

Vegyésmérnöki tudomány szerepe a fenntartható fejlődésben

I. rész. Energia-, anyag takarékos technológiai folyamatok tervezése

INCZÉDY János

Pannon Egyetem, 8201 Veszprém, Pf. 158

A hazánkban úttörő munkát végzett, fiatalon elhunyt,
Fonyó Zsolt emlékének tiszteletére

A vegyésmérnöki tudomány a *kémiai folyamatok tudománya*¹. Kialakulásának kezdeti szakaszában, elsősorban a mesterséges úton létrehozott, rendszerekben, laboratóriumokban, üzemekben lejátszódó kémiai folyamatok tervezése és megvalósítása volt a feladata, de napjainkban már —egyre fokozódó mértékben—magában foglalja a bennünket körülvevő természetes élettelen és élő világrendkívül bonyolult (komplex) rendszereiben lejátszódó kémiai folyamatok megismerését, leírását, modellezését (azonosítását), a folyamatoknak beavatkozással történő irányítását, szabályozását, ellenőrzését, és tervezését is.

I. Kémiai technológiai folyamatok tervezése.²

Kémiai technológiai folyamatok tervezésére nemcsak a kémiai termékeket (nagy tömegben gyártott kémiai alapanyagokat, kismennyiségben előállított finomkémiai termékeket, hatóanyagokat, stb.) gyártó *vegyiparban*, de az élelmiszereket, italokat gyártó *élelmiszeriparban*, és a különböző funkciós tulajdonságokkal rendelkező anyagokat (mikroelektronikai eszközöket, fényvezetőszállakat, kémiai érzékelőket, rugókat, mágneseket, hőálló szerkezeti anyagokat, stb.) előállító *anyag-iparban* is.

Kémiai technológiai folyamatok során az alapvető feladat az, hogy bizonyos alap-, ill. nyersanyagokból meghatározott kémiai összetételű és/vagy szerkezetű terméket állítunk elő. A megvalósítás több, egymást követő, műveleti lépésben történik. A műveletek: kémiai reakció, elválasztás, keverés, hűtés, fűtés, nyomásváltoztatás, aprítás, vagy szemcseméret-növelés, stb. A műveletek sorrendjének van egy uralkodó hierarchiája, ami azonban szükség szerint változtatható. A hierarchikus sorrend a következő: reaktor, elválasztás és recirkulációs rendszer, hőhasznosító hőcserélő rendszer, víz-, oldószer, hulladék kezelés, feldolgozás. A tervezés az előállításához (szintézishez) szükséges műveletek kijelölésével, a megvalósításhoz szükséges módszerek, készülékek vagy eszközök megválasztásával, majd azok összekapcsolásával, a technológiai folyamathálózat elkészítésével kezdődik. A hálózat ismeretében a teljes folyamat-rendszer szimulációját leíró, matematikai modell elkészítése következik. Ehhez természetesen szükségesek valamennyi műveleti lépéshez, részfolyamathoz tartozó, áramlási sebesség-, összetétel-, hőmérséklet-, nyomás-, stb. változásoknak az adatai is. A modell segítségével tervezhető, a műveletekhez szükséges készülékek típusa, mérete, kapacitása, a szükséges alap-, vagy nyersanyagok mennyisége, az energiafogyasztás nagysága, a termék mennyisége stb. és végül, becsülhetők a tervezett rendszer működésének jóságát (hatékonyságát) jellemző mérőszámok is. A működés hagyományos, nagyon fontos, de nem egyetlen jósági kritériuma a *gazdaságosság*.

Fontos elengedhetetlen további feltétel a *biztonság*, a dolgozók egészségvédelme is. Ha a tervezett rendszerrel több, hasonló termék előállítása, vagy más esetben, többféle nyersanyag felhasználhatósága is követelmény, úgy a rendszer *jó flexibilitása* is lényeges. Legújabbán pedig, a *fenntartható fejlődés megvalósítása* érdekében az *ökológiai követelmények betartása*: az anyagtakarékosság, a környezet (levegő, víz, termőföld, vegetáció stb.) szennyezésének minimálisra történő csökkentése, sőt kizárása is, a folyamattervezés fontos kritériumává vált.

Figyelembevéve a felsorolt, döntő fontosságú szempontokat, a korszerű kémiai technológiai hálózatok tervezésében kiemelten fontos szerepet kap az integráció, vagyis a hőenergia, a nyersanyag, adalékanyag, hulladék stb. integrált hasznosítása. Eszerint a technológiai hálózatban a készterméket biztosító, szintézis lánc főcsapása mellett, helyett kell kapjanak, az integrálást lehetővé tevő, hőcserélőt, anyagcserélőt, elválasztó elemet, segédreaktort, stb. tartalmazó, recirkulációs hálózati körök is.

A legjobb hatékonysági jellemző értékek elérése és meghatározása céljából, végül, a tervezett folyamat rendszer működését, először alternatív belső szerkezeti változtatásokkal (különböző konfiguráció, kapcsolási sorrend, vagy más elválasztási módszer, segédanyag, eljárás, újabb recirkuláció beiktatása, stb.) elvégzett, összehasonlító számítások útján, (hálózati szerkezet optimalálás), majd azt követően, a különböző működési feltételek között elvégzett, összehasonlító számítások segítségével (paraméter optimalálás), optimalálni kell.

