

Fonyó Zsolt
az MTA levelező tagja

Integrált vegyipari rendszerek folyamatszintézise

Elhangzott 1999. február 16-án

Bevezetés

A műszaki kémia egyik legfontosabb feladata a vegyipari termelőfolyamatok optimális kialakítása, vagyis a *vegyipari folyamattervezés*. E tevékenység célja a műszaki kémiai termelőfolyamatoknak mint rendszereknek optimális kijelölése, alkalmasan megválasztott műszaki-gazdasági célfüggvény és korlátozó feltételek alapján. A vegyipari termelőfolyamatok megválasztása, a megvalósításokhoz szükséges berendezések és a köztük kialakítandó anyag-, energia- és információs hálózatok tervezése a vegyész-mérnök legszebb, legtöbb kreativitást igénylő feladatai közé tartozik.

A folyamattervezés tevékenysége azonban bonyolult, mert a) a tervezés során különböző – sokszor egymásnak ellentmondó és nem összemérhető – célokat kell mérlegelnünk, b) be kell tartanunk azokat a korlátokat, amelyeket a magasabb hierarchiaszintű rendszer optimális kialakítása igényel, c) a folyamatok értékelésénél mára már meghatározóvá váltak a környezettudomány által szolgáltatott szempontok, azaz a környezet védelme a folyamattervezés egy új vezérlője lett. Ezeknek megfelelően a hangsúly eltolódott a keletkezett kémiai hulladékok kezeléséről a hulladék keletkezésének csökkentésére. Ennek legfontosabb eszköze a hulladék anyagok és hulladék energiák célirányos felhasználása az anyag- és energiaátalakító folyamatok mind teljesebb integrációjával.

A folyamattervezés alapjai

A modellezés hierarchiaszintjei

A vegyipari folyamattervezésnél az alrendszerket képező műveleti egységek számának, típusának, optimális kapcsolási módjának, szerkezeti és üzemeltetési paramétereinek meghatározása a feladatunk. Az ilyen összetett és interaktív részproblémákat magában foglaló feladatokat tapasztalatok szerint csak azok hierarchikus felbontása után lehet sikeresen megoldani.

Az ún. *hierarchikus modellezés* módszere szerint a következő hierarchiaszintek megkülönböztetése bizonyult hasznosnak:

- egy- és többfokozatú (egyszerű és összetett) műveleti egységek szintje,
- a műveleti egységek hálózatának szintje (üzemi szint) és
- vállalati szint.

A hierarchikus modellezés általánosan elfogadott gyakorlata szerint a rendszertani tárgyalás a hierarchiaszinteknek megfelelő matematikai modelleket igényel, vagyis a felsőbb szintű modellektől nem követelhetjük meg az alsóbb szinten szükséges részletességet. Ez a megállapítás voltaképpen azt jelenti, hogy a struktúrának stabilabbnak kell lennie alkotóelemei modelljénél, továbbá, hogy a modellezés felsőbb szintjén létjogosultsága van az alrendszerek zárt analitikus közelítő összefüggéseinek, melyeket régebben – a számítógép előtti korszakban – az alsóbb hierarchiaszinteken használtak. Így kerülnek helyükre a különböző vegyész-mérnöki tudománytörténeti korokból származó matematikai modellek.

Műveleti egységek szintje

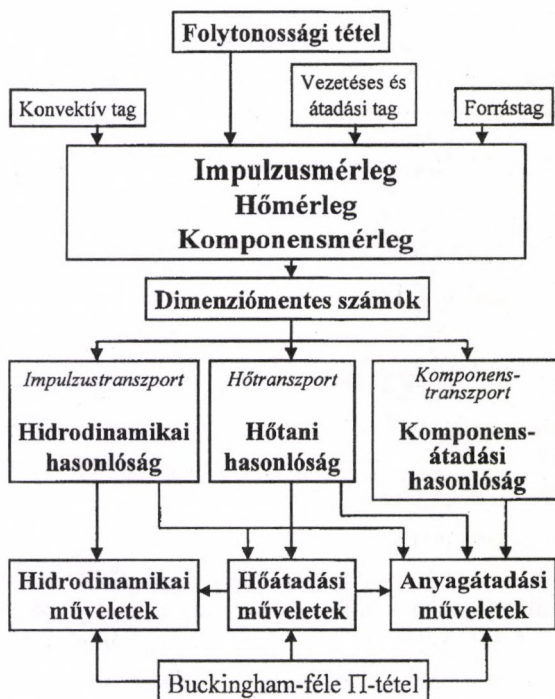
Az egyszerű és összetett műveleti egységek rendszeres kutatásainak eredményeképpen a műveleti szintű modellezés igen fejlett fokot ért el. E tématerületen belül világosan megfigyelhető a tudományos absztrakció előrehaladása és elmélyülése [1–3].

A fejlődést tömören úgy vázolhatjuk, hogy az akkoriban leíró jellegű *kémiatechnológiából* – amely az idetartozó ismeretkört eredetileg leíró módon kezelte – a 20. század első felében kivált és idővel kifejlődött a *művelettan* mint hasonló célú berendezések (készülékek, gépek) általános, vagyis a konkrét gyártási eljárástól (technológiától) független elmélete. A korai művelettan már elemző jellegű ismeretanyag volt, de igazán tudományos megalapozottságot csak az 1950-es években fejlődésnek indult *transzportfolyamatok elmélete*nek bevonásával nyert.

Az így körülhatárolt „chemical engineering” területén ugyanis a 20. század egyik alapvető tudománytörténeti felismerése az volt, hogy a különböző műveleteknek azonos fizikai és kémiai alapjai vannak, nevezetesen a komponens-, hő- és impulzustranszport. Ezeknek az alapoknak az általánosítása és rendszerezése ma már lehetővé teszi a művelettan egységes tárgyalását. Tehát egy újabb absztrakciós lépéssel – a transzportfolyamatok elméletének bevonásával – kidolgozhatóvá vált a tudományos megalapozottságú művelettan.

Fábrý György kollégámmal közösen írott és a közelmúltban megjelent könyvünk [4] részletesen rámutat a hasonlóságelmélet fontos és áthidaló szerepére az elmélet és a mérnöki gyakorlat között. A hasonlóságelmélet segítségével ugyanis a transzportfolyamatok elméletéből következő differenciális mérlegegyenleteket dimenziómentes mennyiségek összefüggéseire vezethetjük vissza. Ennek alkalmazása során a helyi differenciális mérlegegyenletek tagjaiból makroszkopikus vezetési és konvektív tagok, a térbeli határfeltételekből pedig átadási tagok lesznek. A hasonlóságelmélet az e tagok dimenziómentes arányairól, illetve az egyes transzportjelenségekhez tartozó (energia-, impulzus-, komponenstranszport) dimenziómentes arányok közti összefüggésekről ad számot.

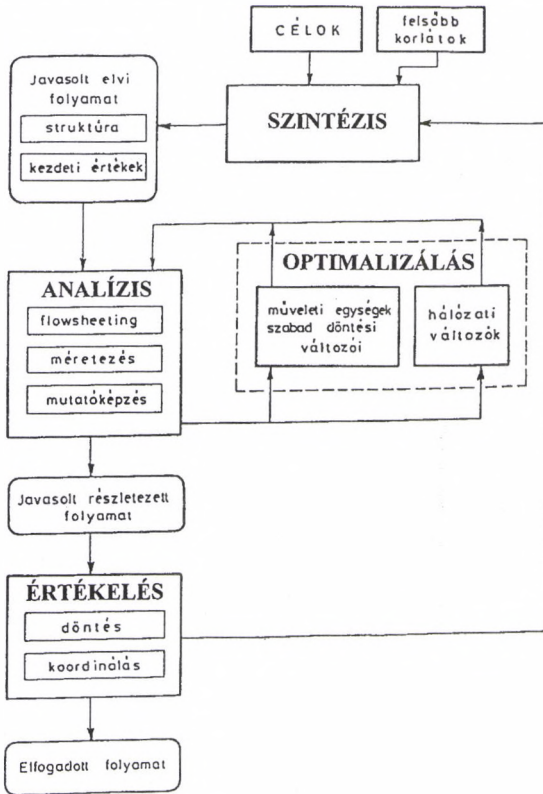
Könyvünkben rámutatunk arra is, hogy a hasonlóságelmélet nemcsak a vegyipari folyamatok biztonságosabb méretnövelését segíti elő laboratóriumi méretről üzemire, hanem a kísérleti adatok és tapasztalatok általánosításával lehetővé teszi a hidrodinamikai, hőtani, anyagátadási és kémiai műveletek egységes tárgyalását is. A vegyipari műveletek ilyen értelmű felépítését vázolja egyszerűsítve az 1. ábra.



1. ábra. A műveletek felépítése

Műveleti egységek hálózatának szintje

Jelen székfoglaló előadás fő célja azonban nem a műveleti, hanem a hálózati szintű modellezés újabb eredményeinek ismertetése. A vegyipari folyamat tervezés főbb mozzanatai a szintézis, az analízis, az optimalizálás és az értékelés (2. ábra). Mivel a tervezés ciklusában a szintézis mozzanat szerepel, a folyamattervezés egészében véve szintézisfeladat, így a folyamattervezés kifejezés szinonimája a folyamatszintézis.



2. ábra. A folyamattervezés elvi vázlat

szeder struktúráját (elemeinek számát és típusát, valamint az elemeket összekötő hálózat topológiáját), továbbá az adott struktúrájú rendszer szabad döntési változóinak egy a javasolt folyamatra jellemző tartományát és kezdeti értékét.

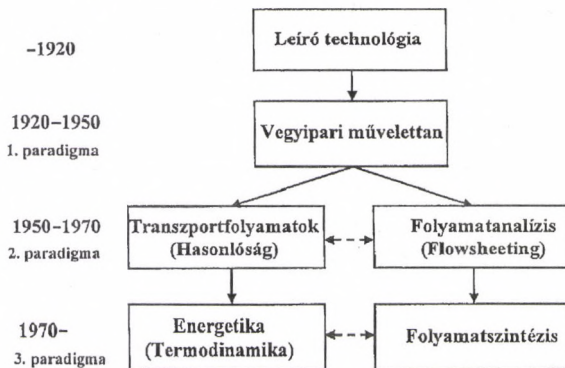
A tervezés szintézis részét hosszú ideig elhanyagolták. A kutatók figyelme csak az utóbbi időkben irányult a szisztematikus *folyamatszintézis* témakörére. Ma már állíthatjuk, hogy a folyamatszintézis az utóbbi három évtizedben a műszaki kémia egyik legdinamikusabban fejlődő, legalkotóképesebb területe

volt, és ezáltal lényeges hatást gyakorolt a vegyipari folyamatok fejlesztésére, tervezésére és működtetésére. A folyamatszintézis a vegyipari folyamatok fizikai-kémiai jelenségeit és kölcsönhatásait felhasználva, *rendszeres megközelítést javasol a folyamatok vegyész-mérnöki tervezésére.*

Jelen előadás keretében nem kívánok mélyebben belebocsátkozni a *Kuhn-féle paradigma-elméletbe*,¹ vagyis a tudósiskolák témaváltása történelmi folyamatának filozófiájába, mégis célszerűnek látszik a folyamatszintézis helyének megjelölése a „chemical engineering”-iskolák tudománytörténetében. Az *első paradigma* korszakát képező vegyipari műveletek iskolája után a fejlődés és a hozzátartozó témaváltás két egymást befolyásoló, párhuzamosan haladó, *különböző szinten történt (3. ábra).* A *mikroszintű fejlődés* eredményezte a transzportfolyamatok elméletét, és tette lehetővé a különböző műveletek tudományos igényű megértését és leírását. E mikroszintű kutatás napjainkban a műveletek energetikájával folytatódik, ennek célja a változások magyarázata a hajtóerők, az energiatípusok és a nem megmaradó entrópia segítségével. A párhuzamosan végbement *makroszintű fejlődés* a folyamatok rendszeres vegyész-mérnöki tervezését tette lehetővé. Ennek első fejlődési fokozata a folyamatanalízis, vagyis a műveletek hálózatának anyag- és hőmérlegsámítása, értékelése és optimalizálása volt, a második fokozat pedig a rendszeres folyamatszintézis. Ennek eredményeképpen ma már nyilvánvaló, hogy az elszigetelt és integrált műveletek optimális jellemzői (konverzió, refluxarány, nyomás stb.) különbözőek, továbbá, hogy az üzemi rendszerjellemzőket (lefúvatás, recirkuláció, regenerálás stb.) is figyelembe kell vennünk az optimalizálandó változók között.

A jelen székfoglaló előadás a folyamatszintézissel foglalkozik, mely az előbbi besorolás szerint már a vegyész-mérnöki tudomány *harmadik paradigmájához* tartozik.

A jelen székfoglaló előadás a folyamatszintézissel foglalkozik, mely az előbbi besorolás szerint már a vegyész-mérnöki tudomány *harmadik paradigmájához* tartozik.



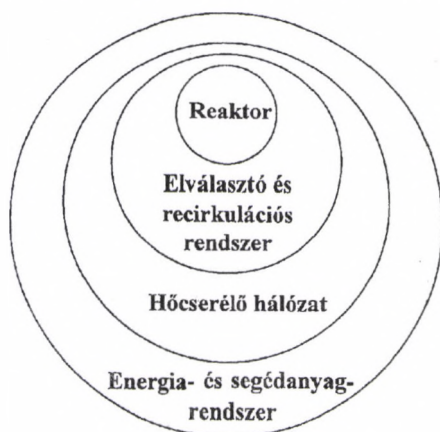
3. ábra. A „chemical engineering” paradigmái

¹ A paradigma ebben a kontextusban a valóságos gyakorlat egyes elfogadott mintáit jelenti, melyek magukban foglalják a megfelelő törvényeket, elméletet, az alkalmazást és a kutatási eszközöket együtt. A közös paradigmák alapján a kutatókat azonos szabályok és minták vezérlik. Ez az elkötelezettség és a hozzákapcsolódó közmegegyezés előfeltétele a normál tudománynak, azaz egy bizonyos kutatási hagyomány létrejöttének és fennmaradásának.

ma-korszakához tartozik. A bemutatandó kutatási eredmények pedig hozzájárulást jelentenek a folyamatszintézis megvalósításához *generikus tervezési módszerek és eszközök* kidolgozása formájában.

Hierarchikus és környezetközpontú folyamattervezés

A hierarchikus folyamattervezés legcélszerűbben az ún. „*hagymadiagram*”-on szemléltethető (4. ábra). E diagram különböző rétegei jelképezik a folyamattervezés egymást követő lépéseit. A folyamattervezés a legbelső réteggel a



4. ábra. A hierarchikus folyamattervezés „*hagymadiagram*”-ja

reaktor megtervezésével kezdődik, majd kifelé haladva az elválasztó rendszerrel és recirkulációval, a hőcserélő hálózattal, az energia-, és segédanyag-rendszerrel folytatódik.

