

Vegyésmérnöki tudomány szerepe a fenntartható fejlődésben II. rész, Környezetbarát kémiai technológiai rendszerek tervezése, új típusú kémiai rendszerek alkalmazása, az optimalítás korszerű matematikai módszerei

INCZÉDY János

Pannon Egyetem, 8201 Veszprém, Pf. 158.

A hazánkban úttörő munkát végzett, fiatalon elhunyt, Fonyó Zsolt emlékének tiszteletére^{25,26}

A közlemény első részében⁹ ismertettük a legutóbbi évtizedben kifejlesztett, nagy hatékonyságú, integrációs tervezési módszereket, melyeknek felhasználásával az energia- és anyagtakarékos kémiai technológiai eljárások tervezése és a megvalósított rendszerek működésének ellenőrzése biztonságosan megvalósítható. A fenntartható fejlődést szolgáló kémiai technológiai eljárásoknak azonban nem csupán energia- és anyagtakarékosnak kell lenniük, hanem *környezetbarát*nak is, vagyis olyanoknak, mely a környezetet sem haszontalan hulladékkal, sem egészségre és a környezetre káros gáz és folyadék kibocsátással nem szennyezi. Ennek megvalósítása pedig azt igényli, hogy a technológiai eljárások során keletkező melléktermékek újrahasznosítása a rendszeren belül maximális, a környezetre káros anyagok kibocsátása pedig minimális legyen. Ezért a tervezés során fontos figyelembe venni a technológiai folyamat során keletkező melléktermékek, hulladékok (fizikai vagy kémiai) funkciós tulajdonságait, és a melléktermékek, hulladékok újrafeldolgozásának, hasznosításának technológiáját meg kell tervezni. Ehhez pedig az kell, hogy a tervezés vezérlő paramétere a feldolgozandó *anyagok funkciós tulajdonsága* legyen. A IV. fejezetben a *tulajdonság integráció alkalmazásának módszerét* mutatjuk be, melynek segítségével a maximális újrahasznosítást és minimális káros anyag kibocsátást garantáló technológia megtervezhető. Megjegyezzük, hogy nemcsak a hasznos funkciós tulajdonságú termékek, de a káros szennyezőket tartalmazó hulladékok kezelése során is a tulajdonság mértéke a mérvadó, ugyanis a megengedett határokat is tulajdonság mérőszámaként, (pH, toxicitás, színezettség, stb.) adják meg.

A tulajdonság integráció nem csak a környezetbarát technológiák tervezése során hasznos, de az új típusú, *anyagtechnológiai rendszerek tervezésének* során is. A funkciós tulajdonságokkal rendelkező, különleges anyagszerkezetű, különleges minőségű, új típusú anyagok: fényvezetőszálak, hatóanyagok, intelligens anyagok és a nanotechnológiai eszközök, gyártástechnológiájának tervezése és optimalítása, a tulajdonság integráció segítségével biztonságosabbá tehető és nagy mértékben meg is gyorsítható.

IV. Környezetbarát kémiai technológiai rendszerek tervezése tulajdonság integrációval¹⁰

Tulajdonság alapú Pinch analízis¹⁰

Az ipari folyamat rendszerek nagy része működése során nagy mennyiségű, külső forrásból származó, költséges

anyagokat (oldószereket stb.) használ fel, mely egyes műveletek során csak részben veszít hatékonyságából és egyéb belső forrásból származó hulladék anyagokkal kombinálva újra felhasználható. Olyan esetekben, mikor a felhasználhatóság kizárólag az anyag tulajdonságától és nem kémiai összetételétől függ, célszerű az integrálást a funkciós tulajdonság mennyiségi értéke szerint elvégezni. A műveletek hálózatából álló rendszerekben rendszerint több *belső forrás* áll rendelkezésre, melynek árama újrahaznosítható. Az áramokat különböző fogadó, nyelő egységekbe vezetjük újrafelhasználás céljából. Az áramoknak van G_i tömegsebessége és p_i tulajdonság értéke, mérőszáma, mely utóbbira az alábbi megkötés érvényes:

$$p_j \min \leq p_{jbe} \leq p_j \max \quad (12)$$

A megkötés adja meg az egyes nyelőkbe juttatható áramok tulajdonság határait. Feladatunk az, hogy a források áramait nyelőkbe vezessük, ahol a keveredés megtörténik. Az áramok megosztását, a nyelők sorrendjét, összekapcsolását, úgy kell kialakítani, hogy csak minimális külső forrásból származó friss anyagra legyen szükség, és a szennyező kibocsátás minimális legyen. Összekeverés során a bevitt tulajdonságmennyiség értékét az összekevert áramok tömegsebessége és tulajdonsága szabja meg:

$$G_T \times \psi(p_i) = \sum_i G_i \times \psi(p_i) \quad G_T = \sum G_i \quad (13)$$

ψ a tulajdonság-keverés operátora. [Ha a tulajdonság pl. sűrűség, úgy $\psi(p_i) = 1/p_i$].