Nem említettük eddig, hogy a kémiai technológiai rendszerek napjainkban is két nagy csoportra oszthatók: 2 lehetnek folyamatos (pl. csőreaktorral működő) vagy szakaszos (pl. keverő üst reaktorral működő) üzeműek. A tervezés során természetesen a különböző reaktor típusok működési adatait, az időben lejátszódó kémiai folyamatok változásait, figyelembe kell venni, De a teljes rendszert magábanfoglaló tervezéshez, optimaláláshoz szükséges számítások során,— tekintettel arra, hogy a szakaszos reaktort tartalmazó folyamat lánc is rendszerint ciklikus (félfolyamatos) működésű, és a folyamatos reaktort tartalmazó folyamatlánc pedig rendszerint tartalmaz ciklikus működésű elemeket is,—a különbséget gyakorlatilag nem kell figyelembe venni.

Mint feljebb láttuk, az optimalálás, elsősorban *szerkezeti optimalálás*, mikoris különböző belső konfigurációjú, és különböző alternatív módszert alkalmazó műveleteket tartalmazó folyamathálózatok működésének jóságát és hatékonyságát kell összehasonlítani, a lehetséges kombinációk rendkívüli nagy száma miatt, szinte

megvalósíthatatlannak tűnő, számítás igényel, még akkor is, ha valamennyi változat műveleti elemeinek működési paramétereit (kapacitás, sebesség, idő, stb.) jól, és nagyon pontosan ismerjük, és az alkalmazott optimálási algoritmus különlegesen nagy teljesítményű. A legújabb, elsősorban statisztikus matematikai és alapvetően termodinamikai kutatások eredményeképpen azonban a folyamat-tervezés teljes optimálása véges idő alatt elvégezhető, ha nem (hagyományos módon) egyetlen, alaposan átgondolt és szakértők szerint is hatékony működésű, nem kibővíthető szerkezetű, rendszer tervet, hanem u.n. „szuperszerkezetű hálózat tervet” készítünk, melyben minden számbajöhető művelet típus, minden kapcsolati lehetőség, stb. benne van, és a hálózat, a számítások eredménye révén, optimális méretre kibővíthető. Az optimálására azonban ilyen esetben, egy olyan különleges algoritmus szükséges, mely a betáplált, nagyszámú működési paraméterek birtokában, a célfüggvény (pl. költség, szennyező kibocsátás, stb.) minimalizálását úgy végzi, hogy mindazokat az elemeket, melyek a cél szempontjából nem relevánsak, kitörli, és így egy kevésbé komplex szerkezethez jutunk. A számítás során, egyúttal a működési feltételek, a készülék méretek optimálása is megtörténik.

Az optimális folyamatrendszer tervének elkészítéséhez szorosan hozzátartozik a *folyamatellenőrzés* tervének elkészítése, és megvalósítása is. Enélkül ugyanis nemcsak a tervezés jósága nem igazolható, de a gyártásfolyamat irányítása, szabályozása sem valósítható meg. Az irányításhoz, szabályozáshoz szükséges mérési adatok folyamatos biztosítása a folyamatrendszer megfelelő pontjain elhelyezett mérőműszerek segítségével történik. Ezeknek egy része a közvetlenül mérhető (hőmérséklet, nyomás, áramlási sebesség, sűrűség, összetétel, pH, stb.) tulajdonságának mérőszámát adja meg, míg más része a termék minőségének megítélése, vagy a környezetet károsító hulladék kibocsátása szempontjából legfontosabb, de közvetlenül nem mérhető tulajdonságokat. Utóbbiak esetén van nagy szerepe a *kemometriás* módszereknek, mikoris a mérőszámot, több mérhető változó adatából, alakfelismerő algoritmus segítségével számítjuk ki. Az *ellenőrző rendszer* jó működése és minőségi teljesítménye az egész technológiai rendszer jó és megbízható működésének alapfeltétele.³

II. Energia takarékos kémiai technológiai folyamat rendszerek tervezése

Hőcserélő hálózat tervezése (hőintegrálás)

„hőmérséklet intervallum” módszer.⁴

Kémiai technológiai műveletekben a hőmérsékletnek fontos szerepe van. Ezért hálózati terv készítése során a hulladék hő hasznosítása, a hőforgalom ésszerű tervezése. (fűtés, hűtés, hőcsere integrációja) jelentős gazdasági haszonnal jár. Az elérhető maximális hőenergia hasznosítás kiszámítása, mely a hőcserélő alrendszerek (kaszádok) sorrendjétől is függ, a termodinamika törvényeinek felhasználásával valósítható meg. Az I. törvény lehetővé teszi a hőcserélőn áthaladó áramok energiatartalom-változásának kiszámítását, a II. törvény pedig megszabja az áramlás irányát. A forró

víz nem hűthető a hűtővíz hőmérséklete alá. Optimum esetén a felhasznált gőz, víz és üzemeltetési költség összege minimális.

Az integrálás nemcsak energia, fűtőanyag-, víz megtakarítást jelent, de a CO₂ kibocsátást is csökkenti. A fűtés rendszerint gőzzel a hűtés hideg vízzel történik. A rendelkezésre álló, fűtésre vagy hűtésre felhasználható, belső szolgáltató hőáramok hőmérsékletének jelölése: T_{sz} , a cél hőmérsékleté pedig: $T_{cél}$. Ha $T_{sz} > T_{cél}$, úgy forró, ha $T_{sz} < T_{cél}$ úgy hideg áramról beszélünk. Hőátadás esetén, a hőmérséklet megközelítés értéke: a legkisebb alkalmazható hőmérsékletkülönbség: ΔT_{min} .

