

DOKTORI (PHD) ÉRTEKEZÉS

---

**Optimális hálózatok szintézise  
változtatható arányú és összetételű  
anyagáramokat feldolgozó műveleti  
egységekkel**

---

DOI:10.18136/PE.2016.614

*Szerző:*

Szlama Adrián György

*Témavezető:*

Dr. Heckl István

Pannon Egyetem

Műszaki Informatikai Kar

Informatikai Tudományok Doktori Iskola

2016

# Optimális hálózatok szintézise változtatható arányú és összetételű anyagáramokat feldolgozó műveleti egységekkel

Értekezés doktori (PhD) fokozat elnyerése érdekében

Írta: Szlama Adrián György

Készült a Pannon Egyetem Informatikai Tudományok Doktori Iskolája keretében

Témavezető: Dr. Heckl István

Elfogadásra javaslom (Igen / Nem)

(aláírás)

A jelölt a doktori szigorlaton ..... %-ot ért el

Veszprém

.....

A Szigorlati Bizottság elnöke

Az értekezést bírálóként elfogadásra javaslom:

Bíráló neve: ..... (igen /nem)

(aláírás)

Bíráló neve: ..... (igen /nem)

(aláírás)

A jelölt az értekezés nyilvános vitáján ..... %-ot ért el

Veszprém

.....

A Bíráló Bizottság elnöke

A doktori (PhD) oklevél minősítése: .....

.....

Az EDHT elnöke

# Tartalomjegyzék

Szerzői nyilatkozat	i
Tartalomjegyzék	ii
Ábrák jegyzéke	v
Táblázatok jegyzéke	vii
Kivonat	viii
Abstract	x
Abstrakt	xii
Köszönetnyilvánítás	xiv
Rövidítések	xv
<b>1. Szakirodalmi áttekintés</b>	<b>1</b>
1.1. A folyamatszintézis alapjai . . . . .	1
1.1.1. A folyamatszintézis lépései . . . . .	2
1.1.2. Szisztematikus eljárások a folyamatszintézis területén . . . . .	4
1.1.2.1. Petri-hálók . . . . .	5
1.1.2.2. P-gráfok . . . . .	8
1.2. Szétválasztási hálózatok szintézise . . . . .	9
1.2.1. SNS feladatok matematikai modellje . . . . .	13
1.3. P-gráf módszertan . . . . .	13
1.3.1. Alkalmazási területek . . . . .	14
1.3.2. Folyamathálózat-szintézis feladatok modellezése . . . . .	15
1.3.3. Struktúra reprezentáció . . . . .	16
1.3.4. Strukturálisan megengedett hálózatok . . . . .	17
1.3.5. Algoritmusok . . . . .	18
1.3.5.1. MSG - Maximal Structure Generation . . . . .	18
1.3.5.2. SSG - Solution Structure Generation . . . . .	18
1.3.5.3. ABB - Accelerated Branch & Bound . . . . .	18
1.3.6. Modellezés a módszertan segítségével . . . . .	19

<b>2. Folyamathálózatok és szétválasztási hálózatok integrált szintézise</b>	<b>21</b>
2.1. Bevezetés . . . . .	21
2.2. Komponensáram-alapú P-gráf reprezentáció . . . . .	24
2.2.1. A vizsgált SNS feladatosztály bemutatása . . . . .	24
2.2.2. A feladatosztály maximális struktúrája . . . . .	25
2.2.3. A szétválasztó hálózatok építőelemeinek átalakítása . . . . .	30
2.2.3.1. Anyagáramok . . . . .	30
2.2.3.2. Szétválasztó berendezések . . . . .	31
2.2.3.3. Keverő berendezések . . . . .	32
2.2.3.4. Megosztó berendezések . . . . .	33
2.3. Az IPSNS feladat megoldási folyamata . . . . .	34
2.3.1. A technológiák szétbontása termelő és szétválasztási folyamatokra . . . . .	37
2.3.2. A technológiákat tartalmazó maximális struktúra felírása . . . . .	38
2.3.3. Szétválasztási feladat felírása . . . . .	39
2.3.4. Szétválasztási feladat maximális struktúrája . . . . .	41
2.3.5. Komponensáram-alapú P-gráf reprezentáció SNS-hez . . . . .	42
2.3.6. A termelő és szétválasztó hálózatok összekapcsolása . . . . .	44
2.3.7. MILP modell felírása és megoldása . . . . .	48
2.4. Az integrált és a szekvenciális módszer összehasonlítása . . . . .	48
2.4.1. Költséges szétválasztás elkerülése . . . . .	51
2.4.2. A termék mennyiségének figyelembe vétele . . . . .	52
2.5. Alkalmazás: valós vegyipari folyamat modellezése . . . . .	52
2.6. A fejezet rövid összefoglalása . . . . .	59
<b>3. Intervallum alapú globális optimalizálási eljárás SNS feladatok megoldására</b>	<b>60</b>
3.1. A szétválasztó hálózatok építőelemei . . . . .	63
3.2. Szemléltető példa . . . . .	65
3.3. Általános algoritmus . . . . .	67
3.3.1. Az eljárás áttekintése . . . . .	67
3.3.2. Nemlineáris elemek a matematikai modellben . . . . .	69
3.3.3. Branch & Bound keretrendszer . . . . .	72
3.3.4. Részproblémák . . . . .	73
3.3.5. Szétválasztás . . . . .	74
3.3.6. Részprobléma kiválasztása . . . . .	75
3.3.7. Szétválasztó berendezések terhelésének meghatározása . . . . .	76
3.3.8. Lineáris alsó becslő függvény a szétválasztók költségére . . . . .	78
3.3.9. Részprobléma alsó becslésének megadása . . . . .	80
3.3.10. Megállási feltételek vizsgálata . . . . .	81
3.4. Matematikai modell . . . . .	81
3.5. Alkalmazás: A szemléltető példa megoldása . . . . .	85
3.6. Az eredmény értékelése . . . . .	87
3.7. A fejezet rövid összefoglalása . . . . .	90
<b>4. A P-gráf módszertan kiterjesztése rugalmas bemenetekkel rendelkező megújuló energiahálózatok optimális tervezésében</b>	<b>91</b>

4.1.	Az aktuális energiahelyzet áttekintése . . . . .	94
4.2.	A P-gráf módszertan kiterjesztése . . . . .	96
4.3.	Az új matematikai modell . . . . .	100
4.3.1.	Célfüggvény . . . . .	101
4.3.2.	Anyagegyensúlyi feltételek . . . . .	102
4.3.3.	Műveleti egységek mérete . . . . .	102
4.3.4.	Abszolút anyagfolyam korlátok . . . . .	102
4.3.5.	Relatív anyagfolyam korlátok . . . . .	103
4.3.6.	Kapcsolat a be-és kimenetek között . . . . .	103
4.3.7.	Műveleti egységek kizárására vonatkozó feltételek . . . . .	103
4.4.	Alkalmazás: megújuló hőellátó rendszer optimális tervezése . . . . .	104
4.4.1.	Az esettanulmány bemutatása . . . . .	104
4.4.2.	A felhasználható berendezések működése . . . . .	105
4.4.3.	A károsanyag kibocsátás szabályozása . . . . .	108
4.4.4.	Érzékenységvizsgálat . . . . .	109
4.5.	A fejezet rövid összefoglalása . . . . .	113
<b>5.</b>	<b>Multiperiodikus folyamathálózat-szintézis feladatok megoldása</b>	<b>114</b>
5.1.	A multiperiodikus viselkedés bemutatása . . . . .	117
5.1.1.	Hagyományos, egyetlen periódussal rendelkező műveleti egység működése . . . . .	120
5.1.2.	Multiperiodikus műveleti egység működése . . . . .	121
5.2.	A multiperiodikus műveleti egység P-gráf modellje . . . . .	123
5.3.	Gyakorlati alkalmazás – St. Margarethen . . . . .	127
5.3.1.	Információgyűjtés . . . . .	127
5.3.2.	A maximális struktúra felírása . . . . .	128
5.3.3.	Az optimális hálózat meghatározása . . . . .	131
5.4.	A fejezet rövid összefoglalása . . . . .	132
<b>6.</b>	<b>Új tudományos eredmények</b>	<b>133</b>
6.1.	Tézisek . . . . .	133
6.2.	Az értekezés témaköréből készült publikációk . . . . .	136
<b>A</b>	<b>függelék</b>	<b>139</b>
<b>B</b>	<b>függelék</b>	<b>146</b>
	<b>Irodalomjegyzék</b>	<b>151</b>

# Ábrák jegyzéke

1.1. A folyamatszintézis és a hozzá kapcsolódó tevékenységek sorozata. . . . .	2
1.2. Egy egyszerű feladat Petri-háló és P-gráf reprezentációja. . . . .	6
1.3. P-gráfok strukturális reprezentációja. . . . .	16
2.1. Ismétlődő szétválasztó berendezés kihagyása. . . . .	27
2.2. A maximális struktúra felépítésének lépései egy 4 komponensű betáplálás esetén. . . . .	29
2.3. Ugyanazon három komponensből álló anyagáram SNS és P-gráf reprezentációja. . . . .	31
2.4. Egy szétválasztó berendezés hagyományos és P-gráf reprezentációja. A berendezés az első és második komponens között hajt végre szétválasztást. . . . .	32
2.5. A két (a) és három (b) kimenetű megosztó berendezések hagyományos és P-gráf reprezentációja. . . . .	34
2.6. Az IPSNS feladat megoldásának folyamatábrája. . . . .	35
2.7. A rendelkezésre álló technológiák szétbontása termelő és szétválasztó folyamatokra. . . . .	38
2.8. A technológiákat tartalmazó maximális struktúra. . . . .	39
2.9. A szétválasztási feladat bejövő és kimenő anyagáramai. . . . .	41
2.10. A szétválasztási feladat maximális struktúrája. . . . .	42
2.11. A szétválasztó részhálózatok komponensáram-alapú P-gráf reprezentációja. . . . .	43
2.12. A <i>Decomp1</i> műveleti egység felbontja a <i>Mix1</i> anyagáramot komponenseire. . . . .	45
2.13. A <i>Devices</i> műveleti egység kapcsolódása a hálózat többi eleméhez. . . . .	45
2.14. Az integrált hálózat maximális struktúrája. . . . .	47
2.15. A példafeladat sematikus P-gráf reprezentációja. . . . .	49
2.16. A példafeladat integrált P-gráf reprezentációja. . . . .	50
2.17. Az alternatív megoldások összehasonlítása. . . . .	51
2.18. Lineáris, fix részes költségfüggvények a méret függvényében. . . . .	52
2.19. Az alternatív megoldások összehasonlítása II. . . . .	53
2.20. A gyártási folyamatban részt vevő reakciók. . . . .	54
2.21. A szétválasztókkal kiegészített termelő hálózat struktúrája. . . . .	55
2.22. Az integrált hálózat maximális struktúrája. . . . .	56
3.1. Három bemenettel és egy kimenettel rendelkező keverő berendezés grafikus reprezentációja. . . . .	63
3.2. Egy megosztó berendezés grafikus reprezentációja. . . . .	64
3.3. Egy szétválasztó berendezés grafikus reprezentációja. . . . .	64
3.4. A szemléltető példa szigorú szuperstruktúrája két bemenettel és három tiszta termékkel. . . . .	66

3.5. Az eljárás folyamatábrája. . . . .	68
3.6. Megosztó működése: az anyagáram megosztása 1:4 megosztási aránnyal. . .	70
3.7. A $\lambda_1$ megosztási arány helyettesítése a $[\Lambda L_1; \Lambda U_1]$ megosztási intervallummal. . . . .	71
3.8. Lineáris alsó becslő függvény a szétválasztók költségének közelítésére. . . .	71
3.9. Négy megosztási intervallumot tartalmazó részprobléma. . . . .	73
3.10. Két gyerek generálása a 4. intervallum szétvágásával a 83. iterációban. . .	75
3.11. A részfeladatokat tartalmazó lista módosítása az elemek beszúrásával. . .	76
3.12. A szétválasztón áthaladó anyagáram méretének alsó ( $XL$ ) és felső ( $XU$ ) becslése. . . . .	77
3.13. Konkáv költségfüggvény lineáris alsó becslése az $[XL; XU]$ intervallumon. .	78
3.14. A becslő függvény $A$ és $B$ paramétereinek meghatározása. . . . .	79
3.15. A részfeladat alsó becslése a 9. LP megoldásával. . . . .	80
3.16. A példa feladat optimális megoldásstruktúrája. . . . .	86
4.1. A megújuló energiaforrások részesedésének 2020-ig történő előrejelzése Magyarországon. . . . .	94
4.2. Az energiaköltségek csökkentésének lehetőségei. . . . .	95
4.3. A műveleti egységek eredeti és kiterjesztett matematikai modelljének összehasonlítása. . . . .	96
4.4. Köztes anyagpont bevezetése a nyersanyagok és a berendezés között. . . .	97
4.5. Az esettanulmányhoz tartozó maximális struktúra. . . . .	105
4.6. Az optimális hálózat és a felhasznált nyersanyagok átalakulása a hőigény függvényében. . . . .	109
4.7. Az $A$ - $D$ megoldásstruktúrák P-gráf reprezentációja. . . . .	111
4.8. Az $E$ - $H$ megoldásstruktúrák P-gráf reprezentációja. . . . .	112
5.1. Az almapucoló berendezés betáplálása egyperiódusú működés esetén. . . .	118
5.2. Az almapucoló berendezés betáplálása multiperiódusú működés esetén. . .	119
5.3. Egyetlen periódussal rendelkező műveleti egység P-gráf ábrázolása. . . .	120
5.4. A multiperiodikus berendezés maximális kapacitásának meghatározása. . . .	124
5.5. Multiperiodikus berendezés P-gráf reprezentációja. . . . .	125
5.6. A szemléltető példa maximális struktúrája. . . . .	129
A.1. Az integrált maximális struktúra megoldása 8 000 kg/év igény esetén . . .	140
A.2. A szekvenciális módszer megoldása 8 000 kg/év igény esetén . . . . .	141
A.3. Az integrált maximális struktúra megoldása 100 000 kg/év igény esetén . .	142
A.4. A szekvenciális módszer megoldása 100 000 kg/év igény esetén . . . . .	143
A.5. A szakirodalomban szereplő hálózat maximális struktúrája . . . . .	144
A.6. Az integrált ipari példa optimális megoldásstruktúrája . . . . .	145

# Táblázatok jegyzéke

2.1. A példafeladatban szereplő nyersanyagárok. . . . .	49
2.2. A példa feladatban szereplő berendezések költségadatai. . . . .	50
2.3. Az optimális megoldásstruktúrában szereplő műveleti egységek tulajdonságai. . . . .	57
2.4. Az optimális megoldásstruktúrában szereplő anyagok tulajdonságai. . . . .	58
3.1. A ki-és belépő anyagáramok összetétele. . . . .	66
3.2. A példa megoldásának részletei. . . . .	85
3.3. A különböző megoldó algoritmusok eredményeinek összehasonlítása. . . . .	87
3.4. Összehasonlítás piacvezető globális optimalizációs szoftverekkel. . . . .	88
4.1. Az esettanulmányban szereplő nyersanyagok konverziós együtthatói. . . . .	107
4.2. A rendelkezésre álló berendezések beruházási és működési költségei. . . . .	107
4.3. Az anyagfolyamokhoz tartozó relatív alsó és felső korlátok. . . . .	107
4.4. Szabadon rendelkezésre álló nyersanyagok mennyisége. . . . .	108
5.1. Az egyetlen periódussal rendelkező működéshez kapcsolódó adatok. . . . .	121
5.2. A multiperiodikus működéshez kapcsolódó adatok. . . . .	123
5.3. A feladatban szereplő nyersanyagok tulajdonságai. . . . .	127
5.4. A feladatban szereplő termékek tulajdonságai. . . . .	128
5.5. A berendezések költségei és kapacitás korlátai. . . . .	128
5.6. A berendezések költségei és kapacitás korlátai. . . . .	130
5.7. A berendezések kapacitása az optimális struktúrában. . . . .	131



# *Kivonat*

## **Optimális hálózatok szintézise változtatható arányú és összetételű anyagáramokat feldolgozó műveleti egységekkel**

Szlama Adrián György

Az egyre fokozódó globalizáció egyik legjelentősebb gazdasági hatása az ipari fejlődés és termelés területén figyelhető meg. Kiemelt hangsúlyt kap a termelési folyamatok hatékonyságának növelését célzó mérnöki tervezés, legyen szó akár a költségek csökkentéséről vagy a termelési volumen növeléséről. Ez olyan nagyméretű rendszerek optimalizálását teszi szükségessé, amelyeknél már nem elegendő a szakemberek gyakorlati tudására épülő heurisztikus eljárások alkalmazása, hanem olyan speciális célszoftverek használatát igénylik, amelyek hatékonyan képesek kezelni a nagyméretű rendszereket is.

Számos korábbi tanulmány rámutatott arra, hogy összetett és bonyolult folyamatok esetében a rendszerszintű szemlélet használata célravezetőbb, mint a részrendszerek egyre részletesebb modellezése. Ez a szemlélet a folyamatokra épülő rendszerek strukturális tervezését tűzi ki célul. Az optimális folyamat meghatározását folyamatszintézisnek nevezik.

A P-gráf módszertant Friedler és szerzőtársai dolgozták ki a 90-es évek elején. A módszertan gráfok egy egyedi osztályát vezeti be, amely alkalmazásával lehetőség nyílik a folyamathálózatok struktúráinak formális és grafikus reprezentációjára egyaránt. A P-gráf egy jól kidolgozott axiómarendszerre épül, amely lehetővé teszi a struktúrák kombinatorikus tulajdonságainak megfogalmazását és szigorú matematikai eszközök használatát.

Kutatásaimban optimalizálási eljárásokat dolgoztam ki, valamint a P-gráf módszertan kiterjesztési lehetőségeit vizsgáltam, amelyek segítségével új feladatosztályokon is alkalmazhatóvá vált a keretrendszer. Jelen dolgozatban részletesen ismertetem ezeket az irányokat. A kidolgozott modellek, algoritmusok gyakorlati alkalmazását ipari példákon keresztül szemléltetem.

Munkám során konkrét költségfüggvénnyel rendelkező szétválasztó berendezéseket tartalmazó SNS feladatok optimális megoldására dolgoztam ki egy új, intervallumokat használó globális optimalizálási eljárást. Az algoritmus szabályozható toleranciaértékek mellett meghatározza az optimális hálózat felépítését és a hozzá tartozó anyagáramok méretét.

Bevezettem egy olyan integrált hálózatszintézis feladatot, amely egyaránt tartalmaz folyamathálózati és szétválasztási hálózati elemeket. A korábbi megközelítésekkel ellentétben a két kapcsolódó részhálózat tervezését nem szekvenciálisan, hanem párhuzamosan hajtom végre. Bemutattam a komponensáram-alapú P-gráf reprezentációt, valamint módszert adtam meg a szétválasztó részhálózatokat tartalmazó PNS feladat matematikai modelljének felírására.

Kidolgoztam a P-gráf módszertan egy olyan kiterjesztését, amelyben a rugalmas bemenetekkel rendelkező műveleti egységeknek köszönhetően hatékonyan alkalmazható többek között megújuló energiaforrásokat tartalmazó komplex energiatermelő rendszerek optimális tervezésére is. A feladatosztályban szereplő specifikus elemek kezelésére egy új matematikai modellt dolgoztam ki.

Módszert dolgoztam ki a multiperiodikus működésű berendezések modellezésére a P-gráf módszertan segítségével. Az új típusú berendezéseket a hagyományos műveleti egységek és anyagpontok felhasználásával reprezentáltam.

# *Abstract*

## **Optimal network synthesis adopting operating unit model with flexible and multicomponent streams**

Adrián György Szlama

The pace of globalization is quickening and it has significant economic impact on industrial development and production. The engineering design of production processes gets more and more focus whether it is about the cost reduction or increasing the production volume. One of the main reason is that the structure of processes fundamentally changed. Whereas before some chemical industrial processes were designed in such a way that they can proceed invariably due to the inexhaustible commodity stocks, nowadays constant change and adaption can be observed. The spreading of renewable energy sources and alternative technologies is on the rise which causes constantly changing variables in the investigated systems.

Taking into account these considerations requires the optimization of large scale and complex systems. The heuristic methods based on the engineers practical knowledge is no longer enough, there is a need for special methods and software components which are capable to support effectively the large scale system design. Numerous former studies pointed out that system wide approach is more appropriate than modeling smaller parts in a more detailed way. The objective of this approach is the structural modeling. I.e., the determination of the optimal structure of a process is called process network synthesis.

The P-graph framework was elaborated by Friedler et al. in the early 90's. The framework introduces a unique class of graphs which allows the formal and graphical representation of process networks. P-graph is based on a well-designed axiom system. Due to these axioms it is possible to formulate the combinatorial attributes of structures and the use of rigorous mathematical tools.

In my researches I developed optimization methods mostly based on the extensions of the P-graph framework. Due to these optimization methods, the P-graph framework can be used in the solution of new problem classes. In my thesis I introduce them in detail. The practical application of the elaborated models and algorithms will be demonstrated via industrial size examples.

I have introduced an integrated network synthesis problem which comprises both separation network and process network components. In contrast to the former approaches (sequential implementation) in my novel method both networks are optimized at the same time. I have introduced the component-flow based P-graph representation and I gave the procedure to generate the mathematical model for PNS problems involving separation subnetworks. I have modeled the separators with linear cost function containing fixed part.

After that I have investigated the class of separation processes involving concave cost functions. I have introduced a novel method for optimizing SNS problems with concave cost function. This global optimization method utilizes intervals. The algorithm determines the structure of the optimal separation network and the flowrates of the streams with arbitrary precision.

The variable flowrate ratio and periodically different renewable energy sources requires such a mathematical model in which the operating units are modeled in accordance with the altered circumstances. I have elaborated an extension of the P-graph framework with flexible input and output ratios for the operating units. Due to the extension, the framework turns into an effective modeling and optimization tool in the field of complex energy production systems involving renewable sources. I have elaborated a new mathematical model for handling the specific elements of the examined problem class.

The composition of raw materials and products can vary periodically according to the impact of external factors like seasons. For the treatment of these periodically changing conditions I have introduced a novel method for modeling multiperiodic operating units by the P-graph framework. I have represented the new devices with conventional operating units and material nodes in the framework.

# *Abstrakt*

## **Die Synthese optimaler Netzwerke mit Einheiten, die Materialflüsse mit veränderlichem Anteil und mit veränderlichen Zusammensetzung verarbeiten**

Adrián György Szlama

Eine der wichtigsten wirtschaftlichen Auswirkungen der zunehmenden Globalisierung ist im Bereich der industriellen Entwicklung und Produktion zu sehen. Der Schwerpunkt wird auf die Erhöhung der Effizienz der technischen Gestaltung von Produktionsprozessen gelegt ob es um Senkung der Kosten oder Erhöhung der Produktionsmengen geht. Einer der Hauptgründe, dass sich die Struktur der Prozesse grundsätzlich in den letzten Jahrzehnten verändert hat. Früher wurde ein chemisches Herstellungsverfahren für mehrere Jahre als unverändert geplant, weil man dachte, dass der Rohstoff unbegrenzt verfügbar wird (denken wir zum Beispiel an Erdölverarbeitung). Heute ist lieber die kontinuierliche Veränderung, und Anpassung gewöhnlich. Die erneubaren Energiequellen und alternative technologische Implementierungen gewinnen an Boden, und das bedeutet, dass die getesteten Systeme durch externe Faktoren beeinflusst werden, und sie ändern ständig, auch neue Faktoren erscheinen.

All dies macht es notwendig, große und komplexe Systeme zu optimieren, die bei denen ist es nicht ausreichend, heuristische Methoden auf der Basis von Spezialisten zu benutzen. Diese Systeme erfordern die Verwendung von speziellen Techniken und Software, die die effiziente Gestaltung von großen Systemen unterstützen. Viele frühere Studien rechtfertigte, dass ein systemweiter Ansatz bei komplexen und anspruchsvollen Prozessen gezeigt unter Verwendung ist nützlicher als die detaillierte Modellierung von Subsystemen. Dieser Ansatz beruht auf der strukturellen Gestaltung von Prozessen. Die Bestimmung des optimalen Prozesses nennt man Prozesssynthese.

Die P-Graph Methode wurde von Friedler und seinen Mitverfassern in den frühen 90er Jahren erarbeitet. Die Methode führt eine einzigartige Klasse von Graphen ein, mit denen es möglich ist, die Netzwerkstrukturen sowohl formell als auch graphisch zu darstellen. Der P-Graph basiert auf einem gut entwickelten System von Axiomen, die die Strukturen der kombinatorischen Eigenschaften der Formulierung und Verwendung von strengen mathematischen Werkzeugen ermöglicht.

In meinen Forschungen habe ich Optimierungsverfahren erarbeitet, und ich habe das Expansionspotential der Methode P-Graph untersucht, mit dem es möglich ist, das Rahmensystem bei den Aufgabeteilen zu benutzen, die die neuen Anforderungen enthalten. In dieser Arbeit beschreibe ich ausführlich diese Richtungen. Die Modelle und Algorithmen zeigen die praktische Anwendung durch industrielle Beispiele.

Ich führte eine integrierte Netzwerk-synthese Aufgabe ein, die sowohl aus Prozessnetzwerkelementen als auch aus Trennungnetzwerkelementen besteht. Im Gegensatz zu den früheren Ansätzen, ich führe die beiden zugehörigen Unternetzplanung nicht sequentiell sondern parallel aus. Ich stellte die elektrische Komponenten-basierte P-Graph vor, und ich gab die Methode für die Darstellung des mathematischen Modells vom PNS Job für die Trennungsteilnetzwerke, ich für die Bestimmung der Kosten von Trennungsausrüstung eine lineare Kostenfunktion mit einem festen Teil benutzte.

Dann untersuchte ich Trennungsverfahren, in denen es nicht genug ist, die Trennungsausrüstung mit linearen Kostenfunktion zu modellieren, sondern die Verwendung einer konkaven Funktion ist erforderlich. Ich arbeitete Jobs mit SNS, die optimale Trennungsausrüstung konkav zu lösen, in denen die Kosten für meine Arbeit in einem neuen Verfahren zur globalen Optimierung Intervalle benutzen. Der Algorithmus bestimmt den Aufbau des optimalen Netzwerkes, die Grösse der Materialflüsse und die steuerbaren Grenzwerten.

Der Anteil der erneuerbaren Energiequellen beziehungsweise die veränderliche Verfügbarkeit in einem Jahr machten die Schaffung eines mathematischen Modells erforderlich, in dem die Ausrüstung für die Verarbeitung von Rohstoffen, technologische Verfahren folgen können, wie viele Quellen verfügbar sind. Dazu arbeitete ich die Erweiterung der P-Graph-Methode aus, die wegen der flexiblen Eingangseinheiten der operativen Einheiten dazu geeignet ist, komplexe Energieerzeugungssysteme optimal zu planen, die erneubare Energiequellen enthalten. Die Aufgabe ist, die spezifischen Elemente in einer neuen Klasse von mathematische Modell entwickelt.

Die Zusammensetzung der Quellen oder der Produktnachfrage aufgrund externen Faktoren, wie die Jahreszeiten, kann sogar innerhalb eines Jahres unterschiedlich sein. Um dieses periodische Verhalten Modellierungsmethode zu überwinden arbeitete ich eine Methode für Modellierung von multiperiodischen betriebenen Geräte mit Hilfe der P-Graph-Methode aus. Die neuen Maschinentypen wurden mit der herkömmlichen Einheiten und Materialpositionen dargestellt.

# *Köszönetnyilvánítás*

Ezúton mondok köszönetet témavezetőmnek, Dr. Heckl Istvánnak eredményeim elérésében és dolgozatom elkészítésében nyújtott folyamatos és áldozatos segítségéért.

Dr. Heriberto Cabezas professzor úrnak, aki értékes szakmai tanácsokkal látott el.

Köszönöm a Rendszer- és Számítástudományi Tanszék munkatársainak a szakmai segítséget és támogatást.

Külön köszönöm Kiss Rékának, hogy olyan hosszú ideig tűrte a munkával járó nehézségeket és mindent bevetett a disszertáció megírásának ösztönzésére. Hálás vagyok a családomnak a megértésért, a biztatásért és az áldozatvállalásért, amellyel a tanulmányaim során elkísértek és a dolgozat elkészítését lehetővé tették.

# Rövidítések

<b>ABB</b>	<b>A</b> ccelerated <b>B</b> ranch & <b>B</b> ound
<b>B&amp;B</b>	<b>B</b> ranch & <b>B</b> ound
<b>CSTR</b>	<b>C</b> ontinuous <b>S</b> tirred <b>T</b> ank <b>R</b> eactor
<b>IEEE</b>	<b>I</b> nstitute of <b>E</b> lectric and <b>E</b> lectronic <b>E</b> ngineers
<b>IGOS</b>	<b>I</b> ntervallumos <b>G</b> lobális <b>O</b> ptimalizáló <b>S</b> NS feladatokra
<b>IPSNS</b>	<b>I</b> ntegrated <b>P</b> rocess and <b>S</b> eparation <b>N</b> etwork <b>S</b> ynthesis
<b>LIFO</b>	<b>L</b> ast <b>I</b> n- <b>F</b> irst <b>O</b> ut
<b>LP</b>	<b>L</b> inear <b>P</b> rogramming
<b>MILP</b>	<b>M</b> ixed <b>I</b> nteger <b>L</b> inear <b>P</b> rogramming
<b>MSG</b>	<b>M</b> aximal <b>S</b> tructure <b>G</b> eneration
<b>NLP</b>	<b>N</b> on- <b>L</b> inear <b>P</b> rogramming
<b>PFR</b>	<b>P</b> lug <b>F</b> low <b>R</b> eactor
<b>PNS</b>	<b>P</b> rocess- <b>N</b> etwork <b>S</b> ynthesis
<b>SNS</b>	<b>S</b> eparation <b>N</b> etwork <b>S</b> ynthesis
<b>SSG</b>	<b>S</b> olution <b>S</b> tructure <b>G</b> eneration
<b>UML</b>	<b>U</b> nified <b>M</b> odeling <b>L</b> anguage
<b>VCM</b>	<b>V</b> inyl <b>C</b> hloride <b>M</b> onomer



# 1. fejezet

## Szakirodalmi áttekintés

A dolgozathoz kapcsolódó szakirodalom áttekintését két fő egységben tárgyalom. Az 1. fejezet egy általános áttekintést nyújt, amely több, további fejezethez is szervesen kapcsolódik. Áttekinti a folyamatszintézis témakörét, a lehetséges megoldó módszereket, valamint a szétválasztó-hálózatok szintézisével kapcsolatban született publikációkat és eredményeket. Ezen kívül a munkám egyik alapját képező P-gráf módszertant is összefoglalóan ismertetem. A második egységet az egyes fejezetek előtt szereplő témaspecifikus irodalmi áttekintések adják. Ezekben az adott témakörhöz szorosabban kapcsolódó szakirodalmat foglalom össze.

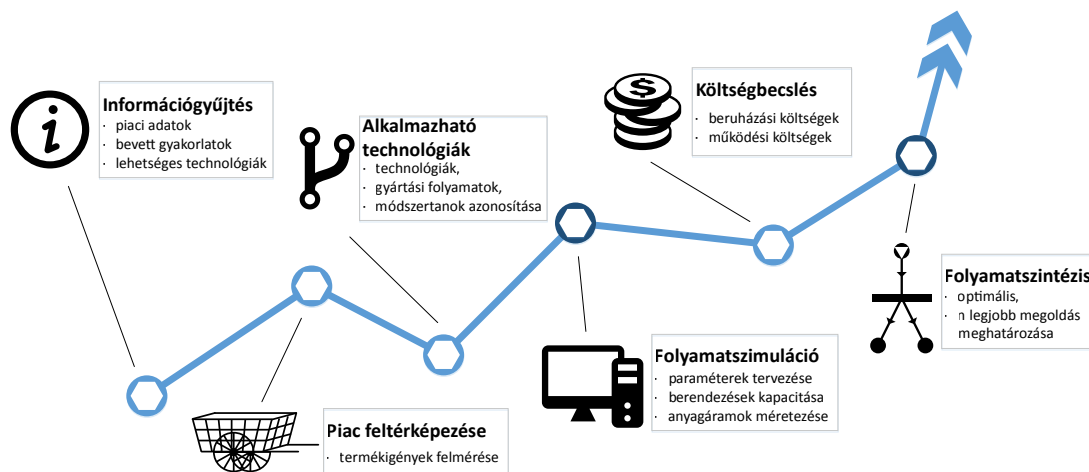
### 1.1. A folyamatszintézis alapjai

Egy folyamatokra épülő rendszer optimális struktúrájának megalkotását folyamatszintézisnek nevezik. A szakirodalomban számos publikáció született az eljárásban rejlő lehetőségek bemutatásáról. Ismertettek olyan gyakorlati példát [1] is, ahol a szintézis hatékonyságának köszönhetően egy rendszer energiafogyasztását 50%-kal, valamint a teljes költségét 35%-kal lehetett csökkenteni. Ipari méretekben ekkora megtakarítás igen jelentős gazdasági eredménynek számít. A megközelítés egyik legfontosabb alkalmazási területének a vegyészmérnökök által tervezett folyamatok optimalizálása tekinthető. A folyamatszintézis célja itt kibővül a rendszerben szereplő műveleteket végrehajtó funkcionális egységek meghatározásával, valamint azok konfigurációinak és kapacitásértékeinek megadásával [2].

A folyamatszintézis során a rendszerek ábrázolására legtöbbször folyamatábrákat használnak. A folyamatábrában szereplő funkcionális egységek egy-egy részhálózatot reprezentálnak. A legegyszerűbb esetben ezek egyetlen feldolgozó egységből vagy műveletből állnak, de akár több ilyen egységet is tartalmazhatnak. A folyamatszintézis képes kijelölni a legjobb technológiát a lehetséges alternatívák közül, azaz meghatározza a rendszerhez tartozó optimális folyamatábrát, továbbá képes megállapítani a funkcionális egységek méretparamétereit és a közöttük fennálló kapcsolatokat. A folyamatszintézist gyakran használják megjelenő, új technológiák [3], [4] versenyképességének vizsgálatára, megtérülési idő becslésére vagy akár a rendszerben szereplő bizonytalan paramétereket (például változó nyersanyagárakat vagy rendelkezésre állást) figyelembe vevő érzékenységvizsgálatok végrehajtására [5].

### 1.1.1. A folyamatszintézis lépései

A folyamatszintézis más modellezési technikákhoz hasonlóan egy nagyobb, több lépésből álló folyamatként írható le. A folyamatban szereplő tevékenységek sorrendjét mutatja be az 1.1 ábra.



1.1. ÁBRA. A folyamatszintézis és a hozzá kapcsolódó tevékenységek sorozata.

1. Az első lépés, amely megalapozza a teljes folyamat eredményességét, az információgyűjtés. Ez magába foglalja az aktuális piaci információk megszerzését, a bevett gyakorlati alkalmazások és lehetséges technológiák azonosítását és megismerését.

2. Ezt követi a piac feltérképezése, a termékigények felmérése, a rendelkezésre álló nyersanyagok áttekintése.
3. A harmadik lépésben történik az alkalmazható technológiák részletes vizsgálata. Itt fontos szempont, hogy csak olyan bevett gyakorlatok, gyártási folyamatok és módszertanok kerüljenek kiválasztásra, amelyek adott lépéseken keresztül potenciálisan alkalmasak a termékigények kielégítésére a rendelkezésre álló nyersanyagok felhasználásával. Ezen információk birtokában már megbecsülhetővé válik a piacban rejlő potenciál, amely magában foglalja az eladható termékek, a feldolgozandó nyersanyagok definiálását, valamint a kapcsolódó folyamatok kvantitatív és kvalitatív meghatározását.
4. A negyedik lépés során szimulációs szoftverek segítségével a berendezésekhez tartozó méretezési és tervezési paramétereket kell meghatározni. Ezt minden egyes olyan berendezésre el kell végezni, amely a korábban azonosított technológiák részét képezi. Ezen a ponton a potenciális alternatív technológiákat külön-külön kell szimulálni megvizsgálva, hogy ezek közül melyek tudják ellátni a folyamatábrában szereplő adott funkcionális egység szerepét.  
  
Annak érdekében, hogy biztosítani lehessen az alternatív technológiák felcserélhetőségét egy meghatározott funkció ellátásában, a működés során megengedett mérettartományokat a szimuláció előtt specifikálni kell. Ekkor az olyan mennyiségi paraméterek, mint a belépő és kilépő anyagáramok a szimuláció során összhangban lesznek. Ennek eredményeként a bemenetekre és kimenetekre vonatkozó mennyiségi feltételek mellett minden egyes funkcionális egységhez meghatározásra kerül a felhasználható alternatív technológiák köre és a bennük foglalt berendezésekre vonatkozó tervezési paraméterek értéke.
5. Ezt követően – rendszerint más típusú szoftverek segítségével – a kapacitásra és tervezésre vonatkozó paraméterek felhasználásával minden egyes berendezésre és ezáltal minden alternatív technológiai folyamatra meghatározható azok beruházási és működési költsége. Rendszerint az anyagáramok méretével arányos energiaigény jelentősen befolyásolja a berendezések működési költségét. Ennek következtében a szimuláció által meghatározott anyagáram méreteket is figyelembe kell venni a költségbecslés során.

A folyamatszintézis előtt célszerű meghatározni az alternatív technológiákhoz tartozó költségeket több, különböző nagyságrend esetén is, nem csak az egységnyi mérethez tartozóan. Érdeemes felírni a költségeket a méretezés függvényében, mivel ekkor pontosabb modellekkel lehet dolgozni a folyamatszintézis során. Leggyakrabban a terheléssel lineárisan változó, fix résszel rendelkező költségfüggvényt használatják. Lineáris regresszió segítségével könnyen meghatározhatóak a diszkrét méretértékekhez meghatározott költségpontokra illeszthető fix résszel rendelkező lineáris költségfüggvények [5].

6. Végül, a hatodik lépésben a folyamatszintézis képes algoritmikusan meghatározni a lehetséges technológiák optimális hálózatát és azok optimális méretét egyaránt. Ez a lépés nem hajtható végre folyamatszimulációs szoftverekkel, mivel a szimuláció nem képes a költség szerinti optimális hálózatot megtervezni az anyagok két vagy több tulajdonságának figyelembe vétele mellett.

### 1.1.2. Szisztematikus eljárások a folyamatszintézis területén

Két fő osztályát különböztetik meg a folyamatszintézis területén fellelhető szisztematikus eljárásoknak. Ezek a heurisztikus módszerek, illetve a matematikai programozási módszerek. Rendszerint a heurisztikus módszerek egyszerűbben implementálhatóak, azonban csak lokális szinten hatékonyak. A heurisztikus módszerekre jellemző, hogy gyakran nem találják meg a globális optimumot [6]. Az evolúciós módszereket a heurisztikus eljárások közé szokták sorolni, azonban egy jól elkülöníthető sémát követnek. Először egy lehetséges megoldás minél gyorsabb meghatározása a céljuk, majd ezt követően előre definiált szabályok szerint ezt a megoldást javítva igyekeznek eljutni jobb megoldásokig [7].

A matematikai programozáson alapuló konvencionális algoritmikus eljárások képesek meghatározni egy adott matematikai programozási modellhez tartozó optimális megoldást. Ehhez azonban az eljárás feltételezi az előre definiált matematikai modell meglétét, valamint, hogy a modell tartalmazza a mérnöki rendszerben szereplő összes tervezési alternatívát [8].

A matematikai programozási módszerek egyik hátulütője, hogy a megoldandó probléma méretének és összetettségének függvényében az optimális megoldás meghatározása rendkívül nehéz számítási feladatot jelenthet. További hátrányuk, hogy egy matematikai

modellben nehéz bizonyos tulajdonságokat (például fenntarthatósággal kapcsolatos kérdéseket) megfogalmazni, azonban a szakirodalom már erre is kínál megoldást, például a többcélú programozás alkalmazásával. [9].

A gyakorlatban a folyamatszintézis során használt probléma definíció magába foglalja a rendelkezésre álló nyersanyagok, a lehetséges berendezések, az előállítani kívánt termékek, valamint az ezekhez tartozó ár, költség és korlátozási paraméterek meghatározását. Annak érdekében, hogy a matematikai programozásban rejlő potenciált megfelelően ki lehessen használni, egy olyan modellgenerálási eljárás szükséges, amely matematikailag szigorú, lehetőleg axiomatikus és hatékonyan implementálható algoritmusokat tartalmaz. Ennek egy lehetséges megközelítése a kombinatorika egyik fontos ágára, a gráfelméletre épül. Segítségével elérhetővé válnak az ismert gráfelméleti algoritmikus eljárások a modellgenerálás és ábrázolás során. Több megközelítés is született már a témával kapcsolatban ezek közül a Petri-hálóok lehetséges alkalmazását és a P-gráf módszertant ismertetem részletesebben.

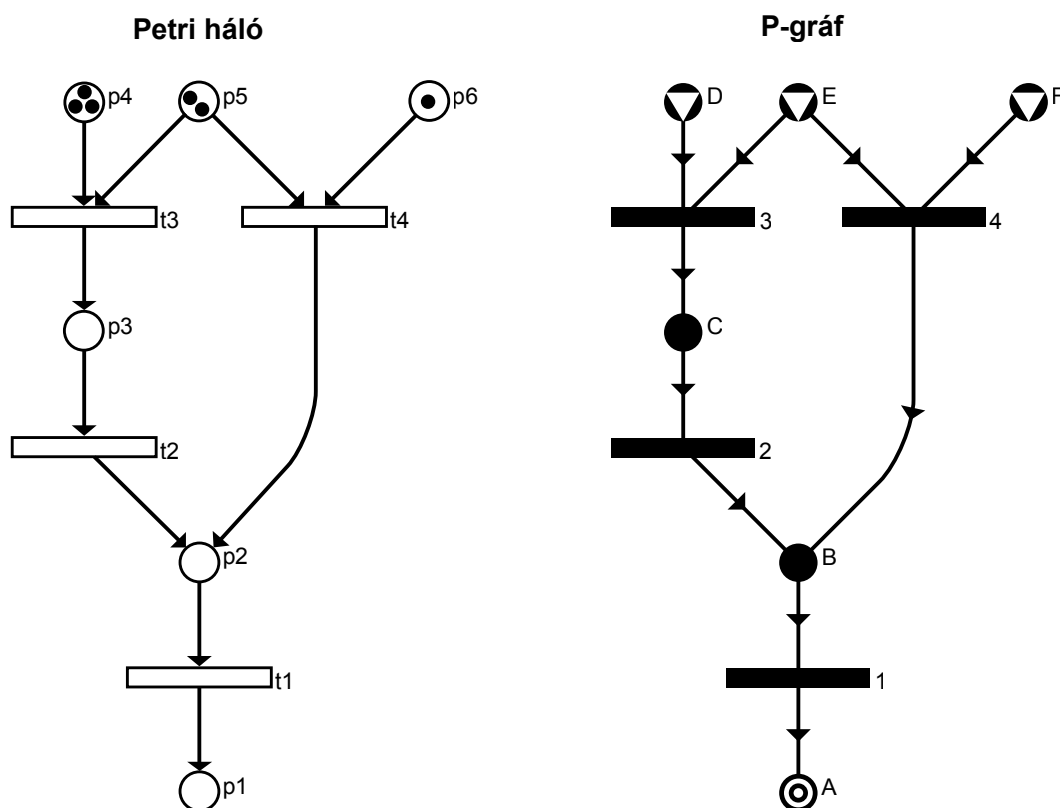
#### **1.1.2.1. Petri-hálóok**

A Petri-hálóok eredete Carl Adam Petri német matematikus nevéhez köthető. A felhasznált jelölésrendszert 1939-ben dolgozta ki és eredetileg kémiai folyamatok leírására szánta. A matematikai alapokat doktori disszertációjában dolgozta ki 1962-ben [10].

A Petri-hálóok kiválóan alkalmazhatóak konkurens, aszinkron, elosztott és párhuzamos rendszerek modellezésére egyaránt. Manapság gyakran használják UML (Unified Modeling Language - egységesített modellezőnyelv) alapú rendszermodellek formalizálására. Az addig használt formalizmusokkal szemben (például állapotgépek) a legnagyobb előnye a tömörebb, átláthatóbb modellek használata. A Petri-háló a P-gráf módszertanhoz hasonlóan egyidejűleg nyújt egy grafikus és egy matematikai reprezentációt. Az előbbinek köszönhetően lehetővé válik az áttekinthető, hierarchikus ábrázolás, míg az utóbbi előnye a precíz, egyértelmű megfogalmazás. A módszer hátrányaként szokták feltüntetni, hogy viszonylag egyszerű feladatokhoz is nagyméretű Petri-háló tartozhat. Ennek egy következménye, hogy a feladat növekedésével párhuzamosan csökken a hálózat átláthatósága.

A folyamatszintézis területén is jól alkalmazhatóak a Petri-hálóok. Az ott megismert feladat, miszerint meg kell határozni egy olyan hálózatot, amely a rendelkezésre álló nyersanyagokból egy adott célfüggvény szerint optimálisan előállítja a kívánt termékeket, egy úgynevezett elérhetőségi problémaként modellezhető. Ebből a modellből már lineáris algebrai eszközök segítségével elő lehet állítani a megfelelő megoldásstruktúrákat. A Petri-háló további előnye, hogy alkalmas komplex, adaptív irányítási struktúrák kezelésére is.

A módszer sajátossága, hogy más ábrázolásmódok is kiteríthetők Petri-hálóvá. A szakirodalomban számos hivatkozás található a Petri-hálóok és a P-gráf módszertan ilyen szintű összefonódására [11], [12]. Az utóbbi publikációban megmutatták a szerzők, hogy a P-gráf módszertan által definiált, a vegyészmérnöki tudományterületeken széles körben alkalmazott algoritmusok, amelyek kihasználják a folyamathálózat-szintézis feladatokban rejlő kombinatorikus tulajdonságokat a gyorsítás érdekében, átültethetők a Petri-hálóok módszertanába. Ennek köszönhetően hatékony eljárásokkal bővítették a Petri-hálóok analízisét segítő eszközök táráát.



1.2. ÁBRA. Egy egyszerű feladat Petri-háló és P-gráf reprezentációja.

A [12] publikációban részletesen ismertették a Petri-hálók és a P-gráf keretrendszer elméleti kapcsolatát, valamint a két módszertan közötti különbségeket. Az 1.2 ábra mutatja be a Petri-háló és P-gráf reprezentáció közötti különbségeket. A bal oldali ábrán látható Petri-hálóban a  $p_1, p_2, \dots, p_6$  csúcsok jelölik a helyeket, míg a  $t_1, t_2, t_3, t_4$  csúcsok a tranzíciókat. Hasonlóan a P-gráf estében az  $A, B, \dots, F$  csúcsok az anyagpontokat és az 1,2,3,4 csúcsok a műveleti egységeket jelölik. Ezen kívül ismertették az ABB (Accelerated Branch & Bound) algoritmus Petri-háló adaptációját, amellyel megoldottak egy egyszerű példafeladatot. A [12] publikáció alapján rövid áttekintést adok a Petri-hálók és az elérhetőségi feladat matematikai hátteréről.

### Petri-hálók struktúrája

Egy Petri-háló az  $N = (P, T, E, W)$  négyessel írható le, ahol  $P$  és  $T$  a helyeket és tranzíciókat jelölő diszjunkt halmazok. A helyek és tranzíciók illetve a tranzíciók és helyek között futó élek halmazát  $E$  jelöli úgy, hogy  $E \subseteq (P \times T) \cup (T \times P)$ . Az élekhez tartozó súlyfüggvényt a  $W : E \rightarrow \mathcal{N}$  írja le. A helyek tartalmazhatnak úgynevezett tokeneket, amelyeket a tranzíciók az élekhez rendelt súlyfüggvény szerint tudnak fogyasztani és termelni a helyekhez kapcsolódóan.