Az időegység alatt átadott tulajdonság tartalom (mennyiség):

$$M_i = G_i \times \psi(p_i) \quad (14)$$

A nyelő keverő egységekre érvényesek az alábbi operátor határértékek:

$$\psi_j \min \leq \psi_{jbe} \leq \psi_j \max \quad (15)$$

A külső friss forrás a legjobb tulajdonságú, tehát

$$\psi_{friss} \leq \psi_{jbe} \leq \psi_j \max \quad \psi_{friss} = \psi(p_{friss}) \quad (16)$$

Egy nyelő maximális tulajdonság tartalma pedig:

$$M_j \max = G_j \times \psi_j \max \quad (17)$$

mely, megszabja a források által bevezethető maximális tulajdonság mennyiségét.

Pinch analízis elkészítésének lépései a következők:

(1) Összeállítjuk a nyelők áramlási sebesség és megengedett tulajdonságtartomány adatait. Lásd a (12) feltételt. Kiszámítjuk a tulajdonság operátor maximális értékét, és az

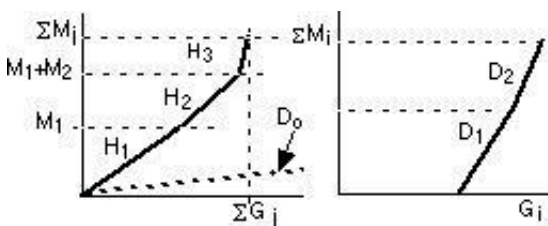
idő egység alatt megengedett maximális átvihető tulajdonság mennyiségét. Lásd a (14) egyenletet. Végül sorba állítjuk a nyelőket növekedő ψ_j max szerint. Lásd (16) egyenletet.

(2) Megszerkesztjük a nyelő kompozit görbét: a kívánt G_j és a (17) egyenlettel kiszámított, maximális tulajdonság tartalom ismeretében úgy, hogy minden egyes nyelőnek, növekedő sorrendben, elkészítjük a diagramját, sebesség és átvitt mennyiség koordinátákkal. Az így kapott emelkedő egyenes szakaszokból készítjük el. szuperpozícióval, a *nyelők kompozit görbéjét*. Lásd 6. Ábra.

(3) Kiszámítjuk a friss áram iránytangensének értékét (16) szerint és berajzoljuk a diagramba a friss áram vonalát, mely az origóból indul és ψ_{friss} iránytangenssel emelkedik. Lásd 6. ábra.

(4) Összeállítjuk minden egyes forrás sebesség és tulajdonság adatait. A tulajdonság operátor funkciós alakjának segítségével kiszámítjuk valamennyi forrás ψ_i operátorát. A forrásokat növekedő operátor szerint állítjuk sorba, és kiszámítjuk minden forrás M_i tulajdonság tartalmát. Lásd a (14) egyenletet.

(5) Ezután a G_i sebesség és ψ_i operátor adatokból felrajzoljuk növekedő sorrendben a források emelkedő vonalát, majd ezekből, figyelembe véve a nyelők (feljavítandó áramok) maximális tulajdonság igényét (lásd (17) egyenletet) szerkesztéssel és egymásra helyezéssel, elkészítjük a források kompozit görbéjét. Lásd a 6. ábrát.



6. Ábra. Nyelő- forrás kompozit görbe készítése.