A hierarchikus folyamattervezési eljárás [7, 8] tehát evolúciós (fokozatosan fejlesztő) megközelítéssel, az ábrán látható döntési szintek hierarchiája szerint lépésről lépésre építi fel és tökéletesíti a folyamatot. Ezt az építkezést mutatjuk be az akrolein-gyártás példáján az 5a és 5b ábrákon. Ennek során a folyamat egyre több részletét dolgozzuk ki heurisztikus szabályok felhasználásával gazdaságos-

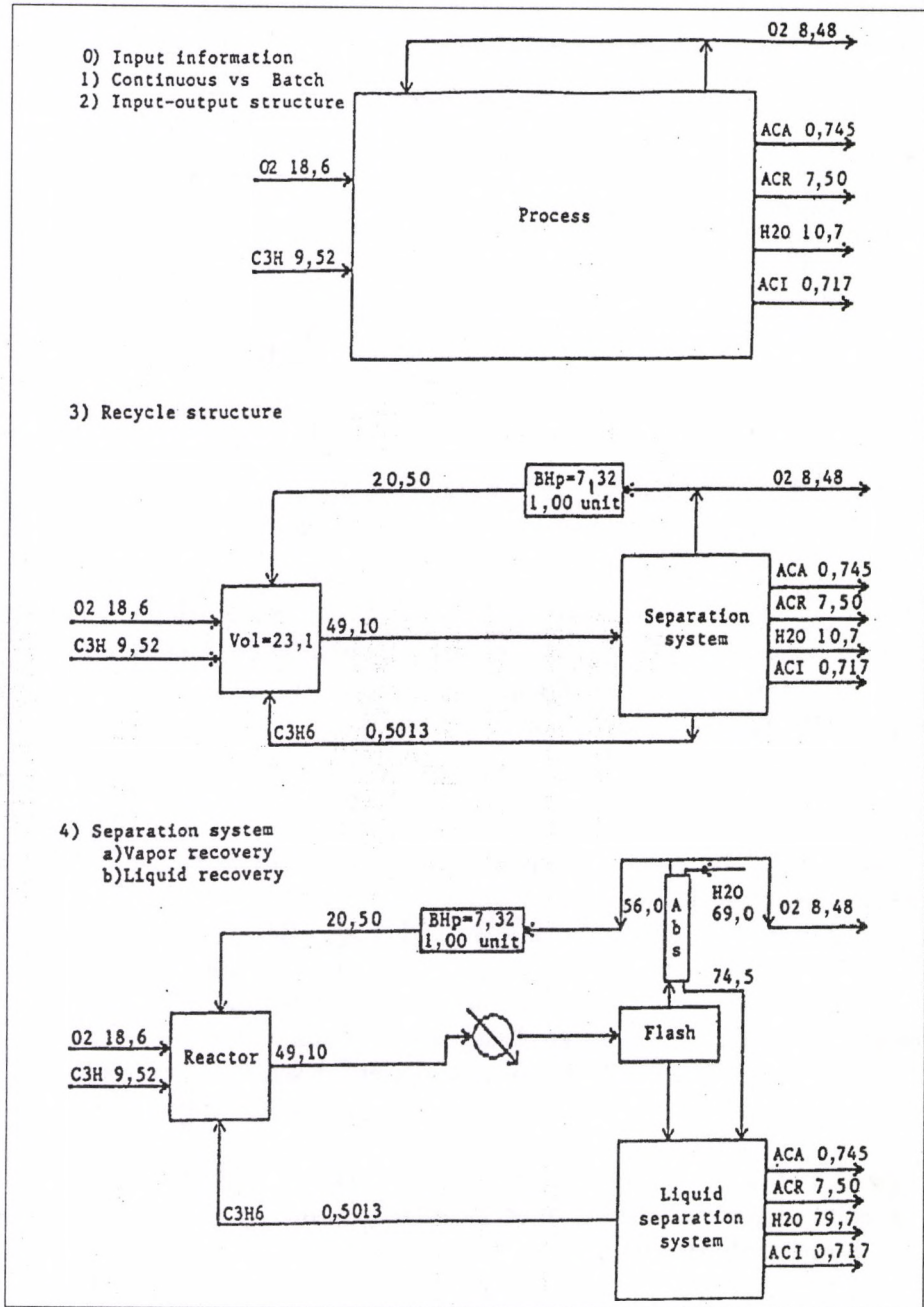
sági mutatók generálásával, analízisével és értékelésével. A heurisztikus szabályok alapja lehet:

- egyszerű természettudományos vagy műszaki-gazdasági tapasztalat,
- kvalitatív mérnöki megfontolások,
- kvantitatív megfontolások és numerikus vizsgálatok.

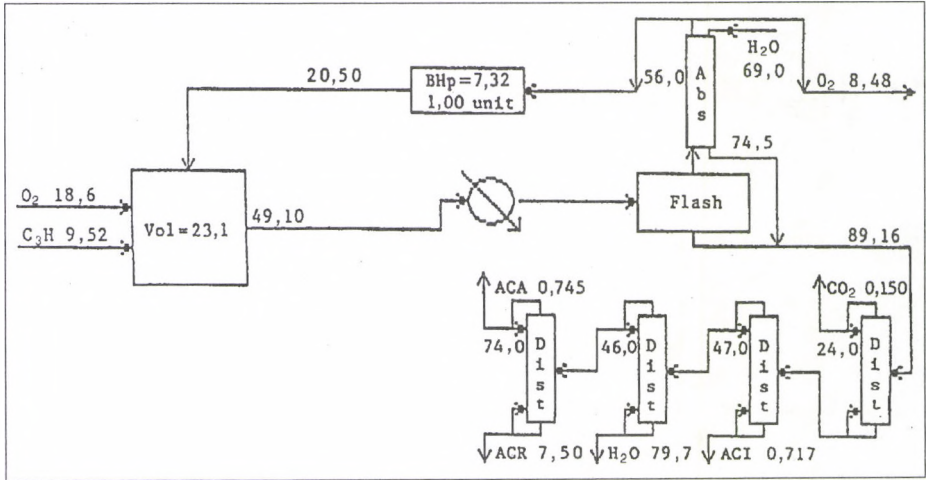
A heurisztikus szabályok bizonytalanságai és ellentmondásai miatt az utóbbi években próbálkozások történtek e szabályok kvantitatív átfogalmazására, valamint az ellentmondó és bizonytalan döntési helyzetek megoldási folyamatainak algoritmizálására.

A műszaki kémia történetének korábbi szakaszaiban a folyamatszintézis célfüggvényében és korlátaiban, a meghatározó jelentőségű *gazdasági szempontok* mellett, szerepeltek ugyan olyan tételek, mint a szabályozhatóság, üzemeltethetőség, megbízhatóság, biztonság, rugalmasság, környezeti előírások, azonban ezek gyakorlatilag csak a gazdasági értékelés részletesebb kifejtését

Integrált vegyipari rendszerek folyamatszintézise



5a ábra. A hierarchikus folyamattervezés első négy szintje



5b ábra. A hierarchikus tervezési módszerrel szintetizált folyamat

jelentették. Jelenleg azonban a környezeti szempontok meghatározóvá váltak, azaz a *környezet védelme* a folyamatszintézis új vezérlője lett. A hangsúly tehát eltolódott a keletkezett kémiai hulladékok kezeléséről a *hulladék keletkezésének csökkentésére*. Ennek legfontosabb eszközei:

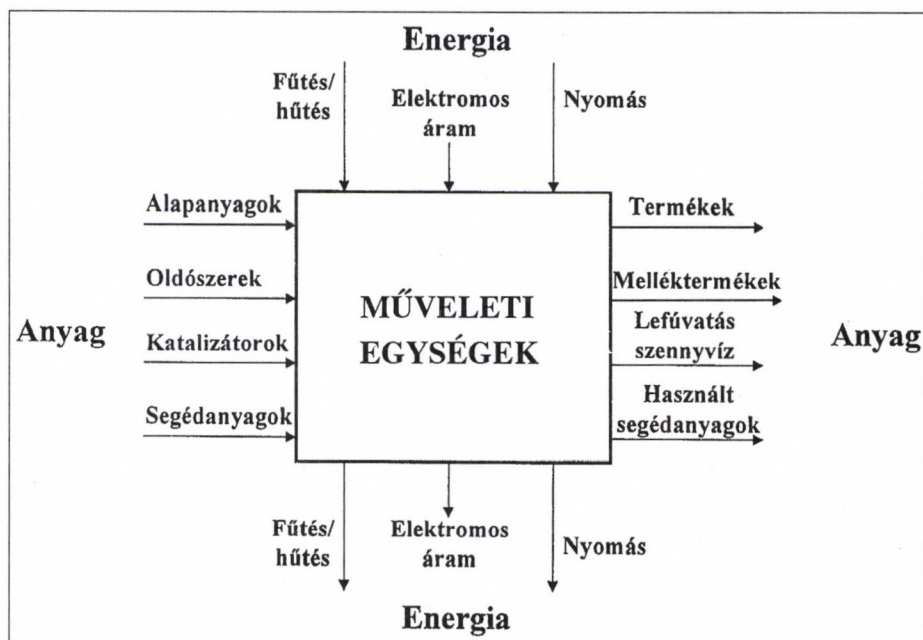
- az áttérés a hulladékszegény folyamatok alkalmazására,
- a mégis keletkezett kémiai hulladékok mind teljesebb körű újrafelhasználása és visszaforgatása, valamint
- a hulladék anyagok és a hulladék energiák célirányos felhasználása az anyag- és energia-átalakító folyamatok mind teljesebb integrációjával.

Ezeknek megfelelően az ún. környezetközpontú folyamattervezés legnagyobb kihívása napjainkban már nem csupán a szintézisprobléma kombinatorikus kezelhetősége, hanem olyan anyag- és energiahulladékokban szegény integrált műszaki kémiai eljárások kifejlesztése, amelyek az alrendszereket képező műveletek belső fizikai-kémiai összefüggései figyelembevételével, integrációval, a hulladékok csökkentésével hozzáadott nyereséget eredményeznek.

Az elmúlt három évtizedben elért kutatási eredményeink tételes ismertetése előtt – a fenti kihívásnak megfelelően – az anyag- és energiainTEGRÁCIÓT megvalósító szintézisproblémák olyan fontos vezérlőjeit szükséges röviden áttekintenünk, mint az energiainTEGRÁCIÓS hálózatok hőkaszkádelmélete, az anyagintegrációs hálózatok komponenskaszkád-elmélete vagy az integrált megközelítés algoritmikus kezelése ún. vegyes-egész értékű programozással.

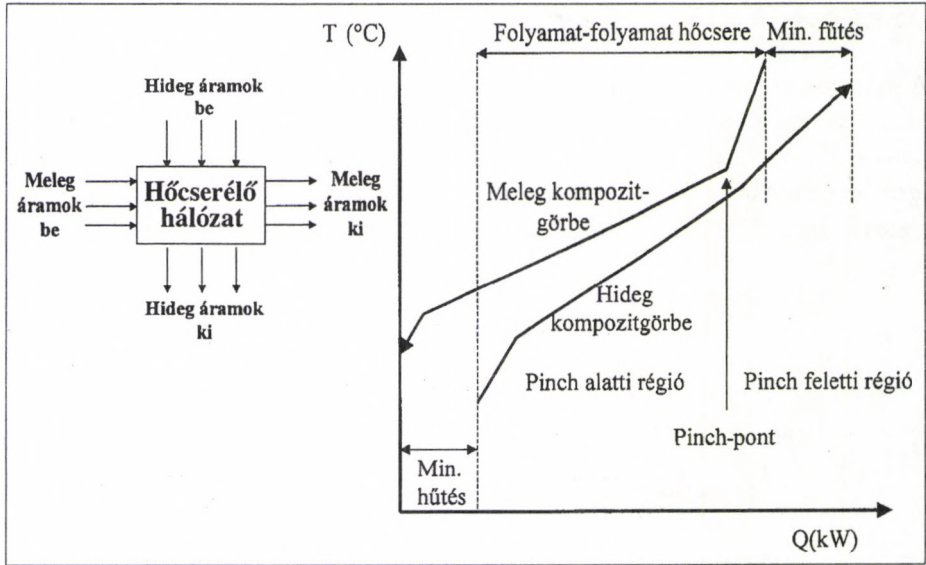
Az energia- és anyagintegráció alapjai

A műszaki kémiai eljárások az anyag- és energiaáramok intenzív integrációját valósítják meg. A vegyipari üzemek célja általában az anyag, pontosabban a kémiai komponsek átalakítása, szeparációja és kezelése. Energia is szükséges azonban például a kémiai reakciók, a szeparáció, a szivattyúzás és kompresszió megvalósításához (6. ábra).



6. ábra. A vegyipari folyamatok anyag- és energiamátrixa

Az *energiaintegráció hőcaskádelmélete* rendszeres módszert kínál az energia-veszteségek csökkentésére és az energia-visszanyerés maximálására (Pinch-módszer) [9]. A módszer lehetővé teszi a vegyipari rendszerek energia-fogyasztásának csökkentését az áramok energiatartalmának gazdaságos felhasználásával, illetve visszaforgatásával. A módszer alapját képező úgynevezett hőcaskád felírásakor arra az egyszerű tényre támaszkodunk, hogy adott technológiai folyamat esetén a hőátadások adott hőmérsékleten játszódnak le. Áramok felmelegedése és lehűlése esetén egy bizonyos hőmennyiség ugyanis adott hőmérséklet határok között lép át egyik közegből a másikba. A hő-

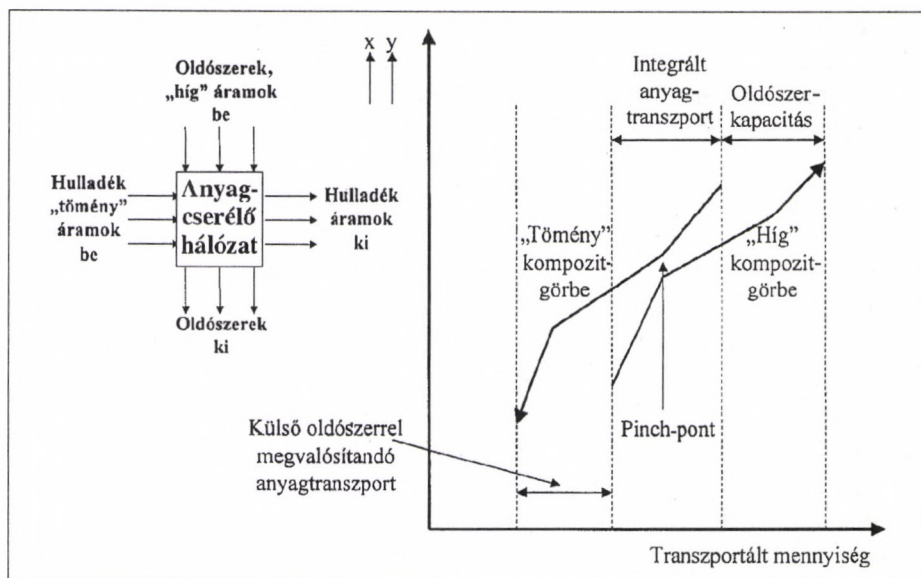


7. ábra. EnergiainTEGRÁCIÓ ÉS A Pinch-móDSZER T-Q DIAGRAMJA

kaszkádot valamilyen véges minimális hőmérséklet-különbség függvényében írhatjuk fel.

Először a hőkínálatokat és hőigényeket vesszük számba hőmérséklet-intervallumonként, majd ezekből *hőkaszkádot* képezünk. A magasabb hőmérsékletű intervallumok energiafeleslegüket átadhatják az alacsonyabb hőmérsékletűeknek, de fordítva nem. Ez a termodinamika II. főtétele alapján ugyanis lehetetlen. Kiválasztva azonban a legnegatívabb fiktív hőátadást, és ennek megfelelő energiát közölve a rendszerrel, megalkotható olyan kaszkád, melynek hőátadásai reálisak. Az így adódó fűtés és hűtés biztosan a rendszer minimális fűtése és hűtése, mert kevesebb külső hőforgalom esetén a kaszkádban valahol negatív hőátadást kapnánk. Azt a hőmérsékletet, melynél ez a negatív érték fellépne, szűkületi hőmérsékletnek (vagy Pinch-hőmérsékletnek) nevezzük (7. ábra).

A módszer további grafikus és numerikus eszközei lehetőséget nyújtanak az anyagáramok energia- és segédanyag-hálózzattal kialakítandó kapcsolatának megtervezésére, továbbá a hőerőgépek, hőszivattyúk és a termikus műveletek megfelelő illesztésére. A minimális fűtési és hűtési igény meghatározásán túlmenően a módszer lehetőséget nyújt a beruházási költségek és így az integrált műszaki kémiai rendszer összes költségének becslésére, sőt a technológiai kapcsolások előzetes tervezésére is.