Egy  $a \in P \cup T$  elemhez (lehet hely vagy tranzíció) tartozó bemeneteket  $\bullet a = \{b \mid (b, a) \in E\}$  jelöli, míg a hozzá tartozó kimeneteket a  $a \bullet = \{b \mid (a, b) \in E\}$ . Tehát a Petri-háló egy irányított páros gráf, amelyben a helyek és tranzíciók két diszjunkt halmazt alkotnak és közöttük irányított, súlyozott élek futnak.

Egy  $M$  token eloszlás vektor egy természetes számokon értelmezett  $|P|$  dimenziós vektor, ami az egyes helyeken található tokenek számát írja le. Egy adott token eloszlás vektor a hálózat egy állapotát írja le, amely a tranzíciók tüzelésével változhat meg. Egy  $t$  tranzíció tüzelése akkor engedélyezett, ha minden egyes bemeneti helyén  $\bullet t$  legalább annyi tokenet tartalmaz, mint amennyit a súlyfüggvény meghatároz, azaz  $\forall p \in \bullet t : M(p) \geq W(p, t)$ . Egy  $t$  tranzíció a tüzelés során eltávolítja a szükséges mennyiségű  $W(p, t)$  tokenet a bemenő helyekről és hozzáadja a  $W(t, p)$  tokeneket a kimenő helyekhez.

## Elérhetőségi feladat

A tüzelési szekvencia egy állapotátmeneti trajektóriát ír le, amely az egymást követő tüzelések hatására felvett állapotokat tartalmazza, tehát a Petri-háló állapotváltozásait írja le. Az elérhetőségi feladat során el kell dönteni, hogy egy adott állapotot leíró token eloszlás vektorból létezik-e olyan állapotátmeneti trajektória, amely egy másik, adott állapotba vezet, azaz létezik-e olyan tüzelési szekvencia, amely az  $M_0$  kezdeti token eloszlás vektorból a végső  $M$  token eloszlás vektorba vezet. Ezt  $M_0 \xrightarrow{t_1 \dots t_m} M$  jelöli.

Egy tüzelési szekvencia tranzíciós vektora egy természetes számokon értelmezett  $|T|$  dimenziós vektor, amely az adott szekvenciában szereplő tranzíciók végrehajtási számait jelöli. Nagyméretű rendszermodellek esetén, ha egy ilyen trajektória létezésére a választ az állapotgráf felépítésével szeretnék megadni, akkor a méret következtében ez robbanásszerű növekedést eredményezhet a keresési térben. Azok az eljárások, amelyek elkerülik ezt a robbanásszerű növekedést, kizárólag a tranzíciós vektort adják meg a kiindulási és a célállapot között. Ennek következtében ezen eljárások igennel vagy nemmel válaszolják meg a kérdést és nem adnak meg lehetséges tüzelési trajektóriát.

A legfőbb különbség a tüzelési szekvenciát teljes mértékben leíró trajektória és az előzőleg leírt eljárások által előállított tranzíciós vektorok között, hogy az utóbbi kizárólag a tüzelések számát adja meg az egyes tranzíciókhoz, azok sorrendjét figyelmen kívül hagyja. A kapott tranzíciós vektor csak bizonyos Petri-háló osztályok esetén képes mindig tüzelni, ilyenek például az állapotgépek. Általános Petri-hálók esetében a tranzíciós vektorokon a tüzelés előtt egy további szűrő lépést kell végrehajtani.

### 1.1.2.2. P-gráfok

A P-gráf módszertan gráfok egy egyedi osztályát vezeti be, amely alkalmazásával lehetőség nyílik a folyamathálózatok struktúráinak formális és grafikus reprezentációjára egyaránt. A módszertant Friedler és szerzőtársai dolgozták ki [13], [14], [15], [16], [17]. A dolgozatban több algoritmus és módszer a P-gráf keretrendszeren alapszik, ezért kiemelten kezelem a témát és az 1.3 fejezetben részletesebb áttekintést nyújtok róla.



## 1.2. Szétválasztási hálózatok szintézise

A dolgozat során két különböző fejezetben is foglalkozom szétválasztási hálózatok szintézisével, továbbiakban SNS (Separation Network Synthesis), ezért a területhez kapcsolódó szakirodalmat kiemelten, szintén az első fejezetben tárgyalom.

Az SNS egy fontos részterülete a folyamathálózat-szintézisnek. Jelentős szerepet játszik a vegyiparban és kapcsolódó iparágazatokban, ahol szinte kivétel nélkül minden folyamatnak részét képezik szeparációs lépések [18]. Az SNS feladat először az olajiparban jelent meg, azóta számos alkalmazása volt, megfigyelhető az élelmiszeriparban, mezőgazdaságban vagy akár a gyógyszeriparban. Az utóbbi évtizedekben a szétválasztási hálózatok használata a biotechnológia területén is egyre nagyobb mértékben terjedt el [19], [20]. A nélkülözhetetlen vakcinák, antibiotikumok, aminosavak és különböző enzimek előállítására teljességgel elképzelhetetlen lenne szétválasztási folyamatok nélkül [21].

A SNS feladat során az elsődleges cél a bejövő anyagáramokban szereplő komponensek szétválasztása valamilyen fizikai vagy kémiai tulajdonság alapján. Ezek a tulajdonságok lehetnek például a sűrűség, illékonyosság vagy a szemcseméret. A szétválasztó hálózat kimenetén ezek a komponensek külön-külön vagy akár egy meghatározott összetételben jelenhetnek meg, ez mindig az aktuális feladattól függ. Egy ilyen szétválasztó hálózat különböző típusú egységekből épülhet fel.

1. Az első típus a keverő berendezés, amely a bejövő anyagáramok egyesítésére szolgál. A modellezése legtöbbször egyszerűen zajlik, mivel tekintet nélkül az összetételre feladata kizárólag az anyagáramok összekeverése. A gyakorlatban nem feltétlenül jelenik meg külön berendezésként, főként összeömlő vezetékek reprezentálására szolgál.
2. A második típus a megosztó berendezés. Ennek feladata, hogy a bejövő anyagáramot egy adott arányban szétosztja a kimenetei között. A szakirodalomban a megosztók költségétől el szoktak tekinteni, mivel a gyakorlati megvalósítása nem igényel bonyolult berendezéseket, köszönhetően annak, hogy a kimeneteken nem változik meg a bejövő anyagáram összetétele, kizárólag a továbbított mennyiségeket szabályozza.

3. A harmadik, és egyben legfontosabb eleme a szétválasztó hálózatoknak maga a szétválasztó berendezés. Ezek gyakran bonyolult technológiákat (például desztillációs tornyokat) modelleznek. A bemenő anyagáramot választják szét a korábban felsorolt tulajdonságok valamelyike alapján és vágást hajtanak végre a komponenssorrend egy adott pontján (a komponenseket a vizsgált tulajdonság szerint mindig rendezettnek tekintjük, ez adja meg a komponensek sorrendjét).

A modellezés módja alapján tekinthetjük a szétválasztást élesnek vagy nem élesnek is. Éles szétválasztás esetén egy adott komponens kizárólag az egyik kimeneten jelenhet meg, míg nem éles szétválasztás esetén a komponens kis mennyiségben megjelenik a másik kimeneten is. Természetesen a második módszer áll közelebb a valós működéshez, azonban a modellezés aspektusától függően bizonyos esetekben elegendő az egyszerűbb modell használata.

A hálózatban szereplő berendezéseket többkomponensű anyagáramok kapcsolják össze. Ezek az anyagáramok megkülönböztethetőek aszerint, hogy a hálózatban hol találhatóak. Annak ellenére, hogy két anyagáram összetétele megegyezik, még külön kell kezelni őket, ha más berendezéseket kapcsolnak össze. Három különböző típusú anyagáram jelenik meg a reprezentációban. Ezek a betáplálás, köztes anyagáram és a termék anyagáram. Az elnevezések a hálózatban betöltött funkcióra utalnak.

A szétválasztó hálózatok szintézise azért fontos, mert számos olyan szétválasztó hálózat létezik, amely adott bemenő anyagáramokból a kívánt termék anyagáramokat állítja elő. Ezek a hálózatok különbözhetnek az alkalmazott szétválasztó berendezésekben vagy akár a közöttük lévő kapcsolatokban (anyagáramokban) is. Ennek következtében teljesen eltérő hálózati struktúrával is lehetőség nyílik egy adott SNS feladat megoldására. Természetesen ezek a lehetséges szétválasztó hálózatok különböző költségek mellett valósíthatóak meg. Az SNS során a cél meghatározni azt a hálózatot, amely a lehető legalacsonyabb költségek mellett elégíti ki az igényeket.

A szakirodalom hagyományosan külön vizsgálja az SNS feladatok egyes osztályainak megoldhatóságát, azonban a felhasznált megoldási módszerek hasonló megközelítéseket használnak.

A megoldó eljárás kiválasztása során legtöbbször figyelembe veszik, hogy

- milyen kiindulási struktúrával rendelkezik a hálózat,
- milyen matematikai programozási modellt kell megoldani,
- milyen keresési technikát kell alkalmazni,
- milyen költségfüggvénnyel rendelkeznek a szétválasztó berendezések.

A fenti szempontok figyelembe vétele mellett három fő osztályába sorolhatóak az SNS feladatok megoldására használható módszerek. Ezek a heurisztikus, evolúciós és algoritmikus eljárások.

A heurisztikus módszerek legfőbb előnye, hogy alkalmazhatóak ipari méretű feladatok megoldására is [22]. Lényegük, hogy a mérnöki tudásra és gyakorlatból szerzett információra építve döntések egy sorozatával egy jónak tekinthető megoldáshálózatot képesek megadni. Ezek a módszerek azokban az esetekben is egy elfogadható megoldást biztosítanak, amikor más módszerek túlságosan lassúnak bizonyulnak. Másrésztől gyakran igényelnek kézi beavatkozást bizonyos paraméterek megadásával, és nem szolgálnak semmilyen információval arról, hogy a kapott megoldás milyen messze van az optimális megoldástól [23].

Az evolúciós módszerek a számítási igényt és a megoldás minőségét tekintve a heurisztikus és az algoritmikus eljárások közé pozícionálhatóak. Az evolúciós módszerek lényege, hogy egy lehetséges megoldásstruktúrából kiindulva javító lépések segítségével határoznak meg egyre jobb megoldásstruktúrákat. Ennek feltételeit és menetét először Westerberg és szerzőtársai publikálták [24]. Seader és Westerberg egy olyan, leszámláláson alapuló stratégiát mutatott be, amely 7 különböző heurisztikus szabály alapján hozza meg a döntéseit [25].

Később megjelentek olyan megközelítések is, amelyekben kétlépéses megoldási folyamatot használtak. Ezekben először meghatározták az optimális elrendezésű hálózatot, majd a második lépésben optimalizálták a benne található folyamatokat. Ezt az eljárást addig ismételték, amíg javulást értek el a célfüggvény értékében [26], [27], [28].

Elméletben az algoritmikus eljárások alkalmasak a feladat globális optimumának meghatározására, cserébe azonban magas számítási igénnyel rendelkeznek. Az exponenciálisan

növekvő számításigénynek köszönhetően néhány esetben már közepes méretű feladatok megoldása is gondot okozhat ezeknek az eljárásoknak. Már a 80-as évek szakirodalmában is található algoritmikus módszer SNS feladatok megoldására. Floudas egy olyan eljárást publikált, amelyben többkomponensű termékeket állított elő éles szétválasztók segítségével [29]. A bemutatott algoritmus alkalmas volt a feladat szuperstruktúrájának és NLP (Nonlinear Programming) modelljének előállítására.

Quesada és Grossmann olyan hálózatok optimalizálásával foglalkoztak, amelyek keverőkből, megosztókból és lineáris feldolgozó egységekből álltak [30]. Elsősorban erőforráskezelési (pooling), keverési (blending) feladatok megoldására, valamint éles szétválasztókat tartalmazó hálózatok optimalizálására használták. A szétválasztó hálózatokban a nemlinearitás kizárólag a szétválasztó berendezések anyagegyensúlyára felírt bilineáris egyenletekben jelent meg.

Heckl és szerzőtársai egy olyan algoritmikus eljárást mutattak be, amely több szeparátorcsalád bevonását tette lehetővé [31], [32]. Az eljárásuk a korábban Kovács és szerzőtársai által bemutatott [33] szigorú szuperstruktúrán alapult, ennek következtében matematikailag bizonyítottan meg tudták határozni az optimális megoldást.

Mivel az SNS a PNS egy speciális alosztályának tekinthető, ezért sokak számára egy fontos kutatási iránynak bizonyult a P-gráf módszertan alkalmazása SNS feladatok esetében is. Ezt jól bizonyítja a Heckl és szerzőtársai által publikált átfogó tanulmány is, amelyben a szerző a P-gráf egy adaptációját ismerteti SNS feladatok megoldására [34]. Egy olyan módszert mutatott be, amelynek segítségével az SNS feladatok egy bizonyos osztályát át lehet alakítani PNS feladattá, majd az ismert P-gráf algoritmusok segítségével meg lehet oldani. Mások megmutatták, hogy a P-gráf módszertan alkalmas vegyipari folyamatok emissziós értékeinek csökkentésére [35], valamint regionális, megújuló forrásokat felhasználó energiaellátó láncok optimális tervezésére, miközben minimális értéken tartják a környezeti hatásokat [36]. Mindezek rendkívül fontos szerepet játszanak a szétválasztó hálózatok szintézisében is.

Abban az esetben, ha a matematikai modellben nemlineáris feltételek kizárólag a műveleti egységek konkáv költségfüggvényének köszönhetően jelennek meg, akkor az előálló NLP feladat megoldható szakaszos lineáris közelítő függvények használatával. Több *Branch-and-Refine* típusú algoritmus található a szakirodalomban, amelyek erre a módszerre épülnek, és hatékony eljárást adnak SNS feladatok megoldására [37], [38], [39].

### 1.2.1. SNS feladatok matematikai modellje

Hagyományosan két fajta matematikai programozási modell lelhető fel a szakirodalomban SNS feladatokra vonatkozóan [30]. A két modell közös tulajdonsága, hogy tartalmaznak nemlineáris feltételeket is.

Az első modell az úgynevezett kompozíció alapú modell, amelynek alapját az anyagáramok összetétele és együttes tömegárama adja. Ebben az esetben a nemlinearitás a keverők és szétválasztó berendezések anyagegyensúlyi egyenleteiben jelenik meg. Ennek következtében a megoldó algoritmus egy lokális optimum helyen beragadhat és ekkor nem képes meghatározni a globális optimumot [40]. Emellett azt is eredményezheti, hogy az eljárás semmilyen megengedett megoldást nem tud szolgáltatni.

A másik lehetséges modell a komponens áram alapú modell. Ez a hálózat működését az anyagáramokon belül található komponensek tömegáramának segítségével és a megosztókhöz tartozó megosztási arányok segítségével írja fel. Itt a nemlinearitást a megosztó berendezések modellje eredményezi. A 3. fejezetben bemutatásra kerülő intervallum alapú globális optimalizálási eljárás során én is ezt a modellt használom fel.

## 1.3. P-gráf módszertan

A P-gráf módszertan egy olyan optimalizálási keretrendszer, amely irányított páros gráfok segítségével modellezi a hálózatokat. Segítségével a folyamathálózatok struktúráinak reprezentálása egyértelműen lehetővé válik grafikai és matematikai szempontból egyaránt. A struktúrák kombinatorikai tulajdonságainak megfogalmazására egy jól kidolgozott axiómarendszer áll a rendelkezésre.

Ezen axiómák mindegyike lényeges a megengedett struktúrák meghatározása során, valamint ezek adják a keretrendszerhez kidolgozott három alapvető algoritmus [13], [14], [15], [16] alapját is, amelyek ezáltal a folyamathálózat-szintézis feladatok széles spektrumában hatékonyan alkalmazhatóvá válnak. Segítségükkel végigkövethetjük a hálózat-szintézis folyamatát is.

Első lépésben az MSG (Maximal Structure Generation) algoritmus redukálja a kiindulási struktúrát úgy, hogy a hálózat az építőelemekből azokat válogatja ki, amelyek közvetlenül vagy közvetve részt tud venni legalább egy termék előállításában.

Az SSG (Solution Structure Generation) algoritmus szisztematikusan leszámolja az összes kombinatorikusan lehetséges megoldásstruktúrát. Emellett az egyik legfőbb gyakorlati jelentősége az algoritmusnak, hogy segítségével hatékonyan ki lehet szűrni bizonyos modellezési hibákat. Ilyen például, ha a hálózatban szerepelnek olyan funkcionális egységek, amelyek egymástól függetlenül, egymás alternatívájaként használhatóak fel, azonban egy hibás kapcsolódási pont vagy feltétel miatt a lehetséges megoldásstruktúrákban kizárólag együtt jelennek meg.

Végül az ABB (Accelerated Branch & Bound) algoritmus generálja az optimális megoldásstruktúrát. Az ABB algoritmus egy jelentős előnnyel rendelkezik az általános célú optimalizáló eljárásokkal szemben. Nem csak a globális optimumot képes meghatározni, hanem az  $n$ -legjobb szuboptimális struktúrát vagy folyamatábrát is. Az  $n$  változó értékét a felhasználó az algoritmus futtatása előtt adhatja meg. Egy struktúra akkor tekinthető szuboptimálisnak, ha nem létezik olyan részhálózata, amely jobb megoldást ad, tehát

### 1.3.1. Alkalmazási területek

A P-gráf módszertant eredetileg vegyészmérnöki területeken történő alkalmazásra dolgozták ki Friedler és szerzőtársai [13], [14], [15], [16], [17]. Azóta számos alkalommal bizonyult kivételesen hatékony eszközznek a folyamathálózat-szintézis feladatok megoldása során [41], [42], [43], [44], [45].

A módszertant egyre szélesebb körben használják, ami a szakirodalomban is nyomon követhető. A következőkben rövid áttekintést adok, hogy melyik kiemelt területeken jelent már meg, mint felhasznált keretrendszer:

- a döntéstámogató rendszerek fejlesztése során használt folyamatstruktúrák modellezése és reprezentálása [46], [47]
- katalitikus és metabolikus reakcióutak meghatározása [48], [49], [50]
- környezetbarát rendszerek tervezése [51]
- pénzügyi, gazdasági folyamatokat leíró hálózatok tervezése [52]
- ellátási láncok modellezése [53] [54], [55], [56], [57]
- ellátási láncok tervezése nem várt események figyelembe vételével [58]

- regionális energiahálózatok tervezésének támogatása [59]
- optimális menekülési útvonalak tervezése [60], [61]

### **1.3.2. Folyamathálózat-szintézis feladatok modellezése**

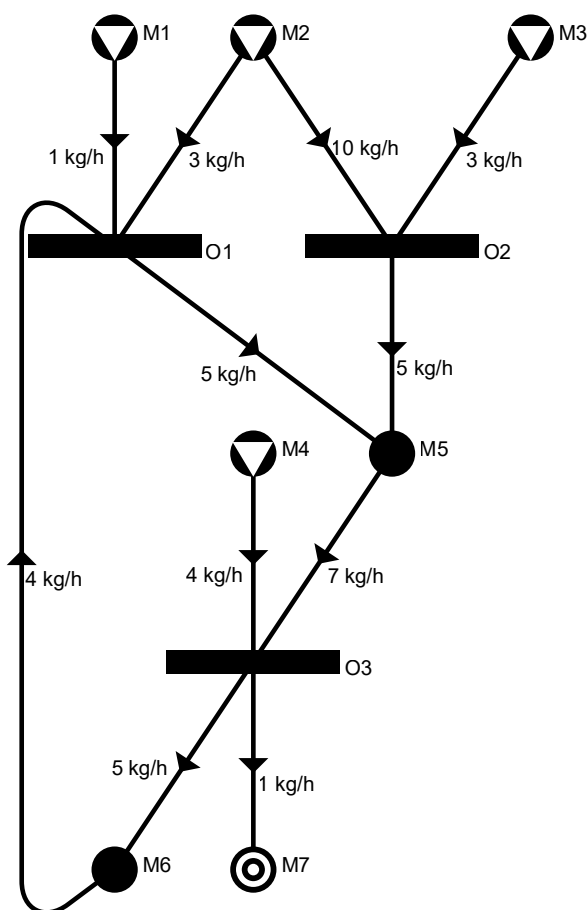
Azokat a funkcionális egységeket, amelyek valamilyen tevékenységet (előállítás, reakció, szétválasztás, konverzió, stb.) végeznek a folyamathálózatban, az úgynevezett műveleti egységek segítségével lehet modellezni. Ezek a műveleti egységek felelősek azért, hogy a folyamatábrában szereplő anyag típusú pontokat feldolgozzák, áttranszformálják. Összességében a folyamathálózat célja, hogy a rendelkezésre álló nyersanyagokat a műveleti egységek segítségével a végtermékekké alakítsa át. A közben keletkező melléktermékeket sem szabad figyelmen kívül hagyni, a felhasználható melléktermékeket vissza lehet táplálni a rendszerbe, míg a káros, illetve haszontalan melléktermékek kezeléséről is gondoskodni kell.

A folyamathálózat-szintézis során az anyagok egyértelműen definiálhatóak a komponenseik segítségével, azok koncentrációival. Ezek jelölésére az anyag típusú csúcsok szolgálnak. Az anyagokat és műveleti egységeket összekapcsoló anyagáramoknak két típusát lehet megkülönböztetni. A kapcsolódó műveleti egységek függvényében ezeket bemenő illetve kimenő anyagáramnak nevezik. Egy PNS feladatban a műveleti egységek működését a hozzá tartozó bemeneti és kimeneti anyagáramok megadásával lehet definiálni. Természetesen egy műveleti egység kimenő anyagárama egy másik műveleti egység bemenő anyagáramaként is szolgálhat.

Gyártási folyamatok tervezése során előzetesen rendelkezünk azzal az információval, hogy milyen végső termékeket kell előállítani az adott nyersanyagok felhasználásával. Így a folyamathálózat-szintézis első lépése, hogy meghatározzuk azokat a műveleti egységeket és a hozzájuk kapcsolódó köztes anyagokat, amelyek feltehetően részt tudnak venni a transzformációs folyamatban.

### 1.3.3. Struktúra reprezentáció

A P-gráf egy irányított páros gráf, amely két fajta csúcsot tartalmazhat. Amint az 1.3 ábrán is látható, az anyag típusú csúcsokat körrel, míg a műveleti egység típusú csúcsokat vízszintes téglalappal jelöli. A szakirodalom az anyagpontokat M (material) típusú csúcsnak nevezi, míg a műveleti egységeket O (operating unit) típusú csúcsnak. Az élek, amelyeken nyíl mutatja az anyagáram irányát, megadják, hogy az egyes anyagból egymáshoz képest mekkora arányban használ fel az adott műveleti egység, illetve mekkora arányban állít elő. A P-gráfban szereplő műveleti egységek jelölhetnek különálló berendezéseket a hozzájuk tartozó anyagáramokkal, de akár összekapcsolódó berendezések egy csoportját is, ez a modellezés pontosságától függ.



1.3. ÁBRA. P-gráfok strukturális reprezentációja.



### 1.3.4. Strukturálisan megengedett hálózatok

Egy P-gráfot akkor tekinthetünk strukturálisan megengedettnek, vagy megoldásstrukturának, ha teljesíti a következő 5 axiómát [13], [14], [15], [16]:

- **(S1)**: Minden végtermék reprezentálva van a gráfban.
- **(S2)**: Egy  $M$  típusú csúcsnak kizárólag akkor nincs bemenete, ha az nyersanyagot reprezentál.
- **(S3)**: Minden egyes  $O$  típusú csúcs olyan műveleti egységet reprezentál, amelyet a szintézis feladat előzetesen definiált.
- **(S4)**: Minden  $O$  típusú csúcsból vezetnie kell útnak legalább egy végterméket jelölő  $M$  típusú csúcsba.
- **(S5)**: Ha egy  $M$  típusú csúcs a gráfhoz tartozik, akkor ennek legalább egy  $O$  típusú műveleti egységnek a bemenetének vagy kimenetének kell lennie.

Az **(S1)** axióma megköveteli, hogy minden terméket legalább egy műveleti egység gyártson. Az **(S2)** axióma szerint egy anyagot csak abban az esetben nem gyárt semmilyen műveleti egység, ha az nyersanyag. Az **(S3)** axiómának köszönhetően a szintézis során csak a megengedett műveleti egységek jelenhetnek meg a hálózatban. Az **(S4)** axióma szerint bármely műveleti egységből kell vezetnie élek sorozatának valamely termékbe. Végül, az **(S5)** axióma előírja, hogy ha egy anyagpont szerepel a gráfban, akkor szerepelnie kell olyan műveleti egységnek is, amely ezt az anyagot előállítja vagy felhasználja.

Ezek az axiómák a folyamathálózatokhoz kapcsolódó alapvető követelményeket fogalmazták meg, amelyek két fő célt szolgálnak. Az első, hogy segítik a kezdeti struktúra analizálását, kizárják az olyan anyagpontokat és műveleti egységeket, amelyek semmilyen körülmények között nem vehetnek részt egy megoldásstruktúrában. Másrészt lehetővé teszik, hogy a potenciális alternatív struktúrákat minimális számítási teljesítmény ráfordítása mellett megvizsgáljuk.

### 1.3.5. Algoritmusok

A P-gráf módszertanban szereplő algoritmusok hatékonyságának egyik legfőbb oka, hogy kihasználják a PNS feladat sajátosságait. Ezek az algoritmusok támogatást nyújtanak a hálózatszintézis teljes folyamata során.

#### 1.3.5.1. MSG - Maximal Structure Generation

A polinomiális futási idővel rendelkező, az 5 axiómára épülő MSG (Maximal Structure Generation) [13], [14] algoritmus célja a matematikailag szigorú, de egyben a legegyszerűbb szuperstruktúra, azaz a maximális struktúra előállítása. Egy szintézis feladat maximális struktúrája minden olyan kombinatorikusan megengedett struktúrát tartalmaz, amely az adott nyersanyagokból a kívánt termékeket állítja elő. Így biztosított, hogy az optimális hálózat is ezek között a megengedett struktúrák között szerepel. Ezek a megengedett struktúrák széles spektrumon változhatnak az összetettségük tekintetében, a legegyszerűbbektől kezdve egészen a maximális struktúráig. Nyilvánvaló, hogy a valamilyen célfüggvénynek (legtöbbször költség minimalizálása) megfelelő optimális struktúra is a maximális struktúra része lesz, azonban ez nem szükségszerűen esik egybe a legegyszerűbb struktúrával.

#### 1.3.5.2. SSG - Solution Structure Generation

Az SSG [15] algoritmus hatékony eljárást biztosít az összes lehetséges megoldásstruktúra szisztematikus generálására, azaz bemutat minden egyes folyamatábrát, amely releváns lehet az adott tevékenységek végrehajtásában. Az SSG algoritmus kizárólag kombinatorikusan megengedett megoldásstruktúrákat generál, amelyek között szerepel a célfüggvény szerinti optimális megoldás is.

#### 1.3.5.3. ABB - Accelerated Branch & Bound

Abban az esetben, ha az SSG által generált megoldásstruktúrák száma rendkívül nagy, akkor a célfüggvény szerinti optimális struktúra meghatározása kiemelkedően időigényes feladat. A gyakorlatban a tervezőket legtöbbször csak a legjobb, vagy néhány, a legjobbhoz közel eső hálózat struktúrája érdekli. Ennek következtében egy olyan algoritmusra

van szükség, amely kizárólag ezt a néhány releváns struktúrát generálja, a többit pedig elveti. Mindez az ABB algoritmusnak köszönhetően egyszerűen megvalósítható. Mint az a nevéből is következik, alapvetően egy korlátozás és szétválasztás (Branch & Bound) [16] típusú algoritmus képezi működésének alapját.

### 1.3.6. Modellezés a módszertan segítségével

A folyamatszintézis eredményeként adottak a hálózatban potenciálisan részt vevő műveleti egységek. Ezt követően meg kell határozni a hozzájuk kapcsolódó anyagpontokat, valamint a műveleti egységek kapacitás értékét. Ezen paraméterek segítségével már megadhatóak a műveleti egységhez tartozó kilépő és belépő anyagáramok méretei is. Mindemellett meg kell adni a rendelkezésre álló nyersanyagok mennyiségét, valamint a termékekből előállítani kívánt mennyiségeket is. Figyelembe kell venni, hogy a köztes anyagok és melléktermékek esetében a bruttó termékmennyiség nem lehet negatív, azaz minden anyagból legalább annyit kell termelni, mint amennyit a rendszer felhasznál belőlük. Abban az esetben, ha egy köztes anyag mennyiségére vonatkozó felső korlát értéke 0, akkor nem szabad belőle többet előállítani, mint amennyi felhasználásra kerül, azaz maradék nem keletkezik a termelés során.

A P-gráf reprezentáció egyértelműen jeleníti meg a PNS feladatban szereplő strukturális és kombinatorikus tulajdonságokat, valamint a kapott struktúrákat.

- Ha egy műveleti egység több belépő anyagárammal rendelkezik, akkor az összes anyagáramnak rendelkezésre kell állnia ahhoz, hogy a műveleti egység megfelelően működjön. Ez a viselkedés egy logikai **ÉS** kapcsolatot valósít meg.
- Abban az esetben, ha egy anyagot több, különböző műveleti egység is elő tudja állítani, akkor ezek bármilyen kombinációja kielégítheti a rá vonatkozó mennyiségi igényeket. Ez a viselkedés a logikai **VAGY** kapcsolatot valósítja meg.

Ennek következtében például egy keverőt nem lehet  $O$  típusú csúccsal reprezentálni, mivel megkövetelné, hogy minden egyes bemenetének jelen kell lennie a keverés során, azonban a valós működés ezt nem követeli meg. Az  $M$  típusú csúcs használata során legalább az egyik forrás rendelkezésre kell, hogy álljon, de nem szükséges az összesnek, tehát ebben az esetben megfelelő megoldásnak bizonyul.

A műveleti egységek által reprezentált berendezések méretének becsléséhez korábbi tanulmányok vagy szimulációs szoftverek (pl. Aspen plus) eredményei használhatóak fel. A nyersanyagok és berendezések árainak meghatározásakor az aktuális piaci adatokat célszerű figyelembe venni, illetve különböző eljárások segítségével a méret függvényében becsléseket lehet végezni. Mindezt követően a hálózat teljes költségét az ABB algoritmus adja meg, amely figyelembe veszi a műveleti egységek működési költségeit, a nyersanyagok árát, valamint a beruházási költségeket is.

## 2. fejezet

# Folyamathálózatok és szétválasztási hálózatok integrált szintézise

### 2.1. Bevezetés

A termelési folyamatok struktúrája alapjaiban változott meg az elmúlt évtizedekben. Míg korábban egy-egy vegyipari gyártási eljárást úgy terveztek meg, hogy akár több éven keresztül is változatlan formában kerüljön végrehajtásra, addig napjainkban az állandó változás, és az ehhez történő alkalmazkodás jellemző. Úgy ítélték meg, hogy ha a korlátlanul rendelkezésre álló nyersanyagok feldolgozására megterveznek egy jól működő folyamatot, akkor az hosszú időn keresztül, változatlan formában fenntartható lesz. Ezzel szemben manapság a megújuló energiaforrások, alternatív technológiai megvalósítások kerültek előtérbe, amelyek megjelenése a modellezés során új kihívás elé állította a mérnököket.

A modellben megjelenő új változók figyelembe vétele olyan nagyméretű és összetett rendszerek optimalizálását tette szükségessé, amelyeknél már nem elegendő a szakemberek gyakorlati tudására épülő heurisztikus eljárások alkalmazása, hanem olyan speciális módszerek és célszoftverek használatát igénylik, amelyek hatékonyan képesek támogatni a tervezést.

Kutatásaim egyik fő irányvonala az olyan összetett folyamatok vizsgálata volt, amelyek egyaránt tartalmaznak gyártó és szétválasztó tevékenységeket is. Az ilyen típusú feladatokra a továbbiakban az angol elnevezésből származtatott IPSNS (Integrated Process and Separation Network Synthesis) rövidítéssel fogok hivatkozni. Tehát az IPSNS célja, hogy egyidejűleg határozza meg a kívánt termékek előállításának és szétválasztásának módját. Korábban az ilyen feladatokat jellemzően szétbontva oldották meg, egymást követően dolgozták ki a különböző funkciókat megvalósító részeket. Ezek a szekvenciális módszerek először az optimális folyamathálózatot tervezték meg, majd ezt követően a hozzá tartozó optimális szétválasztási hálózatot. A fejezetben bemutatom az általam kidolgozott integrált módszer előnyeit a hagyományos, szekvenciális módszerrel szemben. Az IPSNS feladatok megoldásához az irodalmi áttekintés 1.3 fejezetében ismertetett P-gráf módszertant használom fel.

Az SNS feladatok jellemzően olyan elemekkel rendelkeznek, amelyeket közvetlenül nem lehet a P-gráf módszertan segítségével modellezni. Ez szükségessé teszi, hogy első lépésben a szétválasztási részhálózatokat át kell konvertálni olyan formátumba, amelyet a módszertan már képes kezelni. Megmutatom, ha tiszta termékes szétválasztási feladatot tekintünk, ahol a szétválasztók költségfüggvénye fix és arányos résszel rendelkezik, akkor az átalakítás elvégezhető. Ennek érdekében bevezetem a szétválasztási részhálózatok ábrázolására a komponensáram-alapú PNS reprezentációt. Ennek feltételeit és lépéseit részletekbe menően a 2.2 fejezetben fogom ismertetni.

Miután sikerült felírni külön-külön a folyamathálózathoz és szétválasztási részhálózatokhoz tartozó maximális struktúrát, fontos lépés ezek összekapcsolása annak érdekében, hogy megkapjuk az IPSNS feladat maximális struktúráját. Végül a P-gráf módszertan egyik hatékony algoritmusának, az ABB algoritmus segítségével meghatározom az integrált maximális struktúrához tartozó optimális – vagy igény esetén – n-legjobb megoldást. A teljes folyamatot egy valós vegyipari példán, a vinyl-klorid monomer (VCM) előállításán keresztül mutatom be a 2.5 fejezetben.

## A fejezethez tartozó jelölésjegyzék

### Anyagáramok

$B(k_1, k_2, \dots, k_n)$  A  $k_1, k_2, \dots, k_n$  komponenseket tartalmazó betáplálás

$k_i$  Az anyagáram  $i$ . komponense

### Berendezések, technológiák

$D(i)$  Az  $(i)$ . megosztó berendezés

$M(i)$  Az  $(i)$ . keverő berendezés

$Re(i)$  Az  $(i)$ . összetett reakciós hálózati egység

$R(i)$  Az  $(i)$ . reakció

$S_{x,x+1}$  Szétválasztó berendezés, amely az  $x$ . és  $x + 1$ . komponens között vág

$Tech(i)$  Az  $(i)$ . gyártási technológia

### Anyag típusú pontok

$Inter(i)$  Az  $(i)$ . köztes termék, amely közvetlenül felhasználható

$Mix(i)$  Az  $(i)$ . többkomponensű köztes termék (szét kell választani)

$Product$  Előállítani kívánt termék

$Raw(i)$  Az  $(i)$ . nyersanyag

$Sp(i)$  Az  $(i)$ . melléktermék

## 2.2. Komponensáram-alapú P-gráf reprezentáció

A fejezet során meghatározom azt az SNS feladatosztályt, amelyre az új módszer alkalmazható, valamint megadom, hogy miként lehet egy adott feladathoz tartozó maximális struktúrát felírni. Ezt követően ismertetem a konverziós lépéseket, amelyekkel megvalósítható a vizsgált SNS feladattípus P-gráf reprezentációja.

### 2.2.1. A vizsgált SNS feladatosztály bemutatása

Az általános SNS feladatokat nem lehet átalakítani PNS feladattá, mivel olyan műveleti egységeket tartalmaznak, amelyek működése nem modellezhető a P-gráf módszertan axiomarendszerének betartása mellett. Az egyik ilyen műveleti egység a keverő berendezés, amelynek kimenetén végtelen sok féle anyag jelenhet meg, miközben a PNS feladatban egy berendezés kimenete előre definiált, véges sok féle anyag lehet.

Munkám során egy olyan eljárás kidolgozását tűztem ki célul, amely elsősorban vegyipari gyártási folyamatok optimalizálására alkalmas. A vizsgált feladatosztály jellemzője, hogy a termékek előállítása során végrehajtott reakciók legtöbbször nem tisztán tartalmazzák az előállítani kívánt anyagot, hanem bizonyos melléktermékeket is tartalmaz az elegy. Ezért a reakciókat szinte mindig követi egy szétválasztási rész, amelynek feladata, hogy eltávolítsa ezeket a melléktermékeket. A gyakorlatban ezek a szétválasztó folyamatok nem 100%-os hatékonysággal működnek, mindig marad némi szennyeződés az előállított anyagokban, azonban a modellezési eljárás során ettől eltekintek, és éles szétválasztókat, valamint tiszta termékeket használok.

Egy másik sarkalatos pontja a modellezési folyamatnak a berendezések költségeinek meghatározására alkalmazott költségfüggvény kiválasztása. Leggyakrabban nemlineáris, konkáv költségfüggvényt használnak a szétválasztó berendezések modellezésére. A P-gráf módszertan tetszőleges költségfüggvénnyel alkalmazható, azonban az implementált megoldó szoftverek kizárólag lineáris költségfüggvények kezelését támogatják és esetükben garantálják az optimális hálózat meghatározását. Ezért az általam kidolgozott eljárásban is lineáris költségfüggvények alkalmazása mellett döntöttem. Ez a döntés nem egyedülálló a szakirodalomban, korábban már többször használtak lineáris költségfüggvényt: Heckl [31], [34], Floudas [29], Wehe és Westerberg [62], Quesada és Grossmann [30].



Heckl és szerzőtársai korábban bemutatták [32], hogy miként lehet tiszta, illetve több komponensből álló termékeket előállító szétválasztó hálózatokat PNS feladattá átalakítani. A szerzők a modellezés során a szétválasztó berendezéseket lineáris, kizárólag arányos résszel rendelkező költségfüggvénnyel vizsgálták. Az általam bevezetett új módszer egyik újdonsága, hogy a pontosabb modellezés érdekében fix résszel rendelkező lineáris költségfüggvényt használok a szétválasztó berendezések költségének meghatározására. Ez a változtatás jelentős hatással bír az optimális hálózat meghatározása során, erre példát mutatok a 2.4 fejezetben is. Egy további jelentős különbség a hivatkozott publikációval kapcsolatban, hogy míg a szerzők az átalakított SNS feladat maximális struktúráját önállóan vizsgálták a P-gráf módszertan eszközeivel, addig jelen munkámban integráltan, egy olyan nagy hálózat részeként, amely további szétválasztási és gyártási részhálózatokat tartalmaz. A továbbiakban a vizsgált feladattípusra linfix szétválasztási feladatként hivatkozok.

### **2.2.2. A feladatosztály maximális struktúrája**

A folyamatszintézis területén használt matematikai programozási eljárások két fő lépésből épülnek fel. Az első a matematikai modell felírása, amelyet a modell megoldása követ. Az első lépésben jelenik meg maga a szintézis, míg a második lépés főként a hálózat analíziséből áll. A korai, matematikai programozásra épülő folyamatszintézis eljárások többségében a második lépéssel, az analízissel foglalkoztak kiemelten, amely feltételezte a matematikai modell rendelkezésre állását. Ezeket a modelleket legtöbbször a szuperstruktúra alapján írták fel, amely ezáltal kiemelten fontos szerepet kapott a folyamatszintézis területén [63], [64], [65], [66].

Annak ellenére, hogy a megoldás szempontjából mennyire fontos szerepet játszik a szuperstruktúra, a 90-es évekig nem vizsgálták mélyrehatóan az alapvető matematikai tulajdonságait, illetve nem adták meg a szigorú matematikai definícióját sem. Először Friedler és szerzőtársai mutattak be egy matematikai alapokra épülő, gráfelméleti megközelítést [67] a folyamatszintézis feladatok kezelésére, valamint megadtak egy polinom futási idejű algoritmust (MSG) [14], amely szisztematikusan generálja a szuperstruktúrát, ami garantáltan tartalmazza az optimális megoldást. A vizsgálatok során kiemelten vizsgálták a két kérdést, miszerint a feladat modellje tartalmaz-e felesleges műveleti egységeket, azaz a szükségesnél nem komplexebb-e a modell, valamint garantáltan tartalmaz-e minden

olyan műveleti egységet, amely szerepet játszhat az optimális struktúrában. A meghatározott szuperstruktúrát elnevezték maximális struktúrának.

Egy maximális struktúra a feladathoz tartozó összes, kombinatorikusan lehetséges megoldásstruktúra unióját jelöli. Ebben a fejezetben megadok egy olyan eljárást, amely a linfix szétválasztási feladat speciális tulajdonságait kihasználva algoritmikusan generál maximális struktúrát.

A jobb áttekinthetőség érdekében ismételten kiemelem a linfix szétválasztási feladat meghatározó tulajdonságait:

1. A hálózatban éles szétválasztó berendezések szerepelnek.
2. A szétválasztó berendezések lineáris, fix részt tartalmazó költségfüggvénnyel rendelkeznek. A hálózat költségét a szétválasztó berendezések költségének összege adja.
3. A szétválasztási feladat során egy betáplálásból tiszta termékeket kell előállítani. Minden komponens külön termékként jelenik meg.

A maximális struktúra helyességét két lépésben bizonyítom. Az első lépésben megmutatom, hogy egy ilyen SNS feladathoz tartozó optimális megoldásstruktúra milyen tulajdonságokkal rendelkezik. Ezt követően megadok egy olyan algoritmust, amely szisztematikusan állít elő egy olyan maximális struktúrát, amely garantáltan tartalmazza az összes ilyen tulajdonsággal rendelkező megoldásstruktúrát.

Jelölje az  $n$  komponensből álló betáplálást  $B(k_1, k_2, \dots, k_n)$ . A komponensek szétválasztását egy szétválasztó család tagjainak segítségével lehet végrehajtani.  $n$  komponens esetén,  $n - 1$  különböző szétválasztó berendezés áll rendelkezésre, ahol  $S_{x,x+1}$  jelöli az  $x$ . és  $x + 1$ . komponensek között vágó berendezést. Ekkor az optimális megoldásstruktúrára a következő tulajdonságok érvényesek:

1. **Állítás:** A linfix szétválasztási feladat esetében az optimális megoldásstruktúra minden szétválasztó berendezéstípusból legalább egyet tartalmaz.

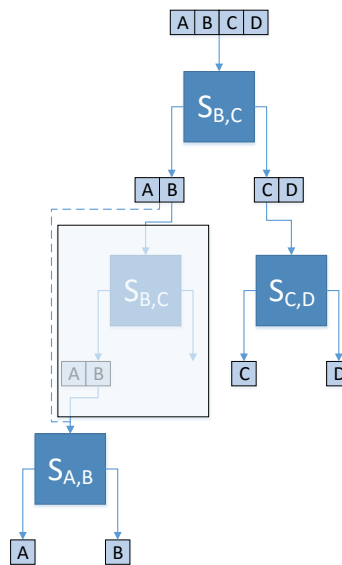
**Bizonyítás:** Egy  $n$  komponensből álló betáplálást  $n$  darab tiszta termékre kell szétbontani. Ez kizárólag úgy lehetséges, ha minden szomszédos komponenspár

között vágás történik. Ehhez az összes,  $n - 1$  féle szétválasztó berendezésből legalább egyet fel kell használni.

2. **Állítás:** Az optimális megoldásstruktúra minden szétválasztó berendezéstípusból legfeljebb egyet tartalmaz.

**Bizonyítás:** Tegyük fel, hogy az  $S_{k_i, k_{i+1}}$  szétválasztó 2-szer szerepel a hálózatban. Ekkor tekintsük a betáplálástól távolabb eső berendezést. Ennek a bemenő anyagárama a korábbi  $S_{k_i, k_{i+1}}$  szétválasztó tevékenységének köszönhetően az  $\{k_1 \dots k_i\}$  vagy  $\{k_{i+1} \dots k_n\}$  komponensek egy részhalmazát tartalmazza. Ennek következtében a vizsgált szétválasztó nem hajt végre valós szétválasztást a bemenetén. Így a szétválasztó elhagyásával csökkenthető a hálózat teljes költsége úgy, hogy a termékek változatlanok maradnak.

Ezt szemlélteti a 2.1 ábra a 4 elemű  $R(A, B, C, D)$  betáplálás esetén. A szaggatott vonal jelzi, hogy az  $A, B$  komponenseket tartalmazó anyagáram közvetlenül beköthető az  $S_{A,B}$  szétválasztóba a második  $S_{B,C}$  szétválasztó kihagyásával. Ekkor a hálózat ugyanazokat a termékeket állítja elő, csak olcsóbban (a második  $S_{B,C}$  szétválasztó költségeivel kevesebb).



2.1. ÁBRA. Ismétlődő szétválasztó berendezés kihagyása.

3. **Állítás:** Az optimális megoldásstruktúra nem tartalmaz bypass.

**Bizonyítás:** A bypass egy közvetlen áramot jelent a betáplálástól a termékig. Ha lenne bypass az optimális struktúrában, akkor a többkomponensű betáplálás közvetlenül a termékbe lenne vezetve, ami ellentmond a tiszta termék feltevésnek.

4. **Állítás:** Létezik olyan optimális megoldásstruktúra, amely nem tartalmaz megosztó berendezést.

**Bizonyítás:** Az állítás bizonyítása indirekt úton történik. Tegyük fel, hogy minden optimális megoldásstruktúra tartalmaz megosztó berendezést. Jelölje  $D$  a megosztót, amelynek bemenete  $\{k_i, k_{i+1}, \dots, k_{l-1}, k_l\}$ , ahol  $1 \leq i, l \leq k$ . A megosztó kimenetei az  $\{\lambda * k_i, \lambda * k_{i+1}, \dots, \lambda * k_{l-1}, \lambda * k_l\}$  és  $\{(1 - \lambda) * k_i, (1 - \lambda) * k_{i+1}, \dots, (1 - \lambda) * k_{l-1}, (1 - \lambda) * k_l\}$  anyagáramok, ahol  $0 \leq \lambda \leq 1$ . A megosztó berendezések alapvető működéséből következik, hogy a megosztás során nem változtatja meg a komponensek arányát, kizárólag a teljes anyagáram méretét csökkenti  $\lambda$  és  $1 - \lambda$  arányokban. Ennek következtében a kimenetek komponens-aránya is megegyezik, így mindkét kimenethez ugyanazt a szétválasztó hálózatot kell felépíteni. Ilyen esetben a megosztó elhagyásával csökkenthető a teljes költség, mert a szétválasztók költségfüggvényének fix része miatt két kisebb szétválasztó költsége több lesz, mint egy nagyé, tehát a hálózat nem lehet optimális.

Az 1. és 2. állításból következik, hogy az optimális megoldás minden szétválasztó típust pontosan egyszer tartalmaz, valamint nem tartalmaz bypass és megosztó berendezést sem, tehát a szétválasztó berendezések alkalmazásának megfelelő sorrendjét kell meghatározni.