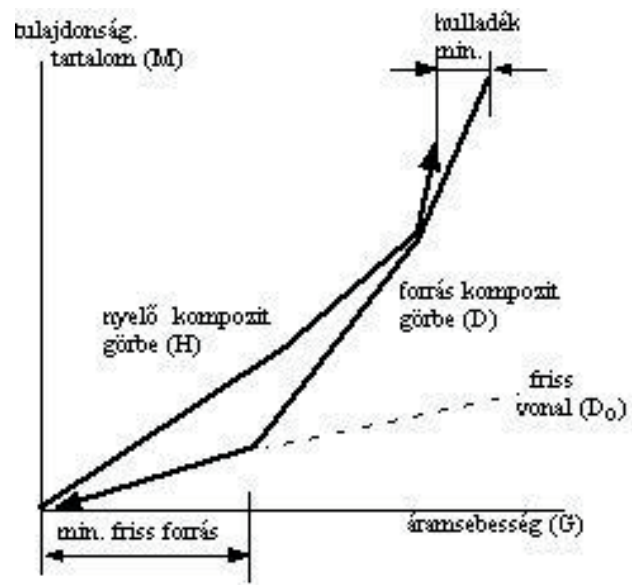
(6) A források kompozit görbéjét bal irányban elcsúsztatjuk a friss vonaláig, úgy, hogy az mindig a nyelő kompozit görbe alatt maradjon és a forrás kompozit görbéjével egyetlen pontban, a pinch pontban, érintkezzen, az átfedő tartományban.

Ezután a diagramból meghatározzuk a pinch pont helyét, továbbá a friss forrás fogyasztás, és a szennyező kibocsátás minimális értékét. Lásd a 7. ábra diagramjának bal alsó részét, illetve felső jobb oldali részét.

A források szolgáltatják a dús áramokat (D_1, D_2, \dots) a nyelők pedig a híg áramokat (H_1, H_2, \dots). A külső (friss) forrás dús áramának jelölése: D_0 . Műveletek hatására a híg áramok *jósága fokozódik*, hasznos tulajdonság tartalma növekszik, a dús áramoké pedig csökken.

A fenntartható fejlődés szempontjából rendkívül fontos újrahasznosítás megvalósításának tervezéséhez, a Pinch analízis számos értékes információt szolgáltat.

Pinch pontban a nyelők kumulatív árama által felvehető maximális tulajdonságtartalom megegyezik a források



7. Ábra. Tulajdonság alapú anyaghasznosítás Pinch diagramja.

kumulatív tulajdonságtartalmával. A pont alatt kerül felhasználásra a friss külső forrás. A pont felett viszont a belső forrásokból származó újrahasznosított, és a rendszertől kibocsátott tulajdonság tartalom jelentkezik. A külsőforrás igény és a hulladék kibocsátás csökkentése megvalósítható a művelet-hálózat ésszerű tervezésével, ha az alábbi szabályokat szem előtt tartjuk: (1) *Pinch pontban tulajdonság tartalom nem mehet át.* (2) *Hulladék kibocsátás, Pinch alatt, és* (3) *friss forrás használata Pinch felett, nem lehetséges.* Viszont, ha azt találjuk, hogy a pinch alatt kevés a felhasználható forrás, a pinch felett pedig felesleg van, úgy nyelő szakaszok vihetők alulról a pinch fölé, és forrás szakaszok alája. A (15) feltétel határainak ésszerű módosításával, mind a friss felhasználás, mind pedig a hulladék kibocsátás mértéke minimálisra csökkenthető.

Foo, Kazantzi, El-Halwagi, Mannan¹¹ dolgozatukban jó példáit mutatják be a tulajdonságalapú művelettervezésnek akkor, ha az egyébként hulladék-kibocsátásra kerülő, de értékes tulajdonságot hordozó anyagok újrahasznosítását kell megtervezni és megvalósítani.

Egyik esetben fémfelületek oldószeres zsírtalanítása során használt, részben kimerült oldószerelemek regenerálásának, illetve újrahasznosításának technológiáját, másik esetben pedig, minőségi papírgyártás során keletkező selejtes, törtfényű (broke), árnyas pulpok feljavítására kívántak alkalmas, és hulladékfeldolgozás szempontjából optimális technológiát megtervezni.

Első esetben a tulajdonság tartalom követésére alkalmas mérőszámként, (rögzített hőmérsékleten) az oldószereleg Reid-féle göznyomását ($p_{\text{göz}}$), a második esetben pedig a pulpok fehér fényt visszaverő képességét kifejező, MgO-ra vonatkoztatott reflektivitását (R), választották.

