

Bevezetés

A hazai kémiai technológiai kutatás és oktatás megalapítója *Wartha Vince* volt, akinek 1870. okt. 1-én rendes tanárrá történt kinevezésével alakult meg a kémiai technológiai tanszék „műszaki vegyipari-műtani tanszék” néven az akkori m. kir. József Műegyetemen.

Az elmélet és gyakorlat egységéről vallott nézeteit így fejtette ki [1]:

„Az elvont tudomány teszi alapját a tisztán műszaki tudományoknak; ő az, ki lelket lehel a holt tömegbe. Tudományos alap nélkülül ipar sem létezhetik, és maga a föld is csak a tudomány varázsveszejének érintésére szolgáltatja ki kincseit.

Bár sokat halljuk — mégpedig irányadó körökben is — hangsúlyozva, hogy a műszaki iskola túlnyomóan gyakorlati irányt kövessen; halljuk a mesét az arany praxisról és a szürke teóriáról; de ne hallgassunk rá, mert ez a legtöbb esetben olyanoktól származik, kiknek sem az elméletről, sem a gyakorlatról helyes fogalmuk nincs. Az elméletnek helyes és ésszerű gyakorlati alkalmazása szülte az újkor bámulatos eredményeit, holott a tiszta empirizmus csak aránytalan sok idő- és példázatokkal tud egyes esetekben sikert mutatni... Kézzelfoghatóan látjuk, hogy egy nemzet fejlődésében minő szerep jutott a tudomány ápolásának. Valóban életrevaló ipar csak ott fejlődhetik, ahol a tudományt fejlesztik.”

Szerteágazó technológusi munkásságát, melyvel a hazai ipar és mezőgazdaság megteremtését és fejlesztését szolgálta részletesen tárgyalja *Móra* tanulmánya [2].

„Wartha után *Pfeifer Ignác* vezetése alatt a kémiai technológiai tanszéken főként a magyar szénfeleségekből alacsony hőmérsékleten előállított kátrány és a feldolgozásával nyerhető olajok képezték vizsgálat tárgyát. Ez a munkásság az első világháború előtt kezdődött meg, abban az időben, amikor a szénolajok előállításának gazdasági szükségessége még távolról sem volt fontos probléma: *Pfeifer Ignác* a Wartha-féle vízvizsgálati módszert tökéletesítette és az egyesített Wartha—*Pfeifer*-eljárást a technikai vízelemzésekre csaknem mindenütt használták”. Ezenkívül „Dynamó olajat” és „kenőolajat” bontottak el 550 és 675°C közötti hőmérsékleten és vizsgáltak a keletkezett termékek — benzol, toluol, xilol — mennyiségét.

A nagynevű elődök nyomában *Varga József* haladt, mint *Móra László* tanulmánya előszavában olvashattuk:

„A műszaki tudósnak azonban az élet mindennapi követelményeihez kell igazodnia, azok pedig

rohanó korszakunkban szüntelenül változnak. Új igényekhez új nyersanyagokat, az új nyersanyagokhoz új technológiákat kell keresni. Nyersanyagforrások elapadnak, más nyersanyagok végtelennek tűnő készletekben bukkannak fel, amíg az igények haladványszerű növekedése ezt a végtelent is végesíti. Hogy ez mennyire így van, arra éppen *Varga József* élete mutat kristálytisza példát. A kissármási földgázforrást, amelyen szén-drogén technológiai kutatásait elkezdte, a békeszerződés lezárja számára. Kőolaj- és földgázkészlet hiányában az ország egyetlen motorhajtó anyagokká feldolgozható ásványi kincséhez fordul. De közben feltárják a lispei olajmezőket. Be kell záratnia szép sikerekkel kecsegtető péti kísérleti üzemét. A lispei olaj hamarosan kiapad, de máris itt van a nagylengyeli olaj. Nagy aszfalttartalma újból a régi nyomvonalra csábít és megszületik, mintegy a több évtizedes kutatómunka szintéziseként, a köszénkátrányok és nehéz kőolajmaradékok feldolgozására egyaránt alkalmas hidrokrakk eljárás.... én pont ebben látom *Varga József* alakját történelmivé magasztosulni, az igit-veig műszaki embert, a mérnököt látom, aki egy világosan megfogalmazott műszaki cél megvalósításához minden járható utat megkeres és kipróbál. Ez a cél pedig *Varga József* életében egy nyersanyagszegény ország vegyiparának megalapozása volt.”

A Wartha által alapított hazai kémiai technológiai iskola hagyományait, illetőleg szellemét a Budapesti Műszaki Egyetemen *Korach Mór*, *Vajta László*, *Szebényi Imre* és munkatársaik, illetőleg a Veszprémi Vegyipari Egyetemen *Varga József*, *Polinszky Károly* és munkatársaik kémiai technológiai munkássága örizte meg és fejlesztette tovább a folyamatosan megújuló követelményeknek megfelelően. A kémiai technológiák leíró módon történő vizsgálatát *Korach* műegyetemi, majd — megalakulása után — a Magyar Tudományos Akadémia által vezetett Műszaki Kémiai Kutató Intézetben folytatott munkássága során kialakult szintetikus módon történő tanulmányozása váltotta fel. Ez a szemléletmód vezetett el az általános kémiai technológia törvényszerűségeinek megállapításához. „Az általános kémiai technológiában kezdetben a vegyipari rendszerek fejlődési tendenciáit, fejlődési és egyéb törvényeit tanulmányoztuk. 1959-től kezdve kimutattuk, hogy legalább négy általános kémiai alaptörvény szerepel ebben a tudományágban: 1. a költségparaméter törvénye; 2. a nagyszámú változók törvénye; 3. a léptékhatás törvénye; 4. az automatizálás törvénye. A technológia fejlődésére mintegy tíz törvényszerűség, ill. „trend”, fejlődési irányzat jellemző:

1. a csökkenő költségparaméter, 2. a csökkenő energiafogyasztás, 3. a növekvő fajlagos térfogati

* Budapesti Műszaki Egyetem, Budapest

** MTA Műszaki Kémiai Kutató Intézet, Budapest — Veszprém

teljesítmény és a csökkenő fajlagos munkaerő-fogyasztás az időegységben, 4. a növekvő automatizálás, 5. az empirikus módszerek háttérbe szorítása a tudományos módszerekkel szemben, 6. a folyamatos munkamenet fejlődése, 7. az „építő-kocka” módszer kialakulása, 8. a minden új technológia előnyeivel járó új hátrányok jelentkezése, 9. a gyengébb minőségű és a ritka nyersanyagok, valamint a hulladékanyagok és hulladékenergiák növekvő fogyasztása, 10. a technológiai hatások aszimptotikus közeledését egy határértékhez kifejező törvény” [4].