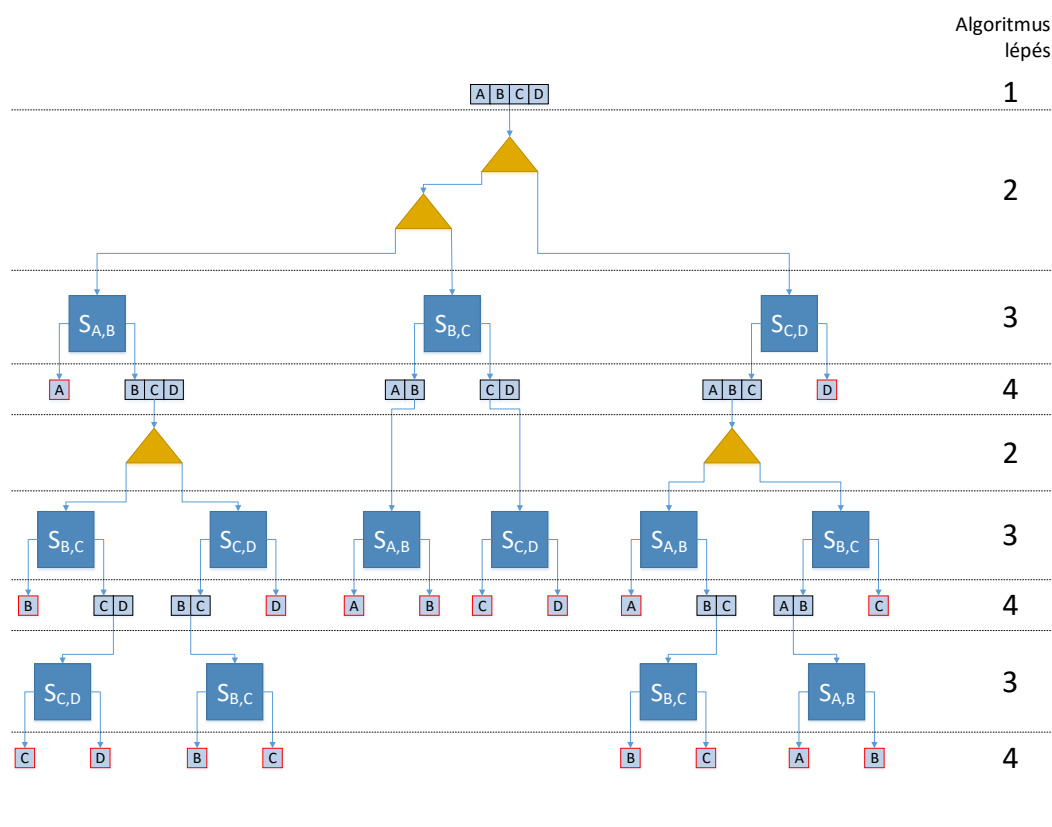
A második lépésben a maximális struktúraként egy olyan egyszerű fastruktúrát építünk fel, amely tartalmazza a szétválasztó berendezések összes lehetséges sorrendjét. Az algoritmus a következő lépéseket hajtja végre:

### Maximális struktúra generáló algoritmus

1. Felveszem a betáplálást, mint anyagáramot. Ez lesz a fa gyökere.
2. Megosztó berendezések segítségével az  $n$  komponensű anyagáramot felbontom  $n - 1$  anyagáramra. 2 komponens esetén nincs szükség megosztóra. (Korábban bemutattam, hogy az optimális struktúra nem tartalmaz megosztót, de a szuperstruktúra

még tartalmazhat. Az optimalizálás után azt kapjuk, hogy a szuperstruktúrában lévő megosztóknak csak egy kimenete lesz, vagyis a megosztó elhagyható.)

3. Minden keletkező anyagáramot bekötök egy szétválasztó berendezésbe, ahol az első berendezés az első és a második, a második berendezés a második és harmadik komponens között vág, stb.
4. A keletkező kimeneteket felveszem anyagáramként.
5. Minden új anyagáramra végrehajtom a 2. és 3. lépést mindaddig, amíg minden anyagáram egyetlen komponensből nem áll.
6. Az azonos komponenseket keverők segítségével egyesíteni kell. A keverők kimenetei jelentik a termékeket.



2.2. ÁBRA. A maximális struktúra felépítésének lépései egy 4 komponensű betáplálás esetén.

Az algoritmus a 2.2 ábrán látható faszerkezetet szintenként építi fel. A jobb oldalon látható számok jelzik, hogy az algoritmus melyik lépése került végrehajtásra az adott

szint előállításánál. A pirossal jelölt anyagáramok már csak egyetlen komponenset tartalmaznak, így azok már végtermékeknek tekinthetők. A végleges maximális struktúra eléréséhez ezeket a folyamatokat kell egyesíteni a keverők segítségével. A hálózatban szereplő megosztó berendezések kizárólag a lehetséges sorrendek közötti választást teszik lehetővé, valódi megosztást nem hajtanak végre a 4. állítás következtében.

### 2.2.3. A szétválasztó hálózatok építőelemeinek átalakítása

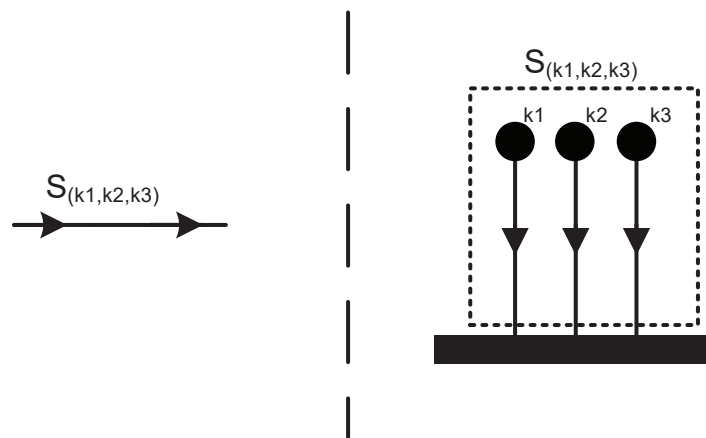
Az SNS feladatok egyik legfőbb jellemzője, hogy a hálózatban szereplő anyagáramok több komponensből épülnek fel, valamint bizonyos berendezések hatására az anyagáramok felépítése megváltozhat. Ilyen például a szétválasztó berendezés, amely a bejövő anyagáramon szétválasztást hajt végre legtöbbször valamilyen fizikai vagy kémiai tulajdonság alapján, majd a komponensek egy része az egyik, míg más része a másik kimeneten halad tovább. Ahhoz, hogy reprezentálni lehessen az anyagáramok komponens összetételét a P-gráfok segítségével is, bevezettem a komponensáram-alapú P-gráf reprezentációt.

A reprezentáció egyik legfőbb tulajdonsága, hogy a hagyományos P-gráf elemek segítségével lehet a szétválasztó hálózatokra jellemző berendezéseket és anyagáramokat komponensenként megjeleníteni. Ez nagyban elősegíti a hálózat átláthatóságát és az egyes komponensek mozgásának nyomon követését.

A következőkben ismertetem, hogy a szétválasztási feladatokban szereplő egyes részeket miként lehet reprezentálni komponensáram-alapú P-gráfok segítségével.

#### 2.2.3.1. Anyagáramok

Egy  $n$  komponensből álló anyagáramot a  $(k_1, k_2 \dots k_n)$  vektorral adom meg, ahol minden  $k_i \in R^+$  az áramban szereplő  $i$ . komponens mennyiségét határozza meg. A teljes anyagáram mennyiségét a komponensek mennyiségének összege adja meg. A rendelkezésre álló szétválasztási eljárásoknak megfelelően a komponenseket valamilyen módon rendezettnek tekintem. A hagyományos SNS reprezentáció során egy anyagáramot irányított éllel jelölök, amelyen feltüntettem a komponens-összetételét.



2.3. ÁBRA. Ugyanazon három komponensből álló anyagáram SNS és P-gráf reprezentációja.

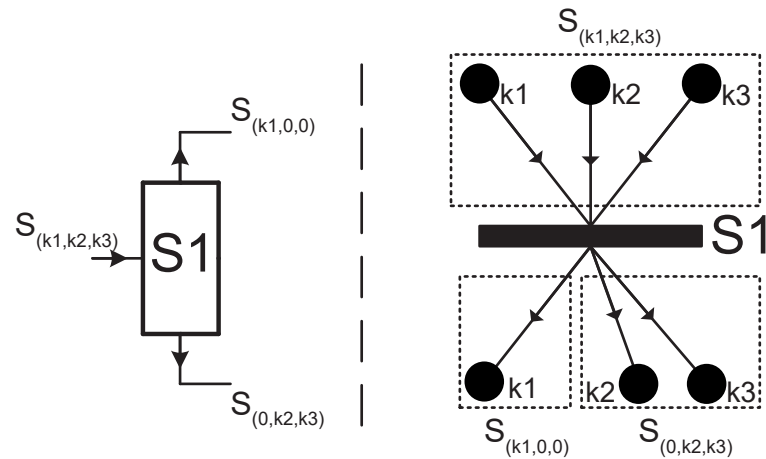
A komponensáram-alapú P-gráf esetében minden egyes komponenst egy külön éllel reprezentálok, viszont ezeket az éleket együtt kezeltem, mivel közösen reprezentálják az adott anyagáramot. A 2.3 ábra mutatja be, hogy miként lehet átalakítani egy három komponensből álló  $(k_1, k_2, k_3)$  anyagáramot.

### 2.2.3.2. Szétválasztó berendezések

A szétválasztó berendezések a belépő anyagáramot pontosan két kilépő anyagárammá választják szét valamilyen kémiai vagy fizikai tulajdonság alapján. A 2.4 ábra egy egyszerű, éles szétválasztót mutat be, amely a három komponensből álló belépő anyagáramot a második és harmadik komponens között választja szét.

A PNS konverzió feltétele, hogy a vizsgált szétválasztó hálózat maximális struktúrájában csak véges sok féle összetétellel rendelkező anyagáram szerepeljen. A szétválasztó berendezések képesek megváltoztatni az összetételt, de mivel éles szétválasztókkal modellezem ezeket a berendezéseket, ezért egy komponensáram méretére kétféleképpen lehet hatással. A szétválasztás típusától függően az adott komponens méretét 0-ra csökkenti az anyagáramban, vagy pedig változatlanul hagyja. Ez a viselkedés lehetővé teszi a szétválasztó berendezések P-gráf reprezentációját.

A komponensáram-alapú P-gráf reprezentáció esetében a szétválasztót egy hagyományos műveleti egységgel jelölöm, azonban a kilépő komponensáramokat már a szétválasztásnak megfelelően külön kezeltem. Ez a gyakorlatban annyit jelent, hogy külön-külön egy



2.4. ÁBRA. Egy szétválasztó berendezés hagyományos és P-gráf reprezentációja. A berendezés az első és második komponens között hajt végre szétválasztást.

műveleti egység bemenetét képezik, vagy termékként jelennek meg. A 2.4 ábra az említett három komponensből álló anyagáramot szétválasztó berendezés új reprezentációját is tartalmazza.

### 2.2.3.3. Keverő berendezések

Jelen munkám során olyan tiszta termékes SNS feladatokkal foglalkozom, ahol az éles szétválasztó berendezések lineáris, fix részt tartalmazó költségfüggvénnyel rendelkeznek. Heckl és szerzőtársai megmutatták [34], hogy lineáris költségfüggvény esetén létezik olyan optimális megoldás, amelyben keverők kizárólag közvetlenül a termékek előtt fordulnak elő.

Ez egy fontos tulajdonság, mivel a keverő berendezések azok, amelyek meg tudják változtatni az anyagáramok összetételét. Abban az esetben, ha csak a tiszta termékek előtt helyezkednek el, nem kell attól tartani, hogy a keverők a bemenetekből tetszőleges összetételű anyagot létre tudnak hozni [32]. Ennek köszönhetően már lehet ábrázolni az anyagpontokat a P-gráf módszertan segítségével is.

Akkor, ha az SNS feladat több betáplálással rendelkezik, szükség lehet keverő berendezések használatára. Tekintsük a következő példát: a hálózat tartalmaz két olyan anyagáramot, amelyeken ugyanazokat a szétválasztási lépéseket kell végrehajtani. A kizárólag arányos részt tartalmazó költségfüggvény esetében megengedett volt, hogy bár a gyakorlatban ugyanazokat a berendezéseket használjuk a szétválasztásra, a modellben teljesen



külön kezeljük vagy összevonjuk őket [34]. Ha egy 100kg/óra és egy 200kg/óra hozammal rendelkező anyagáramon ugyanazt a szétválasztást kell végrehajtani, akkor megegyezik a teljes költség a következő két esetben:

- külön-külön elvégezzük a szétválasztást és összeadjuk a költségeket,
- az összevont, 300kg/óra hozammal rendelkező anyagáramon hajtjuk végre a szétválasztást.

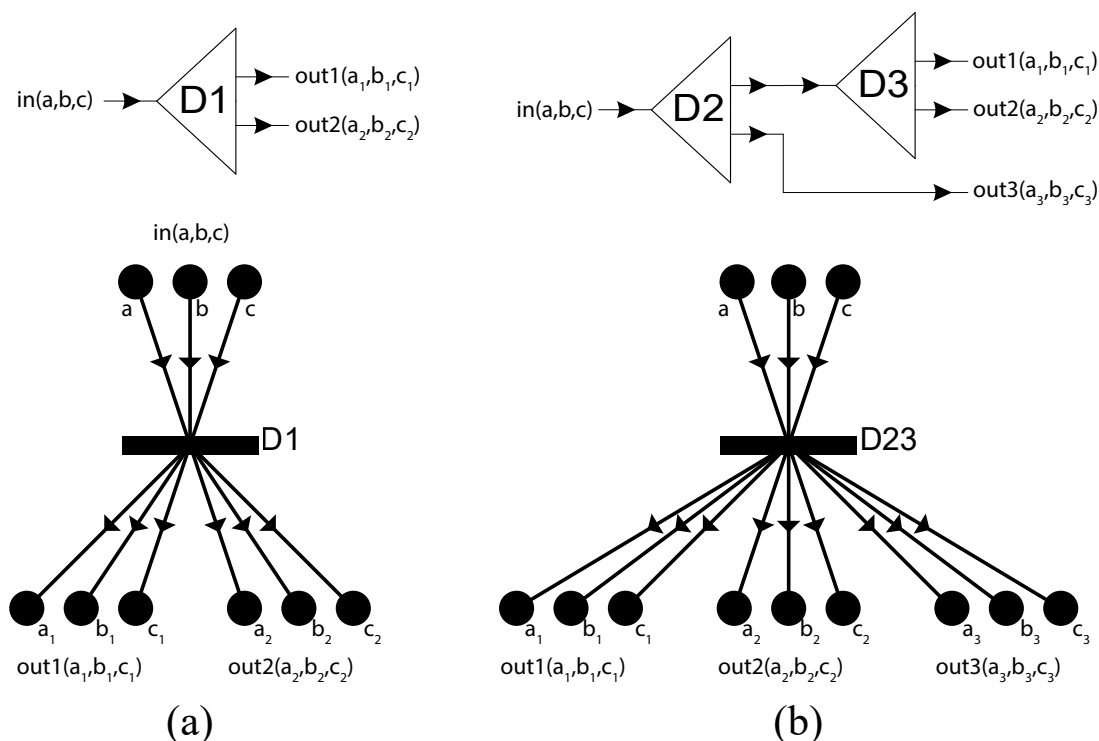
Fix részt tartalmazó költségfüggvény esetében ez már nem valósítható meg, mivel ekkor a fix részt kétszer is hozzáadja a teljes költséghez, holott elegendő lenne egyszer. Ennek a problémának a kezelésére egy speciális módszert vezettem be az olyan keverő berendezések modellezésére, amelyek nem közvetlenül termékek előtt helyezkednek el. A módszer részletes bemutatása a 2.3.6 fejezetben található meg.

#### **2.2.3.4. Megosztó berendezések**

Az egyszerű megosztó berendezések a belépő anyagáramot úgy továbbítják a két kimenetükre, hogy közben a komponensarányok változatlanok maradnak, tehát ugyanaz lesz, mint a belépő anyagáramnál. A gyakorlatban ez egy olyan egyszerű feladatot jelent, amelyre nem szoktak speciális berendezéseket alkalmazni, ezért legtöbbször a művelet költségétől is el szoktunk tekinteni.

Ennek ellenére a modellezés során a megosztó berendezések anyagegyensúlyához kapcsolódóan nemlineáris feltételek jelennek meg. Ezt részletesebben a 3. fejezetben is ismerttettem. A 2.2.2 fejezetben bebizonyítottam, hogy létezik olyan optimális megoldásstruktúra tiszta termékes éles, fix részt tartalmazó, lineáris költségfüggvényű SNS feladatok esetében, amely kizárólag olyan megosztókat tartalmaz, amelyek nem végeznek valós megosztást, a teljes bemenetüket vagy az első, vagy a második kimenetükre továbbítják, tehát egy kizáró vagy műveletet valósítanak meg. Ezeknek a berendezéseknek a P-gráf reprezentációja könnyen megvalósítható, elegendő a kérdéses anyagáramhoz tartozó komponenseket reprezentáló anyagpontokból annyi kimenő élt felvenni, ahány lehetséges alternatívát szeretnénk megvalósítani. Természetesen kettőnél több felé is irányítható a belépő anyagáram, ám ekkor az SNS reprezentációban több megosztó berendezést kell összekapcsolni. A 2.5 ábra *a* részén felül látható a hagyományos SNS megvalósítás és

alatta a P-gráf reprezentációja. Hasonlóan, a három kimenetre vonatkozó megvalósítás látható a 2.5 ábra *b* részén. Analóg módon mindkét esetben felépíthető a megosztás tetszőleges számú kimenet esetén.

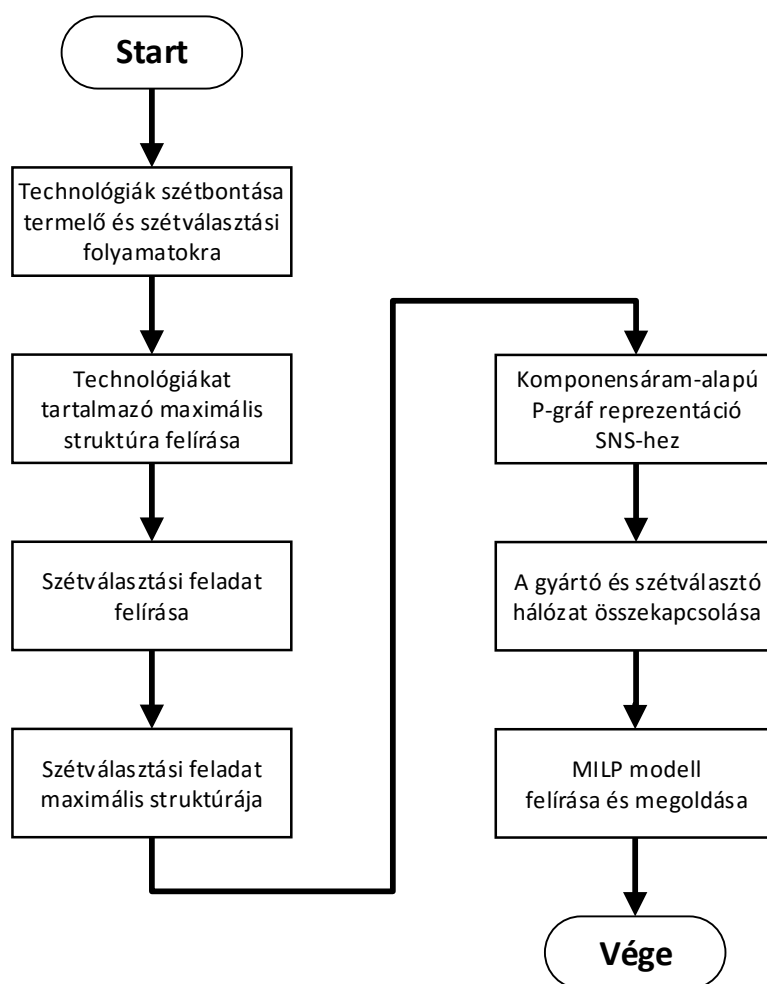


2.5. ÁBRA. A két (a) és három (b) kimenetű megosztó berendezések hagyományos és P-gráf reprezentációja.

### 2.3. Az IPSNS feladat megoldási folyamata

A komponensáram-alapú P-gráf reprezentáció egyik fontos alkalmazási területét az IPSNS feladatok modellezése és megoldása jelenti. Ez esetben is a PNS feladatokra jellemző eljárást követem a megoldás során. Először létrehozok egy olyan maximális struktúrát, amely tartalmaz minden lehetséges megoldásstruktúrát, így az optimális megoldást is. Ezt követően felírom a maximális struktúrához tartozó matematikai modellt. Ennek megoldásával meghatározom az optimális struktúrát. Az általam elért eredmény a maximális struktúra új módszerrel történő meghatározásában jelenik meg, az optimális megoldást a P-gráf módszertan részét képező ABB algoritmus segítségével határozom meg.

A 2.6 folyamatra segítségével végigkövethetjük egy IPSNS feladat megoldását. A továbbiakban bemutatom a megoldási folyamat egyes lépéseit, az új eredményeket tartalmazó részeket pedig részletesebben ismertetem egy egyszerű mintafeladat segítségével.



2.6. ÁBRA. Az IPSNS feladat megoldásának folyamatábrája.

Egy teljes termelési hálózat a különböző gyártási technológiák összekapcsolásával írható fel. Egy gyártási technológia alatt nem csak egy specifikus berendezés működése érthető, hanem egy összetett folyamat, amely akár több lépésből is állhat. Példaként tekintsük a 2.5 fejezetben ismertetett valós vegyipari példában szereplő egyik ilyen folyamatot. A hivatkozott szakirodalomból vett példában [68] *Re1* jelöl egy úgynevezett reakciós egységet. Ez az egység egy összetett folyamatot jelöl, a direkt klórozó reaktort, amely több berendezésből épül fel. Az etilén direkt klórozása során a tökéletesen kevert tank

reaktort (CSTR) és a dugós áramlású reaktort (PFR) a keletkezett etilén-diklorid (EDC) tisztítása követi. Ez két desztillációs oszlop segítségével valósul meg, az egyik felel a könnyű, a másik a nehéz melléktermékek elválasztásáért.

Az, hogy milyen részletességgel kerül ábrázolásra egy ilyen folyamat, az alkalmazott modellezés finomságától függ. Lehet akár egyetlen műveleti egységgel jelölni az egész folyamatot, de akár minden egyes fizikai berendezés külön-külön is megjeleníthető a hálózatban. A részletesebb modell pontosabban közelíti a valós működést, de figyelembe kell venni, hogy megnő a megoldandó optimalizálási feladat bonyolultsága is.

Az ilyen összetett gyártási technológiákra jellemző, hogy a lépések sorrendje nem minden esetben kötött. Az előző példát alapul véve, az alkalmazott desztilláló oszlopok technológiailag nem kötik meg, hogy milyen sorrendben kell a könnyű és nehéz melléktermékeket szétválasztani az etilén-dikloridtól. A szétválasztási lépések sorrendje döntő befolyással bír nem csak az adott folyamatra (etilén direkt klórozása), hanem akár az egész termelési hálózatra is. Ez tette szükségessé, hogy a termelő hálózat szintézis vizsgálatát kibővítssem a szétválasztási hálózatok szintézisével, egy egészként vizsgálva a teljes hálózatot és keresve az optimális megoldásstruktúrát.

A továbbiakban egy példán keresztül mutatom be, hogy a termelés során felhasználható adott gyártási technológiák ismeretében miként lehet felírni egy olyan integrált hálózatot, amelynek további vizsgálatával meghatározható a kívánt termékeket előállító optimális megoldásstruktúra.

A mintafeladat három különböző gyártási technológiát tartalmaz, amelyeket a könnyebb követhetőség érdekében rendre *Tech1*, *Tech2*, *Tech3* jelöléssel láttam el. Minden gyártási technológia esetében ismert, hogy mely anyagok felhasználásával milyen anyagokat állítanak elő. A feladatban előforduló anyagokat a következőképpen jelölöm:

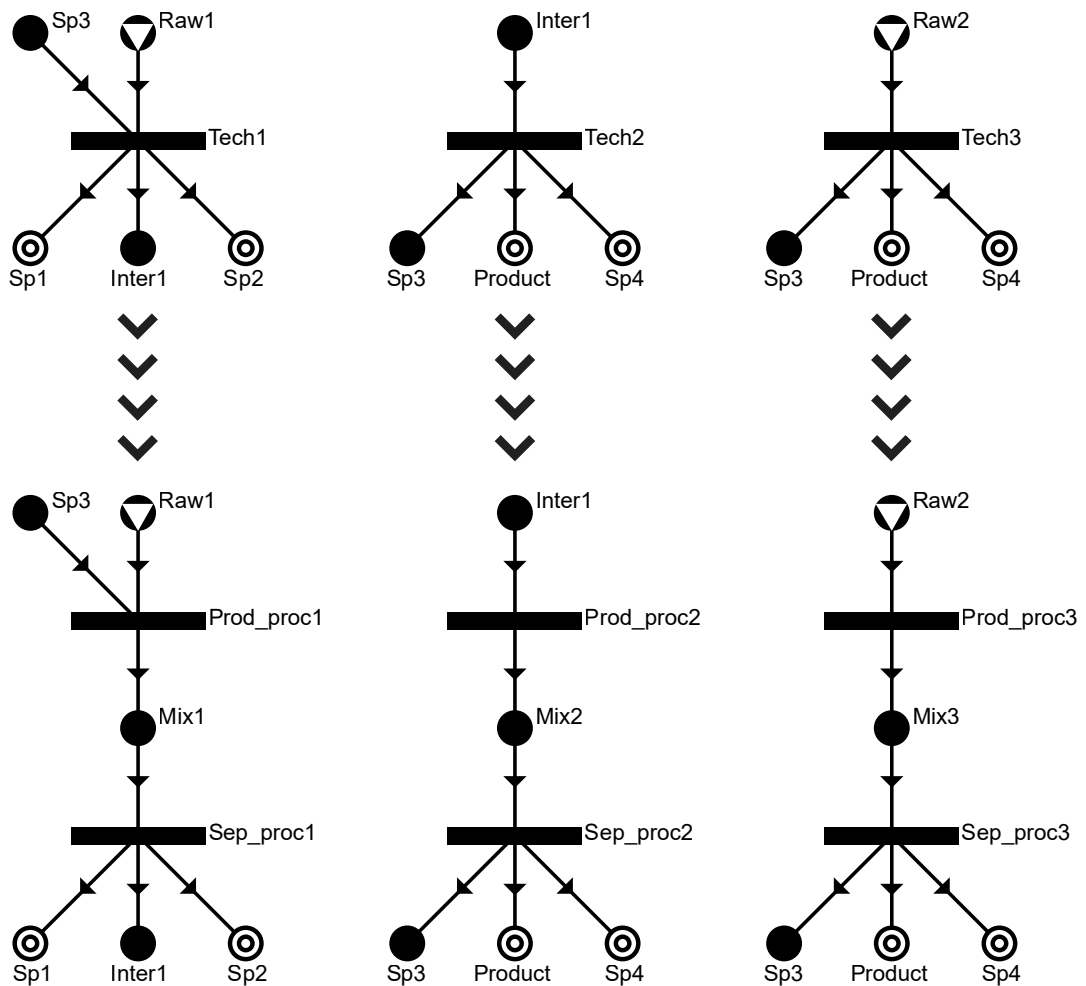
- **Nyersanyagok:** *Raw1*, *Raw2*
- **Termékek:** az előállítani kívánt terméket a *Product* jelöli, a melléktermékeket (SideProduct) *Sp1*, *Sp2*, *Sp3*, *Sp4*. A vizsgált termelési folyamat során ezek közül az *Sp3* mellékterméket használom fel ismét, a többi melléktermék jelen esetben nem releváns.

- **Köztes termékek:** a köztes termékek jelölésére két különböző elnevezést használunk, amely szintén utal azok felhasználási módjára. *Mix1* és *Mix2* jelölik a reakciók által előállított köztes anyagokat, amelyek még tartalmazzák a melléktermékeket, azaz több komponensből állnak. Ezek akkor fognak megjelenni a hálózatban, amikor felveszem a szétválasztásokat jelölő műveleti egységeket is. *Inter1* jelöli azt a köztes terméket, amely már átesett a szétválasztási eljárásán és már csak egyetlen komponenst tartalmaz, amely bemenetként szolgál egy másik reakciónak.

### 2.3.1. A technológiák szétbontása termelő és szétválasztási folyamatokra

A 2.7 ábra mutatja be a gyártási technológiák P-gráf reprezentációját (kezdetben egy durva modellezést használunk, minden technológiát egy műveleti egységgel jelölök). A 2.7 ábrán látható, hogy milyen bemenetekkel és kimenetekkel rendelkeznek az egyes technológiák. Például a *Tech3* technológia a *Raw2* nyersanyagot felhasználva előállít 3 különböző anyagot. Ezek közül a *Product* jelöli a teljes termelés kívánt végtermékét, az *Sp4* és *Sp3* anyagpontok pedig egy-egy mellékterméket. Ezek közül az *Sp3* a *Tech1* technológia segítségével hasznosítható, mivel annak az egyik szükséges bemenetként jelenik meg.

Ahhoz, hogy vizsgálni lehessen egy-egy technológia pontos működését és a teljes termelő hálózatra gyakorolt hatását, részletesebben kell megjeleníteni őket. A finomabb modell felírásának első lépése, hogy elkülönítem a technológiákban rejlő termelő és szétválasztási folyamatokat. Azokban a technológiákban, ahol megjelenik mindkét típusú művelet, a korábbi, technológiát jelképező műveleti egységet szétbontom két műveleti egységgé. Ezek közül az első jelöli a termelő tevékenységet, a második a szétválasztás folyamatát. Ezeket egy olyan anyagponton keresztül kell összekapcsolni, amely a termelés során keletkező nem tiszta terméket (elegyet) és a szétválasztási fázis bemenetét jelképezi. A 2.7 ábra mutatja be, hogy a példában szereplő három technológia esetében miként zajlik ez a lépés. Az említett köztes anyagokat a *Mix1*, *Mix2* és *Mix3* anyagpontok jelölik, az egyes termelő és szétválasztó folyamatokat pedig rendre a *Prod\_proc1*, *Sep\_proc1*, a *Prod\_proc2*, *Sep\_proc2* valamint a *Prod\_proc3*, *Sep\_proc3* műveleti egységek.

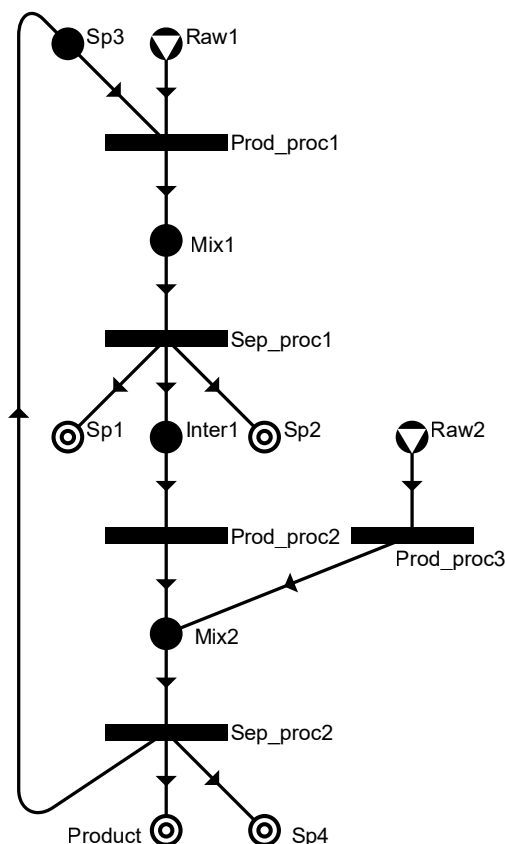


2.7. ÁBRA. A rendelkezésre álló technológiák szétbontása termelő és szétválasztó folyamatokra.

### 2.3.2. A technológiákat tartalmazó maximális struktúra felírása

A következő lépésben az MSG algoritmus segítségével összekapcsolom ezeket a részhálózatokat és létrehozom a maximális struktúrát. Ez a maximális struktúra még nem a végleges változat, mivel az egyes gyártási és szétválasztási folyamatok nincsenek teljes részletességgel ábrázolva. A későbbiekben ezeket a szétválasztási folyamatokat jelképező műveleti egységeket fogom helyettesíteni a hozzá tartozó szétválasztási hálózat maximális struktúrájával. Ennek köszönhetően a modellben nem rögzítjük előre a szétválasztási folyamatban szereplő műveletek sorrendjét, hanem az optimalizálás során, ha a feltételek úgy követelik meg, akkor azok meg is változhatnak. A technológiákat tartalmazó maximális struktúra látható a 2.8 ábrán. A *Product* terméket a *Prod\_proc2* és *Prod\_proc3*

gyártási folyamatok állítják elő. Mielőtt a kész termék rendelkezésre állna, a *Sep\_proc2*-vel jelölt szétválasztási folyamaton át kell esnie, amely eltávolítja belőle az *Sp3* és *Sp4* melléktermékeket. A *Prod\_proc2* termelő folyamathoz szükséges *Inter1* bemenetet a *Prod\_proc1* gyártó folyamat állítja elő és a *Sep\_proc1* szétválasztási folyamat során választják el az *Sp1* és *Sp2* melléktermékektől.



2.8. ÁBRA. A technológiákat tartalmazó maximális struktúra.

### 2.3.3. Szétválasztási feladat felírása

Az egyes szétválasztási folyamatokhoz tartozó maximális struktúrákat nem külön-külön írom fel, hanem egyetlen szétválasztási feladatnak tekintem őket, és egyben határozom meg. Ennek az az oka, hogy lehet kapcsolat a szétválasztási folyamatok között, amit csak akkor lehet figyelembe venni, ha egy feladatként kezelem őket. Ilyen a példában szereplő *Sep\_proc2* és *Sep\_proc3* szétválasztási folyamat, amelyek valójában ugyanazokat a szétválasztó berendezéseket használják, mivel a *Mix2* és *Mix3* bemenő elegyek ugyanazokból a komponensekből épülnek fel, azonban eltérő arányokban. Ezt a fontos

tulajdonságot jelölni kell a struktúrában, mivel jelentős hatással bír a teljes költséget tekintve.

Mint korábban leírtam, tiszta termékes, fix részt tartalmazó lineáris költségfüggvényű szétválasztó berendezéseket felhasználó szétválasztási hálózatokkal modellezzük. Ezek a feladatok a betáplálások összetételével, a termékekkel és a lehetséges szétválasztó berendezésekkel adhatóak meg. Az előző lépésben meghatározott maximális struktúra alapján a következő szétválasztási feladat írható fel:

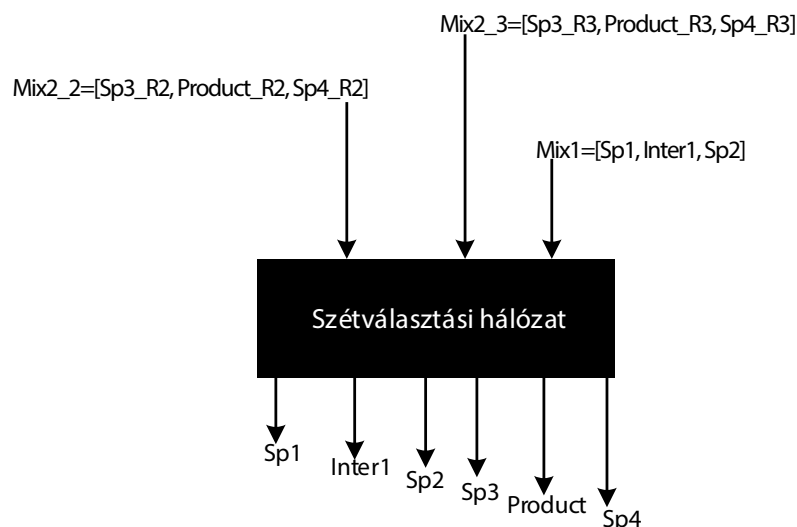
- A *Sep\_proc1* szétválasztási folyamathoz tartozó betáplálás a  $Mix1 = [Sp1, Inter1, Sp2]$ . A termékek, amelyeket előállít, az *Sp1*, *Inter1* és *Sp2*. Mivel tiszta termékeket kell gyártani, ezért ehhez két fajta szétválasztó berendezést kell felhasználni. Az egyik az első és a második komponens között vág, a másik a második és a harmadik között. Ezek rendre a  $S11 = [Sp1|Inter1, Sp2]$  és  $S12 = [Sp1, Inter1|Sp2]$ .
- A *Sep\_proc2* szétválasztási részhálózathoz a  $Mix2 = [Sp3, Product, Sp4]$  betáplálás tartozik. Itt azonban figyelembe kell venni, hogy két olyan reakció is van, a *Prod\_proc2* és *Prod\_proc3*, amelyek egyaránt a *Mix2* anyagáramot állítják elő. Mivel két különböző reakcióról van szó, ezért feltételezhető, hogy az általuk előállított két anyagáram eltérő arányban tartalmazza ugyanazokat a komponenseket. Ahhoz, hogy ezt megfelelően lehessen kezelni, külön betáplálásként kell kezelni a két anyagáramot (jelölje ezeket  $Mix2\_2$  és  $Mix2\_3$ ).

Amennyiben az optimalizálás során azt az eredményt kapom, hogy a két betáplálást ugyanabban a sorrendben kell szétválasztani, akkor egy keverő berendezéssel ( $M1$ ) egyesíteni lehet őket. Ha nem ugyanaz az ideális szétválasztási sorrend, akkor továbbra is külön kell kezelni a két anyagáramot. A tiszta termékeket rendre *Sp3*, *Product* és *Sp4* jelöli. A szükséges szétválasztó berendezéseket pedig  $S21 = [Sp3|Product, Sp4]$  valamint  $S22 = [Sp3, Product|Sp4]$ .

A szétválasztási feladat a 2.9 ábrán látható kimenetekkel és bemenetekkel rendelkezik.

A szétválasztási feladat mérete bizonyos esetekben csökkenthető. Ha olyan kimenet jelenik meg, amely több, szomszédos (valamely szétválasztási tevékenység szerint) komponensből áll, akkor ezeket nem szükséges külön-külön reprezentálni, hanem össze lehet





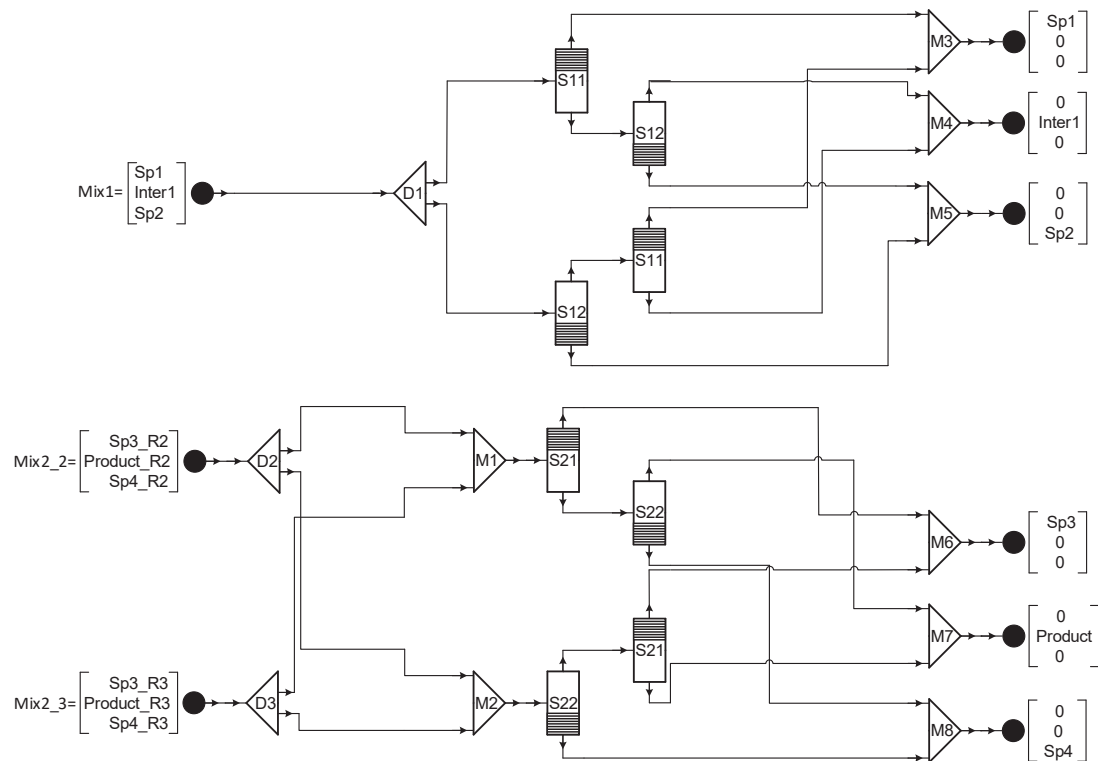
2.9. ÁBRA. A szétválasztási feladat bejövő és kimenő anyagáramai.

vonni egy anyagponttá. Például, ha egy három komponensű elegyet kell úgy szétválasztani, hogy kettő komponens kerül az egyik termékbe és a harmadik komponens a másik termékbe, akkor ez modellezhető két anyagponttal és egy szétválasztó berendezéssel.

#### 2.3.4. Szétválasztási feladat maximális struktúrája

A szétválasztási feladathoz tartozó maximális struktúrát a 2.2.2 fejezetben ismertetett algoritmus segítségével generálom. A 2.10 ábrán látható az előállított maximális struktúra. A baloldalon találhatóak a betáplálások, a jobb oldalon pedig a tiszta termékek, a két oldal között pedig a lehetséges szétválasztási sorrendek.

A 2.10 ábrán  $S11$  jelöli azt a berendezést, amely a  $Mix1$  anyagáram esetében az első és a második komponens között tud vágni,  $S12$  pedig azt a berendezést jelöli, amely a második és harmadik komponens között. Hasonlóan, a  $Mix2\_R2$  és  $Mix2\_R3$  anyagáramoknál  $S21$  az első és második, míg  $S22$  szétválasztó a második és harmadik komponens között választ szét.

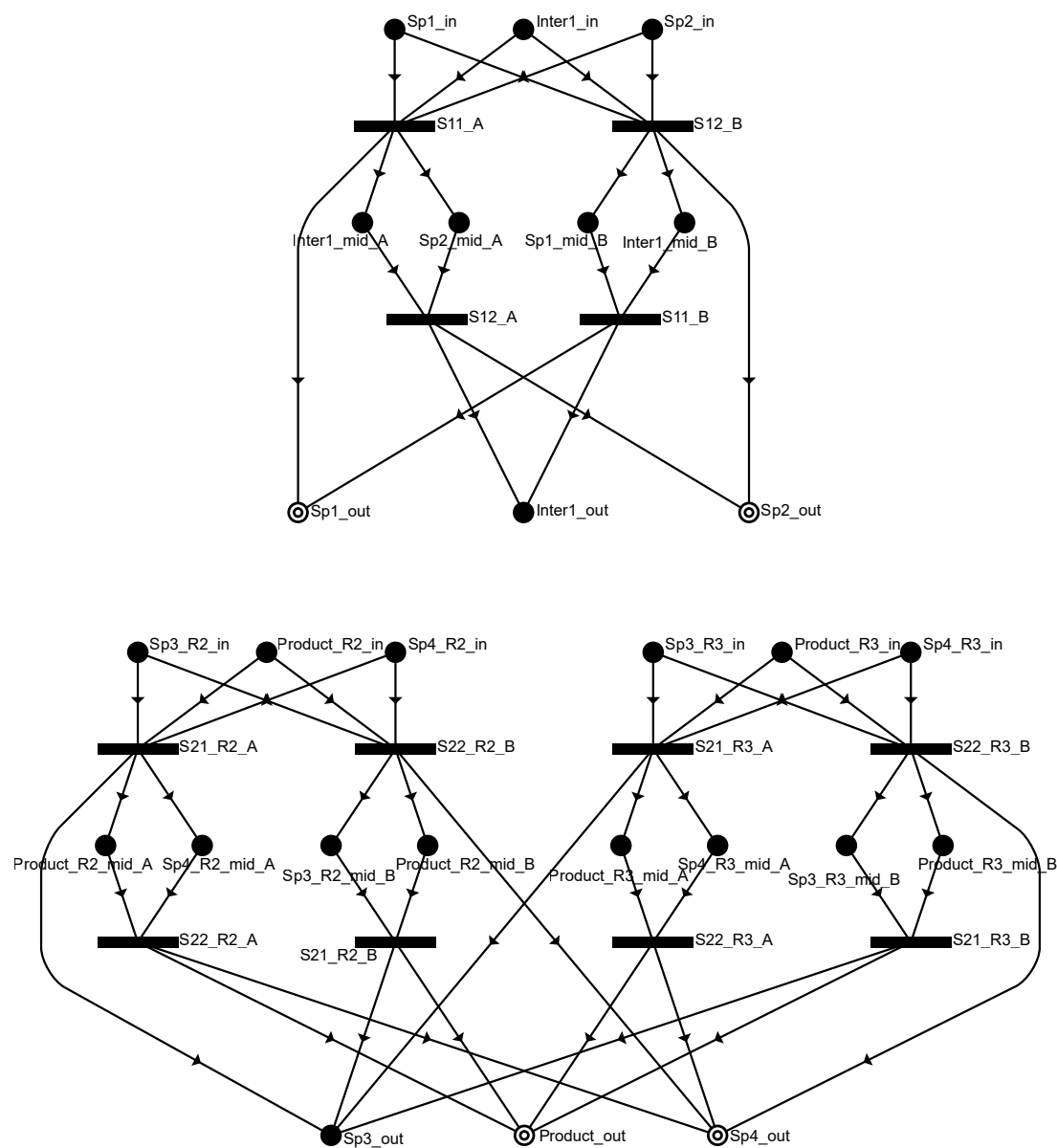


2.10. ÁBRA. A szétválasztási feladat maximális struktúrája.

### 2.3.5. Komponensáram-alapú P-gráf reprezentáció SNS-hez

A 2.2 fejezetben leírtak szerint átalakítottam az SNS feladat superstruktúrájában szereplő komponenseket a P-gráf reprezentációban szereplő elemek segítségével. Ennek eredménye látható a 2.11 ábrán.

A létrehozott komponensáram-alapú P-gráf reprezentáció két független részhálózatból áll. Az anyagpontok és műveleti egységek létrehozása során fontos az olyan elnevezések használata, amelyek utalnak a csúcs hálózatban betöltött szerepére. A termelő folyamatok mindegyike egyetlen reakcióból áll. Ezek az  $R1$  ( $Prod\_proc1$ ),  $R2$  ( $Prod\_proc2$ ) és  $R3$  ( $Prod\_proc3$ ). A jelölések során ezekre a reakciókra hivatkozom.



2.11. ÁBRA. A szétválasztó részhálózatok komponensáram-alapú P-gráf reprezentációja.

Az anyagpontok esetében az elnevezés a következőképpen épül fel:

1. a komponens neve,
2. a termelő reakció neve, ha több reakció kimenetén is szerepelhet ez a komponens,
3. egy azonosító, amely meghatározza, hogy a szétválasztás melyik fázisában szerepel az anyagpont, lehet *in* (a belépő anyagáramban), *out* (kilépő anyagáramban) vagy *mid* (köztes anyagpont)
4. azonosító, amely megadja, hogy melyik szétválasztási sorrendben szerepel az anyagpont ( $A, B, C \dots$ ). A 2.11 ábrán két sorrendet különböztetünk meg az alsó részhálózatban, ahol  $A$  jelöli az  $S21 - S22$  sorrendet, míg  $B$  jelöli az  $S22 - S21$  sorrendet.