Alábbiakban szemléltetjük mindkét esetben, a mérőszámok keverési szabályát, továbbá a tulajdonság operátor és mérőszám összefüggését leíró egyenleteket.

$$p_{\text{göz},T}^{1.44} = \sum_i x_i \times p_{\text{göz},i}^{1.44} \quad (18)$$

$$\Psi(p_{\text{göz},i}) = p_{\text{göz},i}^{1.44} \quad (19)$$

$$R_T^{5.92} = \sum_i x_i \times R_i^{5.92} \quad (20) \quad \Psi(R_i) = R_i^{5.92} \quad (21)$$

Említett szerzők¹¹ a grafikus szerkesztéssel készült analízis diagramból vett adatok felhasználásával megvizsgálták és algebrai számításokkal meghatározták, a szakaszokra bontott nyelők és források tulajdonság tartalmának felesleg és deficit értékeit, majd az áramok összes lehetséges megosztásának és összekapcsolásának feltételezésével készített „szuperszerkezetű” modellt korszerű számítógépi optimaló program segítségével vizsgálták meg. Ennek eredményeként határozták meg azt az optimális konfigurációt, mely a legkisebb külső forrás fogyasztást igényli és hulladék kibocsátása a legkisebb

FÜGGELÉK

F.1. Új típusú segédanyagok és környezetkímélő technológiák

A fenntartható fejlődés megvalósításához nem elegendő a jelenlegi hagyományos technológiák tervezésének optimalása és a hulladékok feldolgozására és felhasználására határos újabb, eljárások kifejlesztése. Feltétlenül szükség van olyan alapvetően új technológiai eljárások kifejlesztésére is, melyek eleve jóval kisebb tömegű (víz-, oldószer-, szemcsés szilárd) anyagáramok felhasználását és regenerálását igénylik, és a felhasznált anyagok az egészségre nem károsak, a környezetet nem szennyezik és gyakorlatilag regenerálás nélkül újra felhasználhatók.

Ionos folyadékok

Az ionos folyadékok 100 °C alatti hőmérséklet tartományban is folyékony halmazállapotú, nem illékony, (kis gözteniójú), nem gyúlékony, jó oldóképességű szerves sók. A kation imidazólium-, piridínium-, ammónium-, foszfónium származék, az anion pedig a kloridtól kezdve a tetrafluorborátig nagyon változatos lehet.

Előnyösen használhatók a hagyományos oldószerek helyett, poláros vegyületek oldószereként, reaktorban lejátszódó szintézis reakciók, vagy kétfázisú elválasztási műveletek megvalósítása során. Regenerálásuk, minthogy nem desztillációval, hanem érintkeztetéssel történik, nem energia igényes és rendszerint hulladékmentes is.

A BASF (Ludwigshafen) üzemeiben az etoxi-difenil-foszfin és a dietoxi-fenil-foszfin előállítására, a difenil-klór-foszfin, ill. második esetben, a diklór-fenil foszfin etanollal történő reakciójával történik, majd azt a sósav megkötése és eltávolítása követi. Utóbbi lépésekhez korábban ammóniát, vagy metilamint használtak.

Legújabbban azonban a sav megkötést imidazol alapú ionos folyadékkal (Basil®) végzik. Ezzel sikerült az energia- és anyag felhasználást a korábbiak néhány %-ára, a hulladék kibocsátást pedig korábbiak felére csökkenteni.¹²

Fluor kétfázisú rendszerek alkalmazása szerves szintézisek során.

Egyes folyadék halmazállapotú, szerves perfluor vegyületek

olyan tulajdonságokkal rendelkeznek, melyek kiválóan használhatóak az új típusú, környezetbarát kémiai technológiák megvalósítása során. Nem bomlékony, stabilis, nem degradálódó, hidrofób anyagok, melyek vízzel és az általánosan használt szerves oldószerek nagy részével, szobahőmérsékleten nem elegyednek, de egyes oldószerekkel nagyobb hőmérsékleten homogén elegyet alkotnak, szuperkritikus CO₂-ban kiválóan oldódnak, és a gázokat is oldják.

A perfluor- és szerves- oldószeres, kétfázisú, rendszer alkalmazásának felfedezői Horváth T. István és Rábai József voltak, akiknek közleménye 1994-ben jelent meg.¹³ Katalitikus szintézis során, kétfázisú rendszer alkalmazása esetén, szobahőmérsékleten a katalizátor-vegyület a perfluor fázisban, a reakcióban résztvevő alkotók pedig a vele érintkező szerves oldószeres fázisban oldott állapotban vannak jelen. Felmelegítés hatására a két fázis egymással homogén fázist alkot, a reakció lejátszódik, majd lehűtés és két fázis megjelenése és elválasztása után a reakció termék(ek) egyszerű módon megkaphatók és a katalizátor is visszanyerhető (pl. szilárd fázisú szelektív extrakcióval).