A csökkenő költségparaméter törvényének az alumíniumiparban való érvényesülését vizsgálta *Pünkösti*, és a következőket állapította meg [5]: „*Korach* professzor kutatásainak ismeretében és alumíniumipari vizsgálataim alapján jó eredményekkel bíztat a technikai-gazdasági fejlődéstörvény alkalmazása a tervezési- és beruházási tanulmányoknál, döntéseknél.”

Az általános kémiai technológia megállapításainak, illetőleg az ahhoz vezető szemléletmód alkalmazása szolgál vezérfonalul *Vajta—Szebényi* Kémiai Technológiájához [6]. A *Korach* munkássága alapján kialakult tárgyak szerepét és súlyát a Budapesti Műszaki Egyetemen folyó vegyész-mérnök képzésben *Szebényi* mutatja be tanulmányában [7].

A kémiai technológiák folyamatának vizsgálata vezette el *Korachot* a technológiai rendszerek gráfelméleti vizsgálatához. E területen végzett munkásságának eredményeit foglalja össze poszthumusz műve, melyet *Haskóval* készített [8].

Mint láttuk, a kémiai technológia felhasználásával, csoportosításával sok kutató foglalkozott. Munkáik, bár a legkülönbözőbb szemléletet tükrözik, vagy csak a tudományágakat adják meg, vagy csak egy részterületet vizsgáltak.

A magyar kémiai technológiai iskola az elmúlt évtizedekben néhány új szempontot vetett fel, melyek — úgy gondoljuk — hozzájárultak a fejlődéshez.

A kémiai technológiát, műszaki kémiát — mint tudományt — tanulmányozhatjuk leíró, szintetikus, vagy analitikus jelleggel.

A leíró kémiai technológia — mely néhány viszonylatban is — a legkiműveltebb, a kidolgozott és meglevő kémiai technológiákat — mint tőlünk független rendszereket — leírja. Csoportosítási szempontjai is ilyenek: vagy nyersanyagok szerinti pl. olaj, szén stb. vagy végtermékek szerinti: pl. műtrágya, sav, műanyag stb.

A szintetikus műszaki kémia — melynek művelését *Korach M.* és munkatársai emelték tudományos rangra — a vegyipari folyamatokat és rendszereket egészükben tanulmányozza. Általános törvényeket vizsgál, a technológiák összehasonlításával foglalkozik. Az analitikus műszaki kémia — mellyel a továbbiakban részletesen foglalkozunk — a komplett folyamatok szisztematikus elemzését végzi.

Műszaki kémiai rendszerek analitikus vizsgálata

Mintegy tíz éve fogalmaztuk meg, hogy: „Az analitikus műszaki kémia komplett folyamatok elemzéséből indul ki, és szisztematikus, lépésről-lépésre bontja azokat részeire. Az így kialakuló csoportok nem kizáró jellegűek, hanem a különböző analízis szempontoknak felelnek meg. A műszaki kémia analitikus bontásának olyannak kell lennie, hogy

szisztematikus legyen;

figyelembe vegye a rendszerek sajátos belső törvényszerűségeit;

az egyes szintek jól elhatárolhatók legyenek;

az egyes csoportok elemeiből felépíthetők legyenek egyszerű kombinációval az összes üzemi technológiák;

a gyakorlatban használható legyen” [9].

Az előzőekben megfogalmazott követelményeket kielégítő — a műszaki kémiai rendszerek körében folytatott — kutatásaink alapján módszert dolgoztunk ki a műszaki kémiai optimalizálásra [10]. Az ilyen szemléletmóddal végzett kutatásaink vezettek el a műszaki kémiai rendszer- és szerkezetelmélet kidolgozásához [11]. Az elmúlt években a műszaki kémiai rendszerek vizsgálatában munkatársainkkal elért eredményeinket általánosítva a következő három elv fogalmazható meg:

1. A tulajdonságokkal jellemzett konkrét műszaki kémiai rendszerek bizonyos tulajdonságait elhagyva (*általánosítás*), majd adott szabályok szerint új tulajdonságokkal kiegészítve (*konkretizálás*) új konkrét rendszereket kaphatunk algoritmikusan. *Általánosítás—konkretizálás elve.*

2. Az összetett műszaki kémiai rendszerek alrendszerekre bontásával (*analízis*) és az alrendszerek adott szabályok szerinti összeépítésével (*szintézis*) algoritmikusan új összetett rendszereket kaphatunk. *Analízis—szintézis elve.*

3. Készíthető olyan számítógépes program, mely olyan kérdéseket tesz fel, hogy a technológus által adott válaszok alapján, a szükséges információkat szolgáltatja, és a válaszokat úgy általánosítja és rendezi, hogy új, eddig nem közölt információkra algoritmikusan tesz szert. *Számítógépes segítés elve.*

Az általánosítás—konkretizálás elve

Az elv megvalósítására az általunk kidolgozott szerkezetelmélet alkalmazása nyújt lehetőséget [12]. Lényege, hogy a rendszereket tulajdonságaikkal határozzuk meg, a tulajdonságokat ekvivalencia osztályokba soroljuk, és a tulajdonságok között tiltásokat adunk meg. Konkrét rendszer esetén bizonyos tulajdonságosztályok elemeit elhagyjuk, úgy általánosítunk. A konkretizálásnál a hiányzó tulajdonságosztályok elemei közül választunk új tulajdonságokat úgy, hogy a tiltásokat figyelembe vesszük. Az elv alkalmazása anyagáramok esetében azt jelenti, hogy konkrét anyagáramból (eltekintve az anyagi minőségtől) általánosított komponens rendszerhez, majd (eltekintve a komponensek halmazállapotától) általánosí-

tott fázis rendszert kapunk, melyből konkretizálás útján a kiindulástól eltérő anyagáramokhoz is jutunk. Műveletre történő alkalmazáskor a komponensektől, majd a fázisoktól eltekintve a konkrét művelettől általánosított művelet csoport megfogalmazásához juthatunk, melyből visszafelé haladva (konkretizálva) az eredetitől eltérő műveleteket is kapunk.

