 kW a nulla külső fűtéshez tartozó külső hűtés, ami szükségszerűen megegyezik a hőmérlegből számítható szükséges fűtés ellentettjével. Ez az egyezés a számítás ellenőrzéséül szolgálhat.

A kapott intervallumközi hőátadások azonosak a GCC megfelelő  $Q$ -értékeivel. Minden intervallumközi hőátadás a megfelelő hőmérséklethez tartozik, s ebből felrajzolható a feladat GCC-je.

A negatív hőátadások természetesen irreálisak. A GCC-t jobbra kell tolni, hogy a hőátadások nemnegatívak legyenek. Ezt numerikusan úgy érjük el, hogy a legfelső intervallum fölött nulla helyett véges pozitív fűtést alkalmazunk. De mekkorát?

Pontosan akkorát, amekkora a negativitás megszüntetéséhez szükséges. Bármekkora  $X$  nagyságú fűtőteljesítményt alkalmazunk a kaskád tetején, az a kaskádon végigcsorogva az energia-megmaradás miatt az összes intervallumközi hőátadást ugyanazzal az  $X$  értékkel növeli meg. Ezért a legkisebb algebrai értékű intervallumközi hőátadás határozza meg a szükséges külső fűtés nagyságát.

Esetünkben a legkisebb érték a -107.5 kW, tehát a kaskád tetején 107.5 kW



2.12. ábra. Hőkaszkád-számítás – 2.

fűtést kell alkalmazni, hogy a negatív számok eltűnjenek. Az eredményt a **2.12. b./ ábra** mutatja. A minimális fűtés 107.5 kW, a minimális hűtés 40 kW. Természetesen ez csak az összes szükséges fűtés és hűtés, melyek részeit különböző hőmérsékleteken alkalmazhatjuk. A szélső hőmérsékleteken alkalmazás volt viszont a legegyszerűbb módja a minimumok meghatározásának.

A minimális külső hőforgalmat mutató hőkaszkád egyik intervallumközi hőátadása nulla. Ez éppen a megfelelő GCC pinch pontja. Esetünkben ez 80 °C, ami a *shifted* pinch hőmérséklet. A valódi (*unshifted*) pinch hőfokok: 90 °C a meleg áramokra és 70 °C a hideg áramokra.

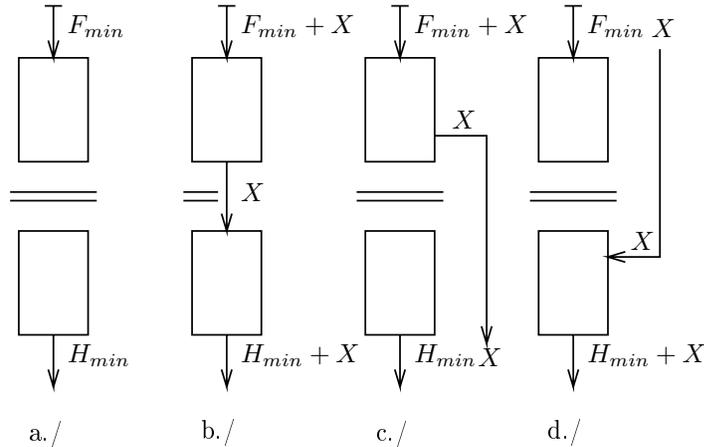
### 2.2.6. Pinch-szabályok

Mind a hőkaszkád, mind a vele egyenértékű GCC azt mutatja, hogy a minimális fűtésű és hűtésű (azaz pinch helyzetű) hálózat, vagyis a maximális energia-visszanyerés akkor érhető el, ha a pinch hőmérsékleten a hőátadás nulla. A pinch helyzetről enél több is mondható.

Maximális energia-visszanyeréshez az alábbi három szabályt, mint szükséges feltételt be kell tartani:

1. A pinch hőmérsékleten keresztül ne történjen hőátadás.
2. A pinch fölött ne hűtsünk.
3. A pinch alatt ne fűtsünk.

Megjegyzés: Véges MAT esetén kettős pinch hőmérséklettel kell számolni. Az 1. szabály azt jelenti, hogy a meleg pinch hőfok feletti melegáram–szakasz és a hideg pinch hőfok alatti hidegáram–szakasz között ne tervezzünk hőátadást. A 2. szabály azt jelenti, hogy a meleg pinch hőfok feletti melegáram–szakaszokon ne alkalmazzunk külső hűtést. A 3. szabály azt jelenti, hogy a hideg pinch hőfok alatti hidegáram–szakaszokon ne alkalmazzunk külső fűtést. A szabályokat a **2.13. ábra** magyarázza.



2.13. ábra. Általános pinch–szabályok

A **2.13. b./ ábra** mutatja a helyesen kijelölt rendszert, ami megfelel a pinch helyzetű GCC-nek vagy kaszkádnak. A **2.13. b./ ábra** azt mutatja, hogy ha a pinch-en keresztül  $X$  teljesítményű hőátadást valósítanánk meg, akkor (a hőmérséklet miatt) ugyanakkora, vagyis  $X$  nagyságú növekedést észlelnénk mind a fűtésnél, mind a hűtésnél. Ez az elrendezés a **2.9. c./ ábra** diagramjainak felel meg.

A **2.13. c./ ábrán** feltételeztük, hogy a pinch fölött alkalmazunk  $X$  nagyságú külső hűtést. Megint csak az energiamérleg miatt valahol a hőelvonás fölött ugyanakkora fölös fűtést is alkalmaznunk kell. A **2.13. d./ ábra** ennek tükörképét mutatjuk. *Figyelem!* A pinch szabályok csak a maximális visszanyeréshez szükségesek. Ha nem ragaszkodunk maximális energia-visszanyeréshez, akkor a szabályok megsérthetők.

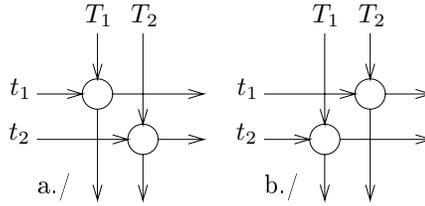
## 2.3. Hőcserélő hálózatok kijelölése

### 2.3.1. Minimális felület és "vertikális" hőátadás

A maximális energiavisszanyerés az üzemelési költséget minimalizálja közelítően. A maximális energiavisszanyerés mellett akkor legolcsóbb a hőcserélő hálózat, ha

beruházási költsége e korlátozó feltétel mellett minimális. A beruházási költséget közelítően minimalizálja minimális hőátadó felület beépítése. A maximális energiavisszanyerés mellett minimális felületű hőcserélő hálózat tervezéséhez viszont az ellenáram elvén alapuló kapcsolási rendet kell kialakítani.

Az egyes hőcserélő egységekre vonatkozó ismereteink alapján analógiával azonnal belátható, hogy az ellenáramtól való eltérés csökkentheti az energia-visszanyerés lehetőségét. A meleg áramok legmelegebb szakaszait a hideg áramok legmelegebb szakaszaival kell csatolni, és viszont. Ellenkező esetben, ha pl. a meleg áramok magas hőmérsékletű szakaszait a hideg áramok alacsony hőmérsékletű szakaszainak melegítésére használjuk, akkor esetleg nem marad elegendő és megfelelő hőmérsékletű hőkínálat a hideg áramok melegebb szakaszaira, pedig ellenáramú kapcsolás esetén lenne elegendő.



2.14. ábra. Párosítások és csatolási sorrendek

Az ellenáramú kapcsolás igazolásához tekintsük az **2.14. ábrán** vázolt kétféle párosítást, a megfelelő hőmérsékletekkel. Bevezetve a

$$\Delta_{j,i} = T_j - t_i$$

$$\alpha = \frac{Q}{c_i}$$

$$\beta = \frac{Q}{C_j}$$

jelöléseket, a két hőcserélő együttes rögzített  $Q$  hőteljesítményéhez tartozó hőátbocsátó felület változása, ha az **2.14. a./ ábra** elrendezéséről az **2.14. b./ ábra** elrendezésére térünk át, algebrai átalakítások után így írható fel:

$$\Delta A = \frac{(\alpha - \beta)^{-1}}{f_{mod} k} \left[ \left( \ln \frac{\Delta_{1,2} - \beta}{\Delta_{1,2} - \alpha} + \ln \frac{\Delta_{2,1} - \beta}{\Delta_{2,1} - \alpha} \right) - \left( \ln \frac{\Delta_{1,1} - \beta}{\Delta_{1,1} - \alpha} + \ln \frac{\Delta_{2,2} - \beta}{\Delta_{2,2} - \alpha} \right) \right]$$

Tegyük fel, hogy az eredeti, az **2.14. a./ ábra** elrendezésének megfelelő esetben az  $A$  felület minimális volt. Akkor a felületváltozásnak pozitívnak kell lennie. Innen kapjuk:

$$\frac{(\Delta_{1,2} - \beta)(\Delta_{2,1} - \beta)(\Delta_{1,1} - \alpha)(\Delta_{2,2} - \alpha)}{(\Delta_{1,1} - \beta)(\Delta_{2,2} - \beta)(\Delta_{1,2} - \alpha)(\Delta_{2,1} - \alpha)} > 1$$

Vegyük figyelembe, hogy

$$\Delta_{1,1} + \Delta_{2,2} = \Delta_{1,2} + \Delta_{2,1}$$

ekkor átrendezéssel kapjuk a következő egyenlőtlenséget:

$$(T_2 - T_1)(t_2 - t_1)[(\Delta_{1,1} - \alpha) + (\Delta_{2,2} - \beta)] \geq 0$$

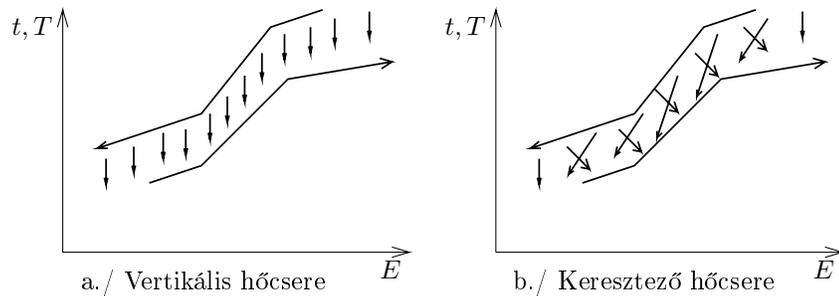
A szögletes zárójelben álló tagok mindig pozitívak, így

$$(T_2 - T_1)(t_2 - t_1) \geq 0$$

A zárójeles tényezők előjele tehát megegyezik. Ez éppen azt jelenti, hogy a melegebb melegáramot a melegebb hidegárammal csatoljuk, és viszont.

A fenti levezetés akkor is érvényes, ha az egyes áramok ugyanannak az áramnak különböző szakaszai. Ekkor az eredmény azt jelenti, hogy többszörös csatolásnál az ellenáramú kaszkád kapcsolás sorrendje az optimális, és nem az egyenáramú kaszkádé.

A tökéletesen ellenáramú kaszkád kapcsolás és hőátadás azt jelenti, hogy az azonos  $t$  hőmérsékletű  $dt$  hideg áram szakaszokat az ugyancsak azonos  $T$  hőmérsékletű  $dT$  meleg áram szakaszokkal csatoljuk. A CC diagramon ez pontosan annak felel meg, hogy az összetett áram vonalak egymást fedő tetszőleges  $dE$  energia-intervallumaiban történik az energia-visszanyerés. Ehhez az szükséges, hogy a CC diagramon ábrázolva minden  $dE$  hőközlés a  $t$ -tengellyel párhuzamos, azaz függőleges (vertikális) irányú legyen. Az ilyen hőközlést vázolja a **2.15. a./ ábra**. A hőközlést jelző irányok egymással (is) párhuzamosak, egymást nem keresztezik.



2.15. ábra. Vertikális és keresztező hőcsere

A gyakorlatban az ilyen rendszer megvalósítása az áramok sokszoros elágaztatását igényli és nagyon sok, kisméretű hőcserélőhöz vezet. A költségfüggvény  $b$  kitevője általában 1-nél kisebb szám, így az azonos hőcserélő felületet kevesebb egységgel megvalósító rendszerek az olcsóbbak, míg az elaprózott rendszerek nagyon drágák. Ezen felül a bonyolultság növekedése sem éppen előnyös. Ezért ha lehet,

elkerüljük az elágaztatásokat, és inkább ún. cikk-cakkos, vagy keresztező rendszereket tervezünk, amit a **2.15. b./ ábra** mutat. Ezzel növeljük az összfelületet, mégis csökkentjük a költségeket. (A paradox jelenség oka a költségfüggvény nem-linearitása).

Természetesen a cikk-cakkos tervezés és a vertikális tervezés között gazdasági kompromisszumot keresünk.

### 2.3.2. Hagyományos tervezés: gyors algoritmus

A hagyományos tervezői eljárás az ellenáram elvét alkalmazza. Szigorú algoritmusként az alábbi, ún. *gyors algoritmust*, vagy ennek valamilyen változatát adhatjuk meg:

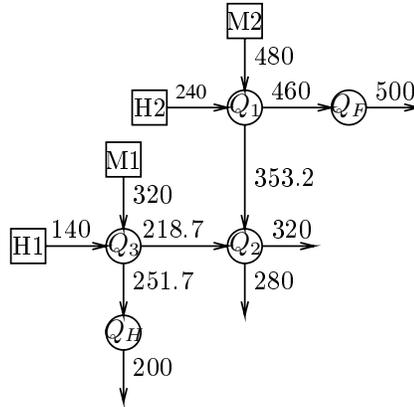
1. Kiválasztjuk a *legnagyobb* belépő hőmérsékletű meleg áramot, ezt jelöljük  $j^\square$ -vel. Jelöljük a megfelelő hőmérsékletet  $T^\square$ -vel, az áram célhőfokát  $T^{\square*}$ -gal.
2. Kiválasztjuk ugyancsak a *legnagyobb* kilépő hőmérsékletű hideg áramot, ezt jelöljük  $i^\square$ -vel. Jelöljük a megfelelő hőmérsékletet  $t^\square$ -vel, az áram kiindulási hőfokát  $t^{\square\circ}$ -val.
3. Ha  $T^\square < t^\square + MAT$  és  $C_j \geq c_i$ , akkor fűtést rendelünk az  $i^\square$  hideg áram  $T^\square - MAT$  hőmérsékletétől a  $t^\square$  hőmérsékletig. Visszalépünk az 1. pontra.
4. Ha  $T^\square \leq t^\square + MAT$  és  $C_j > c_i$ , akkor fűtést rendelünk az  $i^\square$  hideg áram  $T^\square - (MAT + \Delta)$  hőmérsékletétől a  $t^\square$  hőmérsékletig.  $\Delta$  tetszőleges pozitív érték lehet, amit heurisztikusan állapítunk meg, vagy utólag optimalizálunk, mint döntési változót. Visszalépünk az 1. pontra.
5.  $j^\square$  és  $i^\square$  között olyan csatolást jelölünk ki, melynek meleg végén a  $T^\square$  és  $t^\square$  hőmérsékletek szerepelnek, és e feltétel mellett a lehető legnagyobb a csatolás hőteljesítménye. Jelöljük e csatolás hideg végén a meleg áram hőmérsékletét  $T_{ki}$ -vel, a hideg áram hőmérsékletét  $t_{be}$ -vel.
6. Ha  $T_{ki} > T^{\square*}$ , akkor legyen a  $j$  meleg áram maradékának kiindulási hőfoka  $T_j^\circ = T_{ki}$ . Elenkező esetben a  $j$  meleg áram nem szerepel tovább a feladatban.
7. Ha  $t_{be} > t^{\square\circ}$ , akkor legyen az  $i$  hideg áram maradékának célhőfoka  $t_i^* = t_{be}$ . Elenkező esetben az  $i$  hideg áram nem szerepel tovább a feladatban.
8. Ha szerepel még hideg áram a feladatban, akkor visszalépünk az 1. pontra.
9. Ha szerepel még meleg áram a feladatban, akkor azokhoz annyi hűtést rendelünk, amennyi eljuttatja őket a célhőfokig.
10. Vége.

#### 1. Példa

A feladatnak a módszer alkalmazásához szükséges adatai:

	$T^\circ, t^\circ$	$T^*, t^*$	$C, c$
H1	140	320	14.45
H2	240	500	11.53
M1	320	200	16.70
M2	480	280	20.00
MAT		=	20.00

A megoldást a **2.16. ábra** mutatja.  $Q_F = 461.2$ ,  $Q_1 = 2536.6$ ,  $Q_2 = 1463.4$ ,  $Q_3 = 1137.6$ ,  $Q_H = 862.4$ .



2.16. ábra. Gyors algoritmus, 1. példa megoldása

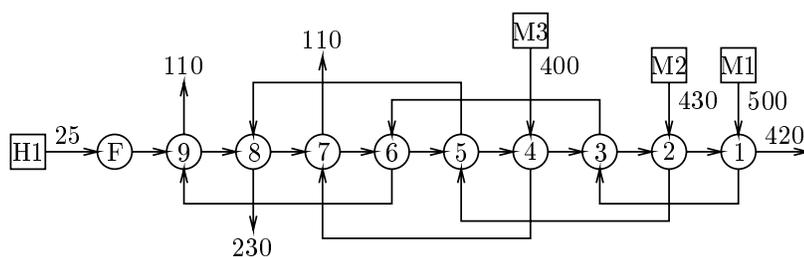
## 2. Példa

A feladatnak a módszer alkalmazásához szükséges adatai:

	$T^\circ, t^\circ$	$T^*, t^*$	$C, c$
H1	25	420	70
M1	500	110	20
M2	430	230	50
M3	400	210	30
MAT		=	20.00

A megoldást a **2.17. ábra** mutatja.

Az 1. feladatot a gyors algoritmus jól megoldja. A 2. feladatban a három meleg áram váltakozva a legmelegebb. A MAT korlátozó értéke miatt sok apró csatolást jelöl ki a módszer, holott a meleg áram elágaztatásával elegáns 4, sőt 3 csatolásos rendszert is ki lehetne jelölni, melynek ugyanekkora fűtése, és kisebb a beruházási költsége. A gyors algoritmus – mint látni fogjuk – egyes esetekben nagyobb fűtést és hűtést jelöl ki, mint amennyi valóban szükséges.



2.17. ábra. Gyors algoritmus, 2. példa megoldása

### 2.3.3. Pinch-tervezés

A maximális energiavisszanyerést megvalósító hálózat kijelöléséhez a három *általános* pinch-szabályból kell kiindulni. Az első szabályból következik, hogy a pinch alatti és pinch fölötti részfeladatot egymástól függetlenül is meg lehet oldani. Az alkalmazott szabályok és eljárások a két oldalra nézve szimmetrikusak.

Bármelyik oldalt nézzük is, azt találjuk, hogy a pinch felé haladó áramok igényeit csak a velük szemben haladó, és a pinch azonos oldalára eső áramokkal szabad kielégíteni. Például a meleg oldalon a meleg áramok kínálatát csak hideg áramoknak a meleg oldalra eső szakaszai vehetik fel. A hideg oldalra eső szakaszok azért nem, mert a pinch-en keresztül nem cserélünk hőt, külső hűtőközeg pedig azért nem, mert a meleg oldalon nem alkalmazunk hűtést. A pinchtől távolodó áramokra ilyen merev szabályok nem érvényesek. Például a meleg oldalon a hideg áramok igényeit kielégíthetjük meleg áram szakaszokkal (melyek szükségszerűen a meleg oldalon vannak), de külső fűtőközeggel is.

A pinch felé haladó áramok igényeinek a kielégítése tehát nehezebb, mint az onnan távozóké. Ezen belül is a legtöbb gondot azok a pinch felé haladó áramok jelentik, melyek a pinch hőfokát el is érik (vagy át is lépik). Ezeknek kielégítésére ugyanis kizárólag a pinchet átlépő vagy a pinchtől induló áramok alkalmazhatók, ha maximális energiavisszanyerést megvalósító hálózat kijelölése a cél. Ennek az az oka, hogy a pinch hőfokon az egymással párosítható meleg és a hideg áramok között éppen MAT hőfokkülönbség található, míg a pinchtől távolabbi párosításoknál ennél nagyobb különbség is előfordulhat, illetve általában a nagyobb különbség a jellemző.

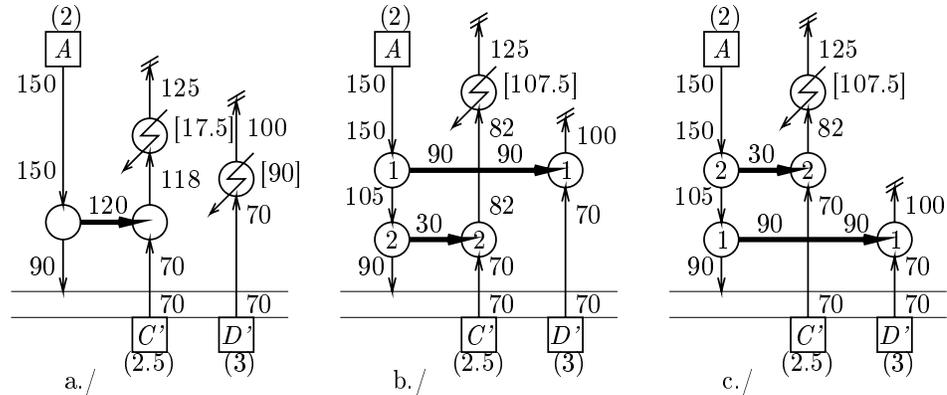
A pinch közvetlen közelébe eső (a pinch hőfokot érintő) hőátadó egységek kijelölésénél csak azokat az áramokat, illetve áram-szakaszokat vizsgáljuk, melyek a pinch hőfokot érintik. Ezeket *pinch-áramoknak* nevezzük.

#### Példa

Az 2.2.5 alfejezetben használt feladat adataival (2.1. Táblázat) elvégezzük a pinch-tervezést. A feladat megoldása közben rámutatunk az alkalmazandó ter-

vezési (kijelölési) szabályokra.

Először a meleg oldalt vizsgáljuk. A meleg oldalon egyetlen meleg és két hideg áram szakasz szerepel, mindhárom szakasz pinch-áram. A melegoldali feladatot vázlatosan mutatja a **2.18. ábra**. Az ábra alján a kettős vonal a két valódi pinch hőfokot jelképezi. Az áramok kiindulási pontjánál kis négyszögbe írjuk az áram vagy áram-szakasz jelét, és mellette zárójelben feltüntetjük hőkapacitását. Az áramokat irányított szakaszok jelképezik, melyek a képzeletbeli, felfelé mutató hőfokskála mentén helyezkednek el. Az áramok megfelelő pontjain a vonal mellé írjuk a jellemző hőmérsékleteket.



2.18. ábra. Meleg részrendszer tervezése

A hőcserélő hálózat kijelölése azt jelenti, hogy (1) egymáshoz rendeljük a párosított meleg és hideg áram-szakaszokat, valamint az áramokhoz szükség esetén hozzárendeljük a külső segédközegeket (fűtés vagy hűtés), (2) ha egy áram(-szakasz) több másikkal és/vagy segédközeggel is találkozik, akkor kijelöljük a találkozások sorrendjét, (3) megadjuk az egyes csatolásokhoz tartozó hőteljesítményeket. Az 1. és 2. tevékenységek eredményét úgy jelöljük, hogy a csatolt áramokat jelképező vonalakat egy-egy csomóponttal szakítjuk meg, és e csomópontokat keresztirányban összekötjük. A segédközegezes fűtés esetén a hideg áramot a megfelelő ponton egy olyan csomóponttal szakítjuk meg, melyet nem kapcsolunk össze más csomóponttal. Ugyanígy járunk el a meleg áramokon alkalmazott hűtés jelölésénél is. Ezt a jelölésmódot **rácsábrázolásnak** nevezzük.

A **meleg oldalon** egyetlen meleg áram szerepel. Ezt kell a pinch hőfokára eljuttatni a rendelkezésre álló két hideg pinch árammal. Ha a legelső (és ezért talán a későbbieket korlátozó) csatolást tekintjük, akkor csak két választási lehetőségünk van: az  $A$  áramot vagy a  $C'$ -vel, vagy a  $D'$ -vel csatolhatjuk.

Az első esetben a kijelölés menete egyértelmű. Az eredményt a **2.18. a./ ábra** mutatja. A  $C'$  áram fűtési igénye messze felülmúlja az  $A$  áram kínálatát. Így a

$C'$  áram végén és a  $D'$  áram egészére fűtést kell alkalmazni. A fűtőteljesítmények összege éppen 107,5 kW, vagyis a korábban kiszámított minimális fűtés.

A második esetben kétféle módon is kijelölhetjük a hálózat meleg oldalát. Az egyik esetben a természetes logika szerint a  $D'$  áramot olyan hőcserélőben csatoljuk az  $A$  árammal, melynek egyik végén bevezetjük a  $D'$  hideg áramot a pinch (kiindulási) hőfokon és a *másik végén bevezetjük az  $A$  áramot* ugyancsak a kiindulási hőfokán. Az  $A$  áram így 45 fokkal hidegebben lép ki a hőcserélőből, és *maradékát* csatoljuk a  $C'$  árammal (**2.18. b./ ábra**). A másik esetben a  $D'$  áramot olyan hőcserélőben csatoljuk az  $A$  árammal, melynek egyik végén bevezetjük a  $D'$  hideg áramot a pinch (kiindulási) hőfokon és *ugyanazon a végén elveszük az  $A$  áramot* ugyancsak pinch (cél-) hőfokon, majd az  $A$  áram *kezdőszakaszát* csatoljuk a  $C'$  árammal (**2.18. c./ ábra**).

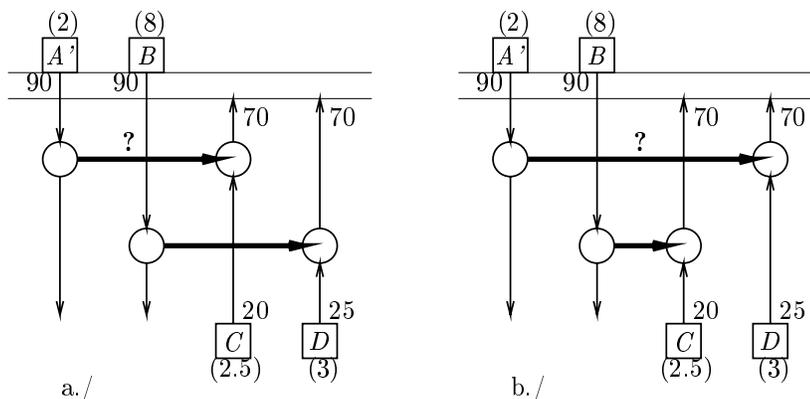
A b./ és c./ eset közti különbség látszólag csak a csatolási sorrend. A csatolási sorrenden nem látható, hogy melyik terv felel meg jobban az ellenáram elvének, mert a meleg áramot két, azonos hőfokról induló hideg árammal csatoljuk. A tervezés menete azonban lényegesen különböző: a b./ esetben a két szélső (messze eső) hőfokú áramot csatoljuk, míg a c./ esetben a kisebb hőmérsékletektől a nagyobb hőmérsékletek felé haladunk (fokozatosság, ellenáram).

Az eredményt jól mutatják a kijelölt csatolások hőfokkülönbségei. A MAT-hoz képest a következő többleteket találjuk: A b./ esetben a pinch csatolásnál 0 és 3, a másik csatolásnál 15 és 30. A c./ esetben a pinch csatolásnál 0 és 15, a másik csatolásnál 45 és 58. A c./ esetben tehát a hajtóerők jóval nagyobbak, így várhatóan a hűtendő felület kisebb lesz.

A vizsgált feladat túlságosan egyszerű, így nem mutat példát arra, hogy a b./ típusú tervezés esetenként olyan csatolások kijelöléséhez vezet, melyek következtében a meleg áram maradéka nem hűthető le a pinchig. Általában azonban ez a lehetőség fenyeget. Ezért a **pinch tervezést a pinch hőfoktól fokozatosan távolodva végezzük.**

**A hideg oldal tervezése** közben fogunk találkozni a pinch csatolásokra vonatkozó többi szabállyal. A hideg oldalon két meleg áram és két hideg áram szerepel, a **12. ábra** szerint. Összesen két olyan csatolás tervezhető, melyek érintkeznek a pinch-sel. Ezeket kétféleképpen jelölhetjük ki, ez a két eset látható a **2.19. ábrán**.

A **2.19. a./ ábra** esetében vizsgáljuk meg az  $A'-C$  csatoláshoz tervezhető hőtéljesítményt! Ne felejtjük el, hogy pinch csatolást tervezünk, tehát mind a meleg, mind a hideg áram meleg vége pinch hőfokú. A meleg áram gyorsabban hűl, mint ahogy a hideg áram melegszik, mert a meleg áram hőkapacitása kisebb ( $2 < 2,5$ ). Ennek következtében tetszőlegesen kicsiny hőtéljesítmény mellett is kisebb a hidegvégi hőfokkülönbség, mint MAT. Tehát *maximális energiavisszanyerést megvalósító hőcserélő hálózat tervezéséhez az  $A'-C$  csatolást nem jelölhetjük ki a pinchnél.* Ugyanez a probléma merül fel az **2.19. b./ ábra**  $A'-D$  kapcsolásánál is ( $2 < 3$ ). A pinch csatolás előfeltétele, hogy hideg oldalon a meleg áram, meleg oldalon a hideg áram hőkapacitása ne legyen kisebb a hozzárendelt áram hőkapacitásánál. Általában a **pinchtől távozó és oda érkező, egymással csatolt**



2.19. ábra. Hideg részrendszer lehetetlen csatolásai

pinch áramokra teljesülnie kell a

$$C_{\text{távozó}} \geq C_{\text{érkező}}$$

**feltételnek**, hogy a pinch csatolás megvalósítható legyen. Ez a feltétel a pinch áramok összegére mindig teljesül, különben máshol lenne a pinch. Ha az összes lehetséges kapcsolási kombináció egyikében sem teljesül maradéktalanul a fenti feltétel, akkor **az áramok elágaztatásával** lehet olyan kapacitásokat kialakítani, amik lehetővé teszik a feltétel teljesítését.

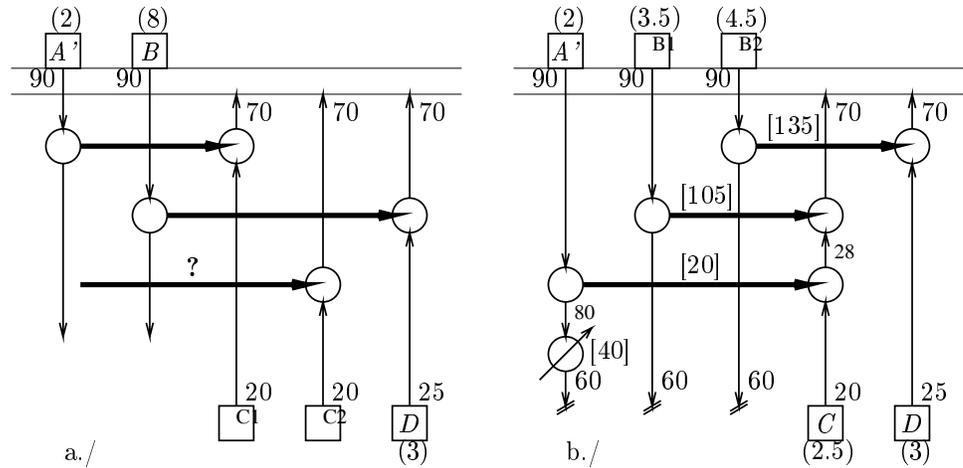
Az elágaztatásoknál azonban ügyelni kell az áramok számának viszonyára is. Például ha a vizsgált feladatban elágaztatjuk a  $C$  áramot, mondjuk 0,2–2 arányban ( $C1$  és  $C2$  áramok), akkor az  $A'$  áram csatolható a  $C2$  árammal és a  $B$  áram a  $D$  árammal (**2.20. a./ ábra**). Vizsgáljuk meg, hogy ekkor mi melegítheti fel a  $C1$  áramot a pinch hőfokára!

Elvben három lehetőségünk van  $C1$  felmelegítésére:

1. Külső fűtés.
2. Meleg áramok pinchnél melegebb szakaszai.
3. Az  $A'$  áram vagy a  $B$  áram maradéka.

Az 1. esetet a pinch-szabályok kizárják: ne fűtsünk a pinch alatt. A 2. esetet is a pinch-szabályok zárják ki: ne cseréljünk hőt (ne fűtsünk vagy hűtsünk) a pinchen keresztül. A 3. eset sem valósítható meg. Ugyanis a pinch csatolások következtében a maradékok hőfoka kisebb a pinch hőfoknál. Ugyanakkor a  $C1$  áramot pinchig kell melegíteni, ezért nincs meg a kívánt MAT-nyi különbség a csatolás melegvégén.

Látható, hogy a hideg oldalon a hideg pinch áramok pinchig való felmelegítéséhez legalább annyi meleg pinch áramra van szükség. Ezzel szimmetrikusan, a meleg oldalon a meleg pinch áramok pinchre hűtéséhez legalább annyi hideg pinch áramra van szükség. Általában szükséges, hogy **a pinchtől távozó áramok száma ne**



2.20. ábra. Hideg részrendszer elágaztatással

legyen kisebb az oda érkezők számánál:

$$N_{\text{távozó}} \geq N_{\text{érkező}}$$

Ha ez a feltétel nem teljesül, akkor megint csak az áramok elágaztatásával lehet segíteni rajta. Esetünkben nem a  $C$  áramot kell elágaztatni, mert azzal elrontjuk az áramok létszámára egyébként teljesülő feltételt, hanem pl. a  $B$  áramot célszerű elágaztatni.

Hogy a  $B$  áramot milyen arányban célszerű elágaztatni, arra nézve nincs általános szabály. Egy lehetséges tervváltozatot mutat a **2.20. b./ ábra**.

### 2.3.4. A maradék-feladat ellenőrzése és rejtett pinch

Az előző alfejezet csak a pinch csatolások kijelölésére ad szabályrendszert. A pinch-től távoli helyekről csak annyit állít, hogy a pinch-től fokozatosan távolodva kell kijelölni a csatolásokat. Erre a részproblémára három különböző megoldási stratégia ismert:

1. Maradék-feladat ellenőrzése (angol: *Remaining Problem Analysis, Hidden Pinch*).
2. Hajtóerő-profil (angol: *Driving Force Plot*) alkalmazása.
3. Hőfok-intervallumonkénti tervezés, majd fokozatos fejlesztés ciklustöréssel (angol: *Shifts and Loops, Loop Breaking*)

Ezek közül itt a maradék-feladat ellenőrzését ismertetjük.

A pinchközeli tervezés elvégzése után külön a meleg és külön a hideg oldal tervezésére felhasználható a gyors algoritmus, de csakis a következő módosításokkal:

1. A hideg oldalon a melegvégről, a meleg oldalon a hidegvégről kezdjük a tervezést (a pinchől távolodva tervezünk).
2. A gyors algoritmus szerinti csatolások alkalmasságát (helyességét) minden alkalommal ellenőrizzük a maradék-feladat hőkaskád-számításával. Ha a maradék-feladat ellenőrzése azt mutatja, hogy a kijelölt csatolás eredményeképpen a szükséges külső hőforgalom megnő, akkor a csatolás hőteljesítményét csökkentjük.