A műveleti egységek elnevezése:

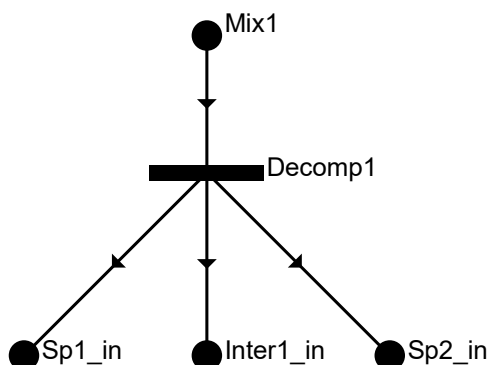
1. a szétválasztó típusának azonosítója,
2. a termelő reakció neve, ha több reakció kimenetén is szerepelhet ez a komponens,
3. azonosító, amely megadja, hogy melyik szétválasztási sorrendben szerepel a műveleti egység ( $A, B, C \dots$ ).

A fenti nevezéktan segítségével lehetővé válik a P-gráf reprezentáció elemeinek egyértelmű azonosítása. Például  $Sp4\_R2\_mid\_A$  jelöli azt az  $R2$  reakciót követő  $Sp4$  komponst, amely az  $A$  szétválasztási sorrend köztes anyagpontjaként jelenik meg. Az  $S21\_R3\_A$  műveleti egység az SNS maximális struktúrájában szereplő  $S21$  szétválasztó berendezést reprezentálja az  $A$  szétválasztási sorrendben, az  $R3$  reakciót követően.

### 2.3.6. A termelő és szétválasztó hálózatok összekapcsolása

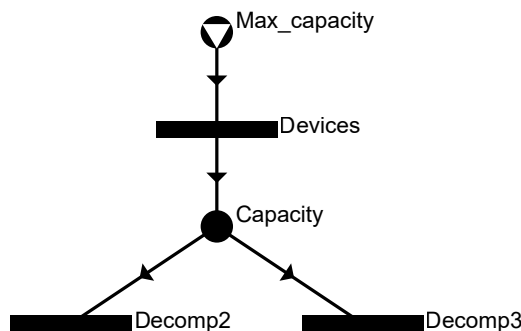
A termelő és szétválasztó részhálózatok összekapcsolására bevezetnek új, úgynevezett dekompozíciós műveleti egységeket. Segítségükkel lehet szétbontani a termelő részhálózatok kimeneteként megjelenő, több komponst tartalmazó anyagáramokat komponenseikre. Ezeket a 2.14 ábrán látható integrált maximális struktúrában a  $Decomp1$ ,  $Decomp2$ ,  $Decomp3$  műveleti egységek jelölik. A 2.12 ábrán kiemelten mutatom be a

hálózatban szereplő *Decomp1* műveleti egységet és környezetét. Ezen műveleti egységeknek nincs költsége, mivel nem valós berendezést jelölnek, hanem kizárólag a modellezés miatt szükségesek. Mivel a bemeneten található anyagáramok összetétele pontosan ismert, ezért a kimenő élek súlya is egyértelműen meghatározható.



2.12. ÁBRA. A *Decomp1* műveleti egység felbontja a *Mix1* anyagáramot komponenseire.

A dekompozíciós műveleti egységek még egy fontos célt szolgálnak, amely akkor kerül előtérbe, ha több olyan anyagáram is szerepel a hálózatban, amelyeken ugyanazokat a szétválasztási lépéseket kell végrehajtani. A reprezentációban ezen anyagáramok szétbontását külön kezeltem, azonban a gyakorlatban ez a folyamat nem válik szét teljesen.



2.13. ÁBRA. A *Devices* műveleti egység kapcsolódása a hálózat többi eleméhez.

Tekintsük a 2.14 ábrán szereplő *R2* és *R3* reakciók kimenetét. Ezek a *Mix\_R2* és *Mix\_R3* anyagpontok, amelyek ugyanazon komponenseket tartalmazzák, de nem szükségszerűen ugyanabban az arányban. A példában előfordulhat, hogy az eltérő összetétel következtében ellentétes sorrendben kell végrehajtani a szétválasztási lépéseket a két anyagáramon ahhoz, hogy a minimális költséget érjük el. A másik lehetőség, hogy a sorrend megegyezik, ekkor a szétválasztási folyamat előtt akár össze is keverhetjük a két

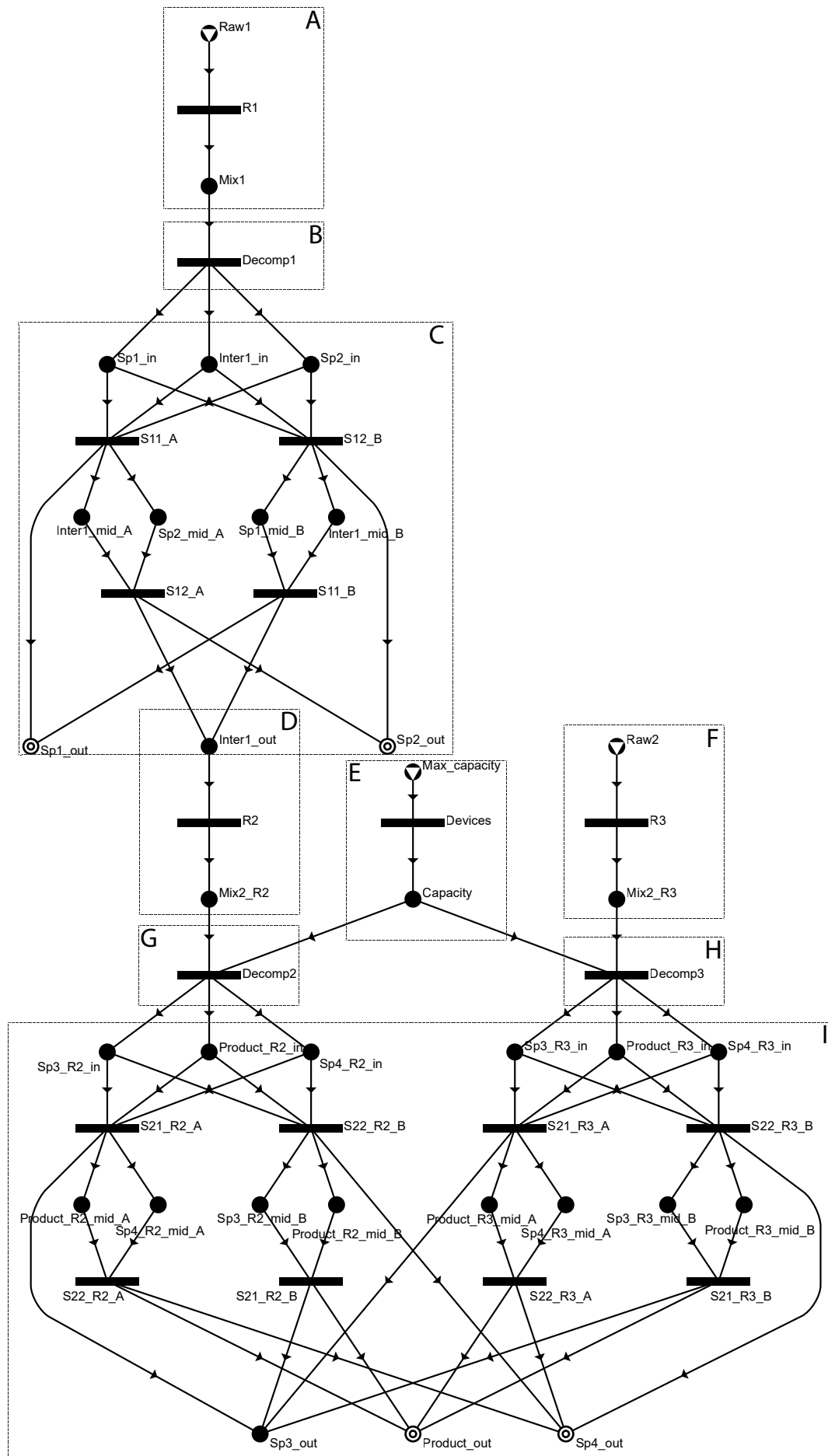
anyagáramot. A két esetben az a közös, hogy a két anyagáramhoz nem kell megvásárolni minden berendezésből kettőt, hanem ugyanazokat a berendezéseket használva választjuk szét a két anyagáramot egyszerre vagy egymást követően.

Ezt a működést az eddigi modellel nem lehet megfelelően kezelni, mivel a beruházási költségek mindkét anyagáram esetén megjelennek, így kétszer is berkerülnek a hálózat teljes költségébe. Ennek kezelésére vezetem be a mutlipériódusú műveleti egységhez hasonlóan azt, hogy logikailag szétbontom a berendezések működését és fizikai megvalósításának reprezentációját. A gyakorlatban ez annyit jelent, hogy felveszek egy olyan műveleti egységet, amely a kérdéses szétválasztási berendezések fizikai reprezentálására szolgál. Ehhez rendelem hozzá a fix beruházási és működéséi költségeket. A példában a *Devices* műveleti egység jelöli és megjelenik a 2.14 ábrán, valamint kiemelten a 2.13 ábra mutatja be.

Ezt követően a *Devices* műveleti egységet összekapcsolom a dekompozíciós műveleti egységekkel, amelyek összefogják a hozzájuk tartozó szétválasztó berendezéseket. Az összekapcsolás olyan anyagpontokon keresztül történik, amely a berendezések kapacitását reprezentálja. Az arányos költségek továbbra is a szétválasztó berendezéseket reprezentáló műveleti egységekhez kapcsolva jelennek meg. E módszer segítségével elérhető, hogy a szétválasztó berendezésekhez tartozó fix költségek pontosan egyszer szerepeljenek.

A 2.14 ábrán pontozott vonallal jelöltem a maximális struktúra fő komponenseit. Ezek a következők (a felső sarokban található betűjel azonosítja a komponenseket):

- **A**: A 2.7 ábrán látható *Prod\_proc\_1* gyártó folyamat, ahol *R1* reakció jelöli a műveletet.
- **B**: A 2.12 ábrán látható dekompozíciós műveleti egység, amely komponenseire bontja a *Mix1* anyagáramot.
- **C**: A 2.10 ábrán látható, szétválasztási hálózathoz tartozó maximális struktúra egyik komponense.
- **D**: A 2.7 ábrán látható *Prod\_proc\_2* gyártó folyamat, ahol *R2* reakció jelöli a műveletet.



2.14. ÁBRA. Az integrált hálózat maximális struktúrája.

- **E**: A 2.13 ábrán látható *Devices* műveleti egység, amely az **I** részben szereplő szétválasztó berendezések fizikai tulajdonságának reprezentációja, segítségével kezelhetőek a fix költségrészek.
- **F**: A 2.7 ábrán látható *Prod\_proc\_3* gyártó folyamat, ahol *R3* reakció jelöli a műveletet.
- **G**: A 2.12 ábrán látható dekompozíciós műveleti egység, amely komponenseire bontja a *Mix2\_R2* anyagáramot.
- **H**: A 2.12 ábrán látható dekompozíciós műveleti egység, amely komponenseire bontja a *Mix2\_R3* anyagáramot.
- **I**: A 2.10 ábrán látható, szétválasztási hálózathoz tartozó maximális struktúra másik komponense.

### 2.3.7. MILP modell felírása és megoldása

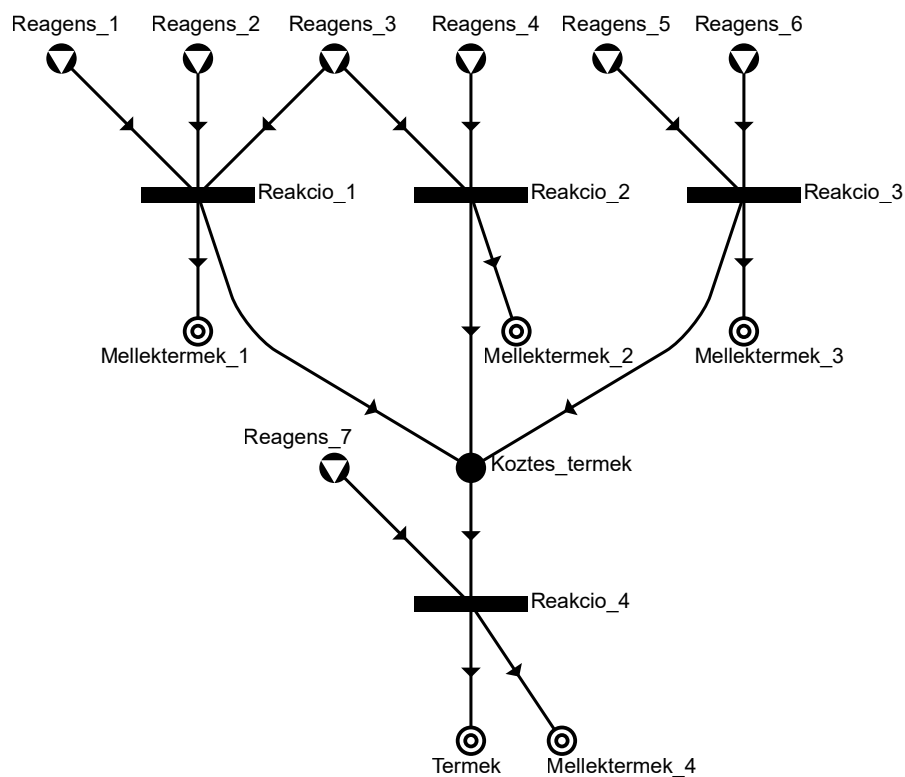
A MILP matematikai modell felírására és megoldására egyaránt a P-graph Studio nevű szoftvert használtam, amely a szakirodalomban bemutatott MSG [13], SSG [14], ABB [15], [16] algoritmusokat implementálja.

## 2.4. Az integrált és a szekvenciális módszer összehasonlítása

Az integrált módszer (2.8 és 2.14 ábrák) egy összetettebb hálózat optimalizálását követeli meg, azonban eddig nem mutattam meg, hogy valóban indokolt-e a pontosabb, így nagyobb modell megoldása. Egy kisméretű feladat segítségével ismertetem, hogy melyek azok az esetek, amikor a hagyományos, szekvenciális módszer használatával nem garantálható a globális optimum meghatározása, viszont az új, integrált módszerrel igen.

A példafeladatot a 2.15 ábra mutatja be. Ez a feladat két fő részből épül fel. Az első részben egy köztes terméket állít elő. Erre három alternatív lehetőség áll rendelkezésre, amelyek a *Reakcio\_1*, *Reakcio\_2*, *Reakcio\_3* reakciókat tartalmazzák. Ezt követően a második lépésben ezt a köztes anyagot is felhasználva a *Reakcio\_4* nevű reakció előállítja a végterméket. Minden egyes reakciót szétválasztási folyamat követ.





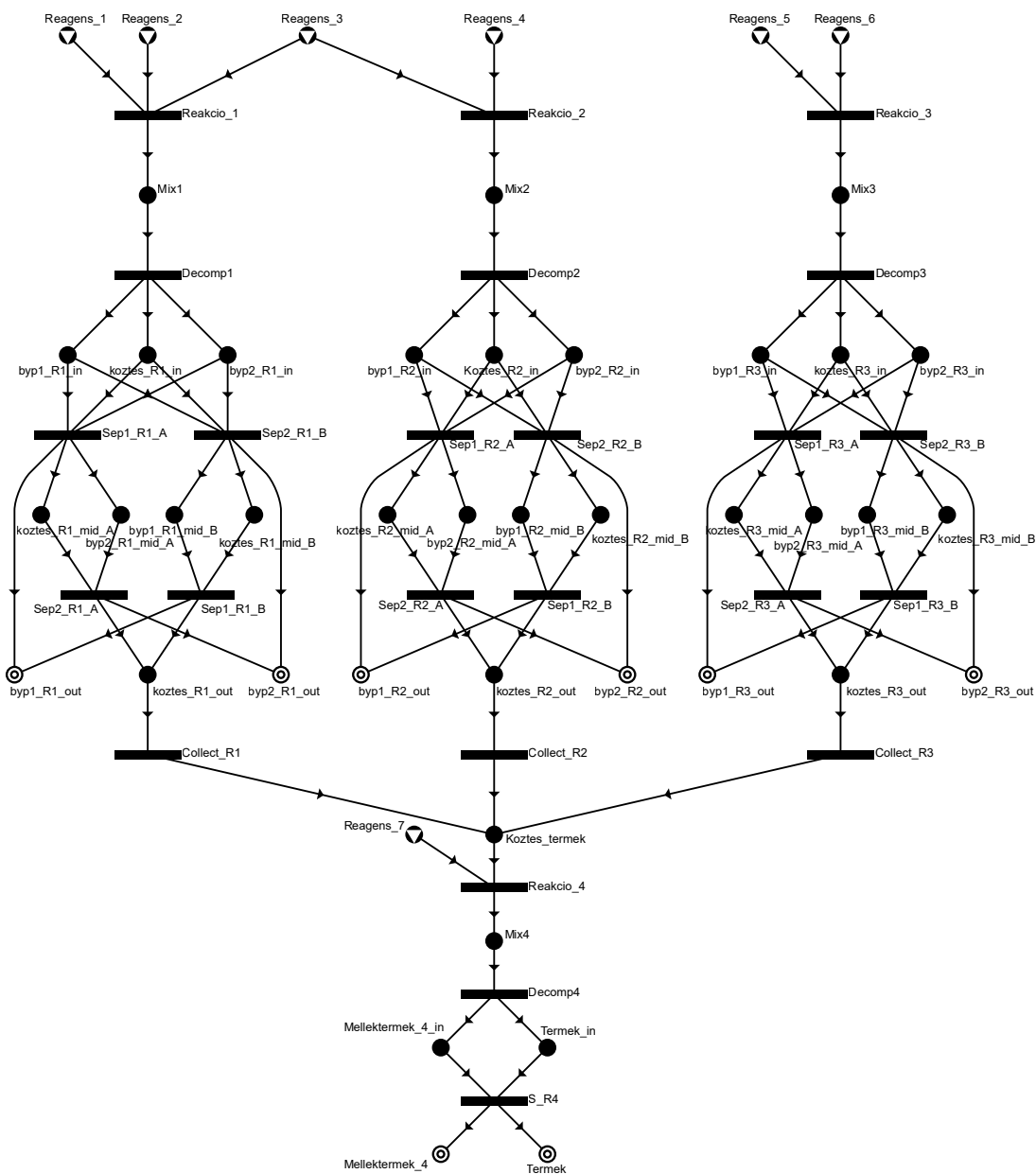
2.15. ÁBRA. A példafeladat sematikus P-gráf reprezentációja.

2.1. TÁBLÁZAT. A példafeladatban szereplő nyersanyagárak.

Megnevezés	Ár [€/g]
Reagens_1	0,05
Reagens_2	0,06
Reagens_3	0,20
Reagens_4	0,10
Reagens_5	0,20
Reagens_6	0,10
Reagens_7	0,60

A 2.16 ábra a feladathoz felírt maximális struktúrát mutatja be. Látható, hogy mindhárom alternatív reakcióhoz felírtam a lehetséges szétválasztási sorrendeket is. A reakciókhoz és szétválasztó berendezésekhez, valamint a nyersanyagokhoz tartozó paramétereket a 2.1 és 2.2 táblázat foglalja össze.

A következőkben két különböző esetet mutatok be, amellyel illusztrálom a két módszer eltérő működését. Az egyes megoldásstruktúrák P-gráf reprezentációját az A függelék tartalmazza.



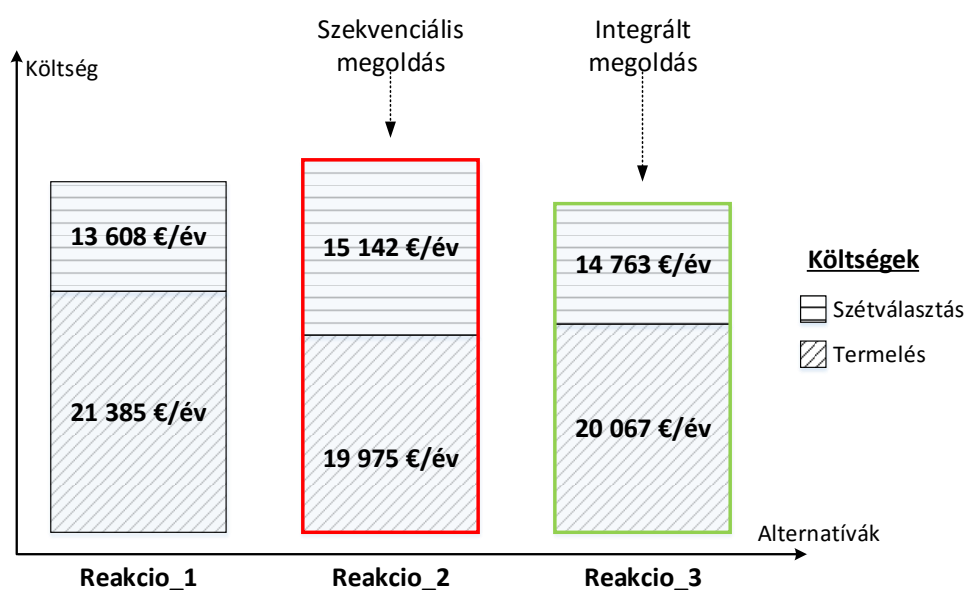
2.16. ÁBRA. A példafeladat integrált P-gráf reprezentációja.

2.2. TÁBLÁZAT. A példafeladatban szereplő berendezések költségadatai.

Megnevezés	Fix költség [€/év]	Arányos költség [€/év]
Collect_R3	0	0,00
Decomp3	0	0,00
Decomp4	0	0,00
Reakcio_3	4 000	0,40
Reakcio_4	1 500	0,50
S_R4	1000	0,30
Sep1_R3_B	1 400	0,40
Sep2_R3_B	600	0,55

### 2.4.1. Költséges szétválasztás elkerülése

A szekvenciális tervezési folyamat hátránya, hogy a termelő rész tervezése során még nem lehet figyelembe venni a szétválasztási részhálózatok költségét. Ez a példa egy olyan esetet mutat be, amelynek során a hagyományos módszer először megkeresi a legolcsóbb gyártási folyamatot. Ahogy a függelék A.1 ábráján is látható, ehhez az alternatívák közül *Reakcio\_2*-t tartalmazó struktúrát választotta ki. Ezt követően a szétválasztási rész tervezése során meghatározza a *Reakcio\_2*-höz és *Reakcio\_4*-hez tartozó optimális szétválasztási hálózatot is.



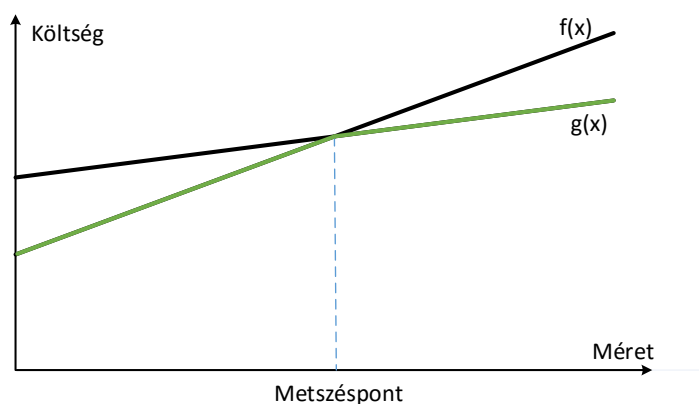
2.17. ÁBRA. Az alternatív megoldások összehasonlítása.

Az integrált módszer ezzel ellentétben egyszerre optimalizálja a termelési és szétválasztási részhálózatot. Ennek során a *Reakcio\_3* és *Reakcio\_4* reakciókat választotta be az optimális hálózatba. A 2.17 ábra jól szemlélteti, hogy a két módszer közül melyik adott jobb megoldást. Itt a három lehetséges megoldásstruktúrához tartozó költségek láthatóak.

Látható, hogy a legolcsóbb gyártási folyamathoz (*Reakcio\_2*) tartozó szétválasztási folyamat jelentősen drágább, mint a többi lehetséges szétválasztás. Ennek következtében jobb megoldás kapható egy olyan megoldással, amelyben bár nem a lehető legolcsóbb a gyártás, de a szétválasztási költségek alacsonyak (*Reakcio\_3*).

### 2.4.2. A termék mennyiségének figyelembe vétele

A lineáris, fix részt tartalmazó költségfüggvények esetében ha változik a termék mennyisége, akkor változhat az optimális struktúra is. A 2.18 ábrán a metszéspont előtt az  $f(x)$  függvényhez tartozott kisebb költség, míg utána a  $g(x)$  függvényhez.



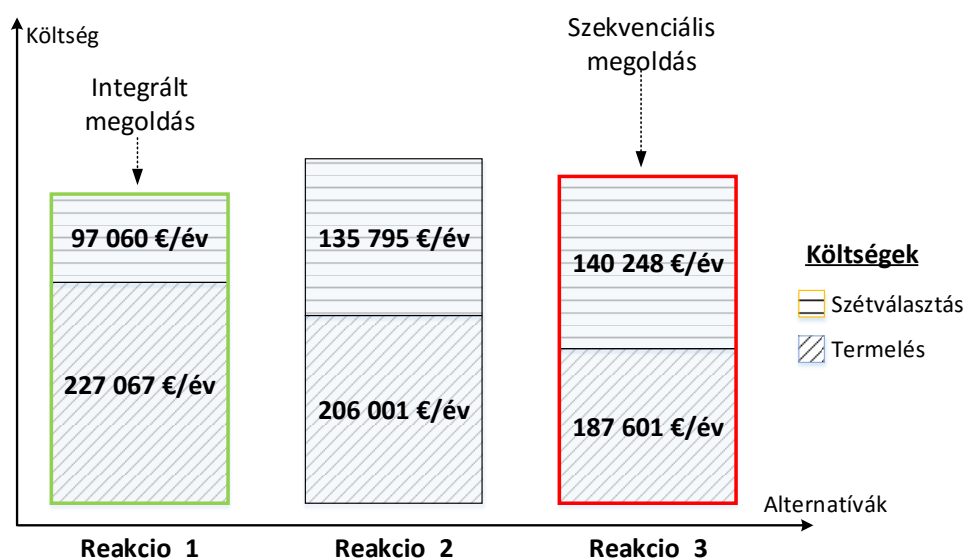
2.18. ÁBRA. Lineáris, fix részes költségfüggvények a méret függvényében.

Az előző példát megoldottuk nagyobb termékigény esetén is. 8 000 kg/év igény helyett 100 000 kg/év igénnyel vizsgáltuk a lehetséges megoldásstruktúrákat. A hagyományos módszer az optimális hálózatba a *Reakcio\_3*-at választotta be, azonban az integrált módszer megmutatta, hogy ekkora méretnél már a *Reakcio\_1* használatával alacsonyabb összköltség érhető el. A kapcsolódó eredményeket a 2.19 ábra mutatja be, a két módszerhez kapcsolódó megoldásstruktúrákat a függelék A.1 - A.4 ábrái mutatják be.

## 2.5. Alkalmazás: valós vegyipari folyamat modellezése

A vegyipari példát Klaus Timmerhaus *Plant Design and Economics for Chemical Engineers* című könyvéből [68] vettem. A feladat részletes ismertetése, valamint a megoldása a hagyományos P-gráf módszertan segítségével szintén megtalálható a könyvben. A továbbiakban egy rövid áttekintést adok a feladatról, valamint bemutatom a hozzá elkészített integrált maximális struktúrát és az optimális megoldásstruktúrát.

Az IPSNS feladat megoldását egy valós ipari példán, a vinyl-klorid monomer ( $C_2H_3Cl$ ) előállításán keresztül ismertetem. A vinyl-klorid monomer az egyik legnagyobb jelentőséggel bíró vegyi anyag, amely számos polimer, például a polivinil-klorid (PVC) gyártás



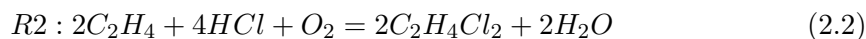
2.19. ÁBRA. Az alternatív megoldások összehasonlítása II.

alapját képezi [69], [70]. Vinyl-klorid monomert elsősorban etilén ( $C_2H_4$ ), klór ( $Cl_2$ ) és oxigén ( $O_2$ ) felhasználásával állítanak elő. A folyamat 3 reakciós egységet foglal magába és mindegyik egy vagy több különböző reaktorból áll. Az első reakciós egység felel az etilén direkt klórozásért, a második az etilén oxiklórozásért és a harmadik az etilén-diklorid pirolízisért [71] [72]. Ezek a folyamatok a következő egyenletekkel írhatóak fel:

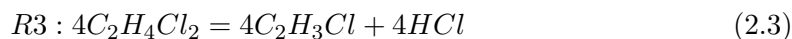
Direkt klórozás:



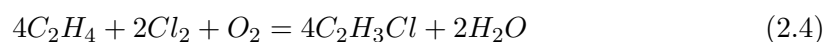
Oxiklórozás:



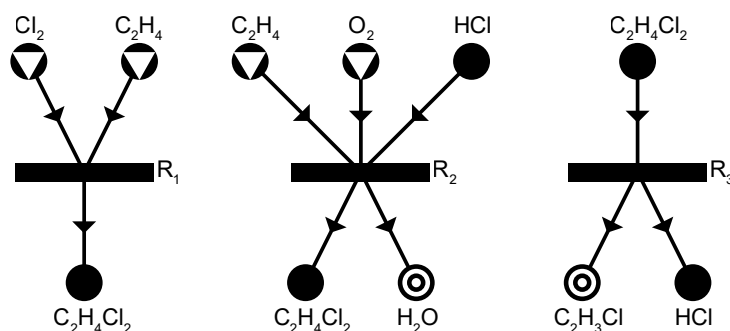
Etilén-diklorid pirolízis:



Eredő reakció:



Meg kell jegyezni, hogy a pirolízis során keletkező hidrogén-klorid ( $HCl$ ) teljes mértékben felhasználásra kerül az oxiklorozás során, ahová reciklációként jut vissza. A fent felsorolt reakciós folyamatok számos mellékterméket is előállítanak, mint például bizonyos klórozott hidrokarbonokat, karbon-monoxidot vagy karbon-dioxidot.

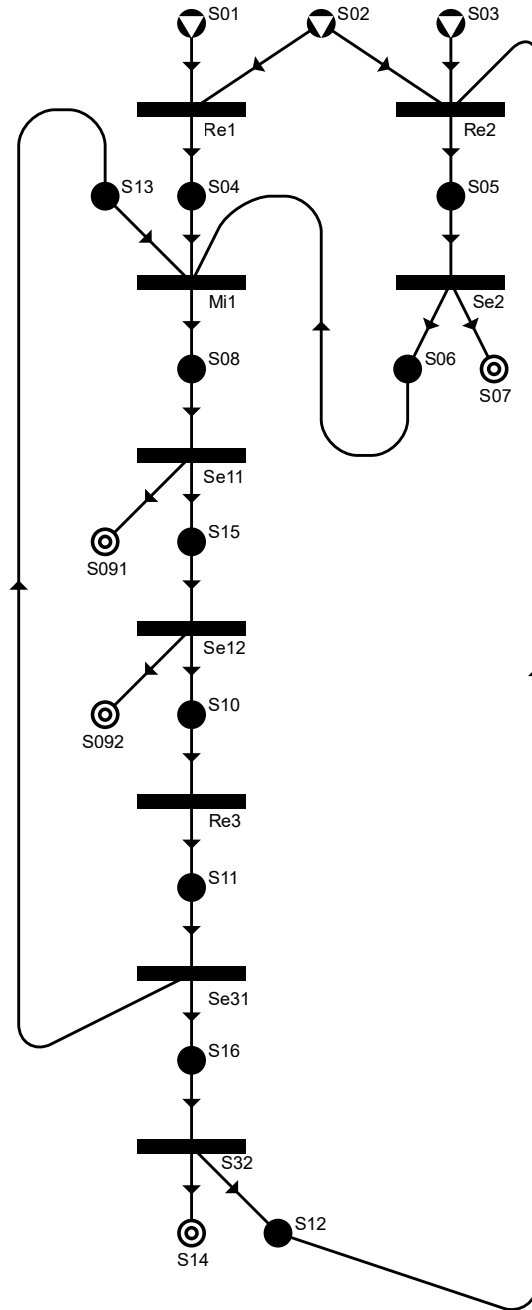


2.20. ÁBRA. A gyártási folyamatban részt vevő reakciók.

Minden reakcióhoz különböző szétválasztó berendezések is csatlakoznak, amelyek feladata a melléktermékek eltávolítása, a hidrogén-klorid visszacsatolása, valamint a végtermék tisztítása [73]. Ezek a többlépcsős szétválasztási folyamatok különböző sorrendben is végrehajthatóak, természetesen eltérő költségek mellett. A modellezés során az elsődleges célom, hogy egyidejűleg figyelembe vegyek minden lehetséges szétválasztási sorrendet is. Ehhez a hivatkozott könyvben szereplő maximális struktúrát kiegészíttem a szétválasztó részhálózatok komponensáram-alapú P-gráf reprezentációjával.

A három ismertett reakció P-gráf reprezentációja a 2.20 ábrán látható. A termelő hálózat maximális struktúrája ezek összekapcsolásával határozható meg. A hálózatban szereplő reakciókat  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_3$  jelöli. Minden reakciót egy szétválasztási lépés követ, így ezeket rendre  $Se_1$ ,  $Se_2$ ,  $Se_3$  jelöli. A szétválasztókkal kiegészített termelő hálózat struktúráját szemlélteti a 2.21 ábra. A hivatkozott forrásban a szerző az optimalizálás során egy rögzített szétválasztási sorrendet alkalmaz az egyes szétválasztási helyeken, amelyet a gyakorlati alkalmazások és szimulációs szoftverek segítségével határozott meg. Ezt a hálózatot az A függelékben található A.5 ábra mutatja be.

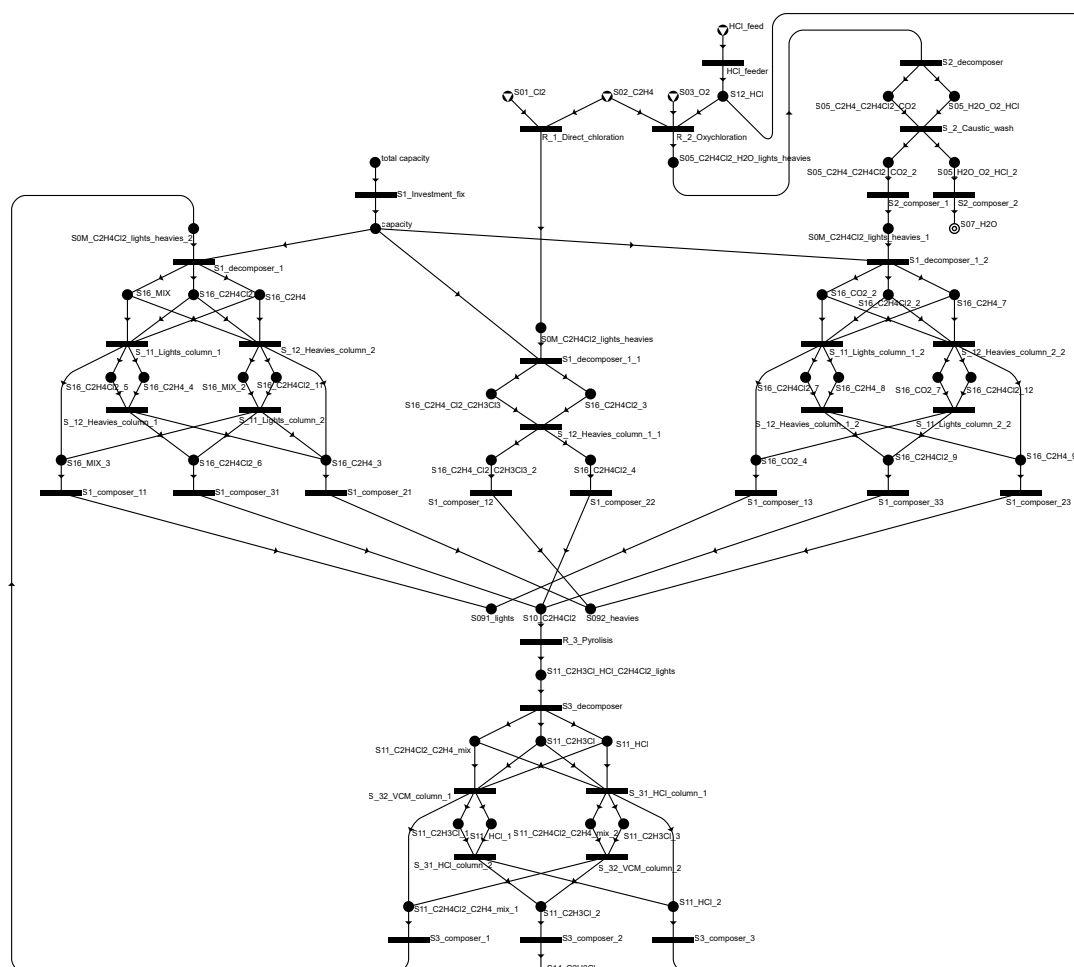
A továbbiakban kibővíttem ezt a hálózatot úgy, hogy tartalmazza az összes szétválasztási sorrendet, így nem kell előre megadnom, hogy milyen sorrendben szerepelnek az egyes szétválasztó berendezések.



2.21. ÁBRA. A szétválasztókkal kiegészített termelő hálózat struktúrája.

A cél az, hogy az optimalizálás során az integrált maximális struktúrán lefuttatott ABB algoritmus legalább olyan jó megoldásstruktúrát azonosítson, mint ami a hivatkozásban is szerepel.

A megoldás során a fejezetben ismertetett lépéseken keresztül felírom a szétválasztási feladatot a lehetséges bemenetek, kimenetek, valamint felhasználható szétválasztó berendezések segítségével. Ezt követően létrehozom a szétválasztó részhálózatok komponensáram-alapú P-gráf reprezentációját. Ezeket összekapcsolom a termelő hálózattal, az így kapott integrált maximális struktúra a 2.22 ábrán látható.



2.22. ÁBRA. Az integrált hálózat maximális struktúrája.

Miután felparaméterezem a szakirodalomban szereplő példa alapján a feladatot, az ABB algoritmus segítségével meghatározom az optimális megoldásstruktúrát.



A kapott megoldás megegyezik a szakirodalomban találhatóval, ugyanazon szétválasztási sorrendeket és anyagáram méreteket alkalmazza. A megoldásban szereplő egyes anyagpontokra és műveleti egységekre vonatkozó paraméterek a 2.4 és 2.3 táblázatokban láthatóak. Az optimális megoldásstruktúra az A függelékben látható.

2.3. TÁBLÁZAT. Az optimális megoldásstruktúrában szereplő műveleti egységek tulajdonságai.

Megnevezés	Méret faktor	Fix ktg. [€/év]	Arányos ktg. [€/év]	Teljes ktg. [€/év]
R_1_Direct_chloration	1,00	2756,30	47121,00	49785,90
R_2_Oxychloration	1,00	3197,10	51287,60	54485,30
R_3_Pyrolysis	1,00	7808,60	842704,60	850467,00
S_11_Lights_column_1	1,00	-	21934,69	21933,50
S_11_Lights_column_1_2	1,00	-	15716,00	15716,20
S_12_Heavies_column_1	1,00	-	288673,40	288657,00
S_12_Heavies_column_1_1	1,00	-	225158,60	224722,00
S_12_Heavies_column_1_2	1,00	-	206931,30	206934,00
S_2_Caustic_wash	1,00	2488,20	1376,40	3864,62
S_31_HCl_column_2	1,00	5738,30	80626,10	86360,00
S_32_VCM_column_1	1,00	4280,80	106571,00	110846,00
S1_composer_22	29890,70	-	-	-
S1_composer_31	38511,70	-	-	-
S1_composer_33	27592,30	-	-	-
S1_decomposer_1	1,00	-	-	-
S1_decomposer_1_1	1,00	-	-	-
S1_decomposer_1_2	1,00	-	-	-
S1_Investment_fix	3,00	12550,90	-	12550,90
S2_composer_1	27624,30	-	-	-
S2_decomposer	1,00	-	-	-
S3_composer_1	38512,80	-	-	-
S3_composer_2	36288,00	-	-	-
S3_composer_3	21192,20	-	-	-
S3_decomposer	1,00	-	-	-
<b>Teljes költség</b>				<b>1926322,42 €/év</b>

2.4. TÁBLÁZAT. Az optimális megoldásstruktúrában szereplő anyagok tulajdonságai.

Megnevezés	Ár [€/g]	Anyagáram [g/év]	Költség [€/év]
S01_Cl2	193	-21 726	4 188 730
S02_C2H4	535	-16 072	8 592 120
S03_O2	28	-4 440	122 101
S05_C2H4_C2H4Cl2_CO2	-	-	-
S05_C2H4_C2H4Cl2_CO2_2	-	-	-
S05_C2H4Cl2_H2O_lights_heavies	-	-	-
S05_H2O_O2_HCl	-	-	-
S05_H2O_O2_HCl_2	-	5 824	-
S0M_C2H4Cl2_lights_heavies	-	-	-
S0M_C2H4Cl2_lights_heavies_1	-	-	-
S0M_C2H4Cl2_lights_heavies_2	-	-	-
S10_C2H4Cl2	-	-	-
S11_C2H3Cl	-	-	-
S11_C2H3Cl_1	-	-	-
S11_C2H3Cl_2	-	-	-
S11_C2H3Cl_HCl_C2H4Cl2_lights	-	-	-
S11_C2H4Cl2_C2H4_mix	-	-	-
S11_C2H4Cl2_C2H4_mix_1	-	-	-
S11_HCl	-	-	-
S11_HCl_1	-	-	-
S11_HCl_2	-	-	-
S12_HCl	-	-	-
S14_C2H3Cl	462	36 288	-16 779 600
S16_C2H4	-	-	-
S16_C2H4_3	-	0	-
S16_C2H4_4	-	-	-
S16_C2H4_7	-	-	-
S16_C2H4_8	-	-	-
S16_C2H4_9	-	16	-
S16_C2H4_Cl2_C2H3Cl3	-	-	-
S16_C2H4_Cl2_C2H3Cl3_2	-	89	-
S16_C2H4Cl2	-	-	-
S16_C2H4Cl2_2	-	-	-
S16_C2H4Cl2_3	-	-	-
S16_C2H4Cl2_4	-	-	-
S16_C2H4Cl2_5	-	-	-
S16_C2H4Cl2_6	-	-	-
S16_C2H4Cl2_7	-	-	-
S16_C2H4Cl2_9	-	-	-
S16_CO2_2	-	-	-
S16_CO2_4	-	4	-
S16_MIX	-	-	-
S16_MIX_3	-	1	-
<b>Anyagok teljes költsége</b>			<b>-3 876 649 €/év</b>

## 2.6. A fejezet rövid összefoglalása

Bevezettem egy olyan integrált hálózatszintézis feladatot, amely egyaránt tartalmaz folyamathálózat és szétválasztási hálózat elemeket. Az IPSNS feladat megoldása során egyidejűleg figyelembe vettem a termelési és szétválasztási folyamatok jellemzőit és azok kapcsolatát. Bemutattam a komponensáram-alapú P-gráf reprezentációt, amely az integrációt lehetővé tette. Megvizsgáltam a megoldandó SNS feladatosztály tulajdonságait, amelyeket felhasználtam a szétválasztási feladathoz felírt maximális struktúra megalkotása során. A maximális struktúra generálásához algoritmust dolgoztam ki.

Továbbá bemutattam, hogy a szétválasztási hálózatokban szereplő egyedi komponenseket miként lehet a P-gráf módszertan segítségével reprezentálni. Részletesen ismertettem az IPSNS feladatok megoldási folyamatát. Ezt követően rámutattam az általam kidolgozott új módszer és a korábban használt szekvenciális módszerek közötti különbségekre, valamint az új módszer előnyeire. Végül egy valós vegyipari példán, a vinyl-klorid monomer előállításán keresztül bemutattam, hogy a gyakorlatban miként lehet a fejezetben ismertetett eljárást alkalmazni.

## 3. fejezet

# Intervallum alapú globális optimalizálási eljárás SNS feladatok megoldására

A vegyiparban gyakran találkozhatunk olyan folyamatokkal is, ahol a berendezések, eljárások költségeinek modellezésére lineáris függvények használata nem kellően adekvát. Ilyen esetekben konkáv költségfüggvények alkalmazásával jobban lehet modellezni a valós működést. Ennek egy jelentős hátulütője, hogy az előző fejezetben ismertetett módszert nem lehet alkalmazni ilyen esetekben. Ennek következtében szükségessé válik egy olyan eljárás kidolgozása, amely segítségével hatékonyan meg lehet oldani akár ipari méretű, konkáv költségfüggvényeket használó szétválasztási-hálózat szintézis feladatokat is.

Egy ilyen módszer hasznosságát az is igazolja, hogy e feladatok az ipari ágazatok többségében megjelennek, legyen szó a gyógyszergyártásról, olajiparról vagy akár az élelmiszeriparról. A termelés méretéből és a benne foglalt költséges eljárásokból eredően az ilyen szétválasztó hálózatok összköltsége igen jelentős lehet. Ennek következtében az SNS feladatokhoz kapcsolódó új modellek bevezetése, megoldó módszerek kidolgozása nem csak elméletben, hanem a gyakorlatban is kézzel fogható jelentős eredményeket nyújthat.

A fejezetben egy új módszert ismertetek, amelyet ilyen speciális SNS feladatok megoldására dolgoztam ki, Branch&Bound (továbbiakban B&B) keretrendszer és lineáris programozási eszközök felhasználásával. A javasolt eljárás hatékonyan meghatározza az

optimális hálózat szerkezetét és a benne szereplő anyagáramok méretét akár konkv költségfüggvények mellett is.

A módszert Kovács és szerzőtársai által publikált feladaton [74] keresztül szemléltem, amelyben a cél tiszta termékeket tartalmazó anyagáramok előállítása két darab három komponensű betáplálásból a lehető legalacsonyabb összköltség mellett. A megoldó módszer a feladat szigorú szuperstruktúrájából [33] indul ki, amelyet szintén Kovács és szerzőtársai definiáltak. A hagyományos eszközöket felhasználva a struktúrából generált matematikai modell nemlineáris lesz. Munkám során azt tűztem ki célul, hogy egy olyan eljárást dolgozzak ki, amely lineáris eszközöket felhasználva képes tetszőlegesen megközelíteni az ehhez hasonló feladatok globális optimumát.

## A fejezethez tartozó jelölésjegyzék

$st$  Anyagáram,  $st \in \mathcal{ST}$

### Halmazok

$\mathcal{CI}$  Az anyagáramban szereplő komponensek halmaza

$\mathcal{D}$  Megosztó (Divider) berendezések halmaza

$\mathcal{M}$  Keverő (Mixer) berendezések halmaza

$\mathcal{S}$  Szétválasztó (Separator) berendezések halmaza

$\mathcal{ST}$  A szétválasztó berendezések bemenő anyagáramainak halmaza

$\mathcal{ST}$  Anyagáramok (Stream) halmaza

### Paraméterek

$A_i$  Az  $i$  szétválasztó alsó költségbecslő függvényének arányos része

$B_i$  Az  $i$  szétválasztó alsó költségbecslő függvényének fix része

$cn$  Komponensek száma egy adott anyagáramban

$F_{st,k}$  A hálózat bemeneteként vagy kimeneteként szolgáló  $st$  anyagáramban szereplő  $k$  komponens mennyisége

$XL$  Az adott szétválasztón áthaladó anyagmennyiség alsó korlátja

$XU$  Az adott szétválasztón áthaladó anyagmennyiség felső korlátja

$YL$  Az adott szétválasztó költségének alsó korlátja

$YU$  Az adott szétválasztó költségének felső korlátja

$\Lambda L_i$  Az  $i$  megosztó első kimenetére vonatkozó megosztási arány alsó korlátja

$\Lambda U_i$  Az  $i$  megosztó első kimenetére vonatkozó megosztási arány felső korlátja

### Folytonos változók

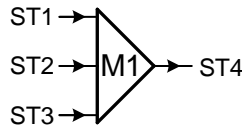
$f_{st,k}$  Az  $st$  anyagáramban szereplő  $k$  komponens mennyisége

$\lambda_i$  Az  $i$  megosztó első kimenetére vonatkozó megosztási arány

### 3.1. A szétválasztó hálózatok építőelemei

A fejezetben ismertetem az SNS feladatokban szereplő építőelemek működését, matematikai modelljét és reprezentációját. Ezek az építőelemek a keverő, megosztó és szétválasztó berendezések.

