

Bevezetés

A vegyipari termeléssel egyidős az a törekvés, amely a felhasznált alapanyagok, víz és energia minimalizálására, egyúttal a környezeti terhelés és a gyártási költségek csökkentésére irányul. Az idők folyamán nemcsak a konkrét célokban következett be hangsúlyeltolódás, hanem a tevékenységi terület és az alkalmazott eszközök megválasztásában is.

Az elmúlt évtizedben került előtérbe a vegyipari folyamatok struktúrájának optimalizálásában – a folyamatszintézisben – rejlő lehetőségek kihasználása, ahol a hangsúly nem az egyes műveleti egységek hatékonyságának növelésén, hanem az egyes berendezések lehető legjobb kapcsolatának kialakításán van.

A Veszprémi Egyetem Számítástudomány Alkalmazása Tanszéke és a Nitrokémia Rt. 1996–97 során vett részt egy olyan, a PHARE és az OMFB által egyaránt támogatott programban, amelynek fő célja ipari folyamatok víz- és energiafelhasználásának együttes minimalizálása volt. Ennek keretében a Nitrokémia Rt. egyik fő termékének, a nitrocellulóznek előállítását vizsgáltuk, melyet kiváló minőségben, de fajlagosan nagy víz- és energiafelhasználással készítenek.

Számos megközelítés létezik a folyamatok hulladékki-bocsátásának minimalizálására. Ezek a felhasznált anyagok mennyiségének a csökkentésével, recirkuláció alkalmazásával, a hulladék elválasztásával, a hulladék koncentráálásával és a hulladék kiváltásával foglalkoznak [1]. Az összes megközelítés azonban elsődlegesen a folyamat struktúrájától függ. Például különféle folyamatokhoz különböző hulladékkezelő rendszerre lehet szükség még akkor is, ha ugyanazt a terméket állítják elő. Így a hulladék-minimalizálási lehetőségek megtervezése nem választható el a terméket előállító folyamattól, mint ahogyan ezt hagyományosan gyakran megteszik. Ráadásul bizonyos hulladékminimalizáló módszerek (pl. felhasznált anyagok csökkentése, recirkuláció, hulladék-szétválasztás) szoros kapcsolatban állnak egymással, tulajdonképpen kölcsönösen függenek egymástól. Ezért a felhasznált anyagok mennyiségnek a minimumát általában nem lehet elérni anélkül, hogy recirkulációval, vagy hulladék-elválasztással ne foglalkoznánk. Ebből következik, hogy a folyamat-tervezés és hulladékminimalizálás összes lépését integrálni kell egy konzisztens módszerben. Ez az integráció azonban rendkívül nehézé teszi a folyamatszintézis már amúgy is komplex feladatát. Ezért egy nagyon hatékony

és matematikailag szigorú technikára van szükség ahhoz, hogy a problémát megoldjuk.

A matematikai programozásnak a különböző szintézis-problémákra való alkalmazására irányuló erőfeszítések biztató eredményekkel szolgáltak, azonban számos kérdés megválaszolatlan maradt a szakirodalomban ahhoz, hogy egy nagyméretű ipari folyamat szintézise megoldható legyen. A probléma bonyolultságának fő forrása annak kombinatorikus jellege. Ezt példával szemléltetjük.

Tegyük fel, hogy 35 különböző műveleti egységből választhatunk egy adott termék előállítását végző folyamat tervezésekor. A 35 műveleti egységből – figyelmen kívül hagyva a létrehozott struktúra megvalósíthatóságát – $2^{35-1} \approx 34$ milliárd féle kombinációt választhatunk, ahol minden esethez egy-egy struktúra tartozik. Manuálisan, vagy heurisztikával lehetetlen megvizsgálni ezeket a kombinációkat, mert könnyen előfordulhat, hogy ugyanazt a kombinációt ismétljük, vagy kizárjuk az optimális kombinációt. Ennélfogva a szisztematikus folyamatszintézis a kombinatorikus matematika alapján képzelhető el.

Friedler Ferenc és munkatársai a folyamatstruktúrák kombinatorikus tulajdonságainak vizsgálata alapján alapvetően új módszert dolgoztak ki folyamatszintézisre, így lehetővé vált korábbi algoritmusok komplexitásának drasztikus csökkentése [2, 3, 4, 5] és eddig megoldhatatlan feladatok megoldására nyílt lehetőség. Így például a fent említett 34 milliárd kombinációból csak 3465 eset kell megvizsgálni úgy, hogy az optimalitás garanciáját továbbra is megőrizzük. A módszert a nitrocellulóz gyártási folyamat víz- és energiafelhasználásának minimalizálásával szemléltetjük.

