

Ecetsavanhidrid előállítás acetone pirolízisével II.*

A számítás menete a SIMUL-rendszerben

BENEDEK PÁL**
FEKETE ATTILA**
LÁZÁR JÓZSEF***

A számítástechnika lehetőségeinek maximális kihasználását a vegyészmérnöki gyakorlatban az jelentette az utóbbi évtized folyamán, hogy egy-egy bonyolult műveleti egység működésének szimulálására heurisztikus készülékmodellekből felépített automatikus programrendszereket készítettek és használtak. A következőkben bemutatjuk az ecetsavanhidrid üzem példáján [1, 2] a készülékmodellek összekapcsolása egy gyakorlatban megvalósított megoldását, amelyet a SIMUL rendszerben hasznosítottak [3].

A SIMUL-rendszer

Az összekapcsolás alap gondolata abból a számítástechnikai igényből következik, hogy egy adott bonyolult műveleti egység szimulációs modellje egyetlen Algol program legyen. Egy-egy készülék modellje tehát ebben az Algol programban eljárás lesz. A SIMUL-rendszer szóhasználata szerint az ilyen eljárást *boxnak* nevezzük. A box funkciója az, hogy a megfelelő készüléket elhagyó anyagi áramokat jellemző *áramvektorokat* a belépő áramvektorokból és a készülékre jellemző *működési paraméterek vektorából* kiszámítsa.

Mivel a box az Algol programban eljárás, azt *azonosítóval* kell ellátni. A *boxindex* kétjegyű szám, amely arra utal, hogy a box hol található meg a boxkatalógusban. Ugyanaz a box egy bonyolult műveleti egység szimulációs modelljében többször is előfordulhat. Ezek eltérő kapcsolásban vannak és eltérő működési paramétereik vektora is. Egy-egy konkrét működési paramétervektort a rövidség kedvéért kétjegyű számmal jelölünk és ezt a *box működési indexének* nevezzük. A boxról mondottak jelölésére a számítási folyamatábrán az 1. ábra szerinti konvenciókat használjuk. A számítási folyamatábra egyébként abban különbözik a (2. ábrán is bemutatott) technológiai folyamatábrától, hogy

- a készülékeket boxok váltják fel,
- az anyagáramokon kívül az információ áramokat is tartalmazza.

Az adott bonyolult műveleti egység szimulációs modelljét egyetlen Algol programban úgy lehet

* A közlemény I. részét l. Magy. Kém. Lapja 29, 548 (1974)

** Magyar Vegyipari Egyesülés Mérnöki Irodája, Budapest

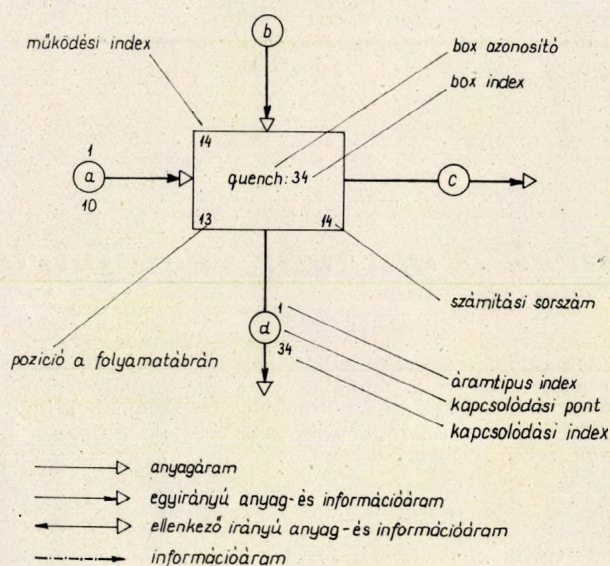
*** Kőbányai Gyógyszervegyészeti Gyár, Budapest

megfogalmazni, ha ezt a programot a programozó a boxokból mint eljárásokból felépíti. Ebben az összefüggésben a számítási folyamatábra a felépítés vázlata. A program felépítése során két kérdés adódik:

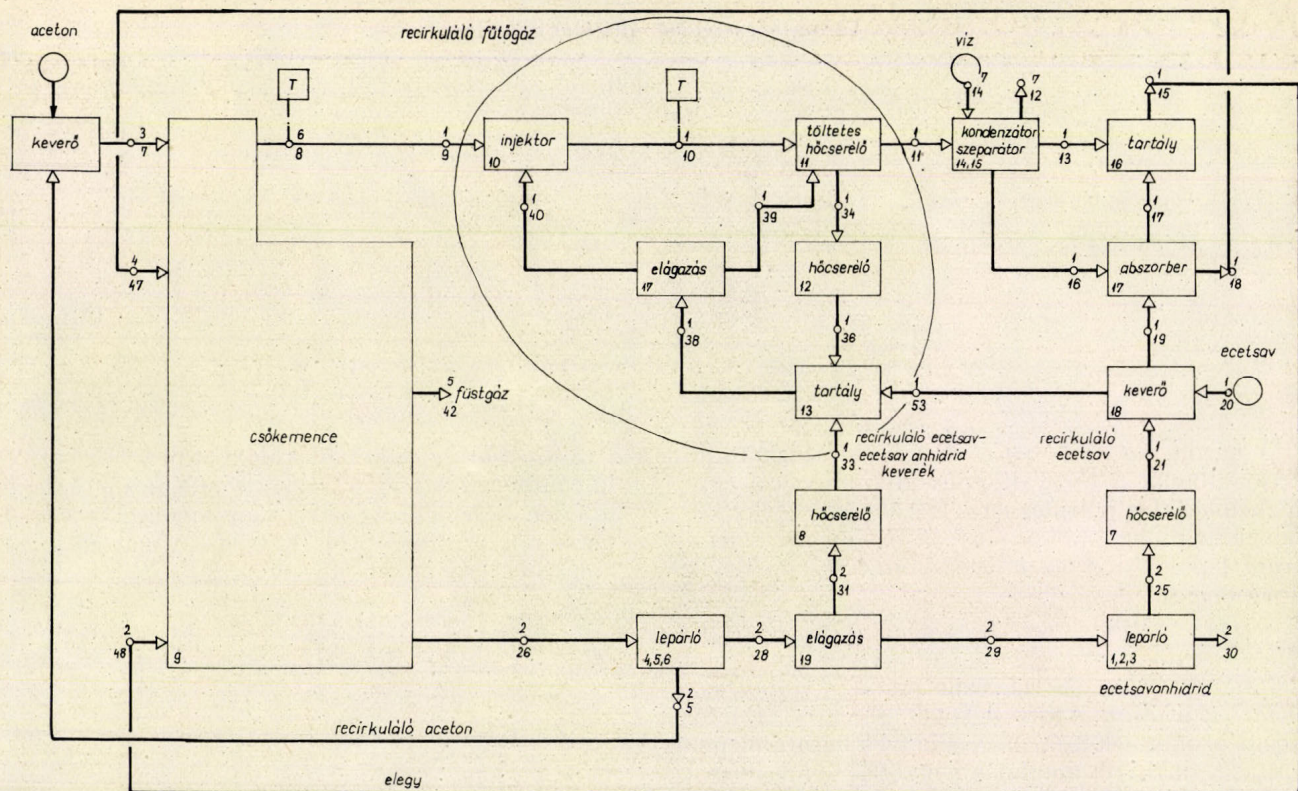
Az első: hogyan szervezze meg a programozó azokat a matematikai (pl. egyenletrendszer megoldás) vagy fizikai tulajdonságokat számító eljárásokat (pl. molhő számítás), amelyek használatára több boxon belül is szükség van? Ezeket boxon belül ismertetjük, mégpedig minden egyes boxon belül újra és újra és azt, amire éppen szükség van, avagy ugyanazt az általános érdeklődésre számot tartó eljárást a boxokat tartalmazó egyetlen összefogó programban egyetlen helyen deklaráljuk?