8. ábra. Anyagintegráció és a Pinch-módszer.
Koncentráció–transzportált mennyiség diagramja

Az anyagintegrációs hálózatok komponensszakád-elmélete (8. ábra) lehetőséget teremt bizonyos nemkívánatos komponensek racionális kinyerésére úgynevezett hulladék áramokból „oldószerbe”, azaz „híg áramokba” (mass separating agents) [10, 11]. Az anyagintegráció az energiainTEGRÁCIÓnál általánosabb és bonyolultabb, ugyanis megvalósításához

- számos műveletet kell mérlegelnünk (pl. abszorpciót, adszorpciót, extrakció, deszorpciót, kigőzölést);
- általában nagyon sok oldószer közül választhatunk;
- az oldószeráram is optimalizálандó;
- az áramok csatlakozását és a műveletek hálózatának struktúráját is meg kell választanunk.

A módszer alapját képező komponensszakád kémiai komponensenként vizsgálható a koncentráció–transzportált mennyiség összefüggésekkel. A komponensszakád is valamilyen véges minimális koncentrációkülönbség függvényében írható fel, és segítségével meghatározható:

- az integrált anyagtranszport,
- a vegyipari eljárásen belül még rendelkezésre álló, de termodinamikailag nem hasznosítható oldószer-kapacitás és
- a külső oldószerrel megvalósítandó anyagtranszport.

Az anyagintegrációs hálózatokra kidolgozott „mass exchange network” Pinch-módszer ma már lehetővé teszi a beruházási költségek és így az integrált műszaki kémiai rendszer összes költségének becslését, sőt a technológiai kapcsolások előzetes tervezését is.

Algoritmikus megközelítés

A heurisztikus szabályok alkalmazása a vegyipari folyamatok beható ismerete és mérnöki tapasztalatok alapján a folyamattervezés elején lehetővé teszi a szelekciót és ezzel a rendszerprobléma kezelését. A hő- és komponenskaszkád figyelembevételével kifejlesztett folyamattervezési módszerek pedig termodinamikai elveken alapulnak, ezáltal a vegyészmérnök számára jó áttekintést szolgáltatnak a folyamat belső lényegéről (insight based approaches). E módszerekhez képest elvileg is új szemléletű az úgynevezett *algoritmikus megközelítés*, mely a folyamatszintézis-problémát koncepcionális szempontból integer és folytonos optimalizálási feladatként kezeli, és azt matematikailag egy *vegyes egészértékű-nemlineáris programozási feladatként* (MINLP = mixed integer nonlinear programming) fogalmazza meg [12].

Hangsúlyozni kell azonban, hogy mindhárom megközelítésnek (heurisztikus, termodinamikai és algoritmikus) létjogosultsága, sőt meghatározott helye van a folyamattervezés különböző stádiumaiban.

Az algoritmikus megközelítés három fő lépése:

1. Az összes lehetséges, egymással konkuráló folyamatstruktúra-változatot *lefedő ún. szuperstruktúra generálása* (9. ábra).

2. A posztulált szuperstruktúra MINLP feladatként történő *modellézése*:

$$Z = \min_{\gamma, x} C(\gamma, x) \quad (1)$$

$$h(\gamma, x) = 0$$

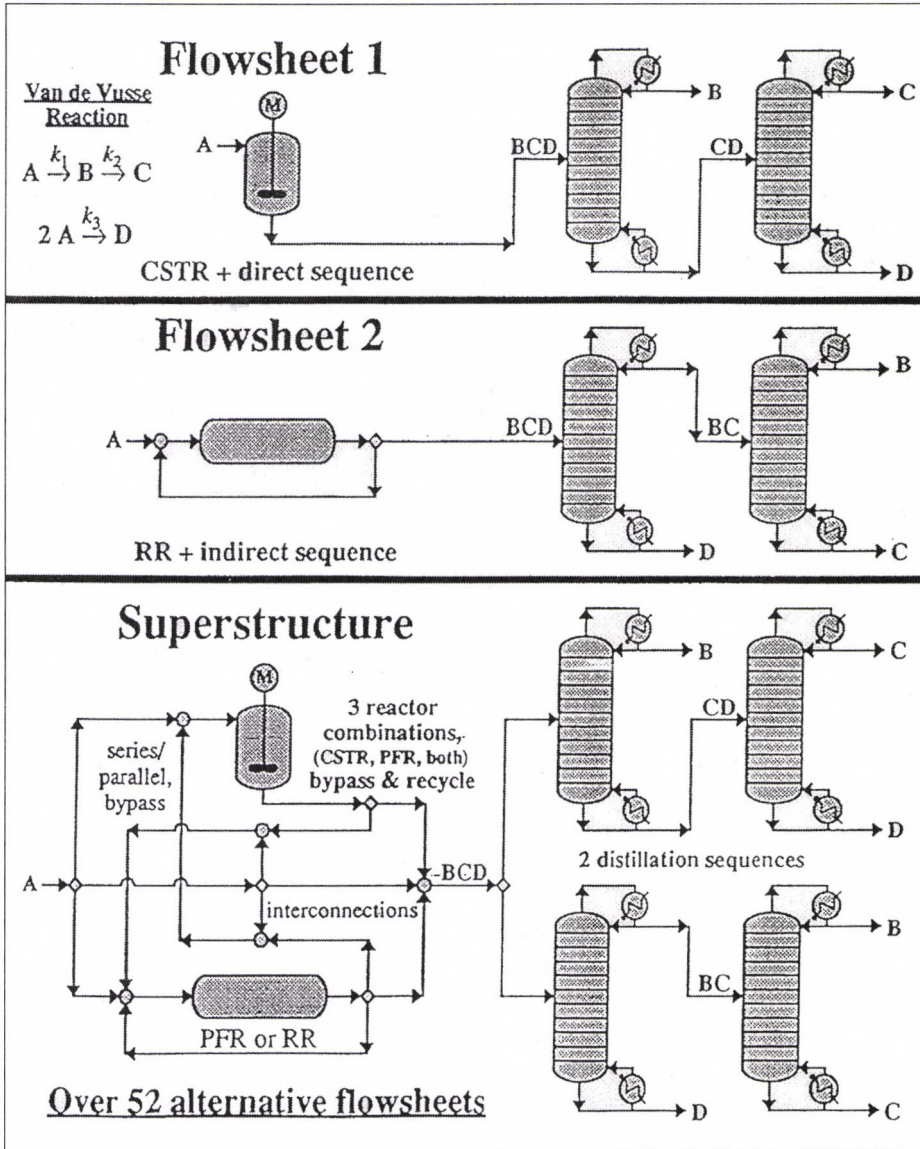
$$g(\gamma, x) \leq 0$$

$$\gamma \in \{0,1\}^m, x \in R^n,$$

ahol γ az integer 0 – 1 változókat (0 nem tartalmazza, 1 tartalmazza), x a folytonos változókat, $C(\gamma, x)$ a célfüggvényt, $h(\gamma, x)$ az egyenlőséget, $g(\gamma, x)$ az egyenlőtlenség típusú korlátozásokat jelenti.

3. Az *MINLP feladat megoldása* a szuperstruktúra extrakciójaként.

Az algoritmikus megközelítésnél a folyamattervezést általában szekvenciális dekompozícióval két lépésben kezelhetjük. A nemlinearitásokat a folyto-



9. ábra. Szuperstruktúra generálása

nos változókra korlátozva ugyanis az integer változókat az első lépésben lineáris programozással (MILP) rögzíthetjük, és csak a második lépésben vesszük figyelembe a nemlinearitásokat (NLP).

Kutatási eredmények

Reverzibilis rektifikáló modell

Szakmai pályafutásom kezdetén az Olajterv tervezőjeként, majd a Budapesti Műszaki Egyetemen tudományos érdeklődésem a szétválasztó műveletek kutatásához, tehát a „hagymadiagramon” belülről a második szinthez kapcsolódott. Ennek keretében az 1960-as évek végén frissen végzett mérnökként feladatul kaptam az ország ma is legnagyobb kőolajipari atmoszferikus és vákuumrektifikáló kolonnájának műveleti és technológiai tervezését. A feladat összetett mibenlétét jellemzi, hogy a kolonnák hosszadalmas hőtani és hidrodinamikai műveleti számításait követően a tervezőnek az ilyen munkák során számos koncepcionális döntést kell meghoznia.

A koncepcionális döntések jelentős része abban az időben a *rektifikálás energiaszükségletének csökkentésére* irányult. Példaképpen megemlítem, hogy csak a kőolaj és a belőle előállított primér benzin desztillációjához a Dunai Finomító 6,5 millió tonna kapacitás esetén kb. $8 \cdot 10^8$ kJ hőt használ fel óránként. E hőmennyiség mindössze 1%-os csökkentése kb. $1,5 \cdot 10^6$ kg fűtőolaj megtakarítását teszi lehetővé évente. A példa arra utal, hogy a korszerű kőolaj-feldolgozó, petrokémiai és gázzétválasztó ipari desztilláló rendszerek méretezését és üzemeltetését az apparatív szempontok mellett a termékekre vonatkozó minőségi, mennyiségi és – a műveletrugalmassági követelmények teljesítésén túlmenően – energetikai szempontok figyelembevételével is meg kellett vizsgálni. A téma aktualitását az 1974-ben kirobbant világméretű energiaválság tovább fokozta: egyre sürgetőbbé vált az energiafelhasználó létesítmények energetikai hatásfokának javítása.

Az első kedvező nemzetközi visszhangot kiváltó közlemények a többkomponensű rektifikáló rendszerek termodinamikai megfontolásainak egységes elméletbe foglalásából születtek, melyet az elmélet alapján konkrét javaslatok követtek az ipari desztillálóberendezésekben lejátszódó irreverzibilitások gazdaságilag célszerű csökkentésére, a beruházási költség, terhelhetőség, termékminőség és termékugalmasság figyelembevételével. E munkák *tulajdonképpen a termikus elválasztási műveletek energetikai javításának termodinamikai megalapozását jelentették* [13–19].

Az úgynevezett *reverzibilis rektifikáló modell* szerint a többkomponensű elegyek termodinamikailag reverzibilis rektifikálásánál (ellentétben a binár elegyek korlátozatlan elválasztásával) az elválasztás élessége rendkívül korlátozott, a fejtermékből csak a legnehezebb, a fenéktermékből csak a legkönnyebb komponens vonható el teljesen, a többi komponens megoszlik a

fej- és fenéktermék között. Ezen túlmenően az oszlopban az anyagáramokat (és vele együtt a komponensek koncentrációját is) az oszlop magassága mentén folytonosan pontról pontra változtatni kell. Ez csak a dúsító szekció valamennyi közbülső pontjához való infinitezimálisan kis mennyiségű hő bevezetésével, illetve a szegényítő szekció valamennyi közbülső pontjából infinitezimálisan kis mennyiségű hő elvezetésével biztosítható még végtelen számú elválasztási fokozatú oszlop esetén is (mely infinitezimálisan kis hajtóerőértékeket biztosít). Ezekből nyilvánvaló tehát, hogy „*adiabatikus desztillációval*” (hőcsere csak az oszlop két végén van) termodinamikailag reverzibilis desztillációt nem lehet megközelíteni.

Egynél több komponensből álló termékek esetén az egyensúlyi reflux és kiforralási anyagáramokat nem kaphatjuk meg a kolonnából távozó gőz, illetve folyadék egyszeri kondenzációjával, illetve elgőzölögtetésével (az így kapott folyadék, illetve gőz nem lesz egyensúlyban az oszlop végein távozó gőz-, illetve folyadékáramokkal).

Ez a többkomponensű elegyek desztillációjára vonatkozó megállapítás – az elválasztási élesség korlátozottsága mellett – a másik nagy jelentőségű eltérés a binér elegyek rektifikációjához képest, és azt jelenti, hogy a reverzibilis rektifikálás egyensúlyi reflux és kiforralási anyagáramait valamilyen más módon kell biztosítani, például a következő kolonnából való visszatáplálással vagy segédrektifikálással.

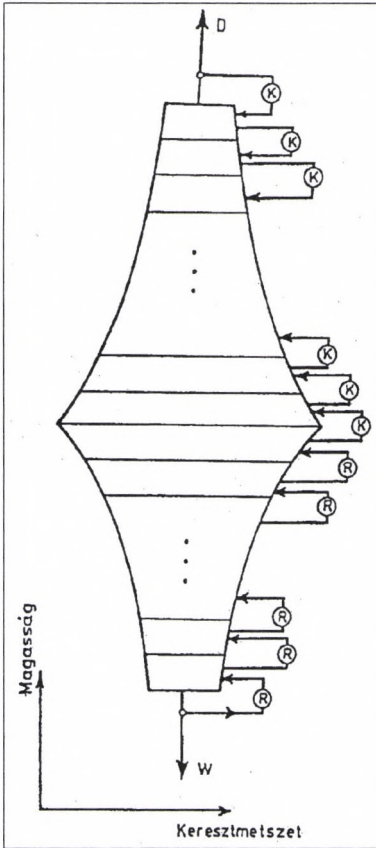
Az ipari gyakorlatban általában megvalósított desztillálófolyamatoknál a károsan nagy hajtóerők létrejötte és ezzel a rektifikációs folyamat irreverzibilitása főként két okra vezethető vissza:

– irreverzibilitás a betáplálásnál (másodosztályú elválasztás potenciálisan sem lehet reverzibilis, továbbá az anyagáramok folyamatos változása az oszlop magassága mentén nincs biztosítva);

– irreverzibilitás a kolonna végein (a reflux és a visszaforralt gőz nincs egyensúlyban az eltávozó termékekkel).

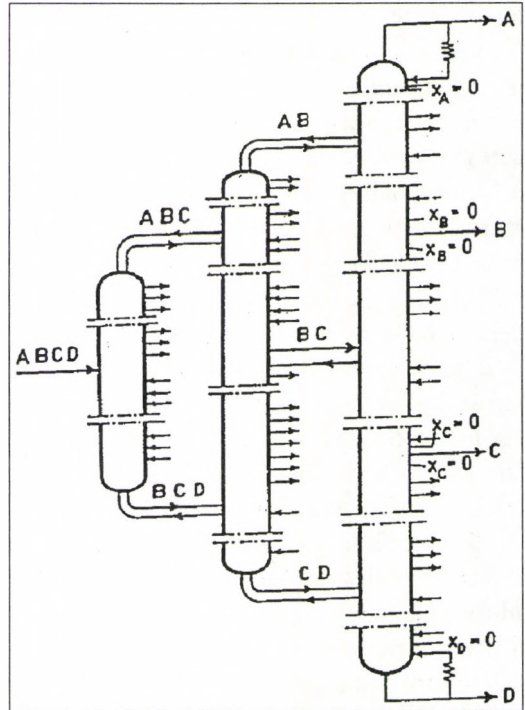
A tervező feladata mindkét irreverzibilitási forrás minimálisra csökkentése. Az előző megfontolások alapján összefoglalhatók a reverzibilis rektifikáló modell sajátosságai:

1. végtelen számú elválasztási fokozat biztosítása;
2. a dúsító szekció valamennyi közbülső pontjából infinitezimálisan kis hőelvezetés, a szegényítő szekció valamennyi közbülső pontjához infinitezimálisan kis hőhozzávezetés biztosítása, ezzel a fázisegyensúly megvalósítása az oszlop teljes hossza mentén;
3. valamennyi szekcióban legfeljebb egy komponenst lehet teljesen elválasztani (a terméket egyetlen komponensből lehet mentesíteni). Ez azt jelenti,



10. ábra. Reverzibilis desztillálóoszlop anyagáram-eloszlása

(K – kondenzátor, R – visszaforráló, az oszlop végtelen magas



11. ábra. Négykomponensű elegy szétválasztásának reverzibilis folyamata (végtelen oszlopmérettek)

- hogy fejtermékből csak a legnehezebb, a fenéktermékből csak a legkönnyebb komponens vonható el teljesen;
4. a kulcskomponensek kimerítésének pontjaiban a reflux és gőzáramok értékei nem lehetnek zérussal egyenlők, és egyensúlyi összetételük egyszeri kondenzációval vagy elgőzöltetéssel nem, csak segédrektifikálással biztosítható;
 5. a kolonnában elhanyagolhatóan kicsiny nyomásesést kell biztosítani a végtelen tényéren keresztül.