Az általánosítás—konkretizálás elve gyakorlati alkalmazásának legfontosabb előfeltétele általános modell kidolgozása volt. Ezt az MTA Műszaki Kémiai Kutató Intézetben *Virág* készítette el [13].

Az analízis—szintézis elve

Az összetett vegyipari rendszerek analitikus vizsgálata során tapasztaltuk, hogy ugyanazok a kémiai technológiai lépések több különböző technológiában is előfordulnak. Hasonlóképpen a különböző technológiai lépésekben ugyanazokat a műveleti célokat megvalósító alrendszerekkel — műveleti egységekkel, berendezésekkel — találkozhatunk.

Amikor fordított irányban járunk el és azt vizsgáljuk, hogy az egyes technológiák analízise során már megismert műveleti lépések kombinációjával milyen összetett rendszerek alakíthatók ki — azaz szintetizálunk — akkor egy-egy technológiai feladat megoldására számos megoldást, számos értelmes kombinációt kaphatunk. Ekkor kerül előtérbe a célszerű választás és optimalálás kérdése.

A rendszerelmélet és a szerkezetelméleti kezelésmód alkalmazása lehetővé teszi egyre növekvő ismereteinknek, mint építő elemeknek, olyan rendező és folyamatosan továbbfejleszthető elv szerinti csoportosítását, kódolását, amellyel algoritmikusan meghatározható — ismereteink mindenkori adott szintjén — egy konkrét technológiai feladat összes megvalósítási lehetősége, vagy műszaki-gazdasági megfontolások szerinti legjobb megoldása.

Az elv alkalmazásának két előfeltétele van: — hierarchia kialakítása; — a részrendszerek bizonyos tulajdonságainak függetlensége a többi részrendszertől.

A vizsgálatainknál kialakított hierarchiát már részletesen ismertettük [14]. A környezet független tulajdonságok adott esetben meghatározhatók.

Az analízis—szintézis elv megvalósítására speciális algebrai struktúrát [15] és számítógépes programot [16, 17] dolgoztunk ki.

Számítógépes segítés elve

Dialóg programot dolgoztunk ki [18], és alkalmaztuk az általánosítás-konkretizálásnál az új tulajdonságok, valamint az analízis—szintézisnél az új rendszert felépítő részrendszerek kiválasztására. A dialóg program további jelentős alkalmazása lehet a rendszer modellek megkeresése.

Már a hatvanas években elkezdték a nagy (100 vagy annál több műszaki kémiai műveleti egységet tartalmazó) rendszerek szimulációjára alkalmas programcsomagok kidolgozását [19, 20, 21, 22]. Ezeket a jelentős anyagi ráfordításokat igénylő

munkákat részben a számítástechnikai lehetőségek bővülése, részben a rohamosan fejlődő vegyipar igénye tette lehetővé és szükségessé. A fejlődést jelzi, hogy a 80-as években már Magyarországon is fogják oktatni a vegyészmérnököknek az ún. „számítógéppel segített tervezés” tantárgyát. Egyes reaktorok vagy folyamatok modellezése természetesen régebbi múltra tekint vissza. A kutatók a folyamatok fizikájába és kémiájába behatolva matematikai és számítástechnikai szempontból egyre bonyolultabb összefüggésekkel számolnak. A nagy rendszerek szimulációjánál viszont természetesen minél egyszerűbb bemenet-kimenet összefüggéseket alkalmaznak.

A fent említett nagy rendszereket szimuláló programcsomagokat műveleti egységek (berendezés), vagy annál összetettebb számítási modulok alkotják. Az előre elkészített modulokból felépített szimulációs rendszer csak annyiban veheti figyelembe az alkalmazó napi igényeit, amennyiben sikerül a feladatához legjobban illeszkedő modul kiválasztania. Ebben az esetben a felhasználó számára a modellalkotás folyamata többé-kevésbé mindig „fekete doboz”. Ugyanakkor figyelembe kell venni, hogy jelenleg Magyarországon az alkalmazó választási lehetőségei korlátozottak. Sőt, többnyire egyetlen olyan előre elkészített programcsomagot sem talál, melynek segítségével a számítási kívánt folyamatot szimulálhatná.

Felmerülhet a kérdés: nem lenne-e célszerű a kis és közepes rendszerek (4—8 készülék) szimulációjánál a modellek bonyolultságát tekintve valamely középutat választani? Érdemes lenne-e ezeknél a rendszereknél a készüléken belüli eloszlásfüggvényeket is számítani?

Indokoltnak tartottuk egy új elveken alapuló szimulációs rendszer felépítését, melyben az alapmodulok a műveleti egységeknél jóval kisebbek. Olyan rendszert kívántunk létrehozni, mely a vegyészmérnöktől nem kíván sem számítástechnikai ismereteket, sem elmélyült modellezési előtanulmányokat, mégis segítségével — a számítástechnika adta lehetőségeket felhasználva — ön-maga létrehozza a számítási kívánt műveleti egység(ek) modelljét.

Példák az elvek gyakorlatban történő alkalmazására

Analízis—szintézis elve

Az analízis—szintézis elvének alkalmazását folyadék—szilárd rendszerek szétválasztását megvalósító öt konkrét műveletsor vizsgálatának példáján mutatjuk be. A példákban közös, hogy a cél minden esetben a szilárd anyag száraz szemcse formájában való kinyerése. A folyadék, ill. segéd-folyadék visszanyerésének szükségességét környezetvédelmi, ill. gazdaságossági szempontok alapján esetenként kell eldönteni.

Az első műveletsor: oldatból a száraz szilárd anyag kinyerése szárazrapárlással és az oldószer visszanyerése kondenzációval. Jelöljük a további-

akban a feldolgozandó anyagáramokat „ a_i ”-vel, a szükséges segédanyagokat „ b_j ”-vel, a műveleteket „ l_k ”-val, az eredő változást „ l_m ”-el. E jelölésekkel a leírt műveletsort mátrix formában is reprezentálhatjuk. A mátrix elem „1” a műveleti egységbe belépő anyagáramra, „-1” a műveleti egységből kilépő anyagáramra, „0” az adott műveleti egységben nem szereplő anyagáramra. Az eredő változás mátrixának elemeit a műveletsor mátrixának adott sorában szereplő elemek algebrai összege adja. A műveletsor és eredőjének mátrixát az 1. ábrán mutatjuk be.