A nitrocellulózgyártás folyamatának ismertetése

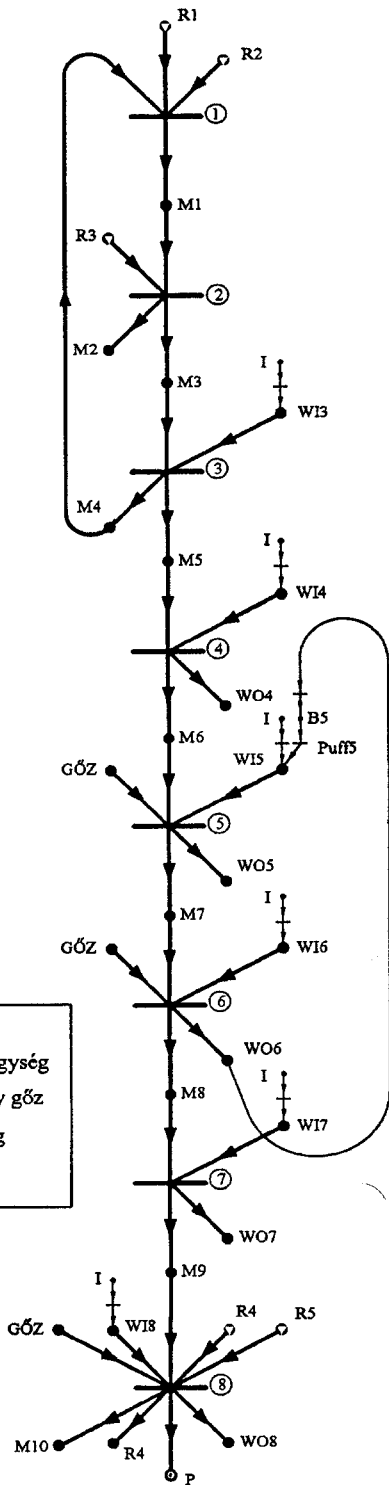
A nitrocellulózt cellulózból állítják elő. A gyártási folyamat főbb lépései a nitrálás, savtalanítás, viszkozitás-beállítás, formázás (alkoholos ill. zselatinált forma).

A finomra vágott cellulózt folytonos üzemi reaktorban nitrálják, a képződött nitrocellulózt folytonos üzemi centrifugán választják el a nitrálósavtól; a technológia ezt követő lépései szakaszos üzemi berendezésekben mennek végbe.

A szálás szerkezetű nitrocellulóz transzportja, tökéletes savtalanítása nagymennyiségű vizet igényel, továbbá az autoklavozás és oldószer-lehajtás gőzfogyasztása magas, így ezek együttes csökkentése a jó termékminőség megőrzése mellett jelentősen javíthatja a termék előállítási költségét.

A nitrocellulózgyártás folyamatának egyszerűsített P-gráfja az 1. ábrán látható. A műveleti egységek vízbetáp-

* Veszprémi Egyetem, Számítástudomány Alkalmazása Tanszék, Veszprém
** Nitrokémia Rt., Fűzőgyártelep



1. ábra. A nitrocellulózgártás P-gráfja

lálását WI, míg vízkibocsátását WO jelöli. Az ábrán az I ipari vizet jelent, míg a Puff jelű műveleti egység puffertartályt reprezentál.

A víz- és energiafelhasználás optimalizálásának matematikai modellje

Az optimális víz- és energiafelhasználást biztosító rendszer meghatározásához az alábbi feltételeket kell figyelembe venni:

- (i) különböző minőségű és mennyiségű víz generálódik a folyamat különböző helyein;
- (ii) ezen vizek hőmérséklete eltérő;
- (iii) a műveleti egységek közötti távolság különböző, ami a csővezetéképítés költségét befolyásolja;
- (iv) a folyamat félfolytonos, ezért egy műveleti egységhez puffertartályt kell beépíteni, ha recirkuláltatott vizet használ fel;
- (v) adott műveleti egység a rendelkezésre álló különböző minőségű vizek közül csak bizonyosakat fogadhat;
- (vi) ipari víz valamennyi műveleti egységnél használható a teljes igény vagy egy részének kielégítésére, ha a teljes vízigényt ipari vízzel biztosítjuk, akkor puffertartályra nincs szükség;
- (vii) a recirkuláltatott víz melegítése közvetlen gőzbevezetéssel történik, ha szükséges;
- (viii) a célfüggvény magában foglalja az ipari víz és energia (gőz) költségét, a működési költséget és az átépítés beruházási költségét (pl. új csővezetékek, puffertartályok, szivattyúk stb.).