A keverők két vagy több folyam egyesítésére szolgálnak. A kimenő anyagáramban szereplő komponensek mennyisége a bejövő anyagáramokban található komponensek mennyiségének összege lesz. A gyakorlatban a keverő legtöbbször egybeömlő csővezetékeket jelent. A 3.1 ábra egy 3 bemenettel rendelkező keverőt mutat be. A 3.1 és 3.2 egyenletek segítségével modellezhető a berendezés működése.



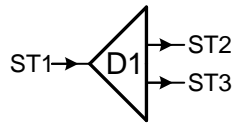
3.1. ÁBRA. Három bemenettel és egy kimenettel rendelkező keverő berendezés grafikus reprezentációja.

$$st = [f_{st,C1}, f_{st,C2}, f_{st,C3}] \quad st \in \{ST1, ST2, ST3, ST4\} \quad (3.1)$$

$$f_{ST1,k} + f_{ST2,k} + f_{ST3,k} = f_{ST4,k} \quad k \in \mathcal{CI} = \{C1, C2, C3\} \quad (3.2)$$

A 3.1 egyenlet mutatja, hogy az anyagáramok a komponens összetételükkel írhatóak fel, ahol  $f_{st,C1}$  jelöli az  $st$  anyagáram  $C1$  komponensét. Az ábrán bemutatott példában minden anyagáram 3 komponensből ( $C1, C2, C3$ ) áll. Az  $M1$  berendezésre vonatkozó anyagegyensúlyt a 3.2 egyenlet biztosítja, ahol minden komponens esetén a kimenő anyagáramot a három bejövő anyagáram összege adja. Például az első komponens esetén  $f_{ST1,C1} + f_{ST2,C1} + f_{ST3,C1} = f_{ST4,C1}$ .

A keverők költsége a hálózat teljes költségének kiszámítása során figyelmen kívül hagyható, mivel az nagyságrendekkel kisebb értéket képvisel, mint a szétválasztó berendezések költsége.

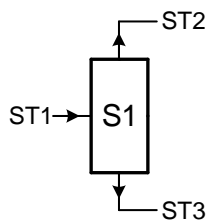


3.2. ÁBRA. Egy megosztó berendezés grafikus reprezentációja.

A 3.2 ábra egy  $D1$  megosztó berendezést reprezentál, amely a bejövő  $ST1$  anyagáramot egy hozzárendelt  $\lambda_1$  megosztási arány alapján két azonos összetételű anyagárammá bont szét.

$$f_{ST1,k} = \lambda_1 * f_{ST2,k} + (1 - \lambda_1) * f_{ST3,k} \quad k \in CI = \{C1, C2, C3\}; \quad 0 \leq \lambda_1 \leq 1 \quad (3.3)$$

A  $D1$  megosztó berendezés esetében az egyes  $k \in CI$  komponensekre vonatkozó anyag-egyensúlyt a 3.3 egyenlet írja le. Az  $f_{ST1,k}$  bejövő anyagáram mérete megegyezik a két kimenő anyagáram,  $f_{ST2,k}$  és  $f_{ST3,k}$  méretének összegével minden egyes  $k$  komponens esetében. A két kimenet aránya a  $\lambda_1$  változó segítségével szabályozható. A teljes költség számítása során a megosztó berendezések költsége a keverők költségéhez hasonlóan elhagyható. A módszer alkalmas 2-nél több kimenettel rendelkező megosztók modellezésére is, ekkor először a több kimenetű berendezést több, összekapcsolt, két kimenetű berendezéssel helyettesíthetjük.



3.3. ÁBRA. Egy szétválasztó berendezés grafikus reprezentációja.

A szétválasztó berendezések a bejövő anyagáramot pontosan két anyagárammá bontják szét, amelyek a kimenetén jelennek meg. Az ilyen típusú szétválasztókat egyszerű szétválasztónak nevezzük. A megosztó berendezésekkel ellentétben, a kimenő anyagáramok komponens összetétele nem egyezik meg. Ideális esetben, amikor éles szétválasztás történik, minden egyes komponens kizárólag az egyik kimeneten jelenhet meg.



$$ST1 = [f_{ST1,C1}, f_{ST1,C2}, \dots, f_{ST1,cn}] \quad (3.4)$$

$$ST2 = [f_{ST1,C1}, f_{ST1,C2}, \dots, f_{ST1,k}, 0, \dots, 0] \quad (3.5)$$

$$ST3 = [0, \dots, 0, f_{ST1,k+1}, \dots, f_{ST1,cn}] \quad (3.6)$$

A kidolgozott algoritmus feltételezi, hogy a megoldandó feladat kizárólag egyszerű, éles szétválasztókat tartalmaz. Egy ilyen berendezés az  $S1$  szétválasztó, amely reprezentációja a 3.3 ábrán látható.

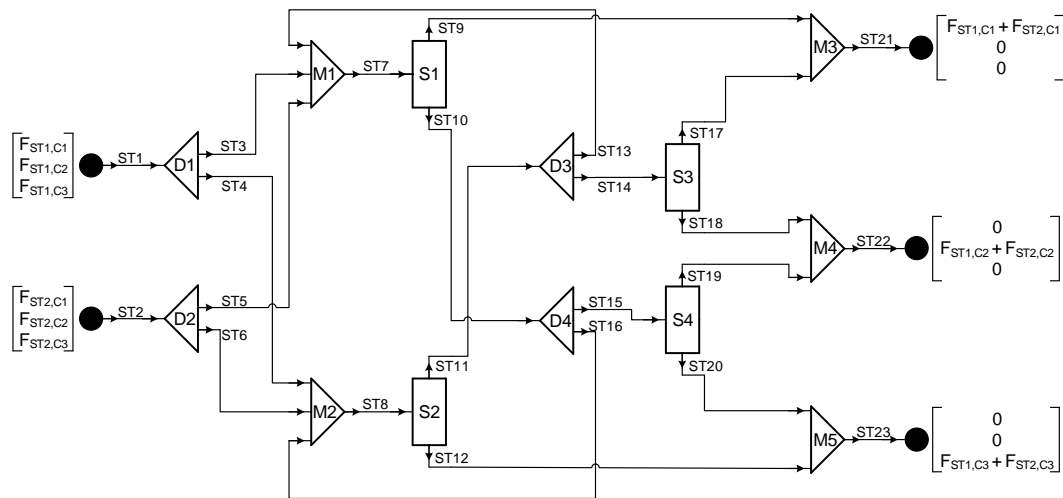
Abban az esetben, ha az  $S1$  szétválasztó berendezés a  $k$ . és  $k + 1$ . komponens között hajt végre szeparálást, akkor a viselkedése komponensáram-alapú modell használata esetén a 3.4 -3.6 egyenletekkel írható fel. Látható, hogy a  $\{C1, C2, \dots, cn\}$  komponenseket tartalmazó bejövő anyagáram a  $\{C1, C2, \dots, k\}$  komponenseket tartalmazó  $ST2$  anyagáramra és  $\{k + 1, \dots, cn\}$  komponenseket tartalmazó  $ST3$  anyagáramra bomlik szét.

Egy szétválasztó költsége a rajta átfolyó anyagáram méretétől függ. A valós működés minél pontosabb modellezésére a szakirodalomban főként konkáv, szigorúan monoton növekvő költségfüggvényt alkalmaznak. Jelen esetben a legtöbbször használt  $x^{0,6}$  exponenciális függvényt alkalmazom, ahol  $x$  jelöli a teljes bejövő anyagáramot. A szétválasztó hálózat teljes költségét a szétválasztó berendezések költségének összege adja.

### 3.2. Szemléltető példa

A kidolgozott módszer működésének és hatékonyságának bemutatására a szakirodalomból választottam egy olyan feladatot, amelynek ismert az optimális megoldása. Ezt a feladatot többek között Kovács és szerzőtársai [74] is megoldották. A feladat egy 3C2FPP szétválasztási feladat, amely annyit jelent, hogy összesen két darab három komponensű betáplálást kell felbontani úgy, hogy a kimeneten a három komponens külön-külön, tiszta termékként jelenik meg. A hálózat felépítéshez egyszerű, éles, konkáv költségfüggvénnyel rendelkező szétválasztó berendezéseket lehet felhasználni.

Mivel az új módszernek nem része a szuperstruktúra felépítése, ezért a megoldás során azt a szigorú szuperstruktúrát veszem alapul, amelyet szintén Kovács és szerzőtársai [74] publikáltak. Ezt a struktúrát ismerteti a 3.4 ábra.



3.4. ÁBRA. A szemléltető példa szigorú szuperstruktúrája két bemenettel és három tiszta termékkel.

3.1. TÁBLÁZAT. A ki-és belépő anyagáramok összetétele.

Komponensek	1. betáplálás	2. betáplálás	1. termék	2. termék	3. termék
1. komponens	120	100	220	0	0
2. komponens	1	1	0	2	0
3. komponens	20	200	0	0	220

A feladat során két egyszerű és éles szétválasztó típust különböztetnek meg.  $S1$  és  $S3$  szétválasztó berendezések tartoznak az első osztályba, ezek az első és a második komponens között hajtanak végre éles vágást. A második osztályba az  $S2$  és  $S4$  szétválasztók tartoznak, ezek a második és harmadik komponens között választják szét a bejövő anyagáramot.

Mint már korábban is említésre került, az  $x^{0,6}$  függvényt használom a berendezés költségeinek leírására, ahol  $x$  jelöli az átáramló anyag mennyiségét. A szétválasztó berendezések mellett a szigorú szuperstruktúra tartalmaz négy megosztó és öt keverő berendezést is. A 3.1 táblázat tartalmazza a bejövő anyagáramok komponens arányát, valamint a kilépő tiszta anyagáramokhoz tartozó mennyiségeket.

A kiválasztott feladat különlegességét az adja, hogy az optimális megoldás kört tartalmaz. Kezdetben az ilyen típusú feladatokat különböző heurisztikus módszerekkel oldották meg. Azt feltételezték, hogy az optimális hálózat nem tartalmazhat redundáns

elemeket, mivel ellenkező esetben nagymértékben növekedhet a megoldandó matematikai programozási modell komplexitása.

Kovács és szerzőtársai mutatták meg [74], hogy amennyiben a heurisztikus szabályok vagy a kiindulásként használt maximális struktúra nem teljes, akkor a módszer nem adja meg az optimális megoldást. Tanulmányukban ismertették, hogy melyek azok a bemeneten megfigyelhető komponens arányok, amelyek esetében az optimális megoldás visszacsatolást, azaz kört tartalmaz. Publikációjukban egy intervallum aritmetikán alapuló globális optimalizálási eljárást használtak [75]. A futási eredményeiket a fejezet végén részletesebben összehasonlítom saját módszeremmel.

### 3.3. Általános algoritmus

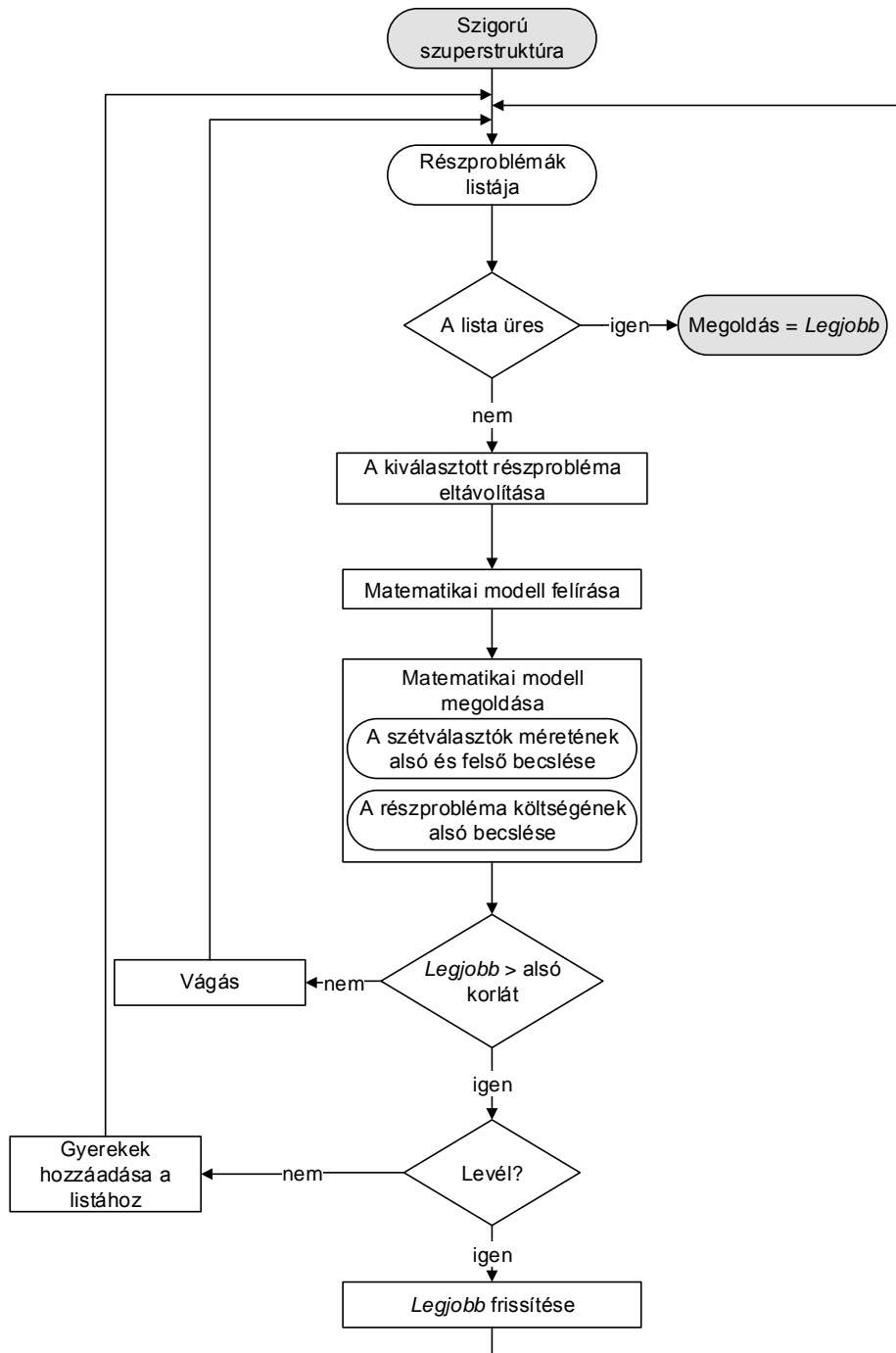
A vizsgált SNS feladattípus megoldására kidolgozott globális optimalizálási eljárás során komponensáram-alapú matematikai modellt írok fel a megadott szigorú szuperstruktúrához. Ebben a modellben a komponens arányok és a megosztókban szereplő megosztási arányok jelennek meg változóként. A megosztási arányok módosításával nyílik lehetőség a komponensáramok méretének, ezáltal a hálózat struktúrájának változtatására is. A nemlineáris modell célfüggvényében a szétválasztó berendezések költsége szerepel és a 3.7 egyenlet segítségével írható fel a szemléltető példa esetében.

$$\sum_{st \in SI} (f_{st,C1} + f_{st,C2} + f_{st,C3})^{0,6} \quad SI = \{ST7, ST8, ST14, ST15\} \quad (3.7)$$

Itt *ST7*, *ST8*, *ST14* és *ST15* a szétválasztó berendezések bejövő komponensáramait (streamek) jelölik. A teljes költséget a bejövő anyagáramokra kiszámított költségek összegeként lehet megadni, ahol az anyagáramok méretét a benne található komponensek összege adja. A következő pontokban ismertetem, hogy a modellben szereplő nemlinearitás honnan ered, valamint részletesen bemutatom az algoritmus működését is.

#### 3.3.1. Az eljárás áttekintése

A 3.5 ábrán látható folyamat foglalja össze a kidolgozott eljárás felépítését. Ebben a pontban egy rövid áttekintést adok a működéséről, a további fejezetekben pedig részletesen kifejtem az egyes lépéseket.



3.5. ÁBRA. Az eljárás folyamatábrája.

Az algoritmus bemenete minden esetben szigorú szuperstruktúra, így biztosítom, hogy az optimális megoldást nem zártam ki a keresési térből. Az algoritmus első lépésben előállítja a gyökér problémát, majd elhelyezi a részproblémák rendezett tárolására szolgáló listán. Ezt követően elindul az iterációs szakasz. Amennyiben a lista üres, azaz nincs több részprobléma, amit meg kell vizsgálni, az aktuális legjobb eredmény lesz az optimális megoldás. A folyamatábrán ezt *Legjobb* jelöli. Ezt követően a program működése véget ér.

Ha a lista nem üres, akkor az alkalmazott szabályoknak megfelelően kiválasztja a lista egy elemét és eltávolítja azt a listából. A következő lépésben felírja a részproblémához tartozó matematikai programozási modellt, majd ezt követően különböző célfüggvényeket felhasználva kiszámítja a szétválasztók bemeneti anyagáramainak méretére vonatkozó alsó és felső korlátokat, valamint a mennyiségi korlátokhoz tartozó költség értékeket. Segítségükkel felírja a szétválasztók konkrét költségfüggvényére vonatkozó lineáris alsó becslő függvényeket, majd ezeket felhasználva már egy lineáris matematikai modellt megoldva megkapja a részproblémához tartozó hálózat költségének alsó korlátját is.

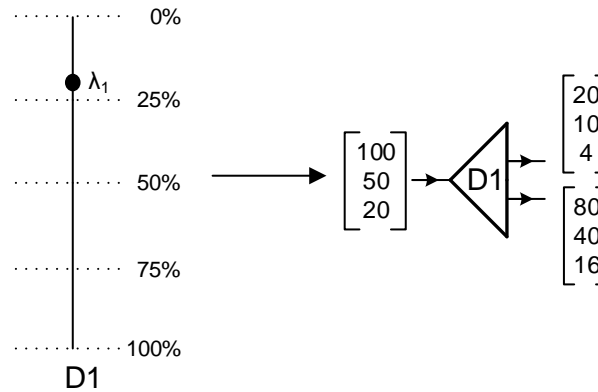
Abban az esetben, ha ez az alsó korlát nagyobb, mint az eddigi legjobb érték, akkor ez az ág biztosan nem tartalmaz olyan levelet, amely javítaná az aktuális legjobb értéket. Ebben az esetben az ág nem igényel további vizsgálatokat, az algoritmus pedig eldobja azt és egy új iterációs lépést indít.

Ha az alsó korlát kisebb az eddigi legjobb korlátnál, akkor a következő lépésben a megálási feltételeket felhasználva megvizsgálja, hogy az aktuális részprobléma levél-e. Abban az esetben, ha levél, az eddigi legjobb értékét felülírja az új korláttal és új iterációba kezd. Ha nem levél, akkor szétválasztó függvény segítségével létrehozza a gyerek részproblémákat és a megadott szabályok szerint hozzáadja őket a részproblémák listájához. Ezt követően szintén új iterációba kezd.

### **3.3.2. Nemlineáris elemek a matematikai modellben**

Amennyiben a 3.1 pontban ismertetett elemekből épül fel a hálózat, akkor nem kerülhető el, hogy a matematikai modell nemlineáris legyen. Ez a tulajdonság két okra vezethető vissza. Az első, hogy a komponensáram-alapú modell miatt a megosztók működését

leíró egyenletek nemlineárisak lesznek. Másodsor, a szétválasztó berendezések konkáv költségfüggvénnyel rendelkeznek.



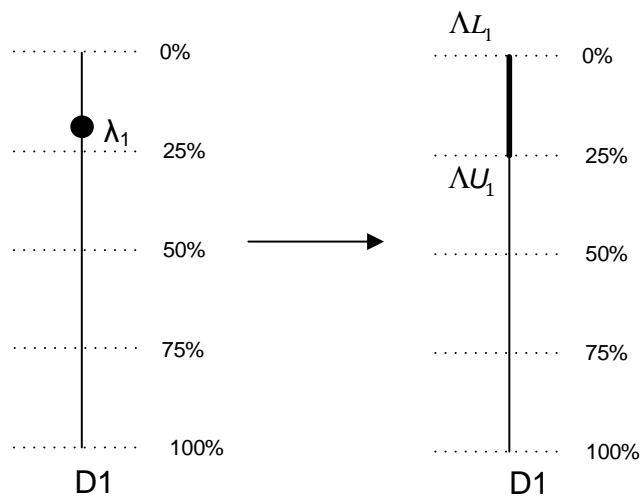
3.6. ÁBRA. Megosztó működése: az anyagáram megosztása 1:4 megosztási aránnyal.

Az általam használt modellben minden egyes megosztóhoz tartozik egy 0-tól 100%-ig terjedő intervallum, amely a megosztási arány meghatározására szolgál. Egy kimenő anyagáram méretét a bejövő anyagáram méretének és a kimenethez tartozó megosztási arányrészt szorzataként lehet meghatározni (mindkettő változó). Ezt mutatja be a 3.6 ábra a  $D1$  megosztó esetében. Mivel a  $\lambda_1$  megosztási arány értéke 20%, ezért a 3.3 egyenlet szerint az első kimenetre jut a bemenet 20%-a, a második kimenetre pedig a 80%-a.

A probléma megoldására a megosztási arány helyett bevezetem a megosztási intervallumot, ez látható a 3.7 ábrán. A B&B alapú módszer korlátozó lépésében alsó ( $\Lambda L_1$ ) és felső ( $\Lambda U_1$ ) korlátokkal adom meg az intervallumokat. Mivel ezek már paraméterként jelennek meg a változó (megosztási arány) helyett, ezért a 3.3 egyenlet helyett bevezetett 3.8 és 3.9 egyenletek már lineárisak lesznek. A 3.7 ábrán ( $\Lambda L_1$ ) értéke 0, míg ( $\Lambda U_1$ ) értéke 0,25. Ez annyit jelent, hogy a megosztási arány értéke ezen a  $[0; 0,25]$  intervallumon mozoghat. Minél szűkebb ez az intervallum, annál jobban közelíthető  $\lambda_1$  eredeti értéke.

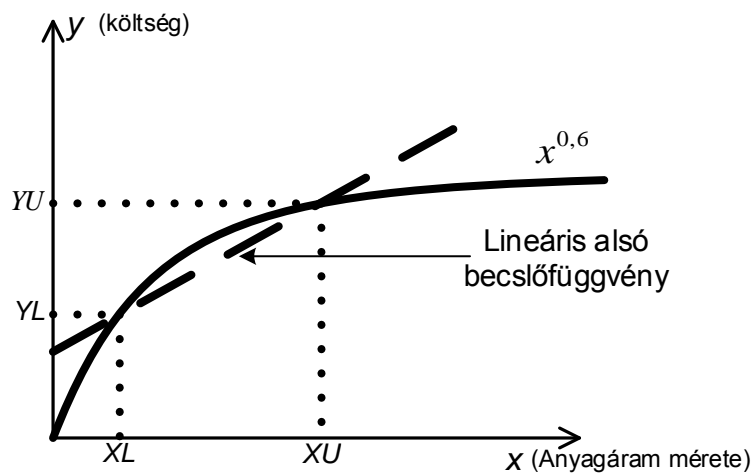
$$f_{ST1,k} * \Lambda L_1 \leq f_{ST3,k} \quad k \in CI = \{C1, C2, C3\} \quad (3.8)$$

$$f_{ST1,k} * \Lambda U_1 \geq f_{ST3,k} \quad k \in CI = \{C1, C2, C3\} \quad (3.9)$$



3.7. ÁBRA. A  $\lambda_1$  megosztási arány helyettesítése a  $[\Lambda L_1; \Lambda U_1]$  megosztási intervallummal.

A konkáv költségfüggvény kezelésére a következő módszert dolgoztam ki. A 3.8 ábrán  $x$  jelöli a szétválasztó berendezésen átáramló anyag mennyiségét. Az alkalmazott  $x^{0,6}$  költségfüggvény jobban közelíti a valós működést, mint a lineáris költségfüggvény, azonban nehezebben megoldható nemlineáris modellt eredményez.



3.8. ÁBRA. Lineáris alsó becslő függvény a szétválasztók költségének közelítésére.

Ezt a nehézséget úgy oldottam meg, hogy az  $[XL, XU]$  intervallumon konstruáltam

egy lineáris alsó becslő függvényt az eredeti konkáv költségfüggvényhez.  $XL$  és  $XU$  jelöli bizonyos megosztási intervallumok mellett a vizsgált szétválasztó berendezésen minimálisan és maximálisan átáramló anyagmennyiséget. Abban az esetben, ha sikerült minden szétválasztó berendezéshez megadni lineáris alsó becslő függvényt, akkor a teljes hálózat költségére lehet adni egy alsó becslést úgy, hogy közben lineáris marad a modell.

### 3.3.3. Branch & Bound keretrendszer

A diszkrét változókat tartalmazó kombinatorikus optimalizálási feladatok rendszerint NP-nehezek. Ez a gyakorlatban annyit jelent, hogy a lehetséges megoldások száma exponenciálisan nő a bemenet méretének függvényében. Például egy  $n \times n$ -es költségmátrixszal rendelkező hozzárendelési feladat esetén a lehetséges megoldások száma  $n!$ . Ennek következtében az explicit leszámlálás nem jelent hatékony alternatívát az optimum megkeresésében. Ilyen esetekben előszeretettel alkalmazzák a B&B eljárást, mint keretrendszert.

A módszer hatékonyságát az adja, hogy a keresési tér jelentős részét ki lehet zárni miután bebizonyosodott, hogy ezek a részek nem tartalmazhatják az optimális megoldást. Az iteratív megoldási folyamat bármely lépésében az aktuális állapot mindig leírható az eddig talált legjobb megoldással, valamint a még megvizsgálandó részproblémák halmazával.

Az eljárás működését egy egyszerű optimalizálási problémán keresztül szemléltetem:

$$\min\{z(x) : x \in \mathcal{L}\} \quad (3.10)$$

ahol  $\mathcal{L}$  azonos dimenzióval, egész koordinátákkal rendelkező, nemnegatív vektorok nem-üres és véges halmaza. Az eljárás két függvényre épül. Ezek közül az egyik a szétválasztási függvény, amely feladata, hogy hozzárendeli az  $\mathcal{L}$  halmaz tetszőleges  $|\mathcal{L}'| > 1$  részhalmazához  $\mathcal{L}'$  egy valódi osztályozását.

A második függvény, amelyre a B&B módszer épül, a korlátozó függvény. Ez  $\mathcal{L}$  tetszőleges részhalmazához hozzárendeli a  $z(\bar{x})$ ,  $\bar{x} \in \mathcal{L}'$  függvényértékek egyik alsó korlátját. Jelölje a szétválasztási függvényt  $f$ , a korlátozási függvényt pedig  $g$ . Az eljárás során egy bináris



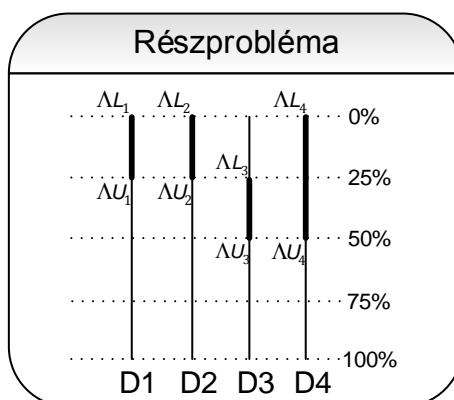
fát építék fel (ezt szokás B&B fának is nevezni), amelynek a csúcsai az eredeti feladat részfeladatai, és a következő lépések szerint végzem el:

*Előkészítés.* A fa gyökerének kinevezem  $\mathcal{L}$ -t. Meghatározom  $g(\mathcal{L})$  értékét és hozzárendelem a gyökérhez. Továbbá legyen az iteráció számát jelölő  $r$  változó értéke 1.

*Az iteráció lépései.*

1. *Első lépés.* Az aktuális iterációban szereplő fa levelei közül kiválasztom azt, amelyikhez a minimális függvényértéket rendeltem hozzá. Legyen ez a levél  $\mathcal{L}'$ .
2. *Második lépés.* Amennyiben  $\mathcal{L}' = \{\bar{x}\}$  teljesül, akkor az eljárás véget ér, mivel  $\bar{x}$  az optimális megoldás. Egyéb esetben ugrás a 3. lépésre.
3. *Harmadik lépés.* Ebben a lépésben létrehozom  $\mathcal{L}'$  gyerekeit az  $f(\mathcal{L}')$  függvény segítségével, majd az új levelekhez is meghatározom az alsó korlátokat a korlátozó függvény használatával. Végül növelve  $r$ -t 1-gyel, átlépek a következő iterációs lépésbe.

### 3.3.4. Részproblémák



3.9. ÁBRA. Négy megosztási intervallumot tartalmazó részprobléma.

A 3.4 ábrán látható szigorú szuperstruktúra négy megosztó berendezést tartalmaz, ezért egy részproblémában négy megosztási arányt kell közösen kezelni. Mivel minden megosztási arányt megosztási intervallumokkal helyettesíték, ezért egy részproblémát 8 paraméter segítségével lehet leírni. Ezek az intervallumokhoz tartozó alsó ( $\Lambda L_1, \dots, \Lambda L_4$ ) és felső ( $\Lambda U_1, \dots, \Lambda U_4$ ) korlátok.

A 3.9 ábra mutat be egy részfeladatot, ahol a hosszú vonalak jelölik a 4 megosztó berendezéshez tartozó teljes  $[0; 1]$  intervallumot, a vastag vonalak pedig a részfeladathoz tartozó aktuális megosztási intervallumokat. A  $D3$  megosztóhoz tartozó  $[0,25; 0,5]$  intervallum azt jelenti, hogy a berendezés bemenetének legalább 25, de legfeljebb 50%-a halad tovább az első kimeneten.

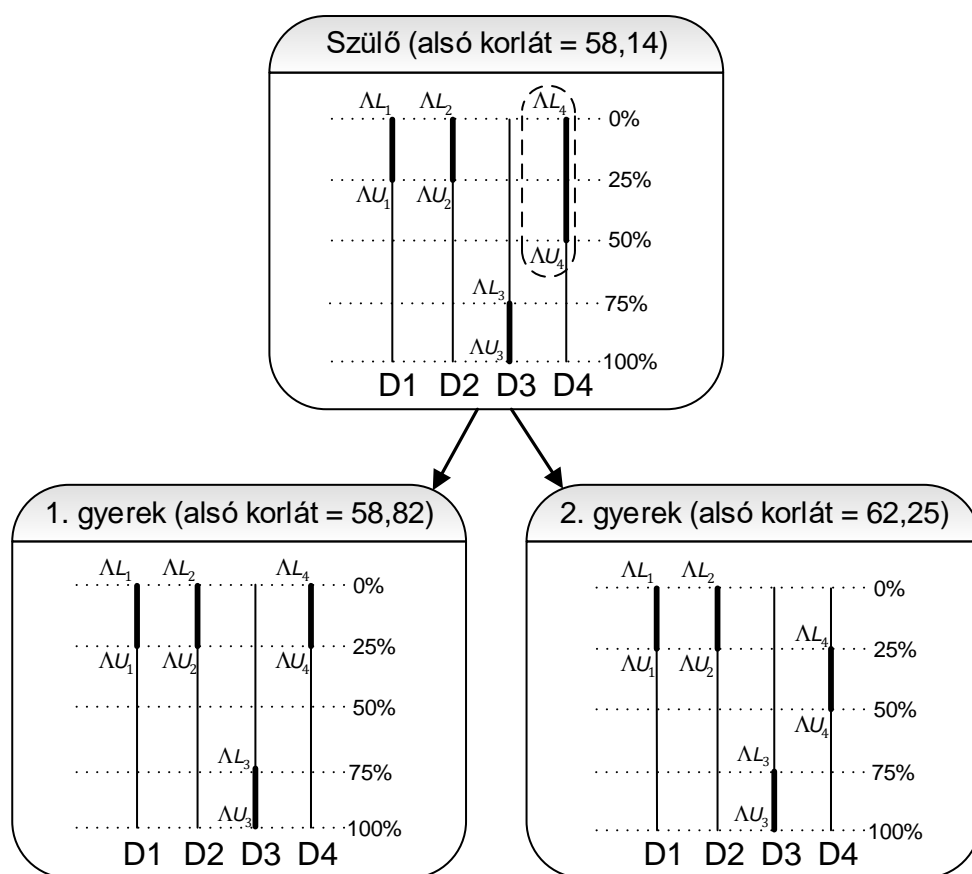
### 3.3.5. Szétválasztás

A szétválasztási függvény mindig a legszélesebb megosztási intervallumot választja ki és osztja ketté. Abban az esetben, ha több egyforma hosszú intervallum is van, akkor ezek közül mindig az elsőt választja ki. A gyökér feladatban minden megosztóhoz a teljes,  $[0; 1]$  intervallum tartozik.

A 3.10 ábra mutatja be a szétválasztó lépés működését a szemléltető példa esetében. A szülő feladatban a  $[0; 0,25]$  intervallum tartozik az első megosztó berendezéshez, majd rendre a  $[0; 0,25]$ ,  $[0,75; 1]$ ,  $[0; 0,5]$  intervallumok a második, harmadik és negyedik megosztóhoz.

Mivel a negyedik intervallum a legszélesebb, ezért az aktuális szétválasztó lépésben ezt az intervallumot bontja ketté az algoritmus. A két gyerek részproblémában az első három intervallum változatlan marad, miközben a negyedik intervallumot rendre a  $[0; 0,25]$  és  $[0,25; 0,5]$  intervallumokkal helyettesítem. A részprobléma fejlécében található alsó korlátot a korlátozó függvény segítségével határozom meg, ennek módját részletesen a későbbiekben tárgyalom, viszont a következő lépésben felhasználok.

Az implementáció során ügyelni kell arra, hogy az intervallumok felezése során kerekítési hibából kifolyólag ne fordulhasson elő olyan helyzet, hogy a szükségesnél kisebb intervallumokat vizsgálunk tovább. A keletkező intervallumok esetében a korlátokat úgy adtam meg, hogy az aktuális toleranciaérték függvényében (tolerancia plusz három tizedes jegy) határoztam meg, hogy mennyire kell kerekíteni az intervallumok határait.



3.10. ÁBRA. Két gyerek generálása a 4. intervallum szétvágásával a 83. iterációban.

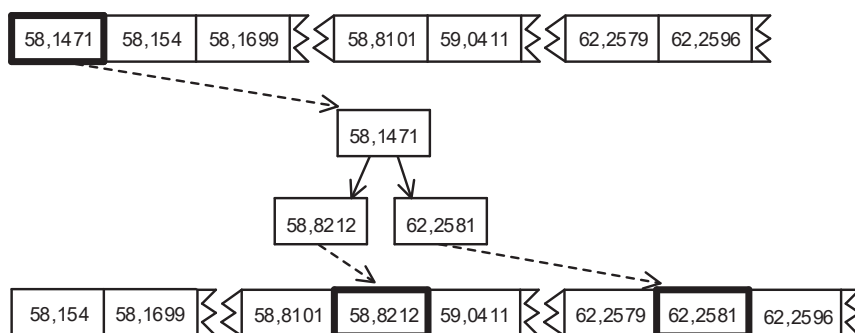
### 3.3.6. Részprobléma kiválasztása

Az eljárás szétválasztó fázisában előállított részproblémákat az algoritmus egy listaszervezetben tárolja. A lista kezelésére két különböző módszert dolgoztam ki.

1. Az elsőben LIFO stratégiát valósítok meg, azaz mindig a lista első elemét választom ki, majd az előállított gyerek részfeladatokat a lista elejére szúrom be. Segítségével a B&B fában mélységi keresést valósítok meg. A stratégia előnye, hogy hamar el lehet jutni egy levélhez és ezáltal kapni egy alsó korlátot, azonban ez a korlát nagy valószínűséggel messze lesz az optimumtól.
2. A második stratégia alkalmazása során a listát a részproblémához tartozó alsó

becslés értéke alapján rendezem növekvő sorba. Ezt úgy valósítom meg, hogy mindig a lista első elemét választom ki, majd a generált gyerek részfeladatokat a hozzájuk kiszámított alsó becslés szerint a lista megfelelő pozíciójába szűrom be. Ezt az eljárást szemlélteti a 3.11 ábra. Az első pozícióban szereplő, 58,147 értékkel rendelkező részfeladatot választom ki. A szétválasztó és korlátozó lépéseket követően két új részprobléma keletkezik, amelyek alsó korlátai 58,821 és 62,258. Ezeket a lista rendezése szerint a megfelelő pozíciókba beszűrom.

A módszer hátránya az előző stratégiához képest, hogy az új részproblémák helyének meghatározása miatt a beszűrés több időt vesz igénybe. A hatékony részprobléma kiválasztásnak köszönhetően (mindig a legkisebb alsó korláttal rendelkező részproblémát vesszük ki) az optimális megoldás megtalálása jelentősen kevesebb iterációt igényel. A számítási eredmények azt igazolják, hogy a második módszer alkalmazásával a teljes eljárás nagyságrendileg 60-szor gyorsabb, mint az első módszerrel.

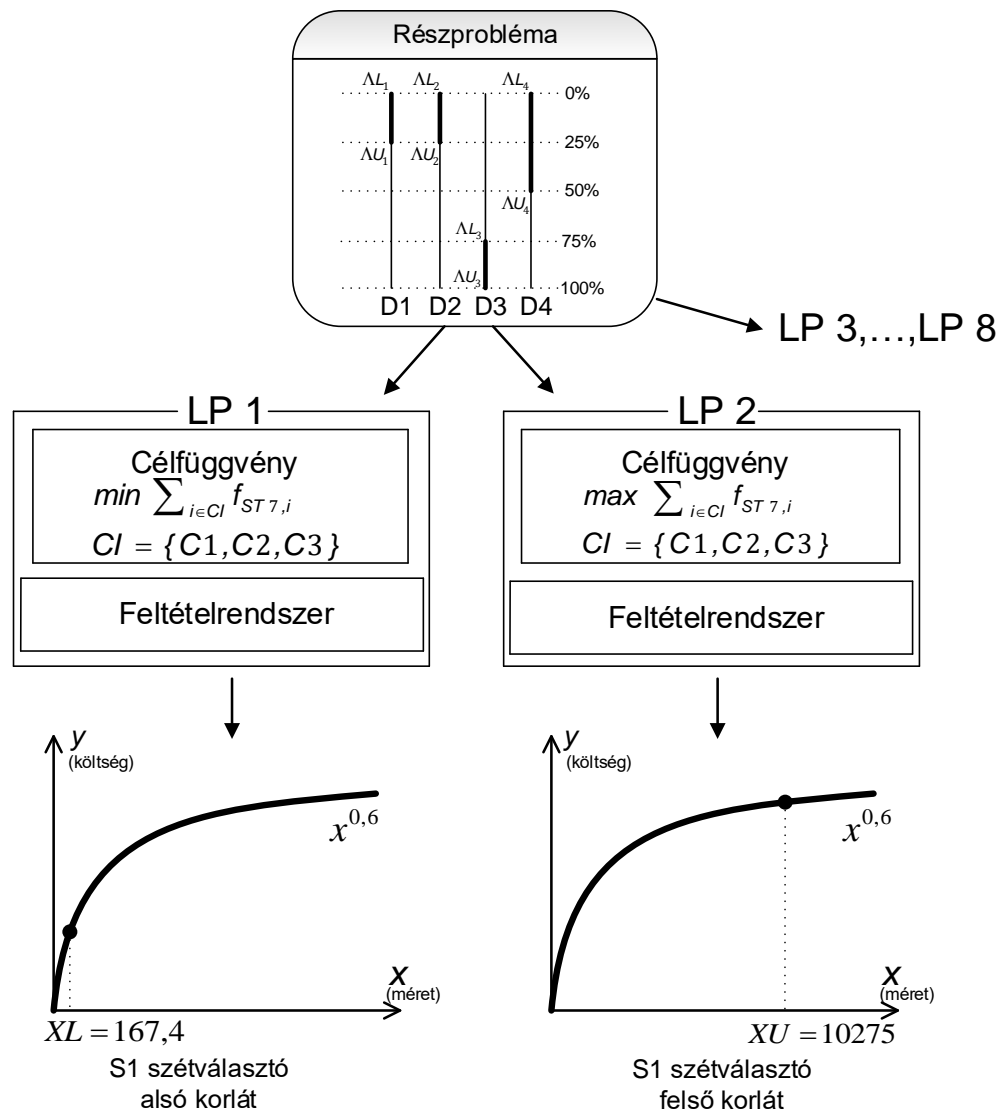


3.11. ÁBRA. A részfeladatokat tartalmazó lista módosítása az elemek beszűrésével.

### 3.3.7. Szétválasztó berendezések terhelésének meghatározása

Erre a lépésre a szétválasztó berendezések alsó becslésének meghatározásához van szükség. A cél, hogy az aktuális részfeladathoz tartozó megosztási intervallumok figyelembe vétele mellett meghatározzam, hogy az egyes szétválasztó berendezéseken milyen korlátok között változhat az átfolyó anyagáram mérete.

Egy szétválasztó esetében a minimum értéket ( $XL$ ) és a maximum értéket ( $XU$ ) egyaránt egy LP megoldásával számolom ki. Az eljárást a 3.12 ábra szemlélteti. Mivel a szemléltető példában összesen négy szétválasztó berendezés szerepel, ezért 8 LP megoldása szükséges ahhoz, hogy mindegyikhez megadjam a belépő anyagáram méretének korlátait.



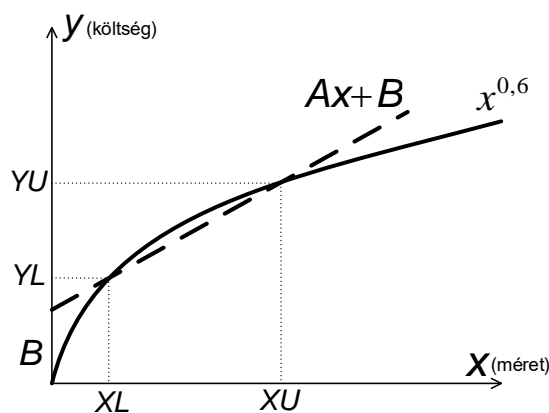
3.12. ÁBRA. A szétválasztón áthaladó anyagáram méretének alsó ( $XL$ ) és felső ( $XU$ ) becslése.

A 3.12 ábra az első szétválasztóhoz tartozó LP1 és LP2 feladatokat részletezi, amelyek megadják az  $S1$  szétválasztóhoz tartozó  $XL$  és  $XU$  értékeket.  $LP1$  az  $ST7$  anyagáram méretének minimumát keresi, míg  $LP2$  az anyagáram maximumát. A nyolc  $LP$  feltételrendszere azonos, kizárólag a célfüggvényben térnek el egymástól. A feltételrendszer

három fő részből épül fel. Az első tartalmazza a megosztó berendezésekre vonatkozó anyagegyensúlyi feltételeket (3.15 - 3.18 egyenletek), valamint a megosztási intervallumokra vonatkozó szabályokat (3.19 - 3.34 egyenletek). A második csoportba tartoznak a keverő berendezésekre vonatkozó anyagegyensúlyi feltételek (3.35 - 3.39 egyenletek), míg a harmadikba a szétválasztó berendezésekre vonatkozók (3.40 - 3.47 egyenletek).

### 3.3.8. Lineáris alsó becslő függvény a szétválasztók költségére

A teljes hálózat költségét a szétválasztó berendezések költsége szolgáltatja, ezért meg kell határozni minden egyes berendezés költségére egy alsó korlátot, hogy a vizsgált részprobléma esetén a teljes hálózat költségére is meg lehessen adni egy alsó becslést. A 3.13 ábrán látható folytonos vonal jelöli az eredeti konkáv költségfüggvényt, a szaggatott vonal pedig a hozzá generált alsó becslőfüggvényt az  $[XL; XU]$  intervallumon, ahol  $XL$  és  $XU$  a 3.3.7 pontban meghatározott, a szétválasztó terhelésének alsó illetve felső korlátja.



3.13. ÁBRA. Konkáv költségfüggvény lineáris alsó becslése az  $[XL; XU]$  intervallumon.

A hozzájuk tartozó, költségre vonatkozó  $YL$  és  $YU$  korlátokat a 3.11 - 3.12 egyenletek segítségével lehet meghatározni. Az  $[XL; XU]$  intervallumra vonatkozó alsó becslő paraméterei a 3.13 - 3.14 egyenletek segítségével kaphatóak meg, ahol  $A$  jelöli a lineáris függvény arányos, míg  $B$  a fix részét.

A B&B eljárás korai fázisában található részproblémák még széles megosztási intervallumokkal rendelkeznek, így  $XL$  és  $XU$  értéke is természetesen távol esik egymástól. Ez pontatlanabb alsó becslést eredményez.

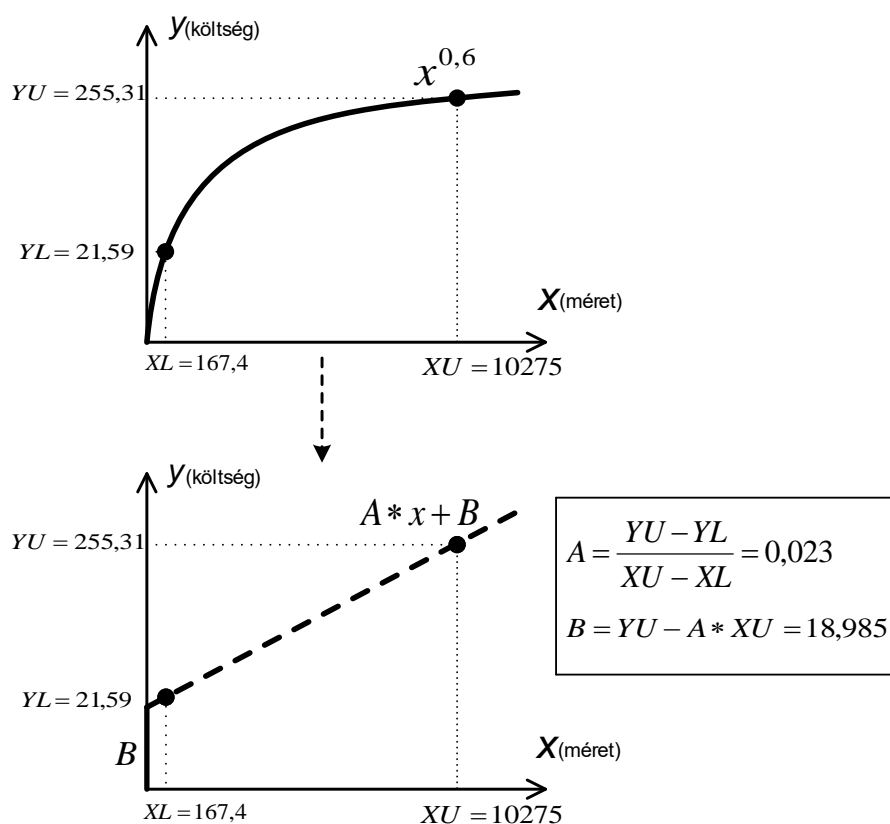
Ahogy haladunk előre az iterációk során, ezen befoglaló intervallumok hossza folyamatosan csökken és ezáltal egyre pontosabb alsó becslést lehet megadni.

$$YL = (XL)^{0,6} \quad (3.11)$$

$$YU = (XU)^{0,6} \quad (3.12)$$

$$A = \frac{YU - YL}{XU - XL} \quad (3.13)$$

$$B = YU - (A * XU) \quad (3.14)$$



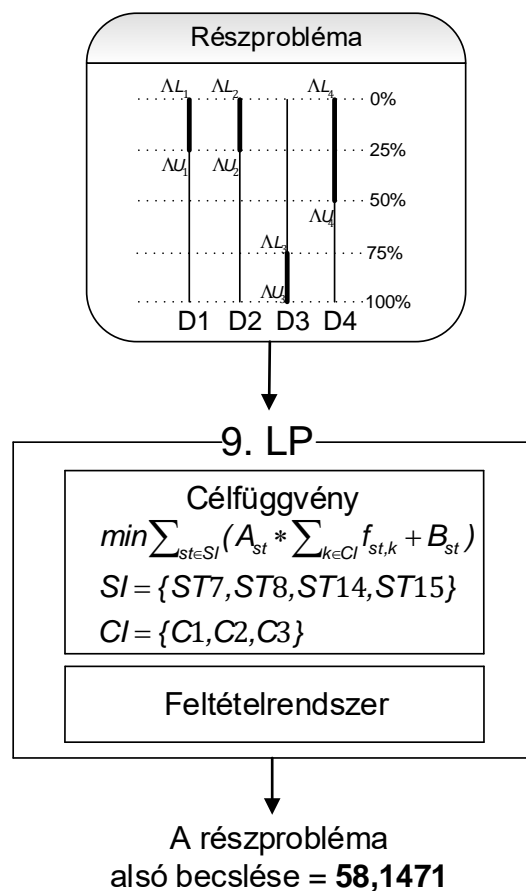
3.14. ÁBRA. A becslő függvény  $A$  és  $B$  paramétereinek meghatározása.