A 2. feltételt teljesítő desztillálóoszlopot a 10. ábra mutatja, ahol a keresztmetszetet a belső anyagárammal arányosan rajzoltuk föl. A végtelenül hosszú

oszlop minden keresztmetszetében (tehát folytonosan) végtelenül kicsiny nagyságú hőcseréket biztosítunk; a dúsító szakaszban hőelvonásokat, a szegényítő szakaszban fűtések.

A többkomponensű elegyek szétválasztását pedig a 3. feltételnek megfelelően olyan kapcsolási elrendezésű desztillálórendszerben lehetne reverzibilisen megvalósítani, amit a 11. ábra mutat. Az egyes oszlopszekciók végtelenül hosszúak (1. feltétel), az oszlopok közti ún. „termikus csatolások” következtében (az utolsó oszlopot kivéve) egyensúlyi a reflux és az elgőzölés (4. feltétel), és végtelenül kicsinynek képzeljük a nyomásesést (5. feltétel).

A termikus elválasztó műveletek energetikai értelmezése

A reverzibilis rektifikáló modell kritériumainak ismeretében nyilvánvalóvá vált, hogy az üzemeltetési és beruházási költségeket együttesen figyelembe vevő, egységes elveken alapuló, műszaki-gazdasági optimalizálási módszer megmutathatja a tervezőnek a határt a hagyományos szétválasztási folyamatoknak a véges méretű, „termodinamikailag optimális” szétválasztási folyamathoz való közelítésében. A desztillálórendszerek teljes folyamathoz kapcsolódó energiaintegrációs tervezéséhez tehát egy általános érvényű stratégia kidolgozására volt szükség, és ez megkövetelte a termikus elválasztóműveletek energetikai értelmezését, valamint a csökkenthető energiavesztések lokalizálását.

A csatolt folyamatok termodinamikai elmélete alapján a rektifikálást formálisan *elsőrendű stacionárius rendszernek* tekinthetjük, ahol a hőmérsékletkülönbség (általunk beállított hajtóerő) hatására hőáram jön létre, melyhez komponensáramok kapcsolódnak, de a bruttó komponensáramok zérussá válnak, és a rektifikáló oszlopban kifejtett szétválasztási munkát a hőáram elértéktelenedése fedezi [27].

A \emptyset -entrópia-forrássűrűség ebben a formalizmusban:

$$\emptyset = \sum_K J_K X_K \geq 0, \quad (2)$$

ahol J_K a K -edik termodinamikai áram, X_K a hozzárendelt hajtóerő.

Általános esetben az áramok az összes hajtóerő függvényei:

$$J_K = \sum_n L_{nK} X_n, \quad (3)$$

és így

$$\emptyset = \sum_K \sum_n L_{nK} X_n X_K \geq 0, \quad (4)$$

ahol L_{nK} a transzportegyüttható.

A csatolt folyamatok esetében a folyamat célja az entrópiacsökkentéssel járó elválasztás, amit a termodinamika törvényei értelmében csak a célfolyamathoz csatolt entrópiatermelő folyamattal együtt lehet megvalósítani. Ezért az entrópiafogyasztó folyamatok hatásfokát csak a hozzácsatolt kényszerítő (hajtó) folyamattal együtt lehet helyesen értelmezni. Például két áramot és hajtóerőt tekintve:

$$\emptyset = \emptyset_1 + \emptyset_2 = J_1 X_1 + J_2 X_2 = L_{11} X_1^2 + (L_{12} + L_{21}) X_1 X_2 + L_{22} X_2^2 \geq 0, \quad (5)$$

de a folyamat úgy is megvalósulhat, hogy az egyik részfolyamat entrópiát fogyaszt:

$$\emptyset = J_2 X_2 = L_{21} X_1 X_2 + L_{22} X_2^2 < 0, \quad (6)$$

amennyiben a másik részfolyamat entrópiatermelése ezt a csökkenést kompenzálja. Ilyen esetben a két folyamat csatolásáról, illetve *csatolt folyamatról* beszélünk. Ez valósul meg általánosítva a termikus szétválasztási eljárásoknál, így a desztilláció esetén is.

Stacionárius állapotban az állapotváltozók időfüggetlenek, de mivel véges hajtóerők hatnak, az entrópiatermelés nem zérus. Ezért stacionárius nem egyensúlyi rendszerek fontos tulajdonsága, hogy bizonyos feltételek teljesítése esetén minimális entrópiatermeléssel jellemezhetőek (*Glansdorf-Prigogine-elv*), miközben bizonyos számú hajtóerőt külső kényszerrel állandó értéken tartunk. A külső kényszerrel állandó értéken tartott áramok száma szerint megkülönböztetünk zérus rendű (egyensúlyi), elsőrendű, másodrendű stb. stacionárius rendszereket.

A relaxációs folyamatoktól eltekintve egy kétváltozós – az 1. áramra elsőrendű stacioner – rendszer X_2 hajtóereje és entrópiaforrás sűrűségfüggvénye a

$$\frac{\partial \emptyset}{\partial X_2} = (L_{12} + L_{21}) X_1 + 2L_{22} X_2 = 0 \quad (7)$$

helyi minimumnál

$$X_2 = \frac{L_{12} + L_{21}}{2L_{22}} X_1 \quad \text{és} \quad (8)$$

$$\emptyset = L_{11} X_1^2 \left[1 - \frac{(L_{12} + L_{21})^2}{4L_{11}L_{22}} \right] = L_{11} X_1^2 (1 - p^2), \quad (9)$$

ahol p a csatolási tényező, az entrópiafolyamatok csatolásának mértéke.

A rektifikálásnál külső kényszerrel állandó értéken tartott X_1 hajtóerő a hőmérséklet-különbség, az általa kiváltott 1. áram a hőáram, a 2. pedig az eredő átadásos komponensáram. Esetünkben az oszlop hőtranszportja által termelt entrópiát a komponensek szeparációjának entrópiafogyasztó folyamata használja fel. A csatolási tényező értéktartománya:

$$0 \leq p \leq 1. \quad (10)$$

Belátható, hogy $p = 0$ esetén a rendszer teljesen irreverzibilis, ugyanis $\emptyset = L_{11} X_1^2$, vagyis csak az entrópiatermelő folyamat játszódik el, és $p = 1$ esetén $\emptyset = 0$, vagyis a rendszer reverzibilis, a hőáram entrópiatermelését a komponensek szétválasztásának entrópiafogyasztó folyamata teljesen felhasználja.

Rámutatunk arra is, hogy a csatolási tényező négyzete voltaképpen a csatolt folyamat termodinamikai hatásfoka, mely a hő és komponensáramok csatolásának mértékét méri:

$$\eta_s^c = \frac{L_{22} X_2^2}{L_{11} X_1^2} = \frac{L_{22} (L_{12} + L_{21})^2 X_1^2}{L_{11} X_1^2 4L_{22}^2} = \frac{(L_{12} + L_{21})^2}{4L_{11} L_{22}} = p^2. \quad (11)$$

E mérték jellemzője, hogy nem veszi figyelembe a csatoláson kívüli entrópiatermelő részfolyamatokat.

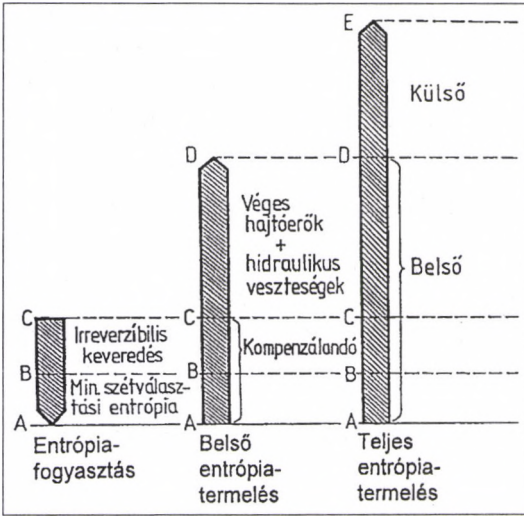
A termikus elválasztó műveleteknél a hőtranszport mellett azonban más entrópiatermelő folyamatok is lejátszódnak. Mivel célunk a termelt entrópia mind teljesebb hasznosítása a komponens-szétválasztás entrópiafogyasztásához, az egész rendszerre definiált termodinamikai hatásfok nevezőjében már az összes entrópiatermelést figyelembe kell vennünk:

$$\eta_s = \frac{L_{22} X_2^2}{L_{11} X_1^2 + \Delta S_L} = \frac{\Delta S_{SEP}}{\Delta S_H + \Delta S_L}, \quad (12)$$

ahol $L_{22} X_2^2$ a komponens-szétválasztás entrópiafogyasztását, $L_{11} X_1^2$ a csatolt hőtranszport entrópiatermelését, ΔS_L az egyéb részfolyamatok (pl. hidraulikai ellenállások, kiegészítő hőcserélők stb.) entrópiatermelését jelenti.

A rektifikálás energetikai javítása

A fős (vagy káros) entrópiatermelés forrásait lényegében három csoportba sorolhatjuk, ezeket ábrázolja sematikusán a 12. ábra. A $B \rightarrow A$ szakasz mutatja a célként kitűzött szétválasztás entrópiafogyasztását. Az oszlopban főként a betáplálásoknál és elvételeknél, de más helyeken is fellépő irreverzibilis keveredések miatt azonban a szétválasztási munka valójában nagyobb, ezt mutatja



12. ábra. Az entrópiatermelés forrásainak csoportosítása

A → E szakasz mutatja. Reverzibilis esetben a B → E szakasz eltűnik.

Az energiatakarékos megoldásokat a 12. ábra felosztásának megfelelően aszerint csoportosíthatjuk, hogy elsődleges vagy domináló hatásukat az irreverzibilis keveredések csökkentése, a hajtóerők egyenletesebbé tétele vagy a külső veszteségek csökkentése révén fejtik-e ki. Az alábbi módszereket tárgyaljuk:

1. csoport: az irreverzibilis keveredések csökkentése

- tényérok vagy töltet pótlólagos felszerelése;
- a betáplálás helyének és hőállapotának optimalizálása;
- a nyomásesés csökkentése révén a hőmérséklet-különbség csökkentése;
- több betáplálás és több elvétel alkalmazása;
- termikusan csatolt desztilláló rendszerek alkalmazása;
- osztott kolonnák alkalmazása.

2. csoport: egységesebb hajtóerő-eloszlás elérése

- közbenső hőforgalmazás;
- közbenső hőszivattyúk alkalmazása;
- speciális ellenáramú készülékek alkalmazása;

3. csoport: a külső veszteségek csökkentése

- energiaintegráció;
- a csatlakozó hőcserélő rendszer optimális kialakítása;
- az anyagáramok üzemek közti közvetlen átvezetése;
- hőszivattyúk alkalmazása.

a C → B, illetve együttesen a C → A szakasz. A hőenergia degradációja során elsősorban ezeket az entrópiafogyasztásokat kell entrópiatermeléssel kompenzálni (A → C szakasz), ez a termelés azonban az oszlop belsejében fellépő véges hajtóerők és hidraulikai ellenállások (súrlódás) miatt jelentősen nagyobb (C → D szakasz). Az A → D belső entrópiatermeléshez külső veszteségek is hozzáadódnak (D → E szakasz), s végül a teljes addicionális entrópia-változást a B → E szakasz, a teljes ráfordítást pedig az

Az itt követett besorolás nem kizáró jellegű, az egyik csoportba sorolt módszernek többnyire olyan hatása is van, aminek alapján a másik csoportba is sorolhatnánk, ez a hatás lehet pozitív és negatív. Például a közbenső hőszivattyúk alkalmazása (2. csoport) tekinthető a 3. csoport szerinti javításnak is (hőszivattyú), mégis a 2. csoportban tárgyaljuk a közbenső hőközlés megvalósítása miatt; vagy a termikusan csatolt rendszer kialakítása (1. csoport) negatív hatású a hajtóerők szemszögéből (2. csoport). A besorolásnál a lényegesebb hatást vettük figyelembe.

Példaképpen az úgynevezett *közbenső vagy lépcsős hőforgalmazású desztillációt* említem, mely különösen fontos komplex elegyek rektifikálásának speciális esetében, a kőolajipari atmoszferikus és vákuumdesztilláció megvalósításánál, amikor több (általában 3) oldalterméket vesznek el a kolonnából. Az úgynevezett *cirkulációs refluxok* elvétele és visszaadagolása közti tényérok keverő kondenzátorként működnek, így nem fejtenek ki megfelelő rektifikáló hatást.

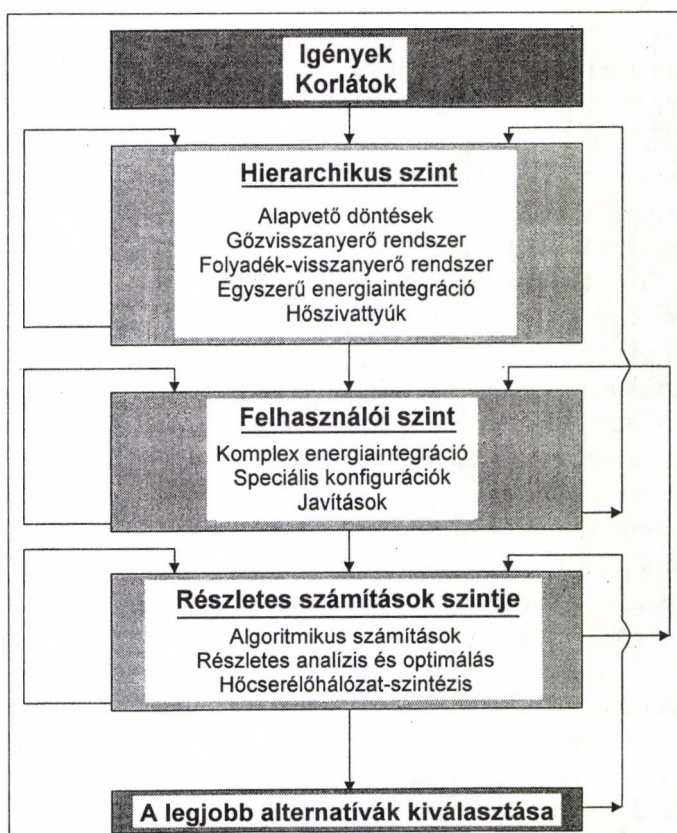
Régebben a cirkulációs refluxokat a termékkel együtt csapolták meg, és a hőcserélés után az elvétel felett két-három tányérral táplálták vissza. Az ilyen rendszerű cirkulációs reflux azzal a hátránnyal járt, hogy növelte az elvételi tányér egyébként is nagy folyadékterhelését, az elvételi tányérra nagy mennyiségű könnyebb párlat is visszafolyt, ezért romlott az elválasztás élesége. A tapasztalatok szerint a frakcionálás minősége jelentősen javul, ha a cirkulációs refluxok megcsapolási helye a termékkelvétel alatti negyedik-ötödik tányér, visszatáplálási helye pedig a megcsapolások alatti első-második tányér. A cirkulációs reflux ilyen kialakítása azonban rosszabb minőségű hőcserét tesz lehetővé. Ennek javítására a korábbi üzemek tervezői az AV-desztillálókolonnák termékcsapolásaira *vaktányérok* beépítését javasolták a szokásos teljes átfolyású tányéros kolonnák helyett. A vaktányérok folyadéklefolyó nincs, az összes folyadékot termékként vezetik el. Könnyen belátható, hogy vaktányéros oszlopokkal valósítható meg a leggazdaságosabb hőcsere. Számításokkal és ipari mérésekkel igazoltuk, hogy a vaktányérok kedvezőtlenül hatnak a kapacitásbővítés és a -szűkítés lehetőségére („kapacitásrugalmasság”), a termék mennyiségének variálhatóságára („termékhozam-rugalmasság”) és a termékminőségek változtathatóságára („termékminőség-rugalmasság”) is.