A 2. ábra mutatja a technológiailag lehetséges vízviszszavezetések tartalmazó maximális struktúrát. Ez a P-gráf tartalmazza az összes lehetséges kapcsolatot, így ennek egy részgráfja szolgáltatja a fentebb ismertetett matematikai modellnek megfelelő költségoptimalis rendszert.

Egy ipari folyamatban több milliárd lehetséges konfiguráció létezhet arra, hogy a különböző minőségű anyagok keletkezési és felhasználási helye között megteremtjük a kapcsolatot. Ilyen nagyméretű feladat optimalis megoldásának megtalálására csak nagyon hatékony módszer képes. Az itt bemutatott kombinatorikus módszer képes megoldani ilyen méretű feladatokat, nagy hatékonysággal megtalálja a globális optimumot, ráadásul a közel optimális megoldások megadására is alkalmazható.

A (i)-(viii) feltételeket és célokat az alábbi modellel fejeztük ki.

$$\begin{aligned} \min & \sum_j \sum_{i \in S_j \cup U_j} F_{ij} (T_j^r - T_i^a) P_{\text{Steam}} + \sum_{i=1}^n P_i^a F_i^a + \\ & + \sum_j (F_j^r t_j^{\text{batch}} P^{\text{buff}} + P_{\text{fc}}^{\text{buff}} y_j) / \text{BH} + \\ & + \sum_j \sum_{\{ij | i \in S_j \cup U_j, P_i^a = 0\}} (P_{ij}^{\text{Pipe}} y_{ij}) / \text{BH} \end{aligned} \quad (1)$$

$$F_j^r \leq K * y_j, j = 1, 2, \dots, m \quad (2)$$

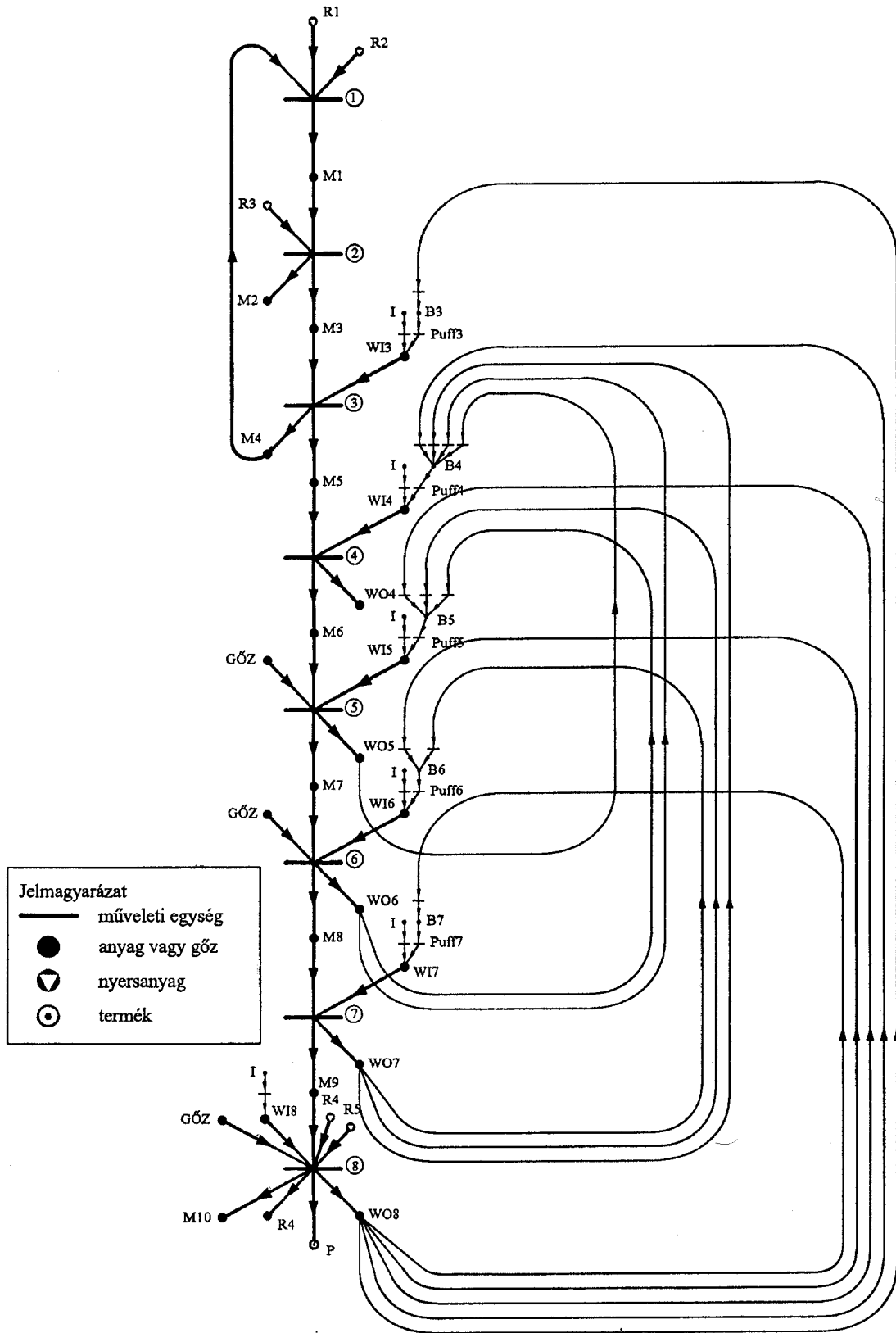
$$\sum_j F_{ij} \leq F_i^a, \forall i \in S_j \cup U_j, j = 1, 2, \dots, m \quad (3)$$