A 3.14 ábra mutat példát arra, hogyan kell meghatározni az alsó becslő függvény paramétereit. Először az  $XL = 176,4$  és  $XU = 10275$  méretekhez tartozó költség értékeket határozom meg a 3.11 - 3.12 egyenletekkel. Ezt követően az  $A = 0,023$  meredekség és  $B = 18,985$  eltolás értékeket számolom ki a 3.13 - 3.14 egyenletek segítségével.

A vizsgált feladat konkáv költségfüggvényeket használ, azonban a módszer alkalmazható más típusú költségfüggvényekre is. Ekkor azonban máshogy kell meghatározni a hozzá tartozó alsó becslést, de ez a teljes eljárás egyéb részeire nincs kihatással.

### 3.3.9. Részprobléma alsó becslésének megadása

Miután meghatároztam a részproblémához tartozó hálózatban a szétválasztó berendezések költségére vonatkozó alsó becselő függvényeket, a teljes hálózat költségére egy 9. LP feladat megoldásával tudok alsó becslést adni. Ez a lineáris programozási feladat a célfüggvényében tér el a korábbi LP-ktől. A korábban meghatározott alsó becselő függvények felhasználásával keresi a teljes költség minimumát. A 3.15 ábra mutatja be ezt a folyamatot, ahol a célfüggvény a korábbi alsó becselő függvények összege.



3.15. ÁBRA. A részfeladat alsó becslése a 9. LP megoldásával.



### 3.3.10. Megállási feltételek vizsgálata

Az eljárás kidolgozása során két különböző megállási feltételt is megvizsgáltam. Az elsőben az  $YL$  és  $YU$  értékeket tekintettem, azaz hogy a szétválasztó berendezések költségére adott korlátok milyen közel vannak egymáshoz. A gyakorlat azt igazolta, hogy ennek a feltételnek a vizsgálata nem praktikus, mivel a vegyiparban dolgozó mérnökök számára nem jelent könnyen megadható paramétert. Továbbá az eljárás hatékonyságát tekintve sem előnyös a használata, mivel egy részproblémában minden egyes szétválasztó berendezés esetén ellenőrizni kell a feltétel teljesülését.

Helyette megállási feltételt vezettem be a megosztó berendezések megosztási intervallumaira. Ez annyit jelent, hogy ha az intervallum, amelyen belül a megosztási arány változhat, kellően kicsi, akkor az addig talált legjobb megoldás optimálisnak tekinthető. Ez gyakorlati szempontból is jobb megoldásnak bizonyult, mivel a szétválasztó hálózatokban használt eszközök hibahatárát könnyen át lehet ültetni a megosztás pontosságába.

A futtatások során különböző toleranciaértékeket használtam az intervallumok méretére vonatkozóan. A 0,001 toleranciaérték azt jelenti, hogy egyetlen megosztási intervallum hossza sem haladhatja meg a 0,001 értéket. Ehhez minden intervallumot legalább 7-szer el kell vágni. A futási eredményekről további részleteket a 3.5 fejezet fog szolgáltatni.

## 3.4. Matematikai modell

Ebben az alfejezetben a korábban említett LP feladatok felépítését fejtem ki részletesen. A hozzájuk tartozó szigorú szuperstruktúra a 3.4 ábrán látható. A komponensáram alapú modellben  $f_{ST3,C1}$  jelöli az  $ST3$  anyagáramban a  $C1$  komponens méretét.

A modell tartalmaz feltételeket a keverők, megosztók, szétválasztók anyagegyensúlyára, valamint a komponensáramok alsó korlátjára. Emellett tartalmazza a felhasznált célfüggvényeket is.

*Anyagegyensúly a D1 megosztó esetén:*

$$f_{ST1,k} = f_{ST3,k} + f_{ST4,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.15)$$

Anyagegyensúly a D2 megosztó esetén:

$$f_{ST2,k} = f_{ST5,k} + f_{ST6,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.16)$$

Anyagegyensúly a D3 megosztó esetén:

$$f_{ST11,k} = f_{ST13,k} + f_{ST14,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.17)$$

Anyagegyensúly a D4 megosztó esetén:

$$f_{ST10,k} = f_{ST15,k} + f_{ST16,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.18)$$

A D1 megosztó működését leíró egyenletek:

$$f_{ST1,k} * \Lambda L_1 \leq f_{ST3,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.19)$$

$$f_{ST1,k} * \Lambda U_1 \geq f_{ST3,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.20)$$

$$f_{ST1,k} * (1 - \Lambda U_1) \leq f_{ST4,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.21)$$

$$f_{ST1,k} * (1 - \Lambda L_1) \geq f_{ST4,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.22)$$

A D2 megosztó működését leíró egyenletek:

$$f_{ST2,k} * \Lambda L_2 \leq f_{ST5,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.23)$$

$$f_{ST2,k} * \Lambda U_2 \geq f_{ST5,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.24)$$

$$f_{ST2,k} * (1 - \Lambda U_2) \leq f_{ST6,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.25)$$

$$f_{ST2,k} * (1 - \Lambda L_2) \geq f_{ST6,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.26)$$

A D3 megosztó működését leíró egyenletek:

$$f_{ST11,k} * \Lambda L_3 \leq f_{ST13,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.27)$$

$$f_{ST11,k} * \Lambda U_3 \geq f_{ST13,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.28)$$

$$f_{ST11,k} * (1 - \Lambda U_3) \leq f_{ST14,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.29)$$

$$f_{ST11,k} * (1 - \Lambda L_3) \geq f_{ST14,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.30)$$

A D4 megosztó működését leíró egyenletek:

$$f_{ST10,k} * \Lambda L_4 \leq f_{ST15,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.31)$$

$$f_{ST10,k} * \Lambda U_4 \geq f_{ST15,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.32)$$

$$f_{ST10,k} * (1 - \Lambda U_4) \leq f_{ST16,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.33)$$

$$f_{ST10,k} * (1 - \Lambda L_4) \geq f_{ST16,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.34)$$

Anyagegyensúly az M1 keverő esetén:

$$f_{ST3,k} + f_{ST5,k} + f_{ST13,k} = f_{ST7,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.35)$$

Anyagegyensúly az M2 keverő esetén:

$$f_{ST4,k} + f_{ST6,k} + f_{ST16,k} = f_{ST8,k} \quad k \in \mathcal{CI} \quad (3.36)$$

Anyagegyensúly az M3 keverő esetén:

$$f_{ST9,C1} + f_{ST17,C1} = f_{ST21,C1} \quad (3.37)$$

Anyagegyensúly az M4 keverő esetén:

$$f_{ST18,C2} + f_{ST19,C2} = f_{ST22,C2} \quad (3.38)$$

Anyagegyensúly az M5 keverő esetén:

$$f_{ST20,C3} + f_{ST12,C3} = f_{ST23,C3} \quad (3.39)$$

Anyagegyensúly az S1 szétválasztó esetén:

$$f_{ST7,C1} = f_{ST9,C1} \quad (3.40)$$

$$f_{ST7,k} = f_{ST10,k} \quad k \in \{C2, C3\} \quad (3.41)$$

Anyagegyensúly az S2 szétválasztó esetén:

$$f_{ST8,k} = f_{ST11,k} \quad k \in \{C1, C2\} \quad (3.42)$$

$$f_{ST8,C3} = f_{ST12,C3} \quad (3.43)$$

Anyagegyensúly az S3 szétválasztó esetén:

$$f_{ST14,C1} = f_{ST17,C1} \quad (3.44)$$

$$f_{ST14,k} = f_{ST18,k} \quad k \in \{C2, C3\} \quad (3.45)$$

Anyagegyensúly az S4 szétválasztó esetén:

$$f_{ST15,k} = f_{ST19,k} \quad k \in \{C1, C2\} \quad (3.46)$$

$$f_{ST15,C3} = f_{ST20,C3} \quad (3.47)$$

Komponens áramok alsó korlátja:

$$0 \leq f_{st,k} \quad st \in \mathcal{ST}; k \in \mathcal{CI} \quad (3.48)$$

A 8 LP célfüggvénye:

$$\min \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST7,k} \quad (3.49)$$

$$\max \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST7,k} \quad (3.50)$$

$$\min \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST8,k} \quad (3.51)$$

$$\max \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST8,k} \quad (3.52)$$

$$\min \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST14,k} \quad (3.53)$$

$$\max \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST14,k} \quad (3.54)$$

$$\min \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST15,k} \quad (3.55)$$

$$\max \sum_{k \in \mathcal{CI}} f_{ST15,k} \quad (3.56)$$

## 3.2. TÁBLÁZAT. A példa megoldásának részletei.

Iteráció	Megosztási intervallumok hossza				Aktuális legjobb	Alsó korlát	Megjegyzés
	D1	D2	D3	D4			
1.	1	1	1	1	$\infty$	22,1588	
2.	0,5	1	1	1	$\infty$	23,3293	
3.	0,5	0,5	1	1	$\infty$	33,5334	
				...			
33441.	0,0009765	0,0009765	0,0009765	0,0009765	62,7928	62,7928	Új legjobb
33442.	0,0009765	0,0009765	0,0019531	0,0019531	62,7928	62,8041	Vágás
				...			
37159.	0,0009765	0,0009765	0,0009765	0,0019531	62,5156	62,5091	
37160.	0,0009765	0,0009765	0,0009765	0,0009765	62,5145	62,5145	Új legjobb
37161.	0,0009765	0,0009765	0,0009765	0,0009765	62,5135	62,5135	Új legjobb
37162.	0,0009765	0,0009765	0,0019531	0,0019531	62,5135	62,5254	Vágás
37163.	0,0019531	0,0019531	0,0039062	0,0039062	62,5135	62,5245	Vágás
				...			
39046.	0,0625	0,0625	0,0625	0,0625	62,4998	62,9499	Vágás
39047.	0,0625	0,0625	0,0625	0,125	62,4998	62,2946	
39048.	0,0625	0,0625	0,0625	0,0625	62,4998	68,3341	Vágás

A 9. LP célfüggvénye:

$$\min \sum_{st \in SI} (B_{st} * \sum_{k \in CI} f_{st,k} + A_{st}) \quad (3.57)$$

### 3.5. Alkalmazás: A szemléltető példa megoldása

A 3.2 táblázat az algoritmus futásának néhány iterációs lépését emeli ki. Tartalmazza az aktuális iteráció számát, a vizsgált részproblémához tartozó megosztási intervallumok hosszát, az eddigi legjobb célfüggvény értéket, az aktuális részfeladathoz kiszámolt alsó korlátot, valamint egy megjegyzés oszlopot. Röviden áttekintek néhány sort a táblázatból.

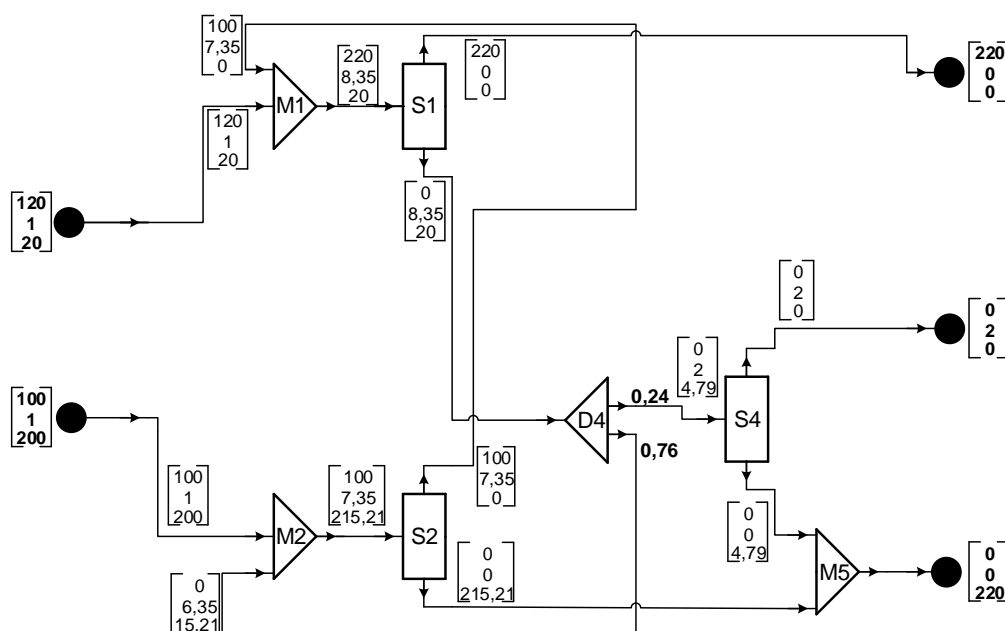
**37159. iteráció:** A részfeladatokhoz kiszámított alsó korlát jobb, mint az aktuális legjobb eredmény, azonban még nem teljesíti a megállási feltételt, mivel a negyedik intervallum hossza nagyobb, mint 0,0001. Ilyen esetben az algoritmus generálja a gyerek részproblémákat és beszúrja őket a listába.

**37160. iteráció:** Ekkor már minden intervallum kellően rövid, így egy megoldáshoz jutott. Összehasonlítva az eddigi legjobb megoldással megállapítható, hogy jobb

eredményt kapott, így az algoritmus lecseréli az eddigi legjobb eredményt, majd a következő iterációba lép.

**37162. iteráció:** A részproblémához kiszámított alsó korlát rosszabb, mint az eddigi legjobb eredmény, így a vizsgált részfeladatot eldobja, vágást hajt végre a keresési fában.

A 3.16 ábrán látható a példafeladathoz tartozó optimális megoldásstruktúra, amelynek teljes költsége 62,5115. Ez pontosan megegyezik a szakirodalomban szereplő értékkel. A megosztókhöz tartozó intervallumok a következők:  $D1: [0,999939; 1]$ ,  $D2: [0; 0,00006103]$ ,  $D3: [0,999939; 1]$ ,  $D4: [0,239197; 0,239258]$ . Figyelembe véve a toleranciaértékből adódó pontatlanságot kijelenthető, hogy a  $D1$  és  $D3$  megosztók teljes bemenete az első kimeneten halad tovább, a  $D2$  megosztó bemenete pedig a második kimeneten. Valós megosztás egyedül a negyedik megosztó esetében történik. Itt látható, hogy a bemenet 23,92%-a az első, míg 76,08%-a a második kimeneten halad tovább. Az optimális hálózat nem tartalmazza az  $S3$  szétválasztó berendezést.



3.16. ÁBRA. A példa feladat optimális megoldásstruktúrája.

3.3. TÁBLÁZAT. A különböző megoldó algoritmusok eredményeinek összehasonlítása.

	Megoldás	Futási idő [s]	Iterációs szám
NLP with OpenOpt_I1	63,1409	10,57	572
NLP with OpenOpt_I2	66,6841	11,35	614
NLP with OpenOpt_I3	70,9611	10,41	559
IGOS_v1 $\epsilon = 0,1$	60,8299	0,96	863
IGOS_v1 $\epsilon = 0,01$	62,4122	6,28	6569
IGOS_v1 $\epsilon = 0,001$	62,4998	35,35	39263
IGOS_v1 $\epsilon = 0,0001$	62,5115	505,47	578629
IGOS_v2 $\epsilon = 0,1$	60,8299	0,62	511
IGOS_v2 $\epsilon = 0,01$	62,4122	1,97	1787
IGOS_v2 $\epsilon = 0,001$	62,4998	3,25	3239
IGOS_v2 $\epsilon = 0,0001$	62,5115	8,41	9337

### 3.6. Az eredmény értékelése

A kapott eredményeket és a futás paramétereit összehasonlítottam több NLP megoldóval és *state-of-the-art* globális optimalizálási rendszerrel, hogy képet kapjunk az általunk kidolgozott eljárás hatékonyságáról. A 3.3 táblázat összeméri a kidolgozott *Intervallumos Globális Optimalizáló SNS feladatokra* (IGOS) algoritmus két változatát és egy NLP megoldó, az OpenOpt [76] eredményeit. Az OpenOpt egy nyílt forráskódú, multiplatformos, python nyelven írt optimalizációs keretrendszer. Az általa implementált *ralg* eljárás az R algoritmusra [77] épül.

Az NLP megoldót három különböző kezdőpontból indítottam, ezeket *I1*, *I2* és *I3* jelöli. Az eredményekből jól látható, hogy az NLP megoldó kevésbé pontos eredményeket szolgáltatott. A futási időket tekintve még  $e = 0,0001$  toleranciaérték esetén is gyorsabb az IGOS második változata (rendezett részprobléma lista), mint az OpenOpt. A rendezett lista előnye az egyszerű mélységi kereséssel szemben a tolerancia értékét csökkentve egyre hangsúlyosabb lesz. Az IGOS megoldót C++ nyelven Qt keretrendszert felhasználva implementáltam, a számítások egy Intel® Core™2 Duo CPU (E8500 @ 3.16GHz) személyi számítógépen futottak.

A második összehasonlításban négy, a piac élvonalába tartozó globális optimalizáló szoftvert mértem össze az általam kidolgozott eljárással. Ezek a BARON, LINDOGlobal, CONOPT és a KNITRO szoftverek. Az eredményeket mutatja be a 3.4 táblázat. Mint látható, ezek a piaci szoftverek sebességben felülmúlják az eljárásomat, köszönhetően

## 3.4. TÁBLÁZAT. Összehasonlítás piacvezető globális optimalizációs szoftverekkel.

Szoftver	Megoldás	Futási idő [s]
IGOS $\epsilon = 0,001$	62,4998	3,251
BARON	62,5123	0,007
LINDOGlobal	65,7497	0,006
CONOPT	Nem megengedett	0,002
KNITRO	Nincs megoldás	0,004

a *state-of-the-art* algoritmusoknak és implementációnak. Emellett természetesen tartalmaznak különböző presolve eljárásokat, amelyek sokat javítanak a futási időn.

A megoldás minőségét tekintve a BARON hasonlóan jó eredményt produkált, mint az IGOS megoldó, viszont a LINDOGlobal csak lokális optimumot talált meg a globális megoldás helyett. A CONOPT és KNITRO megoldók nem találtak megoldást a szemléltető példára.

A harmadik összehasonlításban Csendes Tibor megoldójával [78] (amelyre Kovács és szerzőtárai is hivatkoztak) vetem össze az IGOS eljárást. A hivatkozott megoldó eljárás intervallum aritmetikára épül. Szétválasztási feladatokra történő alkalmazását a szerző egy esettanulmányokból álló cikkben tette közzé [79]. Ebben folyamathálózati problémák megoldására ad megbízható és számítási szempontokból jól kezelhető módszereket. A bemutatott technikákat konkrét példákon keresztül illusztrálja, amelyek között megtalálható az általam megoldott feladat is. Ennek köszönhetően egyszerűen össze tudom vetni a két megoldót.

Az esettanulmányban egy szofisztikált intervallum aritmetikára épülő algoritmus segítségével határozta meg a megosztási arányokat illetve az optimum értékét  $10^{-8}$  pontossággal. A számítások során a szerző egy 133 MHz-es Pentium PC-t használt, az implementációt pedig C-XSC programozási nyelven valósította meg. Az optimális megoldás értékét a következő intervallumban határozta meg:

$$[6.251229619001662E + 001, 6.251229619999187E + 001]$$

Az algoritmus 3254,29 másodperces futási idővel rendelkezett. Az általam bemutatott algoritmus ezzel szemben nagyságrendileg 10 másodperc alatt végzett. Ez a különbség több tényezőre vezethető vissza. Egyrészt a technológiai fejlődésnek köszönhetően a mai számítógépek számítási kapacitása is legalább egy nagyságrenddel növekedett. Másrészt



a garantáltan megbízható eljárások valamint az intervallum aritmetika használata is kb. 30-szoros lassulást eredményez. Harmadrészt jóval nagyobb pontosságot használt a szerző az esettanulmányban mint ami jelen dolgozatban szerepel.

Fontos megjegyezni, hogy az általam megadott intervallumok tartalmazzák a megbízható eljárás segítségével meghatározott pontos optimumhoz tartozó megosztási arányokat, ezzel alátámasztva annak helyességét. Az IGOS megoldó létjogosultságát főként az olyan nagyméretű ipari feladatok megoldása adja, amelyeket az intervallum aritmetikára épülő módszerrel már nem lehetne belátható időn belül megoldani, azonban nem követeli meg a  $10^{-8}$  pontosságot sem.

### 3.7. A fejezet rövid összefoglalása

A fejezetben egy új megoldó módszert mutattam be speciális SNS feladatok megoldására. Az eljárás működését egy szemléltető példán keresztül ismertettem, amely konkáv költségfüggvénnyel rendelkező éles szétválasztókat, megosztókat, keverőket és 3 komponensből álló anyagáramokat tartalmazott. A bemutatott eljárás egy B&B keretrendszeren alapult és a feladat szigorú szuperstruktúrájából indult ki.

A módszer lényege, hogy a megosztókhoz tartozó megosztási arányokat intervallumként kezelte, és hatékony módon határozta meg a feladat optimális megoldását. A megvalósítás során kezelni kellett a modellben megjelenő nemlineáris elemeket. A konkáv költségfüggvények becslésére lineáris alsó közelítő függvényt használtam, míg a megosztó berendezésekben megjelenő nemlinearitást a megosztási intervallumok bevezetésével orvosoltam. Az implementált B&B alapú eljárás az összehasonlításban használt NLP megoldó hatékony alternatívájának bizonyult, azt mind futási időben, mind az eredmény minőségében felülmúlta. A kidolgozott eljárás számos potenciált hordoz még magában, mely további kutatások alapját képezheti. A megoldható SNS feladatok körének bővítésével vagy egy párhuzamosított megoldó implementálásával tovább növelhető a módszer hatékonysága és alkalmazhatósága.

## 4. fejezet

# A P-gráf módszertan kiterjesztése rugalmas bemenetekkel rendelkező megújuló energiahálózatok optimális tervezésében

Számos helyen találkozhatunk olyan átalakult ipari folyamatokkal, amelyekben többek között a megújuló energiaforrások változó aránya, akár évenként változó rendelkezésre állása szükségessé tette speciális matematikai modellek megalkotását, amelyekben a nyersanyagok feldolgozását végző berendezések, technológiai eljárások ezt megfelelően követni tudják. A fejezet során a P-gráf módszertan egy új alkalmazási területét mutatom be. A műveleti egységekhez kidolgozott módosított matematikai modellnek köszönhetően a módszertan rendkívül hatékony eszközként szolgál a speciális, megújuló energiaforrásokat tartalmazó komplex energiatermelő rendszerek optimális tervezésében.

Napjainkban az energiafogyasztás világszinten meredeken emelkedik. Ha a jelenlegi tendencia folytatódik, a közeljövőben komoly energiahiánnyal szembesülhet a társadalom. Ez az egyik legfőbb oka annak, hogy az energiatermelő rendszerek megfelelő tervezése

globális szinten is kiemelkedően fontos feladattá vált, amelyhez elengedhetetlen a hatékony mérnöki eszközök használata. Mivel a nagyméretű energiahálózatok rendkívül bonyolultak és összetettek, ezért a tervezésük során nem az egyes építőelemek működésének részletekbe menő meghatározása, hanem a teljes hálózat rendszerszintű működésének vizsgálata eredményezi a nagyobb előrelépést. A P-gráf módszertan ezt a rendszerszintű szemléletet valósítja meg, azonban a feladat specifikus elemeinek kezelésére szükségessé válik a módszertan kibővítése.

Munkám során Friedler és szerzőtársai [67] által kidolgozott P-gráf keretrendszeret kiterjesztem ki rugalmas bemenetekkel, és felhasználásukkal optimalizálok energiatermelő rendszereket. Az új matematikai modellnek köszönhetően kezelni tudom a megjelenő speciális feltételeket. A kiterjesztett módszertan alkalmazhatóságát egy esettanulmányon keresztül mutatom be.

**A fejezethez tartozó jelölésjegyzék****Halmazok**

- $\mathcal{A}$  A maximális struktúra élei  
 $\mathcal{M}$  Anyagpontok halmaza  
 $\mathcal{O}$  Műveleti egységek halmaza  
 $\mathcal{P}$  Termékek halmaza  
 $\mathcal{R}$  Nyersanyagok halmaza

**Paraméterek**

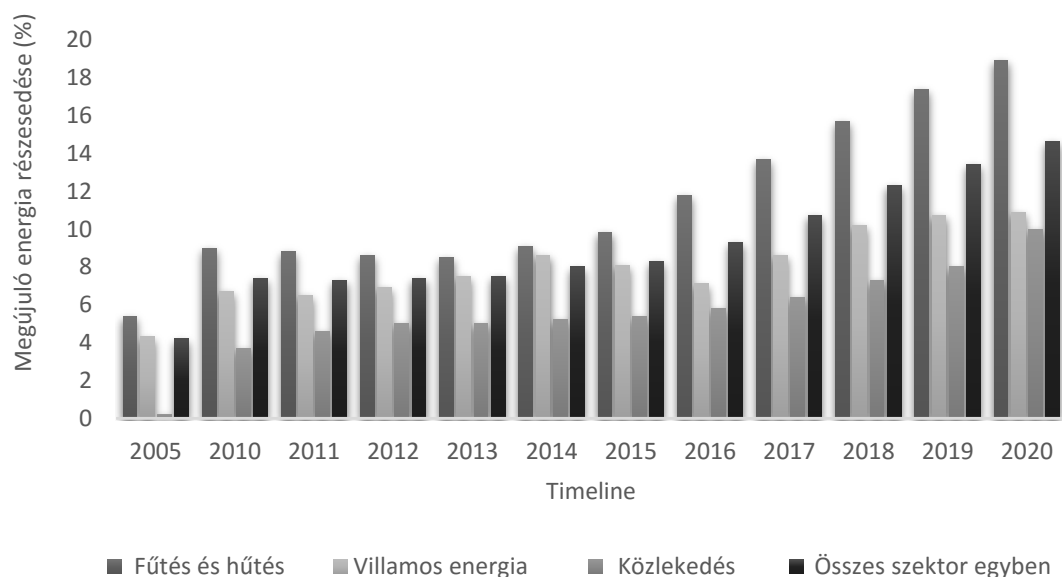
- $C_m$  Az  $m$  anyag ára  
 $F_o$  Az  $o$  műveleti egység költségfüggvényének fix része  
 $G_o$  Az  $o$  műveleti egység költségfüggvényének proporcionális része  
 $I_m$  Az  $m$  köztes anyag maximális mennyisége  
 $LB_{i,j}$  Abszolút alsó anyagfolyam korlát, ahol  $(i, j) \in A$   
 $L_{m,o}$  Relatív alsó anyagfolyam korlát, ahol  $(m, o) \in A$   
 $M$  Kellően nagy szám  
 $P_m$  Az  $m$  termékből minimálisan előállítandó mennyiség  
 $S_m$  Az  $m$  nyersanyagból rendelkezésre álló mennyiség  
 $T_{n,m,o}$  Az  $o$  műveleti egység  $n$  belépő és  $m$  kilépő anyagáramához tartozó konverziós együttható  
 $UB_{i,j}$  Abszolút felső anyagfolyam korlát, ahol  $(i, j) \in A$   
 $U_{m,o}$  Relatív felső anyagfolyam korlát, ahol  $(m, o) \in A$   
 $W_m$  Az  $m$  káros melléktermékhez tartozó büntetés mértéke

**Változók**

- $a_{o,m}$  Az  $o$  műveleti egységet és  $m$  anyagpontot összekötő anyagáram mérete  
 $a_{m,o}$  Az  $m$  anyagpontot és  $o$  műveleti egységet összekötő anyagáram mérete  
 $x_o$  Az  $o$  műveleti egység mérete  
 $y_o$  Az  $o$  műveleti egység beválasztását jelző bináris változó, értéke 1, ha szerepel, egyébként 0

### 4.1. Az aktuális energiahelyzet áttekintése

Napjainkban a világszinten emelkedő energiafogyasztás egyik legfőbb okozója a fejlődő országokban jelenlévő iparosodás és fogyasztás növekvése. A kényelmesebb élet érdekében az emberek egyre több olyan eszközt használnak, amelyek energiát fogyasztanak. A növekvő igény kielégítésének egyik módja, hogy egyre több megújuló energiaforrást használnak fel. Ez a tendencia a következő években sem fog gyengülni, ezt jól illusztrálja a 4.1 ábra is, amely a megújuló energiaforrások részesedésének 2020-ig történő előrejelzését mutatja be Magyarország területén [80]. Mint látható, a hűtés és fűtés szektor kiemelkedő jelentőséggel bír, alátámasztva, hogy a kutatás témája aktuális és fontos terület.

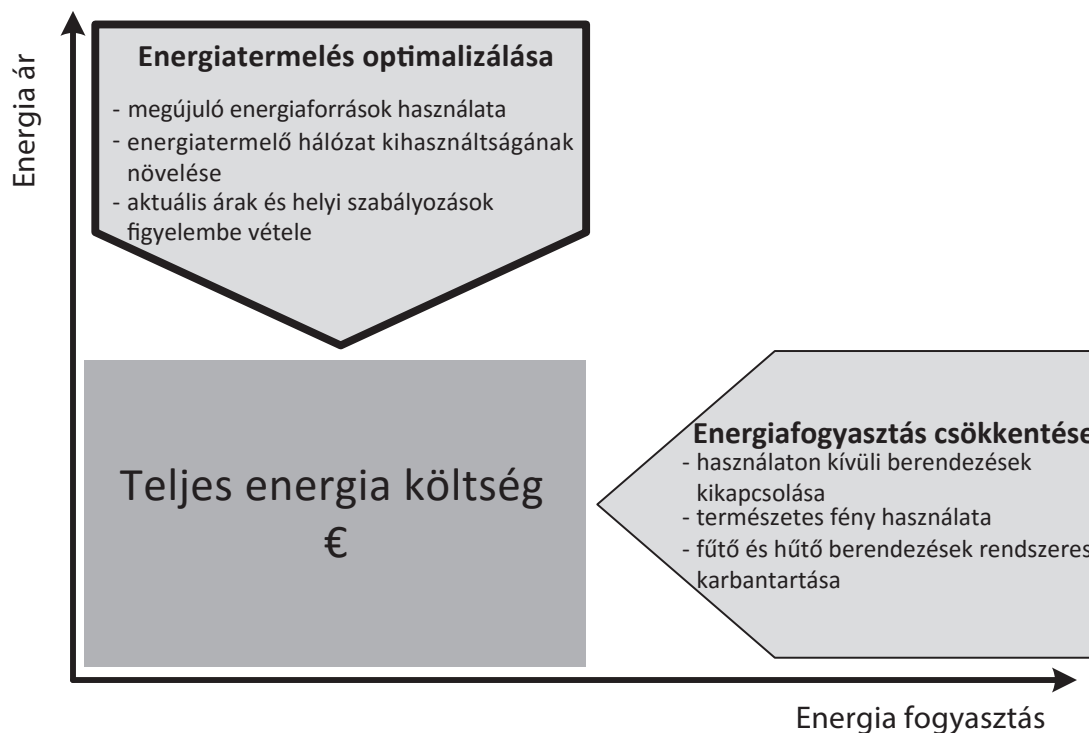


4.1. ÁBRA. A megújuló energiaforrások részesedésének előrejelzése Magyarországon.

A növekvő igények kielégítésére való törekvés mellett fontos a fenntarthatósági szempontok figyelembe vétele is. Az emberiség által okozott klímaváltozás jelenti az egyik legnagyobb, környezetünkre irányuló fenyegetést. A megújuló források használata ezt a hatást gyengítheti.

Az energiaköltségek csökkentésének két fő irányvonala létezik, ezt szemlélteti a 4.2 ábra. Az egyik a környezettudatos életmód folytatása és az energiafelhasználás csökkentése. Egyre több szabályozás vonatkozik az energiahatékony eszközök gyártására, valamint az emberek gondolkodásmódja is egyre jobban befogadja a környezettudatosságot. A

másik lehetőség a termeléssel és szállítással kapcsolatos költségek csökkentése a hatékonyabb működtetés és új technológiák alkalmazásán keresztül. Természetesen eközben figyelembe kell venni a lokális és globális szabályozásokat egyaránt. Mindez megköveteli az energiahálózatok esetleges újratervezését, megújuló energiaforrások bevonását, valamint a felhasználás hatékonyságának növelését. Munkám során a második irányvonal követését tűztem ki célul.

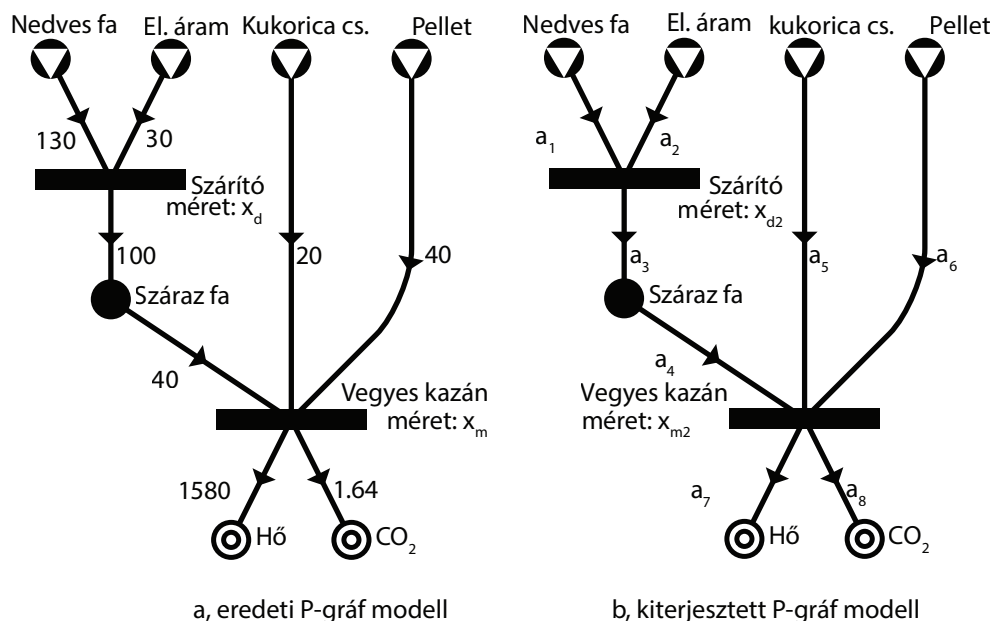


4.2. ÁBRA. Az energiaköltségek csökkentésének lehetőségei.

Az energiatermelő és szállító rendszerek tervezése kiemelkedően nehéz feladatot jelent. A gyakorlat azt mutatja, hogy a rendszer bizonyos komponenseinek újratervezésével csak kismértékben javítható a hatékonyság. Ezzel szemben, a rendszerszintű szemlélet – ahol a hálózat egészét egyben vizsgáljuk – jelentős javuláshoz vezethet. A továbbiakban bemutatom, hogy miként kell kiterjeszteni a P-gráf módszertant, hogy alkalmazni lehessen ilyen típusú hálózatok optimális tervezésére.

## 4.2. A P-gráf módszertan kiterjesztése

A hagyományos P-gráf módszertanban a műveleti egységeket konstans bemenő és kimenő arányokkal modellezzük. Ezt szemlélteti a 4.3/a ábra is, amely egy szárító berendezés és egy vegyes kazán reprezentációját tartalmazza.



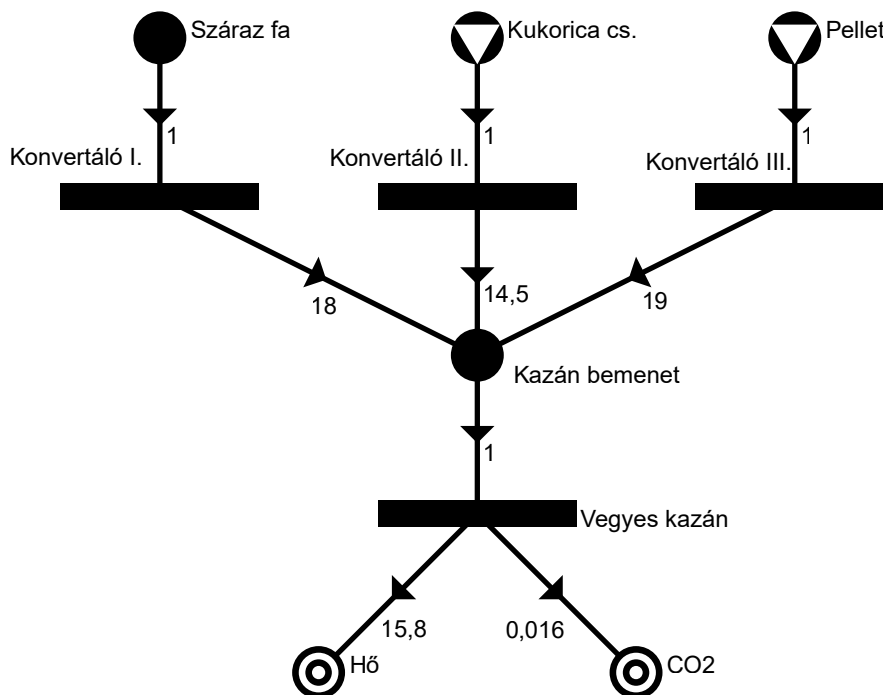
4.3. ÁBRA. A műveleti egységek eredeti és kiterjesztett matematikai modelljének összehasonlítása.

A vegyes kazán különböző típusú nyersanyagokat tud elégetni, azonban a nyersanyagok aránya a bemeneten rögzített. Tegyük fel, hogy az elégetett száraz fa és kukoricacsutka aránya 40 : 20. Ekkor a kazán  $40 \cdot x_m$  kg száraz fát,  $20 \cdot x_m$  kg kukoricacsutkát és  $40 \cdot x_m$  kg pelletet tud elégetni óránként, miközben  $1580 \cdot x_m$  MJ hőt és  $1,64 \cdot x_m$  kg szén-dioxidot állít elő, ahol  $x_m$  jelöli a vegyes kazán méretét. Például, ha  $x_m = 3$ , akkor a kazán 120 kg száraz fát, 60 kg kukoricacsutkát, valamint 120 kg pelletet éget el miközben 4740 MJ hőt és 4,92 kg szén-dioxidot termel.

Ez a modell túl szigorú megkötéseket tartalmaz a berendezés működésével kapcsolatban, mivel például egy kazán esetében széles intervallumon változhat az elégethető anyagok aránya.



Léteznek modellezési eljárások a probléma kezelésére, példaként tekintsük a következő esetet. A modellezés során első lépésben a lehetséges bemenő anyagokból állítanak elő egy úgynevezett *kazánbemenetet*, amit egy újonnan felvett anyagpont reprezentál. Ezt az anyagot úgy kapják, hogy az eredeti nyersanyagokat külön műveleti egységekkel átkonvertálják, majd felhasználják a kazánt reprezentáló műveleti egységgel. Ennek a P-gráf ábrázolása látható a 4.4 ábrán.



4.4. ÁBRA. Köztes anyagpont bevezetése a nyersanyagok és a berendezés között.

A megvalósítás előnye, hogy tetszőleges arányban lehet felhasználni nyersanyagokat, azonban még mindig nem kellően életszerű a modell. Az éleken megadható arányszámok segítségével nem fejezhető ki pontosan, hogy a *kazánbemenet* egyes tulajdonságai miként változnak. Ilyenek például az égéshő vagy az égetéssel kibocsátott szén-dioxid mennyisége. Ha a *kazánbemenet* több kukoricacsutkát tartalmaz, akkor megnő a szén-dioxid kibocsátás is, azonban ezt ez a modell nem tudja kezelni.

A másik hátrány, hogy nem lehet megadni korlátokat, amelyek között az arányok változhatnak. Például nem lehet túl nagy arányban alacsony égéshővel rendelkező anyagot égetni, mivel ekkor túl sok melléktermék keletkezik, ami a kazán állapotára is kihatással lehet. Ez modell szinten százalékos korlátok megadásával kezelhető, ahol szabályozható,

hogyan bizonyos bemenő anyag a teljes bemenet legalább, és legfeljebb hány százalékát adhatja. Ezt a viselkedést sem lehet modellezni a fent leírt módszerrel.

Mindez szükségessé tette a műveleti egységek modelljének bizonyos szintű átalakítását. Természetesen olyan kiterjesztett modellre van igény, amely egyúttal kezelni tudja a hagyományos műveleti egységeket is. Ilyen a 4.3/a példában szereplő szárító berendezés is, amely  $100 * x_d$  kg száraz fát tud előállítani  $130 * x_d$  kg nedves fa és  $30 * x_d$  kWh elektromos áram felhasználásával, ahol  $x_d$  jelöli a berendezés méretét. Ebben az esetben rögzített bemeneti arányokra van szükség, mivel ha a szárító kevesebb áramot használ fel, akkor a fa nem lesz elég száraz, ha viszont többet használ, akkor feleslegesen pazarolja az energiát. Összességében elmondható, hogy az új modellnek kezelnie kell a rögzített és változó bemeneti arányokat is.

A P-gráf keretrendszer kiterjesztése egyben növeli annak sokoldalúságát is, mivel új feladatosztályok esetében is alkalmazható lesz. A kiterjesztett modell rugalmasságát elsősorban új változók bevezetésével érem el, amelyet a 4.3/b ábra szemléltet. A fenti példában a vegyes kazán  $a_4$  kg száraz fát,  $a_5$  kg kukoricacsutkát és  $a_6$  kg pelletet éget el és állít elő  $a_7$  MJ hőt és  $a_8$  kg szén-dioxidot. Ezek a változók az élhez tartozó anyagáram méretét jelölik. Az anyagáramok méretére vonatkozó változók mellett hozzájuk kapcsolódó új feltételek bevezetésére is szükség van. Ezek a feltételek határozzák meg a műveleti egységek működését a modellben.

- A műveleti egységek, mint a vegyes kazán és szárító mérete új jelentést nyer, ezt a 4.3/b ábrán az eltérő változónevek ( $x_{d2}$  és  $x_{m2}$ ) is jelölik. A kiterjesztett modellben a műveleti egység mérete a belépő anyagáramok méretének összegét jelenti, így rajta keresztül meg lehet adni korlátokat az anyagáramok egymáshoz viszonyított méretére, ezt a későbbiekben bővebben kifejtem. A műveleti egységek méretére a 4.1 - 4.2 egyenletek írhatóak fel. A 4.1 egyenletben a szárító berendezés  $x_{d2}$  méretét a nedves fa és elektromos áram mennyisége adja meg, míg a 4.2 egyenletben a vegyes kazán  $x_{m2}$  méretét az elégetett száraz fa, kukorica csutka, valamint pellet mennyisége segítségével lehet felírni.

$$a_1 + a_2 = x_{d2} \quad (4.1)$$

$$a_4 + a_5 + a_6 = x_{m2} \quad (4.2)$$

- Abszolút alsó és felső korlátok is megadhatóak az anyagáram illetve a műveleti egységek méretére. A 4.3 egyenlet segítségével korlátok közé szorítható a felhasznált száraz fa mennyisége, valamint a 4.4 egyenlet a vegyes tüzelésű kazán méretére ad meg abszolút felső korlátot.

$$14 \leq a_4 \leq 30 \quad (4.3)$$

$$x_{m2} \leq 70 \quad (4.4)$$

- Az abszolút korlátok mellett relatív korlátokat is lehet alkalmazni a műveleti egységek méretének függvényében. Abban az esetben, ha nem adok meg relatív korlátokat, akkor a műveleti egység bemenete tetszőleges arányú lehet. Ha ez nem megengedett, akkor meg kell adni, hogy az egyes bemenetek milyen határok között mozoghatnak. A 4.5 egyenlőtlenség biztosítja, hogy a vegyes kazán teljes bemenetének ( $x_{m2}$ ) legalább 10, és legfeljebb 60%-a lehet száraz fa. A 4.6 egyenlőtlenség miatt a kazán teljes bemenetének legalább 20, és legfeljebb 70%-a lehet kukoricacsutka.

$$0,1 * x_{m2} \leq a_4 \leq 0,6 * x_{m2} \quad (4.5)$$

$$0,2 * x_{m2} \leq a_5 \leq 0,7 * x_{m2} \quad (4.6)$$

- A műveleti egységek kizárására vonatkozó feltétel változatlan maradt az eredeti modellhez képest. A 4.7 egyenlőtlenség megköveteli, hogy ha a kazán mérete ( $x_{m2}$ ) nullánál nagyobb, akkor a műveleti egység beválasztását jelölő bináris változó értéke 1 lesz. Mivel  $M$  kellően nagy számot jelöl, ezért  $y_{m2} = 1$  esetén  $x_{m2}$  tetszőlegesen nagy értéket felvehet, így az egyenlőtlenség teljesülni fog.

$$x_{m2} \leq M * y_{m2} \quad (4.7)$$

- Egy műveleti egység kimenő anyagáramainak mérete a belépő anyagáramok méretétől függ. A kiterjesztett modellben a kilépő anyagáramok mérete a belépő anyagáramok méretének lineáris függvényeként írható fel. A vegyes kazán esetében az előállított hő ( $a_7$ ) mennyisége az elégetett száraz fa ( $a_4$ ), kukoricacsutka ( $a_5$ ) és pellet ( $a_6$ ) mennyiségének függvénye. Az egyes bemenetekhez tartozó együtthatók

jelen esetben az adott anyag fűtőértéke alapján határozhatóak meg. Például, ha 14 MJ/kg fűtőértékű száraz fából  $a_4$  kg-ot égetünk el egységnyi idő alatt, akkor  $14 \cdot a_4$  MJ hő keletkezik. Hasonlóan a kibocsátott szén-dioxid mennyisége is a bemenetek lineáris függvényeként írható fel. A 4.8 - 4.9 egyenletek írják le, hogy a keletkező hő ( $a_7$ ) és szén-dioxid ( $a_8$ ) mennyisége hogyan függ a bemenetek mennyiségétől.

$$a_7 = 14 \cdot a_4 + 15 \cdot a_5 + 18 \cdot a_6 \quad (4.8)$$

$$a_8 = 1,88 \cdot a_4 + 1,25 \cdot a_5 + 1,62 \cdot a_6 \quad (4.9)$$

A rugalmas bemenetekkel rendelkező műveleti egységekkel kiterjesztett matematikai modell használata szükségessé tesz néhány kisebb módosítást az ABB algoritmuson is. Az eredeti ABB algoritmus pszeudo kódja megtalálható a szakirodalomban [16]. A javasolt módosítások a neutrális kiterjesztéshez kapcsolódnak.