Vizsgálataink végül is bebizonyították, hogy vaktányérok alkalmazására egyáltalán nincs szükség. Ha ugyanis a vaktányér nélküli oszlopokban a cirkulációs refluxokat a hőmérlegnek megfelelően maximálisra növeljük, elérhető, hogy csak annyi gőz áramoljék felfelé, amennyi az oszlop felsőbb részéből eltávozik, így a belső reflux szélső esetben megszüntethető. Ezzel az oszlopot úgy működtetjük, mintha vaktányéros lenne, a gazdaságosabb

hőcsere így is megvalósítható. A korábban említett üzem rektifikálóoszlopainak cirkulációs refluxait a reverzibilis modell elve alapján terveztük meg, és ezáltal a korábbi üzemekhez képest lényeges energetikai és termékhozam-rugalmasság-javítást értünk el.

Reaktorrendszer és a kombinált tervezési módszer

Új vegyipari folyamatok tervezése természetesen a „hagymadiagram” legfelső szintjével, tehát a kémiai reaktorokkal a rendszer input-output struktúrájának és recirkulációs hálózatának szintézisével kezdődik. Tapasztalataink szerint azonban például a *Douglas-féle hierarchikus módszert* követő úgynevezett PIP (Process Invention Procedure) szakértői rendszert alkalmazva [19] a hie-



13. ábra. Kombinált folyamattervezési rendszer

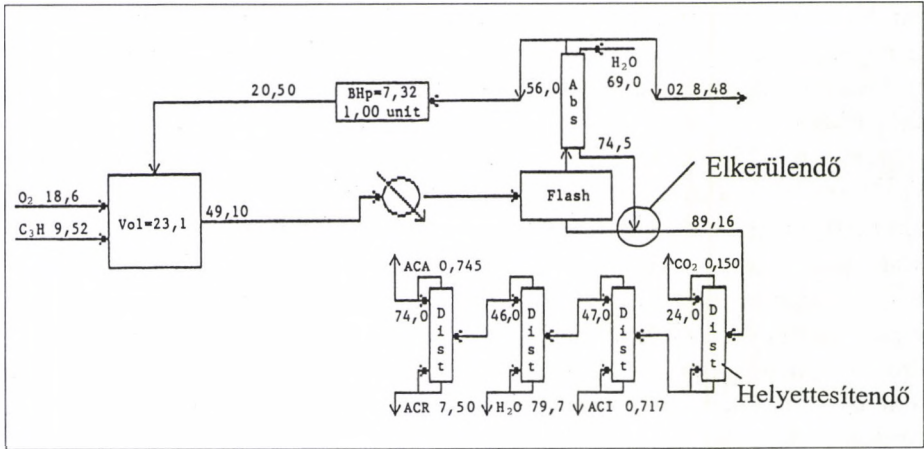
rarchikus és algoritmikus módszerek önmagukban nem képesek gyakorlatban használható folyamatok szintetizálására. Az általunk javasolt új kombinált módszer lehetőséget biztosít a tervező aktív és kreatív közreműködésére egy új, felhasználó-irányított (*user driven*) tervezési lépés beiktatásával (13. ábra).

A kombinált módszernél a hierarchikus tervezési stratégiát a folyamattervezés kezdeti stádiumában használjuk fel. Eszerint a megoldások különböző alternatíváit generáljuk és minősítjük a vizsgálati tartományban tapasztalati szabályok, gyors, rövidített számítási módszerek és a költségek egyszerűsített becslése alapján. A felhasználó által irányított tervezési lépések a hierarchikus tervezési stratégia alkalmazása közben szerzett tapasztalatok és eredmények értékelésére és a folyamat további tökéletesítésére szolgálnak. A tervezőnek itt lehetősége nyílik az előre nem látott problémák kreatív megoldására, speciális megoldások és korlátozások figyelembevételére.

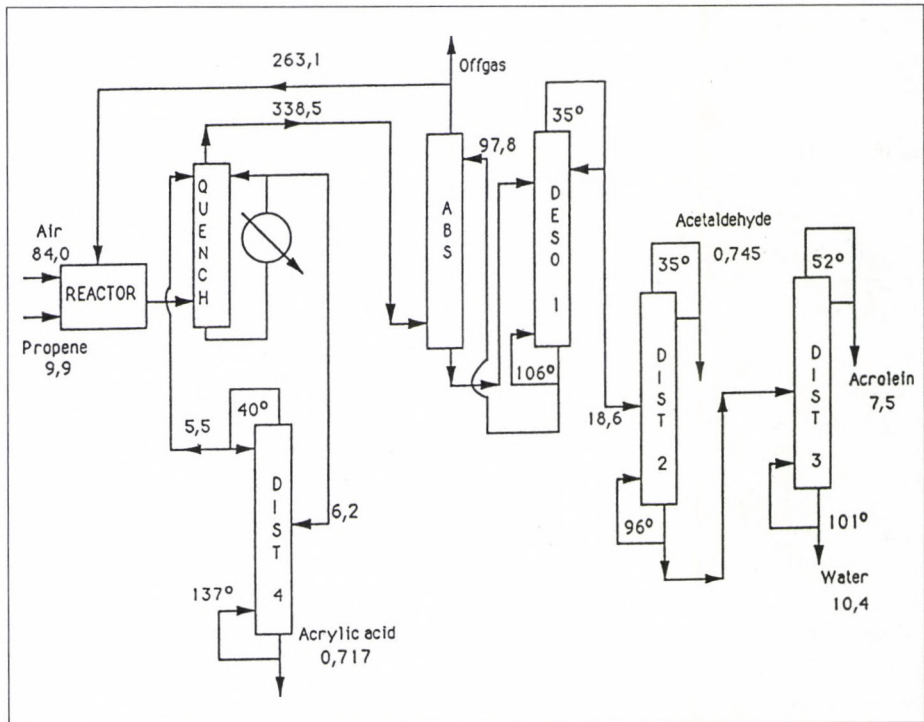
1. táblázat

Az akroleingyártás alapadatai

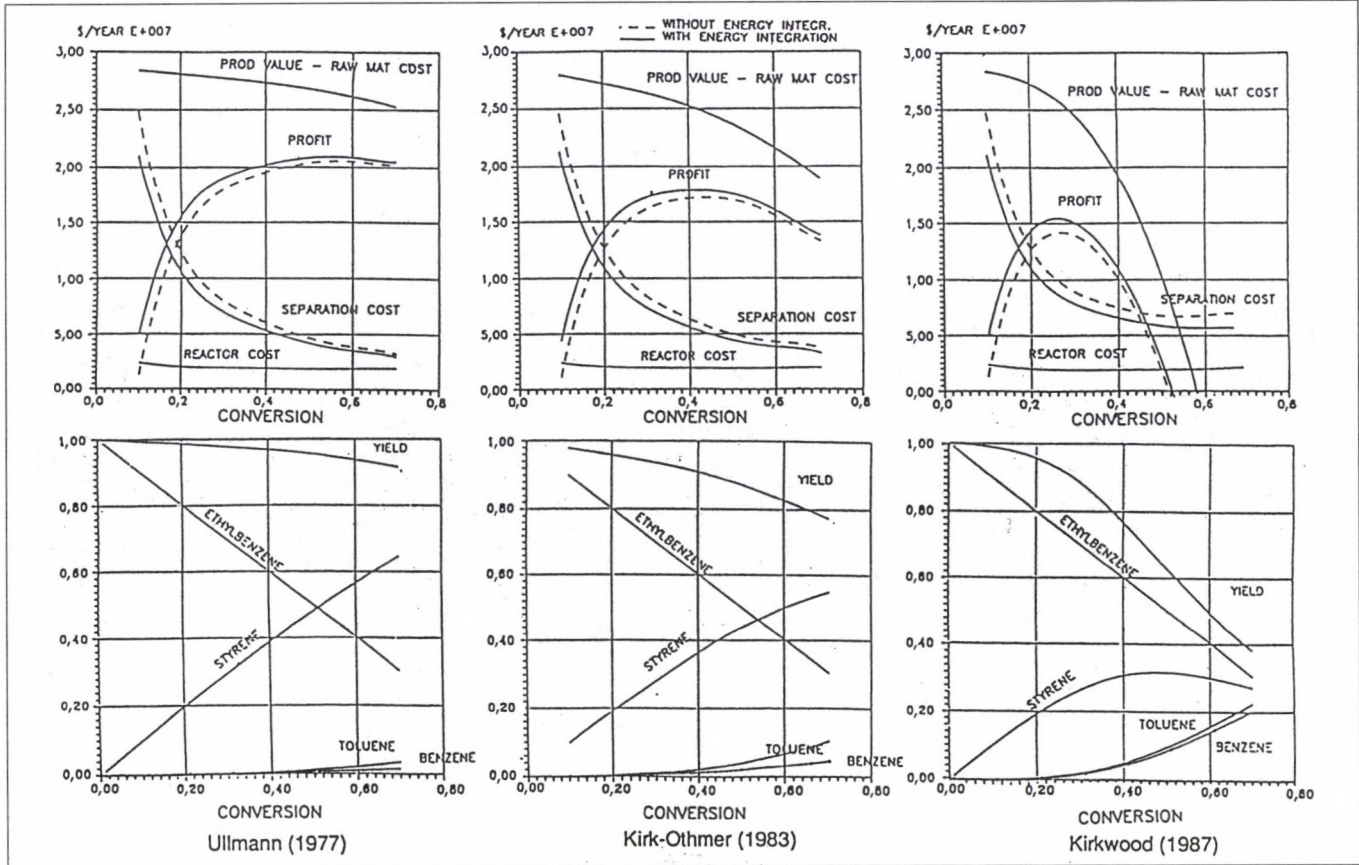
Reaction system	Heat of the reaction (kJ mol ⁻¹)	
C ₃ H ₆ + acrolein + H ₂	-341	
Acrolein + 3,5 O ₂ → 3 CO ₂ + 2 H ₂ O	-1582	
C ₃ H ₆ + 4,5 O ₂ → 3 CO ₂ + 3 H ₂ O	-1923	
Acrolein + 2 O ₂ → 3 CO + 2 H ₂ O	-742	
C ₃ H ₆ + 3 O ₂ → 3 CO + 3 H ₂ O	-1083	
C ₃ H ₆ + 2 O ₂ → acetaldehyde + CO ₂ + H ₂ O	-757	
Acrolein + 3,5 O ₂ → acrylic acid	-254	
Production rate = 7,5 mol h ⁻¹		
Temperature = 400 °C		
Pressure = 2,5 bar		
The reaction rate expressions	Pre-exp factor (m ³ kmol ⁻¹) ¹⁻ⁿ (h ⁻¹)	Activation energy (kJ kmol ⁻¹)
r ₁ = k ₁ × c _a ^{0,95} × c _b ^{0,05}	5,44 × 10 ⁷	5,365 × 10 ⁴
r ₂ = k ₂ × c _c × c _b ^{0,05}	9,79 × 10 ⁹	1,014 × 10 ⁵
r ₃ = k ₃ × c _a ^{0,95} × c _b ^{0,05}	2,34 × 10 ⁸	1,015 × 10 ⁵
r ₄ = k ₄ × c _c × c _b ^{0,05}	1,70 × 10 ⁷	1,014 × 10 ⁵
r ₅ = k ₅ × c _a ^{0,95} × c _b ^{0,05}	3,71 × 10 ⁷	1,015 × 10 ⁵
r ₆ = k ₆ × c _a ^{0,95} × c _b ^{0,05}	1,71 × 10 ⁷	7,349 × 10 ⁴
r ₇ = k ₇ × c _c × c _b ^{0,05}	4,00 × 10 ⁷	9,231 × 10 ⁴
Material price		
C ₃ H ₆ = 9,5 Skmol ⁻¹		
Acetaldehyde = 8,0 Skmol ⁻¹		
Acrolein = 25,40 Skmol ⁻¹		
Acrylic acid = 21,20 Skmol ⁻¹		



14. ábra. Az akroleingyártás szintetizált folyamatábrája



15. ábra. Módosított folyamatábra



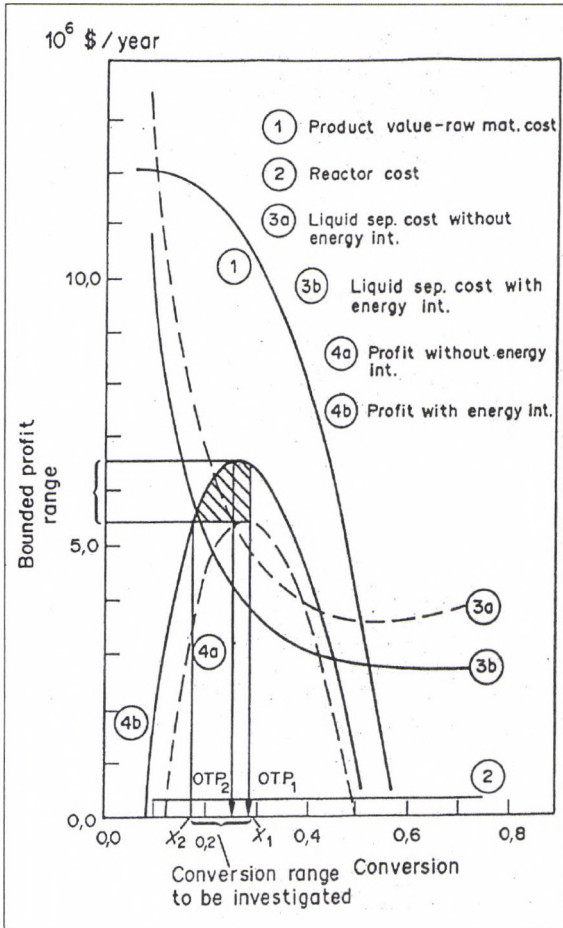
16. ábra. Sztirologyártási technológiák összehasonlítása

A módszer további jellemzője egy új, korlátozós stratégia alkalmazása a vizsgálati tartományok csökkentésére. A stratégia a *prediktor alapú rendezett keresés* elvét hasznosítja, és három korláton (konverziós, hőszivattyús és rigórozus) alapul. A különböző esettanulmányok alapján általános következtetések vonhatók le a korlátok általánosságára és alkalmazhatóságára. A kombinált

módszer hatékonyságát számos vegyipari folyamaton és esettanulmányon teszteltük és igazoltuk.

Példaképpen az akroleingyártás alapadatait mutatom be (1. táblázat) és a szakértői rendszerrel szintetizált folyamatábrát (14. ábra). A szintetizált struktúrák analizálásával könnyen beláthatjuk, hogy az első desztillálóoszlop parciális kondenzátorával helyettesíthető, továbbá, hogy akroleindús abszorber-fenéktermékét és az akrilsavdús egyensúlyi desztilláció folyadéktermékét nem célszerű elegyíteni. A kombinált módszerrel módosított folyamatábrát a 15. ábra mutatja.

Szemléltetésképpen tekintünk az úgynevezett konverziós korlátozást, mely azon a megfigyelésen alapul, hogy az energiaintegrált folyamatok optimális

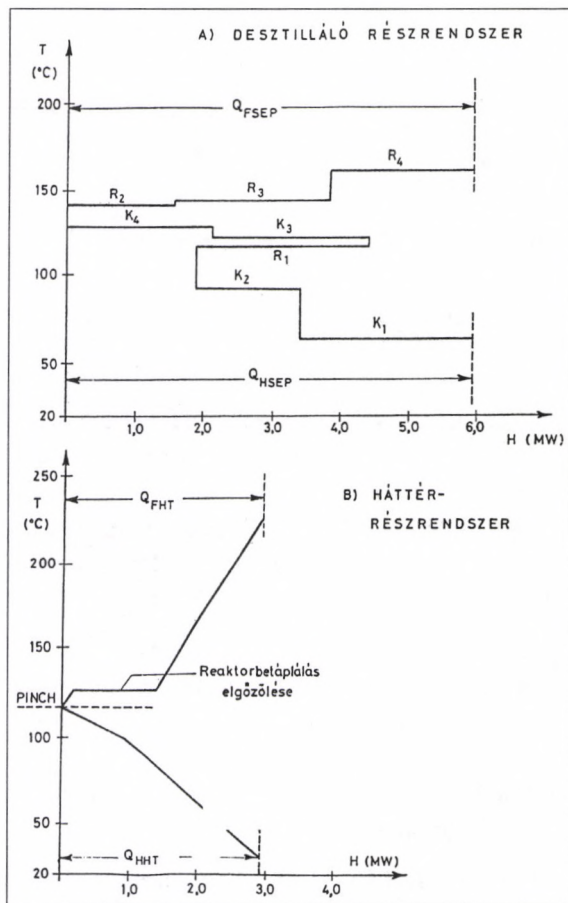


17. ábra. Az ún. konverziókorlátozás

konverziója mindig kisebb, mint az integrálatlan folyamatoké (16. ábra). A vizsgált konverziótartomány tehát a legjobb integrálatlan konverzióval felülről korlátozott, a keresés alsó korlátját pedig az optimális integrálatlan profit szolgáltatja (17. ábra).