A második műveletsor: oldatból a száraz szilárd anyag kinyerése hűtéses kristályosítással, majd a szuszpenzió pasztáig történő töményítése, a paszta száraz szemcsével történő keverése és a nedves szemcse szárítása útján, ill. az oldószer visszanyerése a szárítás után abszorpciót követő rektifikálással. A műveletsor és az eredő változás mátrixát a 2. ábra mutatja. Itt és a következőkben a mátrix elemei nem teljes áramok esetében „1” ill. „-1”.

A harmadik műveletsor: oldatból a száraz szilárd szemcse kinyerése az oldott anyag extrakcióval történő átvitelével segédfolyadékba, majd abból történő hűtéses kristályosítása és a keletkezett szusz-

$$\begin{array}{c} l_1 \quad l_2 \\ \alpha_1 \quad \left[\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ -1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{array} \right] \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ b_1 \end{array} = \begin{array}{c} l_1' \\ \alpha_1 \quad \left[\begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{array} \right] \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ b_1 \end{array}$$

1. ábra. Az első műveletsor és eredő változás mátrixa

α_1 oldat; α_2 száraz szemcse; α_3 nedves gáz; α_4 oldószer; b_1 száraz gáz; l_1 szárazra párlás;

l_2 kondenzáció; l_1' első eredő változás

$$\begin{array}{c} l_3 \quad l_4 \quad \textcircled{5} \quad l_6 \quad l_7 \quad l_8 \\ \alpha_1 \quad \left[\begin{array}{cccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1^x & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1^x & 0 & 0 & 1^x & -1^x \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{array} \right] \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \\ \alpha_6 \\ \alpha_7 \\ \alpha_8 \\ b_1 \\ b_3 \end{array} = \begin{array}{c} l_2' \\ \alpha_1 \quad \left[\begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \\ \alpha_6 \\ \alpha_7 \\ \alpha_8 \\ b_1 \\ b_3 \end{array}$$

2. ábra. A második műveletsor és eredő mátrixa

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, b_1$ ugyanaz mint előbb; α_5 szuszpenzió; α_6 paszta; α_7 nedves szemcse; α_8 folyadékkeletg; b_3 abszorbens; l_3 hűtéses kristályosítás; l_4 szuszpenzió töményítése pasztáig; l_5 paszta keverése száraz szemcsével; l_6 szemcse szárítása;

l_7 abszorpció; l_8 rektifikálás; l_2' második eredő változás

penzió szárítása útján, ill. a segédfolyadék (extrahálószer) visszanyerése a szárítás után gőzei adszorpcióját követő deszorpciójával. A műveletsor és az eredő változás mátrixa a 3. ábrán látható. Itt és a következőkben minden olyan feldolgozandó anyagáramot, melyben az eredeti oldószer helyett segédfolyadék van, „ a_i ”-vel, az ezen végbemenő változást biztosító műveletet „ l_k ”-vel jelöljük.

A negyedik műveletsor: szuszpenzióból a száraz szemcsét nedves szemcséig történő töményítéssel, majd a nedves szemcse szárításával nyerjük ki. A műveletsor és az eredő változás mátrixát a 4. ábra mutatja.

A ötödik példa: a száraz szemcsét pasztából közvetlen szárítással állítjuk elő. A megfelelő mátrix az 5. ábrán látható. Az eddiek során a konkrét példákat analizáltuk. A szintézis első lépéseként az 1.—5. ábrákon mátrix formájában rögzített ismereteinket egy mátrixban foglaljuk össze, mely a 6. ábrán látható. Itt és a következőkben, csak a zérustól eltérő mátrix elemeket tüntetjük fel.

A következő lépésben az eddigieket újabb műveletekkel is bővíthetjük. Legyenek ezek az újabb műveletek az elpárologtatásos kristályosítás, a granulálás és a granuláló oldat készítés, melyek — a korábban ismertetetteknek megfelelően megadott — mátrixai a 7a, b, c ábrán láthatók.

A kibővített mátrix, melyben ezen újabb ismereteinket szintetizáltuk az előbbiekkkel, a 8. ábrán látható.

Általánosítás—konkretizálás elve

Az általánosítás—konkretizálás elvének alkalmazását az előzőekben részletezett példából kiindulva mutatjuk be. A konkrét példák analízise majd szintézise révén kapott, 6. ábrán bemutatott mátrixban szereplő ismereteinket általánosítsuk úgy, hogy tekintsük el a feldolgozandó folyadék „jelzőjétől”. Vagyis ne vegyük figyelembe sem az anyagáramnál, sem a műveletnél, hogy eredeti vagy segédfolyadék szerepel-e. Az „általá-

$$\begin{array}{c}
 \alpha_1 \\
 \alpha'_1 \\
 \alpha_2 \\
 \alpha'_3 \\
 \alpha_4 \\
 \alpha'_5 \\
 \alpha'_9 \\
 b_1 \\
 b_2 \\
 b_4
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 l_9 & l'_3 & l'_{10} & l'_4 & l'_{12} \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\
 -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\
 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\
 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & -1
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{array}{c}
 a_1 \\
 a'_1 \\
 a_2 \\
 a'_3 \\
 a_4 \\
 a'_5 \\
 a'_9 \\
 b_1 \\
 b_2 \\
 b_4
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 l'_3 \\
 1 \\
 0 \\
 -1 \\
 0 \\
 -1 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0
 \end{bmatrix}$$

3. ábra. A harmadik művelet sor és eredő változás mátrixa

a_1, a_2, a_4, b_1 ugyanaz mint előbb; a'_1 oldat segédfolyadékban; a_3 , segédfolyadékkal nedvesített gáz; a'_5 szuszpenzió segédfolyadékban; a'_9 segédfolyadékkal telített adszorbens; b_2 segédfolyadék (extrahálószer); b_4 adszorbens; l'_3 hűtési kristályosítás segédfolyadékból; l_9 extrakció; l'_{10} segéd folyadék szuszpenzió szárítása száraz szemcséig; l'_{11} segédfolyadék gözeinek adszorpciója; l'_{12} segédfolyadék vákuum deszorpciója; l'_3 harmadik eredő változás

nosított" anyagáramokat ill. műveleteket „ a_i ”-vel ill. „ l_k ”-vel jelölve, a 9. ábrán bemutatott „általánosított” mátrixhoz jutunk.