Tekintsük azt az esetet, amikor a műveleti egység két bemenettel rendelkezik, de akkor is működőképes, ha csak az egyik áll rendelkezésre. Ekkor a neutrális kiterjesztés közvetlenül nem alkalmazható. Egy feltételvizsgálat beillesztésével a kiterjesztés a rugalmas bemenetekkel rendelkező műveleti egységekre is alkalmazhatóvá válik. A kiterjesztés végrehajtása előtt ellenőrizni kell, hogy a vizsgált bemenő anyagáramhoz tartozó relatív alsó korlát értéke nulla vagy nem. Amennyiben nem nulla, akkor a kiterjesztés az eredeti módon végrehajtható. Abban az esetben, ha az értéke 0, akkor a neutrális kiterjesztés nem alkalmazható. Ez az egyszerű feltételvizsgálat nem módosítja számottevően az ABB algoritmus futási teljesítményét, mivel a gyakorlatban a nulla relatív alsó korláttal rendelkező anyagáramok száma alacsony.

### 4.3. Az új matematikai modell

A maximális struktúrához tartozó matematikai modell egy vegyes egész lineáris programozási feladat (MILP). A fejezetben ismertetem az általános felépítését.

### 4.3.1. Célfüggvény

A legkisebb költséggel rendelkező hálózatot kell meghatározni, ezért olyan lineáris programozási feladatot kell megoldani, amelyben a célfüggvény minimuma határozza meg az optimumot. A 4.10 célfüggvény 3 fő komponensből tevődik össze.

- **A műveleti egységek költsége (első kifejezés):** Az egyes  $o \in \mathcal{O}$  műveleti egységek költségeinek összegzése. Mivel a berendezések és folyamatok költsége lineáris költségfüggvénnyel írható le, ezért mindegyik rendelkezik fix és arányos résszel. A fix rész az  $F_o$  paraméter és az  $y_o$  beválasztási bináris változó szorzataként határozható meg. Az arányos rész a  $G_o$  paraméter és a műveleti egység méretét jelző  $x_o$  változó szorzataként áll elő.
- **A nyersanyagok költsége (második kifejezés):** A kifejezés az  $m \in \mathcal{R}$  nyersanyagok költségeinek összegét tartalmazza. Egy  $m$  nyersanyag költsége a  $C_m$  egységár és az elfogyasztott mennyiség szorzataként adható meg. Az utóbbi annak összegzésével határozható meg, hogy mennyit fogyasztottak el a műveleti egységek összesen az adott nyersanyagból.
- **A kibocsátott káros anyagra vonatkozó büntetések (harmadik kifejezés):** Az  $m \in \mathcal{P}$  termékekhez tartozó büntetéseket összegzi. Itt a szándékosan előállított termékeket és a melléktermékeket egyaránt termékként kell kezelni. Egy adott  $m$  termék esetében a büntetés mértéke a hozzá tartozó  $W_m$  paraméter és a legyártott mennyiség szorzataként határozható meg. Az utóbbi annak összegzésével számolható ki, hogy a műveleti egységek összesen mennyit állítottak elő belőle. Abban az esetben, ha egy termék nem szennyezi a környezetét, akkor a hozzá tartozó büntetési együttható értéke 0.

$$\min \sum_{o \in \mathcal{O}} (F_o * y_o + G_o * x_o) + \sum_{m \in \mathcal{R}} [C_m * \sum_{o \in \mathcal{O}: (m,o) \in \mathcal{A}} a_{m,o}] + \sum_{m \in \mathcal{P}} [W_m * \sum_{o \in \mathcal{O}: (o,m) \in \mathcal{A}} a_{o,m}] \quad (4.10)$$

### 4.3.2. Anyagegyensúlyi feltételek

A 4.11 egyenlet írja le azt az anyagegyensúlyi feltételt, amelynek minden  $m \in \mathcal{M}$  anyagpontra teljesülnie kell. Az előállított és az elfogyasztott mennyiségek különbségének 0 és az  $I_m$  paraméter közé kell esnie. Az  $I_m$  paraméter megadja, hogy az  $m$  köztes anyagból mekkora az a mennyiség, amely büntetés nélkül megmaradhat belőle. A  $\sum_{o \in \mathcal{O}: (o,m) \in \mathcal{A}} a_{o,m}$  tag az előállított mennyiséget úgy határozza meg, hogy az egyes műveleti egységek által előállított mennyiségeket összegzi. Emellett figyelembe kell venni az alapból rendelkezésre álló  $S_m$  készletet is, ami nyersanyag esetén nagyobb lesz 0-nál.

Hasonlóan számítható ki egy anyagból a teljes elfogyasztott mennyiség ( $\sum_{o \in \mathcal{O}: (m,o) \in \mathcal{A}} a_{m,o}$ ) is. Ekkor a végtermékek esetében figyelembe kell venni a termékből minimum legyártandó  $P_m$  mennyiséget is.

$$0 \leq [S_m + \sum_{o \in \mathcal{O}: (o,m) \in \mathcal{A}} a_{o,m}] - [P_m + \sum_{o \in \mathcal{O}: (m,o) \in \mathcal{A}} a_{m,o}] \leq I_m \quad \forall m \in \mathcal{M} \quad (4.11)$$

### 4.3.3. Műveleti egységek mérete

Egy  $o$  műveleti egység  $x_o$  mérete a hozzá kapcsolódó bejövő anyagáramok méretének összegeként határozható meg, ahogy a 4.12 egyenlet is leírja.

$$\sum_{m: (m,o) \in \mathcal{A}} a_{m,o} = x_o \quad \forall o \in \mathcal{O} \quad (4.12)$$

### 4.3.4. Abszolút anyagfolyam korlátok

A 4.13 egyenlőtlenségek segítségével abszolút korlátok közé szorítható egy  $o$  műveleti egység  $a_{m,o}$  bemeneti anyagáramának és kimeneti anyagáramának  $a_{o,m}$  mérete. Az  $a_{m,o}$  és  $a_{o,m}$  változó nem lehet kisebb az  $LB_{m,o}$  illetve  $LB_{o,m}$  abszolút alsó korlátnál. Ez többek között akkor használható, ha meg kell adni, hogy egy adott termékből legalább mennyit kell legyártani. Hasonlóan,  $a_{m,o}$  és  $a_{o,m}$  változó értéke nem lehet nagyobb  $UB_{m,o}$  illetve  $UB_{o,m}$  abszolút felső korlátnál. Ez például melléktermékek esetében használható, ha meg kell adni egy felső korlátot valamely káros anyag kibocsátására.

$$\begin{aligned}
LB_{m,o} \leq a_{m,o} \leq UB_{m,o} & \quad \forall o \in \mathcal{O}, m \in \mathcal{M}, (m, o) \in \mathcal{A} \\
LB_{o,m} \leq a_{o,m} \leq UB_{o,m} & \quad \forall o \in \mathcal{O}, m \in \mathcal{M}, (o, m) \in \mathcal{A}
\end{aligned} \tag{4.13}$$

#### 4.3.5. Relatív anyagfolyam korlátok

A 4.14 egyenlet segítségével egy  $o$  műveleti egység esetében a bemenő anyagáramok mérete relatívan, az  $x_o$  műveleti egység mérethez viszonyítva adható meg. Ekkor az  $x_o$ -n keresztül össze lehet mérni az  $o$  műveleti egységhez tartozó bemenetek méretét.

Az alsó korlát a következőképpen adható meg: Az  $a_{m,o}$  anyagáram nem lehet kisebb, mint a hozzá tartozó műveleti egység mérete és az  $L_{m,o}$  paraméter szorzata. Ez annyit jelent, hogy a teljes áthaladó anyagáram legalább  $L_{m,o}$  részét az  $a_{m,o}$  anyagáram adja ki. Hasonlóan, az  $o$  műveleti egységen áthaladó anyagmennyiség legfeljebb  $U_{m,o}$  részét képezheti az  $m$  anyag.

$$L_{m,o} * x_o \leq a_{m,o} \leq U_{m,o} * x_o \quad \forall o \in \mathcal{O}, m \in \mathcal{M}, (m, o) \in \mathcal{A} \tag{4.14}$$

#### 4.3.6. Kapcsolat a be-és kimenetek között

A műveleti egységek lényege, hogy valamilyen szabály alapján a bemenő anyagáramokat átalakítják kimenő anyagáramokká. A 4.15 egyenlet írja le ennek a transzformációnak a módját. Az  $o$  műveleti egység  $a_{o,m}$  kimenő anyagáramának mérete lineárisan függ az  $a_{n,o}$  bemenő anyagáramoktól. Az egyes bemenetekhez tartozó függvény együtthatókat a  $T_{n,m,o}$  paraméterek jelölik. Ezeket a továbbiakban konverziós együtthatóknak nevezem.

$$a_{o,m} = \sum_{n:(n,o) \in \mathcal{A}} (T_{n,m,o} * a_{n,o}) \quad \forall m : (o, m) \in \mathcal{A}, o \in \mathcal{O} \tag{4.15}$$

#### 4.3.7. Műveleti egységek kizárására vonatkozó feltételek

A 4.16 egyenlet biztosítja, hogy az  $o$  műveleti egység  $x_o$  mérete 0, ha nem szerepel a hálózatban ( $y_o = 0$ ).  $M$  egy kellően nagy számot jelöl. Kiválasztása során ügyelni

kell arra, hogy túl nagy szám numerikus instabilitást eredményezhet a MILP modell megoldása során, míg túl kicsi érték indokolatlanul szűkítheti a keresési teret.

$$x_o \leq M * y_o \quad \forall o \in \mathcal{O} \quad (4.16)$$

#### 4.4. Alkalmazás: megújuló hőellátó rendszer optimális tervezése

Az új matematikai modell ismertetését követően szeretném bemutatni, hogy miként működik a kiterjesztett módszertan egy gyakorlati példa esetében. A P-gráf módszertanban rejülő potenciál a nagyméretű feladatok megoldása esetén kerül a felszínre. Ennek ellenére példaként egy olyan hőellátó rendszert választottam, amelynek optimalizálása méreténél fogva nem tekinthető nehéz feladatnak, azonban a módszer működését átláthatóan, egyszerűbben képes szemléltetni. Nagyméretű feladatok megoldása az itt leírtakhoz hasonlóan történik. Cserébe a példafeladatban szinte minden speciális tulajdonsággal rendelkező műveleti egység szerepel, illetve a káros anyag kibocsátásra vonatkozó korlátozások és büntetések is megjelennek.

A példafeladat megoldására a kiterjesztett P-gráf módszertant alkalmaztam. A kapcsolódó matematikai programozási modell megtekinthető a B függelékben. A MILP modellt egy személyi számítógép (Intel® Core™i5-3210M preocesszor, 8 GB RAM, Windows 7 operációs rendszer) segítségével oldottam meg kevesebb, mint egy másodperc alatt.

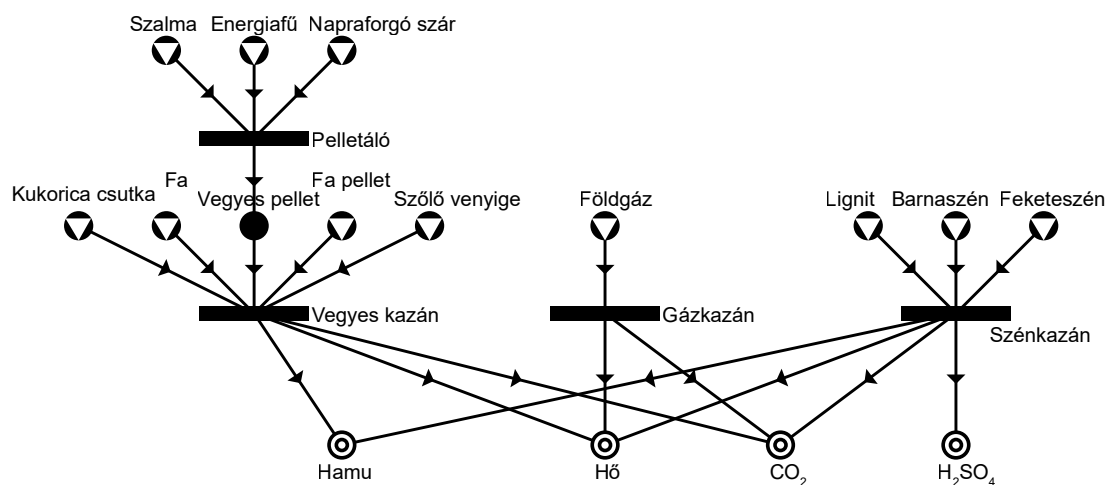
##### 4.4.1. Az esettanulmány bemutatása

A kiválasztott esettanulmányban egy kisméretű farm hőellátását vizsgáltam. A hőellátó hálózat maximális struktúrája a 4.5 ábrán látható. A feladat átláthatóságának érdekében nem bontottam szét a szükséges hőmennyiséget felhasználási terület szerint (ház fűtése, üvegház, szárítás stb.), hanem összegeztem az igényeket és egyben kezeltem.

A kívánt hőmennyiség előállításához két különböző típusú nyersanyagcsoport használható fel. Az egyikbe tartoznak azok, amelyek a mezőgazdasági tevékenység melléktermékeként jelennek meg. Ilyenek például a szalma, napraforgó szár vagy a szőlő venyige.



Ezeknek előnye, hogy ingyenesen a rendelkezésre állnak, de csak korlátozott mennyiségben. A másik csoportban szerepelnek azon nyersanyag típusok, amelyeket meg kell vásárolni. A példában ilyen a fa pellet, földgáz vagy a feketeszen.



4.5. ÁBRA. Az esettanulmányhoz tartozó maximális struktúra.

#### 4.4.2. A felhasználható berendezések működése

Miként a maximális struktúrában is látható, összesen négy különböző berendezés használható fel a hő termelése során. Ezek között szerepel egy pelletáló gép, valamint három különböző típusú kazán.

A **pelletáló** vegyes pelletet tud előállítani szalma, energiafű és napraforgó szár bizonyos kombinációiból. Az összetétel során figyelniük kell arra, hogy a vegyes pellet égéshője kellően magas legyen, mivel ellenkező esetben az égetése túl sok hamut eredményez, ami ronthatja a tüzelés hatásfokát. Az új matematikai modellben lehetőség nyílik a pelletáló berendezés által feldolgozott nyersanyagok összetételének precíz szabályozására. Az alábbi példában a cél olyan bemenő anyagáram előállítása, amely legalább 20%-ban tartalmaz szalmát, míg a teljes bemenet legfeljebb 70%-a lehet napraforgó szár. Az energiafűre nem adok meg korlátozásokat.

Ekkor a 4.17 - 4.19 egyenlőtlenségek szabályozzák a pelletáló bemenő anyagáramának felépítését. Ezek közül 4.17 felel a szalmára, 4.18 az energiafűre és 4.19 a napraforgó szárra vonatkozó feltételek megadásáért. A pelletáló által feldolgozható anyagmennyiség legalább 20%-a kell, hogy szalma legyen, míg napraforgó szár legfeljebb a teljes nyersanyagmennyiség 70%-a lehet. Az energiafű részesezésére nem adtam meg korlátozást.

$$0,2 * x_{pelletalo} \leq a_{szalma,pelletalo} \leq 1 * x_{pelletalo} \quad (4.17)$$

$$0 * x_{pelletalo} \leq a_{energiafu,pelletalo} \leq 1 * x_{pelletalo} \quad (4.18)$$

$$0 * x_{pelletalo} \leq a_{napraforgo,pelletalo} \leq 0,7 * x_{pelletalo} \quad (4.19)$$

A **vegyes tüzelésű kazán** fa, fa pellet, vegyes pellet, kukoricacsutka és szőlő venyige égetésére használható. Az új feltételek lehetővé teszik, hogy e nyersanyagok aránya széles határok között változzon. Természetesen a kazán által előállított termék (hő) és melléktermékek (hamu, szén-dioxid) mennyisége függ a bemenet összetételétől és a hozzájuk tartozó konverziós együtthatóktól, ahogy azt a 4.15 egyenlet is leírta. A kapcsolódó konverziós együtthatókat a 4.1 táblázat tartalmazza. Ezek a fűtőérték [MJ/kg], a keletkező hamu [kg/kg], a keletkező szén-dioxid [kg/kg] és a keletkező kénsav [g/kg]. Továbbá a táblázat tartalmazza az [€/kg]-ban megadott aktuális magyarországi piaci árakat az egyes nyersanyagokhoz. Ebben az oszlopban a 0 érték azt jelenti, hogy ingyenesen hozzáférhető.

A modell felírásához szükséges egyéb paramétereket is bemutatok. Ezek a következők: a 4.2 táblázatban összegyűjtöttem az egyes berendezésekhez tartozó beruházási és működési költségeket. A 4.3 táblázat tartalmazza az anyagfolyamokhoz tartozó relatív alsó és felső korlátokat, valamint a 4.4 táblázat az ingyenesen rendelkezésre álló nyersanyagok mennyiségét. Ezek nem mindegyike valós ipari adat, kiválasztásuk során az volt az elsődleges cél, hogy bemutassam a kiterjesztésben rejlő lehetőségeket és nem az, hogy egy konkrét feladatot megoldjak.

A **gázkazán** segítségével a szolgáltatótól vásárolt földgáz felhasználásával lehet hőt előállítani. Ez az alternatíva jelenti a legtisztább megoldást a kibocsátott káros melléktermékek tekintetében, de ezzel együtt a legdrágábbat is.

Végül a **széntüzelésű kazán** segítségével különböző típusú szénfajtákat lehet elégetni. A példában három típust különböztetek meg, ezek a lignit, barnaszén és feketeszén. A széntüzelés legnagyobb hátránya a relatív magas kénsav kibocsátás.

4.1. TÁBLÁZAT. Az esettanulmányban szereplő nyersanyagok konverziós együtthatói.

	Fűtőérték [MJ/kg]	Hamu [kg/kg]	Szén-dioxid [kg/kg]	Kénsav [g/kg]	Ár [€/kg]
Szalma	15,3	0,028	1,250	0,58	0,000
Energiafű	17,4	0,020	1,280	0,62	0,000
Napraforgó szár	13,5	0,030	1,200	0,60	0,000
Fa	14,0	0,020	1,880	0,80	0,055
Fa pellet	18,0	0,006	1,620	0,68	0,280
Kukoricacsutka	15,0	0,030	1,250	0,60	0,000
Szőlővenyige	14,8	0,025	1,200	0,55	0,000
Földgáz [m3]	34,0	0,000	1,200	0,00	0,430
Lignit	12,5	0,200	2,800	70,00	0,032
Barnaszén	20,0	0,300	3,000	12,00	0,122
Feketeszén	29,0	0,540	3,335	5,00	0,210

4.2. TÁBLÁZAT. A rendelkezésre álló berendezések beruházási és működési költségei.

	Fix beruházási költség [€]	Proporcionális mű- ködési költség [€/kg]
Pelletáló	4300	0,026
Vegyestüzelésű kazán	2666	0,03
Gázkazán	2333	0,03
Széntüzelésű kazán	2500	0,03

4.3. TÁBLÁZAT. Az anyagfolyamokhoz tartozó relatív alsó és felső korlátok.

Folyam	Jelölés modellben	a	$L_{m,o}$ Relatív alsó korlát	$U_{m,o}$ Relatív felső korlát
szalma → pelletáló	P_in_st		0,2	1
energiafű → pelletáló	P_in_en		0	1
napraforgószár → pelletáló	P_in_su		0	0,3
fa → vegyeskazán	M_in_wo		0	0,8
fa pellet → vegyeskazán	M_in_wp		0,2	1
vegyes pellet → vegyeskazán	M_in_mp		0	0,8
kukoricacsutka → vegyeskazán	M_in_co		0	0,8
szőlővenyige → vegyeskazán	M_in_gr		0	0,8
földgáz → gázkazán	G_in_na		0	1
lignit → szénkazán	C_in_li		0	0,3
barnaszén → szénkazán	C_in_br		0	1
feketeszén → szénkazán	C_in_an		0	1

4.4. TÁBLÁZAT. Szabadon rendelkezésre álló nyersanyagok mennyisége.

Nyersanyag típus	Mennyiség [kg]
Szalma	600
Energiafű	1500
Napraforgó szár	850
Fa	5000
Kukoricacsutka	1200
Szőlővenyige	1500

#### 4.4.3. A károsanyag kibocsátás szabályozása

A kibocsátott károsanyag szabályozására három különböző módon nyílik lehetőség. Az egyik a relatív korlátok használata. Segítségükkel megszabható, hogy a nagyobb mennyiségű káros anyagot eredményező nyersanyagokból csak korlátozott mennyiséget lehessen felhasználni. Ilyen például a széntüzelésű kazán esetében a lignit. A lignitből keletkező kénsav mennyiségének csökkentése céljából bevezettem a 4.20 egyenlőtlenséget, amely szerint a szénkazánban elégetett nyersanyagok legfeljebb 30%-a lehet lignit.

$$0 * x_{szenkazan} \leq a_{lignit,szenkazan} \leq 0,3 * x_{szenkazan} \quad (4.20)$$

A második lehetőség az abszolút korlátok bevezetése a keletkező szén-dioxid és kénsav mennyiségére. Erre szolgál a 4.21 és 4.22 egyenlőtlenség. Látható, hogy a rendszer legfeljebb 125000 kg szén-dioxidot és 1000 g kénsavat bocsáthat ki.

$$a_{vegyeskazan,CO_2} + a_{gazkazan,CO_2} + a_{szenkazan,CO_2} \leq 125000 \quad (4.21)$$

$$a_{szenkazan,H_2SO_4} \leq 1000 \quad (4.22)$$

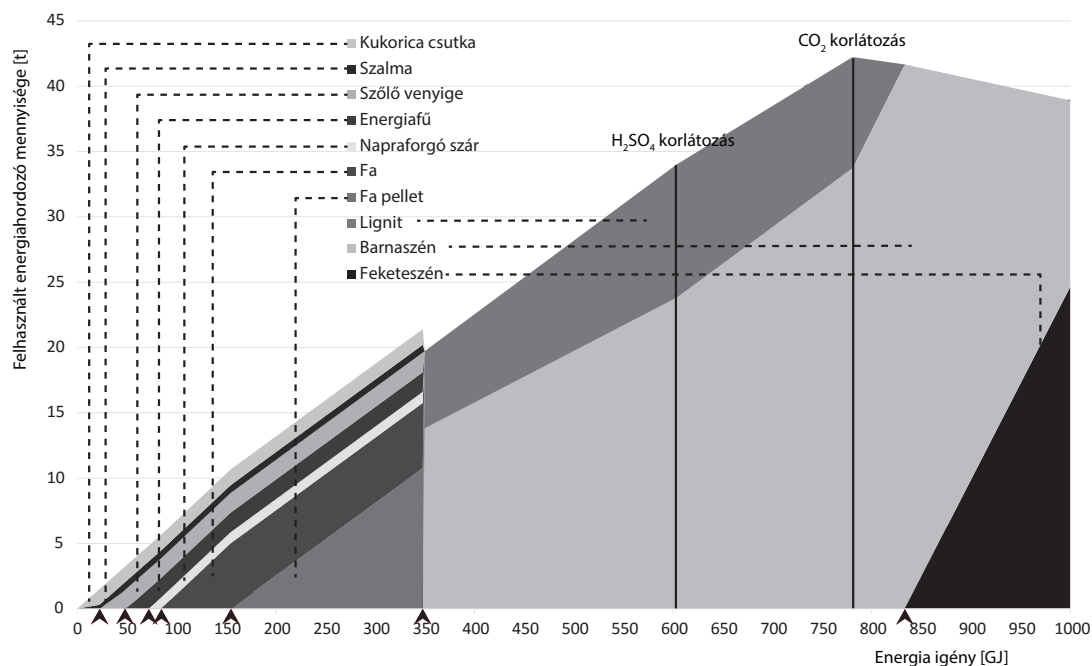
A harmadik lehetőség büntetés bevezetése a célfüggvényben minden egyes kibocsátott egység után. A 4.23 kifejezés azt szemlélteti, hogy minden kibocsátott gramm kénsav után 0,5 € büntetést kell fizetni.

$$0,5 * a_{szenkazan,H_2SO_4} \quad (4.23)$$

#### 4.4.4. Érzékenységvizsgálat

A kitűzött feladatot először 160 GJ/év energiaigény mellett oldottam meg. Ekkor az optimális hálózatban a következő nyersanyagokat használtam fel: 0,6 t szalma, 1,5 t energiafű, 0,85 t napraforgó szár, 5 t fa, 0,308 t fa pellet, 1,2 t kukoricacsutka és 1,5 t szőlővenyige. A hálózat két berendezést tartalmaz, a pelletálót és a vegyes tüzelésű kazánt. Az optimális hálózat költsége évente 2,272€. Az ideális hálózat P-gráf reprezentációja a 4.8 ábrán látható  $F$  megoldásstruktúra.

Emellett elvégeztem egy érzékenységvizsgálatot is, mivel fontos információnak tartottam, hogy egy megoldásstruktúra mennyire bizonyul stabilnak. A hőigény felbecslésének pontatlanságát figyelembe véve látható, hogy egy adott hálózat milyen értékek között tekinthető még optimálisnak. A vizsgálat eredményét mutatja a 4.6 ábra.



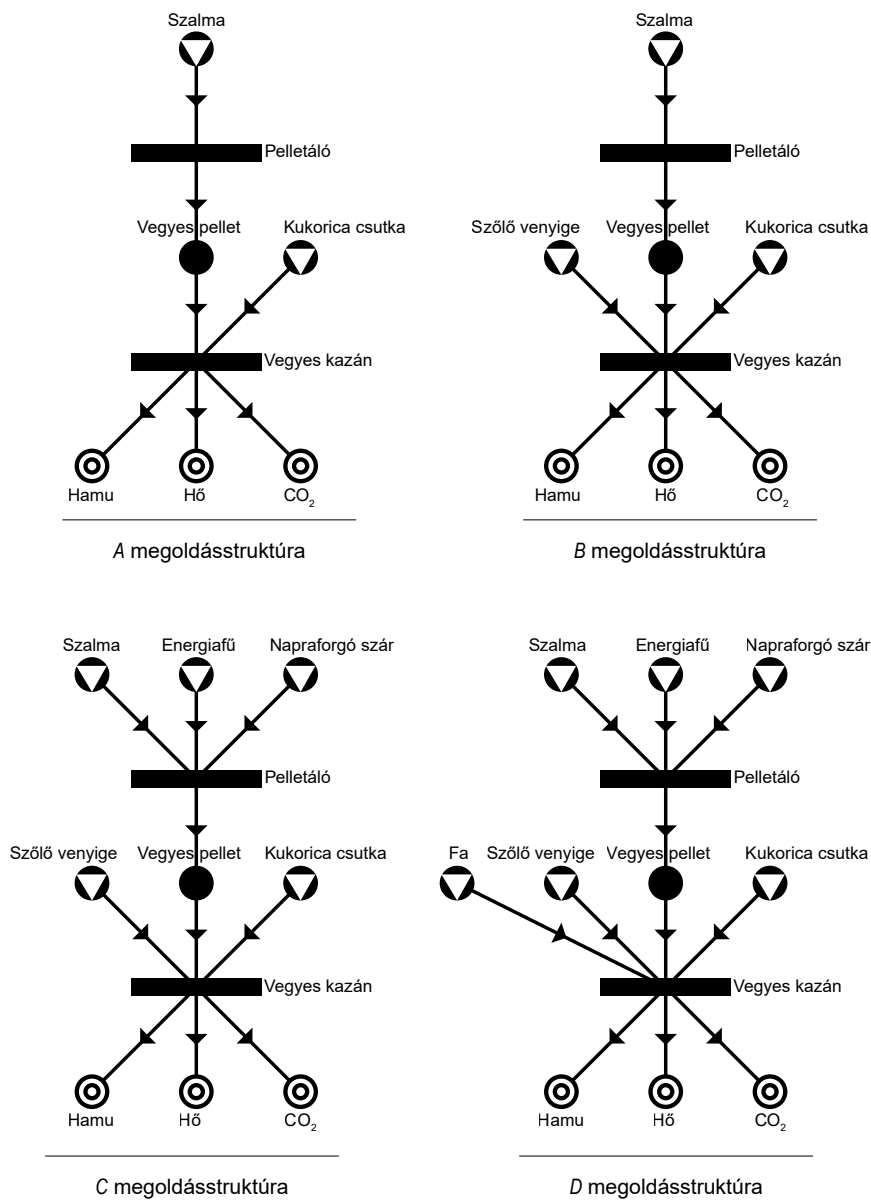
4.6. ÁBRA. Az optimális hálózat és a felhasznált nyersanyagok átalakulása a hőigény függvényében.

A diagram alján látható nyilak jelzik azokat a pontokat, ahol megváltozik az optimális hálózat. Minden egyes pontban látható, hogy az egyes nyersanyagokból mennyi kerül felhasználásra az adott igény esetén.

Munkám során a 0 – 1000 GJ/év intervallumot vizsgáltam. Ez 8 részre bontható fel az optimális hálózat szempontjából. A következőkben áttekintem ezeket a szakaszokat aszerint, hogy milyen nyersanyagok kerültek felhasználásra, illetve milyen esemény köthető az adott intervallumhoz.

- a) 0 – 24 GJ/év: Az *A* megoldásstruktúra az optimális ebben az esetben, amely a vegyes tüzelésű kazánt és a pelletáló berendezéseket tartalmazza. A pelletáló vegyes pelletet készít a szalmából, a vegyes tüzelésű kazán pedig vegyes pelletet és kukoricacsutkát éget el. Ahogy növekszik a hőigény, egyre több szalmát és kukoricacsutkát használ fel.
- b) 24 – 46 GJ/év: A *B* megoldásstruktúra, mint optimális struktúra jelenik meg, mivel 24 GJ/év értéknél elfogyott a rendelkezésre álló kukoricacsutka. Ebben a struktúrában is a pelletáló és vegyes tüzelésű kazán szerepel, de nyersanyagként megjelenik a szőlő venyige is.
- c) 46 – 72 GJ/év: 46 GJ/évnél elfogy a szalma. A *C* megoldásstruktúrában, mint optimális struktúrában megjelenik az energiafű a pelletáló nyersanyagaként.
- d) 72 – 86 GJ/év: Ezen az intervallumon a napraforgó szár jelenik meg, mint a pelletáló harmadik típusú bemenete. Ezáltal némileg csökken a vegyes pellet fűtőértéke, de még mindig olcsóbb megoldás, mint a lehetséges alternatívái.
- e) 86 – 156 GJ/év: Az *E* megoldásstruktúrában, mint optimális struktúrában a fa lesz az új nyersanyag. Az ingyenesen rendelkezésre álló nyersanyagok felhasználásával legfeljebb 156 GJ/év hőmennyiség állítható elő.
- f) 156 – 350 GJ/év: Mivel 156 GJ/évnél elfogyott a fa, ezért a fa pellet vásárlásával lehet a legolcsóbban fedezni az igényeket. Így ez a struktúra még mindig jobb alternatívát jelent, mint más típusú kazánokat beüzemelni.
- g) 350 – 834 GJ/év: A 350 GJ/év érték egy jelentős fordulópontnak számít. Ennél magasabb igény esetén a vegyes tüzelésű kazán helyét átveszi a szénttüzelésű kazán. Amint azt a *G* megoldásstruktúra is mutatja, a szénttüzelésű kazán lignit és barnaszén égetésével fedezi az igényeket.

Két jelentős esemény történik ezen az intervallumon, ami befolyásolja a bemenet összetételét. Az első 604 GJ/év értéknél következik be, amikor eléri a kibocsátható

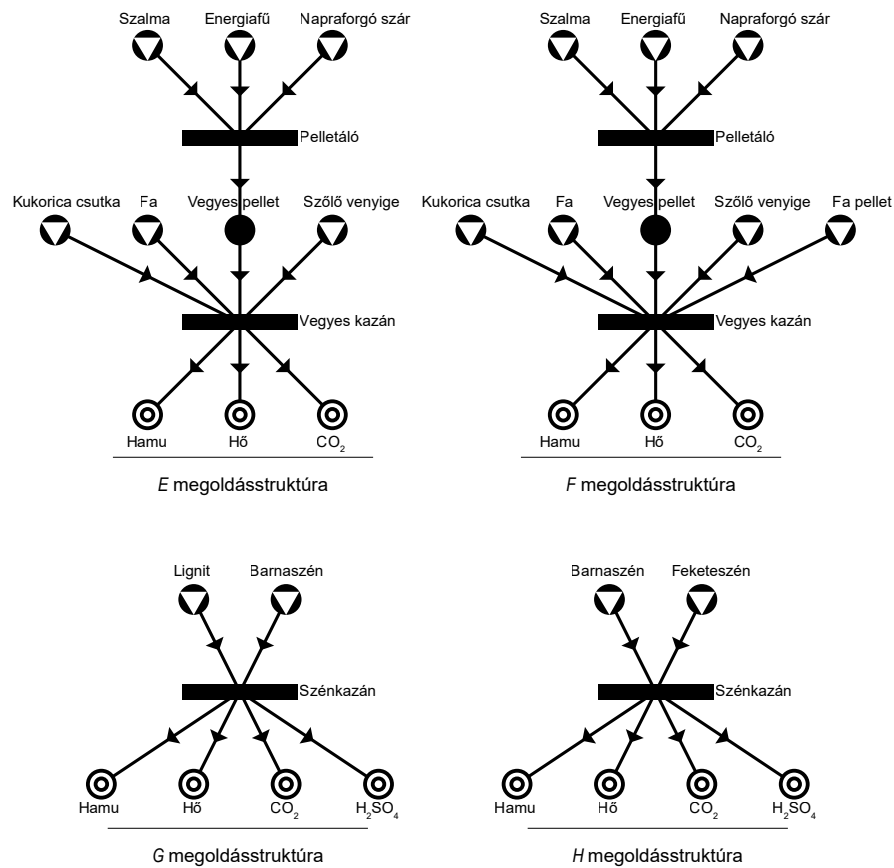


4.7. ÁBRA. Az A-D megoldásstruktúrák P-gráf reprezentációja.

kénsav a felső korlátot. Ennek következtében magasabb igény esetében a lignit mennyisége csökken, és a drágább, de kevesebb kénsavat eredményező barnaszén fokozatosan veszi át a helyét.

Hasonló események figyelhetők meg a 782 GJ/év értéknél is, ahol a kibocsátható szén-dioxid éri el a korlátot. Ez felgyorsítja a lignit kivonását a széntüzelésű kazánhoz felhasznált nyersanyagok sorából.

- h) 834–1000 GJ/év: A *H* optimális hálózatban a lignit szerepét már teljesen átvette a feketeszén. Az igény emelkedésével folyamatosan csökken a barnaszén mennyisége,



4.8. ÁBRA. Az *E-H* megoldásstruktúrák P-gráf reprezentációja.

miközben a magasabb fűtőértékkel rendelkező, valamint kevesebb szén-dioxidot és kénsavat kibocsátó feketeszén mennyisége növekszik.



## 4.5. A fejezet rövid összefoglalása

A P-gráf módszertan korábban már többször is bizonyította, hogy egy hatékony eszköz szintézis feladatok megoldására. Később számos új területen is alkalmazták a módszertant, amely szintén azt mutatja, hogy nem egy speciális problémaosztály megoldására szolgáló eszközt, hanem egy általános keretrendszert jelent. A P-gráf magja egy általános matematikai módszertan, amely jól alkalmazható hálózatok tervezéséhez függetlenül attól, hogy a hálózat mit reprezentál. Mindemellett a módszertan elég rugalmas ahhoz, hogy új funkciókat lehessen beleépíteni.

Jelen fejezetben a P-gráf módszertant egy új matematikai modellel terjesztettem ki, ami lehetővé teszi a rugalmas műveleti egységek kezelését. Korábban a bemenő anyagok arányai rögzítettek voltak, most pedig széles skálán változtathatóak. A dolgozatban egy szemléltető példa segítségével mutattam be az új változókat és feltételeket a matematikai modellben. A rugalmasság azért fontos a műveleti egységeknél, mert számos olyan eset van, többek között megújuló energiaforrások használatakor, amikor a bemenő és kimenő arányok időszakosan változhatnak (például az évszakok változásával).

A kiterjesztett módszertan működését egy esettanulmányon keresztül mutattam be. Ebben egy olyan energiatermelő hálózatot kellett optimálisan megtervezni, amely különböző megújuló energiaforrásokat és környezeti szabályozásokat tartalmazott. Végrehajtottam egy érzékenységvizsgálatot is, amely rámutatott arra, miként változik meg az optimális struktúra és a nyersanyagok felhasználása a hőigény függvényében.

## 5. fejezet

# Multiperiodikus folyamathálózat-szintézis feladatok megoldása

A P-gráf módszertan folyamathálózat-szintézis (PNS) feladatok megoldására kidolgozott hatékony keretrendszer. Ebben a fejezetben bemutatom a keretrendszer egy olyan kiterjesztését, amellyel alkalmassá válik a multiperiódusú működés kezelésére. Segítségével az erőforrások és nyersanyagok változó összetétele mellett már az időszakonként változó rendelkezésre állását is modellezni lehet.

Az eredeti módszertan feltételezi, hogy a berendezések az idő függvényében változatlanul működnek, azaz a teljes vizsgált időhorizont alatt minden tekintetben a kezdeti állapotot őrzik. Ez a megközelítés megfelelő olyan alkalmazási területeken, mint például a vegyipar, ahová a keretrendszert eredetileg is szánták.

Léteznek viszont olyan területek is, amelyek alapvető működésére nagy befolyással bírnak a rendszeresen változó külső tényezők. Ilyen befolyásoló tényezők lehetnek például az évszakok vagy a napszakok váltakozásának hatásai. Jelenlétük hangsúlyosan fellelhető a mezőgazdaság, élelmiszeripar és az energiaipar különböző területein.

Többek között a felsorolt alkalmazási környezetek jelentősége inspirálta a fejezetben tárgyalt kutatási tevékenységet, amely a multiperiodikus működés modellezését tűzte ki

célul. A modellben feltételezem, hogy a műveleti egységek terhelése az aktuális igényeknek megfelelően időszakonként változik, viszont az időszakokon belül mindig változatlan marad.

A továbbiakban egy modellezési technikát ismertetek, amellyel a P-gráf módszertant alapul véve multiperiodikus működésű berendezéseket lehet kezelni. Használatát egy esettanulmányon keresztül mutatom be.

## A fejezethez tartozó jelölésjegyzék

- $acc$  Évesített beruházási költség
- $a_i$  Az  $i$ . időszakban aktuálisan kihasznált kapacitás
- $cc$  Teljes beruházási költség
- $m$  Maximális kapacitás
- $md_i$  Termék igény az  $i$ . periódusban
- $mf_i$  Betáplálás az  $i$ . periódusban
- $oc_i$  Működési költség az  $i$ . periódusban
- $pl_i$  Az  $i$ . periódus hossza
- $tc$  Teljes költség
- $x$  A műveleti egység mérete, amely a hagyományos P-gráf esetén megegyezik a kapacitással

## 5.1. A multiperiodikus viselkedés bemutatása

Az iparban előforduló rendszerek működésüket tekintve három csoportba sorolhatóak: folytonosak, szakaszosak, vagy egyaránt tartalmaznak folytonos és szakaszos alrendszereket is. A szakaszos és a folytonos működés közötti különbség, hogy egy folytonosan termelő berendezés kimenetén folyamatosan jelenik meg a termék, egy szakaszos működésű berendezés esetében csak a végrehajtási idő leteltével. További különbség, hogy folytonos berendezések mindig egy feladatot hajtanak végre, egy szakaszos működésű üzemben pedig egy berendezés több, eltérő feladatot hajthat végre. A szakaszos rendszerek előnye, hogy nagyon rugalmasak, azaz viszonylag könnyen át lehet állni egy másik termék gyártására vagy egy új gyártási módszerre. Ezzel szemben a folytonos rendszerek hosszú távon olcsóbbak.

A multiperiodikus működésű rendszerek a folytonos üzemű rendszerek közé tartoznak, így olyan műveleti egységeket tartalmaznak, amelyek a működés során állandósult állapottal rendelkeznek. Ezzel szemben a szakaszos üzemű rendszerekben található műveleti egységek működése 3 jól elkülöníthető fázisra bontható. Az első a nyersanyagok betáplálása, a második a művelet végrehajtása, a harmadik pedig a termékek kivétele. Ez a három lépés olyan gyakran kerül végrehajtásra, amennyiszer csak szükséges.

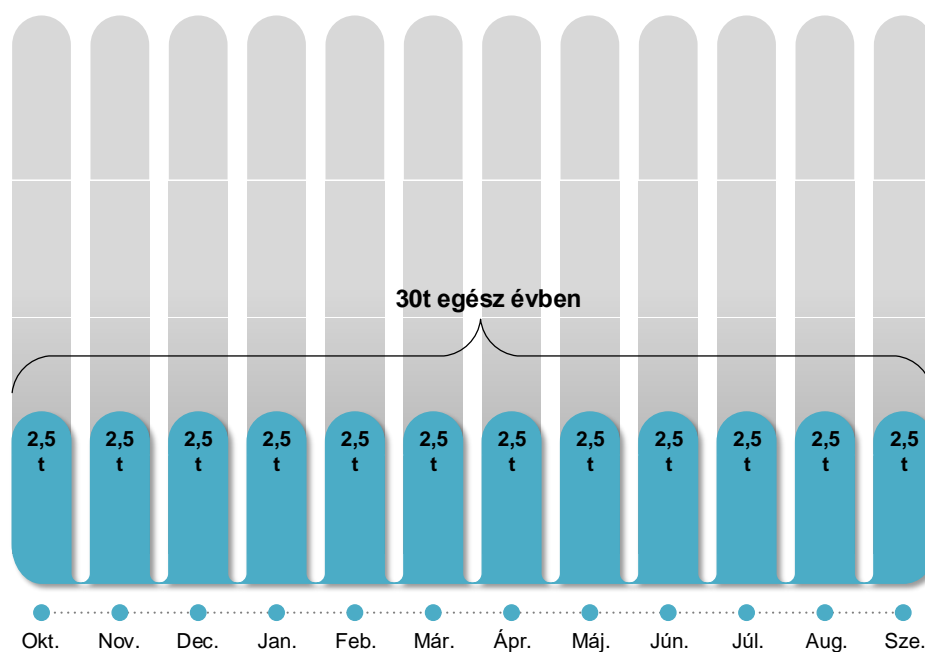
Hagyományosan a folytonos vegyipari folyamatok állandó műveleti feltételekkel rendelkeznek a kezdetektől fogva egészen a termelés végeztéig. Ezáltal ezek a műveletek jól modellezhetőek egyetlen periódussal rendelkező folyamatként. A P-gráf létrehozása során eredetileg definiálták, hogy minden egyes műveleti egység a működése során folytonosan, 100%-os kihasználtsággal üzemel a felhasználható nyersanyagok arányainak figyelembe vételével. A műveleti egységek kapacitása úgy határozható meg, hogy az egyetlen, a teljes folyamaton átívelő periódus során változatlan maradjon és kielégítse a felmerülő igényeket.

Mivel nem tesznek különbséget a berendezések mérete és terhelése között, ezért helyettük egységesen a kapacitás fogalmat használják. Más szavakkal, a kapacitás megadja, hogy a kellő betáplálások mellett a műveleti egység az adott időperiódus alatt (pl. egy év) mekkora igényt tud kielégíteni az előállított termékek mennyiségét tekintve.

Azok a műveleti egységek, amelyek változatlan terheléssel működnek, jól modellezik a hagyományos, vegyiparban használatos berendezések viselkedését, azonban vannak

olyan területek is, ahol ez a modell nem megfelelően közelíti a valós működést. Ilyen például a mezőgazdaság vagy az élelmiszeripar. Ennek legfőbb oka, hogy ezen ágazatok működésére jelentős hatással bír az évszakok váltakozása és az ezzel járó aktuálisan fennálló szezonális eltérések.

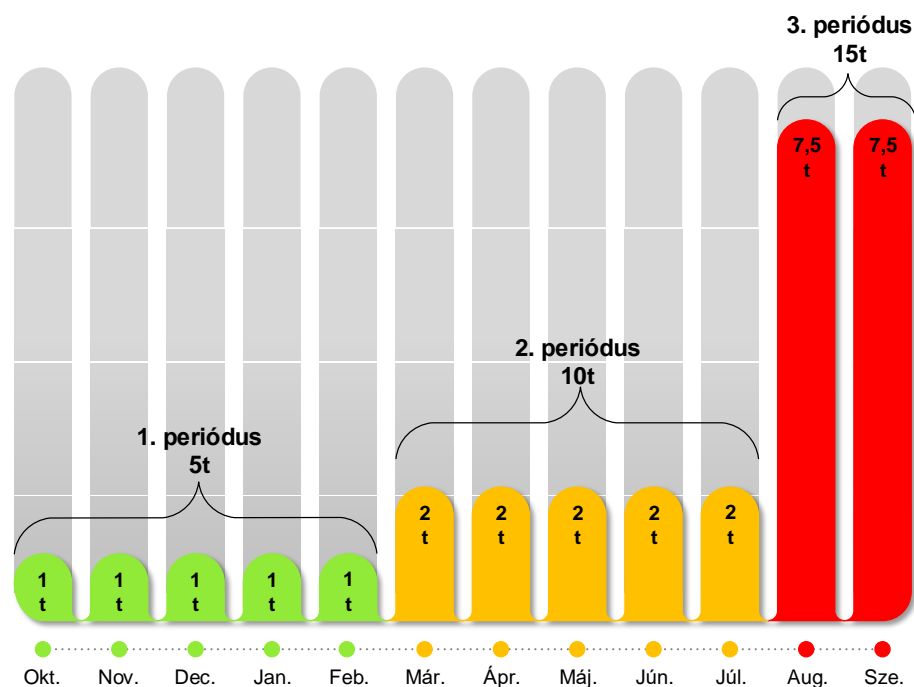
Amennyiben rendelkezésre áll a szükséges tároló kapacitás, akkor a berendezések bemeneti illetve kimeneti anyagait el lehet raktározni, ezáltal megvalósítható a folytonos működés állandó terheléssel. Abban az esetben, ha nem áll rendelkezésre elegendő tároló, akkor különböző időszakok definiálása válik szükségessé. Ezáltal az előállított termékek mennyisége időszakra időszakra változhat. Ezen kívül a szezonális működésre jellemzően a nyersanyagok összetétele és mennyisége is periódusonként eltérhet.



5.1. ÁBRA. Az almapucoló berendezés betáplálása egyperiódusú működés esetén.

A multiperiodikus működés illusztrálására egy példafeladatot mutatok be. A példa egyetlen műveletet foglal magában, 30 tonna alma meghámozását. A feladat során felteszem, hogy az alma héjának tömege elhanyagolható, ennek következtében a művelet bemenetén illetve kimenetén szereplő mennyiségek azonosak.

Az 5.1 ábra bemutatja a hónapra lebontott betáplálást (a megpucolandó alma mennyiségét tonnában) az egyetlen periódussal illetve az 5.2 ábra a multiperiodikus működéssel rendelkező műveleti egység esetén.



5.2. ÁBRA. Az almapucoló berendezés betáplálása multiperiódusú működés esetén.

Az egyetlen időperiódus esetén havonta egységesen 2,5 tonna almát kell megpucolni. Ez éves szinten 30 tonna almát jelent. A multiperiódusú működés esetén 3 időperiódust különböztetnek meg. Ezek hossza 5, 5 és 2 hónap. Az első időszakban 5 tonna almát kell megpucolni, a másodikban 10 tonna almát, a harmadikban pedig 15 tonna almát. Az igény időszakokon belül nem változik.