#### Példa.

Legyen az aktuális hideg oldali feladat vagy korábbi lépések eredményeképpen megmaradt feladat a következő:

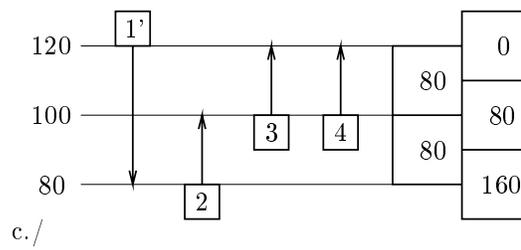
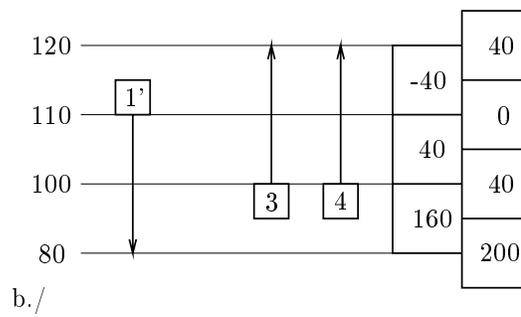
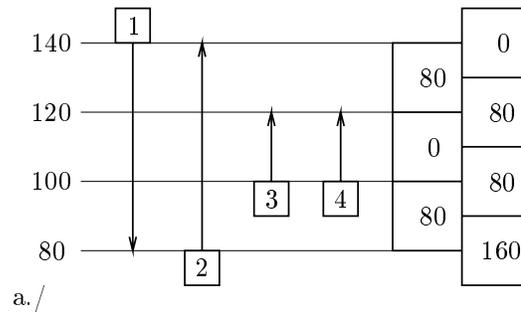
	$T^o, t^o$	$T^*, t^*$	$C, c$
1	150	90	8
2	70	130	4
3	90	110	2
4	90	110	2
MAT			= 20

A hőkaskád számítását mutatja a **2.21. a./ ábra**. A kaskád tetején nulla fűtéssel számoltunk (hideg oldali részfeladat), s hogy valóban itt van a pinch, az abból derül ki, hogy a legmagasabb hidegáram-hőfok éppen MAT-tal kisebb a legmagasabb melegáram-hőfoknál.

Ha most a pinch és a gyors algoritmus szabályai szerint maximális hőteljesítményű csatolást jelölünk ki az 1. és a 2. áram között, akkor a maradék-feladat hőkaskádját a **2.21. b./ ábra** szerint kapjuk. (E konkrét esetben a maximális hőteljesítmény kimeríti a 2. áram fűtési igényét.) A kaskád tanúsága szerint a maradék-feladat minimális fűtése 40 egység. Csakhogy ez korábban nulla volt! Nem is lehetett más a pinch alatti, *hideg* részfeladatban.

Következésképp a kijelölt csatolás vagy nem megfelelő párosítású vagy túl nagy hőteljesítményű, és ezzel akadályozza a maximális energiavisszanyerés elérését. Az első feltevés biztosan téves, hiszen ez pinch csatolás. Csökkenteni lehet viszont a csatolás kijelölt hőteljesítményét egy olyan értékre, melynél a maradék-feladat fűtési igénye nulla marad. Azt a legnagyobb hőteljesítményt, melynél ez még éppen teljesül, megengedhető csatolási teljesítménynek hívjuk, és vagy egzakt algebrai kifejezéssel, vagy fokozatos közelítéssel lehet meghatározni. Ha ezt alkalmazzuk a vizsgált feladatra, akkor maradék-feladatként a **2.21. c./ ábra** szerinti kaskádot kapjuk.

Az utóbbi ábrából jól látszik, hogy a megengedhető csatolás alkalmazásának eredményeképpen új pinch helyzet keletkezik 120 foknál, és az 1. áramot majd elágaztatva, párhuzamosan a 3. és a 4. árammal kell csatolni. Az ilyen új pinch helyzeteket *rejtett pinch*nek nevezzük.



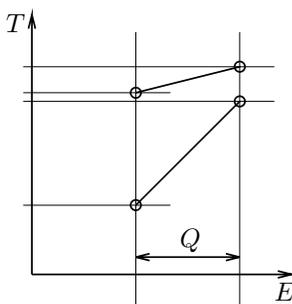
2.21. ábra. Rejtett pinch, a maradék feladat ellenőrzése

## 2.4. Előtervezés (*supertargeting*)

### 2.4.1. Minimális felület (*area targeting*)

A 2.2 *alfejezetben* tárgyalt energia–targeting arra való, hogy a maximális energia–visszanyerést, és az ahhoz tartozó minimális energia–költséget előre meghatározzuk. Előre, vagyis még a hőcserélő hálózat kijelölése előtt. Természetesen minden ilyen minimális energia–költség az önkényesen felvett MAT paraméter függvénye.

A hőcserélő hálózat tervezésénél a gazdasági cél az összköltség minimalizálása. Ezért jó lenne előre ismerni az energiához hasonlóan a beruházási költségek minimumát is. A beruházási költség minimuma helyett egyszerűbb a felhasznált összes hőátadó felület minimumát meghatározni. Ennek alapja a 2.3.1 *alfejezetben* tárgyalt vertikális hőközlés.



2.22. ábra. Egyetlen csatolás CC-diagramja

A **2.22. ábra** egyetlen csatolást mutat  $T$ – $E$  diagramon. Mivel mind a négy hőmérséklet ismert, azokból számítható az átlagos  $\Delta$  hajtóerő. Az  $E$ -tengelyre eső vetület megadja a  $Q$  hőteljesítményt. Ha még a (becsült)  $k$  hőátbocsátási tényező is ismert, akkor a szükséges felület azonnal számítható:

$$A = \frac{Q}{k\Delta}$$

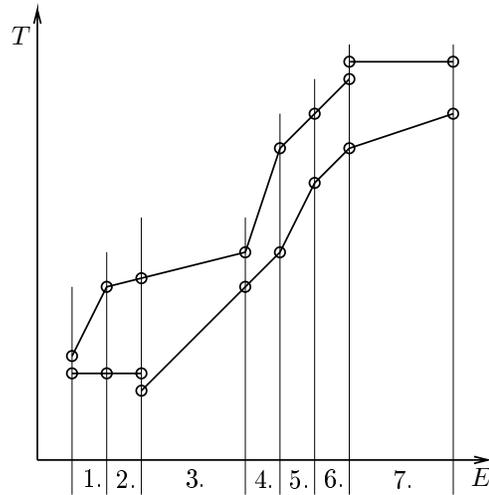
Ha több, azonos négy hőfokkal rendelkező hőcserélő  $Q_i$  teljesítményeinek összege éppen

$$Q = \sum_i Q_i$$

és ráadásul azonosak a (becsült)  $k$  hőátadási tényezők is, akkor az összes felület így számítható:

$$A = \sum_i A_i = \sum_i \frac{Q_i}{k\Delta} = \frac{1}{k\Delta} \sum_i Q_i = \frac{Q}{k\Delta}$$

vagyis ugyanúgy, mintha egyetlen csatolás lenne. Ebben az esetben a **2.22. ábra** úgy is tekinthető, mint az egyes szereplő áramok CC diagramja.



2.23. ábra. CC-diagram felosztása energia-intervallumokra

Tekintsünk most egy teljes CC-diagramot (*unshifted*), például a **2.23. ábrát!** Feltételezzük, hogy az összes megtervezendő csatolásra azonos a becsült  $k$  hőátbocsátási tényező. Az ábra szerint az összetett görbék jellemző hőmérsékleteinél felosztottuk az  $E$ -tengelyt  $Q$ -szakaszokra. Minimális felületet keresünk, amiről tudjuk, hogy a vertikális hőközléshez tartozik. Vertikális hőközlés esetén a hőközlés az egyes szakaszokon belül történik. Az egyes  $Q_j$  szakaszok viszont olyan kisebb CC diagramok, melyekre a fentiek szerint ki tudjuk számítani a minimális felületet.

Minden egyes  $Q_j$  szakaszhoz ismert négy hőmérséklet, melyekből meghatározható a hozzá tartozó  $\Delta_j$  hajtóerő. Ennek alapján az összes felület minimuma:

$$A_{min} = \sum_j A_j = \frac{1}{k} \sum_j \frac{Q_j}{\Delta_j}$$

Valójában persze a hőcserélő hálózat aligha lesz teljesen vertikális hőközlésű. Ennek ellenére a fenti  $A$  érték jó becslést ad a végső (optimális) felületre.

A fentivel pontosabb becslés is adható, ha figyelembe vesszük az egyes áramok eltérő hőátadási képességeit. A 2.1 alfejezetben vázolt modell szerint az egyes  $i$  áramok becsült, és a fal, valamint a lerakódás ellenállásával korrigált  $\alpha_i$  hőátadási tényezői felhasználásával az  $i$  és  $m$  áramok csatolásához tartozó  $k_{i,m}$  átbecsült tényező becslése:

$$\frac{1}{k_{i,m}} = \frac{1}{\alpha_i} + \frac{1}{\alpha_m}$$

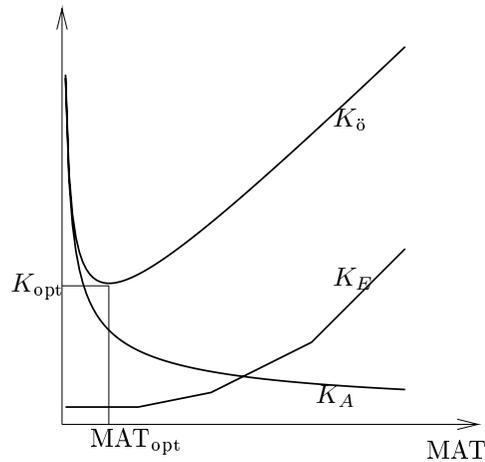
Ezzel a minimális felület becslése:

$$A_{min} = \sum_j \left( \frac{1}{\Delta_j} \sum_i \frac{Q_{i,j}}{\alpha_i} \right)$$

ahol  $Q_{i,j}$  az  $i$  áramnak a  $j$  szakaszra eső hőteljesítmény-igénye. Ez utóbbi képletet első publikálásának helyéről BATH-formulaként emlegetjük.

### 2.4.2. Összköltség becslése (*supertargeting*)

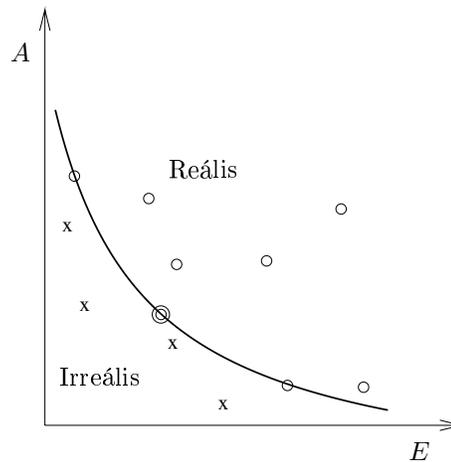
A minimális felület ismeretében becsülhető a minimális beruházási költség is. Bár ez utóbbi függvénye a felületek eloszlásának is, valamilyen értelmes becslés mindig végezhető.



2.24. ábra. Supertargeting

Mindezek a becslések önkényesen felvett MAT-hoz tartoznak. Gazdasági optimalizáláshoz különböző MAT-értékek mellett kell kiszámítani a várható költségeket. A MAT változtatásával a **2.24. ábra** szerinti függvényeket kapjuk.  $K_E$  jelzi az energiafogyasztás éves költségének grafikonját,  $K_A$  a beépített hőátadó felület egy évre vetített költségeinek grafikonját. A  $K_T$  összköltség minimumánál találjuk az optimumot. Az energiaköltség nő, a beruházási költség csökken növekvő MAT mellett, az éves összköltségnek pedig minimuma van. Ez a minimum a hőcserélő hálózat tervezése nélkül is meghatározható, ezt nevezik (hagyományosan) *supertargeting*nek.

Az energia- és beruházási költségek avagy az energia-fogyasztás és a felhasznált felület összefüggése szemléltethető MAT nélkül is. A vízszintes tengelyen  $E$  az energiafogyasztást, a függőleges tengelyen  $A$  a beépített hőátadó felületet jelzi. A



2.25. ábra. Supertargeting másképp

**2.25. ábrán** a folytonos vonal alatti energia-felület párok nem megvalósíthatók. A valódi rendszerek a vonal fölött helyezkednek el, illetve a vonal mentén találhatók a feltételesen optimális rendszerek. Bal oldalon (kis energia, nagy felület) a kicsiny MAT-hoz, jobb oldalon (nagy energia, kis felület) a nagyobb MAT-hoz tartozó optimumok pontjai találhatók, és valahol közöttük az optimum.

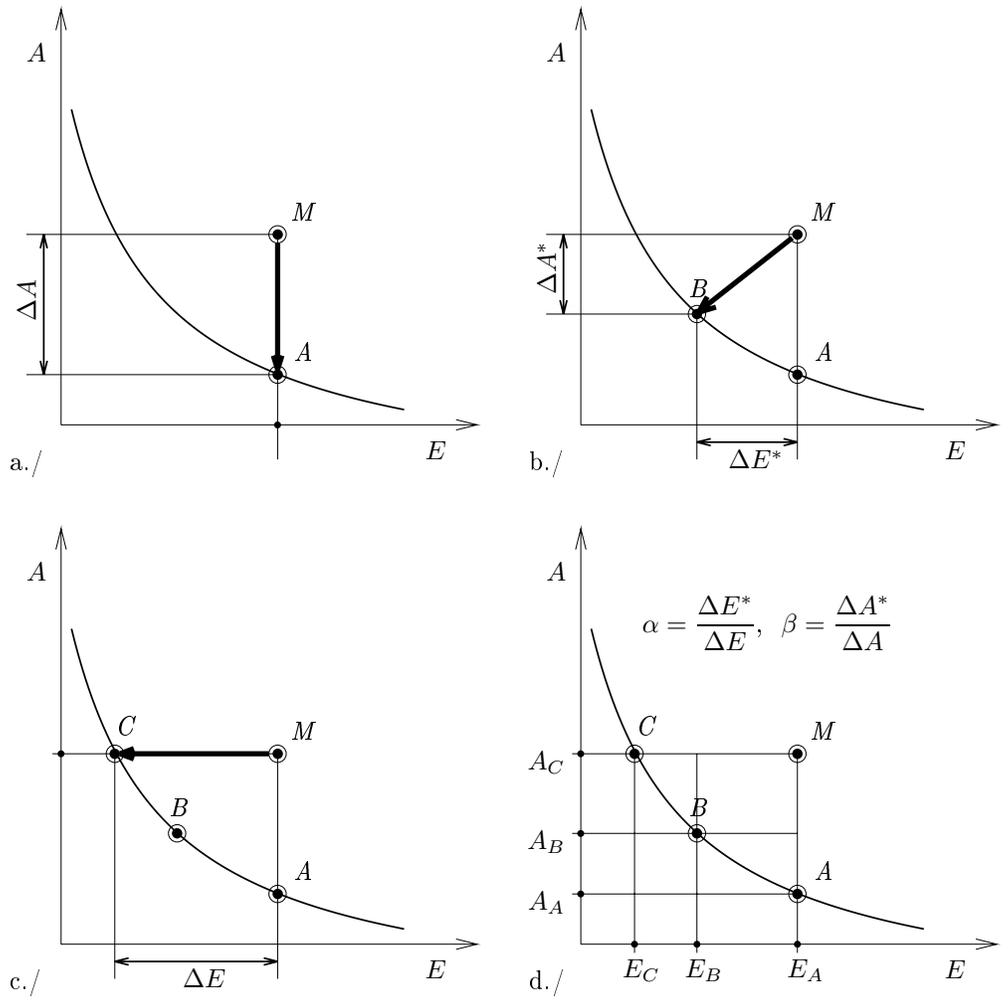
### 2.4.3. Módosítás költségbecslése (*retrofit targeting*)

Az előző fejezetben meghatározott optimum nem használható fel közvetlenül annak becslésére, hogy működő üzemek módosításától milyen gazdasági eredmény várható, illetve, hogy milyen módosítást célszerű végrehajtani.

Tekintsük pl. a **2.26. a./ ábrán**  $M$ -mel jelölt pontot, mely egy működő üzemet jellemez. Az adott energia-fogyasztáshoz tartozó minimális felületű rendszer pontja az  $A$ -val jelzett pont. A kettő között az az elvi különbség, hogy az  $A$  pont rendszerében csupa vertikális hőátadás van, míg az  $M$  pont rendszerében keresztvező csatolások is szerepelnek.

Természetesen módosítás esetén az energia-fogyasztást is csökkenteni szeretnénk. Ehhez esetleg meghatározhatjuk a globális optimumot, ami a  $B$  pontban helyezkedik el (**2.26. b./ ábra**). Az  $M$ - $B$  nyíl mutatja a képzelt módosítás irányát. A nyíl vetülete az  $E$ -tengelyre megadja a várható energia-megtakarítást, a vetület az  $A$ -tengelyre pedig a várható felület-megtakarítást.

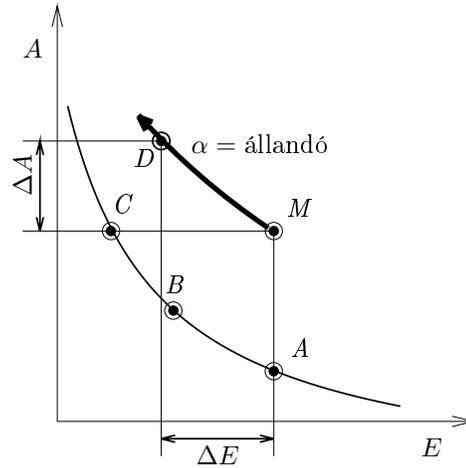
Csak hogy a működő üzembe már korábban beépítettek annyi hőcserélő felületet, amennyi az  $M$  tervhez szükséges volt. Ezzel a felület-mennyiséggel még nagyobb energia-megtakarítás is elérhető, ideális esetben annyi, amennyit az **2.26. c./ ábrán** a módosítást jelző nyíl vetülete az  $E$ -tengelyre. Ehhez a megtakarításhoz



2.26. ábra. Üzem módosítása és költségpontok

nincs szükség új felületekre, vagyis a **beruházási költség és vele együtt a megtérülési idő nulla**. Vagyis nem a globális optimumhoz viszonyítunk, hanem az adott, már beépített felület–mennyiséghez, és így a várható megtakarítás nagyobb, mint ami a globális optimum alapján várható lenne.

Sajnos a fenti célkitűzés a gyakorlatban nem teljesíthető. Ugyanis a beépített felületek konkrét geometriájú hőcserélőkhöz tartoznak, és nem csoportosíthatók át tetszés szerint. Hacsak nem kívánjuk kicserélni az egész hőcserélő rendszert vagy annak nagy részét (és általában nem akarjuk, mert az túl drága mulatság lenne), a beépített felületek adott alakja megszabja az elérhető visszanyerési hatásfokot.



2.27. ábra. Módosítás gazdasági becslése (retrofit targeting)

Az energiavisszanyerés hatásfokát az **2.26. d./ ábráról** leolvasható arányokkal jellemezhetjük. Egy lehetséges jellemző arány az

$$\alpha = \frac{E_C - E_B}{E_C - E_A}$$

míg egy másik a

$$\beta = \frac{A_A - A_B}{A_A - A_C}$$

arány. Ezek az arányok az elérhető értéknek az optimálishoz való viszonyát mutatják. Feltételezve, hogy a rendszeren csak kisebb változtatásokat hajtunk végre, ezek az arányok lényegesen nem módosulhatnak. Így ezek alapján megbecsülhető a valóban elérhető megtakarítás a beruházás függvényében. Ezt a **2.27. ábra** mutatja. Az ábrán a konstans  $\alpha$  vagy konstans  $\beta$  vonalai mentén vagy közelében várhatók a közel optimális módosítások. Adott  $D$  terv esetén a beruházási költség  $K = A_D - A_M$ , míg az energia-megtakarítás várható értéke  $E = E_M - E_D$ . Ezeket a különbségeket kell felhasználni a gazdasági értékeléshez.

## 2.5. A GCC és az integráció

Eddigi megfontolásainkban a minimális vagy közel minimális fűtésre és hűtésre, azaz a maximális energia-visszanyerésre koncentráltunk. A CC-diagram és a hőkaszkád alkalmas eszközök ennek számítására, és segítségével további fontos részletek tisztázhatók.

A GCC (*Grand Composite Curve*, azaz a *Fővonal*), amit az 2.2.4 alfejezetben írtunk le, nem a minimális hőforgalom meghatározására szolgál. Arra alkalmasabb a CC-diagram és a hőkaszkád, melyekből a GCC-t származtatjuk. A GCC arra való, hogy (i) az egyes hőfokokon optimális hőforgalmat, vagyis a hőforgalom optimális elosztását határozzuk meg vele, illetve (ii) optimális integrációt jelöljünk ki a különböző energiahordozók és -fogyasztók között.

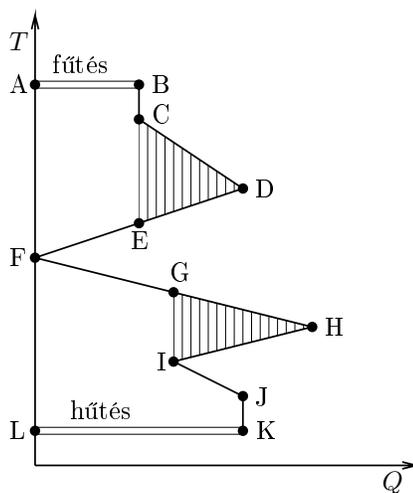
A GCC segítségével kijelölhetjük a rendelkezésre álló fűtőgőz, fűtőolaj, kemence és füstgáz, hűtővíz, hűtőgép, hőszivattyú, hőerőgép, stb., általában segédközegek és segédműveletek optimális elosztását, illetve ugyanezen segédközegek és segédműveletek (a magyar ipari szakzsargonban is használt angol kifejezéssel: *utility*-k), termikus szétválasztó rendszerek, gőzfejlesztés, helyi gőzturbina, gázturbinák optimális hőfok- (és nyomás-) szintjeit, a vegyes hőerőmű és energiarendszer optimális megcsapolási pontjait a hőerőmű és a felhasználó üzem együttesére nézve, azaz ezen rendszerek optimális integrációját, sőt meghatározhatjuk az üzemblokkok közti maximális integrációt és kijelölhetjük az integrációs pontokat.

### 2.5.1. Redukált GCC és utility pinch

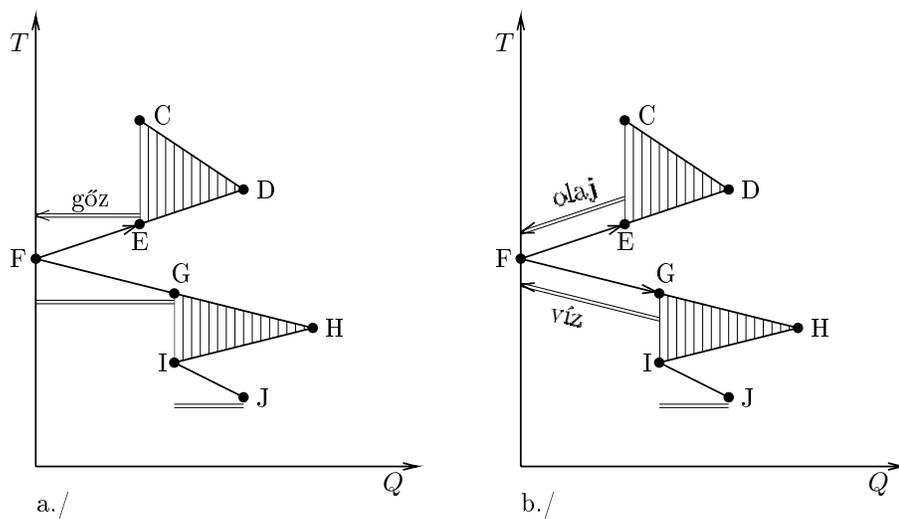
A 2.28. ábrán egy egyszerű GCC-t ábrázoltunk pinch helyzetben (CDFHIJ vonal). Berajzoltuk az általánosan legmagasabb hőmérsékletű fűtőgőz vonalát és az alkalmazandó hűtőközeg vonalát. Ha e kiegészítő vonalakat feltüntetjük, és így a teljes rendszer GCC-je a  $Q = 0$  vonalról indul, és oda érkezik, mint ahogyan az ábrán is, akkor *kiegyensúlyozott* (angol: *balanced*) GCC-ről beszélhetünk.

Azonban egyáltalán nem kell, hogy a segédközegek szélső hőmérsékletűek legyenek. Az ábrán a teljes kiegyensúlyozott hővonalat az ABCDEFGHIJKL pontok mentén részekre oszthatjuk. A CD szakasz elegendő hőkínálattal rendelkezik, hogy az ED szakasz fűtési igényét kielégítse, ezt függőleges vonalkézással jelöltük (ami egyben a vertikális hőcsere elvére is emlékeztet). Ennélfogva az F pinch pont fölött csak az FE szakasz fűtési igényét kell külső hőforrással kielégíteni, amihez sokkal kisebb hőmérsékletű fűtőközeg is alkalmas lehet, nincs szükség éppen az AB szakaszra. Például nagynyomású gőz helyett alkalmazhatunk kb. E vagy E+MAT hőmérsékletű közepes vagy kisnyomású gőzt, vagy fűtés közben csökkenő hőmérsékletű fűtőolajat, a 2.29. ábra szerint.

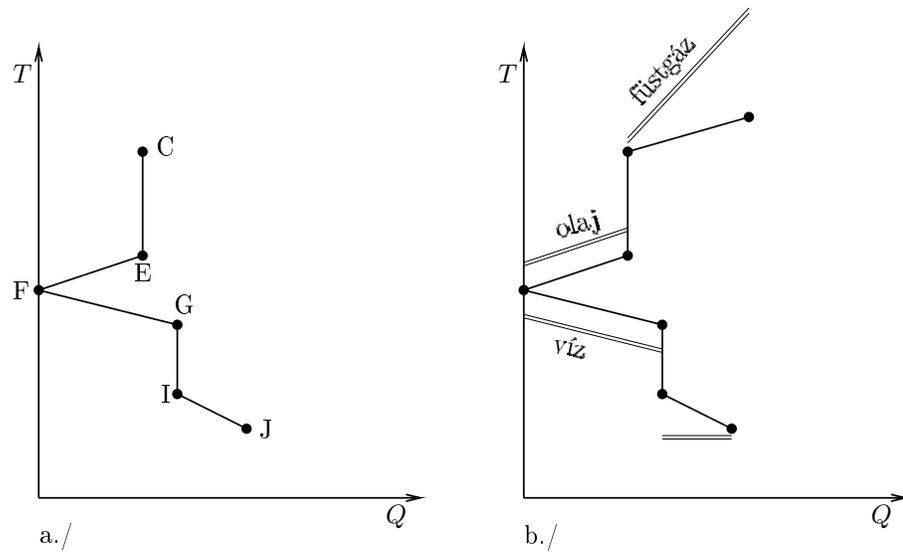
Ugyanígy az IH szakasz hűtheti a GH szakaszt (szintén függőleges vonalkézással jelöltük), és a nagyon alacsony hőmérsékletű LK hűtés helyett (ami valószínűleg drága gépi hűtés lenne) alkalmazhatunk magasabb hőmérsékletű vizes hűtést, sőt, talán léghűtést is az FG szakasz alatt, ugyancsak a 2.29. b./ ábra szerint. Ha a pinch elég magas hőmérsékletű, akkor alatta *másodlagos gőztermelést* lehet kijelölni.



2.28. ábra. Kiegyensúlyozott GCC



2.29. ábra. Fűtés-hűtés kijelölése



2.30. ábra. Redukált GCCU

A függőleges vonalkézással jelölt részek a belső energia-visszanyerésnek, azaz a folyamaton belüli integrációnak felelnek meg. Ezeket a "zsebeket" a segédközegek optimális elhelyezésénél el is hagyhatjuk, levághatjuk, és a **2.30. a./ ábra** szerinti *redukált GCC*-vel dolgozhatunk.

A redukált GCC sarkai mutatják azokat a hőmérsékleteket, melyek a felhasználható segédközegek hőfokainak szabnak korlátot. Ideális esetben a kiegyensúlyozott GCC segédközeg-vonalai érintik a e pontokat, ezért ezeket *utility-pinchnek* (*segédközeg-pinchnek*) nevezzük.

Példaképpen a **2.30. b./ ábrán** felrajzoltuk egy optimálisan kiszolgált rendszer kiegyensúlyozott GCC-jét. A fűtésre használt füstgáz (kemencében égéssel termelt fűtőközeg) energia-leadását jellemző erősen ferde vonal érinti a főfolyamat sarokpontját.

### 2.5.2. Kapcsolat a hőerőművel

A fosszilis tüzelőanyagok elégetésén alapuló hőerőművek szolgáltatásaik szerint durván háromfélék lehetnek: csak elektromos energiát termelő erőművek, melyekben a turbinát forgató gőzt nagy vákuumba terjesztik ki, tisztán gőzszolgáltató művek, melyek elektromos energiát nem, vagy csak alig termelnek, ellenben megfelelő minőségű gőzt szolgáltatnak települések és ipari üzemek fűtéséhez, illetve kombinált erőművek, melyek többlépcsős turbinarendszerében többféle megcsapolási helyről a kívánt nyomású túlhevített gőzt szolgáltatják a településnek és az ipari üzemeknek, de nagy mennyiségű elektromos áramot is termelnek.

Az utóbbi két esetben a megcsapolások mennyiségének és nyomásának változtatása kis mértékben lehetséges, és részben tervezéskor, részben üzemeltetés közben a megcsapolási helyeket és arányokat az igényeknek megfelelően optimalizálják.

Az optimumot azonban hagyományosan a hőerőmű gazdasági számításai alapján határozzák meg, és a felhasználói igények korlátozóként jelentkeznek. Például a szomszédos települést megfelelő mennyiségű fűtőgőzzel kell ellátni az évszaktól és az időjárástól függően.

A hőerőmű mellé telepített vegyi üzemeket szokás szerint két-három megcsapolásból származó ún. fővonalból látják el gőzzel (ezek gőzvezetékek, és nem a GCC-k!). Ezeket a vezetékeket többnyire a határozatlan "kisnyomású", "közepes" és "nagy nyomású gőz" címkével látják el, és e túlhevített gőzt szállító vezetékekből az üzemben fojtással állítják elő a kívánt minőségű fűtőgőzt. E fojtások veszteséget jelentenek, és a vegyipari gépészek feladata az optimális gőzszolgáltató rendszer kialakítása.

A GCC és a utility pinch ismeretében a gőz fő megcsapolási pontjait (nyomásokat) nem pusztán a hőerőmű gazdasági mutatói alapján, hanem a GCC-nek megfelelően, esetleg a két rész cél kompromisszumaként lehet kialakítani, így a hőerőmű és a vegyi üzem együttes rendszerének energiaháztartása és ezzel együtt gazdaságossága is javul.

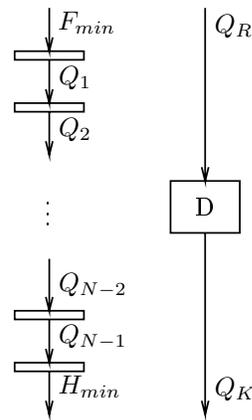
### 2.5.3. Termikus műveletek a hőkaszkád mentén

Tekintsük azt a feladatot, hogy egy működő vagy csak megtervezett vegyi üzembe új desztilláló oszlopot illesszünk. A desztilláló rendszert, mint műveletet tetszés szerinti ismert módszerrel tervezhetjük meg, de utána felmerül a kérdés, hogy mivel forraljuk és kondenzáljuk. Általában célszerű lenne a vegyi üzemben rendelkezésre álló hőkínálatokat és hűtési igényeket felhasználni erre a célra. Vizsgáljuk meg tehát, hogy a desztilláló oszlop igényei hogyan illeszthetők az üzem hőkaszkádjához.

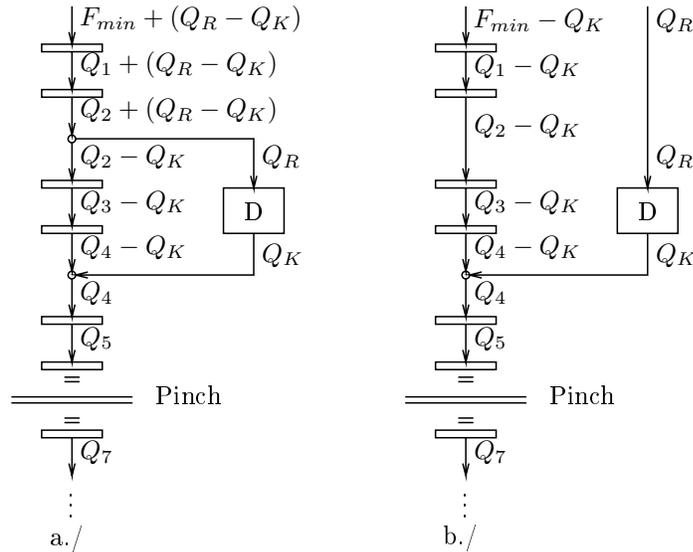
E célból a hőkaszkádot úgy számítjuk ki, hogy a vizsgált desztilláló oszlop igényei abban még nem szerepelnek. Ha a desztilláló oszlopot nem integráljuk az üzem energia-rendszerébe, akkor a forralás és a kondenzálás hozzáadódik a hőkaszkád minimális fűtéséhez és minimális hűtéséhez, vagyis a teljes rendszer minimális hőfogalmát növeli. Ezt mutatja a **2.31. ábra**, amin a desztilláló oszlopot egy négyszög jelképezi. A különálló oszlop növeli a minimális hőforgalmat. Próbáljuk meg a teljes rendszer hőforgalmát csökkenteni azzal, hogy az oszlopot integráljuk a hőkaszkádba!

A desztilláló oszlop végein észlelhető hőmérsékletek szerint ennek durván három változata rajzolható fel, ezeket a következő ábrák mutatják.