Ezen ismereteink konkretizálását úgy végezhajük el, hogy minden olyan anyagáramnál ill. műveletnél, melynél technológusi szemmel szóba-jöhet eredeti és segédfolyadék is az előző mátrix oszlopait és sorait megkettőzzük.

$$\begin{array}{c}
 a_2 \\
 a_3 \\
 a_4 \\
 a_5 \\
 a_7 \\
 b_1
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 l_{13} & l_6 \\
 0 & -1 \\
 0 & -1 \\
 -1^x & 0 \\
 1 & 0 \\
 -1 & 1 \\
 0 & 1
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{array}{c}
 a_2 \\
 a_3 \\
 a_4 \\
 a_5 \\
 a_7 \\
 b_1
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 l'_4 \\
 -1 \\
 -1 \\
 -1^x \\
 1 \\
 0 \\
 1
 \end{bmatrix}$$

4. ábra. A negyedik művelet sor és eredő változás mátrixa
 $a_2, a_3, a_4, a_5, a_7, b_1, l_6$ ugyanaz, mint előbb; l_{13} szuszpenzió töményítése nedves szemcséig; l'_4 negyedik eredő változás

$$\begin{array}{c}
 a_2 \\
 a_3 \\
 a_6 \\
 b_1
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 l_{14} \\
 -1 \\
 -1 \\
 1 \\
 1
 \end{bmatrix}$$

5. ábra. A paszta-szárítás mátrixa
 a_2, a_3, a_6, b_1 ugyanaz, mint előbb; l_{14} paszta közvetlen szárítása

Így a 10. ábrán bemutatott mátrixot kapjuk. E mátrix elemzésével 51 lehetséges konkrét utat gyűjthetünk kiaszilárd—folyadék rendszerek szétválasztására a kiindulásként vizsgált 5 helyett. Az új utak közül egy példaképpen, melynek mátrixát a 11. ábrán mutatjuk be, a következő. Oldatból a száraz szemcse előállítás segédfolyadékkal történő extrakciót követő szárazra párlással, majd a segédfolyadék visszanyerése kondenzációval.

$$\begin{array}{c}
 \alpha_1 \\
 \alpha'_1 \\
 \alpha_2 \\
 \alpha_3 \\
 \alpha'_3 \\
 \alpha_4 \\
 \alpha_5 \\
 \alpha'_5 \\
 \alpha_6 \\
 \alpha_7 \\
 \alpha_8 \\
 \alpha_9 \\
 b_1 \\
 b_2 \\
 b_3 \\
 b_4
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 l_1 & l_2 & l_3 & l'_3 & l_4 & l_5 & l_6 & l_7 & l_8 & l_9 & l'_{10} & l'_4 & l'_{12} & l_{13} & l_{14} \\
 1 & & 1 & & & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & 1 & & & & & & & -1 & & & & \\
 -1 & & & & & 1^x & -1 & & & & -1 & & & & -1 \\
 -1 & 1 & & & & & -1 & 1 & & & & & & & -1 \\
 & & & & & & & & & & -1 & 1 & & & \\
 & -1 & & & -1^x & & & & -1^x & -1 & & & & & -1^x \\
 & & -1 & & 1 & & & & & & & & & 1 & \\
 & & & -1 & & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & & -1 & 1 & & & & & & & & & 1 \\
 & & & & & -1 & 1 & & & & & & & -1 & \\
 & & & & & & & -1 & 1 & & & & & & \\
 & & & & & & & & & & & -1 & 1 & & \\
 1 & -1 & & & & & 1 & -1 & & & 1 & -1 & & & 1 \\
 & & & & & & & & & 1 & & & -1 & & \\
 & & & & & & & & 1 & -1 & & & & & \\
 & & & & & & & & & & & 1 & -1 & &
 \end{bmatrix}$$

6. ábra. A példák egyesített mátrixa

$a_1, a'_1, a_2, \dots, a_9$ feldolgozandó anyagáramok, mint előbb; b_1, \dots, b_4 segédanyagok, mint előbb; l_1, \dots, l_{14} műveletek, mint előbb

$$\begin{array}{ccc}
 & l_{15} & & l_{16} & & l_{17} \\
 a_1 & \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} & a_2 & \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} & b_2 & \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} \\
 b_1 & & a_{10} & & b_3 & \\
 a_5 & & a_{11} & & a_{10} & \\
 a_3 & & a_3' & & & \\
 & a) & & b) & & c)
 \end{array}$$

problémát oldja meg a vegyipari rendszerek vizsgálatára kidolgozott, matematikailag megalapozott szerkezetelmélet. A szerkezetelméleti kezelésmód részletes leírására az előzőekben ismertetett szemléltető példákon túl nem vállalkozunk. Lényege egészen röviden az, hogy a tulajdonságaival

7. ábra. Elpárologtatásos kristályosítás (a), granulálás (b) és granuláló oldat készítés (c) műveleteinek mátrixai

a_1, a_2, a_3, b_1, b_2 ugyanaz, mint előbb; a_1 granuláló oldat; a_{11} granulátum; b_3 szilárd granuláló adalék; l_{15} elpárologtatásos kristályosítás; l_{16} granulálás; l_{17} granuláló oldat készítés

	l_1	l_2	l_3	l_3'	l_4	l_5	l_6	l_7	l_8	l_9	l_{10}'	l_{11}'	l_{12}'	l_{13}	l_{14}	l_{15}	l_{16}	l_{17}
a_1	1		1							1								
a_1'				1						1								
a_2	-1					1 ^x	-1			-1					-1		1	
a_3	-1	1					-1	1								-1	-1	
a_3'										-1	1							-1
a_4		-1				-1 ^x		1 ^x	-1 ^x	-1					-1 ^x			
a_5			-1		1									1				
a_5'				-1						1								
a_6					-1	1										1		
a_7						-1	1							-1				
a_8								-1	1									
a_9											-1	1						
a_{10}																	1	-1
a_{11}																		-1
b_1	1	-1					1	-1		1	-1			1	1			
b_2										1				-1				1
b_3								1	-1									
b_4														1	-1			
b_5																		1

8. ábra. A példák újabb műveletekkel kiegészített egyesített mátrixai

a_1, \dots, a_{11} feldolgozandó anyagáramok, mint előbb; b_1, \dots, b_5 segédanyagok, mint előbb; l_1, \dots, l_{17} műveletek, mint előbb

Számítógépes segítség elve

A számítógépes segítség alkalmazását az teszi lehetővé, hogy az előzőekben bemutatott módszerek algoritmizálhatók.