Amiképpen az Algol fordítóprogram globális függvényeljárásokat tartalmaz (pl. sin, exp...) és ezek tetszés szerinti programban hívhatók, azonosképpen kellene az összefogó programnak az általános érdeklődésre számot tartó eljárásokat tartalmaznia. Az ilyen értelemben megalkotott összefogó program ezek szerint szervezési feladatokat is ellát. Nevezzük ezért *szervező programnak*, a benne foglalt általános érdeklődésre számot tartó eljárásokat *szabványos eljárásoknak*.

Ezt a gondolatmenetet természetesen általánosítani is lehet, azaz alkalmazni adott esetben vala-



1. ábra. A számítási folyamatábra jelölés-konvenciói



2. ábra. A technológiai folyamatára kapcsolódási indexekkel és áramtípus indexekkel

mely bonyolult műveleti egységre. Minden adott esetben természetesen új szervező programot kell írni. De belátható, hogy ez nem kényelmes. És éppen ezért vetődik fel a második kérdés, vajon nem lehetséges-e teljesen általános kezelésre alkalmas, vagyis tetszőszerinti folyamatábrára alkalmazható szervező program készítése? Erre a kérdésre igenlő választ adhatunk. Ilyen a SIMUL-rendszer [3] szervező programja, amely a programépítkezést automatizálja. Ehhez mindenesetre szükséges, hogy a készülékek — boxok — kapcsolódási rendjét valahogyan leírjuk. A leíráshoz a kapcsolódási indexet használjuk. A 2. ábrán ismét közöljük az ecetsavanhidrid üzem előző közleményünkben is bemutatott folyamatábráját, amelyen ezúttal a készülékeket összekötő vonalak minenyikét két-két számmal jelöltük. A két szám közül az alsót nevezzük *kapcsolódási indexnek*. A boxok összekapcsolása most már abban áll, hogy minden box minden kapcsolódási pontja helyére a megfelelő kapcsolódási indexet írjuk.

Hőcserélő blokk

Tekintsük a mondottak érzékeltetésére a 2. ábrának azt a részletét, amely a következő három hőcserélőt tartalmazza:

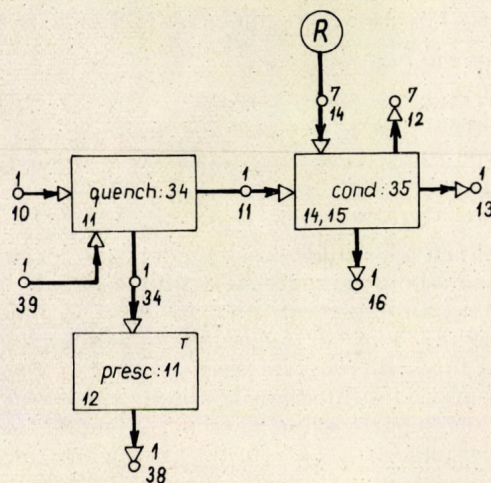
- 11 töltetes hőcserélő,
- 14 kondenzátor,
- 12 csököteges hőcserélő.

Ez a folyamatábra részlet magába foglalja még 15 szeparátort is. Ezeknek a hőcserélőknek a modellezéséről az előző közleményben részletes ismerte-

tést adunk és most tételezzük fel, hogy a modellek eljárásaként, vagyis boxként rendelkezésre állanak. A folyamatábrát úgy alakítjuk át számítási folyamatábrává, hogy — ha ez lehetséges — a folyamatábra egy-egy jelképi ábráját a megfelelő boxra kicseréljük. Adott esetben a következő készülék → box cseréről van szó (3. ábra):

- 11 töltetes hőcserélő → quench: 34 (14)
- 12 hőcserélő → presc: 11 (27)
- 14, 15 kondenzátor → cond: 35 (15)

Az 1. táblázatban összegyűjtöttük a hőcserélők és kapcsolódásuk leírásához szükséges adatokat.



3. ábra. A hőcserélő blokk vázlata

Pozíció	Készülék	Box azonosító	Index	Működési index	Kapcsolódási indexek				
					a	b	c	d	e
11.	Töltetes hőcserélő torony	quench:	34	14	10	39	-11	-34	
14.	Kondenzátor. Szeparátor	cond:	35	15	11	14	-16	-13	-12
12.	Csőköteges hőcserélő	presc:	11	27	34	-36	-35		

Áramtípusok:
 Általános (aceton, ecetsav, ecetsavanhidrid, ketén, metán, etilén, szén-monoxid, szén-dioxid, hidrogén)
 :1 (117, 193, 194, 14, 1, 26, 71, 70, 67)
 Víz :7 (69)

A három hőcserélőből és egy szeparátorból álló készülékblokk a tárgyalt bonyolult műveleti egységben azzal is jellemezhető, hogy mind a négy készülékbe azonos komponenseket tartalmazó anyagáram lép be. Ezt az anyagáramtípust, amelynek komponensei:

aceton, ecetsav, ecetsavanhidrid, ketén, metán, etilén, szén-monoxid, szén-dioxid, hidrogén, „általános áramnak” nevezhetjük és 1 áramtípus indexszel jelöljük. A készülékeket összekötő áramok közül azokat jelöltük meg, amelyeknél áramtípus váltás van. Erről alkalmas előírással gondoskodni kell. Az áramtípus indexet a 2. folyamatábrán a kapcsolódási index fölött tüntetjük fel. Az ábrából látható, hogy a 14 kondenzátor hűtőközege az előzőtől eltérő áramtípus. A 7 áramtípus indexszel jelzett áram egykomponensű, ez a komponens: víz.

A számítási folyamatára elkészítése során a következő általános tennivalók konkrét végrehajtásáról van szó:

- az áramtípusok kiválasztása,
- a boxok kiválasztása,
- a hálózat kidolgozása.

Ezt tettük a „hőcserélő blokk” részleten az előző példában.

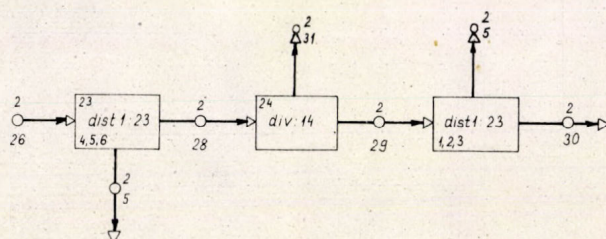
Aggregált készülékmodellek

Most áttérünk a 2. folyamatábrára egy másik részletének, a „lepárló blokknak” a leírására. Ez a részlet a következő készülékeket tartalmazza:

- 4 lepárló oszlop,
- 5 hűtő,
- 6 visszaforraló,
- 1 lepárló oszlop,
- 2 hűtő,
- 3 visszaforraló.

Ezeknek a készülékeknek modellezéséről az előző közleményben az aggregálás műfogásának bemutatásával kapcsolatban már szó esett és most feltehetjük, hogy az aggregált modell eljárásaként vagyis boxként rendelkezésre áll. Ezt a boxot két eltérő működési módban is alkalmazni fogjuk, hiszen két lepárlóoszlop szerepel a most tárgyalt készülékblokkban (4. ábra). Figyelemre méltó a div azonosítójú box megjelenése. Ez a csővezetéki elágazás modellezésére szolgál.