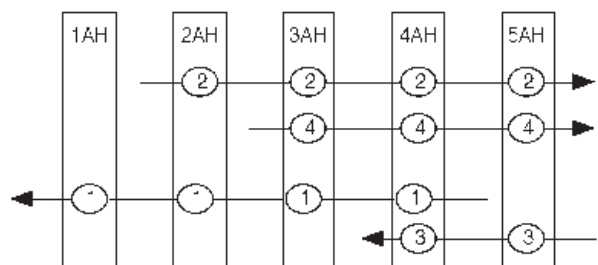
Számítás céljából a z számú, ismert hőmérsékletű és tömeg sebességű, ismert állandó hőkapacitású áramokból, hálózati alrendszereket állítunk össze valamennyi olyan áramból, melynek hőmérséklete a kérdéses hőmérséklet tartományon belül van. Az áramokat a csökkenő hőmérséklet sorrendjében (T_1, T_2, \dots) állítjuk sorba azután, hogy a forró áramokból ΔT_{min} értékét levontuk. Így n számú alrendszerhez (alhálóhoz) jutunk.

$$n \leq 2z - 1 \quad (1)$$

I. Táblázat Hőáramok és adataik⁴

áram és típusa	hőkapacitás áramsebesség kW / C °	$T_{betáp}$ C °	$T_{cél}$ C °	hőmennyiség $c_p(T_{betáp}-T_{cél})$ kW
(1) hideg	3.0	60	180	- 360
(2) forró	2.0	180	40	280
(3) hideg	2.6	30	105	- 195
(4) forró	4.0	150	40	140
				$\Sigma = 165$

Ha összesen 4 hőáramunk van és azok jellemzői az I. táblázatban látható értékek, úgy 5 alháló állítható össze, melyeket sorrendben, 1AH, 2AH, stb. -vel jelölünk. Az alhálók sorrendbe állítása egyszerű: az 1AH-ban csak egyetlen, hideg áram, (1), van, mely üzemeltetésre szorul. A 2AH-ban van egy forró (2) és egy hideg (1) áram. Itt üzemeltetésre ugyancsak lesz szükség, mert a hideg áram a nagyobb hőkapacitás sebességű, fennmaradó részét el kell látni hővel. A fűtést, természetesen a hőcserélő forró oldalán kell végezni. A 3AH-ba két forró (2), (4) és egy hideg (1), a 4AH-ba két forró (2), (4) és két hideg (1), (3), végül az 5AH-ba két forró (2),(4) és egy hideg áram (3) jut. Lásd az 1. ábrát.



1. Ábra. Hőcserélő hálózat összeállítása alhálózatokból.⁴

Itt jegyezzük meg, hogy abban az esetben, ha bonyolultabb rendszerről van szó, vagyis a hőáramok száma 20 fölött van, következőképpen járunk el: A forró és hideg áramokat csökkenő kapacitássebesség szerint állítjuk sorba. Ezután kijelöljük rendre az első forró és első hideg áram, majd a második forró és második hideg áram találkozását, és folytatjuk a sort mindaddig, amíg a visszamaradó áramok mind forrók, vagy mind hidegek. Ezután utóbbiak közül, a legnagyobb maradék áramot oda csatoljuk, ahol az első csatolás után a legnagyobb hiány mutatkozott. A sort folytatjuk, mindaddig, amíg készlet és igény van. Ha már hasznosítható, szolgáltató áram nincs, úgy a megfelelő üzemi áramot csatoljuk az illető hőcserélőre.

Az egyes alhálók nettó hőigényének kiszámítása a (2) entalpia mérlegegyenlet megoldásával történik:

$$D_K = I_K - O_K = (T_K - T_{K+1})(\Sigma C_{p(hid)} - \Sigma C_{p(forr)}) \quad (2)$$

D_K (deficit) a különbség, a bemenő áram által szolgáltatott I_K hőmennyiség és az O_K kimenő hőmennyiség között (vagyis a hűtés során elvitt, vagy fűtés során bevitt hőmennyiség) a k -adik alhálóban. C_p a hőkapacitás sebesség (kW / C°). Lásd: II. táblázat 1. oszlop. A 2. és 3. oszlop értékeinek kiszámítása rendre a (3) és (4) egyenlet segítségével történik, és feltételezzük, hogy $I_1 = 0$.

$$I_{K+1} = O_K \quad (3)$$

$$O_{K+1} = O_K - D_{K+1} \quad (4)$$

A II. táblázat 4. és 5. oszlopa adatainak kiszámítása úgy történik, hogy a 3. oszlop legnegatívabb bemenő értékét hozzáadjuk a 2. és 3. oszlop valamennyi bemenő értékéhez. Ha nincs a 3. oszlopban negatív bemenő érték, úgy a 4. és 5. oszlop értékei megegyeznek a 2. és 3. oszlop értékeivel.

A II. táblázat 4. és 5. oszlopa adatainak kiszámítása úgy történik, hogy a 3. oszlop legnegatívabb bemenő értékét hozzáadjuk a 2. és 3. oszlop valamennyi bemenő értékéhez. Ha nincs a 3. oszlopban negatív bemenő érték, úgy a 4. és 5. oszlop értékei megegyeznek a 2. és 3. oszlop értékeivel.