Számítógépes programot dolgoztunk ki, amely tárolja az egyes műveleteknek megfelelő elemi mátrixokat, és ha elválasztási feladatot kap, ezekből generálja az összes lehetséges műveletsort. Lehetőség van párbeszédre is. Amikor több művelet következhet, a program kikérdezi, hogy a felhasználó melyiket választja; és ennek megfelelően építi tovább a műveletsort. Egyszerűbb esetben kis számítógépre (pl. ABC 80) is megadható dialóg program, egy ilyen szilárd-folyadék elválasztási példára vonatkozó program bloksémája látható a 12. ábrán.

Azonban a gyakorlatban — már a közepesnek tekinthető feladatok (kb. 100 műveleti egység) esetén is — olyan problémák merülnek fel, amelyek kis gépen és a rendszerelmélet eredményei nélkül nem oldhatók meg. Westerberg és Stepanopoulos [23] szerint a vizsgált téma szempontjából a rendszerelmélet eredményei nem kielégítőek. Ezt a

reprezentált anyagok halmazán értelmezett algebrai elképzelések reprezentálják a technológia lépéseit. A leképezések halmazán értelmezett algebrai műveletekkel bármely technológia megadható.

A szerkezetelméletre alapozva a technológiai rendszerek szintézisére számítógépes programot készítettünk [16]. A program az algebrai struktúra — számítógépes feldolgozásra kézenfekvő — Petri-gráfos megfelelőjét alkalmazza.

A módszer ún. integrált megközelítésű, és — a szerkezetelmélet általánossága folytán — teljes technológiai rendszerek vizsgálatát teszi lehetővé. Több, az irodalomból ismert probléma megoldását biztosítja, így az integrált struktúra meghatározása algoritmikusan történik. Nagy súlyt helyez a struktúrák vizsgálatára, az egyszerűsítési lehetőségek kihasználására és dekompozíciós lehetőséget biztosít [24], mellyel algoritmikusan bontja hierarchiaszintekre a struktúrát. A generált technológiai lehetőségek számának csökkentése érdekében alkalmazhatók olyan korlátozási feltételek, amelyeket az optimális megoldás tapasztalat szerint teljesít.

	l_1^+	l_2^+	l_3^+	l_4^+	l_5^+	l_6^+	l_7^+	l_8^+	l_9	l_{10}^+	l_{11}^+	l_{12}^+	l_{13}^+	l_{14}^+
a_1^+	1		1						± 1					
a_2^+	-1				1^x	-1				-1				-1
a_3^+	-1	1				-1	1			-1	1			-1
a_4^+		-1		-1^x				-1^x	-1					-1^x
a_5^+			-1	1						1			1	
a_6^+				-1	1									1
a_7^+					-1	1								-1
a_8^+							-1	1						
a_9^+											-1	1		
b_1	1	-1				1	-1			1	-1			1
b_2									1				-1	
b_3							1	-1						
b_4											1	-1		

9. ábra. A példák egyesített és általánosított mátrixa

a_1^+ oldat (oldószertől függetlenül); a_2^+ száraz szemese; a_3^+ nedves gáz (nedvesítő folyadéktól függetlenül); a_4^+ oldószer; a_5^+ szuszpenzió (folyadéktól függetlenül); a_6^+ paszta (folyadéktól függetlenül); a_7^+ nedves szemese (nedvesítő folyadéktól függetlenül); a_8^+ folyadékkelegy; a_9^+ feltett adszorbens; b_1, b_2, b_3, b_4 segédanyagok, mint előbb; l_1^+, \dots, l_{14}^+ műveletek, mint előbb, függetlenül,

hogy a feldolgozandó anyagáram folyadéka eredeti vagy segéd-e

	l_1	l_1'	l_2	l_2'	l_3	l_3'	l_4	l_4'	l_5	l_5'	l_6	l_6'	l_7	l_7'	l_8	l_8'	l_9	l_{10}	l_{10}'	l_{11}	l_{11}'	l_{12}	l_{12}'	l_{13}	l_{13}'	l_{14}	l_{14}'
a_1	1				1													1									
a_1'		1				1												-1									
a_2	-1	-1						1^x	1^x	-1	-1							-1	-1							-1	-1
a_3	-1		1							-1		1						-1		1						-1	
a_3'		-1		1							-1		1					-1		1						-1	
a_4			-1				-1^x							-1^x				-1				-1		-1^x			
a_5				1		1												1						1			
a_5'					-1		-1												1						1		
a_6						-1		1																		1	
a_6'							-1		1																		1
a_7								-1		1																	1
a_7'									-1		1																-1
a_8													-1		1												
a_8'														-1		1											
a_9																					-1		1				
a_9'																						-1		1			
b_1	1	1	-1	-1						1	1	-1	-1					1	1	-1	-1					1	1
b_2				-1			-1^x								-1^x	1							-1		-1		
b_3													1	1	-1	-1											
b_4																								1	1	-1	-1

10. ábra. Az általános mátrix konkretizált változata

a_1, \dots, a_9 eredeti folyadékot tartalmazó feldolgozandó anyagáramok, mint előbb; a_1', \dots, a_9' segédanyagot tartalmazó feldolgozandó anyagáramok, mint előbb; b_1, \dots, b_4 segédanyagok, mint előbb; l_1, \dots, l_{14} eredeti folyadékot tartalmazó anyagáramokat feldolgozó műveletek, mint előbb; l_1', \dots, l_{14}' segédanyagot tartalmazó anyagáramokat feldolgozó műveletek, mint előbb

Elkészült a módszer olyan változata, amely maga is hierarchikus [17] és fokozatos közelítéssel határozza meg az additív célfüggvénnyel jellemzett rendszerek optimális megoldását. A feladatok kényelmes megadása érdekében egy nyelvet definiáltunk, melynek fordítóprogramja is elkészült.