Perfluor oldószerek: dekafluor-pentán; perfluor-hexán; hexafluor benzol, stb.

Perfluor katalizátor: bis[tris(3-perfluor decil) fenil] foszfin] palládium(II) diklorid, stb.

Perfluor ligandum: trisz[3-(perfluordecil)fenil] foszfin, stb.

Perfluor reagens: perfluor-oktil-jodid; perfluor-1-oktanol, stb.

Szintézis megvalósítása fázisok közötti katalizátor-átvitel segítségével.

A hagyományos szerves kémiai technológiák átalakításának egyik legsürgetőbb feladata a kémiai reakciók lejátszódásához elengedhetetlenül szükséges egységes fázist biztosító, nagy mennyiségű oldószer költséges regenerálásának kiküszöbölése.

Sok évvel ezelőtt, mikor a kifinomult ioncserés technikák megszülettek és széles körben ipari alkalmazást nyertek, ígéretesnek tűnt az a felfedezés, hogy ioncserélő hordozón megkötött fémionok, mint homogén redox katalizátorok előnyösen használhatók, mert a reakcióelegyből bármikor, rendkívül egyszerűen, maradék nélkül eltávolíthatók.¹⁴

Az újabb alkalmazott, fázisok közötti katalizátor-átvitelt, a reagenst és/vagy katalizátort tartalmazó vizes fázisból, a szubsztrátumot tartalmazó, szerves oldószeres fázisba, olyan szerves reagens illetve folyékony ioncserélő (pl. tetrabutillammónium-bromid, vagy tetrabutil foszfónium-klorid) segítségével végzik, mely mindkét fázisban oldódik. Átvivő katalizátorként, fent említettek kivül alkalmazhatók egyes korona-éterek és polietilénlikol is. Így homogén fázisban halogénezési, alkilezési, oxidációs, redukciós, stb. reakciók hajthatók végre, kedvező sebességgel, viszonylag alacsony hőmérsékleten, költséges, vízmentes oldószerek alkalmazása és költséges regenerálása nélkül.¹⁵

F. 2. Optimális korszerű matematikai módszerei

Amint az a közlemény első részének 1.fejezetében⁹ olvasható: a legjobb hatékonysági jellemző értékek elérése és meghatározása céljából, a tervezett folyamat rendszer működését, egyrészt a különböző, belső szerkezeti megoldások (különböző konfigurációk, kapcsolási sorrendek, esetleg más, alapelvben eltérő, új típusú elválasztási eljárás, segédanyag, alkalmazása stb.) szempontjából (szerkezeti optimalítás), másrészt pedig, a különböző bemenő működtetési paraméter értékek tartományában jelentkező viselkedése szempontjából (paraméter optimalítás), kell megvizsgálni.

A lehetséges kombinációk nagy száma miatt, gyakran megvalósíthatatlannak tűnő, számítás olyan "szuperszerkezetű hálózat terv" és olyan különleges algoritmus segítségével lehet csak megvalósítani, melyben minden számbajöhető művelet típus, minden kapcsolati lehetőség, stb. szerepel, de végül is a hálózati terv, a számítások eredményeképpen, az egyetlen optimális rendszer méretére kisebbíthető. A legújabb optimalítási eljárások olyan algoritmust alkalmaznak, melyben a nagyszámú szerkezeti változatok igen-nem (logikai) értékeinek és a működési paraméterek folytonos értékeinek egymás mellett jelenlevő tengerében a célfüggvény (pl. költség, szennyező kibocsátás, stb.) minimalizálását úgy végzik el, hogy az eredménytér elemei közül menetközben mindazokat, melyeknek jelenléte logikailag nem megengedhető, vagy korlátot lépnek át és a cél elérése szempontjából nem relevánsak, kitorlik, és végül is egy kevésbé komplex, optimális technológiai szerkezetet és rendszert jelölnek ki.