A **2.32. a./ ábrán** mind a forraló, mind a kondenzátor hőmérséklete a pinch fölött található. A kondenzátorból elvont  $Q_K$  hőt az 5. hőmérséklet-intervallumba vezetjük, ennek megfelelően a 4. intervallumból az 5. intervallumnak átadott kínálati többletnek is  $Q_K$ -val csökkennie kell. Ugyanígy az eredeti intervallumközi átadásokhoz képest  $Q_K$ -val csökkennie kell az összes átadásnak az alsó csatolási pont fölött, egészen a felső csatolási pontig. Ott egyrészt az eredeti kínálatból lev-



2.31. ábra. Hőkaszkád és nemintegrált desztilláló oszlop



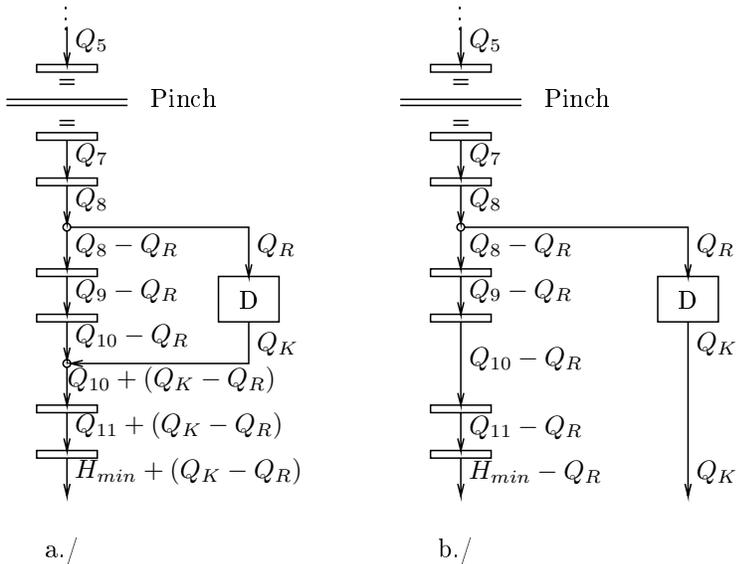
2.32. ábra. Hőkaszkád a pinch fölött integrált desztilláló oszloppal

onódik a  $Q_K$  mennyiség, másrészt viszont a kínálati intervallumnak még a  $Q_R$  forralási teljesítményt is fedeznie kell. Ezért a felső csatoláshoz felhasznált intervallum hőkínálatának összesen  $(Q_R - Q_K)$ -val kell megváltoznia. A hőmérség következtében ennyivel kell megváltoznia az összes, felette elhelyezkedő intervallum összegzett

maradék kínálatának, így a minimális fűtésnek is. Vagyis ha mindkét ponton a pinch fölött integráljuk az oszlopot a hőkaszkádba, akkor a minimális fűtés változása az eredeti (desztillálás nélküli) minimumhoz képest:  $Q_R - Q_K$ . Mivel  $Q_R$  és  $Q_K$  különbsége általában nagyságrenddel kisebb  $Q_R$  és  $Q_K$  abszolút értékeinél, az ilyen integrálással csökkenthetjük a teljes rendszer energia-fogyasztását. Természetesen az integrálás feltétele, hogy a két integrálási pont között elegendő összegzett hőkínálat legyen, vagyis a  $Q_i$  és  $Q_K$ , illetve a  $Q_i + Q_R - Q_K$  értékek egyike se legyen negatív.

A **2.32. b./ ábrán** azt az esetet mutatjuk, melyben az oszlopot csak a kondenzátornál integráljuk. Az ábrán közvetlenül igazolható, hogy ez egyenértékű azzal, mintha a felső integrálási pont a legfelső intervallum fölött lenne. Vagyis ez elvben nem különbözik a **7/a ábra** esetétől.

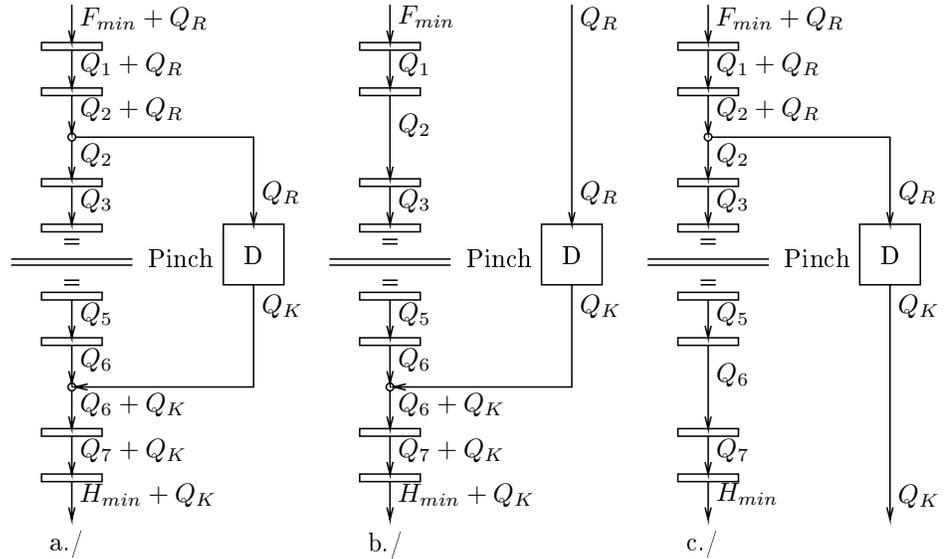
A **2.33. ábra** a **2.32. ábra** tükörképe, és ugyanúgy, mint az előbb, megmutatható, hogy a minimális fűtés változása  $Q_K - Q_R$ . Tehát ha mindkét integrálási pont a pinch alatt helyezkedik el, akkor az integrálással nagy mértékben csökkentjük a teljes rendszer energia-fogyasztását. A  $Q_K$  és  $Q_R$  különbségének előjelétől függően a fűtés vagy a hűtés nő vagy csökken.



2.33. ábra. Hőkaszkád a pinch alatt integrált desztilláló oszloppal

A **2.34. a./ ábra** azt az esetet mutatja, amelynél a forralót a pinch fölött, a kondenzátort a pinch alatt integráljuk. Mint az ábrán nyomon követhető, ebben az esetben a felső integrálási pont fölött az összegzett kínálatok  $Q_R$ -rel megnövekednek, az alsó integrálási pont fölött pedig  $Q_K$ -val növekednek. Ennek eredményeképpen az eredeti (desztillálás nélküli) minimumhoz képest a fűtés  $Q_R$ -rel, a hűtés

$Q_K$ -val nő meg, pontosan úgy, mintha az oszlopot nem integráltuk volna a kaszkádhoz (**2.31. ábra**). Ez az integrálás tehát teljesen felesleges, sőt, káros, hiszen beruházási költséggel és a rendszer bonyolultságának növekedésével jár, haszon nélkül. A **2.34. b./ és c./ ábrák** az ezzel rokon részleges integrálásokat vázolják, természetesen ugyanazzal az eredménnyel.



2.34. ábra. Hőkaszkád a pinch körül integrált desztilláló oszloppal

A kapott eredmény csöppet sem meglepő: a **2.34. a./ ábra** esetében a desztilláló oszlop közvetítésével a pinch ponton keresztül valósítottunk meg hőátadást illetve a **2.34. b./ ábra** esetében a pinch fölött hűtöttünk, a **2.34. c./ ábra** esetében alatta fűtöttünk, ennek megfelelően növekedett a minimális hőforgalom. A másik két esetben ezt elkerültük, tehát a minimális forgalom a teljesítmények különbségével változott, nőtt vagy csökkent.

Mindennek fontos következményei vannak a desztilláló oszlopok és oszloprendszer tervezésében. Például a nyomás növelése növeli a hőmérsékleteket, csökkentése csökkenti azokat, így az átfedő helyzetű oszlop mindkét integrálási pontját szerencsés esetben a pinch fölé vagy alá lehet tolni. Ha ezt nem sikerül megvalósítani, akkor a kaszkádot szolgáltató folyamat paramétereit próbálhatjuk úgy módosítani, hogy az integrációnak kedvezzen.

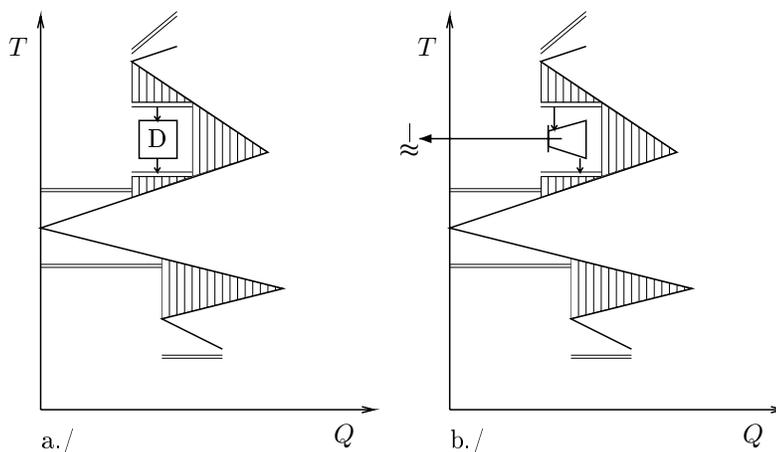
Lehetséges továbbá olyan részleges integráció is, melynél a forralásnak és/vagy kondenzálásnak csak egy részét fedezzük a hőkaszkádból.

### 2.5.4. A GCC zsebei

A 2.5.1 *alfejezetben* levágtuk a GCC "zsebeit", melyek a segédközegek optimális elhelyezésénél feleslegesek voltak. Ám éppen ezek a zsebek játsszák a főszerepet a 2.5.2 és 2.5.3 *alfejezetekben* említett integrációnál, és minden olyan esetben, melynél a belső energia-visszanyerés szélső hőfokai közé kiegészítő műveleteket iktatunk.

A desztilláló oszlopok alkalmas (pinch fölötti vagy pinch alatti) integrációjának feltétele volt, hogy a hőkaszkád közrezárt részében az egyes intervallumközi hőátadások elég nagyok legyenek. Más szóval: az integrációra akkor van lehetőség, ha a folyamat *belső* energia-visszanyerését csapolhatjuk meg. Ezt jól kifejezi a nem redukált GCC-ben ábrázolt desztilláló oszlop (2.35. a./ *ábra*). amit egy zseb belsejében helyeztünk el. A zseb hőkínálata fűti a forralót és a zseb fűtési igénye hűti a kondenzátort.

A desztilláló oszlop energia-fogyasztásáról beszélni voltaképpen pongyola beszédmodot jelent, hiszen az energia nem fogyasztható, és nem is termelhető, mert megmaradó mennyiség. Fogyasztható és termelhető azonban a szétválasztáshoz vagy az azt meghajtó energia-elértéktelenedéshez tartozó entrópiaváltozás, illetve a megfelelő szétválasztási munka. A zseb két szélső vonalát felhasználva voltaképpen munkát termelünk a hőenergia hőmérséklet-szintjének (vagyis az exergiának) a rovására.



2.35. ábra. Hőkaszkád zsebeiben termikus műveletek

A zsebekbe termikus szétválasztó műveletek helyett áram-generátorokat vagy hőerőgépeket is tehetünk, melyek működésének feltétele, hogy egy magasabb hőfokon hőt közöljünk velük, és egy alacsonyabb hőmérsékleten hőt vonjunk el belőlük. Eredményül vagy a tengelyen elvett mechanikus munkát vagy elektromos feszültséget kapunk, amit vagy helyben használunk fel, és ezzel csökkentjük az üzem

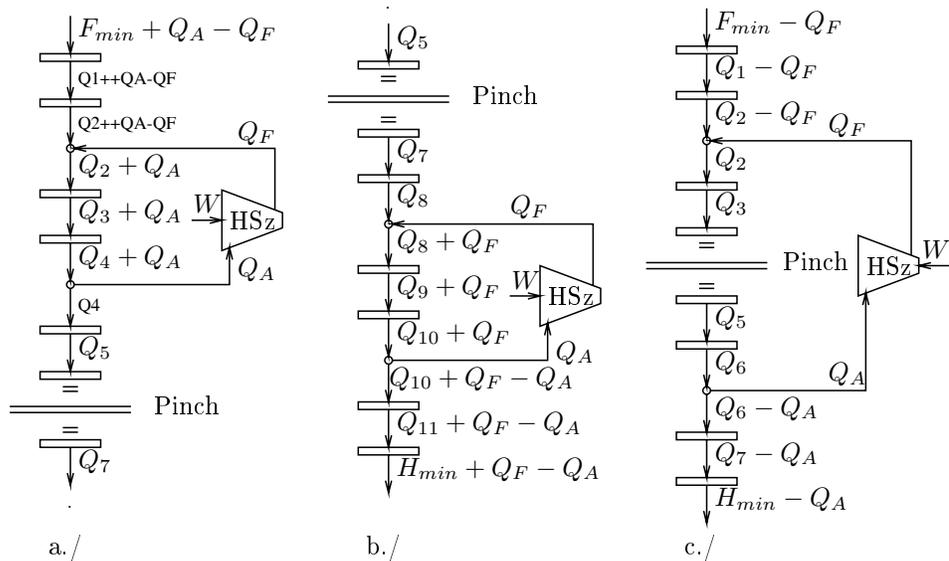
energia-költségeit, vagy a termelt energiát visszatápláljuk az elektromos hálózatba, és bevételhez jutunk.

Az sem kizárólagos feltétel, hogy a kínálatokat közvetlenül használjuk fel. A felső hőmérséklet alatt gőzt termelhetünk vagy olajat melegíthetünk, és ezt az üzem egy másik pontjára elvezetve azt ott használhatjuk fel.

### 2.5.5. Hőszivattyúk és hűtőgépek integrálása

A hőszivattyú és a hűtőgép azonos elven működik. Mindkettő alacsonyabb hőmérsékletéről szállít hőt magasabb hőmérsékletre, és ehhez munkát kell befektetni. Jelöljük az alacsony hőfokon felvett hőt  $Q_A$ -val, a befektetett munkát  $W$ -vel, és egyszerűsítésként tegyük fel, hogy a magasabb hőfokon leadott  $Q_F$  hő azonos  $Q_A$  és  $W$  összegével.

Ugyanúgy, ahogy a desztilláló oszlop, a hőszivattyú vagy a hűtőgép is háromféleképpen hajtható meg a hőkaszkádról. Ezt a három elhelyezést mutatja a **2.36. ábra**.



2.36. ábra. Hőkaszkád hőszivattyúval

A **2.36. a./ ábra** mutatja az integrálást a pinch fölött. A két integrálási pont között az összegzett hőkínálatoknak szükségszerűen  $Q_A$ -val növekedniük kell. A felső integrálási ponttól kezdve a változás  $Q_A - Q_F$ , a minimális fűtés éppen  $W$ -vel növekszik, vagyis a helyzet olyan, mintha a hőszivattyút nem integráltuk volna a

kaszkádhoz. Ennélfogva ennek az integrációnak semmi értelme. A **2.36. b./ ábra** a **2.36. a./ ábra** tükörképe, és ugyanúgy elemezhető.

A **2.36. c./ ábra** mutatja azt az esetet, melynél a hőszivattyút a pinch alatt fűtjük és a pinch fölött hűtjük. Ebben az esetben a minimális fűtés  $Q_F$ -vel, a minimális hűtés  $Q_A$ -val csökken, vagyis a  $W$  munka-befektetés hatására csökkent az energia-fogyasztás.

Összefoglalva: **A hőszivattyú és a hűtőgép alkalmazására éppen a szokásos pinch-szabályok ellenkezője igaz: ezeket a pinchen keresztül érdemes alkalmazni, hogy csökkentsük a külső energiaforgalmat.**

Ha tehát például egy desztilláló oszlopot vagy más termikus szétválasztó rendszert, pl. bepárlót, a pinch egyik oldalán sikerült integrálni, akkor a hőszivattyú alkalmazása főlegesen, ha viszont nem sikerült, mert átfedi a pinchet, akkor a hőszivattyú alkalmazása megfontolandó.

Hőszivattyút alkalmazhatunk a vegyi üzem tetszőleges két pontja között, ha azok hőmérsékletei egymáshoz közel esnek (ekkor jó a hőszivattyú vagy hűtőgép teljesítmény-tényezője), és *átfedik a pinch-hőfokot*.

## 2.6. Ellenőrző kérdések

1. Szerkessze meg 2.1 Táblázat adatainak összetett hővonalait!
2. Szerkessze meg 2.1 Táblázat adatainak GCC-jét!
3. Számítsa ki a 2.1 Táblázat adatainak hőkaszkádját, és határozza meg a pinch-adatokat!
4. Szerkessze meg 2.1 Táblázat adatainak összetett hővonalait!
5. Mik azok a pinch-szabályok? Mik a pinch-tervezés szabályai?
6. Hogyan határozható meg a minimális hőátadó felület?
7. Mit nevezünk szupertargetingnek? Minek a függvényében ábrázoljuk a költségeket?
8. Mire használható a GCC, és hogyan?
9. Milyen a termikus műveletek célszerű és célszerűtlen integrációja a hőkaszkádhoz? És a hőszivattyúé?

## 3. fejezet

# Komponensvisszanyerő rendszerek

### 3.1. Anyagcsere CC, koncentráció-kaszád és pinch

Bizonyos kémiai és vegyipari műveletek egyes kémiai komponensek kinyerésére, visszanyerésére, eltávolítására, elválasztására, dúsítására, stb. ún. *kinyerőszereket* vagy oldószereket alkalmaznak. Ilyenek pl. az extrahálószer extrakciónál, extraktív desztillációnál, extraktív kristályosításnál, az oldószer vagy az abszorbens abszorpciónál, vivőszerek a különféle kromatográfiás eljárásoknál, stb. Ezek ugyanúgy segédközegek (*utility*-k), mint a különféle hűtő- és fűtő közegek és berendezések. Gyakori oldószer a víz és a levegő, mint nagy mennyiségben rendelkezésre álló, legtöbbször káros szennyező anyagot nem hordozó közeg. E közegek kapacitása sem végtelen, gazdálkodni kell a tiszta vízzel és a tiszta levegővel.

Az ipari rendszerekben gyakran előfordul, hogy ugyanazt a kinyerőszert vagy tisztítószert (pl. vizet, levegőt, szerves oldószert) több műveletben is felhasználhatjuk, habár különböző koncentráció-viszonyok mellett. Eközben az eredetileg tiszta anyag szennyezőkben dúsul. (Gyakran épp az a feladata, hogy e szennyezőket felvegye.) Az így kialakuló rendszereket az energiacserélő hálózatok mintájára **anyagcserélő hálózatoknak** nevezik. A vegyészmérnök mind környezetvédelmi, mind gazdasági megfontolások alapján csökkenteni igyekszik a kinyerőszerek felhasznált mennyiségét. Célunk először is kinyerőszer-áram elméleti minimumának meghatározása, azután pedig az adott (minimális vagy közel minimális) kinyerőszer-árammal működő rendszerek kijelölése.

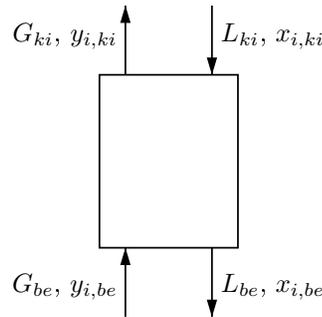
Az energia-visszanyerés és a minimális energia-felhasználás problémakörében a pinch technika alkalmazását az energia, mint megmaradó extenzív mennyiség és a hőmérséklet, mint a hozzá rendelt, s a rendezetlenséggel monoton kapcsolatban álló intenzív mennyiség együttese tette lehetővé. Ugyanilyen viszonyban áll a komponensek mennyisége, mint reakciómentes folyamatokban megmaradó extenzív mennyiség a koncentrációval, mint ugyancsak a rendezettség/rendezetlenség is

jelemző intenzív mennyiséggel.

Energia-visszanyerő rendszerek	Anyagvisszanyerő rendszerek
Hőenergia	Szennyező anyag mennyisége
Hőteljesítmény	Szennyező anyag árama
Hőmérséklet	Szennyező anyag koncentrációja

Ahogy a hőáram (vagyis a belső energia áramának konduktív része) spontán módon csak magasabb hőmérsékletek irányából alacsonyabb hőmérsékletek irányában indul meg, a komponens-áramlás (diffúzió) is spontán módon (munka befektetése nélkül) csak nagyobb koncentrációjú helyről kisebb koncentrációjú helyek felé indul meg.

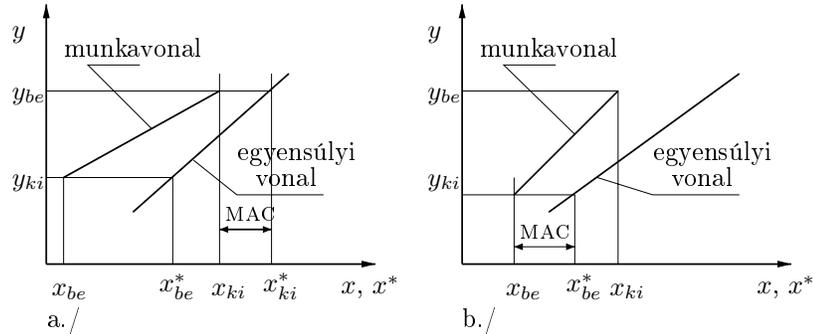
Az anyagcsere folyamatait az ellenáramú abszorpció, extrakció és desztilláció ismert egyensúlyi diagramjain követhetjük nyomon. E berendezéseknek két be- ill. kilépési pontjuk van, melyeket legáltalánosabban a nagyobb és kisebb koncentrációjú, vagy néha (az értékes vagy lényeges komponensben) dúsabb és hígabb végnek nevezünk. A berendezés vázlatát mutatja az **3.1. ábra**, melyen gáz ( $G$ ) és folyadék ( $L$ ) a két szemben haladó áram,  $s$  a megfelelő koncentrációkat  $y$ -nal és  $x$ -szel jelöltük. Ha analógiát keresünk az energetikai rendszerekkel, akkor abszorpció esetén a szennyezett gázáram felel meg a meleg áramnak, a viszonylag tiszta folyadék abszorbens felel meg a hideg áramnak, a szennyező (vagy éppen értékes kinyerendő) komponens pedig az energiának.



3.1. ábra. Abszorber műveleti áramai

A **3.1. a./ és b./ ábrákon** a hagyományos egyensúlyi diagramokat rajzoltuk fel, az egyszerűség kedvéért egyenes egyensúlyi vonallal (lineáris egyensúlyi összefüggésekkel). Az egyensúlyi vonal az egymással fizikai-kémiai egyensúlyban álló fázisok koncentrációit rendeli egymáshoz, és független a művelet technikai megvalósításától. A műveleteket az egymással szemben haladó áramok arányától (vagyis a technikai megvalósítástól) függő meredekségű *munkavonal* is jellemzi. Minél közelebb van a munkavonal az egyensúlyi vonalhoz, annál közelebb van a

művelet az ideális reverzibilis folyamathoz és annál kevesebb kinyerőszert kell alkalmazni, bár ugyanakkor növekszik a szükséges elméleti fokozatok száma, s vele együtt a beruházási költség.



3.2. ábra. Munkavonal, MAC, egyensúlyi összetétel

Végtelenül közeli egyensúlyi és munkavonalak esetén a beruházási költség is végtelenül nagyra válik. Ezért az energetikai MAT értékhez hasonlóan itt is célszerű bevezetni egy minimális koncentráció-különbséget, amit MAC-nak fogunk hívni (minimum approach concentration). Ez a különbség a műveletek különböző végein (és persze az egyes áram-párok esetére is) különböző lehet. A **3.2. a./ ábra** a dús végre, a **3.2. b./ ábra** a híg végre megállapított MAC-ot mutat.

Habár általában többféle szennyező vagy kinyerendő értékes anyag szerepel a reális anyagcsere-hálózatokban, az egyszerűség kedvéért egyetlen szennyező esetére mutatjuk meg, hogyan lehet a fenti egyensúlyi diagramok alapján összetett vonalakat szerkeszteni, kaszkádot számítani, és mit jelent a pinch ebben az esetben.

A mintafeladat kénhidrogén kinyerése kokszológázból. Kétféle szennyezett gázból kell eltávolítani a korrozív kénhidrogént: friss kokszológázból és részben tisztított gázból. A termékek is kétfélék, a részben tisztított gázon nagyobb kinyerést kell elérni. A szennyező anyagot elsősorban vizes ammóniában nyeletjük el, és amit ezzel nem sikerül eltávolítani, azt hűtött metanollal kezeljük. Ammóniát magából a kokszolási folyamatból nyerünk, mennyisége adott. A metanol segédközegként szolgál, és felhasznált mennyiségét minimalizálni igyekszünk.

A mennyiségi és koncentráció-adatokat a **3.1. Táblázat** mutatja.

A feladathoz tartozó MAC érték egységesen 0.01 mol %. A feladat természetéhez ezen kívül hozzátartozik az egyensúlyi összefüggések megadása is (ilyesmi az energetikai problémáknál nem szerepelt). A kénhidrogén egyensúlyi mólörtjei az adott gáz és a vizes ammónia között az adott koncentráció-tartományban jól közelíthetők az alábbi egyenessel:

$$y = 1.45x_1$$

3.1. táblázat. Mintafeladat: kénhidrogén eltávolítása

Áram neve	Tömegáram kg/s	mol % be	mol % ki
G1	0.9	7.00	0.03
G2	0.1	5.10	0.01
L1 (ammónia)	2.3	0.06	3.10
L2 (metanol)	?	0.02	0.35

3.2. táblázat. Intervallum-határok mol %-ban

megj.	$y$	$x^*$	megj.
G1 <sub>be</sub>	7.00	4.82	$x^*$
G2 <sub>be</sub>	5.10	3.51	$x^*$
$y^*$	4.51	3.10	L1 <sub>ki</sub>
$y^*$	0.10	0.06	L1 <sub>be</sub>
G1 <sub>ki</sub>	0.03	0.01	$x^*$
G2 <sub>ki</sub>	0.01	0.00	$x^*$

Az egyensúlyt a gáz és a hűtött metanol között az alábbi egyenes írja le (moltörttekkel):

$$y = 0.26x_2$$

A CC és a kaszkád megszerkesztésekor az ammóniás egyensúlynak megfelelően kettős koncentráció-értékkel számolunk: minden gázbeli moltörtnek megfelel egy bizonyos konkrét, folyadékbeli **ekvivalens moltört** az

$$x_1^* = \frac{y}{1.45} - 0.0001$$

képlet szerint, ahol a 0.0001 levonandó érték a MAC, vagyis e képlettel összetoljuk az áramokat (*shifted*). Az 5 intervallumot határoló 6 koncentrációpárt a **3.2. Táblázat** mutatja. Az L2 áram, vagyis a segédközeg adatai természetesen nem szerepeltek e táblázat összeállításánál. A minimumszámításokban az  $x^*$  koncentrációkat használjuk, az  $y$  értékeket csak a magyarázat kedvéért közöltük.

Intervallumonként összegezhetők a komponens túlkínálatok (**3.3. Táblázat**), és a kaszkádszámítás is a szokott módon történik. (**3.4. Táblázat**). A legkisebb algebrai értékű kínálat negatívját kell felülről bevezetni, hogy mindegyik összegzett kínálat nemnegatív legyen.

A felső 2.84 g/s érték a vizes ammónia minimális metanol-felhasználáshoz tartozó kihasználatlan mosókapacitását jelzi. Az alsó 0.74 g/s érték a metanollal eltávolítandó kénhidrogén mennyisége. Ebből számítható a minimális metanol-szükséglet:

$$L_2 = \frac{0.74}{0.0035 - 0.0002} = 224.2 \text{ g/s}$$

3.3. táblázat. Intervallumonkénti kínálat, g/s-ban

Intervallum	Fölös kínálat g/s
1	17.10
2	5.90
3	-25.84
4	0.72
5	0.02

3.4. táblázat. Koncentráció-kaszád számítása

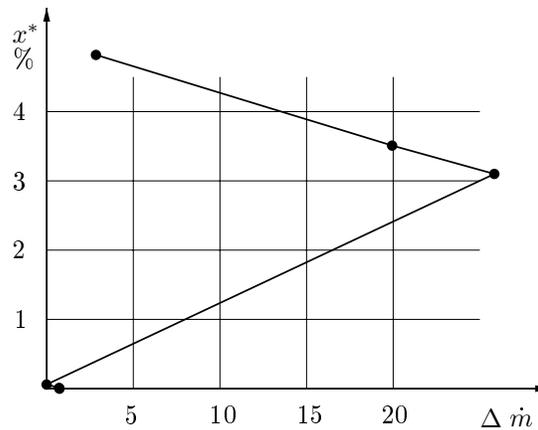
$y$ mol %	$x$ mol %	Kínálat g/s	Kínálat g/s
7.00	4.82	0.00	2.84
5.10	3.51	17.10	19.94
4.51	3.10	23.00	25.84
0.10	0.06	-2.84	0.00
0.03	0.01	-2.12	0.72
0.01	0.00	-2.10	0.74

A koncentráció növelésének és csökkentésének igényei koncentráció-anyagáram diagramokon egyenes vonallal ábrázolhatók. Az anyagáram-tengelyen az egyes áramok által fölvevett vagy leadott szennyező komponens mennyiségét (pontosabban áramát) tüntetjük föl, a koncentráció-tengelyen az ekvivalens egyensúlyi koncentráció-értékeket ábrázoljuk a megadott MAC-kal eltolva (*shifted*). Esetünkben a G1 áram 62.73 g/s szennyezőt, a G2 áram 5.09 g/s szennyezőt ad le, az L1 áram pedig 69.92 g/s szennyezőt vesz föl. Az energetikai CC mintájára koncentráció összetett vonalak (CCC, *Concentration Composite Curves*) szerkeszthetők. Ezek az anyagáram-tengely mentén eltolhatók, s szélső esetben érintkezhetnek. A pinch pont itt is jellemző a feladatra.

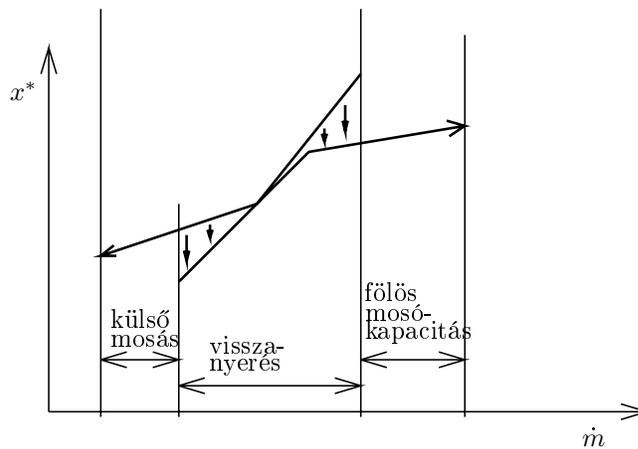
A feladatban szereplő (reális) koncentráció- és anyagáram-értékek olyanok, hogy azok CC diagramja csak nagyon nagy léptékben mutatná a diagram jellegét. A koncentráció GCC diagram (CGCC) még inkább ábrázolható (**3.3. ábra**). A CGCC és a CCC diagramok értelmezése céljából egy fiktív rendszer CCC vonalait mutatja a **3.4. ábra**.

Az ábráról a szokott módon leolvasható:

- A folyamat áramainak kihasználatlan kinyerőképessége
- A külső kinyerőszerrel kinyerendő anyagmennyiség
- A belső anyagcsere (az integráció mértéke)



3.3. ábra. A mintapélda CGCC-je

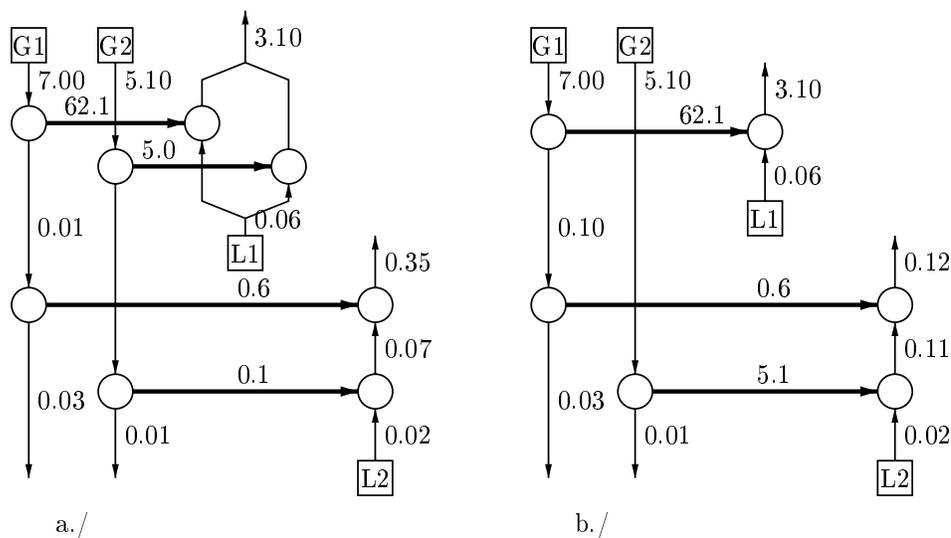


3.4. ábra. CCC értelmezése

- A pinch pont elhelyezkedése a koncentráció-skálán

Az anyagcsere-hálózat tervezésére ugyanolyan, vagy hasonló szabályok érvényesek, mint az energia-visszanyerő rendszerek tervezésére. A tervezést célszerű a pinch felől elkezdni és két irányban távolodva folytatni. Szükség esetén ugyanúgy elágaztatást kell alkalmazni a minimális külső kinyerőszer alkalmazásához, mint az energia-visszanyerő rendszerek esetén a minimális külső hőforgalomhoz. A vizsgált mintafeladat minimális külső kinyerőszer alkalmazó megoldását a **3.5. a./ ábra** mutatja rácsábrázolással. A hálózat természetesen egyszerűsíthető, ha megenged-

jük a minimumnál több kinyerőszer alkalmazását. Ekkor a metanol kilépési koncentrációja is megváltozhat. A **3.5. b./ ábrán** vázolt rendszerben a felhasznált metanol-áram mennyisége 5.6667 kg/s.



3.5. ábra. Anyagvisszanyerő hálózatok

## 3.2. Vízhasználó hálózatok

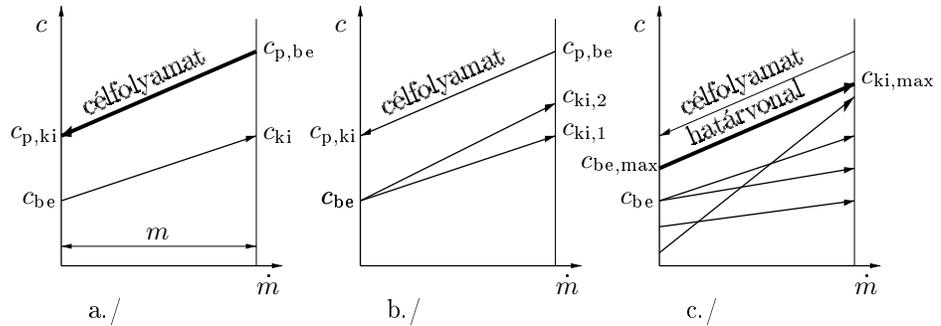
### 3.2.1. Vízvonal, határvonal

A vegyiüzemek számos egységében használnak viszonylag tiszta vizet bizonyos anyagok kimosására, vagy más célból. Ezekben a helyeken a víz szennyeződik. A felhasznált vízáramtól és más paraméterektől függően a szennyeződés mértéke különböző lehet. Szintén különböző feltételeket írhatunk elő a művelethez felhasznált víz kezdeti szennyeződésének maximumára az egyes esetekben. Mivel a különböző helyeken a felhasznált víz kezdeti tisztaságára és a kibocsátott víz szennyezettségére vonatkozó korlátok műveletenként különböznek, kézenfekvő lehetőség az egyik egységből kibocsátott víz felhasználása a másik egységben. Ezzel a felhasznált friss víz, s ugyanolyan mértékben a kibocsátott szennyvíz mennyisége csökkenthető.

A víz újrafelhasználásának elemzéséhez kissé módosítjuk a 3.1. alfejezetben alkalmazott formalizmust és diagramokat. A vízre vonatkozó igényeket azonnal koncentráció-komponensáram ( $C-m$ ) -diagramban rajzoljuk fel. Az  $m$ -tengelyen a

műveletben a víz által időegység alatt felvett szennyező anyag mennyiségét tüntetjük fel. Ez szennyező komponensenként különböző lehet. Ebben az alfejezetben azonban csak az egyetlen szennyező komponens esetét tárgyaljuk.

Az **3.6. a./ ábrán** jobbról balra lefelé haladó irányított vonal képviseli a műveletbeli céláram koncentrációját a leadott szennyezés függvényében. Az  $m$ -tengely a  $H$ -tengelyhez hasonlóan relatív, vagyis az abszolút helyzet nem fontos, hanem az irányított vonalak vetülete képviseli a leadott komponens-mennyiséget (az energetikai vizsgálatoknál ennek a  $Q$  hőteljesítmény felel meg). A  $C$  koncentrációértékek természetesen abszolútak. Az alkalmazott víz koncentráció-vonala vele szemben, alatta halad. A vízbeli koncentráció általában kisebb a célárambelinél.