$$\sum_{i \in S_j \cup U_j} F_{ij} = F_j^r, j = 1, 2, \dots, m \quad (4)$$

$$y_j \in \{0, 1\}, y_{ij} \in \{0, 1\} \quad (5)$$

$$y_j \geq y_{ij}, i \in S_j \cup U_j, P_i^a = 0 \quad (6)$$

ahol



2. ábra. A nitrocellulózzgyártás maximális struktúrája a lehetséges visszavezetések figyelembevételével

$F_1^a, F_2^a, \dots, F_n^a$	csak nulla vagy egy lehet, azaz bináris változók, amelyek a puffertartályok ill. az összeköttetések létezését vagy hiányát fejezik ki. A (6) összefüggés szerint puffertartály szükséges minden olyan esetben, amikor legalább egy visszavezetett (egy másik műveleti egységből származó) vizet használ egy adott műveleti egység.
$T_1^a, T_2^a, \dots, T_n^a$	a rendelkezésre álló különböző minőségű vizek időegységre eső mennyisége;
$T_1^b, T_2^b, \dots, T_n^b$	a rendelkezésre álló különböző minőségű vizek hőmérséklete;
$F_1^r, F_2^r, \dots, F_m^r$	a vízbetáplálás szükséges árama;
$T_1^r, T_2^r, \dots, T_m^r$	a vízbetáplálás szükséges hőmérséklete;
F_{ij}	az i műveleti egység – amelyből víz lép ki (forrás) – és a j műveleti egység – amely vizet használ föl (nyelő) – közötti áram;
S_j	$S_j = \{i: \text{azon } i \text{ források, amelyek a } j \text{ nyelőhöz felhasználhatók}\}$, $j = 1, \dots, m$;
U_j	$U_j = \{i: \text{azon } i \text{ források, amelyeket a } j \text{ nyelőhöz fel kell használni}\}$, $j = 1, \dots, m$;
P_{ij}^{Steam} P_{ij}^{buff}	gőzköltség; a puffert beruházási költségének változó része;
P_{ic}^{buff} P_i^a P_{ij}^{pipe}	a puffert beruházási költségének fix része; az i forrásból származó víz költsége; cső és szivattyú költsége az i forrás és j nyelő között;
t_j^{batch} B H y_j	a j műveleti egység ciklusideje; megtérülési idő években; munkaórák száma évente; bináris változó, ami a j műveleti egység pufférének létezését vagy hiányát fejezi ki. (Ha $y_j = 1$, akkor a puffertartályra szükség van, $y_j = 0$ esetén pedig nem);
y_{ij}	bináris változó, ami jelzi az i forrás és a j nyelő összeköttetésének létezését vagy hiányát;
K	megfelelően nagyra választott pozitív szám.

Az alkalmazott módszer

A kifejlesztett módszer az ún. P-gráf reprezentáción [2], a „decision-mapping”-en [4], kombinatorikus algoritmusokon [3] és a branch-and-bound módszerrel alapul [5].

A branch-and-bound algoritmusok a részproblémák sorozatát generálva és megoldva határozzák meg a feladat optimális megoldását úgy, hogy az egyes részproblémákhoz a költségfüggvény egy alsó korlátja szükséges. Mivel az alap branch-and-bound algoritmus túlzottan nagyszámú részproblémát generál a szintézisfeladatokra, hatékonysága kicsi. Ennek kiküszöbölésére fejlesztették ki szintézisfeladatokra a gyorsított branch-and-bound módszert [5], amely alkalmas a nagyon nagy méretű feladatok megoldására. Ez az algoritmus a szintézisfeladat megoldásakor minimalizálja mind a branch-and-bound eljárás részproblémáinak a számát, mind pedig a méretét. Az alap branch-and-bound algoritmushoz képest a gyorsítás több nagyságrendnyinek bizonyult.