II. Táblázat Hőintegrálás feladat megoldásának részeredményei

		O s z l o p o k :					1	2	3	4	5
AH	forró áram		hideg áram			deficit	összesített		megengedhető		
	(2)	(4)	hőmérséklet C°	(1)	(3)		bemenet kW	kimenet kW	bemenet kW	legnagyobb kimenet kW	
1AH			180	170		+ 30	0	- 30	+ 60	+ 30	
2AH			150	140		+ 30	- 30	- 60	+ 30	0	
3AH			115	105		- 105	- 60	+ 45	0	+ 105	
4AH			70	60		- 18	+ 45	+ 63	+ 105	+ 123	
5AH			40	30		- 102	+ 63	+ 165	+ 125	+ 225	

A II. táblázat számozott oszlopainak adatai megadják a teljes folyamatrendszer fűtő- és hűtőáram mennyiségének szükségletét, abban az esetben, ha a megkívánt, maximális energia hasznosítás (visszanyerés) érvényesül. (Lásd 3. oszlop legelső érték). Megadják az alhálók megengedett legnagyobb, üzemi forrásból származó, fűtő- és hűtő áram mennyiségének értékét, melyeket— figyelembe véve a teljes rendszer optimális energiahasznosításának feltételét— túllépni nem szabad.

A II. táblázat oszlop adatai közül a 3, 4, és 5 oszlopban lévő, három bekeretezett adat a legfontosabb, ugyanis ezek adják meg a teljes rendszer optimális működésének számított értékeit. A 3. oszlop legelső értéke adja meg a teljes rendszer *netto hűtés igényét*, figyelembevéve a teljes entalpiamérleget. Lásd az I. táblázatot. A 4. oszlop legfelső értéke adja meg az *üzemi forrásból igénybeveendő, minimális hőigényt*. Az 5. oszlop legelső értéke pedig a megfelelő *hűtés igényt*.

Bonyolult, nagy rendszerek tervezése során a számítási eredmények pontossága fokozható, ha figyelembe vesszük a ΔT_{min} értékek szerkezetétől, anyagtól, stb. függő változását, a fajhőnek hőmérséklettől függő változását, és a nem linearitást. A tervezett rendszer teljesítménye bizonyos esetekben fokozható egyes áramok megosztásával, vagy ciklusok képzésével.

Pinch analízis, (grafikus módszer)

maximális hőenergia hasznosítás tervezése céljából

Az előző alfejezetben ismertetett, Linhoff és Flower⁴ által kidolgozott, u.n. *hőmérséklet-intervallum* módszer a hagyományos művelettervezés gondolatmenetét követve, a hőcserélők típusának és számának ismeretében, olyan *feladat megoldó algoritmust* (Problem Table Algorithm, PTA) ajánl, melynek segítségével a legésszerűbb és legtakarékosabb hőgazdálkodást biztosító hálózat megtervezhető. Ezzel szemben a japán Itoh, Shiroko és Umeda⁵ által kidolgozott eljárás, a *Pinch analízis*, legelső teendőként, az áramok adatainak ismeretében, az elméletileg elérhető maximális energiafelhasználásnak grafikus úton történő meghatározását végzi el. Ezek után tér rá a hőcserélő rendszerek megválasztására, az optimális üzemeltetési

paraméterek megválasztására, a hálózat megtervezésére. A módszer nevében szerepelő analízis szó arra is utal, hogy a grafikus eljárás működő hőcserélő rendszerek vizsgálatára, és annak eredménye alapján, teljesítménynövelést biztosító változtatások tervezésére is alkalmazható.

A teljes, illetve az általunk kiválasztott és vizsgálni kívánt, hőcserélő-hőáram rendszer teljes termodinamikai mérlegét tükröző, *egyesített kompozitgörbe* diagram elkészítése a következő: Első lépésben a rendszer valamennyi hőáramának adatait (T_s , $T_{cél}$, hőkapacitás sebesség) gyűjtjük össze. Az áramokat három csoportra bontjuk. Az első két csoportban vannak, egymástól elválasztva, a forró és hideg áramok, melyeknek gazdaságos hasznosítása fontos. A harmadik csoportba soroljuk a külső, üzem által előállított, fűtő, hűtő áramokat, melyeket indításra, pótlásra, stb. használhatunk fel. Ezután a teljes rendszer működése során szereplő legalacsonyabb és legmagasabb hőmérséklet értékeket határozzuk meg.

A grafikus szerkesztést az első két csoport kompozit görbéjének elkészítésével kezdjük. Célszerű elsőként a hideg áramok kompozitgörbéjét elkészíteni. Az áramokat T_s növekedő sorrendje szerint rendezzük, mégpedig a feljebb megállapított legalacsonyabb hőmérsékletnél kezdve. A hűtésre szolgáló hideg áramok, hőmérsékletük emelkedése során hőenergiát vesznek fel a hőcserélőben. A felvett hőenergia mennyisége a hőmérsékletváltozásnak k -adik, $T_{ka} - T_{kf}$ szakaszán, abban az esetben, ha a hőmérséklet szakaszon párhuzamosan n számú, különböző hőkapacitás sebességű, hideg áram megy át, az alábbi egyenlet segítségével számítható ki:

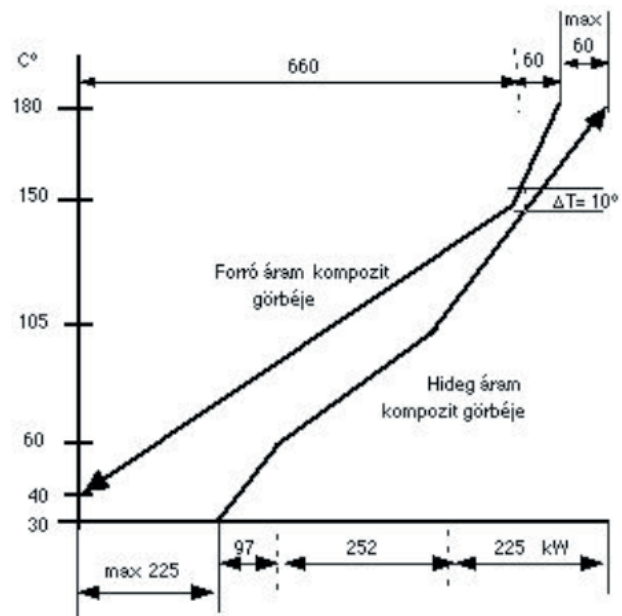
$$Q_{k,n} = \sum_n C_{pn} (T_{kf} - T_{ka}) \quad (5)$$