A most tárgyalt készülékblokk a tárgyalt bonyolult műveleti egységben azzal is jellemezhető, hogy minden készülékbe azonos komponenseket tartalmazó anyagáram lép be. Ezt az anyagáramtípust, amelynek komponensei csakis

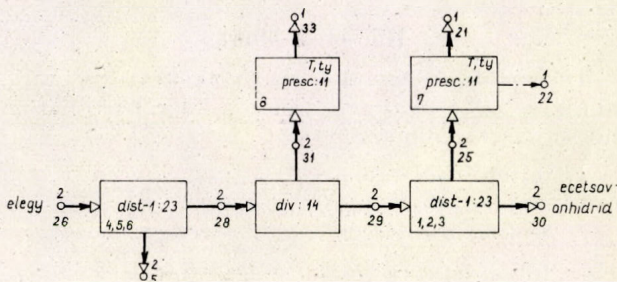


4. ábra. A lepárló blokk vázlata

aceton, ecetsav, ecetsavanhidrid,

a továbbiakban „elegy”-nek fogjuk nevezni és a 2 áramtípus indexszel jelöljük. Már megjegyeztük, hogy az áramtípus változtatását a SIMUL rendszerben számítás során külön, például az ún. presc boxszal elő kell írni. Ennek bemutatására kibővítjük a készülékblokk határait két hűtővel, melyeket presc boxszal modellezzünk és ezenkívül előírjuk, hogy mindkét hűtőt elhagyó áram áramtípus indexe 1 legyen, hogy ezeket az áramokat összekeverhessük 1 áramtípus indexű árammal. Mindkét esetben a presc box az áram hőmérsékletét és áramtípus indexét módosítja. A csővezetéki keveréshez a mix azonosítójú boxot használjuk (5. ábra).

A 2. táblázatban összegyűjtöttük a „lepárló blokk” készülékei működésének és kapcsolódásának leírásához használt boxok adatait, valamint definiáljuk az „elegy” áramtípust.



5. ábra. A lepárló blokk vázlata határainak kiterjesztése után

A lepárló blokk adatrendszere

Pozíció	Készülék	Box azonosító	Index	Működési index	Kapcsolódási indexek				
					a	b	c	d	e
4. 5. 6.	Lepárló oszlop Hűtő Visszaforraló	dist 1:	23	23	26	-5	-28		
	Csővezetési eljárás	div:	14	24	28	-31	-29		
1. 2. 3.	Lepárló oszlop Hűtő Visszaforraló	dist 1:	23	32	29	-25	-30		
8.	Hőcserélő	presc:	11	25	31	-33	-32		
7.	Hőcserélő	presc:	11	33	25	-23	-24		
	Áramtípus váltás	presc:	11	34	23	-21	-22		
	Csővezetési keverés	mix:	13	35	20	21	-19		

Áramtípusok:
Elegy (acetón, ecetsav, ecetsavanhidrid)
:2 (117, 193, 194)

A kemence dekompozíciós modellje

A kemencét a 2. folyamatábrán a 2 pozíciószámú készülék jelzi. Az előző közleményekben kifejtett okoknál fogva ezt a morfológiailag egyetlen készüléket számos összekapcsolt box igénybevitelével fogjuk számítani. A számítás folyamatábrája a 6. ábrán feltüntetett módon alakul, feltéve, hogy az előző közleményben kellő részletességgel magyarázott boxok rendelkezésre állanak. A számításmenetre a „Számítás folyamatprogramja és input adatrendszere” c. fejezetben még visszatérünk.

Újdonság a 6. ábrán az, hogy az anyagáramok mellett eredményvonallal rajzolt *információs áramok* is szerepelnek. Az információs áram *hivatkozást* jelent: azt, hogy egy már korábban előfordult adatot (amely áramvektor vagy működési paramétervektor eleme lehet) egy később előforduló box számítása során közvetlenül vagy *aritmetikai kifejezéssel* átalakítva felhasználjuk.

A 6. ábrának megfelelően a kemencemodellben öt áramtípus szerepel:

- „acetón” 3,
- „pirogáz” 6,
- „fűtőgáz” 4,
- „füstgáz” 5,
- „elegy” 2.

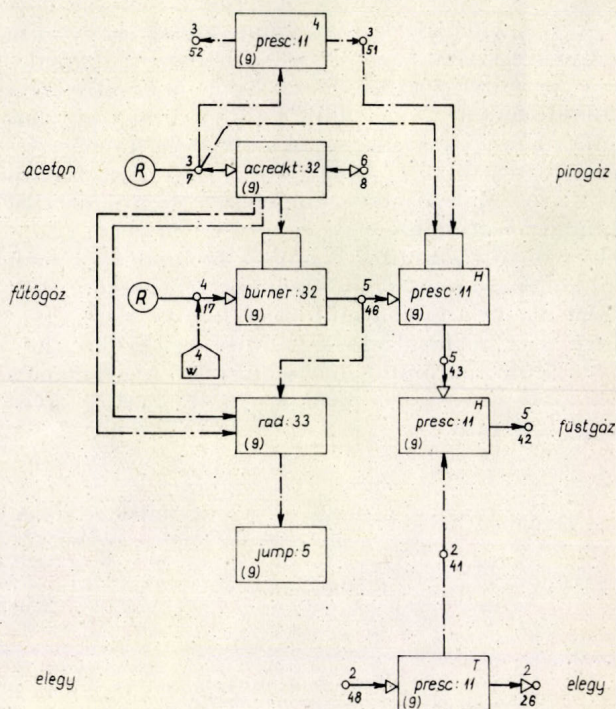
Ez utóbbit a desztillációs készülékekkel kapcsolatban már megismertük.

A kemenceszámításhoz felhasznált boxok és kapcsolódásaik leírásához szükséges adatokat a 3. táblázatban gyűjtöttük össze. Ugyanott szerepelnek az áramtípus definíciók is.

A szabályozott készülékek számítása

Az injektort a 2. folyamatábrán a 10 pozíciószámú készülék jelzi. A folyamatábra leírásakor az előző cikkben már jeleztük, hogy ez a készülék sza-

bályozott, a kilépő gázhőmérséklet alapértéke előírt. Az injektor szimulációjára a *balance* azonosítójú boxot használjuk, amely két eltérő összetételű és/vagy halmazállapotú bemenő áram csővezetési keveredése után előállt kilépő áram áramvektorát számítja ki. Tekintettel arra, hogy a kilépő áram hőmérséklete szabályozott, a belépő pirogázmenyiség pedig adott, az ismert összetételű és hőmérsékletű elegy felhasználandó mennyiségét kell kiszámítani. Ennek a számításnak a szervezésére a *solegs* boxot használjuk, mivel a számítás lényege



6. ábra. A kemence számításmenetének vázlata

A kemenceszámításhoz használt boxok adatrendszere

Pozíció	Készülék	Box azonosító	Index	Működési index	Kapcsolódási indexek					Hivatkozások
					a	b	c	d	e	
9	Pirolizáló kemence	presc:	11	11	7	-51	-52			3e7s
		acreakt:	32	1	7	-8				
		burner:	28	4	47	-46				
		radiation:	33	5						
		jump:	5	6						
		presc:	11	7	46	-43	-44			17elb, 15elb, 4e46s 18e5b, 3e51s,
presc:	11	21	48	-26	-41					
presc:	11	22	43	42	-44			3e4ls		

Áramtípusok:

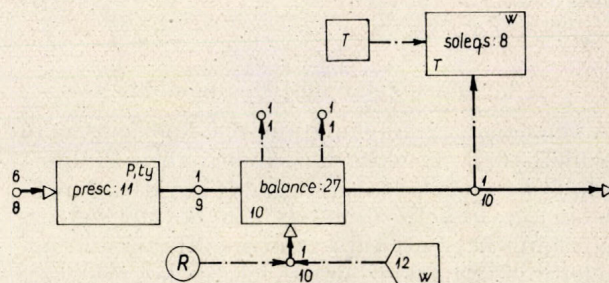
Aceton	:3 (117)
Fűtőgáz	(metán, etilén, szén-monoxid, szén-dioxid, hidrogén) : 4 (1, 26, 71, 70, 67)
Füstgáz	(oxigén, víz, szén-dioxid, nitrogén) :5 (64, 69, 70, 72)
Pirogáz	(aceton, ketén, metán, etilén, szén-monoxid, szén-dioxid, hidrogén) :6 (117, 114, 1, 26, 71, 70, 67)

valójában egy nem lineáris egyenletrendszer gyökének meghatározása. Kézenfekvő, hogy a *soleqs* box csak a számítási folyamatábrán szerepel (7. ábra), a technológiai folyamatábrán nincs megfelelője.