Az itt bemutatott nitrocellulózgyártási folyamat a szemléltetést szolgálja, termelési adatait a valósághoz képest megváltoztattuk. Ezek a változások azonban nem érintik a feladat bonyolultságát és megoldhatóságát. Azért, hogy a működési paraméterek változásának az optimális megoldására való hatását megvizsgáljuk, az optimalizációt különböző paraméterkészletekkel hajtottuk végre. Az összehasonlítás kedvéért és azért, hogy biztosítsuk a további megfontolásokon alapuló választás lehetőségét, a négy legjobb megoldást határoztuk meg minden egyes esetben.

Az 1. és 2. táblázat tartalmazza a vízrecirkulációs rendszer négy legjobb megoldását két esetben. Az első esetben a WO8 jelű víz hőmérséklete 20 °C, a második esetben 40 °C. A 3. táblázat összefoglalja a különböző megoldások költségeit, ahol a költség magában foglalja a beruházási költséget, működtetési költséget, energia költséget, valamint az ipari víz költségét.

A 3. és a 4. ábra az optimális eredménystruktúrát mutatja be 20 °C-os illetve 40 °C-os hőmérsékletű WO8 jelű víz esetén. Megfigyelhető, hogy mind az optimális struktúra, mind az optimális költség értéke erősen függ a WO8 jelű víz hőmérsékletétől.

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a PHARE-nak (H 9305-02/1998) és az OMFB-nek (96-97-69-1175) a projekt megvalósításához nyújtott támogatást.

A célfüggvényben a

$$\left(\sum_j \sum_{i \in S_j \cup U_j} F_{ij} (T_j^r - T_i^a) P_{\text{Steam}} \right) \quad \text{tag a melegítés, a}$$

$$\left(\sum_{i=1}^n P_i^a F_i^a \right) \quad \text{tag a felhasznált vizek, a}$$

$$\left(\sum_j (F_j^r t_j^{\text{batch}} P_{ic}^{\text{buff}} + P_{ic}^{\text{buff}} y_j) / BH + \sum_j \sum_{\{i: i \in S_j \cup U_j \& P_i^a = 0\}} (P_{ij}^{\text{pipe}} y_{ij}) / BH \right) \quad \text{tag pedig a beruházási költségét fejezi ki.}$$

A (2) összefüggés biztosítja azt, hogy a célfüggvényben bináris és folytonos változó szorzatát nem kell szerepeltetni. Ha $y_j = 0$, akkor (2) alapján $F_j^r = 0$, egyébként nincs korlátozva az értéke. A (3) egyenlőtlenség szerint egy adott forrásból maximum annyi vizet használhatunk fel, amennyi az adott forrásból rendelkezésre áll. A (4) egyenletnek megfelelően egy adott vízfelhasználó műveleti egységhez összesen annyi vizet vezetünk a különböző forrásokból, amennyire az adott műveleti egységnek szüksége van. Az (5) korlát azt fejezi ki, hogy y_j ill. az y_{ij} értéke

**A legjobb vízrecirkulációs rendszerek összehasonlítása
(a WO8 jelű víz hőmérséklete 20 °C)**

Műveleti egység száma	Vízbetáplálás azonosítója	A vízbetáplálás forrása				
		Optimális megoldás	2. legjobb megoldás	3. legjobb megoldás	4. legjobb megoldás	Eredeti rendszer
3	WI3	WO8	WO8	WO8	WO8	I
4	WI4	WO5	WO5	WO5	WO5	I
5	WI5	WO6, WO7	WO6, WO7, WO8	WO6, WO7	WO6, WO7	I, WO6
6	WI6	I	WO7	WO7, WO8	I, WO7	I
7	WI7	I, WO8	I	I	I, WO8	I
8	WI8	I	I	I	I	I