A programmal vizsgáltunk a hármasműtrágya gyártást.

A megoldások száma korlátozási feltételek nélkül 735 (ennek generálása ESZ—1022-es gépen 2 perc), korlátozási feltételek alkalmazásával csak 5 megoldást kell feldolgozni. A feldolgozásra eljárást dolgoztunk ki [25].

A módszer szemléltetésére egyszerű példát, az ecetsavgyártást mutatjuk be.

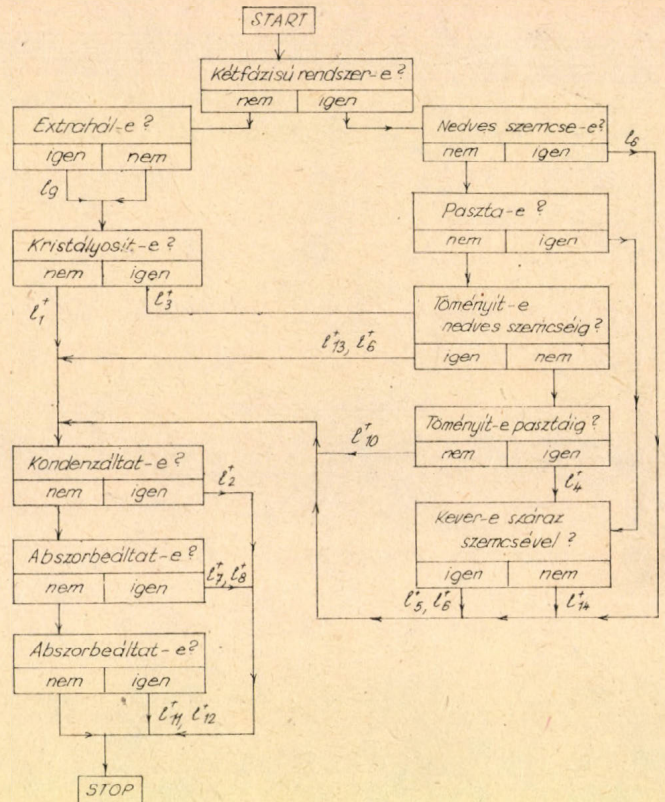
A példa több szempontból is speciális: nem tar-

	l_9	l'_1	l'_2
a_1	1	0	0
a'_1	-1	1	0
a_2	0	-1	0
a'_3	0	-1	1
a_4	-1	0	0
b_1	0	1	-1
b_2	1	0	-1

11. ábra. A konkrétizált mátrixból származtatott új műveletsor mátrixa

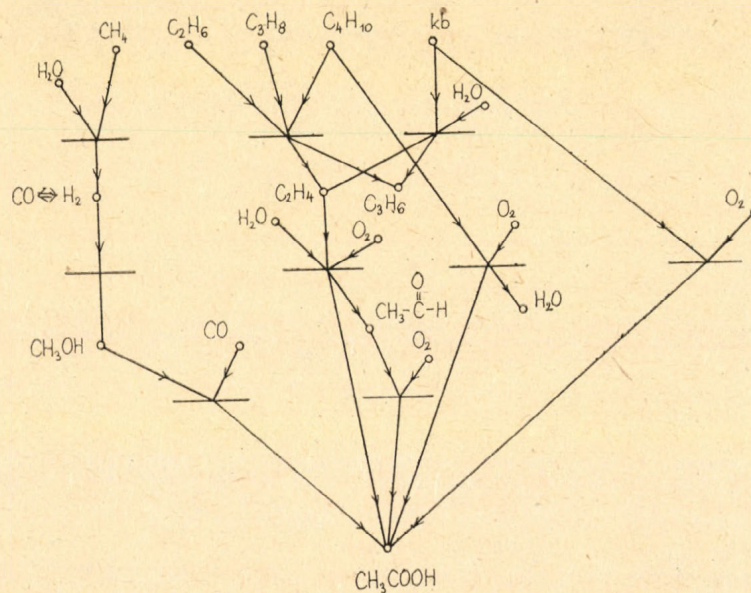
a_1 oldat eredeti folyadékkal; a'_1 oldat segédfolyadékkal; a_2 száraz szemese; a'_3 segédfolyadékkal nedvesített gáz; a_4 eredeti oldószer; b_1 szárító gáz; b_2 segédfolyadék; l'_1 segédfolyadékot szárazra párlása; l'_2 segédfolyadék gőzeinek kondenzáltatása; l_9 extrakció

talmaz recirkulációt; az anyagokat egyetlen tulajdonsággal reprezentáljuk; az áttekinthetőség érdekében a technológiai lépések egyszerűsítettek, és így eltekintünk az optimális megoldás meghatározásától is.



12. ábra. A szilárd-folyadék szétválasztó rendszereket felépítő dialóg program blokkismája

l_1^+, \dots, l_{14}^+ műveletek, mint előbb



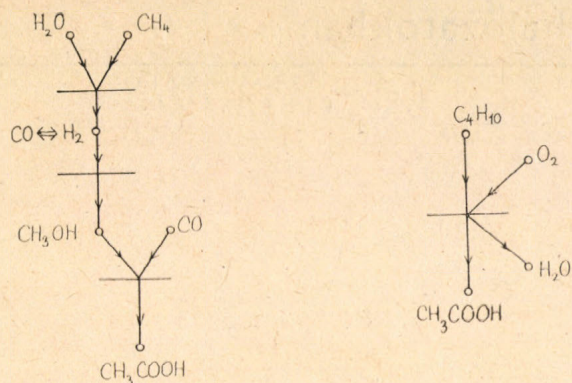
13. ábra. Az ecetsav előállítás lehetőségeinek maximális gráfja

A program az előállítandó végtermék, valamint a felhasználható leképezések ismeretében generálja az integrált struktúrát, az ún. maximális gráfot, melyet példánkra a 13. ábrán mutatunk be.

A maximális gráfon végzett műveletek után generálja a korlátozási feltételeket kielégítő megoldásokat, vagy az optimális megoldást. A 13.

ábrán látható gráfhoz összesen 79 megoldás tartozik, melyek közül három lehetőség látható a 14. ábrán.

A módszer az integrált megközelítésből adódóan lehetőséget biztosít kérdés-felet program automatikus meghatározására is, amely interaktív futtatás esetén közvetlenül használható.