Hozzáférhető számítógépi programok

A legutóbbi évtizedekben kiugróan megnövekedett a száma a forgalomba kerülő, nagyteljesítményű, sok változós, bonyolult összetételű rendszerek működésének vizsgálatára alkalmas, számítógépes programoknak.¹⁶ A NIST (National Institut of Standards and Technology) Matematikai és Informatikai Divíziójának program kínálata: a GAMS (Guide to Available Mathematical Software) rendkívül gazdag¹⁷. Ezek közül elsősorban a MINLP (Mixed-Integer Non-Linear Program) vegyes egészszámú nemlineáris programot, és a legújabb, globális (teljes rendszert átfogó szemléletű), modellek alkalmazását érdemes megemlíteni. Utóbbi csoportba tartozik pl. a GDP (Generalized Disiunctive Programming) csomag, melyben a teljes rendszer leírására konkrét, bináris és folytonos változókat egyaránt tartalmazó, egységes függvényt állítanak elő, melyre három megkötés (korlát) érvényes.

A MINLP programok változatai

A kémiai technológiai rendszerek tervezése során feltétlenül szükséges MINLP program alkalmazása ahhoz, hogy a technológiai rendszerek diszkrét szerkezetének és folytonos paramétereinek optimalítása egyidejűleg legyen megvalósítható. A megoldásra a legutóbbi évtizedek során, számtalan próbálkozás történt, és számos eljárás (algoritmus) született. Napjainkban, mint feljebb is utaltunk rá, a hozzáférhető programcsomagok száma jelentős, és továbbra is növekedőben van. A piac változó kívánalmainak megfelelően egyes fontosabb technológiai rendszerek (pl.

desztilláló, vagy szennyvízkezelő üzemek) tervezéséhez kész csomagok kaphatók.

A megoldási eljárásoknak algoritmusoknak számos válfaja van, de egyszerűsített alapelvük a következőképpen fogalmazható meg:

$$Z(\min) = f(x, y) \quad (22) \quad h(x, y) = 0 \quad (23)$$

$$g(x, y) \leq 0 \quad (24) \quad x \in X, \quad y \in \{0,1\}$$

Z a célfüggvény, pl. összköltség, melynek minimumát keressük. x -el a folytonos változókat (pl. állapothatározó), y -al a diszkrét (pl. igen – nem) változókat jelöltük.

A h jelű, a rendszer teljesítményét megszabó, kémiai és termodinamikai egyenletekkel leírható kapcsolatok függvénye, a g egyenlőtlenség pedig a változók megengedhető tartományát, korlátait szabja meg. X és $\{0,1\}$ a tartományok (dobozok) határai.

A feladatmegoldás algoritmusai a folytonos változókat tartalmazó lineáris rendszerek szélsőérték keresésére szolgáló, a kísérlettervezésben jól ismert, számos kézikönyvben, tankönyvben megtalálható, viszonylag egyszerű szimplex módszer algoritmusából fejlődtek ki.

A Dantzig-tól származó¹⁸, 1947 óta ismert, *szimplex módszer*, az egyik legegyszerűbb és leggyorsabb eljárás lineáris rendszerek optimalítására, cél-függvények szélső értékének meghatározására. Alapelve a következő:¹⁹

$$z_j = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (25)$$

A polinommal felírható, konvex célfüggvény z_j értékei n számú, x_i változótól függenek. A szélső értékék a több dimenziós eredménytérben, zárt poliéder csúcsain jelennek meg. (Két dimenziós síkon háromszög, háromdimenziós térben tetraéder csúcsain.)

Minimum keresés esetén, ésszerű algoritmus szerint végig tapogatva az eredménytáblán levő pontokat, viszonylag rövid úton, gyorsan megtalálható a teljes rendszerre érvényes, valódi minimum érték. (Legegyszerűbb esetben, ha az eredménytér kétdimenziós sík, és minimumkeresés a feladat, a háromszög csúcsain lévő értékek közül a legnagyobbat kidobjuk és helyébe, tükrözéssel új értéket teszünk. A lépéseket mindaddig folytatjuk, míg a legkisebb értékhez nem jutunk.) A pontosság és megbízhatóság érdekében a keresés utolsó szakaszában a kritikus eredménytértartományt szorosabban is átvizsgálhatjuk, és iterációt is végezhetünk.

A digitális számítógépek fejlődésével nem csak a szimplex módszer teljesítőképessége volt nagy mértékben fokozható, de az optimumkeresés a nem lineáris rendszerek vizsgálatára, végül pedig a vegyes egészszámú, vagyis folytonos és diszkrét változókat egyaránt tartalmazó, nem lineáris rendszerek vizsgálatára is kiterjeszhetővé vált.