2. táblázat

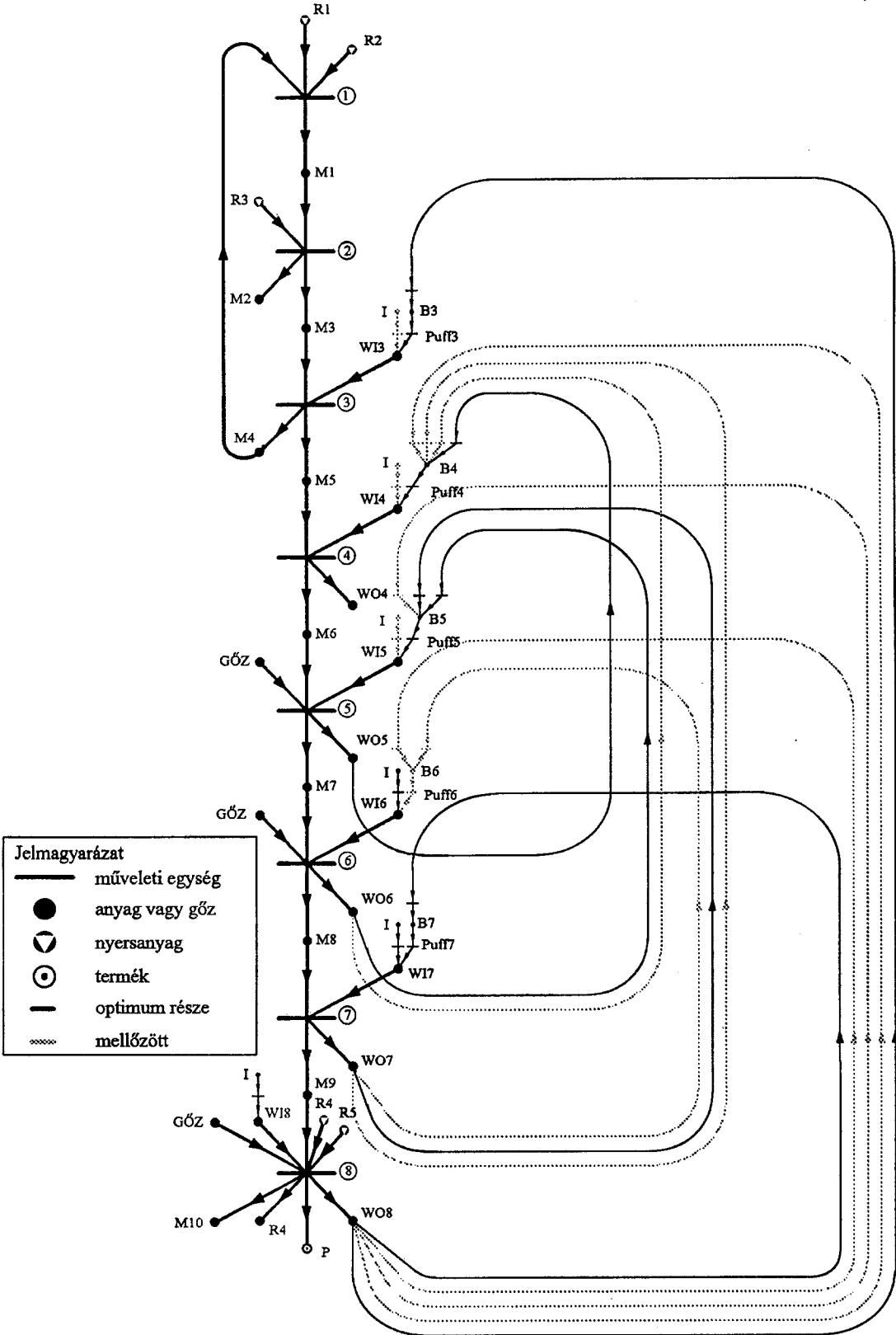
**A legjobb vízrecirkulációs rendszerek összehasonlítása
(a WO8 jelű víz hőmérséklete 40 °C)**

Műveleti egység száma	Vízbetáplálás azonosítója	A vízbetáplálás forrása				
		Optimális megoldás	2. legjobb megoldás	3. legjobb megoldás	4. legjobb megoldás	Eredeti rendszer
3	WI3	I, WO8	I	I, WO8	I	I
4	WI4	WO7	WO7	WO5	WO5	I
5	WI5	WO6, WO8	WO6, WO8	WO6, WO8	WO6, WO8	I, WO6
6	WI6	WO8	WO8	WO8	WO8	I
7	WI7	I	I, WO8	I	I, WO8	I
8	WI8	I	I	I	I	I