14. ábra. Az ecetsav előállítás három lehetséges útjának grájja

Az előbbieken bemutattuk a három új technológiai elv alkalmazhatóságát különböző területeken. Úgy gondoljuk, hogy a példák viszonylag általános volta gondolatébresztő lehet a technológia más területén is.

A kézirat beérkezett: 1982. márc. 3.

IRODALOM

- [1] Wartha V.: A tudomány viszonya a gyakorlathoz. Természettudományi Közönlöny, 28, 561 (1896).
- [2] Móra L.: Wartha Vince a hazai kémiai technológia megalapítója. Budapest, Tankönyvkiadó, 1967.
- [3] Móra L.: Varga József élete és munkássága. Budapest, Budapesti Műszaki Egyetem Központi Könyvtára, Műszaki Tudománytörténeti Kiadványok, 18. szám, 1969. 73. o.
- [4] Korach M.: A műszaki kémia alap és fejlődés törvényei. In.: Magyar Tudományos Akadémia Műszaki Kémiai Kutató Intézet Jubileumi Tudományos Ülésszak, Veszprém, 1970. május 6—7. Budapest, Műszaki Könyvkiadó gondozásában, 1972. 16—28. o.
- [5] Pünkösti Á.: A Korach-törvény alkalmazása az alumíniumiparban. Műszaki doktori disszertáció, Veszprémi Vegyipari Egyetem, Veszprém, 1966.
- [6] Vajta K.—Szebényi I.: Kémiai technológia. Budapest, Tankönyvkiadó, 1969.
- [7] Szebényi I.: Vegyész-mérnök-képzés és technológia-oktatás a Budapesti Műszaki Egyetemen. Magyar Kémikusok Lapja 36, 126 (1981).
- [8] Korach M.—Haskó L.: Kémiai technológiai rendszerek gráfelméleti vizsgálata. Budapest, Akadémiai Kiadó, 1975.
- [9] Blickle T.: Néhány gondolat a műszaki kémia analitikai szemléletű vizsgálatáról. In.: Magyar Tudományos Akadémia Műszaki Kémiai Kutató Intézet Jubileumi Tudományos Ülésszak, Veszprém 1970. május 6—7. Budapest, Műszaki Könyvkiadó gondozásában, 1972. 147—156. o.
- [10] Polinszky K.—Blickle T.: Műszaki kémiai optimalás Budapest, Tankönyvkiadó 1973.

- [11] Blickle T.—Seitz K.: A modern algebrai módszerek felhasználása a műszaki kémiában. Budapest, Műszaki Könyvkiadó 1975.
- [12] Blickle T.—Nagy E.: Vegyipari műveleti rendszerek matematikai modellezése a szerkezetelmélet felhasználásával. Magyar Kémikusok Lapja 34, 57 (1979).
- [13] Virág T.: Áramlástanilag lineáris vegyipari rendszerek matematikai modelljeinek egységes kezelése. Kandidátusi értekezés, Budapest, 1979.
- [14] Blickle T.: A rendszerelmélet alkalmazási lehetőségei a kémiai technológia oktatásában, Magyar Kémikusok Lapja 36, 255 (1981).
- [15] Blickle T.—Seitz K.: A modern algebrai módszerek felhasználása a műszaki kémiában. Budapest, Könyvkiadó, 1975. 12—16. o.
- [16] Friedler F.—Blickle T.—Gyenis J.—Tarján K.: Computerized Generation of Technological Structures. Computer and Chemical Engineering 3, 241 (1979).
- [17] Friedler F.—Blickle T.—Tarján K.: Design of the Structure of Chemical Technological Systems by a Hierarchie Method. In.: Computerized Control and Operation of Chemical Plants, Proceeding-14th European Symposium Vienna, September 1981. Vienna, Verein Österreichischer Chemiker 1981. 101—108. o.
- [18] Halász G.—Csapó Z.: Hő- és anyagátadási folyamatok kérdés-felelet rendszerrel segített szimulációja. In.: A rendszerelmélet alkalmazásai. Struktúra-modellek. Sopron, Neumann János Számítógéptudományi Társaság, Műszaki és Természettudományi Egyesületek Szövetsége, 1979. 76—90. o.
- [19] General Simulation System (360 OS and Do 5 Revision 2 Users Manual. No. SH 20-06940 New York, IBM Corporation, White Plains 1969.
- [20] Benedek P. et al.: Bonyolult műveleti egységek matematikai szimulációja. A kémia újabb eredményei, 15. kötet Budapest, Akadémiai Kiadó, 1973.
- [21] Seader J. D.,—Sieder, W. D.—Pauls, A. C.: FLOWTRAN Simulation — An Introduction CACHE Committee, Ulrich's Bookstore, Ann Arbor, Mich. 1974.
- [22] Rosen, E. M.—Pauls, A. C.: Computer-Aided Chemical Process Design: The FLOWTRAN System. Computer and Chemical Engineering 1, 1 (1977).
- [23] Westerberg, A. W.—Stepanopoulos, G.: Studies in Process Synthesis Chemical Engineering Sciences 30, 963 (1975).
- [24] Tarján K.—Blickle T.—Friedler F.: Computerized Method for Decomposition of the Structure-Synthesis of Technological System. In.: Computerized Control and Operation of Chemical Plants, Proceeding-14th European Symposium Vienna, September 1981. Vienna, Verein Österreichischer Chemiker 1981. 109—116. o.
- [25] Tarján K.—Gyenis J.—Friedler F.: Összetett vegyipari rendszerek műveleti egységei számítási sorrendjének meghatározása. Magyar Kémikusok Lapja, 35, 490 (1980).

РЕЗЮМЕ

На основе результатов, полученных авторами с своими сотрудниками при аналитическом исследовании химико-технологических систем, было определено три принципа, применение которых является новым способом обработки для исследования этих систем. В данной работе излагается сущность этих принципов (обобщение-конкретизация, анализ-синтез, применение ЭВМ) и представляется возможность их применения

SUMMARY

The systems of chemical technologies were analysed and based on the results determined by the authors and their co-workers, three principles were created. Using these principles a new method of handling was discovered for the examination of the systems. In this work the essence of the principles (computer aided generalization — concretisation; analysis-synthesis) is discussed and the application fields of the principles are shown.