A „vegyes egészszámú” program megvalósítását elsősorban a hatvanas évek óta ismert, *Branch & Bound* (korlátozás és szétválasztás) program²⁰ alkalmazása tette lehetővé. Ennek működési alapelve az, hogy a vizsgálandó eredménytér pontjaiból kis lokális csoportokat képezünk és azokat elfogadhatóság és értékelhetőség szempontjából külön-

külön vizsgáljuk meg. Ha az így kapott értékek nagyobbak, mint a felső korlát, úgy azokat töröljük. Ha az érték a csoportban legkisebb, és kisebb mint az eddig talált értékek, úgy azt megtartjuk. A nem értékelhetőket újra vizsgáljuk. Az algoritmus jóságától függ, hogy milyen gyorsan lehet az igazolt, valódi minimum értéket megtalálni.²¹

A folyamatos ritkítás ellenére, abban az esetben, ha az egészszszámú változók száma a folytonos változókéhoz képest nagy és nagyszámú, többesres nagyságrendű adatot tartalmazó eredménytér vizsgálatáról van szó a számítási idő igénye már rendkívül nagyra válik.

Az egészszszámú számítástechnika alkalmazásával ugyanis a csúcsok (szélső értékek) pontos helyének meghatározása gondot okoz, mert a csúcs többnyire két egészszszám között helyezkedik el. Ennek a problémának megoldására született meg a 80-as években a *Branch & Cut* (szétválasztás és metszés) program²². Ez lehetővé teszi, hogy az eredménytér burkoló hálójának csúcsai közelében, síkokkal metszéseket végezzünk, melyeknek segítségével az egészszszámú eredmények a felszínre kerülve értékelhetőkké válnak. Így mód van a helyek, értékek pontos meghatározására. A letapogatással végzett optimum keresés során gyakran előfordul, hogy a rendszerben több helyi minimum is jelentkezik. Utólagos összehasonlító eljárás segítségével dönthető el, melyik a teljes rendszerre érvényes „globális” minimum.

Ma már a vegyes egészszszámú nem lineáris rendszerek optimalizálásának számítógépes programja megoldottnak tekinthető. A jelenleg folyó kutatások most főleg arra irányulnak, hogy az optimalizálás, elszakadva a fent leírt egymásra épülő algoritmusok alkalmazásától, egységes szerkezetű, globális szemléletű, egyszerűsített logikai program alkalmazásával legyen megvalósítható.

Megjegyzés

A két részben megírt irodalmi összefoglaló, amint az a címdalán levő dedikációból kitűnik, elsősorban azzal a céllal készült, hogy megemlékezzünk Fonyó Zsolt^{25,26} kollégánk úttörő munkásságáról. Ugyanakkor a megírás készítéséhez az a szándék is hozzájárult, hogy a hazai kémikus társadalom figyelmét ráirányítsa azokra a legutóbbi évtizedekben világszerte elért eredményekre, melyek messze túlmenően a vegyipar napi gondjainak megoldásán, elsőrendű szerepet játszhatnak az egész emberiség megmaradását fenyegető katasztrófák elhárításában, és jövőnk alakulásának tervezésében is.

A Teremtő sok millió évvel ezelőtt alakította ki csodálatos Világunkat, melyet az emberiség szédületes kapzsisága, egyre fokozódó mértékben zsákmányol ki és tesz tönkre. A Világ szépségének fenntartása és megtartása mindannyiunk érdeke és felelőssége is.

Hivatkozások

- Inczédy, J. *Magyar Kémiai Folyóirat* **2007**, *113*, 13-19.
- Kazantzi, V.; El-Halwagi M. M. *Chem. Eng. Prog.* **2005**, *101*, 28-37; www.cepmagazine.org (2005.Aug.)