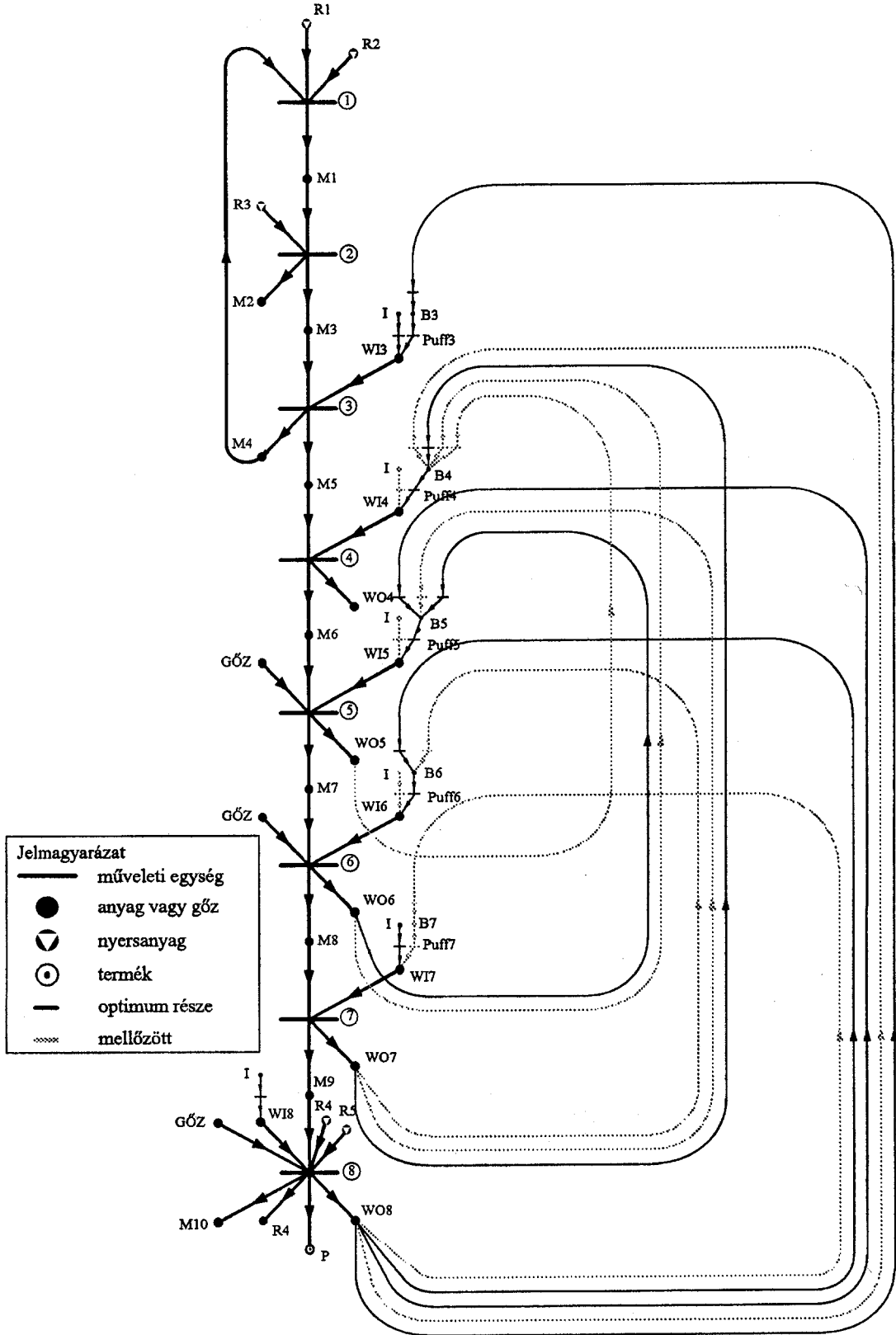
3. táblázat

**Különböző vízrecirkulációs rendszerek költségeinek összehasonlítása
(Ft/t termék)**

Megoldások	A víz-recirkulációs rendszer költsége 20 °C hőmérsékletű WO8 jelű víz esetén	A víz-recirkulációs rendszer költsége 40 °C hőmérsékletű WO8 jelű víz esetén
Optimális megoldás	8869,30	7939,50
Második legjobb megoldás	8872,65	7939,50
Harmadik legjobb megoldás	8872,65	7939,50
Negyedik legjobb megoldás	8872,70	7939,50
Eredeti rendszer	10110,40	



3. ábra. A 2. ábrán bemutatott struktúrából származtatott optimális megoldás 20 °C hőmérsékletű WO8 jelű vízkimenet esetén. Az optimális költség értéke 8869,30 Ft/t termék



4. ábra. A 2. ábrán bemutatott struktúrából származtatott optimális megoldás 40 °C hőmérsékletű WO8 jelű vízkimenet esetén.
Az optimális költség értéke 7939,50 Ft/t termék

- [1] R. W. Rittmeyer: *Chemical Engineering Progress*, 87 (5), 56–62 (1991).
- [2] F. Friedler – K. Tarjan – Y. W. Huang – L. T. Fan: *Axioms and Theorems. Chem. Engng. Sci.*, 47, 1973–1988 (1992).
- [3] F. Friedler – K. Tarjan – Y. W. Huang – L. T. Fan: *Computers Chem. Engng.*, 17 (9), 929–942 (1993).