A számítási folyamatábrára részletesen még egy olyan boxot látunk, amelyeknek nincs a technológiai folyamatábrán megfelelője. A kemencéből kilépő és az injektorba belépő pirogáz útjában sorba kapcsolt *presc* box van. Ez a pirogáz nyomását, illetve áramtípusát módosítja. A számítási folyamatábrára e részletéhez szükséges boxok adatait a 4. táblázatban gyűjtöttük össze.

A recirkulációs körök számítása

A recirkulációs körök számításának szervezése nagymértékben hasonlít a szabályozott készülékek számításszervezéséhez. Nem hoz létre elvi különbséget az, hogy (mint a szabályozás esetében) információ visszacsatolásról vagy pedig (mint recirkuláció esetében) anyagáram visszacsatolásáról van szó. Matematikai modellezés szempontjából mindkét eset nemlineáris egyenletrendszerre vezet. Ez azonban számítástechnikai szempontból nem túl kellemes, mert nagy számítási időigény van és ezért, ha valamilyen műfogás lehetővé teszi, igyekezünk a recirkuláció számítását elkerülni. Két ilyen műfogást mutatunk be. Egyik a recirkulációs kör „felszakítása”, a másik a számítási irány ügyes megválasztása.



7. ábra. A szabályozott injektor számításmenetének vázlatja

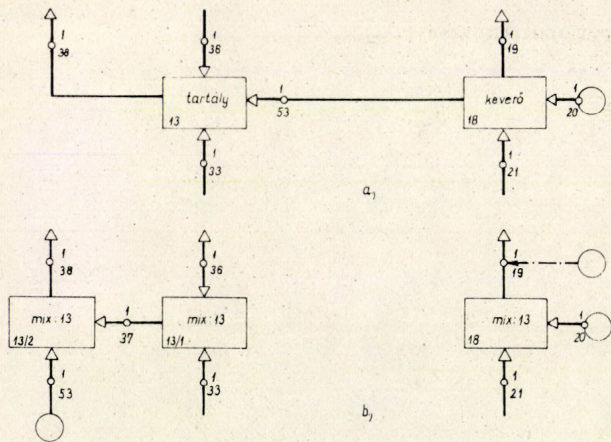
A 2. ábrán két — a 9 csökemencén áthaladó — recirkulációs kört figyelhetünk meg: az aceton-, illetőleg a fűtőgáz-recirkulációt. Megtehetjük, hogy ezeket a kemence előtt „felszakítjuk” vagyis a számítást egyirányúvá tesszük. A 7 kapcsolódási ponton a csökemencébe táplált acetonáram és az 5 kapcsolódási ponton a 4 lepárló oszlopból eltávozó acetonáram különbözni fog, a különbség éppen a teljes bonyolult műveleti egység *friss* acetonáram lesz.

Az abszorberből 18 kapcsolódási ponton távozó, illetve a 47 kapcsolódási ponton a kemencébe lépő fűtőgázáram különbsége a bonyolult műveleti egységből *lefuvatott* fűtőgáz áram lesz. (Az „elegy” *egyenesáramban* halad a bonyolult műveleti egységben, nem képez recirkulációt!) E két külső recirkulációs körön kívül a folyamatábrára két belső

Az injektor szabályozó blokk adatrendszere

4. táblázat

Pozíció	Készülék	Box azonosító	Index	Működési index	Kapcsolódási index				
					a	b	c	d	e
10	Nyomásbeállítás és áramtípus váltás ...	presc:	11	9	8	-9	-4		
	Iteráció	soleqs:	8	12					
	Injektor	balance:	27	13	9	40	-10	-1	-1



8. ábra. A recirkulációs kör vázlata

a) a technológiai folyamatban, b) a számítási folyamatban

recirkulációs kört is tartalmaz (a 2. ábrán ezt jeleltük is).

Az ecetsav, illetve az ecetsavanhidrid recirkuláció számításakor először a 13 tartály, illetve a 18 keverő modellezésével kell foglalkoznunk. Ezekre nagyon alkalmas a mix box, azonban a folyamatábrát úgy kell alakítanunk, hogy csak két bemenő és csak egyetlen kimenő anyagárama legyen mindegyik mix boxnak. Evégből a 8. ábrán bemutatott átalakítást hajtjuk végre. Ez az átalakítás nemcsak azt teszi lehetővé, hogy a mix boxokat felhasználjuk, hanem a mix boxnak azt a tulajdonságát is kiaknázhathatjuk, hogy a számítás iránya az anyagáram irányával ellentétes is lehet. Ugyanez vonatkozik a 17 pozícióban levő balance boxra is. Ez azt jelenti, hogy a belső recirkulációs körben a

számítás egyirányúvá válik. Ezt legjobban a teljes számítási folyamatábrán vehetjük szemügyre (9 ábra).

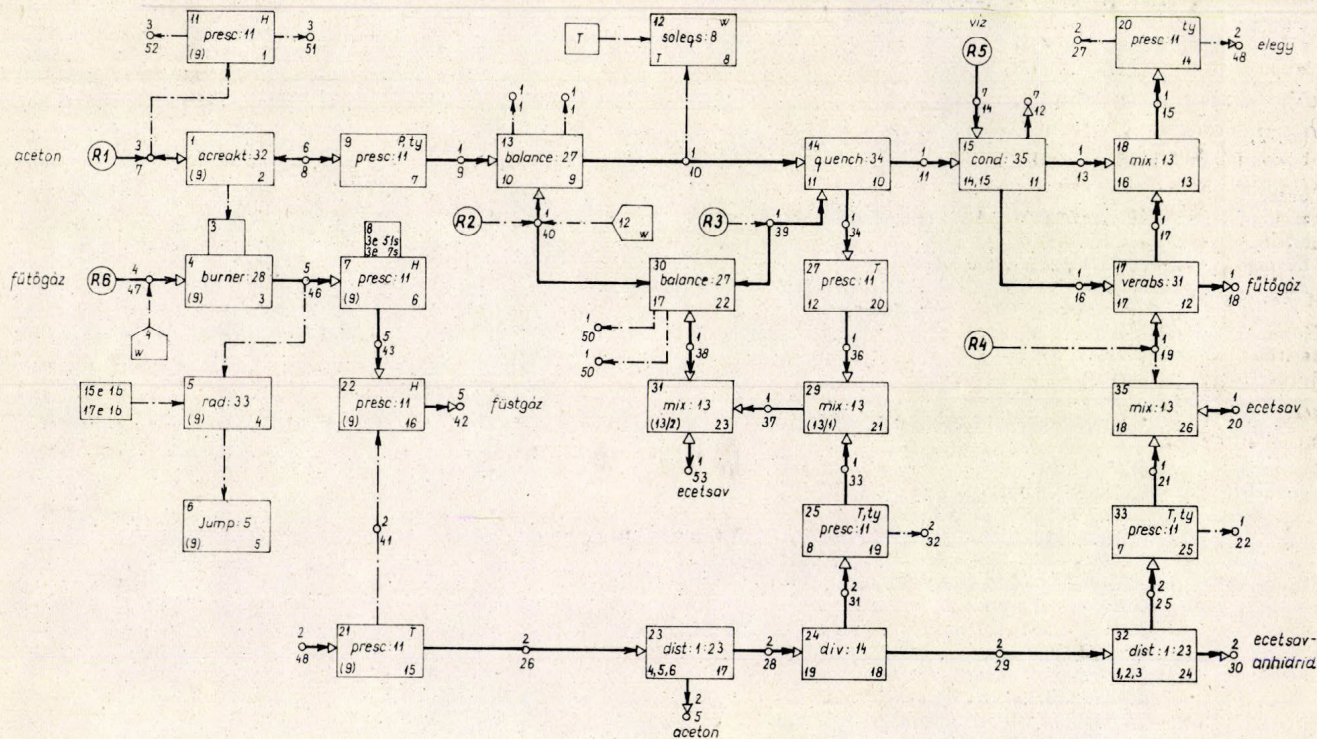
A friss ecetsaváram a számítási folyamatára kidolgozása után három betáplálási áramra hasad szét. Alapértékét a 19 kapcsolódási ponton belépő R4 ecetsaváram képviseli, a „két kiegészítő” áram pedig a 20, ill. 53 ponton lép be. Ezek közül az első a 17 abszorberben reagáló, a második pedig a 11 töltetes hőcserélőben reagáló ecetsavat pótolja.