- Foo, D. C.Y.; Kazantzi, V.; El-Halwagi, M. M.; Mannan, Z.A. *Chem.Eng.Sci.* **2006**, *61*, 2626-2642.
- Saling, P.R. (BASF, Ludwigshafen): Strategies for sustainable development of chemical synthesis with the eco-efficiency analysis and see-balance, 1st European Chem. Congress, Budapest, 30. 8. 2006.
- Horváth, I.T.; Rábai, J. *Science* **1994**, *266*, 72.
- Inczédy, J. *Analytical Application of Ion Exchangers*, Pergamon Press, Oxford, **1966**, p.82.
- Erdey, L.; Inczédy, J.; Markovits, I. *Talanta* **1980**, *4*, 25;
- Chem Files*, Vol. 1.. No 7. www.sigma-aldrich.com/fluka 2006.
- Grossman, I.E.; Caballero, J.A.; Yeomans, H. *Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems* (Department of Chemical Engineering, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA 15213, USA, PDF copy, 2003.
- NIST: Guide to Available Mathematical Software.<http://gams.nist.gov >
- Dantzig, G.B. *Lineare Programmierung und Erweiterungen*. Springer Verlag, Berlin, **1966**.
- Doerffel, K.; Eckschlager, K. *Optimale Strategien in der Analytik*, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, **1981**.
- Land, A.H.; Doig, A.G. *Econometrica* **1960**, *28*, 497-520.
- Sager, S. *Numerical methods for mixed-integer optimal control problems* (Thesis), Interdisciplinary Center for Scientific Computing, Universität Heidelberg, **2005**, PDF copy
- Nemhauser, G.; Wolsey, L. *Integer and combinatorial optimization*, Wiley Interscience, **1988**, ISBN 0-471-35943-2.
- Pintér, J.D. *GAMS/LGO Nonlinear solver suite: key features, usage, and numerical performance*, **2006**, http://www.google.hu/search?hl=hu&q=Mixed-Integer+Nonlinear+Programing%2C+Pruessner%2C+GAMS&btnG=Google+keresés&meta=
- Venkatasubramanian, V.; Politis, D.N.; Patkar, P.R. *AICH Journal* **2006**, *52*, 1004-1009.
- Fonyó, Zs. *Integrált vegyipari rendszerek folyamatszintézise*. Akadémiai lev.tag, székfoglaló előadás, 1999.2.16.
- Fonyó, Zs. *A vegyipari folyamat tervezés koncepcionális kihívásai*. Akadémiai r.tag, székfoglaló előadás, 2004.11.16.

The essential role of the chemical engineering science in the sustainable development, Part 2.

Following the descriptions of the optimisation procedures of the economic energy and material consumption in the chemical technological processes, introduced in the first part of the article, the optimisation of the property controlled processes are presented. The property based process investigations received a high priority and interest in our time, The reason of this occurrence is not only due to the fact, that the properties of the by-products and wastes have prominent roles in the damage of health and of the environment, but due to the increasing industrial production of the very important, new type, material engineering products, which of values are characterised by their special, (sometimes very sophisticated) functional properties.

If one can find correct relation, or relations, between the characteristic property of the substance, and also some connected characteristic measurable quantities, and we know the threshold limit of the acceptable mixing rate of two fluids, the extent of the exchange of properties, between the two matching material streams, can be controlled. The Pinch analysis can be used successfully, very similarly to those cases, where the energy and material integration's were carried out. From the results of the analysis the thermodynamically allowed balance of the property either in the production or in the regeneration processes can be estimated. As examples, taken from the literature, the reuse of mixed solvents,

originating from degreasing processes of metal surfaces, and the propriety improvement of the recirculated, faulty, fibre products in the paper making process are introduced. In the first case, at the reuse of solvent mixture, Reid vapour pressure measurements were used for controlling the property. In the paper making process the optical reflectivity of the pulp stream was measured, which is a key property of the paper product.

In the Appendices new type chemicals (ionic liquids), and new type chemical systems (fluorous and phase transfer) are introduced. By their use the waste water and waste solvent formations, which are very usual at the traditional synthesis works, can be removed. The expensive, energy consuming regeneration's of solvents can be saved. In the fluoruos phase systems the homogenic phase, preferred for the reaction, and the two phase state preferred for the

separation step, can be changed by temperature at will. In the phase transfer catalysis the catalyst is transferred to the reaction phase by a cationic reagent, being soluble in both phases,.

In the last paragraph, the essential mathematical programmes of optimisation, developed in the very last time, are discussed, and their development and their use briefly explained. Since in many cases, units with very different operation principle may be chosen into the structure of the technological systems, and the discrete and continuous variables are present simultaneously, it is indispensable the use of mixed integer non linear programmes (MINLP). Today, thanks to the fantastic high developments of the informatics, there are many programmes available for the prediction of the optimal configurations and operations of the planned, chemical engineering process systems.