- [4] F. Friedler – J. B. Varga – L. T. Fan: *Chem. Engng. Sci.*, 50 (11), 1755–1768 (1995).
- [5] F. Friedler – J. B. Varga – E. Fehér – L. T. Fan: *Combinatorially Accelerated Branch-and-Bound Method for Solving the MIP Model of Process Network Synthesis*, In: *Nonconvex Optimization and Its Applications* (Eds: C. A. Floudas and P. M. Pardalos), pp. 609–626, Kluwer Academic Publishers, Norwell, MA, U.S.A., 1996.

Irodalomgyűjtés lezárva: 1998. december

ÖSSZEFOGLALÁS

Halász László – Rajnai Kálmán: Nitrocellulózüzem víz- és energiafelhasználásának minimalizálása kombinatorikus módszerrel

Az utóbbi években előtérbe került a vegyipari folyamatok strukturális optimalizálásának kérdése, ahol a hangsúly nem az egyes berendezések hatékonyságának növelésén van, hanem a rendszer optimális működtetésén. Ez egy nagyon összetett folyamat-szintézis feladat, amely a probléma kombinatorikus jellege miatt csak hatékony, matematikailag szigorú eszközökkel oldható meg.

Friedler és munkatársai alapvetően új módszert dolgoztak ki folyamatszintézisre, amelyet a nitrocellulóz gyártás víz- és energiafelhasználásának minimalizálása példáján mutattunk be. Az optimalizáció eredményeképpen olyan vízrecirkulációs rendszert javasoltunk, amely jelentős víz- és energiafelhasználás megtakarítást eredményez az eredeti folyamatokhoz képest.

[Magy. Kém. Lapja, 55, 134 (2000)]

SUMMARY

L. Halász – K. Rajnai: Minimization of Water and Energy Consumption of Nitrocellulose Plant Using Combinatorial Method

In the last several years the question of structural optimization of chemical industrial processes has become more emphasized, where the emphasis is on the optimal operation of the system instead of increasing efficiency of the operating units. This is a very complex process synthesis problem, which can be solved by effective, rigorous mathematical tools because of the combinatorial nature of the problem.

Friedler et al have developed a basically new method for process synthesis problems, which is demonstrated by example of minimization of water and energy consumption of nitrocellulose production. Corresponding to the result of optimization such a water recycling system was proposed, which results in heavy water and energy consumption reduction in comparison to the original process.

Szemle ... Szemle ... Szemle ...

Mikrohullámú szárító kemence

A *Linn High Therm GmbH* közlése szerint az új tervezésű, szabadalmaztatott rendszer különböző anyagok folyamatos szárítására, ill. melegítésére alkalmas. A standard modul mikrohullámú körszáritó kemence három átmérőben (490, 640 és 950 mm), 330 mm-es zónahosszúságban áll rendelkezésre. A csatornaszélesség és magasság elérheti a 600x300 mm-t. A mikrohullám teljesítménye 800 W, 1.200 W és 1.900 W mindegyik zónában (összesen max. 10 kW). Lehetőség van a magnetronok teljesítményének 15-100 % határok közötti folyamatos szabályozására. Az

egység mérete illeszthető a termelési folyamathoz. (*Internet cím: www.linn.de*)

Energiatakarékos váltóáramú motormeghajtás

A finn *ABB Industry Oy* olyan váltóáramú hajtás (ACS 611) gyártását kezdte meg, amely egyesíti a pontos fordulatszám vezérlést és a közvetlen nyomatékvezérlést (DTC) a visszatápláló féküzemmel olyan energia-visszatápláló alkalmazásoknál, mint a 11 kW és az 55 kW közötti teljesítménnyel rendelkező daruk, centrifugák és csévéllő gépek. Az ACS 611 két áramátalakítót tartalmaz közös házban elhelyezve.

Egy aktív inverter helyettesíti a szokásos diódás egyenirányítót a bemeneti váltóáramú oldalon, csökkentve a felharmonikusokat és biztosítva a szinuszos áramellátást. Az extra inverter lehetővé teszi továbbá a teljes körű négy-negyed-es működést és a kétirányú energiaáramlást, ami azt jelenti, hogy a hajtás vissza tudja táplálni a fölös energiát a féküzemű motortól az elektromos rendszerbe. Az energia megtakarítás jelentős olyan alkalmazásoknál, ahol az energia a fékező motortól visszavezethető az elektromos hálózatba, úgy, hogy azt más üzemi alkalmazások használják fel, és ne menjen veszendőbe.

RL