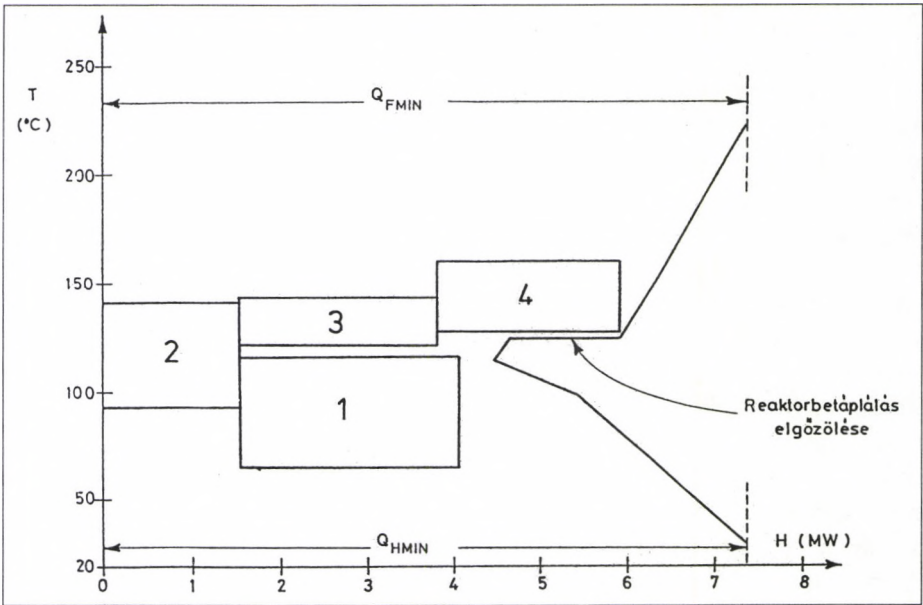
EnergiainTEGRÁCIÓS ÉS HŐSZIVATTYÚVAL SEGÍTT DESZTILLÁCIÓ

Az energiafogyasztás csökkentésének az előzőekben felsorolt módszereit korábban általában egyedi oszlopok tervezésénél vizsgálták. Mivel azonban a desztillálóműveletek legtöbbször nem izoláltak, hanem a teljes folyamat részei, tervezésüket is a teljes vegyipari folyamat figyelembevételével kell végeznünk [19–23]. A részfolyamatok T-H diagramon történő illesztése jó segítséget nyújt az energia-integrációs folyamatok kialakításához. Példaképpen egy négykolonnás direkt szétválasztási sorrend desztilláló részrendszerének és háttér-részfolyamatának (reaktor, quench) T-H profilját mutatja a 18. ábra. Ugyanezen folyamat együttes T-H diagramját ábrázoltuk a szemléletesebb Andreco-vich–Westerberg-féle ábrázolásmóddal a 19. ábrán. Mivel a 4. kolonna kondenzátorában leadott hő a kolonnanyomás megfelelő megválasztásával felhasználható a reaktortáp elgőzöltetésére, a teljes folyamat összes fűtési és hűtési igénye az így „átlapolt” hőmennyiséggel kisebb a részfolyamatok összegzett fűtési és hűtési igényénél.



18. ábra. Részrendszerek H, T profiljai (R = reboiler; K = kondenzátor)

Általában a hőcaszkád elemzése megmutatja, hogy többnyire van egy olyan hőmérséklet, melyen keresztül nincs hőátadás, ha a rendszer fűtése és hűtése minimális; ez az úgynevezett szűkületi hőmérséklet. A szűkületi

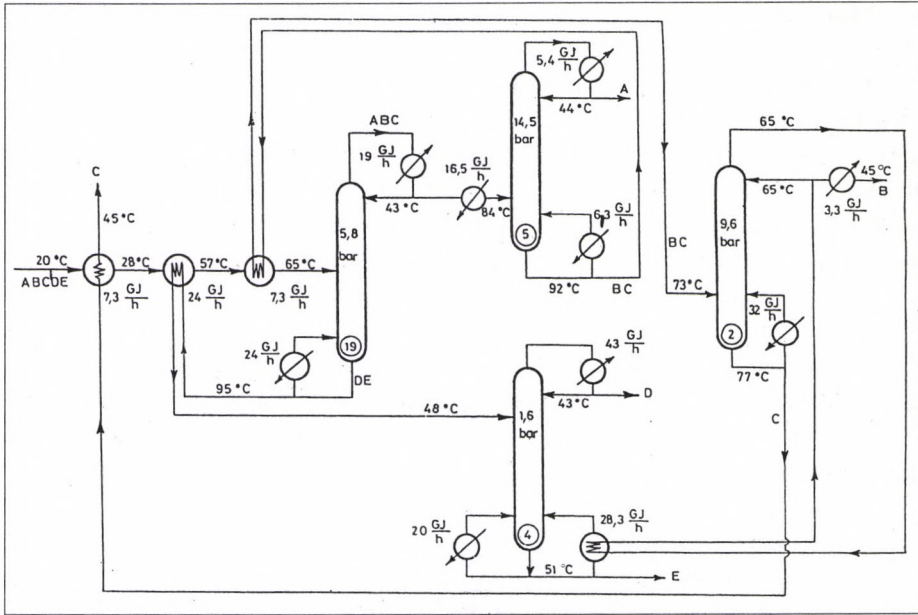


19. ábra. A teljes folyamat T, H diagramja az Andreovich–Westerberg-féle ábrázolásmódban

hőmérséklet létezése alapján megadható három olyan egyszerű szabály, mely a minimális energiatárolású rendszer tervezésének szükséges és elégséges feltétele:

1. *szabály:* a szűkületi hőmérséklet átfedésével nem szabad hőátadást tervezni, ugyanis ez ugyanannyi felesleges fűtéshez és hűtéshez vezet.
2. *szabály:* a meleg oldalon nem szabad hűtést tervezni, ugyanis ez ugyanannyi felesleges fűtéshez vezet.
3. *szabály:* a hideg oldalon nem szabad fűtést tervezni, ugyanis ez ugyanannyi felesleges hűtéshez vezet.

E három szabály és általában a hőkaszkádelmélet következetes alkalmazása alapján számítási eljárást dolgoztunk ki ipari desztillálórendszerek *energia-integrációs tervezésére*. Az algoritmikus döntési mechanizmusú módszerünk alapelve, hogy a szűkületi hőmérsékletet átfedő energiatintegrációkat a részletes számítások megkezdése előtt kizárjuk, és így a tervezés teljes számítási ideje a teljes leszámításhoz képest lényegesen csökken. Egy könnyű szénhidrogénelegy hőcserélő rendszerrel kiegészített integrált folyamatábráját mutatjuk be a 20. ábrán, melynél az ötkomponensű elegy lehetséges 126 energia-



20. ábra. Hőcserélő rendszerrel kiegészített integrált folyamat

integrációja helyett a hőcserélő alkalmazásával mindössze csak 43 alproblémát kellett mérlegelnünk.

A bemutatott tervezési eljárásnál túlmenően paraméter-vizsgálatok alapján heurisztikus szabályokat fogalmaztunk meg a kolonnák energiatartalmára. E szabályokból kitűnt, hogy az oszlopok hőforgalmának és hőmérséklet-különbségének kiemelkedő szerepe van az integráció gazdaságosságának alakulásában:

1. szabály: válasszunk pótfűtést igénylő csatolásokat, azaz olyan struktúrákat, ahol a magasabb hőmérsékletű oszlop hőforgalma nem fedezi a nyelő-oszlop energiaigényét!
2. szabály: kerüljük a magas hőmérséklet és így módon drága fűtőközegek használatát!
3. szabály: válasszunk nagy hőforgalmú csatolást!

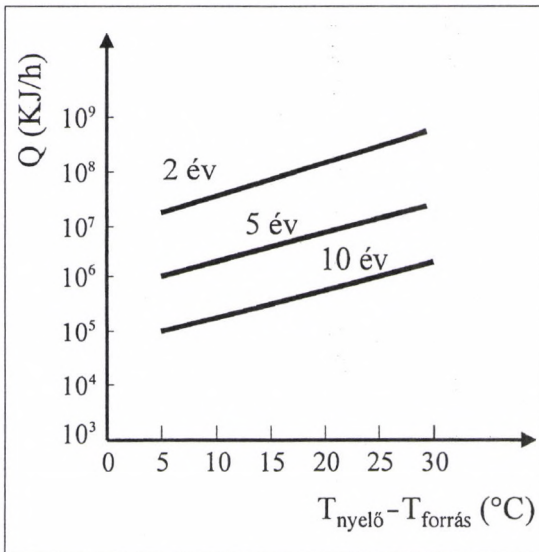
Az általunk kidolgozott és a fentiekben vázolt általános tervezési stratégia alapján kutatócsoportunk számos ipari szétválasztó rendszer rekonstrukciójára, intenzifikálására és módosított üzemeltetésére tett javaslatot.

A hőszivattyú-körfolyamat desztillálóberendezéshez történő kapcsolásával a kolonnából kilépő termékek energiatartalmát ismételtelen felhasználjuk. Ezzel

a külső entrópiatermelés és így a szétválasztáshoz szükséges energia mennyisége csökkenthető. A hőszivattyú külső munka vagy hő befektetésével a kolonnából távozó alacsonyabb hőmérsékletű, nagy hőtartalmú párákat alkalmasra teszi a kolonna fűtésére. Ezáltal a szétválasztó művelet energiafelhasználása csökken, és így az üzemeltetési költségben jelentős megtakarítás érhető el. Az üzem beruházási költsége azonban megnő, elsősorban a beépítendő kompresszor vagy az abszorpciós berendezés miatt. Ezért a tervező mérnöknek minden esetben mérlegelnie kell, hogy a bonyolultabb hőszivattyús technológia a hagyományos, illetve egyéb technológiáknál gazdaságosabb-e vagy sem.

Munkaközeges hőszivattyúval biztonságos hőátvitel valósítható meg nemcsak a desztillálóoszlopok kondenzátora és kiforralója között, hanem egy vegyipari technológia bármely két pontja között is. Erre az esetre egy általános nomogramot szerkesztettünk, amely ilyen esetekben segít megbecsülni egy hőszivattyú beruházásának megtérülési idejét (21. ábra).

A hőszivattyúk alkalmazása az üzemi rekonstrukciók új területének bizonyult. Meglevő üzemek korszerűsítésénél ugyanis a berendezések konstrukciós paraméterei korlátozzák az energia-visszanyerési lehetőségeket. A hőszivattyú, különösen a munkaközeges hőszivattyú azonban képes olyan



21. ábra. Zárt körű hőszivattyúval dolgozó energiaintegráció gazdasági potenciálja (a paraméter a leírás évek száma)

energiaintegrációs kolonnapcsolások megvalósítására, melyeket különben a meglévő berendezések szerkezeti paraméterei korlátoznának.

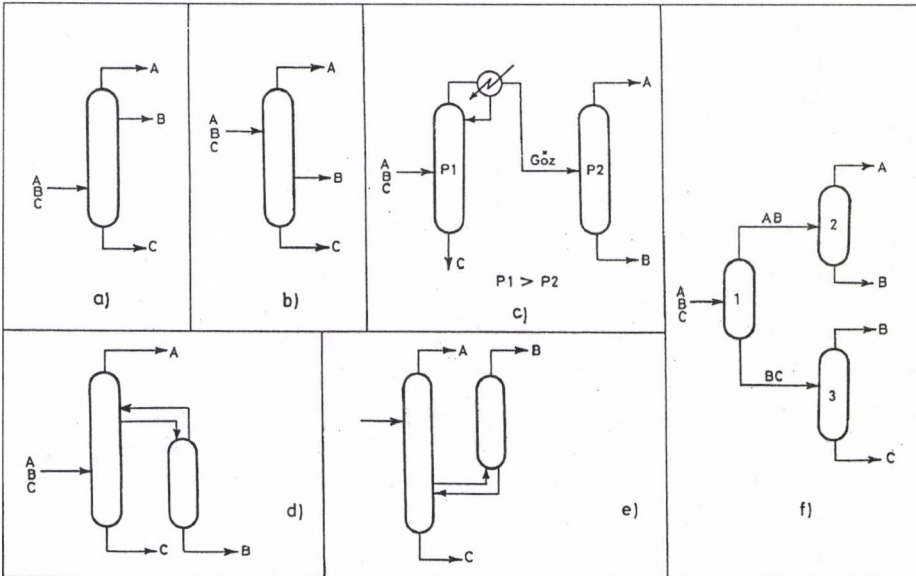
Legújabb, az abszorpciós hőszivattyúk elemzését is magában foglaló gazdasági elemzésünk szerint kisebb hőforgalomnál általában csak az energiaintegrációt, közepes és nagy hőforgalomnál és kis hőmérséklet-különbségnél a mechanikus hőszivattyúzást, nagyobb hőmérséklet-különbségnél pedig az abszorpciós hőtranszformációt célszerű elsősorban mérlegelnünk (2. táblázat).