3.6. ábra. Vízvonal és határvonal

Ugyanaz a feladat, illetve ugyanaz a kinyerés különböző vízmennyiségekkel is megvalósítható. Ha a felhasznált víz kezdeti szennyezettsége változatlan, akkor a kevesebb víz végső szennyezettsége nagyobb, a több vízé kisebb. Ezeknek az eseteknek meredekebb és laposabb vízvonalak felelnek meg, a **3.6. b./ ábra** szerint. Ha a felhasznált víz kezdeti koncentrációja is változhat, akkor nagyon sokféle vízfelhasználással oldható meg a feladat. A gyakorlatban kijelölhetjük a kezdeti koncentráció maximumát és a végkoncentráció maximumát, mint korlátozó feltételeket. A kettő közé húzott vonalat nevezzük **határvonallnak** (*limiting water profile*). Ilyet mutat a **3.6. c./ ábra**. A tervezés végén az alkalmazott víz vonala ettől eltérő lehet (általában az is), de mindig csak lefelé térhetünk el a határvonaltól. Célunk lesz a minél meredekebb vízvonal kijelölése (minimális vízáram), és lehetőség kihasználjuk a maximális belépési koncentrációkat, hogy maximalizáljuk a víz újrafelhasználását.

A továbbiakban a céláramot jellemző vonalat nem használjuk, arra csak a határvonal definiálásához és értelmezéséhez volt szükség. Szükség esetén azonban még visszatérünk a **3.6. c./ ábrára**, hogy értelmezzük a vonalon végzett egyes műveleteket.

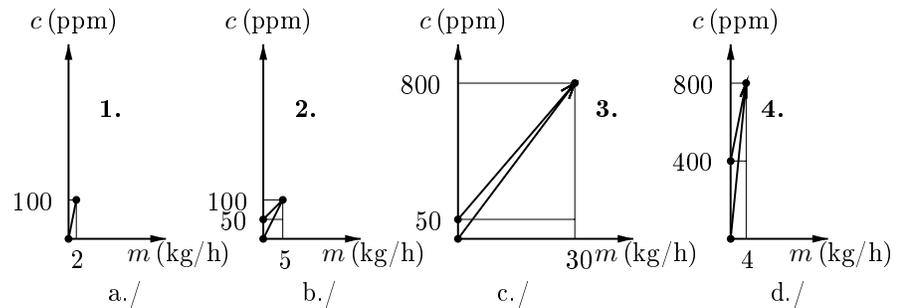
### 3.2.2. Összetett határvonal (LCC) és pinch

Az **3.5. Táblázatban** négy vízfelhasználó folyamat határadatait soroltuk fel (Wang & Smith, 1994).  $V$  jelöli a víz tömegáramát t/h-ban, ami kb. azonos a  $m^3/h$  térfogatárammal. A mértékegységek olyanok, hogy  $V \times \Delta c$  g/h-ban adja meg  $m$ -et. Például az 1. folyamatban  $20 \times (100 - 0) = 2000$  g/h, vagyis 2 kg/h. A négy folyamat együttes terhelése 41 kg/h. A felhasználandó vízmennyiség újrafelhasználás nélkül azonos lenne az egyes felhasználások összegével, vagyis 170 t/h lenne. Az 1. és a 2. folyamat kibocsátott vizei felhasználhatók a 4. folyamathoz, így azonnal látszik, hogy a felhasználás kevesebb, pl. 160 t/h is lehet.

3.5. táblázat. Vízhasználási mintapélda (Wang és Smith, 1994)

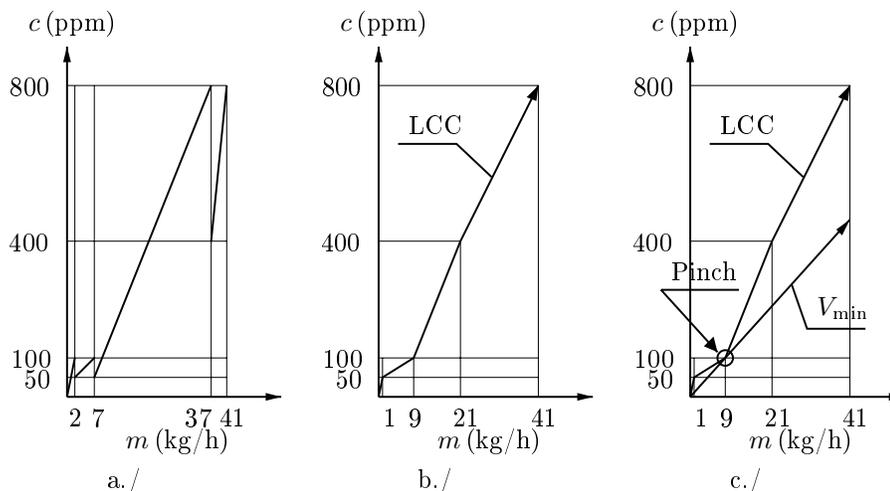
folyamat	$m$ (kg/h)	$c_{be}$ (ppm)	$c_{ki}$ (ppm)	$V$ (1000 kg/h)
1	2	0	100	20
2	5	50	100	100
3	30	50	800	40
4	4	400	800	10

A táblázatban azonban csak a határvonal meredekségéhez tartozó vízfogyasztást tüntettük fel. Az egyes folyamatok határvonalait és a szennyezetlen friss víz felhasználásához tartozó minimális vízfogyasztású vízvonalaikat a **3.7.ábra** mutatja. Ha mind a négy folyamathoz szennyezetlen friss vizet használunk, akkor az egyes folyamatokhoz felhasznált víz mennyisége kisebb, mint a táblázatban adott vízmennyiség. A felhasznált vízmennyiségek ekkor: 20 t/h, 50 t/h, 37.5 t/h, és 5 t/h, vagyis összesen 112.5 t/h friss vízre lenne csak szükség.



3.7. ábra. Wang és Smith feladatának folyamatai

Ha a **3.8. a./ ábra** egymás mellé helyezett határvonalaiból az energetikai



3.8. ábra. LCC szerkesztése és a minimális vízfogyasztás megállapítása

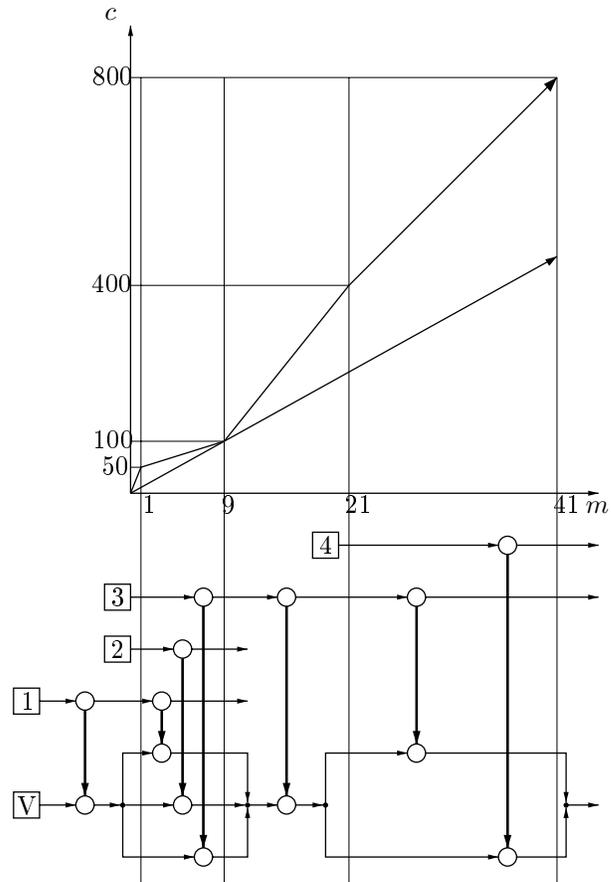
pinch technikánál megismert módon összetett vonalakat készítünk, akkor a **3.8. b./ ábrán** látható **összetett határvonalat**, vagy **LCC-diagramot** (Limiting Composite Curve). A valóban felhasznált friss víz vonalának ezen összetett vonal alatt kell futnia. Minél meredekebb a *vízfogyasztás vonala*, annál kevesebb vizet használunk. A vízfogyasztás elméleti minimumát a pinch (érintés) szabja meg, ezt a helyzetet mutatja a **3.8. c./ ábra**. A vízfogyasztás vonalának meredekségéből leolvasható, hogy a minimális vízfogyasztás mindössze 90 t/h.

### 3.2.3. A vízfogyasztó hálózat kijelölése

A minimális vízfogyasztású hálózat kijelölésére két (egyformán alkalmas) módszer is használható.

Az egyik az energetikai problémáknál megismert vertikális tervezés, ami maximális hajtóerőket, s így alacsony beruházási költséget von maga után. Ennél az  $m$ -tengelyt osztjuk szakaszokra, s szükség szerint elágaztató tervezést végzünk szakaszonként. A szakaszolást és a kijelölt hálózat rácsábrázolását mutatjuk be az **3.9. ábrán**. Az egyes szakaszokban annyi részre osztjuk a vízáramot, ahány határvonalból épül fel az adott szakasz összetett határvonal-részlete. Az így megtervezett hálózat természetesen az elágazások miatt bonyolult, de egyszerűsíthető.

Egy másik tervezési eljárás a csatolások minimalizálására törekszik megkerülő kapcsolásokkal. Ennek érdekében a  $C$ -tengelyt osztjuk szakaszokra és így szintetizáljuk a hálózatot. Ezt a szakaszolást és a megfelelő rács-tervezést mutatja a **3.9. ábra**. Az így kialakított kapcsolat is egyszerűsíthető. (Az egyszerűsítés első lépése a koncentráció-határokkal elválasztott, de szomszédos csatolások összevonása. Ilyen

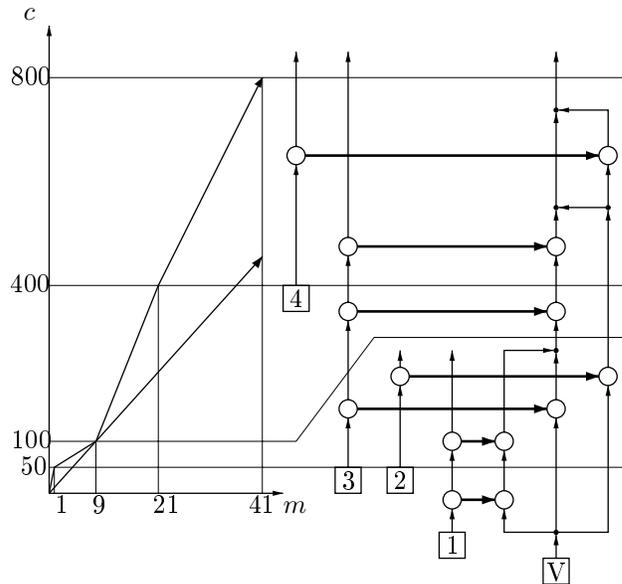


3.9. ábra. Vízfogyasztó hálózat kijelölése anyagáram-intervallumonként

páros a  $c = 400$  határ két oldalán a 3. folyamat két csatolása, és a  $c = 50$  határ két oldalán az 1. folyamat két csatolása.

### 3.2.4. Regenerálás és újrafelhasználás

A felhasznált, tehát szennyezett vizet végleges kibocsátás előtt a környezetvédelmi előírásoknak megfelelően tisztítani kell. A tisztított vizet vagy kibocsátjuk, vagy újra felhasználhatjuk, de ez utóbbi eset elvben nem különbözik a friss víz felhasználásától. A regenerálás is tisztítást jelent. A különböző regeneráló eljárásokra való tekintet nélkül csak annyit érdemes megjegyezni, hogy a regenerálás egy minimális  $c_0$  végkoncentrációval vagy maximális szennyezés-eltávolítási aránnyal jellemezhető. A továbbiakban a  $c_0$  koncentráció értékét adottnak tételezzük föl.



3.10. ábra. Vízfogyasztó hálózat kijelölése koncentráció-intervallumonként

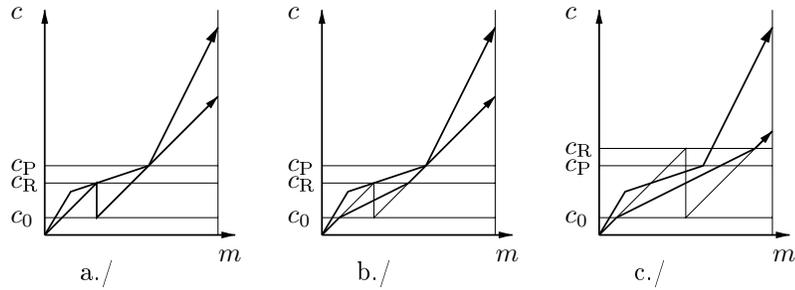
A regenerálásnak és a regenerált víz újrafelhasználásának két esetben van gazdasági és környezetvédelmi jelentősége:

1. A tisztítást közbenső koncentráció elérése után végezzük, így az olcsóbb, mint a teljesen szennyezett víz regenerálása.
2. A regenerálás során nem érünk el olyan tisztaságot, mint a kibocsátás előtti kezelésnél (tehát olcsóbb), de ez a minőség is elegendő a műveletek elvégzéséhez.

A hálózat szempontjából is kétféle regenerációs rendszert lehet megkülönböztetni:

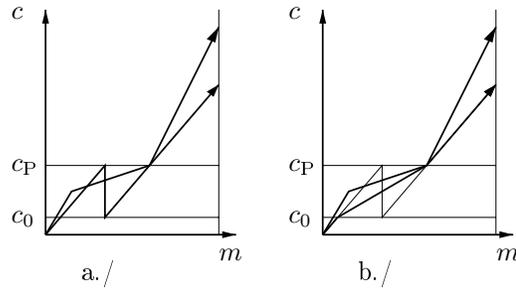
1. A regenerált víz felhasználása a hálózat egy más (későbbi) pontján.
2. A regenerált víz visszaforgatása (recirkulációja) és felhasználása.

Először a **recirkuláció nélküli** esetet tárgyaljuk. Megvizsgáljuk, miként változik a minimális vízfogyasztás, ha a pinch koncentráció alatti vagy fölötti  $c_R$  koncentrációjú vizet regenerálunk. A **3.11. a./ ábrán** a vízfogyasztás vonalán a regenerálást függőleges irányú hirtelen koncentrációcsökkenés képviseli. A törés után a vízfogyasztás vonalának meredeksége változatlan. Ez a meredekség nagyobb a regenerálás nélküli minimális meredekségnél, így a vízfogyasztás csökken. A regenerálás koncentrációját és a vízfogyasztást úgy választottuk meg, hogy a vonal érinti az LCC-t, vagyis pinch-helyzet alakult ki. Ennek ellenére a fogyasztás nem minimális.



3.11. ábra. Vízvonalak regenerálással a Pinch alatt

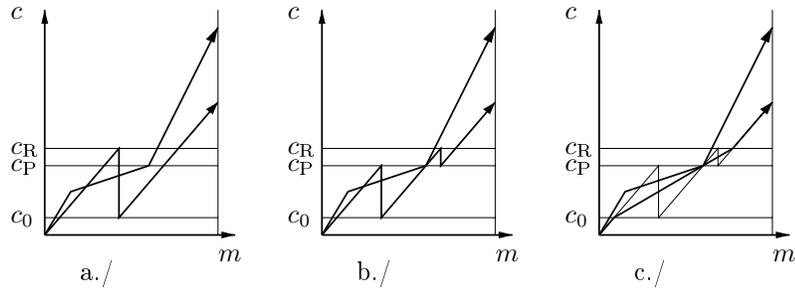
Ennek megmutatásához először képezzük a regenerálás előtti és utáni vízfogyasztás összetett vonalát (**3.11. b./ ábra**). Az így kapott diagram is pinch-helyzetű. Ha azonban a regenerálás előtt a víz szennyezettsége (változatlan fogyasztás mellett) nagyobb koncentrációt érhetne el, akkor az összetett fogyasztás vonalának második szakasza a **3.11. c./ ábra** szerint alakulna, vagyis nem érintené a határvonalat. Ebből következik, hogy nagyobb koncentrációt megengedve csökkenthetjük a vízfogyasztást. A **3.12. ábra** mutatja a vízfogyasztás minimumát



3.12. ábra. Vízvonal regenerálással a Pinch-koncentrációnál

abban az esetben, ha a pinch-koncentráció elérésekor regenerálunk. Az előző elemzést megismételve nem távolodunk el a pinchtől, vagyis a fogyasztás minimális. A **3.12. ábra** vízvonala meredekebb, mint a **3.11. ábráé**. A vízfogyasztás az előzőnek  $\frac{6}{7}$ -e.

Ha most ugyanekkora (a példában a  $\frac{6}{7}$ -szeres, vagyis minimális) vízfogyasztás mellett a regenerálási koncentrációt a pinch koncentrációjánál magasabbnak választjuk, mint pl. a **3.13. a./ ábrán**, akkor a javaslat elemzéséhez a regenerálásos vízfogyasztás vonalát a **3.13. b./ ábra** szerint két részre bonthatjuk. A megfelelő összetett vízfogyasztási vonalát a **3.13. c./ ábra** mutatja. Ezekről leolvasható,



3.13. ábra. Vízvonal regenerálással a Pinch-koncentráció fölött

hogy (i) a vízfogyasztás minimális marad, (ii) a pinch fölötti regenerálás fölösleges, tehát haszontalan költséget vonz.

Összefoglalva: **Regenerálás esetén**

1. a vízfogyasztás minimális, ha a regenerálási koncentráció nem kisebb a pinch-koncentrációnál;
2. a pinch fölötti regenerálás nem csökkenti és nem növeli a vízfogyasztást, viszont fölösleges, tehát káros.

A minimális vízfogyasztás egyszerűen számítható, ha figyelembe vesszük, hogy a regenerált víz mennyisége megegyezik a regenerálandó víz mennyiségével, vagyis a meredekség nem változik. A **3.14. ábráról** leolvasható, hogy

$$\frac{c_P - c_0}{m_P - m_R} = \frac{c_P}{m_R}$$

ahonnan  $m_R$  kifejezhető, majd a minimális vízáram a meredekségből számítható:

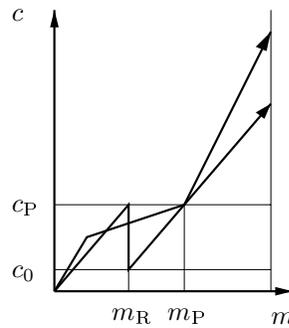
$$V_{\min} = \frac{m_R}{c_P}$$

Gazdasági megfontolások alapján néha célszerű részleges regenerálást alkalmazni, ekkor a regenerálandó áram kevesebb a minimális fogyasztásnál, és a számítás kissé módosul.

### 3.2.5. Regenerálás és visszaforgatás

Még tovább csökkenthető a friss víz fogyasztása, ha a regenerált vizet nem csak más, "később következő" folyamatokban használjuk újra, hanem a regenerálás előtti folyamatokban is felhasználjuk, azaz *visszaforgatjuk*.

Ha a regenerálással elérhető  $c_0$  koncentráció nem nagyobb, mint a friss víz szennyezettsége (ami nagyon is lehetséges), akkor elvben egyáltalán nincs szükség friss



3.14. ábra. Minimális vízfogyasztás meghatározása regenerálás mellett

vízre, hanem a technológiában úgy forog a víz, mint bármely más regenerált oldószer. Az elkerülhetetlen veszteségek miatt ekkor csak pótlásra van szükség. Egyáltalán nem biztos, hogy ez gazdaságos megoldás, mivel a regenerálás is költséges. A gyakorlatban gazdasági optimumot keresünk.

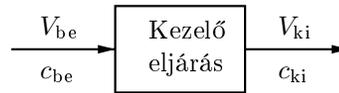
Ha a  $c_0$  koncentráció nagyobb, mint a friss víz szennyezettsége (ami szintén lehetséges, illetve valószínű), akkor mindenképpen szükség van annyi friss vízre, amennyit az összetett vonal (LCC)  $c_0$  koncentráció alatti szakasza igényel. A  $c_0$  koncentráció fölötti szakaszra az előző bekezdés megfontolásai alkalmazhatók.

### 3.3. Elosztott vízkezelés

#### 3.3.1. A vízkezelő hálózatok szintézisének feladata

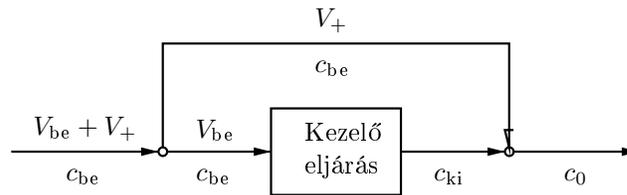
Bonyolult vegyi üzemekben, komplexekben sok, különböző helyen keletkezik szennyvíz, általában különböző mértékű szennyezettséggel. Ezeket a szennyvizet kibocsátás előtt kezelni kell. A kezelés többnyire mechanikai és kémiai előkezelésből, biológiai kezelésből és utótisztításból áll. A folyamatok műveleti részleteitől függetlenül a kezelések kijelöléséhez a következőket kell figyelembe venni:

1. Az egyes kezelési műveletek vagy folyamatok egymást követik, és e sorban a szennyezettség mértéke csökken.
2. A kezelési folyamatokban többnyire elő van írva a  $c_{be, max}$  maximális belépési koncentráció, mely fölött az eljárás nem működik, és a  $c_{ki, min}$  minimális kilépési koncentráció, melynél tisztább vizet az eljárással nem lehet előállítani (**3.15. ábra**). E korlátok betartása mellett azonban a két koncentráció folytonosan vagy lépcsőszerűen változhat.
3. A tisztítási feladat az adott  $c_0$  koncentráció elérése. Ha ez a koncentráció lényegesen nagyobb, mint ami a felhasznált eljárással elérhető (vagyis ha a tisztító eljárással lényegesen tisztább vizet is elő lehet állítani, mint



3.15. ábra. Vízkezelő eljárás önmagában

az előírt érték), akkor esetenként gazdaságos lehet a szennyvíznek csak egy részét erősen megtisztítani, s a másik részével a kezelési folyamatot megkerülni, a **3.16. ábra** szerint. Ezáltal a kezelő berendezésbe táplált szennyvíz árama csökken.



3.16. ábra. Vízkezelő eljárás megkerüléssel

A betáplált áram:

$$V_{be} = \frac{m}{c_{be} - c_{ki}} \quad (3.1)$$

4. A szennyvízkezelés éves költsége a be- és kilépési koncentrációk és a kezelőbe táplált szennyvíz-áram függvénye. (A kilépő vízáram eltérhet a belépőtől, de a felsorolt változók függvénye.)

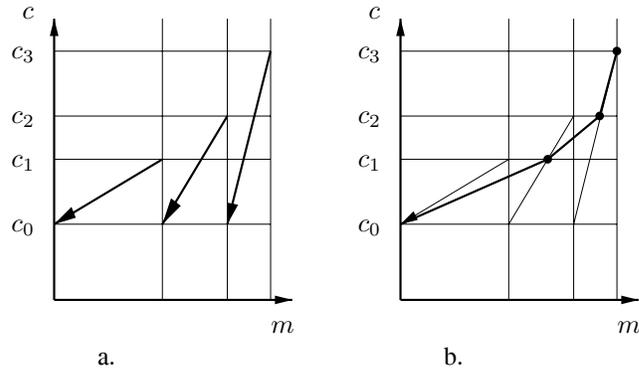
$$K = f_{ccV}(c_{be}, c_{ki}, V_{be})$$

A megkerülések alkalmazásához rögzítjük a be- és kilépési koncentrációkat, s így a költség csak a feldolgozott áram függvénye. Ha adott az eltávolítandó szennyezés  $m$  mennyisége, akkor a koncentráció változása a tápáram mennyiségének függvénye, (3.1) szerint. Így a költség felírható pusztán a tápáram függvényében:

$$K = f_V(V_{be})$$

5. A kezelési eljárások éves költsége a belépő vízáram függvényében az eljárás típusától függően változatos alakú lehet. Lehet növekvő, csökkenő, vagy minimumon áthaladó is.

**Az egyes helyeken képződő szennyvizeket tetszés szerint egyesíthetjük és együttesen kezelhetjük, vagy a szennyvízkezelő rendszer különböző**

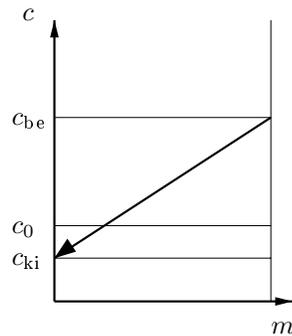


3.17. ábra. Szennyvizek kezelési vonalai és azok összetett vonala

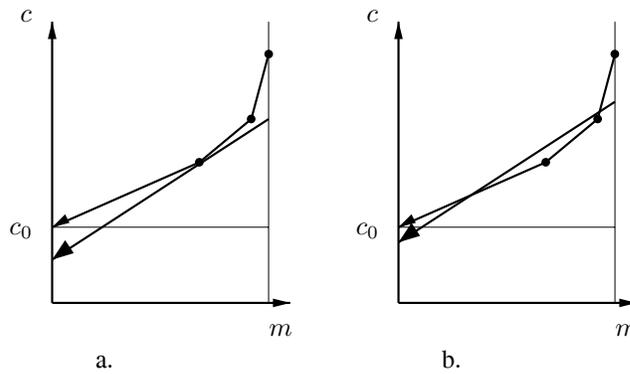
pontjaihoz vezethetjük. Alkalmazhatunk megkerüléseket, elágaztatásokat. Feladatunk az, hogy a költségfüggvények és a korlátozások ismeretében minimális költségű szennyvízkezelő hálózatot jelöljünk ki.

### 3.3.2. Egyetlen kezelési eljárás esete

Szennyvíz-áramok tisztítási feladatait  $C$ - $m$  diagramon a 3.17. ábra szerint ábrázolhatjuk. A vonal vetülete arányos az eltávolítandó mennyiséggel, meredeksége fordítva arányos a víz áramával. Több ilyen áram vonalát a 3.17. a./ ábra szerint egymás mellé rajzolva a már ismert módon szerkeszthetjük meg az összetett szennyvíz-vonalat, amit a 3.17. b./ ábra mutat.



3.18. ábra. Szennyvízkezelő eljárás vonala



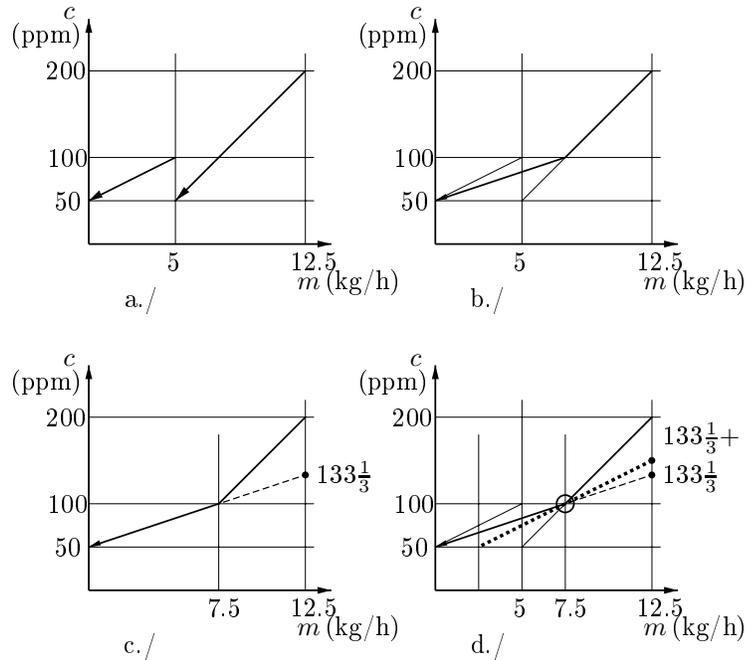
3.19. ábra. Szennyvízkezelő vonala pinch helyzetben és fölötté

Az egyetlen vízkezelő eljárást ugyanígy ábrázolhatjuk  $C$ - $m$  diagramon, ezt mutatja a **3.18. ábra**. A  $c_{ki}$  végkoncentráció célszerűen kisebb az elérendő  $c_0$  koncentrációnál, vagyis a szennyvizeknek csak egy részét vezetjük a kezelőbe, majd a tisztított vizet a tisztítatlannal elkeverve kapjuk a kívánt  $c_0$  koncentrációjú, kibocsátható terméket.

Adott  $V$  áram mellett minél nagyobbak a koncentrációk, annál kisebb a költség. Ezért minimális költséget adott áram, vagyis adott meredekség mellett úgy kapunk, hogy a vízkezelő vonalát egészen az összetett vonalig, vagyis pinch helyzetbe toljuk fel (**3.19. a./ ábra**). Ha a vonalat ennél följebb emelnénk, vagyis azonos feldolgozási arány mellett magasabb koncentrációkkal dolgoznánk (**3.19. b./ ábra**), akkor a keverés után nem érnénk el a kívánt  $c_0$  koncentrációt.

**Példa:**

Két szennyvízáramunk van; az első mennyisége  $V_1 = 100$  t/h, koncentrációja  $c_{1, be} = 100$  ppm, a második áram adatai:  $V_2 = 50$  t/h,  $c_{2, be} = 200$  ppm. A környezetvédelmi előírás  $c_0 = 50$  ppm. Így az 1. áramból elvonandó 5 kg/h szennyezés, a 2. áramból pedig 7.5 kg/h, összesen tehát 12.5 kg/h. A **3.20. a./ ábra** mutatja az egyes vonalakat, a **3.20. b./ ábra** az összetett vonalat. Ha a két áramot egyesítjük, akkor az egyesített áram koncentrációja  $133\frac{1}{3}$  ppm. Ezt a pontot a legalsó szakasz meghosszabbításával metszhetjük ki a 12.5 kg/h értékre emelt merőlegesből (**3.20. c./ ábra**). Ha a 2. áramhoz az 1. áramnak csak egy részét, pl.  $x$  t/h-át keverünk hozzá, a maradék  $100 - x$  t/h árammal pedig megkeverüljük a kezelőt, akkor az elegy koncentrációja 200 ppm alatt és  $133\frac{1}{3}$  ppm fölött lesz, mennyisége pedig nem 150 t/h, hanem  $50 + x$  t/h (**3.20. d./ ábra**). Könnyen kiszámítható, milyen  $c_{ki}$  koncentrációt kapunk, ha ebből az elegyből elvonunk 12.5 kg/h szennyezést. Most azonban először arra vagyunk kíváncsiak, milyen koncentrációt érünk el az első 5 kg/h szennyezés elvonása után, vagyis az  $m = 7.5$  kg/h



3.20. ábra. Szennyvízkezelés példa magyarázata

értéknél. A kezelőbe táplált elegy koncentrációja:

$$c_{be} = \frac{50 \times 200 + x \times 100}{50 + x}$$

Jelöljük  $c_{7.5}$ -tel az 5 kg/h elvonása után kapott koncentrációt, ekkor az elvont szennyezésre vonatkozó mérleg szerint

$$5 = \frac{(c_{be} - c_{7.5}) \times (50 + x)}{1000}$$

ahol az 1000 osztó a ppm, t, és kg közti váltószám. Innen

$$c_{7.5} = 100 \frac{50 + x}{50 + x} = 100 \text{ ppm}$$

vagyis az ilyen keveréssel kapott elegy tisztítási vonala mindig átmegy a (7.5, 100) ponton. Mivel a legkisebb belépési összetétel  $133\frac{1}{3}$  ppm, a kezelési vonal soha nem metszi, hanem mindig csak érinti az igények összetett vonalát. Ha a 2. áramnak is csak egy részét használjuk fel, akkor a belépési koncentrációk minimuma és maximuma is lejjebb kerül, viszont a kezelési vonal nem is érinti az igények összetett

vonalat. Ez a levezetés általában is érvényes, az elérhető koncentrációk maximumát a pinch korlátozza.

Láttuk, hogy különböző keverési és megkerülési arányok mellett a kezelési vonal meredeksége változik, a pinch körül elfordul. Ennek is korlátot szabhat:

1. A fent kifejtett keverési (anyagmérleg) korlát.
2. A kezelési eljárás minimális kilépő koncentrációja,  $c_{ki, \min}$ .
3. A kezelési eljárás maximális belépő koncentrációja,  $c_{be, \max}$ .

E korlátok között a meredekség szabadon változhat.

### 3.3.3. Pinch szabályok

Az optimális tervezés a célfüggvény alakjától függ.

#### Csökkenő költségfüggvény

Ha a költség a vízáram növelésével csökken, akkor maximális feldolgozott vízáramra, vagyis minimális, azaz nulla megkerülésre törekszünk. Ekkor a feldolgozás vonalát az összetett igény vonalának legalsó szakasza, illetve annak meredeksége határozza meg. Az összes áramot elegyítjük, és a kezelőbe vezetjük.

#### Növekvő vagy minimumos költségfüggvény

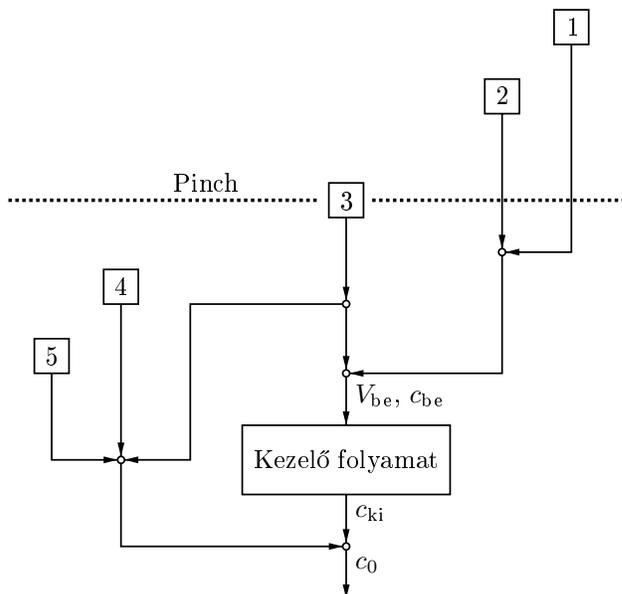
Ha a költség a vízárammal nő, akkor minimális feldolgozott vízáramra, vagyis maximális megkerülésre törekszünk. Ehhez a legmeredekebb kezelési vonal tartozik. Ezt vagy a minimális kilépési koncentráció, vagy a maximális belépési koncentráció szabja meg. Ekkor *a tervezéshez meg kell különböztetnünk a pinch fölötti, pinchről induló, és pinch alatti áramokat.*

A pinch fölötti kezdő-koncentrációjú áramokat maradéktalanul a kezelőbe vezetjük. Ellenkező esetben a megkerülés miatt a feldolgozott áram növekszik, és nem lesz minimális. A pinch alatti koncentrációról induló áramokkal teljesen megkerüljük a kezelőt, ezek kezelése ugyanis nem szükséges. A kívánt szennyezés elvonásához éppen elegendő a pinch fölötti áramok feldolgozása, és az éppen pinchről induló áramok egy részének feldolgozása. Az éppen pinchről induló áramok egy részével megkerültetjük a kezelőt, a másik részét pedig a kezelőbe vezetjük. A kezelési arányt a szennyező anyag mérlege szabja meg.

