

A kutatás irányai és eredményei három fő osztályba sorolhatók.

1. Megvalósíthatósági vizsgálatok

A kutatás egyik fő iránya a különféle folyamatos és szakaszos (de főleg szakaszos) extraktív és reaktív desztilláló folyamatok megvalósíthatóságát, az alkalmas változatok meghatározását, a paraméterek (refluxarány, visszaforralási arány, extraháló ágens táparány) alkalmas tartományának meghatározását célozta.

A különféle oszlopfajták (folyamatos, szakaszos dúsitó, szakaszos kiforraló, középtartályos oszlop), illékonyági viszonyok (nehéz, könnyű és közbenső forráspontú kinyerőszer, minimális és maximális forráspontú azeotrop vagy közeli forráspont azeotrop nélkül, a kinyerőszerrel képzett újabb azeotrop pontok), a konkrét elegyek és kinyerőszer homogén és heterogén folyadékfázisok, egyensúlyi, egyszerű és komplex reakciók, homogén és heterogén katalízis, kinyerőszer bevezetése egyik vagy másik oszlopszakaszba vagy tartályba a megvizsgálandó esetek sokaságát alkotják. Az egyes esetekhez egyedi, illetve ezek kombinációhoz általános vizsgálati módszereket dolgoztunk ki annak megállapítására, hogy az adott elegy és kinyerőszer esetén az adott konfiguráció megvalósítható-e, és ha igen, akkor milyen paraméter-tartományban, milyen várható eredménnyel.

- Módszert dolgozunk ki a szakaszos kiforralóban lejátszódó különféle szakaszos extraktív desztilláló eljárások megvalósíthatósági vizsgálatára, a limitáló paraméterek meghatározására.
- Kidolgozzuk a nemreaktív extraktív desztillációban sikerrel alkalmazott differenciálegyenlet-modell analog változatát az egyensúllyal vezérelt reaktív desztilláció esetére.
- A homogén folyadékfázisú folyamatos extraktív desztilláció műveleti tartományainak felderítésére szolgáló gyors kereső eljárást dolgozunk ki, amivel az egyes szétválasztási feladattípusok esetében eldönthető, hogy a művelet hány (és milyen) oszlopszekcióval valósítható meg.
- Módszert dolgoztunk ki folyamatos heterogén extraktív desztilláció megvalósíthatósági vizsgálatára, az alkalmas oszlop-konfigurációk és paraméter-tartományok meghatározására.
- Szakaszos extraktív desztilláló rendszerek üzemindítási stratégiáit modelleztük és időbeli hatását szimuláltuk, illetve az időbeli szimuláció számítási eredményeit igazoltuk félüzemi kísérletekkel.
- Konzekutív egyensúlyi reakciórendszerre is kidolgoztuk a szakaszos reaktív desztilláció megvalósíthatósági analízisének módszerét, és azt alkalmaztuk a dietilkarbonát szintézis esetében.
- A szakaszos reaktív desztillálás különféle hibrid eseteinek megvalósíthatósági elemzésére alkalmas (dúsitó - kihajtó - középtartályos kombinációk, katalizátor a különféle oszlopszekció-kombinációkban) általános módszert dolgoztunk ki és alkalmaztunk öt-komponensű, konzekutív egyensúlyi reakció rendszerére.

2. Optimalizáló modellek és módszerek

A kutatás egy másik fő iránya olyan modellek és megoldó algoritmusok fejlesztése volt, amivel szétválasztó rendszerek optimális konfigurációja és optimális tervezési paraméterei sikerrel meghatározhatók. Ez elsősorban olyan matematikai programok (MLP és MINLP modellek) kidolgozását jelenti, melyek a vizsgált folyamatot vagy rendszert kellő mélységben modellezik, de ugyanakkor alkalmas megoldó motorral személyi számítógépen elfogadható idő alatt megoldhatók, és a kapott eredmények az alkalmazás szempontjából értékelhetők.

A fő nehézség részben a szétválasztó eljárások termodinamikai modelljeinek erősen nemlineáris és nemkonvex alakjából, részben a lehetséges változatok rendszerének kombinatorikai bonyolultságából ered. Például a pára-folyadék egyensúlyok leírására alkalmazott egyszerű módosított Raoult-Dalton összefüggésben szerepel az aktivitási együttható, aminek összetétel- és hőfokfüggését valamelyik szabadentalpia-többlet modellel, pl. Wilson, NRTL vagy UNIQUAC modellel írhatjuk le, ezek alakja azonban többkomponensű elegyek esetében szokatlanul riasztó a megszokott MINLP modellekben. Ha a desztilláló oszlopok lehetséges kapcsolásai, a fokozatszámok és a betáplálási helyek változók egy modellben, akkor ez részben kombinatorikai problémát jelent, részben pedig az a technikai problémát vetik fel, hogyan kezeljük a potenciálisan jelen levő, de a megoldásban nem szereplő részek anyag- és energiaáramait és egyéb jellemzőit, összefüggéseit. A kidolgozott módszerekkel nyert tapasztalatokat a vegyipar más, rokon strukturális optimalizálási problémáinak megoldására is alkalmaztuk.