A számítás folyamatprogramja és input adatrendszere

A 9. ábrán már a teljes számításmenet szerepel és most már csupán az van hátra, hogy elkészítsük a számítás szintaktikailag helyes folyamatprogramját és input adatrendszerét (5. táblázat).

A folyamatprogram két részből áll. Első része tartalmazza az áramtípusok deklarációit, a második része pedig a boxokat összekötő hálózat leírását. Mindkét rész tartalmával példaképpen az 1—4. táblázatokban foglalkoztunk. Az inputadatrendszer ismét két részből áll. Az első tartalmazza a számítás sorrendjében boxonként azok működési paramétervektorát, második része pedig a hat input áramvektorát. A számítás sorrendjében boxonként kommenteket közlünk.

A számításmenet a csökemence számításával kezdődik. Az R1 belépő hideg acetónáram a csökemence konvektív zónáján áthaladva kerül a kilépő pontján szabályozott pirolizáló szakaszba. Emiatt az anyagáram és az információáram iránya ellentétes és azzal jár, hogy a (7s) belépő acetón



9. ábra. A számítási folyamatábra

Folyamatprogram és input adatrendszer

[MANACAN3]

A25009

áramtípusok

általános (aceton,ecetsav,ecetsavanhidrid,ketén,metán,
etilén,szénmonoxid,széndioxid,hidrogén)
:1(117,193,194,114,1,26,71,70,67)
elegy (aceton,ecetsav,ecetsavanhidrid)
:2(117,193,194)
aceton :3(117)
fűtőgáz (metán,etilén,szénmonoxid,széndioxid,hidrogén)
:4(1,26,71,70,67)
füstgáz (oxigén,víz,széndioxid,nitrogén)
:5(64,69,70,72)
pirogáz :6(117,114,1,26,71,70,67)
víz :7(69)

+

műveletek

adatmentés :11(11,7,—51,—52)
acreact :32(1,7,—8)
előjelváltás, aritmetikai kifejezéssel
burner :28(4,47,—46)
radiation :33(5)
Jump :5(6)
konvektív zóna :11(7,46,—43,—44)
nyomás beáll. és áramv. :11(9,8,—9,—4)
Iteráció, soleqs : 8(12)

^

injektor :27(13,9,40,—10,—1,—1)

v

quench :34(14,10,39,—11,—34)
condenzer :35(15,11,14,—16,—13,—12)
abszorber :31(17,16,19,—18,—17)
nyerstermék :13(18,13,17,—15)
áramtípusváltás :11(20,15,—48,—27)
előmelegítés :11(21,48,—26,—41)
füstgáz hőm :11(22,43,—42,—44)
acetondesztilláció :23(23,26,—5,—28)
dividing :14(24,28,—31,—29)
hőcserélő :11(25,31,—33,—32)
hőcserélő :11(27,34,—36,—35)
mixing :13(29,36,33,—37)
keverés :27(30,39,40,—38,—50,—50)
mixing :13(31,37,38,—53)
ecetsavdesztilláció :23(32,29,—25,—30)
hőcserélő és áramt. v. :11(33,25,—21,—22)
mixing :13(35,21,—20,—19)
print : 2(36)
stop : 4(37)

+

no:73,

boxok működési paraméterei

presc :11(0,103)
acre : 1(987,0,25,4,0,0762,5₁₀—4,66,58,923,6,8×0)
aritm : 3(<0,17e1b>—)
burner : 4(20,0,298,2,3,87,3b,0,0,5)
rad : 5(8,4,3,66,6,4,9,75,2,67,9,57,0,2,28,17e1b,0,91,0,9,1,2,0,85,0,57,
15e1b,4e46s,0,017,1,10,100,10,100,4×0)
jump : 6(4,—2,18e5b)
aritm : 8(<3e51s,3e7s>—)
presc : 7(8b,103)
presc : 9(10,5,005,—1,001)
soleqs :12(1,2,20,0,0,0,2e40s,0,04755,0,0,35,0,001,
0,0,02,4e10s,783,2,0,2,0)
balance :13(0,1)
guench :14(0,0,5,82,0,76,422,2,375,0,1,0,5,9,
3,1,2,3,4,0,2,042,34,068,1,3716,
0,074,0,0638,0,1082,0,0444,0,0296,0,0444,0,0307,0,034,0,0143,
0,7099,0—8,0,7039,0—8,0,007413,0,0031367,0,0)
cond :15(300,0,0254,0,0213,8,53,0,69,0,032,
0,762,4,1,2,3,4,2,675,0,7,10,3,107,0,7,
2,429,0,7,3,935,0,7,0,0005,2,338,300,2,094,1,777,3,003,
0,968,0,838,1,257,0,628,0,838,0,405,10×0)
verabs :17(12,1,067,0,907,6,35₁₀—2,7,62₁₀—2,
0,762,0,508,344,31,3,9,81,0,4,2,0,0762,
2,3,1,0,0,2,5×0,0,22,2,0,075,5919,5216,36,
74,63,8,108,2,44,4,29,6,
44,4,30,7,34,14,3,0,4,12×0

mix	:18(2,05)
presc	:20(2,001)
presc	:21(348,004)
presc	:22(3e41s,103)
disti	:23(8,5,1,2,1,001,05,1,1,1,1,0,330,6,398,5,99,9,99,0,0,0,1, 1,397,7,6,82,329,66,1, 2,397,7,1,165,336,16,0,1316, 3,397,7,0,598,335,26,0,0527)
dividing	:24(0,30517,1)
hőcser	:25(308,004,1,001)
heat	:27(318,004)
tart1	:29(2,05)
kever	:30(10,1)
tart2	:31(2,05)
dist	:32(10,6,2,3,1,001,05,1,1,1,2,65,0,391,412,7,99,2,91,6,0,,0,01, 1,397,7,6,82,329,66,1, 2,397,7,1,165,336,16,0,1316, 3,397,7,0,598,335,26,0,0527)
hőcsere	:33(303,004,1,001)
mixing	:35(2,05)
print	:36(5,5s,7s, <9=11>s,13s, <15>20±s,25s,26s, <28=31>s, <33=34>s,36s, <38=40>s,42s,53s)
+	
streams	
acetontáplálás	: 7(3,0,0,4213,0,313,3,05,1,1)
hűtővíz	:14(7,5,4,0,298,3,05,0,1)
ecetsavbetáplálás	
az abszorberbe	:19(1,0,01820,0,313,05,0,01,7×0)
injektorfolyadék	:39(-1,0,26532,0,308,05,0,0,0,6295,0,3705,6×0)
guench torony folyadék	:40(-1,0,01508,0,308,05,0,0,0,6295,0,3705,6×0)
fűtőgáz	:47(4,0,093,0,308,1,05,1,0,677,0,081,0,191,0,009,0,042)
+	

áramvektorának adatai automatikusan módosulnak, a meleg acetonáram állapotának megfelelően. Ezért a hideg áram adatainak konzerválása a pirozízis számítását megelőző első technikai feladat.

1. presc (11b): a belépő hideg acetonáram (3e7s) entalpiaáramának értékét menti ki és őrizi meg a (3e51s) helyen, mivel az (1b) acreakt box a (3e7s) helyre az előmelegített acetontalpiáját helyezi el.

2. acreakt (1b): a belépő (7s) acetontömeggáramból a konverziók és a kilépő áram szabályozott hőmérséklete ismeretében meghatározza a radiációs zónában kialakult (17elb) átadási hőáramot, a kilépő (8s) pirogáz összetételét, valamint az acreakt-ba belépő előmelegített acetont (7s) áramvektorát.