Ha költség a vízáram függvényében minimumon megy át, akkor az optimális kezelési vonal a két szélső érték közt helyezkedik el. Ebben az esetben ugyanazt az eljárást követhetjük, mint a minimális áramnál, csak a pinch áramok feldolgozási arányát döntési változónak tekintjük, és optimalizálunk.

Összefoglalva (3.21. ábra):

1. A pinch fölött induló áramokat kezeljük.
2. A pinch alatt induló áramokat nem kezeljük.
3. A pinchről induló áramokat részben kezeljük.



3.21. ábra. Elosztott kezelés csökkenő vagy minimumos költségfüggvény esetén

### 3.4. Több szennyező esete

A több szennyező, illetve az elosztott kezelés problémája esetében több kezelő eljárás, továbbá eltérő (pl. veszteséget is leíró) modellek esetében az ismertett módszerek vagy nem, vagy csak lényegesen bonyolultabb változatban alkalmazhatók, amivel elvesztik előnyeiket. Ezekben az esetekben a matematikai programozás módszereit célszerű használni, amit a *Folyamattervezés és modellezés III.-ban* vázolunk.

### 3.5. Ellenőrző kérdések

1. Milyen hasonlóságok és különbségek vannak az energiavisszanyerő hálózatok és a komponenvisszanyerő hálózatok kijelölésének feladata és az alkalmazott ábrázolások között?
2. Mit nevezünk vízvonalnak és határvonalnak? Mi az összetett határvonal?
3. Hogyan határozható meg a minimális frissvíz-fogyasztás?
4. Milyen szennyező-koncentrációnál érdemes vízregenerálást és -újrafelhasználást alkalmazni?

5. Különböző mértékben szennyezett vízárámok esetében milyen koncentrációnál, és milyen mértékű víztisztító eljárást érdemes alkalmazni? Hogyan határozható meg a megfelelő koncentráció?

## 4. fejezet

# Folyamatos rektifikáló rendszerek

Ebben a fejezetben azeotrópiát nem mutató elegyek szétválasztását tárgyaljuk. Feltételezzük, hogy a szétválasztandó komponensek illékonysági sorrendje nem változik az összetétellel vagy a nyomással, pontosabban nem változik a szétválasztó eljárás közben.

Ennek következtében a komponensek illékonyság szerint rendezhetők. A komponenseket vagy sorszámokkal (1, 2, 3, ...,  $M$ ), vagy nagy betűkkel ( $A$ ,  $B$ ,  $C$ , ...) jelöljük, **ami ebben a sorrendben mindig csökkenő illékonyságot** (adott nyomáson növekvő forráspontot) jelent.

### 4.1. Szétválasztási sorrendek

Ebben az alfejezetben feltételezzük, hogy

1. az elegy komponenseit *viszonylag* tisztán szeretnénk kinyerni, azaz viszonylag élesen szeretnénk szétválasztani őket,
2. egyetlen betáplálással és két termékkel (desztillátummal és maradékkal vagy fenéktermékkel) rendelkező, vagyis ún. *hagyományos* oszlopokat alkalmazunk, és
3. az egyes oszlopokban mindig illékonyság szerint *szomszédos* komponenseket választunk szét.

Ez azt jelenti, hogy ha pl. az elegyet az  $A$ ,  $B$ , és  $C$  komponensek alkotják, akkor azt egy oszlopban kétféleképpen választhatjuk szét:

**Egyenes vágás:** Az  $A$  komponens nagy része a desztillátumba, a  $B$  és a  $C$  komponensek túlnyomó része a maradékba kerül. Ennek jelölése  $[A/BC]$ , illetve:

$$[ABC] \implies [A], [BC]$$

**Fordított vágás:** Az  $A$  és a  $B$  komponensek nagy része a desztillátumba, a  $C$  komponens túlnyomó része a maradékba kerül. Ennek jelölése  $[AB/C]$ , illetve:

$$[ABC] \implies [AB], [C]$$

Feltételeink kizárják azt **közbenső** esetet, aminek során az  $A$  komponens nagy része a desztillátumba, a  $C$  komponens nagy része a maradékba kerül, a  $B$  komponens pedig megoszlik a termékek között:  $[ABC] \implies [AB], [BC]$ .

Előfordulhat azonban, hogy egyes *szomszédos* komponenseket nem kívánunk szétválasztani. Ekkor e szomszédos komponenseket egyetlen *pszeudo-komponenssé* vonjuk össze, és úgy kezeljük. Például ha a szétválasztandó elegy propánt, butánt, izobutánt és n-pentánt tartalmaz, és a butánokat nem kell egymástól szétválasztani, akkor azokat egyetlen komponensnek, az elegyet pedig háromkomponensűnek tekintjük.

Háromkomponensű  $[ABC]$  elegy 2 helyen választható ketté, ennél fogva 2 szétválasztási sorrend jelölhető ki:

1. **Egyenes sorrend:**  $[A/BC]$ ,  $[B/C]$
2. **Fordított sorrend:**  $[AB/C]$ ,  $[A/B]$

Négykomponensű  $[ABCD]$  elegy 3 helyen választható ketté, aminek következtében 5 szétválasztási sorrend jelölhető ki:

1.  $[A/BCD]$ ,  $[B/CD]$ ,  $[C/D]$
2.  $[A/BCD]$ ,  $[BC/D]$ ,  $[B/C]$
3.  $[AB/CD]$ ,  $[A/B]$ ,  $[C/D]$
4.  $[ABC/D]$ ,  $[AB/C]$ ,  $[A/B]$
5.  $[ABC/D]$ ,  $[A/BC]$ ,  $[B/C]$

Ezek közül az elsőt nevezzük **egyenes sorrendnek**, az összes többi **"fordított sorrend"**.

Általában is egy  $M$ -komponensű elegy  $M-1$  helyen vágható, és minden szétválasztási sorrendben  $M-1$  **vágás** (kettéválasztás) szerepel. A szétválasztási sorrendek száma  $\frac{2(M-1)!}{M!(M-1)!}$ , ezek közül azt nevezzük *egyenes sorrendnek*, amelyik minden vágásában a legillékonyabb komponenst választjuk le a többtől. Ebben a névhasználatban valószínűleg a szakaszos desztillálás hagyományai őrződnek.

Egy-egy szétválasztási sorrend optimális műveleti tervezése sokváltozós feladat. Döntési változók: oszloponként az oszlop elméleti tányérszáma, a betáplálási tányér sorszám, az oszlop nyomása, refluxaránya, a táp hőállapota, valamint az oszlopközi áramok nagysága és tisztasága. Ha a tányérszámokat és a nyomásokat ideiglenesen rögzítjük, akkor folytonos szélsőértékkeresési feladatot kell megoldani, azonban a keresési tér minden egyes pontjához komoly flowsheting feladat tartozik, melynek megoldása szolgáltatja a szennyező komponensek előre ismeretlen koncentrációit, a szükséges forralási és kondenzálási igényeket, az oszlopok belső anyagáramait, és ebből az átmérőket. Ezeket figyelembe véve az optimális szétválasztási sorrend

megállapítása tisztán matematikai módszerekkel nagyon nehezen megoldható feladat.

#### 4.1.1. Heurisztikus szabályok és terhelési faktorok

Hosszú évek mérnöki tapasztalatai alapján, de a 4.2 alfejezet egyenleteivel alátámaszthatóan ún. *heurisztikus szabályok* állapíthatók meg, melyek segítségével sok esetben kijelölhető az optimális szétválasztási sorrend, vagy legalább a legigéretesebb sorrendek kijelölhetőek, és a biztosan rossz sorrendek elvethetőek. Számos ilyen szabály található a szakirodalomban; ezek alapján az alábbi szabályrendszer is megfogalmazható:

1. Közel ekvimoláris tápösszetétel és szomszédos páronként közel azonos relatív illékonyságok esetén az egyenes sorrend a kedvezőbb.
2. Szomszédos páronként közel azonos relatív illékonyságok esetén a nagy koncentrációjú komponenst célszerű elválasztani a többbitől. Például, ha az  $[A B C D E]$  elegyben a moltörtek tömbje  $x = [0.1, 0.5, 0.2, 0.15, 0.05]$ , vagyis a  $B$  komponensből van sok a tápban, akkor az elegyet  $B$  és  $C$  között érdemes vágni, mert akkor a desztillátumba kerül  $B$  mellett csak 1 komponens marad, míg bármely más vágás esetén több komponens, és nagyobb koncentrációban marad mellette.
3. A valamilyen szempontból "nehéz", vagyis költséges vágásokat célszerű a szétválasztó sor végére hagyni. A vágás nehéz lehet,
  - (a) ha a szétválasztandó komponensek relatív illékonysága lényegesen közelebb van 1-hez, mint bármely másik pár relatív illékonysága (közeli illékonyságú komponensek);
  - (b) ha a két komponens közül legalább az egyiket a többi komponensnél lényegesen tisztábban kell kinyerni, vagy ha az egyik komponenst lényegesen nagyobb arányban kell kinyerni, mint a többbit (a táp komponensáram nagyobb százalékát kell kapnunk a termékben);
  - (c) ha a két komponens egymással azeotrópot képez.
4. Kedvező, ha egy-egy vágásnál a desztillátum és a maradék mólárama megegyezik.

Ezek a szabályok gyakran ellentmondók. Például ha az  $[ABC]$  elegyben  $x = [0.7, 0.2, 0.1]$ ,  $\alpha_{A,B} = 1.03$ ,  $\alpha_{B,C} = 1.7$ , és a komponenseket azonos tisztaságban és közel azonos arányban kell kinyerni, akkor az 1. szabály szerint az  $A/BC$  egyenes szétválasztás, a 3. szabály szerint az  $AB/C$  fordított szétválasztás a kedvezőbb.

A szabályok elsősorban úgy indokolhatók, hogy a nagyobb költségű vágásokat célszerű a többi komponensnél külön, vagyis a sor végén elvégezni. A vágás költségét vagy tényérszámban fizetjük meg (beruházási költség), vagy forralásban és kondenzálásban. Ez utóbbi egyben beruházási költséget is vonz, mivel nagyobb belső áramok nagyobb oszlopátmérővel járnak. Mindenesetre kisebb relatív illékonyság mellett nagyobb mind a minimális elméleti tényérszám, mind a minimális refluxarány, és a korlátok figyelembe vétele mellett egyensúlyozhatunk a beruházási és üzemeltetési költségek között.

Minél közelebb vagyunk a szétválasztó sor elejéhez, annál több komponens van még az aktuális oszlop tápelegében. Ha a nehéz szétválasztást vesszük a folyamat elejére, akkor a nagyobb refluxarányt a többi, az illető vágásban nem érintett komponensre is alkalmaznunk kell, ami többletköltséggel jár (3. szabály).

Ha egy komponens nagy arányban van jelen, és elkülönítését a sor végére hagyjuk, akkor a többi vágás során ez a komponens is jelen van, arányosan növeli a hőközléseket és az oszlopátmérőt, míg ha a folyamat elején leválasztjuk, akkor a többi vágást lényegesen kisebb terheléssel végezhetjük el (2. szabály).

Ha egyik vágás sem lényegesen költségesebb a többinél, akkor az egyenes sorrend azért kedvező (1. szabály), mert (1) a desztillátumban általában tisztább terméket kapunk, mint a maradékban, (2) a forralóban csak az utolsó vágásnál nő magasra a forráspont (mert addig jelen vannak a könnyebb komponensek is).

A 4. szabály az oszlopszakaszok egyenletes terhelésével csökkenti a költségeket, magyarázata bonyolultabb.

A heurisztikus szabályok ellentmondásosságát és bizonytalanságát csökkenthetjük ún. *terhelési faktorok* alkalmazásával. Ilyenek pl. az alábbiak.

A 4. szabály alkalmazását segíti elő a

$$\Delta_k^{(1)} = \frac{D_k}{W_k} \quad (k = 1, 2, \dots, M-1)$$

mérőszámok alkalmazása. Ezek minden lehetséges sorrendre közelítően meghatározhatók, és azt a sorrendet célszerű választani, aminél ezek értéke a legközelebb van 1-hez.

Egy másik terhelési faktor mindkét változata az egyes vágások nehézségét méri:

$$\Delta_k^{(2)} = \left( \frac{F}{T_{NK} - T_{KK}} \right)_k$$

$$\Delta_k^{(3)} = \left( \frac{F}{\alpha_{NK/KK} - 1} \right)_k$$

ahol  $F$  az oszlop tápja,  $NK$  és  $KK$  sorban a szétválasztandó komponenspárban a nehéz és a könnyű komponens indexe (NK: nehéz kulcskomponens, KK: könnyű kulcskomponens),  $T$  az illető komponens normál forráspontja,  $\alpha$  a komponensek relatív illékonyasága. Az egyes sorrendekhez megbecsüljük  $F$  értékeit, kiszámítjuk a fenti faktorokat, és összegezzük őket:

$$\Delta^{(n)} = \sum_{k=1}^{M-1} \Delta_k^{(n)}$$

Azt a sorrendet választjuk, amelyiknél a fenti összeg a legkisebb.

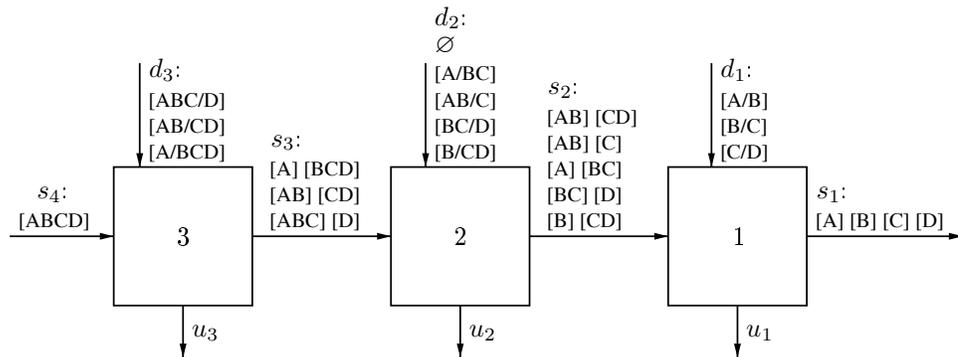
Egy fejlettebb módszer szerint közelítően meghatározzuk az egyes szétválasztási sorrendekben előforduló vágások minimális páraáramát, és azt a sorrendet választjuk, melyben ezek összege a legkisebb. Ez megbízhatóbb eredményt ad, mint a terhelési faktorok, de közelítő számításokon és erősen egyszerűsített célfüggvényen alapul, tehát szintén nem tökéletes.

4.1. táblázat. Számítási eredmény minta. 1. lépés

komponensek száma	elegy	vágás	vágás költsége	sorrend költsége	optimális sorrend költsége
2	AB	A/B	0.752	0.752	0.752
	BC	B/C	0.899	0.899	0.899
	CD	C/D	6.026	6.026	6.026

#### 4.1.2. Sorrend kijelölése diszkrét dinamikus programozással

Tekintsük egymást követő döntéseknek az  $M, M - 1, \dots, 3$  komponensű elegyek vágási helyének meghatározását, és azokon belül az egyéb döntési változók szerinti optimalizálást (refluxarány, tényérszám, stb.). Egészítsük ki a döntési sort egy utolsó taggal, ahol a kétkomponensű elegyek vágásait optimalizáljuk. Ekkor pl. 4-komponensű elegy esetén a **4.1 ábra** szerinti döntési struktúrához jutunk.



4.1. ábra. Vágásokkal kapcsolatos döntési sorozat

Példaképpen a **4.1-3. Táblázatokban** bemutatjuk számítás főbb lépéseit. Az utolsó sor végén kapjuk a minimális költséget, ez most 7.876 egység. Az egyes szétválasztandó részelegyek optimális szétválasztási sorrendjének költségeit az utolsó oszlopban mindig a megfelelő vágás sorába írtuk, így könnyen visszafejtethető az optimális sorrend: [ABC/D], [AB/C], [A/B].

Ahhoz, hogy ezzel a módszerrel megbízható eredményt kapjunk, nem csak megfelelő modellt kell használnunk, hanem megfelelően kell is becsülnünk a sor végére kerülő vágások tápáramait. Ugyanis a számítás a kétkomponensű elegyek szétválasztásának optimalizálásával kezdődik, de a korábbi vágásokban keletkező kétkomponensű elegyek áramát és összetételét előre nem ismerjük.

4.2. táblázat. Számítási eredmény minta. 2. lépés

komponensek száma	elegy	vágás	vágás költsége	sorrend költsége	optimális sorrend költsége
2	AB	A/B	0.752	0.752	0.752
	BC	B/C	0.899	0.899	0.899
	CD	C/D	6.026	6.026	6.026
3	ABC	A/BC	0.997	0.997	1.742
		AB/C	0.990	1.742	
	BCD	B/CD	1.331	7.357	7.007
		BC/D	6.108	7.007	

4.3. táblázat. Számítási eredmény minta. 3. lépés

komponensek száma	elegy	vágás	vágás költsége	sorrend költsége	optimális sorrend költsége
2	AB	A/B	0.752	0.752	0.752
	BC	B/C	0.899	0.899	0.899
	CD	C/D	6.026	6.026	6.026
3	ABC	A/BC	0.997	0.997	1.742
		AB/C	0.990	1.742	
	BCD	B/CD	1.331	7.357	7.007
		BC/D	6.108	7.007	
4	ABCD	A/BCD	1.248	8.255	7.876
		AB/CD	1.399	8.178	
		ABC/D	6.134	7.876	

A sor végére kerülő vágások tápegyeit akkor tudjuk jól becsülni, ha "éles" tisztasági és kinyerési követelményeket kell kielégíteni. Ekkor az egyes vágások tápegyeiben a megfelelő komponensáramokat jó közelítéssel azonosnak vehetjük az egész folyamat tápjában található komponensáramokkal, mert kicsi a veszteség. Ugyanezért a többi komponens áramát nullával közelíthetjük. Ha "lazább" szétválasztásokat is megengedünk, akkor a módszer nem használható.

## 4.2. Underwood egyenletei

A közelítő számításokban általában állandó relatív illékonyságokat tételezünk föl. A relatív illékonyság definíciója:

$$\alpha_{i/j} \equiv \frac{K_i}{K_j}$$

ahol  $K$  az illető komponens egyensúlyi hányadosa:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i}$$

A jelölés egyszerűsítése végett az alábbiakban a relatív illékonyságokat nem a szomszédos komponensek között értelmezzük, hanem minden komponensnek ugyanahhoz a referenciakomponenshez viszonyított relatív illékonyságát használjuk. Ekkor komponensenként definiálhatjuk a relatív illékonyságokat, és egyetlen indexszel látjuk el őket:

$$\alpha_i \equiv \frac{K_i}{K^*}$$

ahol  $K^*$  a referenciakomponens egyensúlyi hányadosa.

Állandó relatív illékonyságok esetén ez egyszerűsíti az egyensúlyi fázisok összetételének kifejezését. Például, ha a folyadékösszetétel ismert, akkor a páramoltörtek így számíthatók:

$$y_i = \frac{\alpha_i x_i}{\sum_j \alpha_j x_j}$$

Ez könnyen belátható, ha figyelembe vesszük, hogy a moltörtek összege 1:

$$y_i = \frac{K_i x_i}{1} = \frac{K_i x_i}{\sum_j y_j} = \frac{K_i x_i}{\sum_j K_j x_j} = \frac{\frac{K_i}{K^*} x_i}{\sum_j \frac{K_j}{K^*} x_j}$$

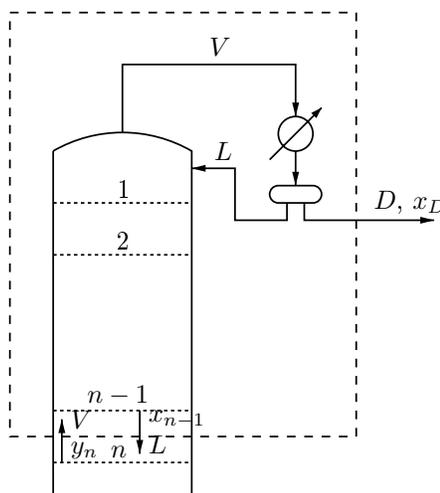
A páraösszetétel ismeretében a folyadékmoltörtek így számíthatók:

$$x_i = \frac{\frac{y_i}{\alpha_i}}{\sum_j \frac{y_j}{\alpha_j}}$$

Biner ("binér", kétkomponensű) elegyek közelítő számítását grafikusán a jól ismert *McCabe-Thiele* diagramon, szerkesztéssel végezhetjük el.

Többkomponensű rendszereknél alkalmazhatjuk a pszeudo-kétkomponensű elegy közelítést, vagyis hogy a vágással kapott termékek komponensáramait összevonjuk, és köztük a kulcskomponensek relatív illékonyságát állapítjuk meg.

Pontosabb eredményt kaphatunk az összes komponens figyelembe vételével. Ennek egyik módszere az *Underwood*-egyenletek alkalmazása. *Underwood (1946-47-48)* a munkavonal egyenletét többkomponensű rendszerekre is általánosította, a következők szerint. A felső munkavonal egyenlete nem más, mint a dúsító (felső) osz-



4.2. ábra. Felső körülkerítés

zlopszakasz komponensmérlege a desztillátumtól a felülről számított  $n-1$ . tányérig, a határokat is beleértve (**4.2 ábra**). Állandó moláris túlfolyást feltételezve, vagyis az oszlopszakasz mentén egyszerűen állandó  $L$  folyadék moláramot és  $V$  pára moláramot véve a mérleg alakja komponensenként:

$$\frac{L}{V}x_{i,n-1} + \frac{D}{V}x_{i,D} = y_{i,n} = \frac{\alpha_i x_{i,n}}{\sum_j \alpha_j x_{j,n}}$$

Szorozzuk meg az egyenlet mindkét oldalát az

$$\frac{\alpha_i}{\alpha_i - \varphi}$$

kifejezéssel, ahol  $\varphi$  egyelőre ismeretlen értékű paraméter ( $\varphi \neq \alpha_i$ ), majd adjuk össze az így kapott egyenleteket ( $i=1, 2, \dots, C$ ) ahol most  $C$  a komponensek száma:

$$\frac{L}{V} \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,n-1}}{\alpha_i - \varphi} + \frac{D}{V} \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \varphi} = \frac{1}{\sum_{j=1}^C \alpha_j x_{j,n}} \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i^2 x_{i,n}}{\alpha_i - \varphi}$$

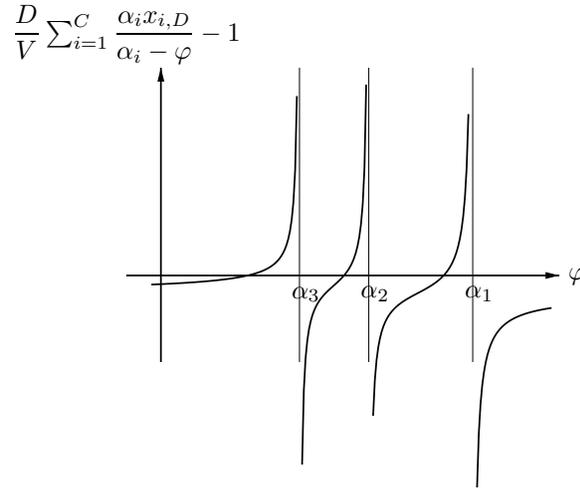
Válasszuk meg  $\varphi$  értékét úgy, hogy a második tag értéke 1 legyen:

$$\boxed{\frac{D}{V} \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \varphi} = 1} \quad (4.1)$$

Ezzel a mérleg alakja átrendezés után:

$$\frac{L}{V} \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,n-1}}{\alpha_i - \varphi} = \frac{\varphi}{\sum_{j=1}^C \alpha_j x_{j,n}} \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,n}}{\alpha_i - \varphi} \quad (4.2)$$

A (4.1) egyenletnek  $C$  gyöke van, mind pozitív, és a gyököket az  $\alpha_i$  relatív illékony-ságok választják el egymástól, a **4.3 ábra** szerint. Az  $\alpha_{i+1}$  és  $\alpha_i$  közé eső gyököt jelöljük  $\varphi_i$ -vel, illetve a 0 és  $\alpha_C$  közé eső gyököt  $\varphi_C$ -vel. Mind a  $C$  gyök kielégíti a



4.3. ábra. Felső oszlopszakasz Underwood egyenletének alakja

(4.2) egyenletet. Válasszuk ki bármelyik két különböző gyököt, például a  $\varphi_{KK}$  és a  $\varphi_{NK}$  gyököket, helyettesítsük őket a 4.2 egyenletbe, majd osszuk el egymással a két egyenletet:

$$\left( \frac{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,n-1}}{\alpha_i - \varphi_{KK}}}{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,n-1}}{\alpha_i - \varphi_{NK}}} \right) = \left( \frac{\varphi_{KK}}{\varphi_{NK}} \right) \left( \frac{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,n}}{\alpha_i - \varphi_{KK}}}{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,n}}{\alpha_i - \varphi_{NK}}} \right)$$

A zárójeles tényezők csak a tényér sorszámában különböznek, és szomszédos tényérokra vonatkoznak. Ugyanezt az egyenletet eggyel lejjebb, vagy eggyel följebb levő

tányérra felírva, majd a közös tényezőket behelyettesítve távolabbi tányérok közti összefüggést kapunk. Az egész dúsító zónára az így kapott összefüggés:

$$\left( \frac{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \varphi_{KK}}}{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \varphi_{NK}}} \right) = \left( \frac{\varphi_{KK}}{\varphi_{NK}} \right)^{N_R} \left( \frac{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,f}}{\alpha_i - \varphi_{KK}}}{\sum_i \frac{\alpha_i x_{i,f}}{\alpha_i - \varphi_{NK}}} \right)$$

ahol az  $f$  a betáplálási tányér indexe,  $N_R$  pedig a dúsító szakasz elméleti tányérszáma. A baloldal számlálója és nevezője is  $V/D$ -vel egyenlő a (4.1) összefüggés szerint, így végül

$$1 = \left( \frac{\varphi_{KK}}{\varphi_{NK}} \right)^{N_R} \left( \frac{\sum_i \frac{\alpha_i x_i}{\alpha_i - \varphi_{KK}}}{\sum_i \frac{\alpha_i x_i}{\alpha_i - \varphi_{NK}}} \right)_f \quad (4.3)$$

A szegényítő szakaszra ugyanilyen levezetéssel kapjuk, hogy a

$$\boxed{\frac{W}{V'} \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,W}}{\alpha_i - \psi} = -1} \quad (4.4)$$

egyenlet  $C$  különböző  $\psi_i$  gyökét meghatározva, bármely kettőből:

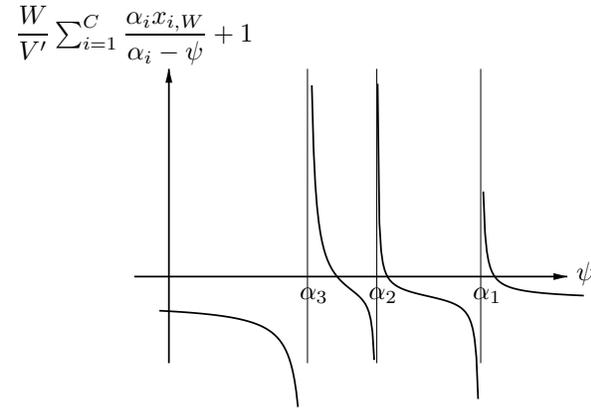
$$1 = \left( \frac{\psi_{NK}}{\psi_{KK}} \right)^{N_S} \left( \frac{\sum_i \frac{\alpha_i x_i}{\alpha_i - \psi_{KK}}}{\sum_i \frac{\alpha_i x_i}{\alpha_i - \psi_{NK}}} \right)_f \quad (4.5)$$

ahol  $V'$  a szegényítő (alsó) oszlopszakasz pára árama,  $W$  a maradék árama. A (4.4) egyenlet  $\psi_i$  gyökei  $\alpha_i$  és  $\alpha_{i+1}$  közé esnek, illetve a  $\psi_1$  gyök  $\alpha_1$ -nél nagyobb (**4.4 ábra**). A refluxarány ( $R = (V - D)/D$ ) ismeretében meghatározhatók a gyökök, és az összes független egyenlet szimultán megoldásával megkapható a táptányér összetétele és a két elméleti tányérszám. Ez azonban elég nehéz feladat, mert  $C$  komponensű elegy esetében a független egyenletek száma  $2 \times C$ .

Biner elegy esetében a táptányér összetétele jól becsülhető, és ezzel a felső és alsó tányérszám egymástól függetlenül számítható.

Többkomponensű elegy esetében a táptányér összetétele nehezebben, de szintén becsülhető, viszont bármely oszlopszakaszra  $C - 1$  független egyenlet írható fel (ennyi független gyökpár van), és a velük számított tányérszámok a becslés miatt különbözők. A gyakorlatban a vágás kulcskomponenseihez tartozó gyökökkel érdemes felírni az egyenleteket.

*Underwood* egyenlet-einek fő haszna, hogy segítségükkel közelítően meghatározható a minimális refluxarány. Bizonyítható, hogy minimális belső moláris anyagáramok és állandó moláris túlfolyás mellett, ha a relatív illékonyságok is állandók, akkor a (4.1) és a (4.4) egyenleteknek van közös gyökük. A közös gyökök a megoszló

4.4. ábra. Alsó oszlopszakasz *Underwood* egyenletének alakja

komponensek relatív illékonyságai közé esnek. Jelöljük az egyik közös gyököt  $\phi$ -vel és helyettesítsük a gyököt mindkét egyenletbe:

$$V = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i D x_{i,D}}{\alpha_i - \phi}$$

$$-V' = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i W x_{i,W}}{\alpha_i - \phi}$$

Adjuk össze a két egyenletet:

$$V - V' = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i (D x_{i,D} + W x_{i,W})}{\alpha_i - \phi}$$

Vegyük figyelembe, hogy  $D x_{i,D} + W x_{i,W} = F x_{i,F}$  és hogy  $Fq = L' - L$ , ahol  $q$  a táp hőállapota. Ezzel az összefüggés alakja:

$$\boxed{1 - q = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,F}}{\alpha_i - \phi}} \quad (4.6)$$

Ha ismerjük a táp összetételét és hőállapotát, akkor meghatározható (4.6) köztes gyöke, majd azt (4.1)-be és (4.4)-be visszahelyettesítve számítható a köztes gyökhöz tartozó  $V$  és  $V'$ , vagyis a minimális páraáramok.

### 4.3. Reverzibilis rektifikálás

#### 4.3.1. A desztillálás termodinamikai hatásfoka

Különböző összetételű anyagok spontán keverednek, ellenben adott összetételű elegy két különböző összetételű eleggyé szétválasztásához munkát kell befektetni. Az izoterm és izobar körülmények között történő szétválasztáshoz minimálisan befektetendő munkát nevezzük **netto szétválasztási munkának**.

A netto szétválasztási munka szoros kapcsolatban van az izoterm és izobar körülmények közötti elegyedési entrópiaváltozással. A (spontán) elegyedés az entrópia (mint rendezetlenség) növekedésével jár. A fordított irányú folyamat (a szétválás) ugyanakkora entrópiacsökkenéssel jár.

Amikor  $\mathbf{x}_D$  összetételű,  $D$  moláramú anyag, és  $\mathbf{x}_W$  összetételű,  $W$  moláramú anyag keveredésével izoterm - izobar módon  $F = D + W$  moláramú,  $\mathbf{x}_F$

$$x_{i,F} = \frac{Dx_{i,D} + Wx_{i,W}}{F}$$

összetételű elegy jön létre, akkor az entrópiánövekedés

$$\Delta S_{\text{mix}} = -R \left[ F \sum_i x_{i,F} \ln \gamma_{i,F} x_{i,F} - D \sum_i x_{i,D} \ln \gamma_{i,D} x_{i,D} - W \sum_i x_{i,W} \ln \gamma_{i,W} x_{i,W} \right]$$

A továbbiakban az egyszerűség kedvéért ideális elegy közelítést használunk, amivel az entrópiánövekedés

$$\Delta S_{\text{mix}} = -R \left[ F \sum_i x_{i,F} \ln x_{i,F} - \left( D \sum_i x_{i,D} \ln x_{i,D} + W \sum_i x_{i,W} \ln x_{i,W} \right) \right]$$

alakú.

Amikor az ilyen  $F$ ,  $\mathbf{x}_F$  elegyet ugyanilyen  $D$ ,  $\mathbf{x}_D$ ,  $W$ ,  $\mathbf{x}_W$  elegyekké választjuk szét, akkor ahhoz az ellenkező előjelű, vagyis

$$\Delta S_{\text{sep}} = +R \left[ F \sum_i x_{i,F} \ln x_{i,F} - \left( D \sum_i x_{i,D} \ln x_{i,D} + W \sum_i x_{i,W} \ln x_{i,W} \right) \right]$$

(negatív) entrópiaváltozással járó folyamatot kell végrehajtani. Mivel (a termodinamika II. Főtétele szerint) zárt rendszerben reális folyamatok entrópiánövekedéssel járnak, és ideális (reverzibilis) folyamatban lehetne az entrópiaváltozás nulla, a szétválasztási folyamat mellett egy másik folyamatnak is le kell játszódnia, melynek entrópiánövekedése ideális esetben  $\Delta S_{\text{mix}} = -\Delta S_{\text{sep}}$ , reális esetben pedig nagyobb. Ez a másik folyamat egyenlíti ki a szétválás entrópiacsökkenését, tehát ez a másik (spontán lejátszódó) folyamat "hajtja meg" a szétválási folyamatot. A meghajtó folyamat minimális entrópiatermelése  $\Delta S_{\text{mix}} = -\Delta S_{\text{sep}}$ , a megfelelő munka a netto szétválasztási munka adott  $T$  hőmérsékleten

$$P_{\text{net sep}} = \frac{-\Delta S_{\text{sep}}}{T}$$

A teljes folyamat energetikai hatásfokát a (szétválásban hasznosuló) netto szétválasztási munka és a valóban befektetett energia vagy munka hányadosa adja:

$$\eta_E = \frac{P_{\text{net sep}}}{P_{\text{befektetett}}} \leq 1$$

Az energia, entrópia, és konstans hőmérséklet közti összefüggés miatt ugyanezt a hányadost kifejezhetjük entrópiával is:

$$\eta_S = \frac{-\Delta S_{\text{sep}}}{\Delta S_{\text{meghajtó}}} \leq 1$$

A hagyományos rektifikálás esetén a meghajtó folyamat az (esetleges) előmelegítőknél és a forralóban felvett magas hőmérsékletű, ezért nagy értékű hőenergia elértéktelenedése. Az elértéktelenedett hőenergia távozik a kondenzátorban és a termékkihűtőkben. Ha az (izoterm folyamat feltételezéséhez szükséges) előmelegítő és termékkihűtő részfolyamatoktól eltekintünk, akkor az entrópiatermelést az annak fő részét kitevő kondenzálási és forralási entrópiatermeléssel közelíthetjük:

$$\Delta S_{\text{meghajtó}} \approx \frac{Q_{\text{kond}}}{T_{\text{hűtő}}} - \frac{Q_{\text{forr}}}{T_{\text{fűtő}}}$$

A hagyományos rektifikálás esetében  $Q_{\text{forr}}$  és  $Q_{\text{kond}}$  azonos nagyságrendű hőteljesítmények, és beszélhetünk egyszerűen  $Q$  hőteljesítmény elértéktelenedéséről a  $T_{\text{fűtő}}$  és  $T_{\text{hűtő}}$  hőmérsékletek között. E két hőmérséklet *nem* a forralási és kondenzálási hőmérséklet, hanem a fűtőközeg és a hűtőközeg hőmérséklete.