- Az extraktív desztilláció oldószerkiválasztással kapcsolt struktúra-szintézisére alkalmas matematikai programozási modellt dolgoztunk ki.
- Az extraktív desztilláció oldószerkiválasztással kapcsolt struktúra-szintézisére kidolgozott matematikai programozási modellt sikerrel alkalmaztuk a folyamat műszaki és gazdasági szempontú analízisére.
- Komplex desztilláló rendszerek szintézisére alkalmas új MINLP modellt dolgoztunk ki.
- Az Outer Approximation algoritmust úgy módosítottuk, hogy az irodalomban fellelhető módszereknél lényegesen hatékonyabban alkalmazható a komplex desztilláló rendszereket leíró MINLP modellek megoldására.
- Alkalmas modellt készítettünk, és optimalizáltuk tengervíz sótanítására szolgáló különféle komponens-szétválasztó berendezések elhelyezését sík tartományon, topográfiai korlátozások figyelembe vétele mellett.
- A vegyipari rendszerek ütemezési feladainál előforduló speciális követelményeket elemezve az ütemezési feladatok új osztályozását adtuk meg, és megoldási módszert fejlesztettünk ki a speciális követelmények kielégítésére.

- A komplex desztilláló rendszerek optimális tervezésére kidolgozott OA algoritmust vegyipari komplex ütemezési feladatok optimalizálásába is beágyaztuk, a rolling horizon módszer alapelveinek rolling operations szemléletű alkalmazásával.
- Ugyancsak az ütemezés tárgykörében speciális vegyipari - élelmiszeripari feladatokra jellemző korlátok kezelésére alkalmas matematikai programokat dolgoztunk ki, és alkalmaztuk a sörpar egy speciális problémájára.

3. Megbízható számítások

A kutatás harmadik fő iránya az egyensúlyi és desztillációs számítások megbízhatóságával kapcsolatos problémák feloldását célozta. Ez több különböző, de rokon forrásból származó bizonytalanságot jelent.

A kutatás területén ezek közül a legismertebb talán a megoszlások számításának problémája. A fázisegyensúly szükséges és elégséges feltétele a mechanikai és hőmérsékleti egyensúly mellett a szabadentalpia minimuma, de ennek meghatározásához globális (nem csak lokális) minimumot kell meghatározni. Mivel ez önmagában nehéz feladat, a megoldás nagyon időigényes, valamint mivel komplex alkalmazásokban, pl. egy desztilláló oszlopban több helyen egyszerre kell különböző eseteket számítani, a gyakorlatban csak a kémiai potenciálok azonosságát ellenőrizzük, ami az egyensúlynak szükséges, de nem elégséges feltétele. A megoldások között szerepel az ún. triviális megoldás, vagyis hogy nincs megoszlás. Előre ki nem mért esetben nem tudhatjuk, hogy a kapott megoldás helyes-e.

Ugyancsak ismert tapasztalat, hogy egy bonyolultabb oszlopszámítás néha nem konvergál. Ilyenkor nem tudjuk, hogy csak a megoldó módszer nem alkalmas, illetve gyenge volt a kezdeti becslés, vagy az adott specifikációk mellett nincs megoldása a feladatnak. Kevésbé ismert, de az is előfordul, hogy adott specifikáció mellett több megoldás is lehetséges, és ezek közül csak az egyiket találjuk meg.

A hagyományos számítások ponsorozatot generálnak, melyek konvergencia-tartománya általában ismeretlen, látszólagos konvergencia is felléphet, és jó esetben is csak egyetlen ponthoz konvergálnak. Ezzel szemben az intervallum-aritmetika különféle változatai közrefogják a megoldást és szeletelik a vizsgált tartományt, és ezáltal több megoldást is megbízhatóan szolgáltatnak. Ezek fő problémája viszont a számítási időigény. A kutatás kezdetén az intervallum-aritmetikai számítások csak nagyon kis méretű vegyipari feladatokra voltak alkalmazhatók.

- Szinguláris pontok és bifurkációs pontok megbízható felderítésére intervallum-aritmetikai módszereket fejlesztettünk ki.
- Hagyományos intervallum-aritmetikán alapuló módszert dolgoztunk ki és alkalmaztunk sikerrel batch extraktív desztilláció megvalósíthatósági tartományainak meghatározására.
- Affin aritmetikai módszert fejlesztettünk ki és alkalmaztunk sikerrel egyensúlyi egységek és azok rövid kaszkádjainak megbízható számítására.
- Az egyensúlyi kaszkádok intervallum-aritmetikán alapuló megbízható számítását úgy fejlesztettük tovább, hogy az alkalmassá vált ipari méretű (reális tényérszámú) kaszkádok számítására is elfogadható időn belül, személyi számítógépen.
- Az intervallum aritmetika affin aritmetika változatát továbbfejlesztve olyan modellt és módszert dolgoztunk ki, amivel ipari méretű extraktív desztilláló rendszert tudtunk megbízhatóan számítani. A módszer a desztilláló rendszerek adott specifikáció mellett minden megoldását kiszámítja.