3. burner (4b): a (47s) fűtőgáz áram adataiból, valamint az (1b) acreakt box által számított (17elb) átadási hőáram ismeretében számítja a radiációs zónából kilépő fűtőgáz (4e46s) hőmérsékletét.

aritm (3): megváltoztatja (17elb) előjelét, az (1b) acreakt és a (4b) burner box előjelkonvenciójának megfelelően.

4. rad (5b): a csökkenő konstrukciós paramétereinek figyelembevételével, az (1b) acreakt által számított (17elb) átadási hőáram és a (15elb) csőfalhőmérséklet ismeretében kiszámítja a radiációs zónából kilépő fűtőgáz (4e46s) hőmérsékletét. Ezt összehasonlítja a (4b) burner boxban más módon számított kilépő hőmérséklettel. Az előírtnál nagyobb különbség esetén Newton iterációval kiszámítja az (1b) burner boxba betáplálendő helyes (2e47s) fűtőgáz mennyiséget. Az iteráció minden lépésben (18e5b) működési paraméterét úgy állítja be, hogy az negatív, mindaddig, amíg a kétféleképpen számított hőmérséklet eltér és pozitív, ha hibahatáron belül megegyezik.

(Megjegyezzük, hogy a rad rendhagyó készülék jellegű box abban az értelemben, hogy nem áramvektor megváltoztató operátorként működik, kizárólag információs áramokat kezel. Másrészt viszont készülékre jellemző adatokat működési paraméterként vesz figye-

lembe. Átmenetet képvisel a készülékjellegű és a matematikai box típus között.)

5. jump (6b): a számítás sorrendjét vezérli. Ha az (5b) rad box (18e5b) működési paramétere negatív, a számítás a (4b) burner boxnál folytatódik már meghatározott új (2e47s) értékkel, ellenkező esetben a radiációs zóna számítása végetért és a kemence konvektív zónájának számítása következik.

6. presc (7b): a konvektív zóna acetoneelőmelegítőjéből távozó (43s) fűtőgáz állapotát számítja. Az áramvektor entalpia és hőmérséklet eleme ismeretlen. Az előbbi a (4e46s) és az acetoneelőmelegítő átadási hőáramának különbsége.

aritm (8b): az acetoneelőmelegítő átadási hőáramát számítja az acreaktor-ba belépő meleg acetont (4e7s) entalpiaáramának és az előmelegítetlen acetont (4e51s) entalpiaáramának különbségeként.

Most félbeszakítjuk a kemenceszámítást, hiszen még semmit sem tudunk a kemence konvektív zónáján áthaladó „elegy”-ről. Ezért a pirogáz feldolgozás számítására térünk át.

7. presc (9b): átmenetet képez a kemenceszámítás és a pirogáz feldolgozás között és két funkciója van. Beállítja a pirogáz nyomását 1 at-ra, mert Jeffreys nem illesztette nyomás szempontból a kemencéből kilépő áramot a hűtőegység bementéhez. Az összehasonlíthatóság fenntartása érdekében járunk el így. A box második funkciója az, hogy megváltoztassa a (8s) áramtípusát a hűtőegységben előforduló komponenseknek megfelelő „általános” típusra.

A meleg pirogázt hűtő hőmérsékletre szabályozott injektort balance box fogja szimulálni. A szabályozást (vagyis a hűtőfolyadék tömegáramának számítását) boxon kívül kell megoldani.

8. soleqs (12b): végzi a (9s) belépő pirogáz előírt hőmérsékletre való hűtéséhez szükséges folyadékmennyiség számítását, a csupán entalpiamérleget számító (13b)

balance box-szal együtt. Az iteráció során az injektorba belépő folyadék (2e40s) tömegáramát úgy kell megválasztani, hogy az injektorból kilépő gáz (4e10s) hőmérséklete az előírt (15e12b) értékre csökkenjen.

9. balance (13b): a belépő (9s) pirogáz és (40s) folyadék áramvektoraiból számítja a kilépő (10s) gáz áramvektorát.

10. quench (14b): a belépő (10s) gáz és a (39s) hűtőfolyadék áramvektorából, a kondenzátor felé menő (11s) telített gáz és a hűtő felé menő (34s) áramvektorait számítja.

11. cond (15b): a belépő (11s) telített gáz és (14s) hűtővíz áramvektoraiból számítja a kondenzátort elhagyó (13s) folyadék (16s) gáz és (12s) hűtővíz áramvektorait.

12. verabs (17b): a belépő (16s) gáz és (19s) ecetsav áramvektoraiból számítja a kilépő (18s) fűtőgáz és (17s) folyadék áramvektorait.

13. mix (18b): számítja a kondenzátorból érkező (13s) és az abszorberből érkező (17s) folyadék áramvektoraiból a keverőt elhagyó (15s) nyerstermék áramvektorát.

14. presc (20b): áramtípusváltásra szolgál, mert a (15s) nyerstermék (48s) háromkomponensű „elegy”. Az áramtípusváltás során elhagyott szennyező komponensek entalpiaáramát is elhanyagoljuk.

Ezzel befejeződött a pirogáz feldolgozó blokk számítása és most visszatérünk a csökemence számításához és befejezzük azt.

15. presc (21b): számítja az elegy megadott (4e26s) hőmérsékletre való előmelegítéséhez szükséges átadási hőáramot (3e41s).

16. presc (22b): számítja az elegy előmelegítő füstgázoldalon a szabadba távozó (42s) füstgáz áramvektorát, mégpedig (43s) áramvektorból és (3e41s) átadási hőáramból.

Ezzel befejeződött a csökemence számítása és a lepárló blokk számítása kezdődik.

17. dist-1 (23b): számítja a (26s) előmelegített elegy lepárlásakor előálló (5s) aceton fejtermék és a további elválasztásra kerülő (28s) fenéktermék áramvektorait.

18. div (24b): meghatározott arányban elosztja a (28s) fenékterméket az anhidrid lepárló oszlop felé (29s), illetőleg az utóhűtő felé (31s).

19. presc (25b): számítja a (31s) áram előírt hőmérsékletre való hűtéskor kialakuló átadási hőáramot (3e32s). A lehűtött folyadék áramtípus váltás után (33s) jut a (21b) keverőbe.

20. presc (27b): számítja a (14b) quench-ből érkező (34s) folyadékáram előírt hőmérsékletre való hűtéskor kialakuló (35s) átadási hőáramot. A lehűtött (36s) folyadék a (21b) keverőbe jut.

Most félbeszakítjuk a lepárlóblokk számítását és befejezzük az injektor quench-torony recirkulációs körének számítását.

21. mix (29b): számítja a lepárló blokkból érkező (33s) folyadék és quench-torony felől érkező utóhűtött (26s) folyadék (37s) keverékáramának áramvektorát.

22. balance (30b): számítja az (9b) injektor, ill. a (10b) quench-torony által felhasznált (40s), ill. (39s) ecetsav-ecetsavanhidrid áramok (38s) összegét.

(A számítás iránya az anyagáram irányával ellentétes.)

23. mix (31b): fiktív keverőként számítja azt a (2e53s) friss ecetsav áramot, amelyet a recirkuláló (37s)

folyadékáramhoz kell adagolni, a (10b) quench-toronyban eltolódott ecetsav-ecetsavanhidrid arány helyreállítására.

Ismét visszatérünk a lepárló blokk számításához.

24. dist-1 (32b): számítja a (23b) első lepárlóoszlop (29s) fenéktermékáramának lepárlásakor előálló (25s) regenerált ecetsav fejterméke a (30s) ecetsavanhidrid áram áramvektorait.

25. presc (33b): számítja a (25s) regenerált ecetsav előírt hőmérsékletre való hűtéskor kialakuló (22s) átadási hőáramot, majd megváltoztatja a kilépő (21s) folyadék áramtípusát.