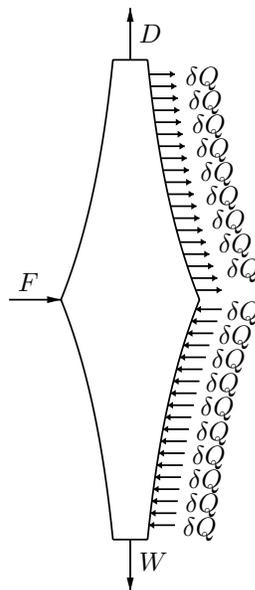
Mindezek alapján a hagyományos rektifikálás termodinamikai hatásfoka becsülhető. Ipari folyamatokat elemezve a következő tájékoztató hatásfokokat kapjuk:

Folyamat	hatásfok
Levegő szétválasztása alacsony hőmérsékleten	0.18
Atmoszférikus és vákuum desztilláció	0.12
Pirolízisgáz-szétválasztás	0.05
Izotópszétválasztás	0.0001

### 4.3.2. Biner elegy reverzibilis desztillálása

A hagyományos rektifikálás alacsony hatásfokának oka az, hogy e folyamat nagyon távol van az ideálistól. Az ideális folyamatnak végtelenül kis lépésekben, végtelenül kicsiny hajtóerőkkel, azaz egyensúlyi folyamatokon keresztül kellene lejátszódnia.

Ennek megfelelően a reverzibilis desztilláló oszlopban mindenhol egyensúlyban van nem csak az egy szintről felszálló pára és az ugyanazon szintről lecsorgó folyadék, hanem az egymással szemben egymás mellett elhaladó pára és folyadék is egyensúlyban van egymással. Ez csak úgy lehetséges, hogy a desztilláló oszlop minden szintjén a munkavonal érinti az egyensúlyi vonalat. Ennek következtében a munkavonal nem lehet egyenes. E görbe munkavonal úgy hozható létre, hogy



4.5. ábra. Reverzibilis desztilláló oszlop, végtelen sok fokozat

(ugyancsak a végtelenül kicsiny lépések elve szerint) minden szinten végtelenül kicsiny hőközlések történnek, és végtelen sok elméleti fokozat jellemzi az oszlopot.

A táp fölött a táptól a kondenzátorig végtelen sok tányér mindegyikén végtelenül kicsiny hőelvonás egyre csökkenő pára moláramot hoz létre. A táp alatt a táptól a forralóig végtelen sok tányér mindegyikén végtelenül kicsiny hőbevezetés fölfelé egyre növekedő, lefelé egyre csökkenő pára moláramot hoz létre (**4.5 ábra**). Ezen kívül az oszlop végein is egyensúlynak kell lenni, tehát csak egyensúlyi (részleges) forraló, és egyensúlyi (részleges) kondenzátor (deflegmátor) használható. További követelmény, hogy különböző összetételű áramok ne keveredjenek, ezért a betáplálási tányért úgy kell megválasztani, hogy forrásponthoz a táphely folyadékösszetétele megegyezzen a tápösszetétellel, harmatponthoz a táphely páraösszetétele megegyezzen a tápösszetétellel, vegyes betáplálás esetén is a keletkező fázisok összetétele megfelelő legyen. Végül a nyomásvesztéseket is ki kellene küszöbölni, és a reverzibilis desztilláló oszlopban nulla nyomásesést kellene biztosítani.

Fonyó közlése szerint egy 30 bar nyomású etilén - etán - propán -bután elegy  $C_2/C_3$  vágásánál a veszteségek a **4.4 Táblázat** szerint rendezhetők. Adiabaticusnak nevezzük az oszlopot, ha csak a forralóban és a kondenzátorban történik hőközlés, az oszlop fala szigetelt. Látható, hogy a legnagyobb hatásfokcsökkenés az oszlopmenti hőközlésről az adiabaticus módra való áttéréskor következik be. Lényegesen kisebb, de számottevő a minimális és reális refluxarány közti lépés, valamint

4.4. táblázat. Rektifikálás termodinamikai hatásfoka

modell	hatásfok
$N = \infty$ , reverzibilis	1.00
$N = \infty$ , adiabatikus	0.35
$N$ véges, adiabatikus	$0.83 \times 0.35$
véges, adiab., nyomásesés	$0.97 \times 0.83 \times 0.35$
véges, adiab., $\Delta p$ , $\Delta T$ a hőcseréknél	$0.825 \times 0.97 \times 0.83 \times 0.35$
teljes hatásfok:	0.232

a forralóban és kondenzátorban a véges hőfokkülönbség figyelembe vétele, míg a hidraulikai ellenállások hatása ezek mellett elhanyagolható.

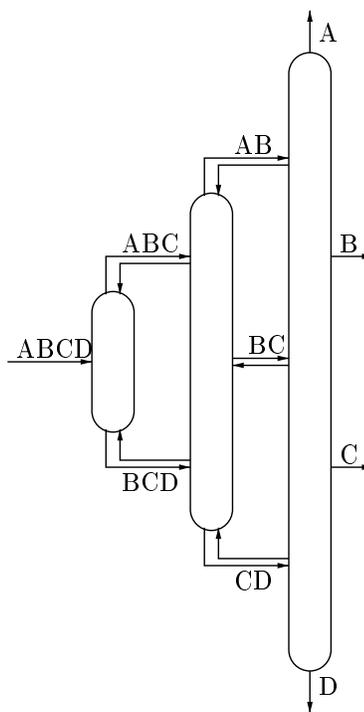
### 4.3.3. Többkomponensű elegy reverzibilis desztilláló rendszere

Többkomponensű elegyek szétválasztásánál a legkönnyebb komponens mellől a nehezebbek visszatartása nagyobb munkabefektetést igényel, mint a két legkönnyebb mellől a náluk nehezebbek visszatartása. Ha a tápban  $C$  szétválasztandó komponens van jelen, akkor a  $C$ . (legnehezebb) komponens visszatartásához kisebb refluxarány kell, mint két vagy több nehéz komponens visszatartásához, vagy könnyebb  $C$ -mentes desztillátumot előállítani, mint  $C - 1$  és  $C$  komponensektől mentes desztillátumot, és legnehezebb a tiszta 1. komponens kinyerése a desztillátumban.

Ugyanígy a tiszta  $C$  maradék előállítása, vagyis az 1., 2. ...,  $C - 1$ . komponensek kiforrálása nehezebb, mint pusztán az 1. komponens visszatartása, és a 2., 3., ...,  $C$ . komponensek előállítása a maradékban. Általában a reverzibilis desztillálás eléréséhez egy-egy oszlopszakaszban csak 1 komponens eltávolítása történhet. Ez úgy valósítható meg, ahogy azt 4-komponensű elegy esetében a **4.6 ábra** mutatja. Az ábra mindhárom oszlopában végtelen sok fokozatot, és minden fokozatban végtelenül kicsiny hőközléseket kell érteni, bár ezt az ábrán nem jelöltük. Minden oszlopközi csatlakozásnál pára és folyadék halad egymással szemben, és ezek egyensúlyban állnak egymással. Az első oszlopban két, a másodikban négy, a harmadikban hat oszlopszekció található, és mindegyik egy-egy komponens eltávolítására szolgál.

## 4.4. Energiatakarékos rektifikáló rendszerek

A bepárlás és a desztillálás a vegyipar legenergiaigényesebb műveletei. A többfokozatú, ellenáramú desztillálásnál a desztillátum  $R + 1$ -szeresét kell páraként előállítani az oszlop fejében ( $R$  a refluxarány), ezért e műveletnél különösen fontos az energiaigény alacsony értéken tartása. A reverzibilis rektifikálás modellje irányt mutat az energiahordozók költségének csökkentéséhez. Az alábbi változatok főként

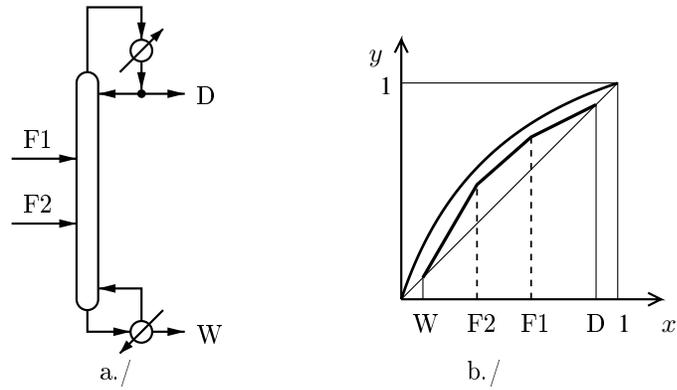
4.6. ábra. Reverzibilis desztilláló rendszer,  $N = \infty$ , sok apró hőközléssel

ezen alapulnak. A hőszivattyús desztillálás olyan megoldás, ami a hőenergia elérték-telenítése helyett közvetlenül mechanikai munkát fektet be, és ezzel hajtja a folyamatot.

#### 4.4.1. Több táp és több elvétel

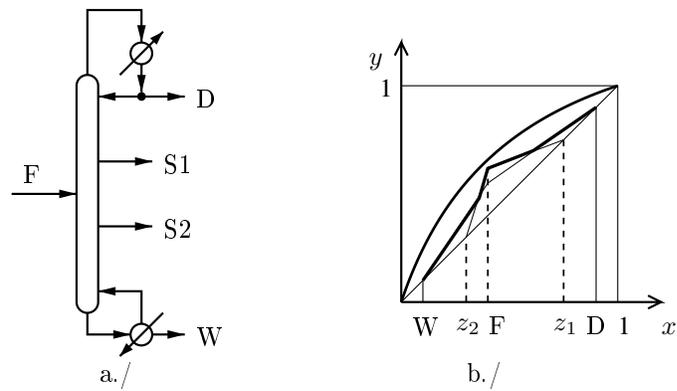
Esetenként több forrásból származó, hasonló összetételű elegyeket érdemes egyetlen oszlopban szétválasztani. Két forrásponthoz ( $q = 1$ ) táp esetét mutatja a **4.7 a./ ábra**. Esetleg egyetlen tápáram előforralásával vagy előkondenzálásával kaphatunk két, különböző összetételű tápot. Ez azzal jár együtt, hogy a munkavonal közelebb kerül az egyensúlyi vonalhoz, és ezáltal csökken a minimális páraáram. Ezt a hatást biner elegy esetében, vagy biner közelítéssel tudjuk szemléltetni. A munkavonal változását a **4.7 b./ ábra** mutatja. Ahogy a munkavonal közelebb kerül az egyensúlyi vonalhoz, a szükséges elméleti tányérszám nő. Azonban adott elméleti tányérszám és adott  $R/R_{\min}$  arány mellett a szükséges refluxarány kisebb, mint egyetlen, egyesített táppal.

Más esetekben érdemes több vágást egyetlen oszlopban végrehajtani, oldalter-



4.7. ábra. Két táp hatása a munkavonalra

mék elvételével. Például egy forrásponthi ( $q = 1$ ) táp és két oldalelvétel esetét mutatja a **4.8 ábra**. Itt a szélső munkavonalak meredekes ugyan, de csökkentett



4.8. ábra. Két elvétel hatása a munkavonalra

termékáramhoz tartoznak, vagyis a páraáram kisebb. Az oldaltermékekhez tartozó munkavonal meredeksége kicsi. A szerkesztéshez használt  $z$  összetételek:

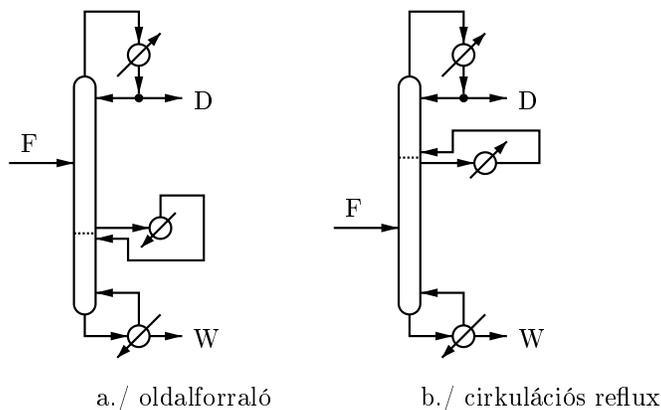
$$z_2 = \frac{Dx_D + S1x_{S1}}{D + S1}$$

$$z_1 = \frac{Wx_W + S2x_{S2}}{W + S2}$$

### 4.4.2. Lépcsős hőforgalmazás

A végtelen sok tányér és minden tányéron végtelenül kicsiny hőközlések helyett a gyakorlatban véges tányérszám mellett néhány ponton alkalmazhatunk közbenső fűtést vagy hűtést.

A táp alatti tányérok esetében a tányérről lecsorgó folyadékot összegyűjtjük, és egy részét az oszlopból kivezetjük, mintha folyadék oldalterméket vennénk el. Azonban ezt a folyadékáramot forralóba vezetjük, és elforralás után a következő tányér alá vezetjük ("oldalforraló"). Ennek az az együttes hatása, hogy az elvétel alatti tányérra vezetünk hőenergiát (4.9 a./ ábra).



4.9. ábra. Lépcsős hőforgalmazás

A táplálás fölötti tányérok esetében nem párát veszünk el és kondenzálunk, mert az technikailag nehéz, ill. nagy nyomásvesztéssel járna. Ehelyett itt is az összegyűjtött folyadékot vesszük el, azt forráspont alá hűtjük, és ugyanazon tányér fölé vezetjük vissza ("cirkulációs reflux"). Ezzel az illető tányérról vonunk el hőenergiát, aminek eredményeképpen a tányérra alulról felszálló pára egy része kondenzál (4.9 b./ ábra).

Mindkét esetben a munkavonalat közelítjük az egyensúlyi vonalhoz, mert a forralás ill. a kondenzálás pontjában a munkavonalnak törése van (változik a pára moláram és a folyadék moláram aránya).

Gazdasági szempontból lényeges, hogy az oldalforralók alacsonyabb hőmérsékletű fűtőközeget igényelnek, mint amire a fenékforralóban van szükség, illetve a cirkulációs reflux hűtésére melegebb hűtőközeg is alkalmas, mint amit a fejkondenzátorban fogyasztunk.

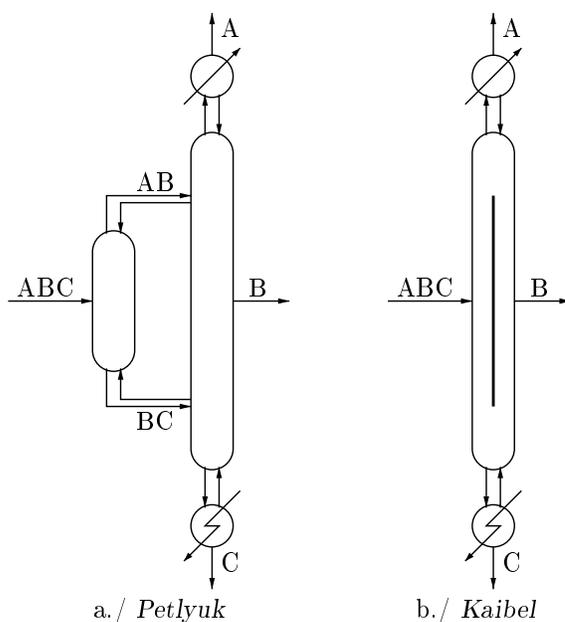
Oldalforralókat alkalmaznak pl. gázfeldolgozó üzemekben. A kőolajfeldolgozás legelején található, vagyis a teljes olajmennyiséget feldolgozó atmoszférikus és vákuum desztilláló üzemekben kb. 5-6 cirkulációs refluxot alkalmaznak, amire az ad

lehetőséget, hogy a feldolgozott elegy nagyon széles forráspont-tartományú. Ennél több közbenső hőforgalmazás már nem gazdaságos.

#### 4.4.3. Termikus csatolás

Ha a többkomponensű elegyek rendszeréből elhagyjuk a végtelen tányérszámokat és a közbenső hőközléseket, akkor a **4.6 ábrán** mutatott rendszerhez hasonló, az anyagáramok (közel) reverzibilis keveredését megvalósító struktúrákhoz jutunk. A közbenső hőközlések elhagyása miatt a rendszer meleg és hideg végein, vagyis az utolsó oszlop tetején és alján kell hőközlést, azaz kondenzálást és forralást alkalmazni. Mivel itt az utolsó oszlopban közölt és elvont hő egy része a többi oszlopon is áthalad, pontosabban a többi oszlopon áthajtott hőáramot is az utolsó oszlop végein közöljük és vonjuk el, azt mondjuk, hogy a korábbi és későbbi oszlopok **termikusan csatolt rendszert** alkotnak. A termikus csatolást az egymással szemközt haladó pára és folyadék áramok biztosítják.

Háromkomponensű elegy esetében a teljes termikusan csatolt rendszert a **4.10 a./ ábrán** mutatott, kéttetes **Petlyuk** (ejtsd: "petljuk") rendszer, illetve a **4.10 b./ ábrán** mutatott egytetes **Kaibel** oszlop, más néven **osztófalas oszlop** valósítja meg. Az utóbbi egyetlen nyomástartó edényből áll, ezért olcsóbb.

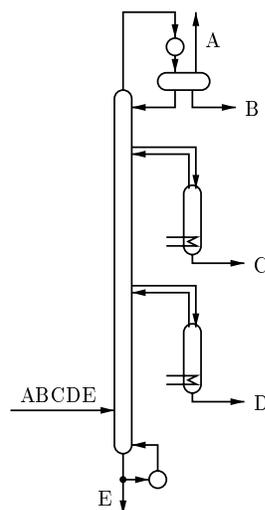


4.10. ábra. *Petlyuk* rendszer és *Kaibel* oszlop

Az ilyen, az előpárló oszlop mindkét végén termikus csatolást alkalmazó rend-

szerek szabályozása kényes feladat. A felszálló párát el kell(ene) osztani a két oszlop között, illetve a felülről lecsorgó folyadékot is el kell(ene) osztani, amihez előbb az egészet ki kell(ene) vezetni a második oszloból. Szabályozás nélkül az oszlopok ellenállása határozza meg a belső anyagáramok eloszlását. Ezen kívül az ilyen rendszerek viszonylag rugalmatlanok, várhatóan csak szűk összetétel tartományban versenyképesek a többi szétválasztó rendszerrel szemben.

Gyakran alkalmazzák viszont a részleges csatolást, vagyis hogy az oszlopokat csak alul vagy csak csak fölül csatolják. Így például a kőolajfeldolgozás atmoszférikus és vákuum desztilláló üzemében több oldalsó kiforráló oszlopot alkalmaznak, a **4.11 ábrához** hasonlóan. Az oldaltermékeket ezekkel a termikusan csatolt oszlopokkal tisztítják elvétel előtt. Ennek fordítottját, az oldaldúsítót alkalmazzák pl. levegő szétválasztásánál.

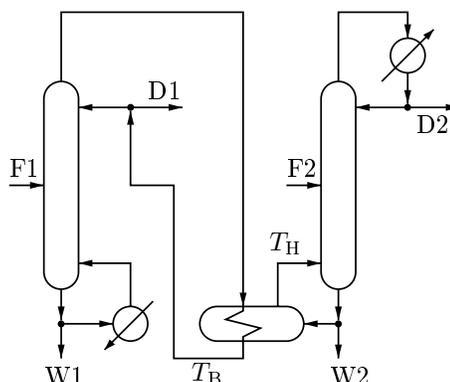


4.11. ábra. Felül csatolt szegényítő (sztripper) oszlopok

#### 4.4.4. Energiaintegráció

A termikus csatolású rendszerekben közvetlen kétirányú anyagforgalom biztosítja a hőenergia konvektív áramát az oszlopok között. Ezzel szemben integrált oszlopokról beszélünk, ha a hőforgalmat kettős célú kondenzátor – forraló hőcserélők valósítják meg. Az egyik oszlop (hőforrás) kondenzátora egyben a másik oszlop (hőhasználó, vagy hőnyelő) forralója, a **4.12 ábra** szerint. Az ilyen kapcsolat megvalósításának feltétele, hogy a forrás oszlop párájának buborékpontja nagyobb legyen a nyelő oszlop fenekén összegyűlő folyadék harmatpontjánál.

A buborék- és harmatpont az összetétel és a nyomás függvénye. Az összetételeket



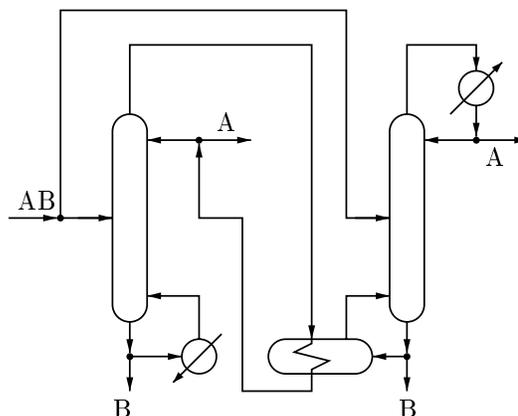
4.12. ábra. Integrált oszlopok

előírja a szétválasztási feladat, a nyomást viszont a tervező vagy üzemeltető mérnök állítja be. A nyomásnak a következő tényezők szabnak korlátokat:

1. Működő oszlop esetében a biztonsági nyomáskorlát, tervezett oszlop esetében a nagy nyomással járó szerkezeti anyag költségek.
2. Vákuum létesítéséhez vákuumszivattyúra, vagy legalább ejtőkondenzátorra, valamint kiegészítő berendezésekre van szükség.
3. Hőérzékeny anyag esetében az oszlop fenekén felső hőmérsékletkorlátot kell figyelembe venni.
4. Az alkalmazható fűtőközeg, és annak költsége. Pl. adott nyomású (azaz adott kondenzálási hőmérsékletű) fűtőgőz helyett kemence építése és üzemeltetése sokkal drágább.
5. A (legolcsóbb) léghűtők alkalmazásához a fejpára buborékpontja nem mehet egy bizonyos küszöbhőmérséklet (pl. 70 C) alá. (Kissé drágább) hűtővíz alkalmazásakor a küszöbhőmérséklet kisebb, kb. 45 C. Ennél kisebb fejhőmérséklet tartásához gépi hűtésre van szükség, ami mind beruházás, mind üzemeltetés szerint lényegesen drágább. E megoldások között is minél mélyebb hőmérsékletet kell tartani, annál drágább rendszerre van szükség, és a költség a hőmérséklet csökkenésével kb. exponenciálisan nő.

Ha azonban a feltételek teljesíthetők, akkor ideális esetben közel 50 %-os energiaköltség megtakarítás érhető el, amiből reálisan 40–45 % megvalósítható. Az integrált desztilláló rendszereket *kettős hőhatású* desztillációnak is hívják, mert ugyanazt a bevezetett párolgáshőt két helyen (mindkét oszlopban) hasznosítják.

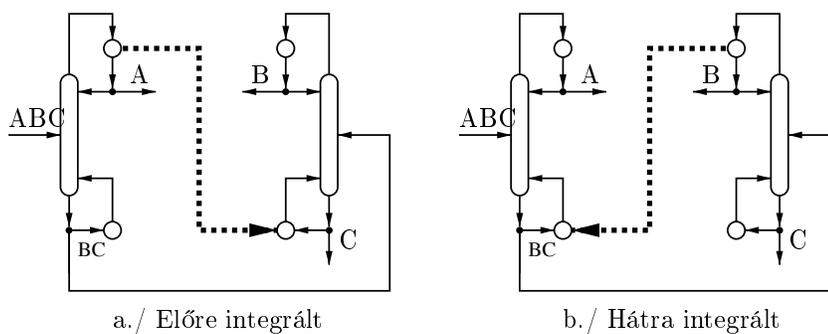
Az energiaintegráció egyetlen binér elegy szétválasztásakor is alkalmazható, pl. a **4.13 ábra** módján. A baloldali oszlop nagyobb nyomáson üzemel, mint a jobboldali, hogy a könnyebb *A* termék buborékpontja magasabb legyen, mint a nehéz *B* termék harmatpontja (azonos nyomáson éppen fordítva lenne). Ha a két osz-



4.13. ábra. Két oszlop esetleg olcsóbb, mint egy.

zlop azonos paraméterekkel üzemelne, akkor a táp kettéosztásával az energiaköltség megtakarítása éppen 50%-os lenne. Azonban a két különböző nyomáson mások a relatív illékonyságok, mások a párolgáshők is, ezért a tápot általában nem pontosan felezzük, és a várható megtakarítás kisebb.

Ha egy szétválasztó sor oszlopai között tervezünk integrációt, akkor eldöntendő, hogy a sorban korábbi oszlop forralja ki a későbbit, vagy fordítva. Turner rendszert vizsgálva, akármelyik megoldást választjuk is, a két oszlop nem lehet azonos nyomású. Egyenes sorrend esetében vagy  $[A] \rightarrow [C]$ , vagy  $[B] \rightarrow [BC]$  elegyek között működik a kondenzátor – forraló (4.14 ábra). Minél távolibb a két elegy forrása



4.14. ábra. Egyenes szétválasztási sorrend mellett kétfajta integráció

– kondenzálási hőmérséklete, annál nagyobb nyomáskülönbséget kell létrehozni a két oszlop között, ezért várhatóan a visszafelé integrált megoldás a gazdaságosabb.

A fordított szétválasztási sorrend esetében vagy  $[AB] \rightarrow [B]$ , vagy  $[A] \rightarrow [C]$  az integráció iránya, itt ugyanazon megfontolás alapján várhatóan az előre integrált megoldás az előnyösebb.

#### 4.4.5. Hőszivattyús desztillálás

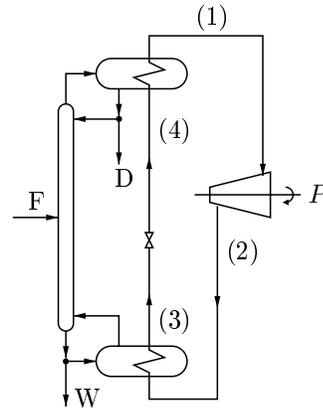
Az oszlopok integrálásakor egyik oszlop párájával forraljuk a másik oszlopot. Egyetlen oszlopon belül ez közvetlenül lehetetlen, mert az oszlop fejében alacsonyabb a hőmérséklet, mint a fenékén, és ez a helyzet nem változik az oszlop nyomásával. Ha a fejpára kondenzációs hőjét a fenék forralására kívánjuk felhasználni, akkor vagy annak nyomását az oszlopon kívül kell megnövelnünk (*páarakompressziós desztillálás*), vagy külső hőhordozónak kell átadnunk a hőt, és annak hőmérsékletét kell növelnünk. Ez utóbbi ötlet a *zárt hűtőkörös desztillálással* valósítható meg.

##### Zárt hűtőkörös desztillálás

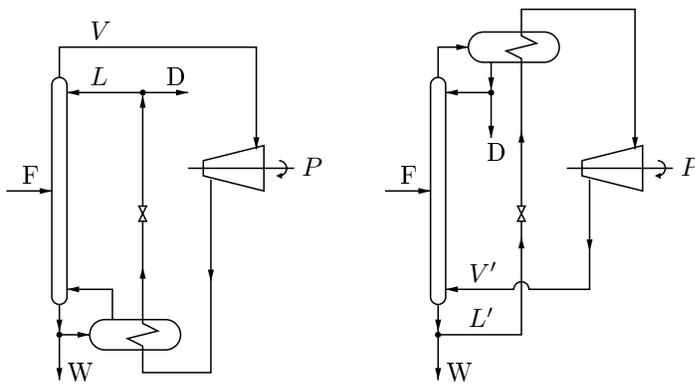
A **4.15 ábra** mutatja azt a megoldást, melynél egy teljes zárt hűtőkört kapcsolunk a desztilláló oszlophoz. A desztilláló oszlop kondenzátora egyben a hűtőkör elpárolgatója; a desztilláló oszlop forralója egyben a hűtőkör kondenzátora. A hűtőközeg, melynek forráspontja alacsonyabb a fejtermék buborékpontjánál, az oszlop kondenzátorában elpárolog, eközben felveszi a pára kondenzációs hőjét. Ennek hatására a hűtőközeg állapota telített pára (1). Ezt a telített párát a kompresszorban  $P$  mechanikai munka (teljesítmény) fogyasztása mellett nagyobb nyomású túlhevített párává nyomjuk össze (2). Olyan nyomást kell elérni, melyen a hűtőközeg forráspontja magasabb a maradék harmatpontjánál. Az oszlop forralójában a hűtőközeg kondenzál, eközben a leadott kondenzálási hőjével működteti a forralót. Ennek hatására a hűtőközeg állapota telített folyadék (3). Ez a telített folyadék torlódik a fojtószelepen, ami a szükséges nagyobb nyomást a forralóban fenntartja. A fojtószelepen áthaladva a hűtőközeg nyomása az eredeti kisebb értékre esik le, ezzel csökken a forráspontja, és azonnal elpárolog a folyadék egy töredéke, aminek hatására az anyag a kisebb nyomáson érvényes forráspontjára hűl le. Így a fojtószelep után a hűtőközeg (4) túlnyomó része telített folyadék, kicsiny hányada telített pára. Ennek telített folyadék része párolog el az oszlop kondenzátorában.

##### Páarakompresszió és folyadékexpenzió

Nyílt hőszivattyús rendszert kapunk, ha nem tetszőlegesen választott segédanyagot, hanem a szétválasztási folyamat anyagát használjuk hűtőközegnek (**4.16 ábra**). A **páarakompressziós desztillálás** esetében a párát komprimáljuk, majd a forralóban kondenzáltatjuk, és a fojtószelep után ebből a kondenzátumból vesszük el a desztillátumot. A **folyadékexpenziós desztillálás** esetében a visszaforralandó folyadékot először a fojtószelep engedjük át, ennek hatására egy része elpárolog, a kétfázisú áram lehűl, majd elpárologva kondenzálja a fejpárát. Az így keletkező párát kompresszorral nyomjuk vissza a legalsó tányér alá.



4.15. ábra. Zárt hűtőkörös desztillálás



a./ Párakompressziós desztillálásb./ Folyadékexpanziós desztillálás

4.16. ábra. Nyíltkörű hőszivattyús desztillálások

### Energiamérleg, hatásosság, alkalmazás

A hőszivattyús desztillálás nem kettős hőhatású, és nem is többszörös hőhatású desztillálás, hanem végtelenszeres hőhatású, mert elvben egyáltalán nincs külső fűtés, hanem a szétválási folyamatot mechanikai munka befektetése hajtja meg. Ez a munkabefektetés akár tizede is lehet a forralási és kondenzálási teljesítményeknek.

A befektetett mechanikai teljesítmény általában olyan többlettel jár, amit kiegészítő hőcserélőben el kell vonni. Ezt az elvi ábrákon nem tüntettük föl. A nyíltkörű megoldásoknál általában nem teljesül az energiamérleg kiegészítő hűtő,

vagy esetleg kiegészítő fűtő alkalmazása nélkül.

A túlhevített pára kondenzálását folyadék bepermetezésével, előtétítéssel segíthetjük.

A pára-kompressziós és a folyadékexpánziós desztillálás tervezésekor ügyelni kell arra, hogy a desztillált anyag kompresszió hatására esetleg nem a túlhevített, hanem a kétfázisú tartományba kerül. Ilyen anyagok pl. az izobutánnál nehezebb telített szénhidrogének. Ilyen esetekben a pára kompresszió előtti túlhevítése költséges, de alkalmas megoldás.

A hőszivattyú teljesítménytényezője

$$\varepsilon = \frac{Q_{\text{forr}}}{P}$$

$$\varepsilon^* = \frac{Q_{\text{kond}}}{P}$$

annál nagyobb, minél kisebb hőfokemelkedést kell elérni. (Itt  $P$  a fölvevett elektromos vagy mechanikai teljesítmény.) Az áthidalt hőfokkülönbséggel a teljesítménytényező rohamosan csökken. A nagyobb hőfokemelkedés eléréséhez nagyobb, és több fokozatú kompresszorra van szükség, és a kompresszor beruházási költsége összemérhető a desztilláló oszlopéval. Ezért az alkalmazás várhatóan akkor gazdaságos, ha közeli forráspontú komponenseket választunk szét (ekkor kicsi a fej és a fenék közti hőfokkülönbség).

Ekkor azonban általában kicsi a relatív illékonyság, a szétválasztáshoz sok elméleti tényérra van szükség, és ezért az oszlop fenekén lényegesen nagyobb a nyomás, mint az oszlop fejében. A megnövekedett fenéknomáshoz nagyobb harmatpont tartozik, és így az áthidalandó hőfokkülönbség is nő, ami rontja a hőszivattyú teljesítménytényezőjét, és növeli a kompresszor költségét. Az ilyen esetekben érdemes az oszlop tányéros vagy rendezetlen töltetes belső szerkezetét kis nyomásesésű rendezett töltetre cserélni, ami gazdaságossá teheti a hőszivattyú alkalmazását.

Ha a vizsgált desztillálási feladat mellett sok egyéb hőközlési hely van az üzemben, akkor a hőszivattyú vagy integráció mérlegeléskor figyelemmel kell lenni a pinch pont aktuális és az integráció utáni helyzetére is, különben a helyi megtakarítás az üzem egy más pontján veszteséggel társul (2.5.3 és 2.5.5 *alfejezetek*).

## 4.5. Ellenőrző kérdések

1. Mit nevezünk fordított szétválasztási sorrendnek?
2. Soroljon fel néhány heurisztikus szabályt és néhány terhelési faktort a desztillációs szétválasztási sorrend megállapításához!
3. Mikor alkalmazható szétválasztási sorrend optimális kijelölésére a dinamikus programozás módszere?
4. Állandó relatív illékonyságok esetén hogyan számítható a többkomponensű folyadékeleggyel egyensúlyt tartó pára összetétele?

5. Hol helyezkednek el az *Underwood*-egyenletek gyökei?
6. Mit nevezünk netto szétválasztási munkának?
7. Írja le a reverzibilis desztilláció modelljét!
8. Mit nevezünk cirkulációs refluxnak?
9. Rajzolja le a *Petlyuk*-rendszert, és magyarázza el működését! Megvalósítható-e egyetlen oszloppal, és ha igen, akkor hogyan?
10. Mi az oszlopközi energiaintegráció feltétele? Hogyan teljesíthető e feltétel?
11. Rajzolja föl a hőszivattyús desztillálás változatait!
12. Van-e összefüggés a hőszivattyús desztillálás gazdaságossága és a desztilláló oszlop belső szerkezete között? Ha igen, akkor fejtse ki!

## 5. fejezet

# Optimalizálás

Gyakori feladat egy algebrai kifejezés (függvény) optimalizálása. Ezen közelebbről a következőt értjük:

Adott egy vagy több *döntési változó*, ezeket az egyszerűség kedvéért együttesen tömbként (vektorként) is jelöljük. Előfordulhat, hogy különböző típusú változóink vannak, például valós, komplex, egész, logikai változók. Most mindezeket egységesen az  $\mathbf{x}$  változótömbbe foglaljuk. Adott e változótömbnek egy valós vagy egész értékű függvénye, ezt jelöljük  $f(\mathbf{x})$ -szel, és *célfüggvénynek* nevezzük. A továbbiakban, ha csak külön nem említjük a nemfolytonos értékeket, mindig valós értékkeszletű célfüggvényekre gondolunk. Matematikai iratokban illik megadni az  $f(\mathbf{x})$  célfüggvény értelmezési tartományát is, ami az  $\mathbf{x}$  értékeknek egy olyan halmaza, melyen  $f$  értelmezve van. Mi most ettől eltekintünk.