A hőmérséklet és energia koordinátákkal készült diagramban a változás egyetlen emelkedő egyenes szakasszal írható le. Lásd a 2. ábrát. A legelső, egyenes, hőmérsékleti szakasz a legelső hőmérsékleti értéktől a szakasz felső hőmérsékleti határáig tart (30–60°). A két ponthoz tartozó abszcissa érték különbsége: 97 kW.

Az egymást követő hőmérsékleti szakaszok kezdeti és végpontját az áramok T_s és $T_{cél}$ értékei adják meg. Ha a hideg kompozit görbe szerkesztését a legfelső méréshatárig elvégeztük, a forró kompozitgörbét szerkesztjük meg. Ez esetben a legfelső hőmérsékleti ponttól indulunk el, és az egymást követő, egyre alacsonyabb hőmérsékletű szakaszokon *leadott hőenergia* mennyiségét számítjuk ki. A számíthatóhoz ugyancsak az (5) egyenletet alkalmazzuk.

A két kompozitgörbe elhelyezése egyetlen diagramban, úgy kell történnjen, hogy azok egymást át ne fedjék, és a közöttük levő egyetlen szűkületben, a *Pinch pontban* a hőmérsékletkülönbség, ΔT_{min} , a két görbe között optimális legyen. Ha ugyanis ΔT_{min} értéke nagyobb, mint az optimális, úgy a teljes rendszer külső üzemi forrásból származó energiaigénye nagyobb és az energia megtakarítás mértéke kisebb. Ha pedig kisebb, úgy az egyszerű, csöves hőcserélők már nem használhatók, és jóval költségesebb, nagyteljesítményű, nagy érintkező belső felületű, lemez,

vagy bordás hőcserélőket kell beszerezni. A hagyományos csöves hőcserélők alkalmazása esetén ΔT_{min} elméleti értéke 3-5 °C körül van, a vegyipari gyakorlatban pedig, 10-20 °C.



2. Ábra. Pinch analízis. Forró és hideg kompozit áramok kombinációjának diagramja. (Az alapáramok adatait lásd az I. táblázatban).

A 2. ábráról leolvasható eredmények összhangban vannak a korábban ismertetett, „feladat tábla” segítségével végzett számítások eredményeivel. Az ábra felső jobb sarkán található, max 60 érték, megegyezik a II. táblázatban levő, megengedhető legnagyobb bemenet értékével. Hasonlóképpen a 2. ábra bal alsó sarkán található 225 érték a II. Táblázat megengedhető legnagyobb kimenet értékével..

III. Anyagtakarékos kémiai technológiai folyamat rendszerek tervezése

Az anyag (nyersanyag, alapanyag) felhasználás és anyaggal történő ésszerű gazdálkodás, megtakarítás, a kémiai technológiai tervezéseknél, hasonlóképpen azok megvalósításánál is mindig központi szerepet játszott. Napjainkban azonban a múlt század felfokozott ütemű, természettudományos és műszaki, gazdasági fejlődése, majd az annak nyomán kialakult, fokozódó globalizációs törekvések hatásai oda vezettek, hogy az emberi tevékenységből származó, egész Földünkre kiterjedő anyagáramlások mérete meghaladja a Föld saját természetes folyamataiból és az éghajlati változások hatásából eredő anyagmozgások összességét⁶. Az anyag-gazdálkodás ellenőrzésének, irányításának fontossága ezért ma a korábbinak sok százszorosára növekedett. Egyrészt a természetes anyagforrások egyre fokozottabban fenyegető kimerülésének, másrészt a környezetet elárasztó, haszontalan, és legtöbb esetben károsító, mérgező és romboló hatású, mellék-termékek szédületes iramban növekedő, mindent elárasztó, fullasztó burjánzása megakadályozásának, vagy lassításának érdekében.

Az anyagtakarékosságot is célzó folyamat tervezés első fázisában, egy előzetesen választott háló modell ismeretében, integrált termodinamikai számítások felhasználásával,

becsüljük meg az elérhető maximális anyag megtakarítást, majd ezt követően alakítjuk ki a hálózat végleges, optimális konfigurációját. Vagyis első lépésben a Pinch analízist végezzük el, és azt követi a feladattábla segítségével történő részletes számítás, optimalálás.⁷

A számítások az energiatakarékos tervezések során alkalmazott módszerekhez hasonlóak, de nagy mértékben eltérnek egyrészt az anyagtranszport mechanizmusának alapvető különbsége, másrészt pedig az egyensúlyt megszabó kritériumok különbözősége miatt. Jelentős eltérést okoz az is, hogy az anyagátvitel során — szemben a hőenergia átvitelével — rendszerint többféle különböző jellegű anyag egyidejű átvitele következhet be. A gondolatmenet alapja és célja azonban, hasonlítható egymáshoz: Egyik esetben a hőenergia megtakarításhoz szükséges, *hőcserélők közötti hőátvitelt*, másik esetben pedig egy, kiválasztott *anyag, vagy anyagsorozat, dús áramokból híg (vagy üres) áramba történő átvitelét (cseréjét)* kell optimális módon megvalósítani. Ez a gondolatmenet érvényesül akkor, ha egy fő termék előállításánál, a terméket a reakcióelegyből tisztán kívánjuk megkapni, de akkor is, ha egyetlen alkotót — legyen az káros, vagy nagyon értékes — sok alkotó mellől kívánjuk összegyűjteni. Hőcserélő rendszereknél a folyamat hajtóereje a hőmérsékletkülönbség, az anyag cserélő rendszereknél pedig a koncentrációkülönbség. Mindkét esetben a működés feltétele, hogy a különbség Δ_{\min} —nál nagyobb legyen.