Ezzel befejeződött a lepárló blokk számítása. Most már csak az ecetsav recirkulációs kör számítása marad hátra, a már alkalmazott műfogással.

26. mix (35b): számítja azt a (20s) friss ecetsav áramot, amelyet a (21s) recirkuláló ecetsav áramához kell adagolni, hogy a (17b) verabs (19s) bemenő ecetsaváramát helyreállítsuk.

Ezzel a számítás érdemi része befejeződött.

27. print (36b): az előírt adatokat kinyomtatja.

28. stop (37b): a program befejeződött.

A számítási eredmények összehasonlítása és értékelése

A *Jeffreys*-féle számítás eredményeivel való összehasonlíthatóság érdekében táblázatban közöljük a technológiai folyamatábrán szereplő anyagáramok adatait (6. táblázat).

A kapott eredmények általában igen jól egyeznek a *Jeffreys*-féle számításával.

A tételes összehasonlítás alapján néhány következtetést lehet levonni:

A kemence számítása során a kétféle módon kapott eredmények között jelentősebb eltérés csak az entalpiaáramok esetében és ennek következtében néhány hőmérséklet és átadott hőmennyiség esetében) mutatkozik. Ennek — a számítás további részeire is vonatkozó — alapvető oka az, hogy a két számítás során eltérő fajhőfüggvényeket és más irodalmi forrásokból származó anyagi állandókat használnak. A SIMUL-rendszerben adódó számítástechnikai könnyebbség azt is lehetővé tette, hogy a fiziko-kémiai tulajdonságok hőmérsékletfüggését is figyelembe vegyük a boxok algoritmusában, ami ugyancsak indokolja az eredmények közötti eltérést. A keletkező anyagáramok összetétele megfelelő, csak a kis koncentrációban előforduló komponensek móltörtjeiben figyelhető meg nagyobb eltérés.

A töltetes hőcserélőt illetően az eredmények (11s, 34s) közel azonosak. A tömegátadási és hőátadási együtthatók értékét megfelelő irodalmi adat és megbízható algoritmus hiányában *Jeffreys*-tól vettük át. A meglévő eltérések oka valószínűleg az, hogy a számítás alapjául használt differenciál-egyenlet rendszert *Jeffreys* Euler módszerével oldotta meg, a torony hosszában 7 helyen becsülve a változók értékeit, a SIMUL-modellben található algoritmus pedig ötödfokú Runge-Kutta

Jeffreys számításai és a SIMUL-rendszerben végrehajtott számítások összehasonlítása

Áramvektor sorszáma	Tömeg- áram, kmól/sec	Hőmérsék- let, K	Móltörtek								
			aceton	ecetsav	ecetsav- anhidrid	ketén	metán	etilén	CO	CO ₂	H ₂
5.	0,0316	329,7	1,000	0,000	0,000	—	—	—	—	—	—
	0,0317	328,7	1,000	0,000	0,000	—	—	—	—	—	—
7.	0,0421	303,2	1,000	—	—	—	—	—	—	—	—
	0,0425	303,2	1,000	—	—	—	—	—	—	—	—
9.	0,0532	987,0	0,583	0,0	0,0	0,150	0,195	0,016	0,046	0,002	0,008
	0,0551	1033,0	0,578	0,0	0,0	0,134	0,189	0,032	0,053	0,025	0,012
10.	0,0658	783,7	0,471	0,121	0,071	0,122	0,158	0,013	0,037	0,001	0,006
	0,0702	783,2	0,454	0,135	0,080	0,106	0,148	0,025	0,042	0,002	0,009
11.	0,0649	421,1	0,499	0,112	0,024	0,116	0,163	0,027	0,046	0,002	0,010
	0,0657	422,0	0,485	0,113	0,048	0,113	0,158	0,027	0,045	0,000	0,010
13.	0,0370	337,8	0,774	0,000	0,226	—	—	—	—	—	—
	0,0369	—	0,736	0,004	0,260	—	—	—	—	—	—
15.	0,0590	329,4	0,550	0,297	0,153	—	—	—	—	—	—
	0,0596	313,2	0,533	0,294	0,173	—	—	—	—	—	—
16.	0,0211	337,8	0,178	0,020	0,003	0,032	0,502	0,085	0,142	0,007	0,030
	0,0221	344,3	0,212	0,030	0,009	0,033	0,469	0,079	0,133	0,006	0,029
17.	0,0219	313,0	0,171	0,798	0,031	—	—	—	—	—	—
	0,0228	336,0	0,204	0,763	0,032	—	—	—	—	—	—
18.	0,0166	313,0	0,000	0,026	0,004	0,000	0,636	0,107	0,179	0,009	0,039
	—	313,0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,677	0,081	0,191	0,009	0,042
19.	0,0182	313,0	—	1,000	—	—	—	—	—	—	—
	0,0181	313,0	—	1,000	—	—	—	—	—	—	—
20.	0,0061	—	—	1,000	—	—	—	—	—	—	—
	0,0064	—	—	1,000	—	—	—	—	—	—	—
25.	0,0121	392,0	0,007	0,959	0,034	—	—	—	—	—	—
	0,0117	392,0	0,006	0,992	0,002	—	—	—	—	—	—
26.	0,0590	348,0	0,550	0,297	0,153	—	—	—	—	—	—
	0,0596	349,6	0,533	0,294	0,173	—	—	—	—	—	—
28.	0,0267	397,7	0,005	0,657	0,339	—	—	—	—	—	—
	0,0279	397,6	0,003	0,627	0,369	—	—	—	—	—	—
29.	0,0185	397,7	0,005	0,657	0,339	—	—	—	—	—	—
	0,0195	397,6	0,003	0,627	0,369	—	—	—	—	—	—
30.	0,0064	411,8	0,000	0,079	0,921	—	—	—	—	—	—
	0,0078	—	0,000	0,083	0,916	—	—	—	—	—	—
31.	0,0081	397,7	0,005	0,657	0,339	—	—	—	—	—	—
	0,0085	397,6	0,003	0,627	0,369	—	—	—	—	—	—
33.	0,0081	308,0	0,005	0,657	0,339	—	—	—	—	—	—
	0,0085	308,0	0,003	0,627	0,369	—	—	—	—	—	—
34.	0,2563	375,0	0,000	0,622	0,378	—	—	—	—	—	—
	0,2546	373,9	0,000	0,627	0,373	—	—	—	—	—	—
36.	0,2563	318,0	0,000	0,622	0,378	—	—	—	—	—	—
	0,2546	318,3	0,000	0,627	0,373	—	—	—	—	—	—
38.	0,2780	308,0	0,000	0,629	0,371	—	—	—	—	—	—
	0,2804	308,0	0,000	0,630	0,370	—	—	—	—	—	—
39.	0,2653	308,0	0,000	0,629	0,371	—	—	—	—	—	—
	0,2653	308,0	0,000	0,630	0,370	—	—	—	—	—	—
40.	0,0126	308,0	0,000	0,629	0,371	—	—	—	—	—	—
	0,0150	308,0	0,000	0,630	0,370	—	—	—	—	—	—
53.	0,0136	—	—	1,000	—	—	—	—	—	—	—
	0,0207	—	—	1,000	—	—	—	—	—	—	—

módszerrel, 21 becsléssel határozza meg az anyag-áramok összetételét. Függetlenül az eredmények viszonylagosan jó egyezésétől, a felhasznált *Jeffreys*-féle modell meglehetősen durva, és a megoldás sikere nagyon függ attól, hogy az átadási együtthatók értéke korrekt-e.

A kondenzátor számítása során úgy találtuk, hogy a *Jeffreys* által adott alapkoncepciót elfogadva az eredmények jól egyeznek. Az adott konverzióhoz szükséges hűtővíz mennyiségét meg kellett növelni, azaz a kilépő gázelegy (16s) hőmérsékletét csökkenteni.