Tervezési javaslat hőszivattyúk alkalmazására

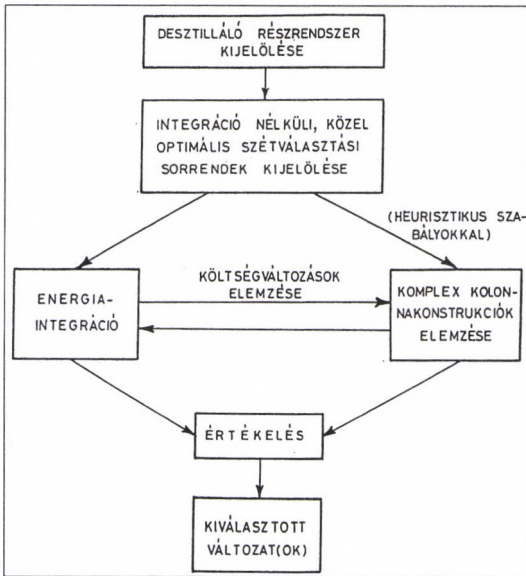
ΔT	Hőterhelés		
	kicsi	közepes (> 2MW)	nagy
Kicsi (< 20 °C)	még az energia-integráció is kérdéses	mechanikus hőszivattyú	mechanikus hőszivattyú
Közepes	még az energia-integráció is kérdéses	mechanikus hőszivattyú	mechanikus hőszivattyú abszorpciós hőszivattyú abszorpciós hőtranszformálás
Nagy	csak energiainTEGRÁCIÓ	abszorpciós hőtranszformálás	abszorpciós hőtranszformálás

Komplex kolonnaelrendezések és nem ideális elegyek

A hagyományos energiainTEGRÁCIÓ megvalósításának legegyszerűbb eszköze a kolonnanyomások megválasztása. Esetenként azonban az úgynevezett komplex elrendezéseket is mérlegelnünk kell (22. ábra). Az általános tervezési stratégiánkat úgy alakítottuk ki, hogy az egyes elválasztási sorrendeket mindkét irányban az energiainTEGRÁCIÓ és a komplexesítés irányában is számba vesszük, és költséghatásukat vizsgáljuk (23. ábra). A stratégia főbb lépései:



22. ábra. A leggyakrabban vizsgált komplex elrendezések



23. ábra. Tervezési stratégia

1. a desztilláló részrendszer kijelölése,
2. heurisztikus vagy egyszerűsített módszerekkel néhány közel optimális integráció nélküli sorrend meghatározása,
3. energiainTEGRÁCIÓ, közbülső hőforgalmazás, betáplálás előmelegítésének vizsgálata a kiválasztott sorrendekre (nyomás változtatása),
4. komplex kolonnakonstrukciók elemzése energiainTEGRÁCIÓ nélkül,
5. integráció nélküli komplex kolonnakonstrukciókat tartalmazó sorrendek kialakítása,

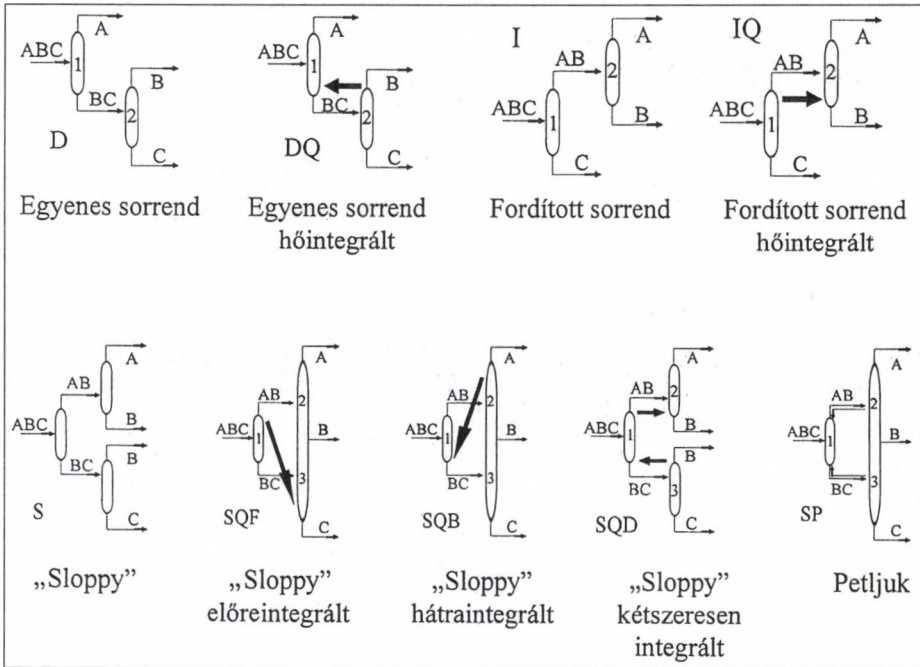
6. komplex sorrendek energiainTEGRÁCIÓjának, közbülső hőforgalmazásának, a betáplálás előmelegítésének elemzése (nyomás változtatása),
7. az előző lépések eredményeképpen kapott legjobb struktúrák pontos szimulációja, optimális paraméterek megkeresése.

Példaképpen a napjainkban a szakirodalomban gyakran javasolt ún. *Petljuk-elrendezés* és a különböző energiainTEGRÁLT kolonnakonstrukciók energiafelhasználását hasonlítottuk össze egy terner elegyre. Vizsgálataink szerint a *Petljuk-elrendezés* általában nem eredményez kisebb energiaköltséget, és az üzemeltetési és szabályozhatósági elemzéseink alapján az energiainTEGRÁLT konstrukciók kedvezőbb tulajdonságokat mutatnak (24. és 25. ábrák).

Nemideális elegyek elválasztásnak folyamatszintézise a desztillációs maradékgörbék elemzése alapján történik [24]. Ezek a görbék szakaszos desztillációnál az üstbéli összetartozó folyadékkoncentrációkat ábrázolják a koncentrációk terében. Nemideális elegyeknél az ún. egyszerű desztillációs tartományokat *határgörbék* választják el egymástól, melyeket egyszerű desztillációval nem lehetséges átlépni.

Példaképpen egy olyan négykomponensű ipari *hibrid eljárást* mutatunk be, melynek kifejlesztésénél kihasználtuk az elegy korlátolt oldhatóságát pótlólagos oldószer-adagolással. Ily módon tehát tulajdonképpen az extraktív desz-

Integrált vegyipari rendszerek folyamatszintézise



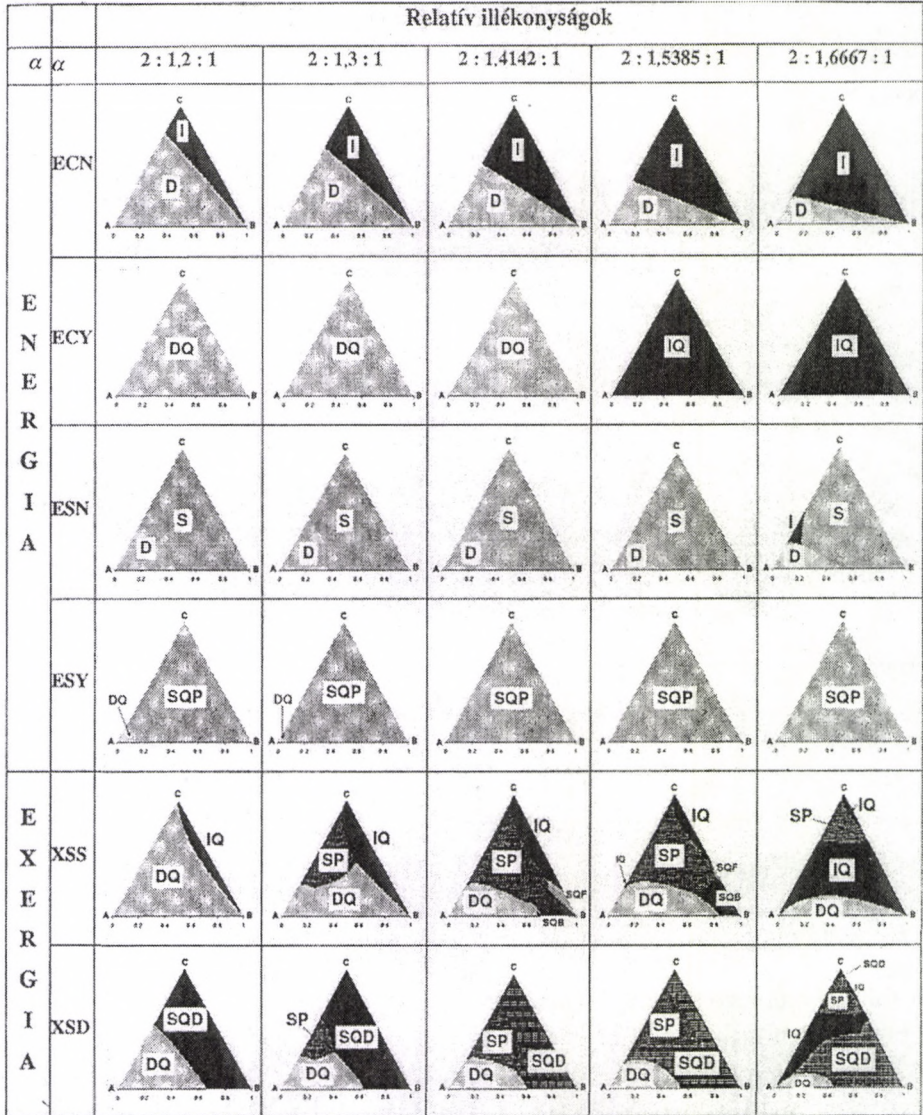
24. ábra. A vizsgált komplex és integrált elrendezések

tilláció és a dekantálás hibrid szétválasztó rendszerét szintetizáltuk (26. ábra), és ezáltal lehetővé tettük az átjárhatóságot a háromdimenziós desztillációs határfelületen.

Hőcserélő rendszerek szintézise

A folyamattervezés harmadik szintjének, azaz a hőcserélő hálózatok szintézisének tipikus megfogalmazása a következő:

Adva van a műveleti áramok egy halmaza, mindegyikhez kiindulási és vég hőmérséklet, árammennyiség és fajhő. Azokat az áramokat, melyeknek hőtartalmát növelni kívánjuk, hideg áramoknak nevezzük, az ellenkezőket pedig meleg áramoknak. Adottak az elvben végtelen mennyiségben rendelkezésre álló fűtő és hűtő segédközegek, a becsült hőátbocsátási tényezők, továbbá valamilyen korreláció a beruházási költség becslésére a hőcserélő felülettől és a segédközegek fajlagos költsége. Végül a költségbecsléshez és -optimalizáláshoz szükség van még a segédközegek be- és kilépési hőmérsékletére, a gőz kondenzálási hőjére, az éves üzemórák számára és az éves értékcsökkenési leírás arányára is.



25. ábra. A legkisebb energia- és exergiaigényű elrendezések

A hőcserélő rendszerek szintézisének egésze tartalmazza a struktúraszintézist, a paraméter optimalizálását, a részletes tervezést, a hő- és anyagmérleg-számítást és a kiértékelést is. A döntő mozzanat azonban a struktúraszintézis, vagyis a szintézis, eredeti értelmében. A különböző szintézismódszerek

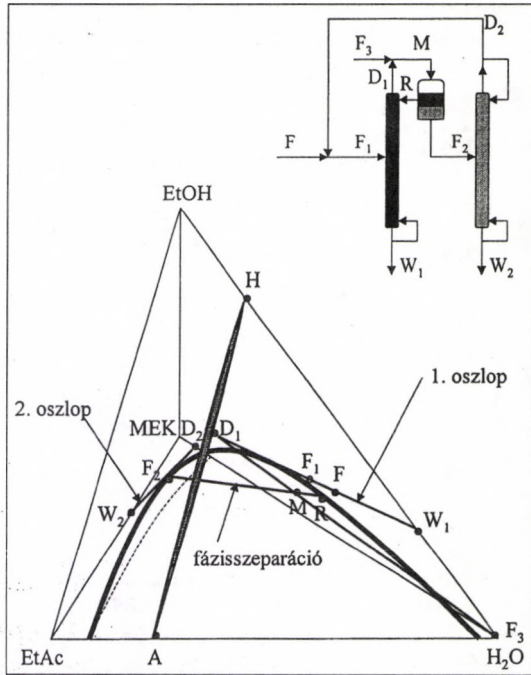
célja a meleg és a hideg áramok és hőátzármaztató egységek optimális hálózatának kialakítása.

A szintézisprobléma kezelésére számos termodinamikai és algoritmikus módszer látott napvilágot. A különböző nagyságrendű film-hőátadási együtthatójú áramok esetére dolgoztuk ki az úgynevezett sokrétű Pinch (diverse Pinch) -módszert [25]. Alkalmazásával a hagyományos Pinch-módszernél realiztikusabb fűtő- és hűtőszükséglet, -összes költség és kezdőstruktúra szintetizálható. A módszer abból a tapasztalati tényből indul ki, hogy a kisebb átadási tényezőjű áramhoz nagyobb optimális hőfokkülönbséget várhatunk, mint a nagyobb hőátadási tényezőjű áramok esetén.

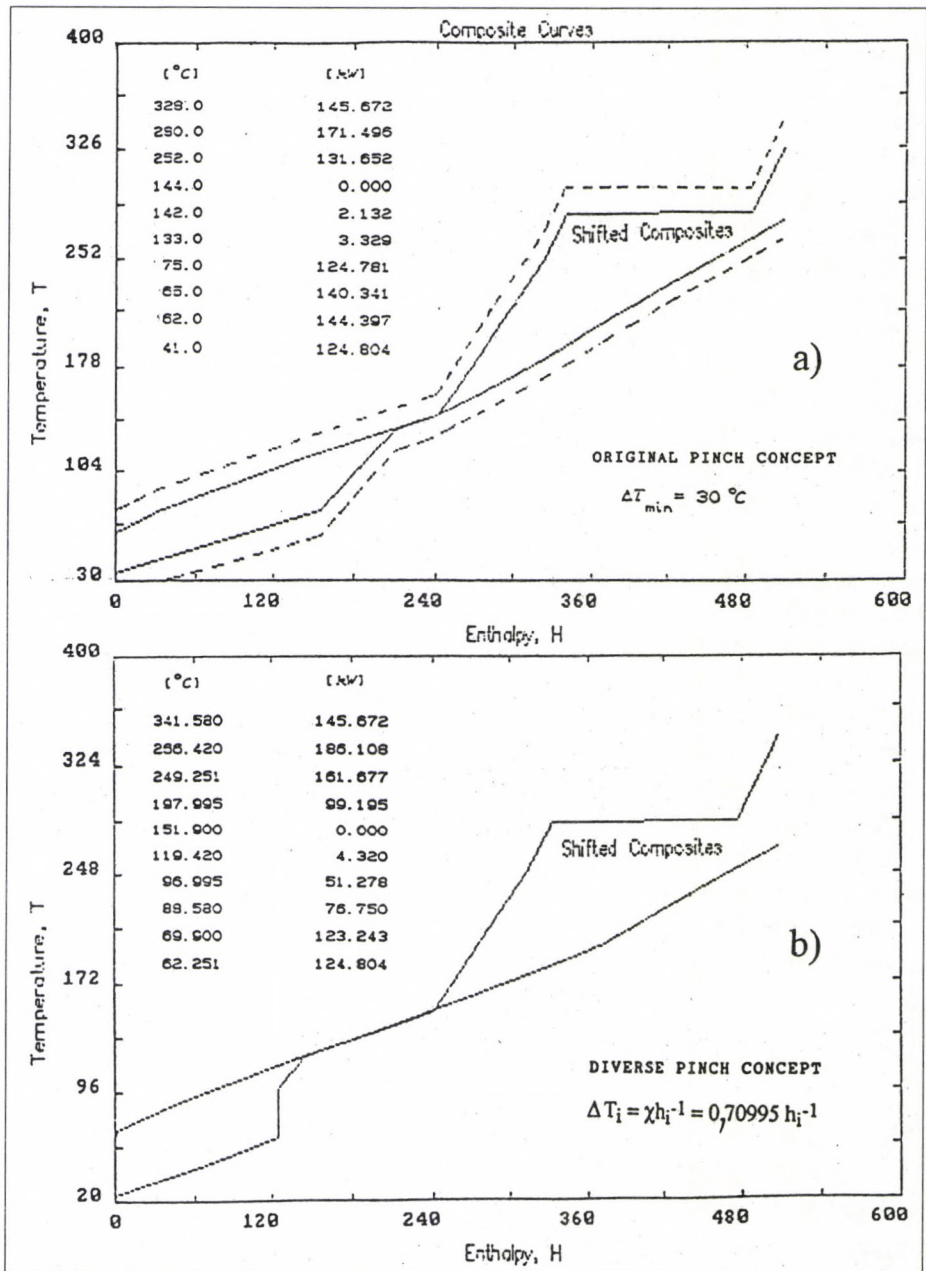
Az összetett vonalak szerkesztését vagy a hőcserélők számítását ún. shifted (módosított) hőmérsékletekkel végezzük. De nem egységes minimális $T/2$ értékkel módosítjuk az egyes áramok hőmérsékleteit, hanem minden egyes áramhoz eltérő értékekkel. Az egyes áramokhoz tartozó egyedi hőmérséklet-módosításokat fordítottan arányosnak vesszük az áram hőátadási tényezőjével:

$$\Delta T_i = \frac{K}{\alpha_i},$$

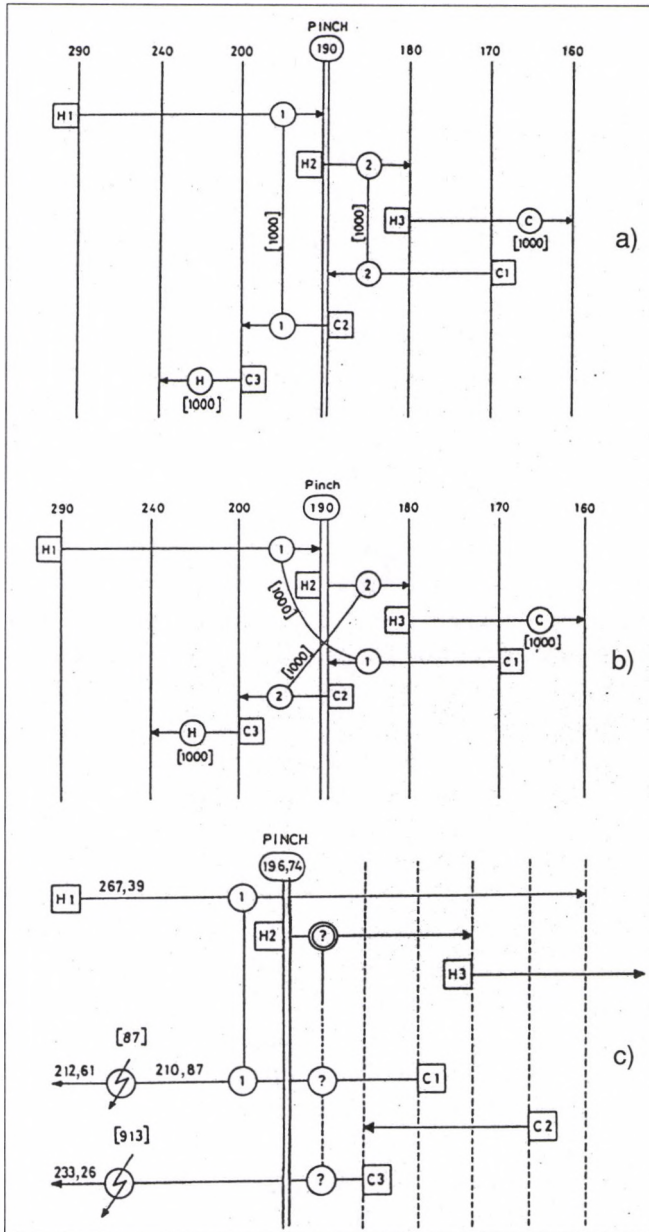
ahol az egész rendszerre nézve közös paraméter, ami a minimális $T/2$ szerepét veszi át. Ezzel a konvencióval olyan hőcserélő hálózatot tervezünk, melyet közel egyenletes hőáramsűrűség (Q/A) jellemez. Bizonyos esetekben ugyanis ha a konvencionális módszert követjük, tehát egységes $\Delta T/2$ -vel számolunk, akkor úgynevezett topológiai csapdába kerülhetünk. Ez azt jelenti, hogy a fokozatos fejlesztés módszerével nem jutunk el az optimális megoldáshoz.



26. ábra. Autoentrainer extraktív desztilláció



27. ábra. Hőcserélő hálózat kompozitgörbéi
a) hagyományos Pinch-módszerrel; b) sokrétű Pinch-módszerrel



28. ábra. Hőcserélőhálózat-tervezés

a) hagyományos Pinch-módszerrel; b) javítása „criss crossing” alkalmazásával; c) sokrétű Pinch-módszerrel

Általában mondható, hogy a különböző nagyságrendű film-hőátadási együttthatójú áramok esetén az új módszer alkalmazásával a *hagyományoshoz képest eltérő kompozitgörbéket* kapunk (27. ábra), és így elkerülhető a hagyományos módszerrel szintetizált „vertikális hőcserének” ún. „criss crossing” segítségével történő módosítása (28. ábra).

Vegyipari üzemek vízháztartásának optimalizálása

Legújabb vizsgálataink az anyagintegrációs hálózatok algoritmikus tervezéséhez kapcsolódnak, ezen belül is a vegyipari üzemek vízháztartásának optimális kialakításához. A vegyipari üzemek ugyanis a jelenlegi gyakorlat szerint igen nagy mennyiségű vizet használnak fel, és nagy mennyiségű szennyvizet bocsátanak ki.

Általában vizet használunk abszorpcióhoz, extrakcióhoz, mosáshoz, kigőzöléshez, továbbá hűtővízként, viszonylag alacsony ára és előnyös fizikai-kémiai tulajdonságai miatt. Ezenkívül alapanyag, reagens és melléktermék is lehet. A használt vagy keletkezett víz a vegyiparban általában erősen szennyezett, ezért nem bocsátható közvetlenül a környezetbe, előzetesen kezelni kell. Az üzemi költségek csökkentésének és a környezet védelmének egy lehetséges módja a felhasznált víz újrafelhasználása, illetve regenerálás utáni újrafelhasználása más egységekben vagy recirkulációval. Az anyagintegrációs hálózatok Pinch-analízise és az algoritmikus módszer kombinálásával hatékony tervezési stratégiát dolgoztunk ki az ipari szennyvízkezelés optimális kialakítására [26]. A 29. ábrán egy ilyen ipari feladat megoldását mutatjuk be számottevő (63%-os) összköltségsökkentéssel.

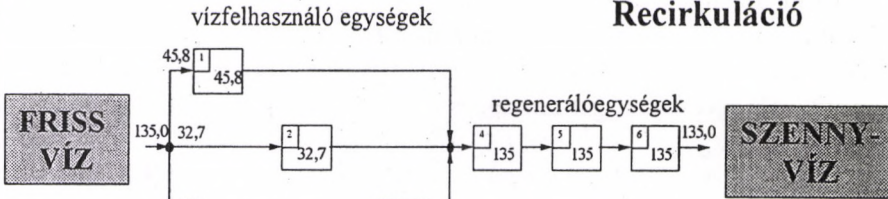
További kutatási feladatok

E székfoglaló előadásban, időkorlátok miatt, természetesen nem részletezhettem a vegyipari folyamattervezés összes aktuális kutatási irányát vagy akár csak a kutatócsoportunk által publikált munkákat sem. Az előadásomat tehát csak azokra az elvekre és eredményeimre korlátoztam, melyek az elmúlt három évtizedben e tématerület kutatásának általunk követett útját főbb vonalakban meghatározták.

Természetesen a folyamattervezés kutatása jelenleg is rohamléptekben halad, és ma már mondható, hogy e témakör az ezredfordulóra a *modern „chemical engineering” egyik leginkább fejlődésben lévő területének bizonyul*. A további kutatást igénylő és megoldásra váró feladatokat itt most csak felsorolásszerűen és a teljesség igénye nélkül jelölöm meg:

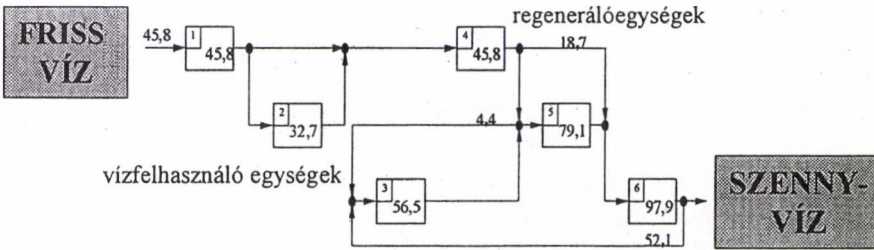
Vízháztartás

Újrafelhasználás
Regenerálás
Recirkuláció



Hagyományos struktúra

Frissvíz-költség:	323
Üzemeltetési költség:	1087
<u>Beruházási költség:</u>	<u>1060</u>
Éves összköltség:	1550



Optimális struktúra

Frissvíz-költség:	110
Üzemeltetési költség:	372
<u>Beruházási költség:</u>	<u>658</u>
Éves összköltség:	568

29. ábra. Ipari vízhálózat esettanulmánya

- a folyamattervezés ismeretbázisának bővítése és új generikus tervezési módszerek kifejlesztése
 - szilárd anyagokkal végzett műveletekre,
 - biokémiai folyamatokra,
 - műanyagipari eljárásokra,
 - komplex kémiai reakciókra,
 - reaktív elválasztó folyamatokra,
 - szakaszos műveletekre,
 - hibrid folyamatokra;
- az új folyamatok tervezése mellett a meglévő folyamatok javításának kutatása (retrofitting);
- a működőképességi, rugalmassági és szabályozhatósági elemzések rendszeres kutatása;
- a környezetbarát (hulladékszegény és energiaracionalizált) folyamatok fejlesztése;
- az algoritmikus megközelítés eszközeinek fejlesztése, ezen belül
 - a matematikai programozás reprezentációjának és programnyelvének kutatása,
 - a szuperstruktúra generálásának és optimalizálásának gráfelméleti kutatása,
 - a globális optimalizálás kutatása.

Köszönetnyilvánítás

E székfoglaló előadás végén fontosnak tartom hálával megemlíteni tanárait, akik velem a „chemical engineering” szakmát megszerettették, illetve tanítványaimat, akik megteremtették annak lehetőségét, hogy tanszékünkön nemzetközileg is elismert kutatócsoport jöjjön létre.

Egyéni szerencsém, hogy a graduális, illetve posztgraduális tanulmányaim során mindkét hazai művelettani iskola (először a veszprémi, majd a budapesti iskolák) műhelyitkait és szemléletét elsajátíthattam. Ez a többoldalú neveltetés nagymértékben hozzásegített a folyamattervezés és művelettan rendkívül sokrétű tématerületén kialakított számos kooperációs kutatás sikeres megvalósításához.

Szakmai és menedzseri tanítóim közül elsősorban *Benedek Pál, Földes Péter, László Antal, Szolcsányi Pál, Tettamanti Károly, Pleva László* és *Pallai Iván* professzorokat emelem ki, munkatársaim, illetve tanítványaim közül pedig a kutatócsoport jelenlegi és a korábbi meghatározó egyéniségeit, elsősorban *Mizsey Péter, Rév Endre, Mészáros István, Lesták Frigyes, Torma Árpád, Tegye*

Ágnes, Balog György, Kalmár István, Kaszás Mihály, Semih Kürüm, Roger Kurrat, Szoboszlai László, Benkő Norbert és Szitkai Zsolt vegyész mérnök kollégákat. Külön hálával emlékezem meg korábbi tanszékvezetőmről, a tragikus hirtelenséggel elhunyt Földes Péter professzorról, aki nemcsak meghívott kutatónak, hanem a későbbiekben is, kutatási témám ügyét messzemenően magáévá téve, munkámat mindig nagy érdeklődéssel kísérte és bátorítással támogatta.

A zürichi Svájci Szövetségi Műszaki Főiskolán (ETH), a Tokiói Egyetemen és más külföldi intézeteknél eltöltött vendégtanári és vendégkutatói évek során további kiváló kutatókkal dolgoztam együtt. Ezek közül kiemelném a következő kutatókat és professzorokat, akik a kutatási együttműködéseink során segítők, illetve partnereink voltak, és így jelentős hatást gyakoroltak munkáinkra: H. Nishimura, Y. Yamashita, Y. Naka (JPN), D. Rippin, M. Rose, O. Kut (CH), I. Grossmann, M. Doherty, J. Douglas (USA), B. Linnhoff, R. Smith (UK), L. Puigjaner (SPA) és G. Heyen, B. Kalitvenzeff (BEL).

Természetesen a bemutatott eredmények csak olyan kollektívában és munkahelyi légkörben születhettek meg, ahol az emberek kölcsönösen érzik munkájuk, az oktatás és a kutatás felelősségét. Szerencsés embernek mondhatom magam, mert én már közel három évtizede egy ilyen kollektívában munkálkodom. Külön köszönetet mondok tehát a Budapesti Műszaki Egyetem Vegyipari Műveletek Tanszék oktatóinak: Manczinger Józsefnek, Sawinsky Jánosnak, Sárkány Györgynek, Mizsey Péternek, Rév Endrének, Hajdu Hajnalkának, Békássyné Molnár Erikának, Borus Andornak, Deák Andrásnak, Kemény Sándornak, Láng Péternek, Havas Gézának, Hunek Józsefnek, Rezessy Gábornak, Simándi Bélának, továbbá az adminisztrációs és műszaki személyzetnek: Danics Istvánnénak, Lingné Mihalovics Gabriellának, Benkéné Lődy Ilonának, Panyi Lászlónénak, Lantos Bélának, valamint Virágh Eörsnének, akik messzemenően magukévá tették tanszékünk oktatásának és kutatásának ügyét, és így hozzájárultak az előadásban bemutatott eredmények létrejöttéhez.

Irodalom

1. Benedek P.–László A.: *A vegyész mérnöki tudomány alapjai*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1964.
2. Szolcsányi P.: *Transzportfolyamatok*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1972.
3. Szolcsányi P.: *Vegyipari műveleti egységek energetikai analízise*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1972.
4. Fonyó Zs.–Fábró Gy.: *Vegyipari művelettani alapismeretek*. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1998.

5. Fonyó Zs.: *Vegyipari rendszertechnika és matematikai modellezés*, I. Tankönyvkiadó, Budapest, 1982.
6. Fonyó Zs.–Rév E.: *Vegyipari rendszertechnika és matematikai modellezés*, II. Tankönyvkiadó, Budapest, 1988.
7. Linnhoff, B., Townsend, D. W., Boland, D., Hewitt, G. F., Thomas, B. E. A., Guy, A. R., Marsland, R. H.: *User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy*, IChemE, Rugby, UK, 1982.
8. Douglas, J. M.: *Conceptual Design of Chemical Processes*. McGraw-Hill, New York, 1998.
9. Linnhoff, B.–Flower, J. R.: *AIChE J.*, 1978, 24, 633, 642.
10. El-Halwagi, M. M. – Manousiouthakis, V.: *AIChE J.*, 1989, 35, 1233.
11. El-Halwagi, M. M.: *Pollution Prevention through Process Integration*. Academic Press, San Diego, 1997.
12. Grossmann, I. E.: *Mixed-Integer Optimization Techniques for Algorithmic Process Synthesis*. Advances in Chemical Engineering, Vol. 23. Academic Press, San Diego, 1996.
13. Fonyó Zs.: *Chemical Engng.*, 1974, 14, 1, 18; 1974, 14, 2, 203.
14. Földes P.–Fonyó Zs.: *Rektifikálás*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978.
15. Fonyó, Zs. – Rév, E.: *Chem. Eng. World Congress, Montreal, Canada*, 1981 Oct. 4–9, paper 6. 9. 4. proceedings, II. 298–302.
16. Fonyó, Zs.–Nishimura, H.–Yamashita, Y.: *AIChE Journal*, 1983, 29, 38.
17. Deák A.–Fonyó Zs.–Földes P.–Hunek J.–Kemény S.–Láng P.–Rév E.: *Elválasztási műveletek*. Tud. Szervezési Int., Budapest, 1985.
18. Pallai, I.–Fonyó, Zs. (szerk.): *Studies in Computer-Aided Modelling, Design and Operation*. Elsevier, Amsterdam, 1992.
19. Mizsey, P.–Fonyó, Zs.: *Comp. and Chem. Engng.* 1990, 14, 1213.
20. Mészáros I.–Fonyó Zs.: *Chem. Eng. Sci.*, 1988, 43, 3109–3112.
21. Fonyó, Zs.–Mizsey, P.: *Heat Recovery System CHP*, 1994, 14, 249–263.
22. Fonyó, Zs.–Kurrat, R.–Rippin D. W. T.–Mészáros, I.: *Computers Chem. Engng.*, 1995, 19, S1–S6.
23. Fonyó, Zs.–Benkő, N.: *Trans IChemE*, 1998, 76, Part A, March, 348–360.
24. Rév, E.–Mizsey, P.–Fonyó, Zs.: *Computers Chem. Engng.*, 1994, 18, S43–S47.
25. Rév, E.–Fonyó, Zs.: *Chem.Eng. Sci.*, 1991, 46, 1623–1634.
26. Rév, E.–Fonyó Zs.–Benkő N.: „*The Use of Nonlinear Programming to Optimal Water Allocation*”. Accepted for publication by Chem. Eng. Commun., 1999.
27. Fonyó, Zs.–Rév, E.: „*Energy Saving Techniques in Distillation*”. Chapter in Kluwer NATO Series Book, Amsterdam, 1999.