Anyagcserélő rendszerek hálózatának tervezése

A feladat: olyan anyagcserélő egységek hálózatának megtervezése, mely n_D számú *dús* (átadó) anyagáramot, n_H számú *híg* (befogadó) áramot és n_E számú *külső* segéd áramot tartalmaz, és bizonyos n_p számú *anyagnak (alkotónak)* dús áramokból híg áramokba történő hatásos és minimális költségű átvitelére alkalmas. ($n_E \geq n_H$); Minden dús áramnak van G_i *tömegsebessége*, bemenő Y_i^s *összetétele*; hasonlóképpen minden híg áramnak van L_j *tömegsebessége* és *bemenő összetétele*: X_j^s . A kicserélődő P anyagnak (alkotónak) van $y_{i,p}^s$ *bemenő* és $y_{i,p}^{cél}$ *célkoncentrációja* a dús fázisban, $x_{j,p}^s$ *bemenő* és $x_{j,p}^{cél}$ *célkoncentrációja* a híg fázisban, mely utóbbi nem léphet túl egy bizonyos $x_{j,p}^{hat}$ *határkoncentrációt* (oldhatósági, vagy környezeti, vagy gazdasági, stb. okból); Valamennyi híg áram sebességére áll az alábbi, „elérhetőségből adódó” fontos megkötés:

$$L_j \leq L_j^{hat} \quad (6)$$

Minden kiegészítő, külső híg áramnak is van bemenő (szolgáltató) X_j^s *összetétele*, melynek cél értékére ugyanúgy érvényes a felfebb említett, híg áramokra vonatkozó megkötés. Az alkotók szétválasztására alkalmazott *reagenst* tartalmazó külső áramok sebességének határait megkötések nincsenek. Ezeket a hatékonyság és gazdaságosság figyelembevételével kell megválasztani.

Anyag és költség takarékos technológia tervezésének bemutatására szolgálhat egyszerű példaként egy petrokémiai üzem szennyvizéből történő benzol-kinyerési technológia tervének elkészítése.⁸

A benzolt tartalmazó szennyvíz két forrásból származik. Az egyik ülepítési, műveletből (D_1), a másik pedig gyártás során végzett, termék elválasztásból (D_2). A két dús áram adatai a III. Táblázatban láthatók. (10^{-6} kg/kg \sim 1 ppm).

III. Táblázat. Benzolt tartalmazó szennyvizek (dúsáramok) adatai⁸

áram	sebesség G_i kg / s	bemenő koncentráció y_1^s (m/m)	cél koncentráció $y_1^{cél}$ (m/m)
D_1	80	$800 \cdot 10^{-6}$	$150 \cdot 10^{-6}$
D_2	140	$1500 \cdot 10^{-6}$	$300 \cdot 10^{-6}$

A benzol kivonása folyadék-folyadék extrakcióval történik. A kicserélő fázis két anyagot: hexánt és heptánt tartalmaz. Az anyagcserében résztvevő híg áramok adatait a IV. táblázatban láthatjuk.

IV. Táblázat. Benzol kivonásához alkalmazott híg áramok adatai⁸

áramok	sebesség L_j kg / s	bemenő koncentráció x^s (m/m)	cél koncentráció $x^{cél}$ (m/m)	átviteli hajtóerő Δ_{\min}
H1 hexán	0.5	$5 \cdot 10^{-6}$	-	$25.000 \cdot 10^{-6}$
H2 heptán	0.6	$10 \cdot 10^{-6}$	$170.000 \cdot 10^{-6}$	$15.000 \cdot 10^{-6}$

Fentiekén kívül, külső anyagelválasztó reagensként (E) alkalmazható az aktív szén. Az anyagcserét, a benzol átvitelét biztosító *megoszlási egyensúlyok* egyenletei az alábbiak:

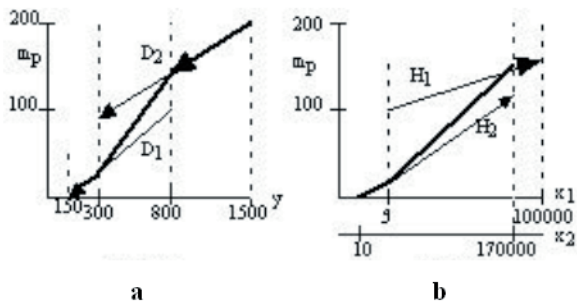
$$y = 0.012x_1 \quad (7) \quad y = 0.007x_2 \quad (8)$$