A legegyszerűbb feladat a célfüggvény maximalizálása vagy minimalizálása a függvény értelmezési tartományán. Ha a célfüggvény előjelét megváltoztatjuk, akkor a két feladat felcserélődik, ezért a továbbiakban csak *minimalizálásól* fogunk beszélni.

A minimalizálás vagy *minimumkeresés* egyidejűleg két érték megkeresését jelenti. Keressük először is a célfüggvény *minimumát*, ugyanakkor azonban keressük azt az  $\mathbf{x}$  értéket is, melyen a célfüggvény e minimumát fölveszi. Ezt a helyet *minimumhelynek* nevezzük. Egy célfüggvénynek több minimumhelye is lehet. Például az  $f(x) = \cos(x)$  függvény minimuma  $f_{min} = -1$ , és minimumhelyei a  $k\pi, k = \pm 1, \pm 3, \pm 5 \dots$  értékek. Néha ezek közül egyetlen (bármely) minimumhely megkeresése a feladat, néha az összes minimumhely felderítése.

A gyakorlatban mindig meg kell adni az  $\mathbf{x}$  értékeinek egy olyan  $\Omega$  halmazát ( $\mathbf{x} \in \Omega$ ), mely fölött keressük a célfüggvény minimumát. Ez azt jelenti, hogy a halmazba nem tartozó  $\mathbf{x}$  helyeket kizárjuk a keresésből, és az ezeknél fölött  $f(\mathbf{x})$  értékeket kizárjuk az összehasonlításból. Tehát hiába van esetleg az  $f$  függvénynek kisebb értéke valamely  $\mathbf{x} \notin \Omega$  pontban, attól még az  $\Omega$  halmazon talált legkisebb függvényérték a minimum, és ahol ezt az értéket kapjuk, az a pont a minimumhely. Ezt az  $\Omega$  halmazt *megengedett* halmaznak nevezzük. (Az angol nyelvű szakirodalom a

'feasible domain' kifejezést használja.)

Az  $\Omega$  (megengedett) halmazt a gyakorlatban egyenlőségekkel és egyenlőtlen-ségekkel adjuk meg. A legegyszerűbb esetben a megengedett halmaz maga az értelmezési tartomány, ekkor megadása elhagyható.

A minimumkeresés feladatának szokásos jelölése:

$$\begin{aligned} \min_{\{ \mathbf{x} \}} f(\mathbf{x}) \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \\ \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \end{aligned}$$

A "min" jelölés alatt azért tüntetjük föl a döntési változókat, mert előfordul, hogy a célfüggvény (pl.  $f(x, y)$ ) még más változóknak (pl.  $y$ -nak) is függvénye, és e más változókat paramétereknek tekintjük. A minimumkeresésnél e paraméterek értéke rögzített. Ha e paraméterek föl vannak tüntetve a feladatban, akkor az azt jelenti, hogy a minimalizálást esetleg különböző paraméterértékek mellett is el kell végezni.

A fenti definíció a célfüggvény *globális* optimumára vonatkozik. Ezzel szemben egy folytonos téren értelmezett valós függvény *lokális minimumot* vesz föl a megengedett tartomány minden olyan  $\mathbf{x}$  *belső pontjában*, melynek tetszőlegesen kicsiny  $\omega$  környezetét tekintve megengedett halmaznak, azon  $\mathbf{x}$  globális minimumhely. Minden olyan globális minimumhely, mely a megengedett tartomány belsejében van egyben lokális minimumhely is. Például a ?? **ábra**  $f^2$  függvényének az  $0 \leq x \leq 1.6$  megengedett tartományon két lokális minimuma van:  $x \approx 0.08$ -nál  $f = 0$  és  $x \approx 1.21$ -nél  $f \approx 0.4$ ; ezek közül az első globális minimum.

Jövőre vonatkozó tervünk a "programunk", és így a tervezést programozásnak is mondhatjuk. Mivel pedig a tervezés mindig valamilyen szempont szerint optimális tervezést jelent, a szélsőérték-keresést gyakran *programozásnak* is nevezzük.

Ennek alapján beszélünk *lineáris programozásról* (jelölése: LP), ha mind a célfüggvény, mind a megengedett tartományt kijelölő egyenletek a döntési változók lineáris függvényeit tartalmazzák. (Az egyéb változók, azaz paraméterek függvényében az egyenletek lehetnek nemlineárisak is.) *Nemlineáris programozásról* beszélünk (jelölése: NLP), ha a bármelyik egyenlet nem lineáris a döntési változóiban. Ezek a megnevezések és jelölések folytonos változók összefüggő tartományán értelmezett valós célfüggvény esetére vonatkoznak. Ha a döntési változók egész értékűek, akkor *integer programozásról* beszélünk (IP). Megkülönböztetünk lineáris és nemlineáris integer programozási feladatokat (ILP és INLP). Végül előfordulnak olyan feladatok, melyekben folytonos és egészértékű változók is szerepelnek, ezek a *vegyes egészértékű lineáris programozás* (MILP) és a *vegyes egészértékű nemlineáris programozás* (MINLP).

Az optimalizálásról vastag tankönyvek és kézikönyvek olvashatók, és külön kurzusok foglalkoznak egyes feladataival. Itt csak áttekintést adunk az alkalmazható módszerekről. A lineáris programozást nem tárgyaljuk, és elsősorban az NLP feladattal foglalkozunk.

## 5.1. Lokális minimumok korlátlan tartományon

Ha a megengedett tartomány korlátlan, akkor annak csak belső pontjai vannak, így globális minimumhelyei egyben lokális minimumhelyek is. (Ha a tartomány korlátos és a globális minimum helye a tartomány határára esik, akkor az esetleg nem lokális minimum.)

A lokális minimumok keresésének leggyakrabban alkalmazott módszerei a minimum helyét olyan  $\mathbf{x}^{(k)}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  pontsorozattal közelítik, melyben a célfüggvény csökken:  $f(\mathbf{x}^{(k+1)}) < f(\mathbf{x}^{(k)}) < f(\mathbf{x}^{(k-1)})$ . Általában megadunk egy  $\mathbf{x}^{(0)}$  kezdeti becslést, majd a  $k-1$ . vagy néhány  $k-1, k-2, \dots$  közelítés és a hozzájuk tartozó  $f_{k-1}, f_{k-2}, \dots$  értékek alapján kiszámítunk egy  $\mathbf{r}$  irányt, mely felé haladva a célfüggvény ( $f$ ) értéke várhatóan csökken. Az  $\mathbf{x}^{(k-1)}$  közelítésből kiindulva az  $\mathbf{r}$  irányvektor hosszának valahányszorosát (pl. tetszőlegesen választott  $\lambda$ -szorosát) lemérve kapjuk az új közelítést:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} + \lambda \mathbf{r} \quad (5.1)$$

Az egyes módszerek az  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mathbf{x}^{(k-1)}, \mathbf{x}^{(k-2)}, \dots)$  függvény alakjában és a  $\lambda$  tényező megadásának módjában különböznek. A legegyszerűbb esetben a  $\lambda$  tényezőt állandónak választjuk, esetleg a célfüggvény csökkenésének mértékétől függően számítjuk. Ha a függvénynek van minimuma, és ha sikerül elérni az  $f_k < f_{k-1}$  feltétel teljesülését, akkor a sorozat várhatóan megközelít egy lokális minimumot. (Korlátlan tartományon nincs minden függvénynek minimuma. Például a lineáris  $f(x_1, x_2, x_3) = ax_1 + bx_2 + cx_3$  függvénynek nincs minimuma a háromdimenziós valós tér egészén, ha az  $a, b$  és  $c$  együtthatók nullától különböző számok).

A továbbiakban, ha csak lehetséges, kétváltozós célfüggvényeket mutatunk példaként, mert azokat síkban színtvonalakkal ábrázolhatjuk. Föltesszük, hogy az egydimenziós minimumkeresés nem okoz különösebb nehézséget, és az egyváltozós függvény csökkenésének irányában megtaláljuk a legközelebi lokális minimumot.

### Keresés komponensenként

Ez a legegyszerűbb keresési módszer. Kiindulva egy  $\mathbf{x}^{(k-1)}$  pontból, először az 1. koordinátát változtatva keresünk minimumot, vagyis

$$\min_{\{x_1, x_2, \dots, x_N\}} f(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

helyett először a

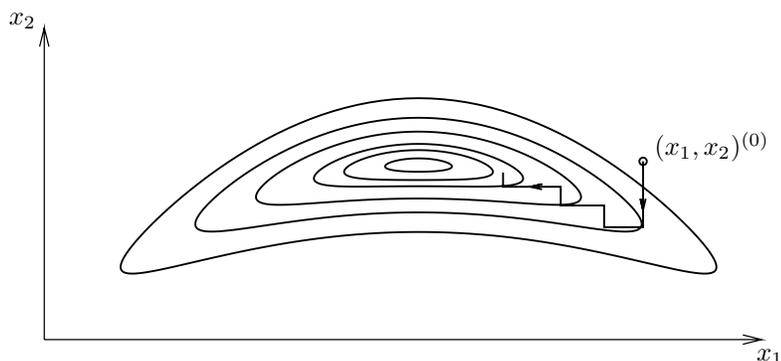
$$\min_{x_1} f(x_1, x_2^{(0)}, \dots, x_N^{(0)})$$

feladatot oldjuk meg, kapjuk az  $\mathbf{x}^{(1)}$  közelítést, utána a

$$\min_{x_2} f(x_1^{(1)}, x_2, \dots, x_N^{(1)})$$

feladatot, stb, majd a

$$\min_{x_N} f(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)}, \dots, x_N)$$



5.1. ábra. Komponensenkénti keresés módszere

feladat megoldása után újra kezdjük  $x_1$ -gyel.

Például a **5.1. ábrán** egy kétváltozós függvény szintvonalait rajzoltuk föl. A körbejáró szintvonalak minimumot zárnak be. Az  $(x_1, x_2)^{(0)}$  pontból, mint kezdeti becslésből kiindulva számítottuk és ábrázoltuk a minimumkeresés első 7 lépését. E lépések a koordináta-tengelyekkel váltakozón párhuzamosak, mert minden lépésben az egyik tengellyel párhuzamosan keressük a minimumot.

### A leggyorsabb csökkenés irányában keresés módszere

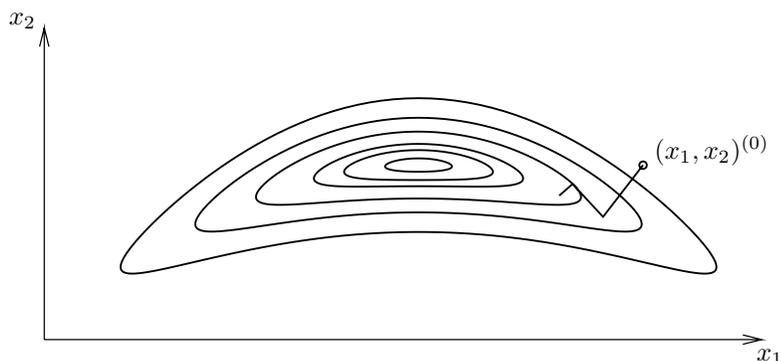
Ez annyiban különbözik a komponensenkénti keresés módszerétől, hogy nem egy koordinátával párhuzamosan, hanem egy másik, kedvezőbb irányú egyenes mentén keressük. A kereső egyenes irányát a függvény *gradiensével* határozzuk meg.

$$\mathbf{grad} f \equiv \nabla f(\mathbf{x}) \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_N} \end{bmatrix}$$

A gradiens-vektor a legnagyobb növekedés irányába mutat, ezért a keresést az ellenkező irányban végezzük. A **5.2. ábrán** az első három lépés eredményét mutatjuk be.

### Gradiens-módszerek

Elvben hatékonyabb keresést végezhetünk, ha nem egyenes mentén keressük, hanem minden pontban az aktuális gradiens szerint lépünk odébb. Ekkor azonban meg kell



5.2. ábra. A leggyorsabb csökkenés irányában keresés 3 első lépése

adnunk, hogy az adott ponttól milyen messze lépünk el. Ezt például egy pozitív  $\lambda$  szorzóval adhatjuk meg, amit a legegyszerűbb esetben állandó értéken tartunk:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} - \lambda \mathbf{grad}f(\mathbf{x}^{(k-1)})$$

A **5.3. ábra** és a **5.4. ábra** mutatja a keresés eredményét alkalmasan választott  $\lambda$  szorzóval.

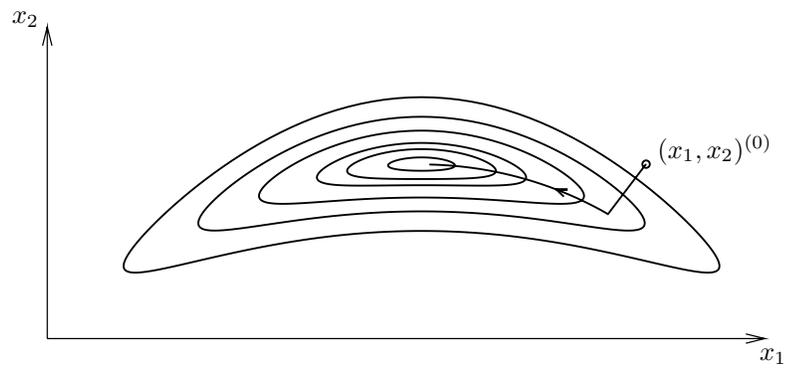
Ha a szorzó értéke nagyon kicsi, akkor majdnem pontosan a gradiens által kijelölt vonal mentén haladunk, de nagyon sok számítási lépéssel, nagyon lassan közelítjük a minimumot. Ezt mutatja a **5.5. ábra**.

Ha ellenben a szorzó nagyon nagy, akkor a módszer nem képes követni a célfüggvény görbületét, és túlmozdítja a közelítést. Ilyen esetet mutat a **5.6. ábra**.

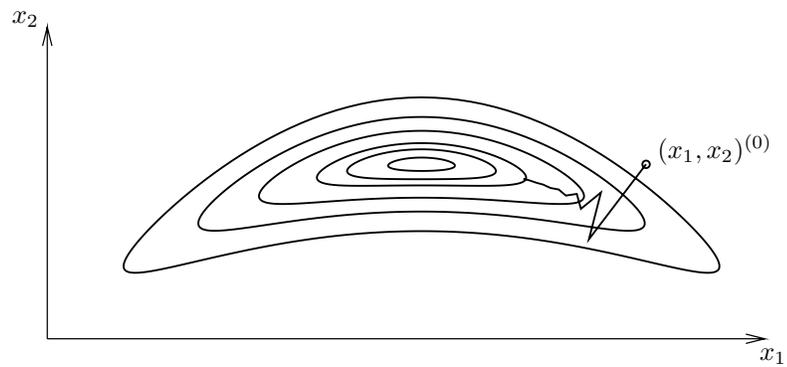
Nyilvánvaló, hogy a keresési munka a  $\lambda$  szorzó menet közbeni változtatásával csökkenthető. Ennek alkalmas megadásához a célfüggvényt az éppen vizsgált helyen valamilyen ismert egyszerű függvénnyel, például másodfokú polinommal közelíthetjük, és ennek alapján megadhatjuk  $\lambda$  optimális értékét. Számos ilyen módszer ismert. Ilyenek például az ún. *konjugált gradiens* módszerek, melyek  $\lambda$  optimális értékét a  $\mathbf{grad}f(\mathbf{x}^{(k-1)})$  és  $\mathbf{grad}f(\mathbf{x}^{(k-2)})$  eltérése alapján határozzák meg. A másodfokú polinom közelítésen alapuló módszereket még a *kvadratikus programozás* módszereinek is nevezik.

### Szimplex módszer és sztochasztikus módszerek

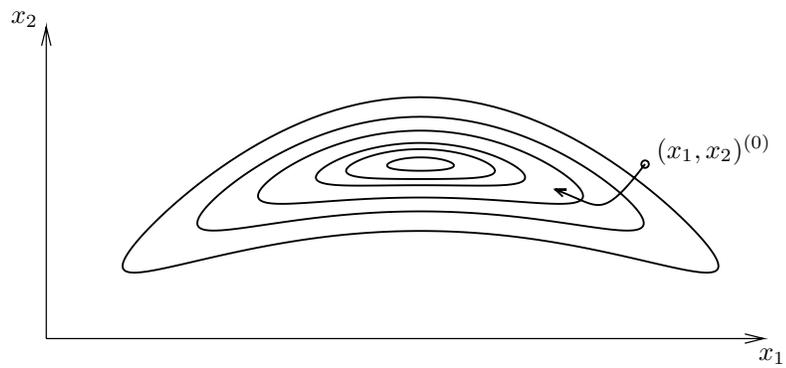
A gradiens néha analitikusan számítható, néha numerikus közelítést kell alkalmazni. A parciális deriváltak numerikus értéke nem mindig pontos, illetve néha nagy hibával jár. A deriváltak számítása és a lépésenkénti függvény-kiértékelés nagy számítási igényt jelenthet, ha a függvény maga nagyon bonyolult. Tipikusan ilyen eset az



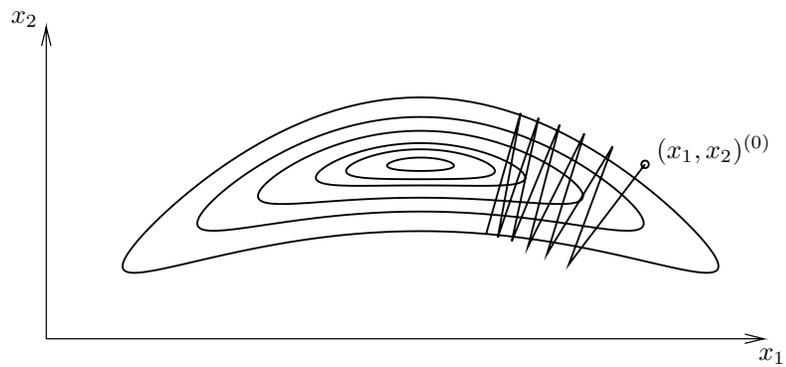
5.3. ábra. A gradiens-módszer jól választott lépéshosszal -1



5.4. ábra. A gradiens-módszer jól választott lépéshosszal - 2



5.5. ábra. A gradiens-módszer nagyon kicsi lépéshosszal



5.6. ábra. A gradiens-módszer nagyon nagy lépéshosszal

öszetett folyamatok állandósult állapotának modellezése és optimalása. A célfüggvény kiértékeléséhez először meg kell keresni a folyamat állandósult állapotát, ami egy nagyon nagy méretű, erősen nemlineáris egyenletrendszer megoldását igényli.

Ilyen esetekben célszerű minél kevesebb helyen kiértékelni a célfüggvényt. Kevés kiértékelési ponttal is meghatározható a legnagyobb csökkenés körülbelüli iránya. A *szimplex módszer*  $N$ -dimenziós függvény esetében  $N + 1$ , az  $N$ -dimenziós lineáris teret kifeszítő pont alapján határozza meg a haladási irányt. A tér kifeszítése azt jelenti, hogy pl. kétdimenziós lineáris térben (síkban) három nem egy egyenesbe eső pontból számol, három dimenziós térben négy nem egy síkba eső pontból, stb. Az  $e$  pontok által meghatározott idomot, testet, stb. nevezzük 2, 3, stb. -dimenziós szimplexnek.

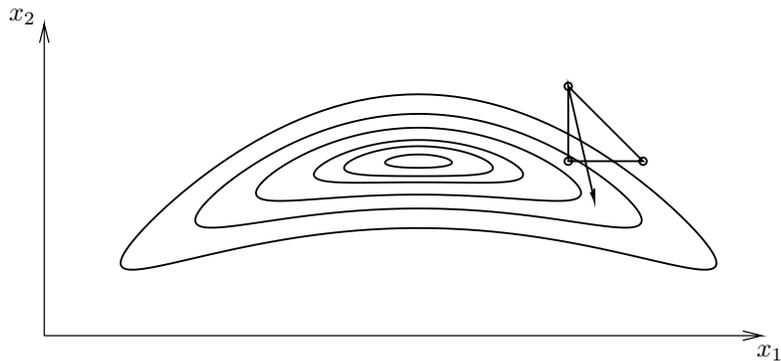
Kiválasztjuk a legnagyobb célfüggvény-értékű pontot, legyen ez az egyszerűség kedvéért éppen az  $N + 1$ . pont. Ha egy másik pont az, akkor számozzuk át a pontokat ennek megfelelően. Ezután vetítsük át ezt a pontot a szemközti oldalra, aminek csúcsait a többi  $N$  pont alkotja. Alkalmos vetítési irányt kapunk, ha a kisebb értékű pontok alkalmasan súlyozott lineáris kombinációjával kijelöljük a szemközti oldal súlypontját. Például pozitív célfüggvény esetén alkalmazható súly a célfüggvény reciproka:

$$\mathbf{x}^\diamond = \frac{\sum_{k=1}^N \mathbf{x}^{(k)} / f(\mathbf{x}^{(k)})}{\sum_{k=1}^N 1 / f(\mathbf{x}^{(k)})}$$

Az  $\mathbf{x}^{(N+1)}$  pontot az  $\mathbf{x}^\diamond$  ponton keresztül vetítjük át:

$$\mathbf{x}^{(N+2)} = \mathbf{x}^{(N+1)} + \lambda(\mathbf{x}^\diamond - \mathbf{x}^{(N+1)})$$

Egy ilyen vetítést mutat a **5.7. ábra**.



5.7. ábra. Szimplex módszer

A legnagyobb csökkenés irányát közelítően úgy is megkereshetjük, hogy a vizsgált pont kis környezetében kis számú, egyenletes eloszlású véletlen pontot generálunk, és az  $n$  pontokban számított függvényértékekre illesztünk egyszerű közelítő függvényt. E *sztochasztikus kereső módszereket* akkor célszerű alkalmazni, ha nagyon sok változós a célfüggvény, és az  $N$  pont számítása is nagyon költséges.

## 5.2. Egyenlőség-típusú korlátok

Az egyenlőség típusú korlátozó összefüggések általában felhasználhatók a keresési tér független változói számának csökkentésére. Ehhez vagy ki kell fejezni egyes változókat a többi függvényében, vagy változó-transzformációt kell alkalmazni.

Legyen például a keresési tér az euklidészi sík ( $\{(x, y), x \in \mathbb{R}, y \in \mathbb{R}\}$ ), és legyen a korlátozó összefüggés:  $h(x, y) = ax + b - y = 0$ , ahol  $a$  és  $b$  valós számok. Ez egy egyenes egyenlete, vagyis a minimumot az egyenes pontjai fölött keressük. Ekkor az  $f(x, y)$  kétváltozós célfüggvényben helyettesíthetjük az  $y$  változót az  $y = ax + b$  kifejezéssel, aminek eredményeképpen az  $f^\circ(x)$  módosított, egyváltozós célfüggvényt kapjuk. Ennek minimumhelye egyben az eredeti feladat minimumhelyének  $x$  értéke is, a minimum az eredeti minimummal azonos, az  $y$  megfelelő értékét pedig az  $y = ax + b$  kifejezéssel számíthatjuk.

Egy másik, ugyancsak a teljes síkon értelmezett feladat esetében legyen az egyenlőség-típusú korlátozó összefüggés  $h(x, y) = x^2 + y^2 - r^2 = 0$ , ahol az  $r$  egy pozitív valós szám. Ez egy kör egyenlete, vagyis erre a körre korlátozzuk a minimumkeresést. Ekkor egyik változó sem fejezhető ki egyértelműen a másik függvényében, de megadható egy egyváltozós alak. Az  $x = r \cos(t)$  és  $y = r \sin(t)$  kifejezések helyettesítésével kapjuk az  $f(x, y)$  kétváltozós célfüggvénnyel ekvivalens  $f^\circ(t)$  egyváltozós célfüggvényt, amit a  $[0, 2\pi)$  intervallum fölött értelmezzünk.

Gyakran azonban olyan bonyolultak az egyenlőség-típusú korlátok, hogy a fenti transzformációs módszerek nem, vagy csak nagy nehézségek árán alkalmazhatók. Ilyenkor is alkalmazható azonban a *Lagrange-féle multiplikátorok módszere*. Legyen a célfüggvény  $f(x, y, \dots)$ , és legyenek a korlátok  $h_1(x, y, \dots) = 0$ ,  $h_2(x, y, \dots) = 0$ ,  $\dots$ , stb.

Lagrange módszere szerint a

$$\begin{aligned} \min_{\{x, y, \dots\}} f(x, y, \dots) & \quad (5.2) \\ h_1(x, y, \dots) & = 0 \\ h_2(x, y, \dots) & = 0 \\ & \vdots \end{aligned}$$

feladat helyett a

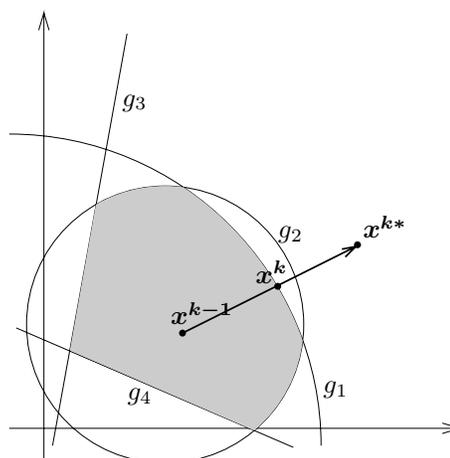
$$\min_{\{x, y, \dots, \lambda_1, \lambda_2, \dots\}} f(x, y, \dots) + \lambda_1 * h_1(x, y, \dots) + \lambda_2 * h_2(x, y, \dots) + \dots \quad (5.3)$$

feladatot oldjuk meg. Bizonyítható, hogy az (5.3) feladat lokális megoldásainak  $[x, y, \dots]$  értékei egyben (5.2) lokális minimumhelyeit is megadják.

### 5.3. Egyenlőtlenség-típusú korlátok

#### Aktív korlát és redukált irányok

Ha az egyenlőtlenségek által közrefogott megengedett tartomány belsejében van az aktuális közelítés, akkor az egyenlőtlenségek figyelembe vétele nélkül határozhatjuk meg a keresési irányt vagy az aktuális lépésirányt. Az adott irányban való keresés közben, illetve a lépés végrehajtása után ellenőrizni kell, hogy az új pont is még a megengedett tartományban van-e. (Azaz ellenőrizni kell, hogy teljesülnek-e a  $g(x) \leq 0$  feltételi egyenlőtlenségek.) Ha igen, akkor lehet folytatni a keresést, mintha nem is lennének korlátok. Ha nem, akkor megsértettük valamelyik egyenlőtlenség-feltételt. Ekkor kiderítendő, hogy melyik feltételt sértettük meg. Ha egyszerre több



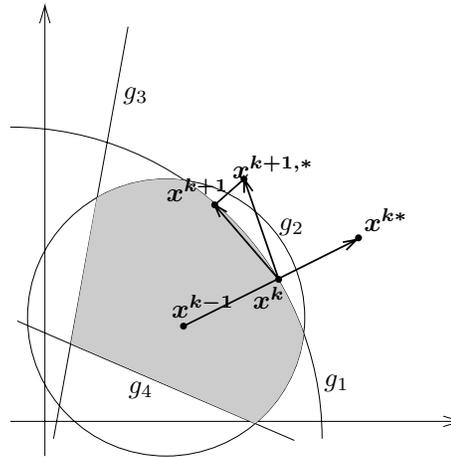
5.8. ábra. Egyenlőtlenség korlátok

feltételt is megsértettünk, akkor is van egy, amit legelőször sértünk meg, amint az  $x^{(k-1)}$  pontból az  $x^{(k*)}$ -jelölt pont felé haladunk az őket összekötő egyenes mentén. Például a 5.8. ábrán mind a  $g_1$ , mind a  $g_2$  egyenlőtlenség típusú korlátot megsérti az  $x^{(k*)}$  pontba mutató mozdítás. A két korlát közül a  $g_1$  határolja (ebben az irányban) a megengedett tartományt, ezért itt a  $g_1$  az ún. *aktív korlát*. Ekkor az  $x^{(k-1)}$  és  $x^{(k*)}$  pontokat összekötő egyenes szakasz és az aktív korlát metszéspontja lesz az új közelítés, vagyis az  $x^{(k)}$  pont.

A továbbiakban azonban a keresést a korlát mentén kell folytatni, mintha az egyenlőség-típusú korlát lenne. Mindaddig ezt kell tennünk, míg a keresési irány

(például a leggyorsabb csökkenés iránya) a megengedett tartomány belseje felé nem mutat, és míg a korlát aktív marad. (Ha a keresés a tartomány belsejébe vezet, akkor a korlát már nem aktív. Akkor sem aktív a korlát, ha nem a megengedett tartomány határán van, mert egy másik korlát közelebb van hozzá.)

A keresés irányát az eredeti keresési térben határozzuk meg. Ez az irány várhatóan vagy kifelé mutat a megengedett tartományból, vagy (ritkábban) befelé mutat, de nagyon valószínűtlen, hogy éppen érintené az egyenlőtlenség-típusú aktív korlátot. Ha kifelé mutat, akkor a keresési irányt, mint vektort az aktív korlátra vetítve kereshetünk a korlát mentén, a megengedett tartomány határán, a **5.9. ábra** szerint. Az így kapott, vetített irányokat nevezzük *redukált irányoknak*. Az ábrán az  $\mathbf{x}^{(k+1,*)}$  pont a megengedett tartományon kívül esik. A mozdítás vetülete az aktív korlátra az  $\mathbf{x}^{(k+1)}$  pontot jelöli ki a következő közelítésnek.



5.9. ábra. Egyenlőtlenség korlátok és redukált irány

### Büntetőfüggvény

Az egyenlőtlenség-típusú korlátok figyelembe vételének egy másik módja, hogy a

$$\min_{\{\mathbf{x}\}} f(\mathbf{x})$$

$$g_1(\mathbf{x}) \leq 0$$

$$g_2(\mathbf{x}) \leq 0$$

$$\vdots$$

feladat helyett a

$$\min_{\{\mathbf{x}\}} f(\mathbf{x}) + P_1(g_1) + P_2(g_2) + \dots$$

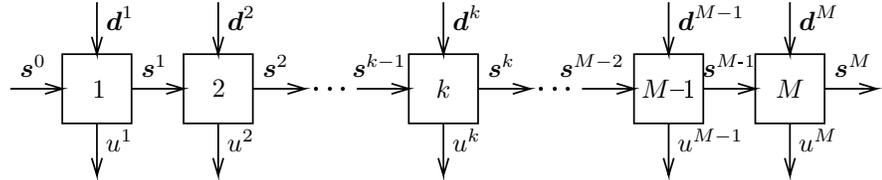
feladatot oldjuk meg, ahol a  $P_i$  függvények értéke nulla, ha az argumentum negatív, és meredeken nő pozitív tartományban. Vagyis ha teljesül a korlátozó feltétel, akkor az eredeti feladatot oldjuk meg, viszont minél inkább megsértjük a feltételt, annál nagyobb értéket adunk hozzá az eredeti célfüggvényhez. Ezeket a  $P_i$  hozzáadott függvényeket *büntetőfüggvényeknek* nevezzük, mert a célfüggvény növelésével büntetik a korlátok megsértését. Ha a büntetőfüggvények elég nagyok, akkor azok a megengedett tartomány felé terelik a keresést.

## 5.4. Dinamikus programozás

Legyen az optimalizálási feladat a következő:

$$\begin{aligned} \min_{\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \dots, \mathbf{d}_M\}} \quad & U = \sum_{k=1}^M u_k(\mathbf{d}_k, \mathbf{s}_k, \mathbf{s}_{k-1}) \\ \mathbf{s}_k = & \mathbf{f}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k) \quad (k = 1, 2, \dots, M) \\ [\mathbf{0} = & \mathbf{h}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k) \quad (k = 1, 2, \dots, M)] \\ [\mathbf{0} \geq & \mathbf{g}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k) \quad (k = 1, 2, \dots, M)] \end{aligned}$$

Ilyen típusú feladat akkor adódik, ha olyan döntések sorozatát kell egyidejűleg optimalizálni, melyek sorban befolyásolják egymást, és a célfüggvény az egyes döntésektől függő tagok összege. A döntések és hatásuk logikai következmény-szerkezetét a **5.10. ábra** mutatja. Például optimális irányítást kívánunk végrehajtani diszkrét



5.10. ábra. Dinamikus programozás

időpontokban adott utasításokkal. Ekkor az egyes időpontokban a döntés előtt a befolyásolni kívánt rendszer állapotát írja le az  $\mathbf{s}_{k-1}$  tömb, és az utasítást írja le a döntési változók  $\mathbf{d}_k$  tömbje. Az utasítás hatására a következő beavatkozás előtt a rendszer állapota  $\mathbf{s}_k$  lesz, ezt a hatást az  $\mathbf{f}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k)$  függvény írja le.

Az utasítás hatását a célfüggvényre az  $u_k(\mathbf{d}_k, \mathbf{s}_k, \mathbf{s}_{k-1})$  célfüggvény-tag írja le. A  $\mathbf{h}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k)$  és  $\mathbf{g}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k)$  függvények az egyes döntésekhez tartozó egyenlőség és egyenlőtlenség típusú korlátok, melyek megléte vagy hiánya nem lényeges tulajdonsága a dinamikus programozási feladatnak.

Vegyipari tervezési példa az azonos típusú reaktorok sorozata. Az állapotok az áramló anyag fizikai tulajdonságai, a döntési változók az egyes reaktorok hőmérséklete, nyomása, térfogata, stb. Csőreaktorok is modellezhetők pl. tökéletesen kevert reaktorok sorozatával.

Más vegyipari példa az egyszerű extrakciós művelet ismételt elvégzése. Ekkor a raffinátum mennyisége és összetétele az állapot, és az alkalmazott extrahálószer mennyisége az egyes fokozatokban alkalmazott döntési változó.

Ha az egyes fokozatokban alkalmazott döntési változók száma  $N$ , akkor a feladat döntési változóinak száma  $V = M * N$ , ami nagy szám lehet. A minimalizálási feladat számításigénye durván arányos az  $ab^V$  kifejezéssel, ahol  $a$  és  $b$  konstansok, vagyis a számításigény exponenciálisan nő  $V$ -vel. A számításigény azonban lényegesen csökkenthető, ha a fokozatok  $M$  száma kettőnél nagyobb. Ennek módja a következő.

Ismerjük az utolsó döntést megelőző  $\mathbf{s}_{M-1}$  állapot lehetséges tartományát. E tartományban válasszunk ki, pl. rácsszerűen, jellemző pontokat, mint lehetséges állapotokat. Skalár állapotok esetében ez pl. a lehetséges intervallum egyenletes felosztásával nyerhető, kétdimenziós esetben síkrács megadásával, stb. Így kapjuk az  $\mathbf{s}_{M-1,j}$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) jellemző állapotpontokat. (Diszkretizáljuk a változó lehetséges tartományát.) E diszkrét pontok mindegyikéhez megoldjuk a megfelelő

$$\begin{aligned} \min_{\{\mathbf{d}_M\}} \quad & u_M(\mathbf{d}_M, \mathbf{s}_M, \mathbf{s}_{M-1}) \\ \mathbf{s}_M = \quad & \mathbf{f}_M(\mathbf{s}_{M-1}, \mathbf{d}_M) \\ \mathbf{0} = \quad & \mathbf{h}_M(\mathbf{s}_{M-1}, \mathbf{d}_M) \\ \mathbf{0} \geq \quad & \mathbf{g}_M(\mathbf{s}_{M-1}, \mathbf{d}_M) \end{aligned}$$

feladatot. Ezek eredményei az egyes  $\mathbf{s}_{M-1,j}$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) jellemző állapotpontokhoz tartozó *optimális*  $\mathbf{d}_{M,j}^*$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) döntési változó vektorok, és a célfüggvény-tag megfelelő *optimális* értékei:  $U_{M,j}^* \equiv u_{M,j}^*$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ). Ezeket akár táblázatosan, akár grafikusán tárolva az  $\mathbf{s}_{M-1}$  állapot kiszámított függvényeinek tekintjük:  $\mathbf{d}_M^* = D_M(\mathbf{s}_{M-1})$ , illetve  $U_M^* = W_M(\mathbf{s}_{M-1})$ .