Az anyagáramok adataira vonatkozóan az ab-

szorber számítása lényegében problémamentes, ellenben a tányérokra felszabaduló hőmennyiségek értékei jelentősen eltérnek a *Jeffreys* által számított értékektől, ami ugyancsak fizikai-kémiai tulajdonságokat számító eljárások eltéréséből fakad.

A lepárló oszlopok számítási eredményei esetében az egyezés igen jónak mondható, csak az anhidrid toronynál találtunk némi eltérést. Ennek magyarázata az, hogy *Jeffreys* nem ad elegendő felvilágosítást a torony működési paramétereiről, így sem a betáplálás helyéről, sem a pontos reflux arányról. Az eredmények összehasonlíthatósága tehát ez esetben kétséges.

Az aceton pirolízisén alapuló ecetsavanhidrid-gyártás számítását a SIMUL-rendszerben Érdi Péter, Fábry László, Gervai Judit és Lázár József egyetemi hallgatók diplomamunkájuk során valósították meg Antal János, Fekete Attila és Szalai Attila vegyész-mérnökök segítségével és közreműködésével. Jelen közlemény kéziratának megfogalmazásában Almásy Gedeon, Farkas Margit és Sztanó Tamás szíves tanácsai szerint jártak el a szerzők.

IRODALOM

- [1] Jeffreys, G. V.: The manufacture of Acetic Anhydride. The Institution of Chemical Engineers, London. 1964.
- [2] Benedek, P.—Lázár, J.—Szalai A.: Magyar Kémikusok Lapja. 29, 548 (1974).
- [3] Almásy, G. és mások: Bonyolult műveleti egységek matematikai szimulációja. Akadémiai Kiadó, Budapest. 1973.

SUMMARY

The authors are dealing with mathematical simulation of an acetic anhydride plant outlined in a previous article. The mathematical simulation has been carried out by the earlier elaborated and published Simul system. The projecting of the computational process and its putting down on the flowchart and the rewriting of the later into the flow-program according to the syntactic rules of the Simul system are shown. The results of the computation are published and compared with Jeffreys' ones.

Könyvismertetés

Atlas of Thermoanalytical Curves 2. (Szerkesztette: Liptay György) (Akadémiai Kiadó, Budapest 1973. 74 derivatogram)

A termikus analízis módszerét egyre szélesebb területen alkalmazzák a tudományos kutatásban és az ipari gyakorlatban egyaránt. Ezért mind a tudományos kutatóknál, mind pedig az ipari szakembereknél jelentkezik az igény derivatogramok gyűjteményét tartalmazó könyvre.

Termoanalitikai tárgyú cikkeket közlő folyóiratokban (Thermochimica Acta, Journal of Thermal Analysis) egy-egy téma-területen elért eredményekről kaphatunk részletes felvilágosítást. Az angol Stanton-cég kiadásában megjelent Thermal Analysis Review egy ideig referálta a termoanalitikai tárgyú közleményeket. A megjelent könyvek csak a differenciál-termoanalízis, vagy csak a termogravimetria eredményeit tartalmazzák, és általában egy témakörrel foglalkoznak. A Termoanalitikai Görbék Atlasza nagy számú vegyület komplex termikus sajátásaiba történő gyors betekintésre ad lehetőséget.

Az Atlasz szerkesztője arra törekszik, hogy a kiválasztott vegyületekkel elméleti és gyakorlati kutatási területek széles spektrumát ölelje fel. Különböző szerzetlen sók, analitikai csapadékok, komplex-vegyületek, műtrágya és gyógyszerként alkalmazott vegyületek, valamint a gépszír technológiában is használt fémacetátok, általában különböző szerves vegyületek, szilikát ásványok, szerek derivatogramjait, azok részleges értelmezését közli gyűjteményében. A derivatogramok mellett feltünteteti a kérdéses vegyület termikus sajátásaival foglalkozó irodalom bibliográfiai adatait is.

Mivel a kísérleti körülmények a termikus sajátásokat befolyásolják, ezért két különböző kísérleti körülmény között, egy kisebb és egy nagyobb bemérésből, egy lassúbb és egy gyorsabb felfűtési sebesség mellett felvett derivatogramokat közöl. A derivatográfias vizsgálatoknál az egyes kutatók platinatégléyt alkalmaznak és levegő jelenlétében dolgoznak. Több esetben, különösen szerves vegyületek hevítésénél a platina katalizálja a termikus bomlást. Ezért igen érdekes lenne olyan gyűjteményt összeállítani, amely a szerkesztő által bevezetett thermo-kerám tégelyben felvett derivatogramokat tartalmazná. Szerves vegyületek vonatkozásában nagy érdeklődésre tartanak számot a nitrogén áramban készített derivatogramok.

A 2. kötet 74 anyag (51–125.) derivatogramját, ezek részleges értelmezését, a vizsgálatok kísérleti körülményeit, a felhasználást, vegyületek eredetét és a vonatkozó termikus irodalom bibliográfiai adatait tartalmazza.

Foglalkozik néhány oxid (MnO_2 , Mn_2O_3 , $KMnO_4$) és hidroxid valamint oxid-hidroxid [$Ca(OH)_2$, $Al(OH)_3$, $NH_2OH \cdot HCl$, $AlOOH$ (böhmit), $FeOOH$ (göthit)] derivatogramjának ismertetésével.

Bemutatja több halogénid termikus görbéit. Különösen nagy figyelmet szentel az ammónium-halogenideknek (fluorid, hidrogén-fluorid, klorid, bromid, jodid), valamint ritkaföldfémek (Pm, Sm, Ho) kloridjainak. Emellett közli még a kalcium-klorid és a réz(I)—higany (II)-jodid derivatogramját.

Az oxisavak sói közül ismerteti néhány vízmentes és kristályvizes alkáli-karbonát (ammónium, nátrium, kálium) és az ammónium-hidrogénkarbonát, néhány szulfát/kálium-hidrogén-szulfát, kálium-alumínium-szulfát), a kálium-nitrát, -kromát, és -dikromát, nátrium-hidrogén- és nátrium-dihidrogén-foszfát, valamint cink és mangán-ammóniumfoszfát, végül nátrium-volframát-dihidrát derivatogramját.

Legnagyobb volumenben szerves savak sóival foglalkozik, különösen az acetátokkal és az oxalátokkal: 12 db fémacetát (NH_4^+ , Li, K, Rb, Cs, Mg, Sr., Ba, Hg(I), Hg(II), Pb) és 7 db fém-oxalát (NH_4^+ , Ba, Zn, Cd, Mn, Co, Ni), ezenkívül a di-ammónium-hidrogén-citrát, ammónium- és nátrium-ureát, kálium-hidrogén-ftalát, nátrium-szalicilát termikus görbéit mutatja be.

Hat db szerves sav (mono-, di- és tri-glicin/aminocet-sav/, aminoglutársav, barbitursav-dihidrát, és a malonsav) termikus sajátóságait tárja elénk.

Betekintést nyújt néhány komplex vegyület (rubidium- és cézium-tetrafenil-borát és nikkelt-hexammin-klorid) és egy gyógyszeralapanyag (Nystatin) termikus viselkedésébe.

Ismerteti három szilikát ásvány és két különböző eredetű szén-minta derivatogramját.

A 2. kötet tehát túlsúlyban szerzetlen vegyületek és szerves savak sóinak derivatogramját mutatja be, mely vegyületek termikus sajátásainak ismerte elméleti és gyakorlati szempontból egyaránt értékesen hasznosítható. Az Atlasz iránti érdeklődést azonban fokozná, ha a következő kötetek a kémia további fontos területeiről, mint pl. polimer, festék, gyógyszer, növényvédőszer vagy szilikát-kémia, tartalmaznának nagyobb számban derivatogramokat.

Nagyon szerencsés és dicsérete méltó, hogy a gyűjteményt nemcsak az Akadémiai Kiadó, hanem a Heyden & Son angol cég is megjelenteti, és ezáltal nemzetközi fórum előtt is lehetővé válik a termoanalitikai kutatások széles területén elért hazai eredmények bemutatása.

Dr. Flóra Teréz