A technológiai folyamat tervezésének első lépéseként a *Pinch analízist* végezzük el. Az analízis eredménye alapján ugyanis megtudható, hogy a rendelkezésre álló, termodinamikai adatok és folyamatjellemzők ismeretében, mi az az ideális esetben elérhető, maximális hatásfok, mellyel a feladat megoldható. Hasonlóképpen, mint azt a II. fejezetben láttuk, az áramok adatainak, és a termodinamikai adatoknak felhasználásával, egyfelől a dús áramok *kompozitgörcbójét*, másfelől pedig a híg áramok *kompozitgörcbójét* szerkesztjük meg. Mindkét esetben olyan diagramot szerkesztünk, melynek ordinátáján a kicserélő anyag — esetünkben a benzol — időegységre eső mennyisége, abszcisszáján pedig a dús áramok és híg áramok benzol tartalmának (x_p) kumulált koncentrációja szerepel. Első esetben a dús áramból távozott, második esetben pedig az extraháló fázis által felvett benzol mennyiségének alakulását ábrázoljuk az egymást követő koncentrációszakaszok sorrendjében. A szakaszokban kicserélő anyagmennyiség, m_p kiszámítása az (5) egyenlethez nagyon hasonló, alábbi egyenletekkel számítható ki:

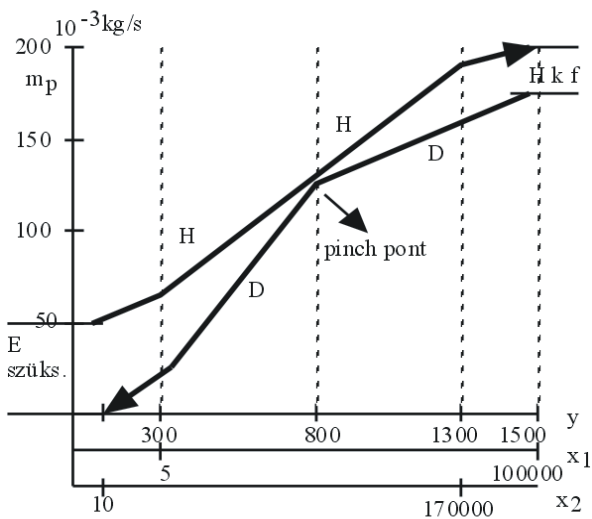
$$m_{p[n-(n-1)]} = \sum G_i \cdot (y_n - y_{n-1}) \quad (9)$$

$$m_{p[n-(n-1)]} = \sum L_j \cdot (x_n - x_{n-1}) \quad (10)$$

A 3a. ábrán a dús áramok, a 3b. ábrán a híg áramok kompozit görcbójének szerkesztési diagramját, a 4. ábrán pedig a két görcbét összefoglaló, *Pinch diagramot* láthatjuk.



3a. Ábra. Dús áramok kompozit görbéjének szerkesztése.⁸ 3b. Ábra. Híg áramok kompozit görbéjének szerkesztése⁸



4. Ábra. Szennyvízből történő benzolkivonás anyagcseréjének Pinch diagramja.⁸

A Pinch diagramból az alábbi fontos megállapítások kaphatók meg: (1) a Pinch pontban anyagátvitel, anyagcsere nem játszódik le. A kritikus koncentrációérték: $800 \cdot 10^{-6}$ (2) A Pinch diagramból leolvasható az is, hogy a termodinamikai és anyagátviteli adatok segítségével történt számítások szerint, mekkora a kicserélhető anyag mennyisége, és mekkora az a mennyiség, amely csak külső, segéd reagens segítségével, esetünkben aktív szénrel, távolítható, illetve választható el. Utóbbi a diagram alsó bal sarkában: E szüks ($52 \cdot 10^{-6}$ kg/s). A jobb felső sarokban pedig, a Hkf felirattal jelölt odinátá hossza a híg áramok kapacitásfeleslegét adja meg. ($14 \cdot 10^{-6}$ kg/s).

Aműveleti eszközök megválasztását, méretezését, és a hálózat konfigurációjának megtervezését, végül a legmegfelelőbb, leghatékonyabb hálózatnak kiválasztásához szükséges számításokat, az előző fejezetben ismertetett „feladat-tábla” elkészítéséhez hasonlóan, célszerű mindig a Pinch analízist követően elvégezni.

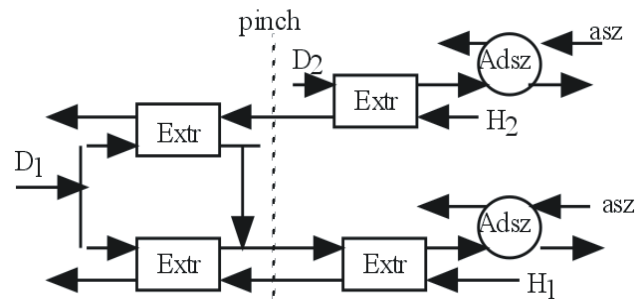
Az alháló és a hálózat tervezése során— ha maximális anyag és költség megtakarításra törekszünk, úgy a pinch pont feletti és pinch pont alatti anyagcserélő egységek tervezésénél figyelembe kell venni azt, hogy a pinch felett a dús áramok száma nagyobb legyen, vagy megegyezzen a híg áramokéval, a pinch alatt viszont éppen fordított a

követelmény. Ha szükséges, az áramok megosztásával lehet kedvező folyamattervet összeállítani. Az anyagcserélők térfogatának növelésével a megosztás elválasztás hatékonysága növelhető, de ugyanakkor a beruházási és üzemelési költségek is növekednek.

A (9) és (10) egyensúlyi egyenleteken kívül, a számításokhoz szükséges, egyes cserélő egységekre érvényes munka vonal egyenlet az alábbi:

$$G_i(y_{pj}^{be} - y_{pj}^{ki}) = L_j(x_{pj}^{ki} - x_{pj}^{be}) \quad (11)$$

A tervekészítés részleteinek ismertetése nélkül, az 5. ábrán mutatjuk be a szennyvízből történő benzol visszanyeréshez szükséges, anyagtakarékos folyamat optimális hálózati tervét.⁸



5. Ábra. Benzolkivonás hálózati terve.⁸ Extr = anyagcserélő extraktorok; Adsz = adszorpciós cserélők; asz = aktív szén.