Ismerjük az utolsó előtti döntést megelőző  $\mathbf{s}_{M-2}$  állapot lehetséges tartományát is. E tartományt is diszkretizáljuk, és kapjuk az  $\mathbf{s}_{M-1,j}$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) jellemző állapotpontokat. (Az egyszerűség kedvéért itt most fölteszük, hogy a pontok  $L$  száma független az éppen vizsgált fokozattól.) E diszkrét pontok mindegyikéhez

megoldjuk a megfelelő

$$\min_{\{\mathbf{d}_{M-1}\}} u_{M-1}(\mathbf{d}_{M-1}, \mathbf{s}_{M-1}, \mathbf{s}_{M-2}) + W_M(\mathbf{s}_{M-1})$$

$$\mathbf{s}_{M-1} = \mathbf{f}_{M-1}(\mathbf{s}_{M-2}, \mathbf{d}_{M-1})$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{h}_{M-1}(\mathbf{s}_{M-2}, \mathbf{d}_{M-1})$$

$$\mathbf{0} \geq \mathbf{g}_{M-1}(\mathbf{s}_{M-2}, \mathbf{d}_{M-1})$$

feladatot. Ezek eredményei az egyes  $\mathbf{s}_{M-2,j}$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) jellemző állapotpontokhoz tartozó *optimális*  $\mathbf{d}_{M-1,j}^*$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) döntési változó vektorok, és a célfüggvény-részösszeg megfelelő *optimális* értékei:  $U_{M-1,j}^* \equiv (u_{M-1,j} + U_{M,j})^*$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ). Ezeket akár táblázatosan, akár grafikusán tárolva az  $\mathbf{s}_{M-2}$  állapot kiszámított függvényeinek tekintjük:  $\mathbf{d}_{M-1}^* = D_{M-1}(\mathbf{s}_{M-2})$ , illetve  $U_{M-1}^* = W_{M-1}(\mathbf{s}_{M-2})$ .

A fokozatokat sorban az utolsótól kezdve visszafelé számítva általában a  $k$ . fokozatban diszkrétizáljuk az  $\mathbf{s}_{k-1}$  állapot lehetséges tartományát, kapjuk az  $\mathbf{s}_{k-1,j}$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) jellemző állapotpontokat, és e diszkrét pontok mindegyikéhez megoldjuk a megfelelő

$$\min_{\{\mathbf{d}_k\}} u_k(\mathbf{d}_k, \mathbf{s}_k, \mathbf{s}_{k-1}) + W_{k+1}(\mathbf{s}_k)$$

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{f}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k)$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{h}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k)$$

$$\mathbf{0} \geq \mathbf{g}_k(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{d}_k)$$

feladatot. Ezek eredményei az egyes  $\mathbf{s}_{k-1,j}$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) jellemző állapotpontokhoz tartozó *optimális*  $\mathbf{d}_{k,j}^*$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) döntési változó vektorok, és a célfüggvény-részösszeg megfelelő *optimális* értékei:  $U_{k,j}^* \equiv (u_{k,j} + U_{k+1,j})^*$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ). Ezeket akár táblázatosan, akár grafikusán tárolva az  $\mathbf{s}_{k-1}$  állapot kiszámított függvényeinek tekintjük:  $\mathbf{d}_k^* = D_k(\mathbf{s}_{k-1})$ , illetve  $U_k^* = W_k(\mathbf{s}_{k-1})$ .

A legelső fokozatban ( $k = 1$ ) az  $\mathbf{s}_0$  állapot általában adott, egyetlen pont, ekkor egyetlen optimalizálási feladatot kell megoldanunk  $L$  helyett. Ha ezt is elvégeztük, akkor először is már ismerjük a célfüggvény optimumát, másodszor pedig a fokozatokon előre haladva, vagyis sorban az 1., 2., ...,  $M$ . fokozaton végighaladva a tárolt  $D_k$  és  $W_k$  függvények, valamint az eleve ismert  $\mathbf{f}_k$  függvények felhasználásával egyszerűen kiszámítjuk minden fokozat optimális  $\mathbf{d}_k^*$  döntési vektorát, és a hozzá tartozó  $\mathbf{s}_k^*$  kapott állapotot.

Az egyes optimalizálási feladatok számításigénye  $ab^N$ . A  $k = 1$  esetet kivéve a szükséges számításigény ennek  $L$ -szerese, mivel  $L$  optimalizálást végzünk. A teljes számításigény kb.  $a[1 + (M-1)L]b^N$ . Vagyis, míg eredetileg a számításigény  $b^{M*N}$ -nel lenne arányos, a dinamikus programozás alkalmazásával a számításigény csak  $b^N$ -nel arányos, ami lényeges, általában nagyságrendi csökkenést okoz. Az  $1 + (M-1)L$  tényező növelő hatása elhanyagolható a kitevő csökkentése mellett.

## 5.5. Globális optimumkeresés

### Konvex és konkáv alakzatok. Korlátozás és szétválasztás.

Folytonos tér valamely  $\Omega$  halmazát *konvex halmaznak* nevezzük, ha bármely két  $\mathbf{x}_1$  és  $\mathbf{x}_2$  elemére ( $\mathbf{x}_1 \in \Omega, \mathbf{x}_2 \in \Omega$ ) az azokat összekötő egyenes szakasz minden eleme is eleme az  $\Omega$  halmaznak:  $\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2 \in \Omega$ , ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ). Például konvex alakzat egy kör vagy egy ellipszis a síkban, vagy konvex minden egyenes szakasz. 180 foknál nagyobb belső szögű sokszög nem konvex.

Hasonlóképpen, egy  $f(\mathbf{x})$  függvényt *konvex függvénynek* nevezzük, ha összefüggő értelmezési tartományának bármely két  $\mathbf{x}_1$  és  $\mathbf{x}_2$  pontját összekötő egyenes szakasz pontjaiban a függvény értéke nagyobb, mint az  $(\mathbf{x}_1, f(\mathbf{x}_1))$  és az  $(\mathbf{x}_2, f(\mathbf{x}_2))$  pontokat összekötő egyenes szakasz  $f$ -koordinátája. Pontosabban legyen  $f_1 = f(\mathbf{x}_1)$ ,  $f_2 = f(\mathbf{x}_2)$ , és legyen  $\mathbf{x} = \alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2$ , ahol  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Ekkor teljesülnie kell, hogy  $f(\mathbf{x}) \leq \alpha f_1 + (1 - \alpha) f_2$ .

Az előjelek megfordításával kapjuk a *konkáv függvény* definícióját. Ekkor annak kell teljesülnie, hogy  $f(\mathbf{x}) \geq \alpha f_1 + (1 - \alpha) f_2$ .

Konvex függvény pl. az exponenciális függvény, míg konkáv függvény a logaritmusfüggvény. A szinuszfüggvény sem nem konvex, sem nem konkáv, de 0 és  $\pi$  között konkáv,  $\pi$  és  $2\pi$  között konvex.

**A globális optimum keresésénél legtöbbször felhasználjuk a konvex halmazokon értelmezett konvex függvények azon tulajdonságát, hogy azok lokális szélsőértéke egyben globális szélsőérték is.**

Válasszuk szét az  $f(\mathbf{x})$  célfüggvény  $\Omega$  megengedett tartományát elkülönülő, csak a határokon érintkező  $\omega_i$  konvex részhalmazokra:  $\Omega = \cup_i \omega_i$ , és közelítsük *alulról* a célfüggvényt az egyes  $\omega_i$  résztartományokon alkalmas  $\phi_i(\mathbf{x})$  **konvex** függvényekkel. E konvex függvények minimuma viszonylag könnyen meghatározható, és biztosan nem nagyobb, mint az eredeti  $f(\mathbf{x})$  függvény minimuma ugyanazon az  $\omega_i$  résztartományon. Vizsgáljuk meg egy tetszőleges  $\omega_i$  résztartomány tetszőleges  $\mathbf{x}$  pontjában  $f_i \equiv f(\mathbf{x})$  értékét, és hasonlítsuk össze egy másik,  $\omega_j$  résztartományon a  $\phi_j(\mathbf{x})$  függvény minimumával, amit jelöljünk  $\phi_j^*$ -gal. Ha  $f_i < \phi_j^*$ , akkor az  $\omega_j$  résztartomány bármely pontjában a célfüggvény értéke biztosan nagyobb, mint  $f_i$ , vagyis az  $\omega_j$  résztartomány biztosan nem tartalmaz globális minimumot, és így a keresésből kizárható.

A **Szétválasztás és korlátozás (Branch and bound)** módszere ezen alapul. A vizsgált tartományt két vagy több konvex részre vágjuk, ezek fölött a célfüggvényt alkalmas *konvex* függvényvel alulról közelítjük, és összehasonlításokkal kizárjuk a kizárható résztartományokat. A megmaradó résztartományokat tovább szabdaljuk kisebb konvex tartományokra, azokat is alulról közelítjük konvex függvényekkel, majd kizárjuk a biztosan nagyobb célfüggvény-értékű résztartományokat. Ezt az eljárást ismételve egyre szűkíthető az a tartomány, mely a globális minimumot rejtí, s végül elegendően kicsiny tartományt kapunk, melynek középpontját tekinthetjük minimumhelynek.

A módszernek van olyan változata is, melyben a konvex résztartományok a nem-megengedett tartomány elemeit is tartalmazhatják. E változatnál a közelítő konvex

függvény minimumhelyét még a megengedettség szempontjából is vizsgálni kell. Az összehasonlításhoz csak az olyan minimum használható föl, mely megengedett tartományba esik. Ellenkező esetben a résztartományt tovább kell bontani kisebb konvex tartományokra.

A keresést segítheti a célfüggvény újabb közelítése *fölről*, **konkáv** függvényekkel. Az alsó és felső közelítések együttes alkalmazása meggyorsíthatja a szélsőérték keresését.

### Egyéb tartományszűkítő módszerek

A ?? **alfejezetben** említett módszerek, vagyis az *intervallum-algebra* és a *kizáró függvény* módszerei eredetileg is globális szélsőérték-keresésre készültek. Ezen nem csak az értendő, hogy a globális értéket határozzák meg, hanem az is, hogy ha több helyen is fölveszi a függvény ugyanazt a globális szélsőértéket, akkor az összes ilyen hely megkereshető. Az *intervallum-algebra* módszerei a célfüggvény értékészletének szoros becslésével határozzák meg a minimumnak a tartományok (intervallumok) fölötti alsó közelítését. A *kizáró függvény* módszere bizonyos értéknél nagyobb függvényértékű tartományokat zár ki a keresésből.

## 5.6. Nemfolytonos változók

Az egészértékű változó értékhalmaza egyes esetekben folytonos térbe ágyazható. Például bizonyos (egész) számú elemet kell vásárolnunk, de ehelyett az elemszámot folytonos változónak tekintve optimalizálunk, majd a kapott optimumhelyhez közeli számú elemet alkalmazunk. Ez az eljárás azonban nem mindig megbízható. Könnyen előfordulhat, hogy a folytonos függvény minimumhelye pl. 3 és 4 közé esik (pl. 3.26), de az egész argumentumok közül 5-nél a legkisebb a célfüggvény értéke.

Az is gyakori, hogy a döntési változó nem hagyományos mennyiség, vagyis nem szám. Például szint kell választani, vagy anyagtípust, esetleg készülékfajtat. Ilyenkor is megszámozzhatjuk a választási lehetőségeket: 1, 2, 3, stb., de itt alkalmazhatnánk más sorszámozást is, az elemek tetszőlegesen rendezhetők sorba.

Több nemfolytonos változó esetében, ha azok értéke egymástól függetlenül választható, a változatok száma szorozódik. Például ha az  $x_1$  változó lehetséges értékeinek száma 8, az  $x_2$  változó lehetséges értékeinek száma pedig 5, akkor a lehetséges  $(x_1, x_2)$  értékpárok száma  $8 \times 5 = 40$ . Több, esetleg sok nemfolytonos változó esetében a lehetséges érték kombinációk száma nagyon nagy is lehet.

Az ilyen feladatok "természetesen kínálkozó" megoldási módszere az összes lehetséges érték kombináció egyenkénti megvizsgálása (kiértékelése), majd azok összehasonlítása. Ezt **teljes leszámplálásnak** nevezzük. Mivel ez kombinatorikus feladat, **kombinatorikus kifejtésről** is szokás beszélni. A megfelelő angol *combinatorial explosion* kifejezés rossz magyar fordítása a "**kombinatorikus robbanás**", azonban ez nagyon is kifejezi a lényegét: a változók számának növelésével robbanásszerűen nő a kombinációk száma.

Ha a nemfolytonos döntési változók mellett folytonosak is vannak, akkor a kombinatorikus kifejtés minden érték kombináció mellett még egy-egy folytonos optimalizálási feladat elvégzését is jelenti.

Egyes esetekben olyan nagy a lehetséges érték kombinációk száma, hogy pusztán azok összegyűjtése és felsorolása is gyakorlatilag lehetetlen. Más esetekben a felsorolás ugyan lehetséges, de a túl sok kiértékelés elfogadhatatlanul hosszadalmassá tenné a feladat megoldását. Ezért fejlesztettek ki olyan módszereket, melyekkel elkerülhető a teljes leszámolás.

### Implicit leszámolások

Tegyük föl, hogy a lehetséges változatok felsorolhatók, de az egyes változatok kiértékeléséhez a folytonos változók szerint optimalizálni kell, és ez túl sokáig tart. Például a lehetséges változatok száma 100 000, és minden egyes változat optimalizálása átlagosan 30 percet vesz igénybe. A teljes leszámolás ideje ekkor több, mint 5 év (pihenési időket nem számítva). Találunk azonban, vagy alkotunk egy gyorsan számítható közelítő eljárást, ami megbízhatóan alulról becsli az optimumot. Ha ez a közelítés pl. 0.1 másodperc alatt meghatározható, akkor 100 000 változat közelítő kiértékelése kb. 1.5 óráig tart.

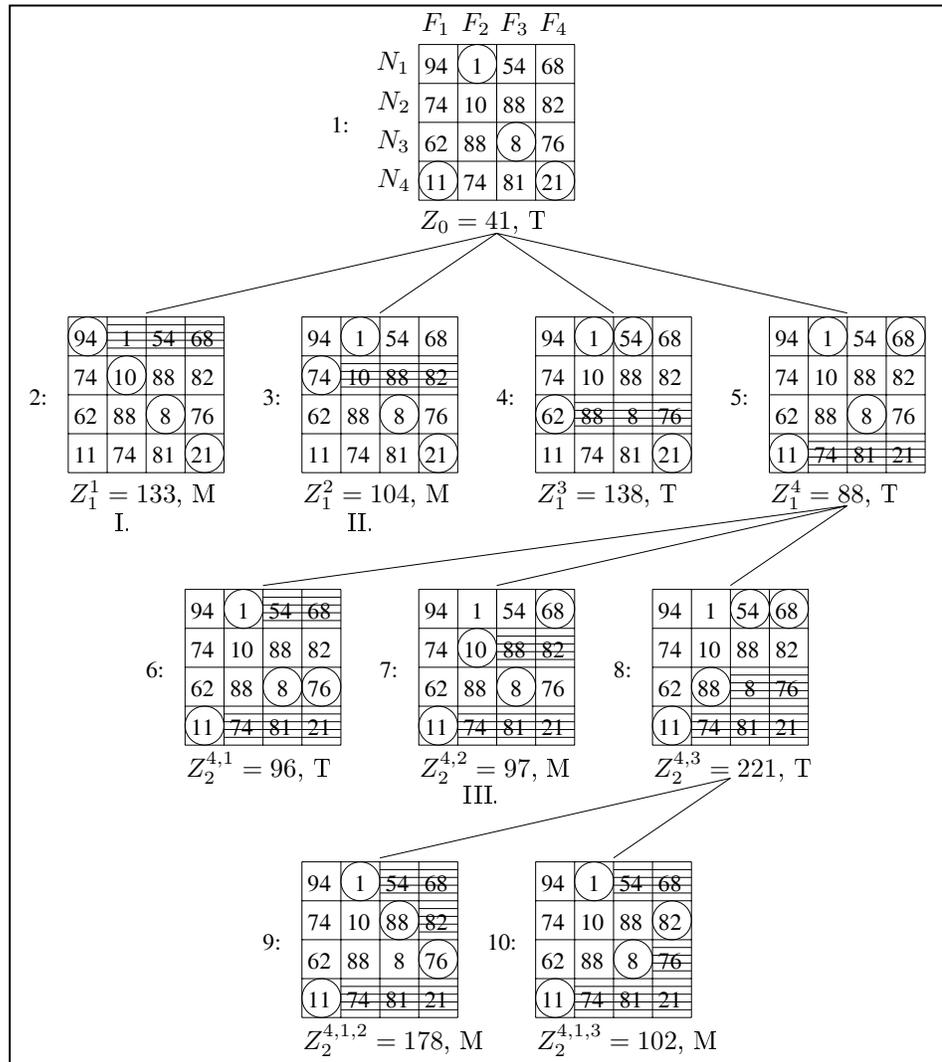
Rendezzük sorba ezeket a változatokat a közelítő optimum szerint növekvően. Ezután optimalizáljuk az eredeti célfüggvény szerint sorra az 1., a 2., a 3., változatot, stb. Ha a közelítés elég jó, akkor eredményül egy olyan táblázatot kapunk, ami (a konkrét számoktól eltekintve) a **5.1. táblázathoz** hasonlít. Az igazi optimumok nagyobbak, mint a közelítő optimumok, mert a közelítés megbízhatóan alulról közelít.

A közelítő eljárás szerint 5. legjobb változat optimalizálása után már nincs szükség a többi változat optimalizálására, mert az összes többi változat minimuma bizonyosan nagyobb, mint a 6. változat közelítő minimuma, ami viszont nagyobb, mint az eddig talált igazi minimumok legkisebbje. Az optimum értéke 1253.6, és a sorban a 4. változat az optimális. Eszerint megtaláltuk a globális minimumot, és ehhez összesen kb.  $1.5 + 5 \times 0.5 = 3$  óra számításra volt szükség. A 100 000 változat túlnyomó többségét nem optimalizáltuk, azaz nem értékeltük ki egzaktul, hanem csak becslést végeztünk. Erre mondjuk azt, hogy *implicit leszámolást* végeztünk.

Nemfolytonos (egészértékű) és vegyes egészértékű programozási feladatokban is alkalmazzák a részleges leszámolás különféle változatait. Általában a szétválasztás és korlátozás módszerét alkalmazzák, vagyis nem egyszerűen sorba rendeznek (mint a fenti példában), hanem elágazó struktúrákat építenek föl, és az egyes ágakat lehet implicit módon leszámolni.

Példaképpen egy összerendelési feladat megoldását mutatjuk be. *Figyelem! E feladat megoldására hatékonyabb módszerek is ismertek, azokat alkalmazzák. Itt azért oldjuk meg ezt a feladatot, mert ezen jól követhető a megoldás, és megérthető a módszer alapelve.* A példa jól mutatja a tiltott megoldások figyelembe vételének lehetőségét is.

Feladatunkban négy férfi válasz párt magának négy nő közül. Mind a négy férfi ugyanazon négy  $\{N_1, N_2, N_3, \text{ és } N_4\}$  nő közül választ. Négy döntési változónk  $F_1$ ,



5.11. ábra. Összerendelési feladat megoldása a szétválasztás és korlátozás módszerével

5.1. táblázat. Implicit leszámítás

sorszám	közelítő minimum	egzakt minimum
1	126.0	1277.2
2	127.8	2013.1
3	674.2	1321.8
4	1021.9	1253.6
5	1203.0	1843.2
6	1297.5	-
7	1506.2	-
8	1506.8	-
9	2017.4	-
stb.	stb.	stb.

$F_2$ ,  $F_3$ , és  $F_4$  értéként az egyes férfiak által választott nő nevét, vagyis egyenként az  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $N_3$ , és  $N_4$  nevek egyikét veszi föl.

Ha bármely férfi bármely nőt választhatja a többiek választásától függetlenül, akkor  $4^4 = 256$ -féleképpen választhatnak párt. Ekkor egy-egy nő több férfinak is lehet párja, miközben más nők esetleg pár nélkül maradnak. (Csak a férfiak választanak.) Feladatunkban azonban előírjuk, hogy nem választhatják ketten vagy többen ugyanazt a nőt. E korlátozással a megengedett megoldások száma  $4 \times 3 \times 2 \times 1 = 24$ .

Feladatunk a párok olyan kiválasztása (a férfiak és a nők olyan egymáshoz rendelése), melyben 10 év alatt a négy párnál összesen elhangzó hangos veszekedések száma minimális. Az egyes elképzelt pároknál 10 év alatt elhangzó hangos veszekedések számát állandónak tekintve, azokat egy mátrixba foglaltuk, és a **5.11. ábra** felső részében mutatjuk meg.

Bármely négy választás (az  $[F_1, F_2, F_3, F_4]$  tömb bármely értéke) a mátrix négy különböző elemét választja ki, és a minimalizálandó célfüggvény e négy elem összege. Formálisan a feladat így írható le:

$$\min_{\{F_1, F_2, F_3, F_4\}} U = \sum_{i=1}^4 M[F_i][i]$$

$$\sum_{i=1}^4 M[j][i] = 1 \quad (j = 1, 2, 3, 4)$$

$$1 \leq F_i \leq 4, F_i \text{ egész } (j = 1, 2, 3, 4)$$

A korlátozás és szétválasztás módszerénél alulról közelítjük az optimumot a korlátozó feltételek egy részének elhagyásával. A feltételek elhagyása teszi lehetővé az optimum alsó közelítését.

Kiindulásként minden korlátot elhagyunk, vagyis bármelyik férfi bármelyik nőt választhatja. Ekkor az egyes férfiak egymástól függetlenül választhatják ki a legkevesebb

veszekedést hozó nőt. Ezt mutatja a **5.11. ábra** 1. mátrixa. Az így nyert becslés (41) biztosan nem nagyobb, mintha korlátozásokkal arra kényszerítettük volna a férfiakat, hogy veszekedősebb párokat is válasszanak.

Ha a kapott választás véletlenül kielégítené a korlátozó feltételeket, akkor már meg is oldottuk volna a feladatot, hiszen ennél jobb megoldást nem találhatunk. Mivel azonban e megoldásnál az  $N_4$  nő két férfihoz is tartozik, ez nem megengedett, hanem tiltott megoldás, amit egy T betűvel jelzünk.

A megoldás tiltott, de a korlátozások figyelembe vételével kaphatunk megengedett, bár veszekedősebb megoldásokat. Válasszuk szét a lehetőségeket az  $F_1$  férfi lehetséges választásai szerint, majd részleges korlátozásokét vegyük figyelembe az ő választását, amikor a többi férfi választ párt. Azért részleges csak a korlátozás, mert a többi férfi egymás közti korlátozását nem vesszük figyelembe.

Az  $F_1$  férfi lehetséges választásait a **5.11. ábra** második sora mutatja (2., 3., 4. és 5. mátrix). A korlátozásokat a tiltott választások kihúzásával jelöltük.

Ha  $F_1 = N_1$ , vagyis ha  $F_1$  lefoglalja  $N_1$ -et, akkor a maradékból a többi férfi korlátozás nélküli optimális választása véletlenül éppen megengedett megoldás, amit egy M betű jelöl a 2. mátrix alatt. Ez az elsőnek talált megengedett megoldás, értéke 133. Amíg nem találunk ennél kisebb értékű megoldást, addig ezt tekintjük az optimális megoldás jelöltjének.

Ha  $F_1 = N_2$ , vagyis ha  $F_1$   $N_2$ -öt foglalja le, akkor a maradékból a többi férfi korlátozás nélküli optimális választása véletlenül szintén megengedett megoldás, amit egy M betű jelöl a 3. mátrix alatt. Mivel ez a megengedett megoldás jobb (104), mint a korábbi, innen kezdve ez az optimumjelölt.

Ha  $F_1 = N_3$ , vagyis ha  $F_1$   $N_3$ -at foglalja le, akkor a maradékból a többi férfi korlátozás nélküli optimális választása (értéke 138) tiltott megoldás, amit egy T betű jelöl a 4. mátrix alatt. Mivel ez a megoldás rosszabb, mint az eddigi legjobb megengedett megoldás (rosszabb, mint az aktuális optimumjelölt, jelen esetben a II. jelű 3. mátrix, 104-es értékkel), és mivel a többi férfi jobban nem választhat, az  $F_1 = N_3$  választással a továbbiakban nem kell foglalkozni.

Az  $F_1 = N_4$  esetben (5. mátrix) olyan tiltott megoldást kapunk, aminek értéke (88) kisebb az aktuális jelölt értékénél. A többi férfi más választásai között esetleg találunk olyan megengedett megoldást, ami a két érték között van, tehát jobb a jelenleginél. Ezért ezt az ágat tovább bontjuk az  $F_2$  férfi maradék választási lehetőségei szerint. Ezt mutatja az ábra harmadik sora.

Az  $F_1 = N_4$  választás után az  $F_2$  férfi más csak három nő közül választhat. E választásokat rögzíti a 6., 7., és 8. mátrix, az  $F_2$  férfi választásának következményeivel. Most már a maradék két férfi csak egymástól függetlenül választhat két nő közül, az első két férfi választását, mint korlátozást figyelembe véve.

Ahogy egyre több férfi választása szerint ágaztatjuk el a feladatot, úgy egyre több korlátozó összefüggést veszünk figyelembe, és végül minden korlátozást tekintetbe veszünk.

Konkrét feladatunk optimális megoldását a harmadszorra talált jelölt, a 7. mátrix mutatja. Az optimum biztos megtalálásához összesen 10 megoldást kellett kiértékelni a 24 megengedett megoldás helyett. A 10 kiértékelt megoldást viszont

nem a megengedettek, hanem az összes 256 megoldás közül választottuk ki.

Az MINLP feladatok megoldásánál a fentitől eltérő, különféle korlátozási és becslési módszereket is alkalmaznak. A fenti példa csak egyfajta alapelvet mutatott be.

### Szimulált hőkezelés (*simulated annealing*)

A fémmegmunkálásban *hőkezelésnek* (is) hívják a fém belső feszültségének csökkentésére szolgáló olyan eljárást, melyben az anyagot először megizzítják, majd szigorúan előírt program szerint lassan csökkentik hőmérsékletét. Hirtelen lehűtéskor nincs idő a termodinamikai egyensúly kialakulására, és magas energiaszintű mikrokristályos szerkezet alakul ki. Lassú hűtéskor alacsonyabb energiaszintű szerkezet is létre tud jönni. Az előzetes melegítésre azért van szükség, hogy kikerüljünk az aktuális lokális minimumhelyről.

A termodinamikai statisztikus sokaságok elmélete szerint egy-egy  $\mathbf{s}$  mikroállapot  $P(\mathbf{s})$  valószínűsége arányos az  $\exp(-\frac{E(\mathbf{s})}{kT})$  kifejezéssel, ahol  $E$  a mikroállapot energiája,  $T$  a termodinamikai hőmérséklet, és  $k$  egy univerzális állandó. Minél nagyobb  $T$ , annál nagyobb a valószínűsége a magasabb energiájú állapotoknak.

A *szimulált hőkezelés* módszerénél az  $E$  energia szerepét az  $f(\mathbf{d})$  célfüggvény veszi át, állapotnak pedig a döntési változók  $\mathbf{d}$  adott értékét tekintjük. Önkényesen fölvev  $T$  paraméter mellett a  $\mathbf{d}$  döntési változók aktuális értékét úgy módosítjuk, hogy a módosított értéket a  $P(\mathbf{d}) \sim \exp(-\frac{f(\mathbf{d})}{kT})$  valószínűséggel fogadjuk el, és  $(1 - P(\mathbf{d}))$  valószínűséggel vetjük el. E módosítások során a célfüggvény értéke nagyrészt csökken, de bizonyos valószínűséggel nőhet is. Bizonyos számú lépés után csökkentjük  $T$  értékét, és megismételjük a lépegető eljárást, majd újra és újra csökkentjük  $T$  értékét az előírt program szerint. Minél kisebb  $T$ , annál kisebb a célfüggvény növekedésének valószínűsége, viszont a mégoly kis növekedési valószínűség is reményt ad arra, hogy elkerüljük a globális optimumtól távoli lokális optimumhoz konvergálást.

A módszer alkalmazásánál az egyes feladattípusokhoz külön-külön ki kell fejleszteni a döntési változók módosításának algoritmusát, és ki kell kísérletezni az alkalmas hűtési programot.

### Genetikus algoritmusok

E módszerek a biológiai evolúció természetes kiválasztódási folyamatát utánozzák. A döntési változók egy-egy adott  $\mathbf{d}$  értékét egy-egy "biológiai egyed" génállományának tekintik, ami az öröklődés során változhat. A módszerek nem egy-egy egyed fejlődését szimulálják, hanem egy populációét, vagyis az egyedek adott méretű halmazával foglalkoznak.

A célfüggvényt úgy tekintjük, mint ami az öröklődéssel létrejövő egyedek életrevalóságát méri (az angol nyelvű szakirodalom a *fitness* / "fitnesz", edzettség/ kifejezést használja). Az életrevalóbb egyedek génállománya nagyobb valószínűséggel öröklődik, mint a gyengéké, de a gyengébbek génjei is öröklődnek bizonyos valószínűséggel.

A módszer alkalmazásához meg kell adni, hogy mit tekintünk géneknek, hogyan módosíthatók ezek, és hogyan lehet az ivaros szaporodáshoz hasonló kettős öröklődést szimulálni (a gének mely részei tekinthetők önálló egységeknek).

Az algoritmus durván a következő:

1. Véletlenszerűen generálunk egy populációt.
2. Kiszámítjuk az egyedekhez tartozó célfüggvény-értékeket (fitness). Kiszámítjuk ezeknek átlagát a teljes populációra, esetleg a minimális és maximális értékeket is.
3. A kiszámított fitness-értékektől függően létrehozuk a következő generációt. (Ez a lényeges lépés, amit alább még részletezünk.)
4. Ismétlés a 2. ponttól.
5. Bizonyos számú generáció után, vagy ha a fitness-átlag vagy minimum-maximum nem változik, befejezettnek tekintjük az algoritmust.

Az új generáció létrehozásánál többféleképp is eljárhatunk. Egy lehetséges megoldás pl. az alábbi:

3.1 A legjobb egyedek néhányát (pl. a 3 legjobbat) változtatás nélkül átvesszük az új generációba (megőrzés, avagy *reprodukción*).

3.2. A többieket a fitness-nek megfelelő valószínűség szerint választjuk be abba a körbe, amiből az új generáció öröklődik.

3.3. Az öröklődési körbe választott egyedek közül véletlenszerűen párokat választva, azok között *kereszteződések*et hozunk létre. Ha az  $i$ . egyed génsorozata  $A_i, B_i, C_i, \dots, Z_i$ , a  $j$ . egyedé  $A_j, B_j, C_j, \dots, Z_j$ , akkor őket egy véletlenszerűen kiválasztott helyen, pl.  $K$  és  $L$  között elvágva "tévesen" illesztjük össze újra. A két módosult elem egyike  $A_i, B_i, \dots, K_i, L_j, M_j, \dots, Z_j$ , a másik pedig  $A_j, B_j, \dots, K_j, L_i, M_i, \dots, Z_i$ .

3.4. Az eddigiek szerint létrehozott egyedek közül véletlenszerűen kiválasztunk néhány (véletlen, vagy előre rögzített számú) egyedet, és azok ugyancsak véletlenül kiválasztott génjeiben bizonyos (alacsony) valószínűséggel változásokat generálunk (*mutáció*). A legegyszerűbb mutációs eljárás az egyes bitek átfordítása (0/1), de bonyolultabb megoldások is alkalmazhatók. Természetesen más sorrendek és kiválasztási eljárások is lehetségesek.

A kiválasztások és a mutáció során alkalmazott valószínűségek az eljárás paraméterei, melyeket az adott feladattípushoz gondosan ki kell kísérletezni. Ugyancsak lényeges paraméter a populáció mérete.

Elvben a reprodukció, a keresztezés és a mutáció együtt biztosítja a populáció génállományának részben a megőrzését, részben javulását. Az egyes gének vagy géncsoportok az életrevalósághoz szükséges tulajdonságok hordozói, és a kereszteződéssel egymás mellé kerülhetnek a kedvező tulajdonságok. A mutáció biztosítja újabb tulajdonságok megjelenését a populációban.

Ennek ellenére előfordul, különösen kevés elemet tartalmazó populációban, hogy az öröklődés során fokozatosan csökken a génállomány változékonysága, és végül csökken a változatossága is, vagyis a populáció *elfajul*. Ekkor az egyedek az életrevalóság szempontjából olyan lokális szélsőértékhez kerülnek, melynek környékén az életrevalóság meredeken csökken, a változékonyságot növelő valószínűségek nem elég nagyok, és a megőrzési valószínűségek túl nagyok. A valódi evolúció során

ilyenkor a populáció elpusztul, mert nem tudja követni a környezet változásait. A szélsőérték-keresésnél a környezet (a célfüggvény) állandó, tehát az elfajult populáció fennmarad, és nem változik.

Sajnos nincs olyan egzakt kritérium, aminek alapján eldönthető lenne, hogy ha a populáció legjobb egyedéhez tartozó célfüggvény-érték hosszú időn keresztül állandó marad, akkor elértük az optimumot, vagy elfajult a populáció. A populáció egyedeinek változatossága azonban a gyakorlatban mégis jól használható ennek ellenőrzésére.

## 6. fejezet

# Javasolt irodalom

SMITH, R.: *Chemical Process Design and Integration*, John Wiley & Sons Ltd. (2005).

DOUGLAS, J. M.: *Conceptual Design of Chemical Processes*. McGraw-Hill, 1988.

SHENOY, U.V.: *Heat Exchanger Network Synthesis: Process Optimization by Energy and Resource Analysis*. Gulf Publishing Company, Houston, TX, USA, 1995.

LINNHOF, B.; ET AL.: *Pinch Analysis and Process Integration: A User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy*. Butterworth, 1982.

EL-HALWAGI, M. M.; V. MANOUSIOUTHAKIS, V.: Synthesis of Mass Exchange Networks. *AIChE Journal*, **35**(8): 1233-1244 (1989).

WANG, Y. P. ; SMITH, R.: Wastewater Minimisation. *Chemical Engineering Science*, **49**: 981-1006 (1994).

HALLALE, N.: A New Graphical Targeting Method for Water Minimisation. *Advances in Environmental Research*, **6**(3): 377-390 (2002).

FÖLDES P., FONYÓ Zs.: *Rektifikálás*. Műszaki, 1978.

KING, J. C.: *Separation Processes*, McGraw-Hill (1971+).

KÓSA ANDRÁS: *Optimumszámítási modellek*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1979.

WILDE, D. J.: *Optimums Seeking Methods*. Prentice-Hall, New York, 1964.