A D_1 áram megosztása: 54 és 26 kg/s; a D_2 sebessége 140 kg/s; a H_1 -é és H_2 -é rendre: 0,5 és 0,6 kg/s.

A közlemény második részének fejezetcímei a következők: Környezetbarát kémiai technológiai rendszerek tervezése tulajdonság integrációval. Függelék: 1. Új típusú kémiai segéd anyagok és technológiák 2. Optimalás korszerű matematikai módszerei.

Hivatkozások

1. Inczédy, J.: Dinamikus kémiai rendszerek működésének ellenőrzése (2002. Január 12.-én elhangzott székfoglaló előadás); MTA Székfoglaló előadások
2. Smith, R. *Chemical Process: Design and Integration*, J. Wiley & Sons, 2005.
3. Inczédy, J. *Kémiai folyamatok műszeres ellenőrzése* Veszprémi Egyetemi Kiadó, Veszprém 2001. ISBN 963 9220 752.
4. Linhoff, B.; Flower, J.R. *Synthesis of Heat Exchanger Networks*, *AIChE Journal* 1978, 24, 633-653.
5. Umeda, T.; Itoh, J.; Shiroko, K. *Heat Exchange System Synthesis* *Chem. Eng. Progress* 1978, 70-76.
6. Pomázi, I.; Szabó, E. *Anyagáramlások a világ legfejlettebb országaiban az Egyesült Államok és Japán példáján*. *Magyar Tudomány* 2006, 10, 1225-1236.
7. El-Halwagi, M. M.; Maanousiouthakis, V. *AIChE Journal* 1989, 35, 11233-1244.
8. Dunn, R.F.; El-Halwagi, M. M. *Design of Cost Effective VOC Recovery Systems* 1996.

The essential role of the chemical engineering science in the sustainable development

Both the new results of the chemical engineering sciences in the fields of designs and realisations of chemical technological processes, and the high extension of the area of the utilisation of chemical processes in the human activities, were of great importance in the last decades of the last century. The chemical technology become an indispensable part of the requirements, to assure the modern life standard, taking part in the production of articles, materials, tools, used in everyday life. Not only pharmaceuticals, or beverages, drinks, etc. but also in the manufacturing of new, intelligent, microelectronic parts, which are essential in the production of tools, used in communication as well as in information technology. For the changes, in the design of chemical technology not only the high diversification of the types of products are responsible, but also the increasing demands concerning the formation of a "sustainable development" in the whole world, which of introduction can not be postponed any more. Beside the costs of the necessary investments, the economies of the processes were always crucial points of the designs and developments of chemical technologies, in which mainly the consumption's of the energy and that of the raw materials were taken into consideration. Today these requirements are extremely extended and imperative. Due to the increasing complexity of the processes, and also to the frightfully increasing polluted areas of the environment, the prediction of the harmlessness of the technological processes become extremely difficult. Therefore, to the control and evaluation of the operation of the existing technological processes, and also to the design of the processes the use of sophisticated mathematical statistical methods, and algorithms, working with high number variables, and multi dimensions are indispensable. Due to the high efficiency of the mentioned algorithms, used at the optimisation of the technologies, they are promising in the control and investigations on the natural, biological or living systems as well.

The design of the technological processes starts with formulation of the problem, and thereafter the traditional operation units are connected to a network, which of structure is to be optimised. To receive an objective value of the effectively accessible maximum efficiency both in the energy and material mass consumption, the recently developed *thermodynamic integration methods*, in which the all potential energy and material sources and streams are included, serve as the most excellent tools. By the use of the

methods the maximum accessible effectively in percent can be estimated. (Very recently integration methods were developed also for the maximum accessible properties of the functional material products. See later in part II.) The next step of the design is the determination of the best configuration and sizes of the units, i.e. the best structure of the network. For the optimisation of the structure, it is a rational way, to prepare a *superstructure*, in which the all possible, or promising connections are inserted, and by the use of the optimisation algorithm, developed to find the best structure configuration of the operation units, the superstructure is decreasing, step by step, and gives as a result the most optimal one, assuring the best efficiency. If the structure optimisation has been done, the parameter optimisation is the next step. Finally, the design of the *instrumental control system*, for the continuous control of the realised, working technological system is to be done. In the second chapter the heat energy integration and optimisation is introduced, on the basis of the paper of Linhoff and Flower.⁴ In the chosen example, two hot and two cold streams are available, to find how many heat exchanger units (subnets), and in what order should be they connected to give optimal utilisation of the system, using the Problem Table Algorithm (PTA). Using thereafter the graphic Pinch method, introduced by Umeda, Itoh, Shiroko,⁵ it was shown, that the results of the two methods, are in full agreement with each other. In the third chapter economy of the mass management, based on the synthesis of the *mass changing units* is introduced, according to the paper of El Halwagi,⁷ and with an example, given by Dunn and El Halwagi:⁸ design of benzene containing wastewater treatment process, using liquid-liquid extraction-, and absorber units. The instructive conclusions of the results of the Pinch analysis are discussed and emphasised its importance, because the problem table preparation and calculation, to find the optimal configuration, can be carried out only, if the position of the pinch point is already known.

In the second part of the paper will be presented the chapter with title: Design of technological systems used for pollution prevention with property integration. Appendices, (1) concerned with some new type chemicals and new type technologies, and (2) mathematical statistical methods of high efficiencies, useful for the explorations and optimisation of non linear, multivariable, complex dynamic systems.