A harmadik időszak (augusztus és szeptember) jelöli a csúcspontot, mivel ez a szüret ideje, a legtöbb almát ekkor szedik, ebben a rövid időszakban kell feldolgozni. A két modell abban egyezik meg, hogy a teljes időszak alatt (1 év) összesen 30 tonna almát kell feldolgozni.

A példában szereplő almapucoló berendezés beruházási és működési költségeit az 5.1 – 5.5 egyenletek adják meg, ahol  $cc$  a beruházási költség,  $acc$  az évesített beruházási költség,  $oc_i$  a működési költség az  $i$ . időperiódusban,  $pl_i$  az  $i$ . időperiódus hossza,  $tc$  a teljes költség,  $a_i$  az  $i$ . időszakban aktuálisan kihasznált kapacitás,  $m$  pedig a maximális kapacitás jelölésére szolgál.

$$cc = 140 + 20m \quad (5.1)$$

$$acc = 140/10 + (20/10)m \quad (5.2)$$

$$oc_i = (6 + 3a_i) * pl_i, \quad i \in \mathcal{I} \quad (5.3)$$

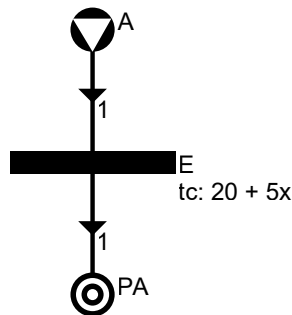
$$a_i \leq m, \quad i \in \mathcal{I} \quad (5.4)$$

$$tc = acc + \sum_{i \in \mathcal{I}} oc_i \quad (5.5)$$

Természetesen egyetlen periódus esetén  $i$  értéke 1, míg a multiperiodikus működés esetén  $i$  értéke 1, 2 és 3 lehet.

### 5.1.1. Hagyományos, egyetlen periódussal rendelkező műveleti egység működése

A két működés egyszerűbb összehasonlíthatóságának érdekében először áttekintem a hagyományos, egyetlen periódussal rendelkező műveleti egység működését. Az 5.3 ábra mutatja be az  $E$  almapucoló berendezés reprezentációját.  $A$  jelöli a feldolgozandó almát,  $PA$  pedig a megpucolt almát.  $x$  jelöli a berendezés kapacitását.  $x = 1$  azt jelenti, hogy a berendezés egységnyi idő alatt 1 tonna alma megpucolására alkalmas. Ekkor, mint az ábrán is látható, a művelet teljes költsége  $20 + 5 * 1 = 25$  €/év. Ebben az egyszerű feladatban az egyetlen kérdés  $x$  értéke, azaz a pucoló berendezés mérete. A válasz 30, mivel ekkor lehet kielégíteni a 30 tonna/év igényt.



5.3. ÁBRA. Egyetlen periódussal rendelkező műveleti egység P-gráf ábrázolása.

Az egyetlen periódussal rendelkező működés esetén kizárólag az  $i = 1$  periódus van jelen, amelynek során az  $E$  almapucoló berendezés  $x$  kapacitással folyamatosan, teljes



5.1. TÁBLÁZAT. Az egyetlen periódussal rendelkező működéshez kapcsolódó adatok.

Paraméter megnevezése	Jelölés	Érték	Mértékegység
Periódus hossz	$pl_1$	1	[év]
Havi betáplálás	$mf_1$	2.5	[t/hónap]
Periodikus betáplálás	$pf_1$	30	[t/periódus]
Aktuális kapacitás	$a$	30	[t/év]
Maximális kapacitás	$m$	30	[t/év]
Évesített beruházási költség	$acc$	74	[€/év]
Működési költség	$oc$	96	[€/év]
Teljes költség	$tc$	170	[€/év]

kihasználtság mellett működik. Ebben az esetben nem különböztetem meg a berendezés kapacitását, aktuális kapacitását, valamint a maximális kapacitását, ezek mind ugyanazok az értékek:  $x = m = a_1$ .

Következésképpen  $m = a_1 = 30$  tonna/év. Az egyetlen periódussal rendelkező működés esetén az éves betáplálás és igény szintén 30 tonna/év, ami a hónapok között egyenletesen oszlik meg, azaz  $mf_1 = md_1 = 30/12$  tonna/hónap = 2,5 tonna/hónap, ahol  $mf_1$  jelöli a havi betáplálást,  $md_1$  jelöli a havi igényt.

10 éves megtérülési idővel számolva az évesített beruházási költség, a működési költség, valamint a teljes költség kiszámolható az 5.2, 5.3 és 5.5 egyenletek segítségével. Behelyettesítve a konkrét értékeket az 5.6, 5.7 és 5.8 egyenleteket kapom.

$$acc = 14 + 3 * 30 = 74 \quad (5.6)$$

$$oc_1 = (6 + 3 * 30) * 1 = 96 \quad (5.7)$$

$$tc = 74 + 96 = 170 \quad (5.8)$$

A kapott eredmények összefoglalása megtekinthető az 5.1 táblázatban.

### 5.1.2. Multiperiodikus műveleti egység működése

Az egyetlen periódussal rendelkező műveleti egységgel ellentétben a multiperiodusú műveleti egység 3 különböző periódussal rendelkezik, amelyek hossza 5, 5 és 2 hónap. Ezt szemlélteti az 5.2 ábra. Több periódus esetén az almapucoló berendezés maximális kapacitása már nincs feltétlenül kihasználva mindhárom  $i = 1, 2, 3$  időperiódus esetén. Egy

kivételével minden egyes periódusban a berendezés feltehetőleg részleges kapacitással üzemel. Ezt a kapacitás értéket jelöli rendre az  $a_i, i = \{1, 2, 3\}$  aktuális kapacitás úgy, hogy közben teljesül az 5.9 feltétel.

$$a_i \leq m, \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (5.9)$$

Egyik periódusban sem lépheti túl az aktuális kapacitás a maximális kapacitást. Minden egyes  $a_i$  értéket úgy kell meghatározni, hogy a berendezés feldolgozza az adott hónapra vonatkozó  $pf_i$  tonna/periódus periodikus betáplálást, és kiszolgálja az adott hónapra vonatkozó  $pd_i$  tonna/periódus periodikus igényt. Természetesen továbbra is eltekintünk az alma héjának tömegétől. Minden egyes periódusban az  $a_i$  aktuális kapacitás úgy határozható meg, hogy a  $pf_i$  periodikus betáplálást el kell osztani a hozzá tartozó periódus  $pl_i$  hosszával. Ezt mutatja az 5.10 egyenlet.

$$a_i = pf_i/pl_i \quad (5.10)$$

Az egyes periódusokra az 5.11 – 5.13 egyenletek adják meg az aktuális kapacitás értékét.

$$a_1 = pf_1/pl_1 = 5/(5/12) = 12 \quad (5.11)$$

$$a_2 = pf_2/pl_2 = 10/(5/12) = 24 \quad (5.12)$$

$$a_3 = pf_3/pl_3 = 15/(2/12) = 90 \quad (5.13)$$

Nyilvánvalóan a maximális kapacitás a legnagyobb aktuális kapacitás értékével lesz egyenlő, azaz  $m = a_3 = 90$  tonna/év. Ekkor teljesül az a feltétel, hogy az aktuális kapacitás egyik periódusban sem haladhatja meg a maximális kapacitást. A beruházási költség ( $cc$ ) kizárólag az  $E$  berendezéstől függ, továbbá a működési költségeket minden egyes periódusra meg kell határozni az aktuális kapacitás alapján. Így az évesített beruházási költség ( $acc$ ), a működési költség ( $oc$ ), valamint a teljes költség ( $tc$ ) a korábban alkalmazott 5.2, 5.3 és 5.5 egyenletek segítségével számolhatóak ki. A kapott eredményeket tartalmazza az 5.2 táblázat.

A táblázatban szereplő adatokat az 5.14 – 5.18 egyenletek szolgáltatták.

5.2. TÁBLÁZAT. A multiperiodikus működéshez kapcsolódó adatok.

Paraméter megnevezése	Jelölés	1.per.	2. per.	3. per.	M.e.
Periódus hossz	$pl_i$	5/12	5/12	2/12	[év]
Havi betáplálás	$mf_i$	1	2	7,5	[t/hónap]
Periodikus betáplálás	$pf_i$	5	10	15	[t/periódus]
Aktuális kapacitás	$a$	12	24	90	[t/év]
Maximális kapacitás	$m$		90		[t/év]
Évesített beruházási költség	$acc$		194		[€/év]
Működési költség	$oc$	17,5	32,5	46	[€/év]
Teljes költség	$tc$		290		[€/év]

$$acc = 14 + 2 * 90 = 194 \quad (5.14)$$

$$oc_1 = (6 + 3 * 12) * 5/12 = 17,5 \quad (5.15)$$

$$oc_2 = (6 + 3 * 24) * 5/12 = 32,5 \quad (5.16)$$

$$oc_3 = (6 + 3 * 90) * 2/12 = 46 \quad (5.17)$$

$$tc = 194 + 17,5 + 32,5 + 46 = 290 \quad (5.18)$$

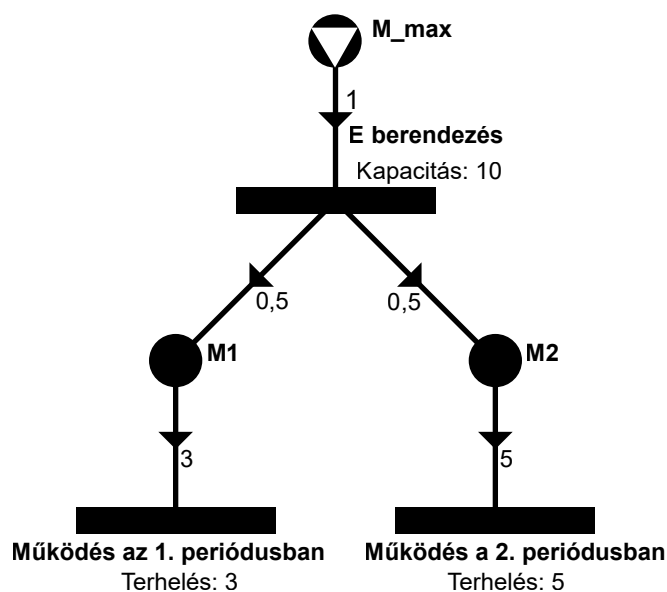
A bemutatott példában a multiperiodikus működés költségesebb, mint a hagyományos működés (290 €/év > 170 €/év), mivel ebben az esetben lényegesen nagyobb a beruházási költség, hogy ki lehessen elégíteni a csúcsidőszakban felmerülő igényeket is. Másrészt a hagyományos módszer alkalmazása akkor lehetséges, ha rendelkezésre áll olyan tárolókapacitás, amely lehetővé teszi, hogy egész évben egyenletes kihasználtsággal lehessen a rendszert működtetni. Sok esetben egy ilyen tároló kapacitás kiépítése költséges eljárás, amely könnyen az ellenkező oldalra billentheti a költségek mérlegét.

## 5.2. A multiperiodikus műveleti egység P-gráf modellje

Az előző fejezetben megvizsgáltam, hogy miként működiknek a multiperiodusú műveleti egységek. A következő lépés annak meghatározása, hogy miként lehet a P-gráf módszertan segítségével ábrázolni őket. Erre a problémára nem egy olyan megoldást adok, amelyben teljesen új komponenseket kell létrehozni a keretrendszerben, hanem a hagyományos műveleti egységek segítségével reprezentálom a multiperiodikus működést.

Ezt a következőképpen valósítottam meg. Először fel kell venni három különálló műveleti egységet,  $O_1$ -et,  $O_2$ -t és  $O_3$ -at, amelyek az almapucoló berendezés működését reprezentálják az egyes periódusokban. Ezekhez a műveleti egységekhez tartozó kapacitás értékek, azaz  $x_1$ ,  $x_2$  és  $x_3$  a multiperiódusú műveleti egység aktuális kapacitásainak felelnek meg, azaz  $a_1$ -nek,  $a_2$ -nek és  $a_3$ -nak.

Ezen kívül szükség van még az  $E$  műveleti egységre, amely a berendezés fizikai tulajdonságait jelöli. Ennek a műveleti egységnek a kapacitása a multiperiódusú berendezés maximális kapacitása lesz. Az  $E$  berendezés bemenetén az  $M\_max$  anyag típusú csúcstalálható, amely a maximális kapacitást reprezentálja és nyersanyagként jelenik meg. Amennyiben egységnyi súly szerepel a berendezést, és ezt a nyersanyagot összekötő  $(M\_max, E)$  élen, akkor a belőle felhasznált mennyiség a teljes időszakra vonatkoztatott kapacitásértéket adja meg.

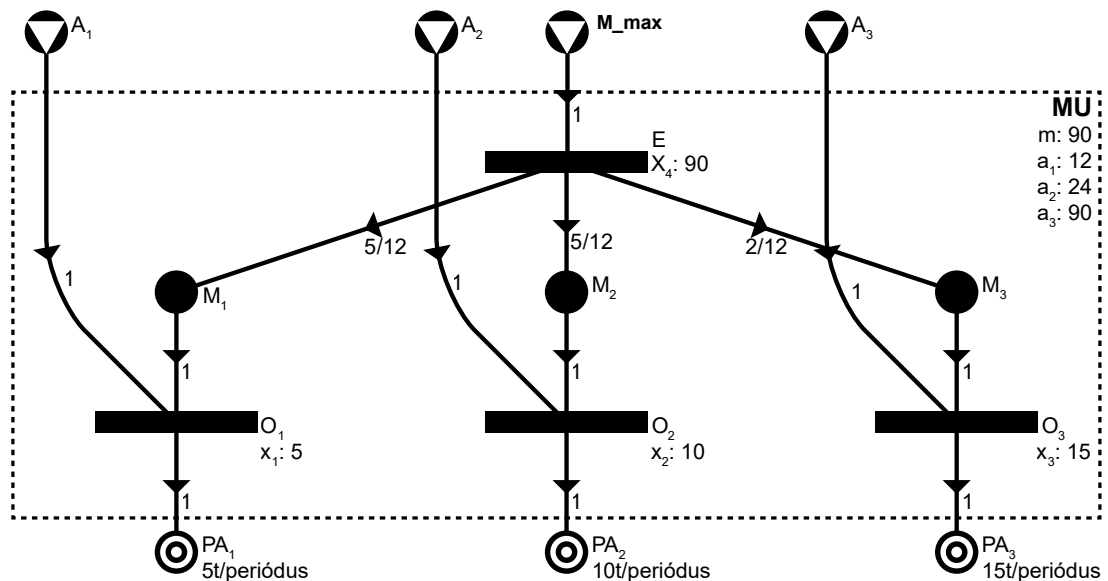


5.4. ÁBRA. A multiperiódikus berendezés maximális kapacitásának meghatározása.

Ezt követően biztosítani kell, hogy az  $E$  berendezés maximális kapacitása valóban a legnagyobb aktuális kapacitás értékének feleljen meg. Az 5.4 ábrán egy példa látható, ahol a berendezés maximális kapacitását határozom meg. Itt a felső műveleti egység jelöli az  $E$  berendezést, míg a két alsó műveleti egység a két periódusban való működését. Két periódust különböztetek meg, amelyek egyforma hosszúak, tehát a teljes időszak 0,5-szerese lesz a periódus hossza mindkét esetben.

Az egyik periódusban  $x_1 = 3$  az aktuális kapacitása a berendezésnek, míg a másik periódusban  $x_2 = 5$ . Ekkor az  $E$  műveleti egység méretének a teljes időszakra  $5 * 2 = 10$ -nek kell lennie. Ez a következőképpen érhető el. Be kell vezetni új, anyag típusú csúcsokat mindkét működést reprezentáló műveleti egységhez. Ezek lesznek az  $M_1$  és  $M_2$  anyagpontok. Az  $E$  berendezés és a működést reprezentáló  $O_1$  és  $O_2$  műveleti egységek ezeken az  $M_1$  és  $M_2$  anyagpontokon keresztül lesznek összekötve. Abban az esetben, ha az  $O_1$  és  $O_2$  műveleti egységek kapacitása rendre  $x_1 = 3$  és  $x_2 = 5$ , akkor 3 egység  $M_1$  és 5 egység  $M_2$  szükséges a megfelelő működéshez. Mivel  $E$ -nek kell kielégítenie mindkét igényt, ezért az  $E$  műveleti egység kapacitása 10 kell, hogy legyen, azaz  $M_1$  és  $M_2$  anyagok kapcsán felmerülő igények közül a nagyobb a teljes időszakra vetítve.

Következésképpen a berendezés maximális kapacitása meg fog egyezni a legmagasabb, működéshez rendelt aktuális kapacitással. A fenti példában minden előállított  $M_2$  anyag felhasználásra kerül, azonban  $M_1$  anyagból bizonyos mennyiség megmarad. Ez reprezentálja azt, hogy az első periódus alatt a berendezés nincs teljes mértékben kihasználva. Fontos megjegyezni, hogy az  $M_1$ ,  $M_2$  és  $M_{max}$  anyagpontok nem fizikailag megfogható anyagok, hanem kizárólag a berendezés kapacitásának meghatározásához felhasznált jelölések.



5.5. ÁBRA. Multiperiodikus berendezés P-gráf reprezentációja.

Ez a módszer alkalmazható az almapucoló berendezésre is. Ezt mutatja be az 5.5 ábra, ahol a berendezést 4 hagyományos műveleti egység reprezentálja. Az  $E$  berendezés kapacitása  $x_4 = m = 90$ . Ez a kapacitás arányosan oszlik meg  $M_1$ ,  $M_2$  és  $M_3$  között

a periódus hosszoknak megfelelően, amelyek 37,5 az első periódusnál, 37,5 a második periódusnál, valamint 15 a harmadik periódusnál.

Ezek az értékek adják meg, hogy ezekből az anyagpontokból mennyi áll rendelkezésre, maximálisan mennyi használható fel belőlük az adott időperiódusban. Nem az összes kerül felhasználásra, csak 5, 10 és 15 egység, mivel ennyi pucolt almára van szükség ( $PA_1, PA_2, PA_3$ ) az egyes periódusokban ( $O_1, O_2, O_3$ ). A periódusokhoz tartozó aktuális kapacitásokat az  $O_1, O_2, O_3$  műveletekhez tartozó kapacitások és a periódushossz hányadosaként lehet meghatározni a korábban bemutatott az 5.11 – 5.13 egyenletek segítségével.

A berendezés fizikai megvalósítása és működése multiperiodikus modell esetén a fenti módszerrel teljesen szét van választva. A működési költségek a működést reprezentáló műveleti egységekhez tartoznak, míg a beruházási költségek a berendezés fizikai megvalósításához kapcsolódnak. Az 5.3 egyenlet a működési költségeket határozza meg, azonban aktuális kapacitásokat ( $a_i$ ) tartalmaz, amelyek nem azonosak  $x_i$ -vel. Ennek következtében a költségfüggvényeket az 5.19 – 5.21 egyenleteknek megfelelően kell módosítani.

$$oc_1 = 6 * (5/12) + 3x_1 = 2.5 + 3x_1 \quad (5.19)$$

$$oc_2 = 6 * (5/12) + 3x_2 = 2.5 + 3x_2 \quad (5.20)$$

$$oc_3 = 6 * (2/12) + 3x_3 = 1 + 3x_3 \quad (5.21)$$

A fenti reprezentációt felhasználva a kapacitások és költségek meghatározhatóak az ABB algoritmus segítségével. A kapott eredmények összhangban vannak a manuálisan kiszámolt értékekkel, amiket az 5.2 táblázat tartalmaz. Mindez azt jelenti, hogy az ABB algoritmus egyaránt jól használható hagyományos, egyetlen periódust tartalmazó műveleti egységek és a multiperiodusú műveleti egységek esetén is, ezáltal is bizonyítva a P-gráf keretrendszer sokoldalúságát.

5.3. TÁBLÁZAT. A feladatban szereplő nyersanyagok tulajdonságai.

Név	Max. mennyiség	Költség
r_corn_wet		185 €/t
r_fast_wood	6,788 t/év	50 €/t
r_forest_wood	5,605 t/év	40 €/t
r_heat_corn	770 MWh/év	0 €/t
r_heat_dry_summer	3,051 MWh/év	0 €/t
r_heat_dry_winter	1,684 MWh/év	0 €/t

### 5.3. Gyakorlati alkalmazás – St. Margarethen

St. Margarethen egy kis település az ausztriai Stájerországban. A város, ahogy Ausztria többi része is, nagyon fontosnak tartja környezetének védelmét, így a megújuló energiaforrások használata náluk is egy kiemelt beruházási területnek tekinthető. A régió egyik legjellegzetesebb terménye a kukorica. Ennek következtében a kukorica szárítása, valamint a kukoricacsutka felhasználása fontos feladat. Az esettanulmány célja egy olyan optimális hálózat megtervezése, amely eleget tesz ezeknek a feladatoknak, továbbá olyan feltételeket is teljesít, mint az üvegházak hővel történő ellátása. Ezeket a célokat olyan rendelkezésre álló nyersanyagok felhasználásával kell elérni, mint például biogáz és fa. A feldolgozáshoz olyan berendezések használhatóak, mint a biogáz üzem vagy a szárító.

A kukoricát nem lehet hosszú távon tárolni. Ennek következtében a kukorica feldolgozására irányuló igény az év során jelentősen változik. Ez szükségessé teszi a periódusok megkülönböztetését, ami megköveteli a multiperiodikus P-gráf használatát.

#### 5.3.1. Információgyűjtés

A megoldási folyamat első lépése az információgyűjtés, ahol meg kell határozni a rendelkezésre álló nyersanyagokat, a szükséges termékeket, valamint a felhasználható berendezéseket, természetesen a modellezéshez szükséges paramétereikkel együtt. Az 5.3 táblázat tartalmazza a felhasználható nyersanyagok paramétereit, míg az 5.4 táblázat a kívánt termékek adatait. Az 5.5 táblázat pedig összegyűjti a berendezésekre vonatkozó költségadatokat és kapacitás korlátokat.

Ezt követően döntést kell hozni az időperiódusokról. Ebben az esetben három periódust különböztetnek meg, egyet a téli időszaknak, egyet a nyári időszaknak és egyet a kukorica

5.4. TÁBLÁZAT. A feladatban szereplő termékek tulajdonságai.

Név	Min. mennyiség		Max. mennyiség		Érték
p_corn_dry	14,271	t/év			205 €/t
p_gde_gaertn_summer	339	MWh/év	339	MWh/év	45 €/MWh
p_gde_gaertn_winter	1,119	MWh/év	1,119	MWh/év	45 €/MWh
p_gde_corn	286	MWh/év	286	MWh/év	45 €/MWh
p_wood_dry					70 €/t

5.5. TÁBLÁZAT. A berendezések költségei és kapacitás korlátai.

Berendezés neve	Beruházási költség (€/méret/év)	Kapacitás korlát
biogas_equipment	-	1
dryer_equipment	-	1
new_dryer_equipment	10,000	-
prod_pellet	-	686,11
heating_equipment	12,000	-
orc_equipment	250,000	-
sng_equipment	300,000	-

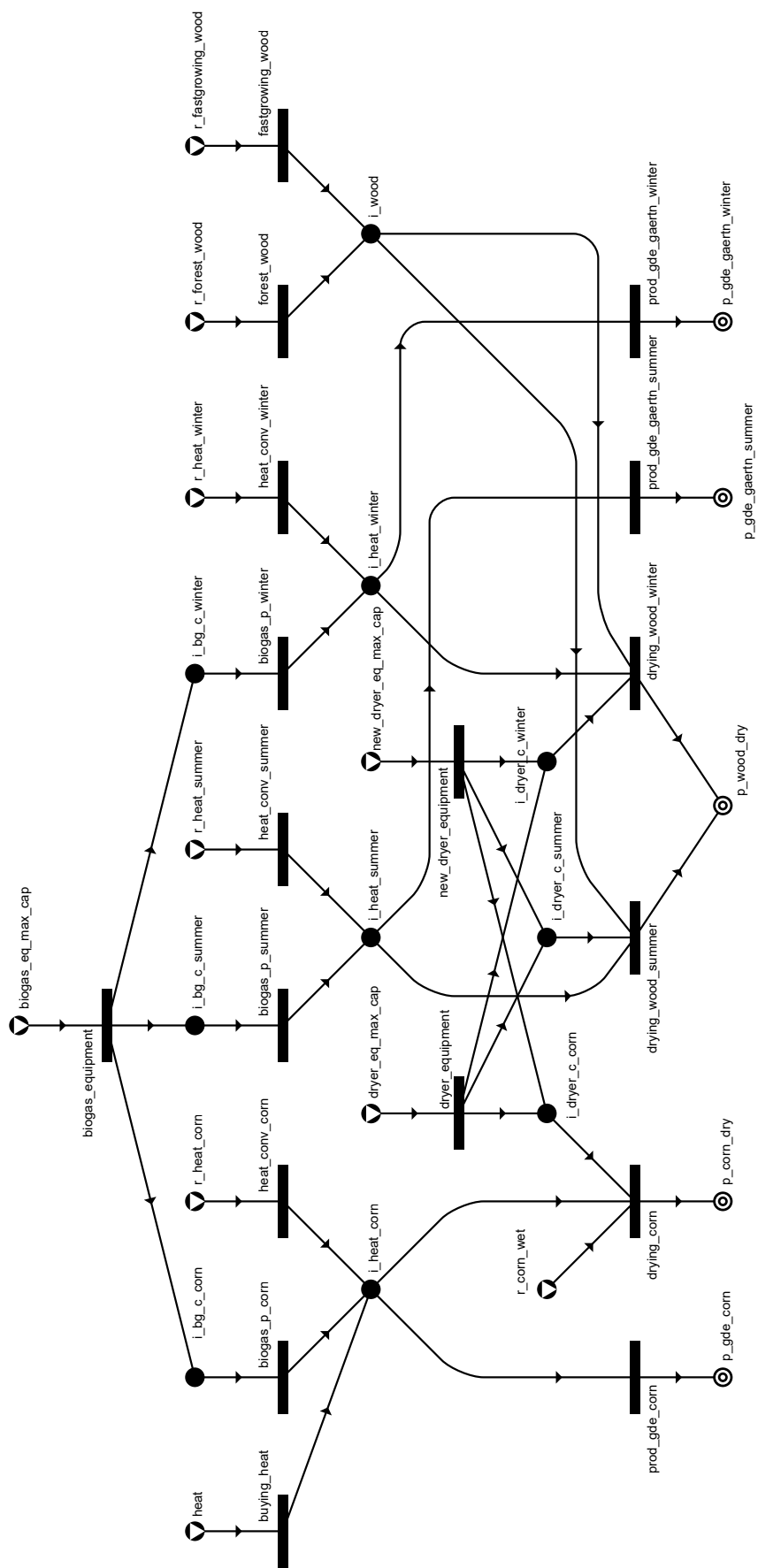
betakarítási idejének. Az első két periódus hossza 3600 óra, a harmadik periódus hossza pedig 1440 óra.

### 5.3.2. A maximális struktúra felírása

A feladat maximális struktúrája az 5.6 ábrán látható. A rendelkezésre álló berendezéseket, anyagokat és a közöttük fennálló kapcsolatokat mutatja be az 5.6 táblázat.

A következő konvenciókat alkalmazom az elnevezéseknél. Az  $r$ ,  $i$ ,  $p$  betűk jelölik rendre a nyersanyagokat, köztes termékeket és a végtermékeket. A *corn*, *summer*, *winter* szavak jelölik a periódusokat, azaz a betakarítás, nyár és tél időszakokat. A biogáz üzem és a szárító már felépült, így ezeknek nincs beruházási költsége. A *buying\_heat* rendelkezik költséggel, mivel ez a vásárolt hőt jelöli, ennek értéke 45 €/MWh. Az első multiperiódusos műveleti egység a biogáz üzem, amely a biogáz elégetésével hőt állít elő a különböző periódusokban. A biogáz előállítását nem jelenik meg külön a hálózatban, mivel azt az üzem belső működéséhez kötjük.





5.6. ÁBRA. A szemléltető példa maximális struktúrája.

5.6. TÁBLÁZAT. A berendezések költségei és kapacitás korlátai.

Berendezés neve	Bemenet	Arány		Kimenet	Arány
biogas_equipment				i_bg_c_corn	1,440 óra/év
				i_bg_c_summer	3,600 óra/év
				i_bg_c_winter	3,600 óra/év
biogas_p_corn	i_bg_c_corn	1	óra	i_heat_corn	0,45 MWh
biogas_p_summer	i_bg_c_summer	1	óra	i_heat_summer	0,45 MWh
biogas_p_winter	i_bg_c_winter	1	óra	i_heat_winter	0,45 MWh
dryer_equipment, new_dryer_equipment				i_dryer_c_corn	1,440 óra/év
				i_dryer_c_summer	3,600 óra/év
				i_dryer_c_winter	3,600 óra/év
drying_corn	r_corn_wet	2,86	t	p_corn_dry	2,86 t
	i_dryer_c_corn	3,98	óra		
	i_heat_corn	1	MWh		
drying_wood_summer	i_wood	6,53	t	p_wood_summer	6,53 t
	i_dryer_c_summer	3,98	óra		
	i_heat_summer	1	MWh		
drying_wood_winter	i_wood	6,53	t	p_wood_winter	6,53 t
	i_dryer_c_winter	3,98	óra		
	i_heat_winter	1	MWh		

A multiperiodikus berendezést 4 hagyományos műveleti egységgel modellezem (egy tartozik a fizikai reprezentációhoz és 3 modellezi a működést a periódusokban). Néhány környékbeli üzem szolgáltat fennmaradó hőt ( $r\_heat\_corn$ ,  $r\_heat\_summer$ ,  $r\_heat\_winter$ ) az egyes időszakokban, amelyekre nyersanyagként tekintek a rendszerben. Ezek a nyersanyagok az  $i\_heat\_corn$ ,  $i\_heat\_summer$ , és  $i\_heat\_winter$  anyagokhoz kapcsolódnak konverter egységeken keresztül. Ezek a konverter egységek nem valódi berendezések, csak a folyamatok modellezéséhez szükségesek.

Hasonló konverter egységeket használok az erdei fa ( $r\_forest\_wood$ ) és a gyorsnövésű fa ( $r\_fast\_wood$ ) átalakításához, ezekből egységesen fát ( $i\_wood$ ) állítok elő. A konverterek nem szerepelnek a berendezéseket bemutató táblázatban, a ki- és bemeneteik egységesen 1 súllyal rendelkeznek. A kukoricát ( $r\_corn\_wet$ ) és a fát ( $i\_wood$ ) egyaránt meg kell szárítani. A kukorica szárítása nagyobb jelentőséggel bír, ezért a betakarítási időszakot kizárólag erre fordítom. Fát a téli és nyári időszakban lehet szárítani.

Ennek következtében a szárítót is multiperiodikus berendezésnek kell tekinteni. Potenciálisan két szárító berendezés használható. Az egyik ezek közül már üzemel, ennek nincsenek további beruházási költségei. A másodikra csak akkor lesz szükség, ha az első nem tudja kielégíteni az igényeket. A szárítók jól kiemelik, hogy egy berendezés különböző bemenetekkel rendelkezhet a periódusokban, valamint jól illusztrálja a kapcsolatot

5.7. TÁBLÁZAT. A berendezések kapacitása az optimális struktúrában.

Berendezés neve	Kapacitás
forest_wood	5,605
fastgrowing_wood	6,788
buying_heat	3,858
heat_conv_corn	770
heat_conv_winter	116
biogas_equipment	1
biogas_p_summer	3,600
biogas_p_winter	3,600
biogas_p_corn	1,440
prod_gde_summer	339
prod_gde_winter	1,119
prod_gde_corn	287
dryer_equipment	1
new_dryer_equipment	13
drying_corn	4,990
drying_wood_summer	1,281
drying_wood_winter	617

a hagyományos és a multiperiodikus részhálózatok között.

### 5.3.3. Az optimális hálózat meghatározása

A feladatot az ABB algoritmussal megoldva a célfüggvény értéke 366,195 €/év teljes költség lett. Az optimális hálózat minden potenciális műveleti egységet tartalmaz. Az ezekhez tartozó kapacitás értékek az 5.7 táblázatban szerepelnek. A megoldásból látszik, hogy szükség van még egy szárító üzembe helyezésére, valamint a betakarítási időszakban vásárolni kell hőt is.

## 5.4. A fejezet rövid összefoglalása

A fejezet során bemutattam a PNS feladatokban szereplő multi-periodikus viselkedésű műveletek koncepcióját. Ennek megalkotását a P-gráf módszertan gyakorlati alkalmazásai inspirálták. Számos olyan területtel találkoztam, ahol a nyersanyagok korlátlan tárolására nem nyílt lehetőség, illetve az előállítandó termékek, valamint a rendelkezésre álló nyersanyagok mennyisége időszakonként változott. Ahhoz, hogy az ilyen típusú viselkedéseket megfelelően tudjam modellezni, létre kellett hoznom egy olyan modellt, amelyben lehetőség nyílt a műveleti egységek terhelésének időszakonkénti változtatására.

A fejezet során bemutattam egy olyan modellezési technikát, amely alkalmas multi-periodikus műveleti egységek ábrázolására. Az új megközelítés lényege, hogy szétválasztottam a berendezések működését az egyes időszakokban a berendezés fizikai megvalósításának reprezentációjától. Ekkor a hozzá tartozó költségeket is szétválasztottam. A beruházási költségeket a fizikai reprezentációhoz, míg a működési költségeket az egyes periódusokban végzett tevékenységhez kapcsoltam. Ez a megközelítés lehetővé tette, hogy a berendezéseket a tervezés során megfelelően méretezzem, így minden egyes időszakban ki tudja elégíteni a felmerülő igényeket.

A módszer egyik sajátossága, hogy a multi-periodikus viselkedés modellezéséhez kizárólag a P-gráf módszertanban már használatos műveleti egységek és anyagpontok reprezentációját használtam fel. Ezek ábrázolását és működését példákon keresztül mutattam be, valamint részletekbe menően ismertettem egy valós ipari példa modellezését és megoldását is a kiterjesztett módszertan segítségével.

## 6. fejezet

# Új tudományos eredmények

### 6.1. Tézisek

1. Bevezettem egy olyan integrált hálózatszintézis feladatot, amely egyaránt tartalmaz folyamathálózati és szétválasztási hálózati elemeket. A korábbi megközelítésekkel ellentétben a két kapcsolódó részhálózat tervezését nem szekvenciálisan, hanem párhuzamosan hajtom végre.
  - a) Bemutattam a komponensáram-alapú P-gráf reprezentációt, amely lehetővé teszi a szétválasztó hálózatok többkomponensű anyagáramainak és berendezéseinek P-gráf alapú megjelenítését.
  - b) Megvizsgáltam a tiszta termékes, éles (lineáris, fix részt tartalmazó költségfüggvényű) szétválasztókat használó SNS feladatosztály tulajdonságait, amelyeket felhasználtam a szétválasztási feladathoz felírt maximális struktúra megalkotása során. A maximális struktúra generálásához algoritmust dolgoztam ki.
  - c) Módszert adtam a szétválasztó részhálózatokat tartalmazó PNS feladat matematikai modelljének felírására. A bemutatott modellt a P-gráf módszertan segítségével oldottam meg.
  - d) Ismertettem a kiterjesztett hálózat előnyeit. Egy szemléltető példa segítségével összehasonlítottam a szekvenciális módszerrel, és megmutattam, hogy általában az új eljárás jobb eredményt ad.

2. Konkáv költségfüggvénnyel rendelkező szétválasztó berendezéseket tartalmazó SNS feladatok optimális megoldására dolgoztam ki egy új, intervallumokat használó globális optimalizálási eljárást. Az algoritmus szabályozható toleranciaértékek mellett meghatározza az optimális hálózat felépítését és a hozzá tartozó anyagáramok méretét. A módszer viselkedését gyakorlati példán keresztül illusztráltam.
  - a) Azonosítottam a matematikai modell azon elemeit, amelyek a nemlineáris viselkedést eredményezik. Módszert dolgoztam ki a nemlineáris elemek lineáris eszközökkel való modellezésére. Elsőként nemlinearitás a komponensáram-alapú modell miatt a megosztók működését leíró egyenletekben jelenik meg. Ennek kezelésére megosztási intervallumokat vezettem be a megosztási arányok helyett. Másodsorban a szétválasztó berendezések konkáv költségfüggvénye eredményez nemlineáris működést. Ennek kezelésére lineáris alsó becslőfüggvényt vezettem be.
  - b) Kidolgoztam az IGOS eljárást, amely egy Branch & Bound keretrendszeren alapul és amelyben lineáris eszközökkel oldottam meg a felírt matematikai modellt. Összehasonlításokat végeztem más megoldó szoftverekkel és megállapítottam, hogy az összevetésben szereplő OpenOpt NLP megoldóval szemben az IGOS minden szempontból jobban teljesít, míg piacvezető globális optimalizációs szoftverekkel szemben a futási idő tekintetében némileg elmarad.
  - c) Kidolgoztam egy gyorsított kiválasztási stratégiát, amely a mérések szerint akár a 60-szorosára is képes gyorsítani a teljes algoritmus működését.
3. Kidolgoztam a P-gráf módszertan egy kiterjesztését, amely rugalmas bemeneteket is tud kezelni. Ez a modell hatékonyan alkalmazható többek között megújuló energiaforrásokat tartalmazó komplex energiatermelő rendszerek optimális tervezésében is. A feladatosztályban szereplő specifikus elemek kezelésére egy új matematikai modellt dolgoztam ki. A kiterjesztett módszertan működését egy esettanulmányon keresztül mutattam be.
  - a) A Friedler és szerzőtársai által kidolgozott P-gráf módszertanban szereplő műveleti egységek konstans bemenő és kimenő anyagáram-arányokkal jellemezhetőek. Munkám során egy új matematikai modellt dolgoztam ki a műveleti egységek számára, amely megengedi, hogy ezek az arányok adott határok között rugalmasan változzanak, valamint a kilépő anyagáramok méretét ezen

arányok függvényében szabályozza. Ezáltal pontosabban lehet bizonyos berendezéseket modellezni, például az energiaellátás területén.

- b) Az új matematikai modell a megújuló energiaforrások mellett képes kezelni a káros anyagok kibocsájtására vonatkozó korlátokat is.
- c) Érzékenységvizsgálatot hajtottam végre egy megújuló hőellátó rendszerhez kapcsolódóan. Megvizsgáltam, hogy az optimális hálózat felépítése, valamint a rendelkezésre álló nyersanyagok felhasználása miként reagál az energiaigény változására.

4. Módszert dolgoztam ki a multiperiodikus működésű berendezések modellezésére a P-gráf módszertan segítségével. Az új típusú berendezéseket a hagyományos műveleti egységek és anyagpontok felhasználásával reprezentáltam.

- a) Bemutattam a multiperiodikus működésű berendezéseket, és összevetettem a hagyományos berendezések viselkedésével. Egy szemléltető példán keresztül ismertettem a két matematikai modell közötti különbségeket, és levontam az ebből eredő következtetéseket a teljes költségre vonatkozóan.
- b) Meghatároztam, hogy miként lehet a multiperiodikus berendezéseket a P-gráf módszertan segítségével modellezni és ábrázolni. Ezt nem új komponensek bevezetésével, hanem a meglévő műveleti egységek és anyagpontok felhasználásával valósítottam meg.

## 6.2. Az értekezés témaköréből készült publikációk

### Lektorált nemzetközi folyóiratcikkek

1. Adrian Szlama, Karoly Kalauz, Istvan Heckl, Botond Bertok. Solving a separation-network synthesis problem by interval global optimization technique. *Computers & Chemical Engineering*, Volume 56, 2013, 142-154, Impact Factor: 2.367
2. Istvan Heckl, Laszlo Halasz, Adrian Szlama, Heriberto Cabezas, Ferenc Friedler, Process synthesis involving multi-period operations by the P-graph framework, *Computers & Chemical Engineering*, Volume 83, 2015, 157-164, Impact Factor: 2.784
3. Adrian Szlama, Istvan Heckl, Heriberto Cabezas. Optimal design of renewable energy systems with flexible inputs and outputs using the P-graph framework. *AIChE J.*, Impact Factor: 2.748 *Megjelenésre elfogadva*

### Konferencia-kiadványokban megjelent közlemények

4. Adrian Szlama, Karoly Kalauz, Botond Bertok Istvan Heckl. Solving a separation-network synthesis problem by interval global optimization technique. *Chemical Engineering Transactions*, 29, 1525-1530, 2012
5. Istvan Heckl, Laszlo Halasz, Adrian Szlama, Heriberto Cabezas, Ferenc Friedler, Modeling Multi-period Operations using the P-graph Methodology, *Computer Aided Chemical Engineering*, 33, 979-984, 2014.

### Nemzetközi konferencia előadások

6. Istvan Heckl, Robert Adonyi, Botond Bertok, Adrian Szlama, Scheduling of the transport of renewables for a power plant, presented at *Factory Automation Conference 2012*, Veszprém, Hungary, May 21-22, 2012.
7. Adrian Szlama, Karoly Kalauz, Botond Bertok, Istvan Heckl, Solving separation-network synthesis problem adopting interval optimization techniques, presented at the *PRES 2012*, Praha, Czech Republic, August 25-29, 2012.



8. Adrian Szlama, Istvan Heckl, Botond Bertok, Optimal design of process networks involving subsystems with variable composition streams, presented at the VOCAL 2012, Veszprém, Hungary, December 11-14, 2012.
9. Istvan Heckl, Laszlo Halasz, Adrian Szlama, Heriberto Cabezas, Ferenc Friedler, Modeling Multi-period Operations using the P-graph Methodology, presented at ESCAPE 24 (24<sup>th</sup> European Symposium on Computer Aided Process Engineering), Budapest, Hungary, June 15-18, 2014.
10. Istvan Heckl, Laszlo Halasz, Adrian Szlama, Heriberto Cabezas, Energy supply chain synthesis involving multi-period operations, presented at 2<sup>nd</sup> International Symposium on Energy Challenges and Mechanics (ECM2), Aberdeen, Scotland, UK, August 19-21, 2014.
11. Adrian Szlama, Istvan Heckl, Optimal design of large-scale energy systems using the P-graph methodology, presented at the VOCAL 2014 (Veszprém Optimization Conference: Advanced Algorithms), Veszprém, Hungary, December 14-17, 2014.
12. Adrian Szlama, Istvan Heckl, Heriberto Cabezas. Optimal design of renewable energy systems using the P-graph methodology, presented at ICOSSE 2015 (4<sup>th</sup> International Congress on Sustainability Science & Engineering) Balatonfüred, Hungary, May 26-29, 2015.
13. Aniko Bartos, Adrian Szlama, Botond Bertok. Optimal design of multi-period process networks including storages for renewable resources, presented at ICOSSE 2015 (4<sup>th</sup> International Congress on Sustainability Science & Engineering) Balatonfüred, Hungary, May 26-29, 2015.

### **Hazai konferencia előadások**

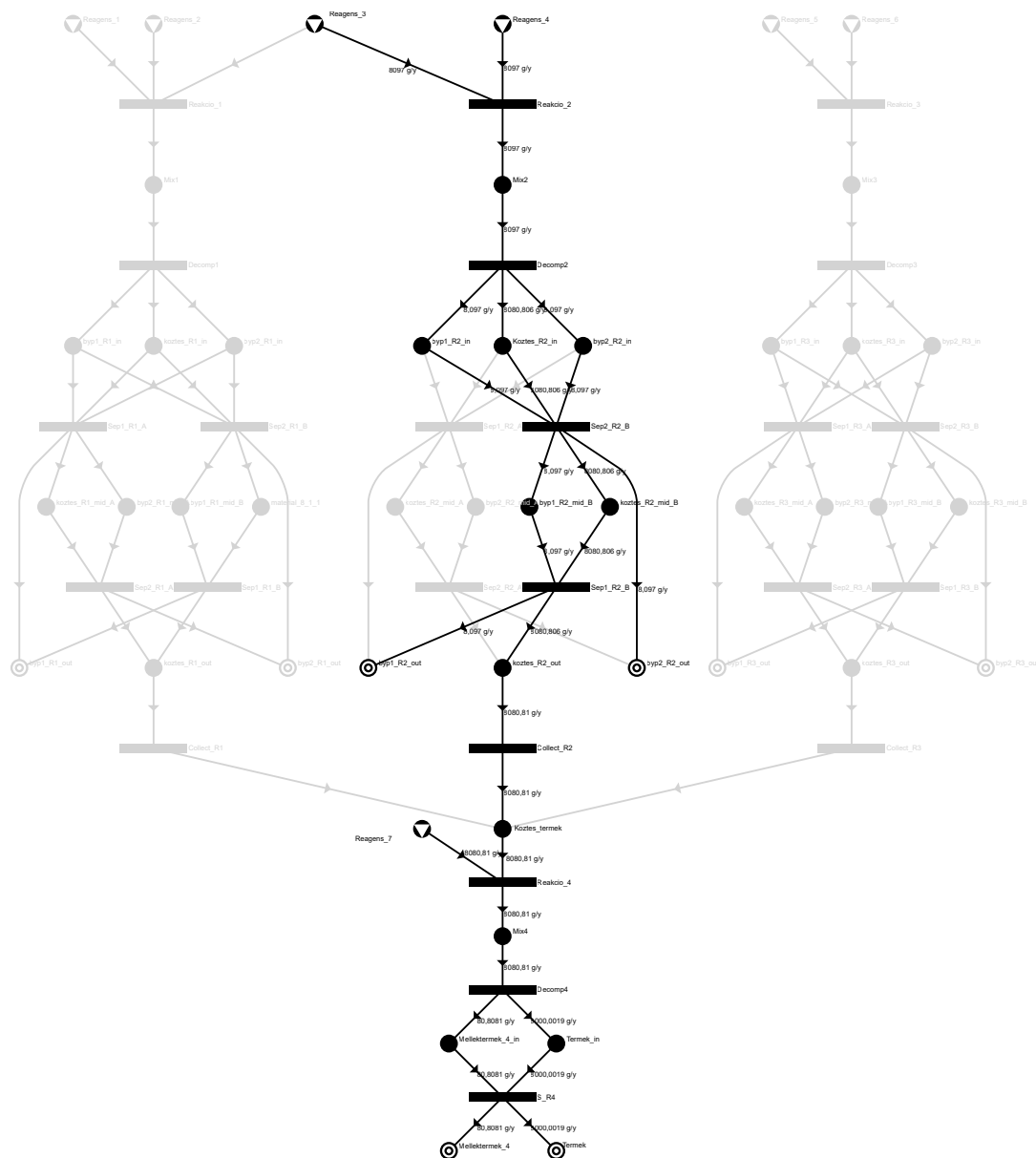
14. Adrian Szlama, Karoly Kalauz, Botond Bertok, Istvan Heckl, Interval branch-and-bound method for global optimization of separation networks, presented at the 8<sup>th</sup> International PhD & DLA Symposium, Pécs, Hungary, 29-30 October, 2012.

15. Adrian Szlama, Istvan Heckl, Botond Bertok, Változó összetételű anyagáramokkal kibővített folyamat-hálózatok optimális tervezése, presented at the XXX. Magyar Operációkutatási Konferencia, Balatonöszöd, Hungary, June 10-13, 2013.
16. Adrian Szlama, Karoly Kalauz, Botond Bertok, Istvan Heckl, Solving separation-network synthesis problem adopting interval optimization techniques, presented at 1<sup>st</sup> Winter School of PhD Students in Informatics and Mathematics, Veszprem, Hungary, November 15-17, 2013.
17. Adrian Szlama, Multi-periodikus folyamat-hálózat szintézis feladatok megoldása a P-gráf módszertan segítségével, Tavasz Szél 2014, Debrecen, Hungary, March 21-23, 2014.
18. Adrian Szlama, Nagyméretű energiatermelő rendszerek optimális tervezése a P-gráf módszertan segítségével, JASZN 2013, Veszprém, Hungary, April 11-13, 2013.

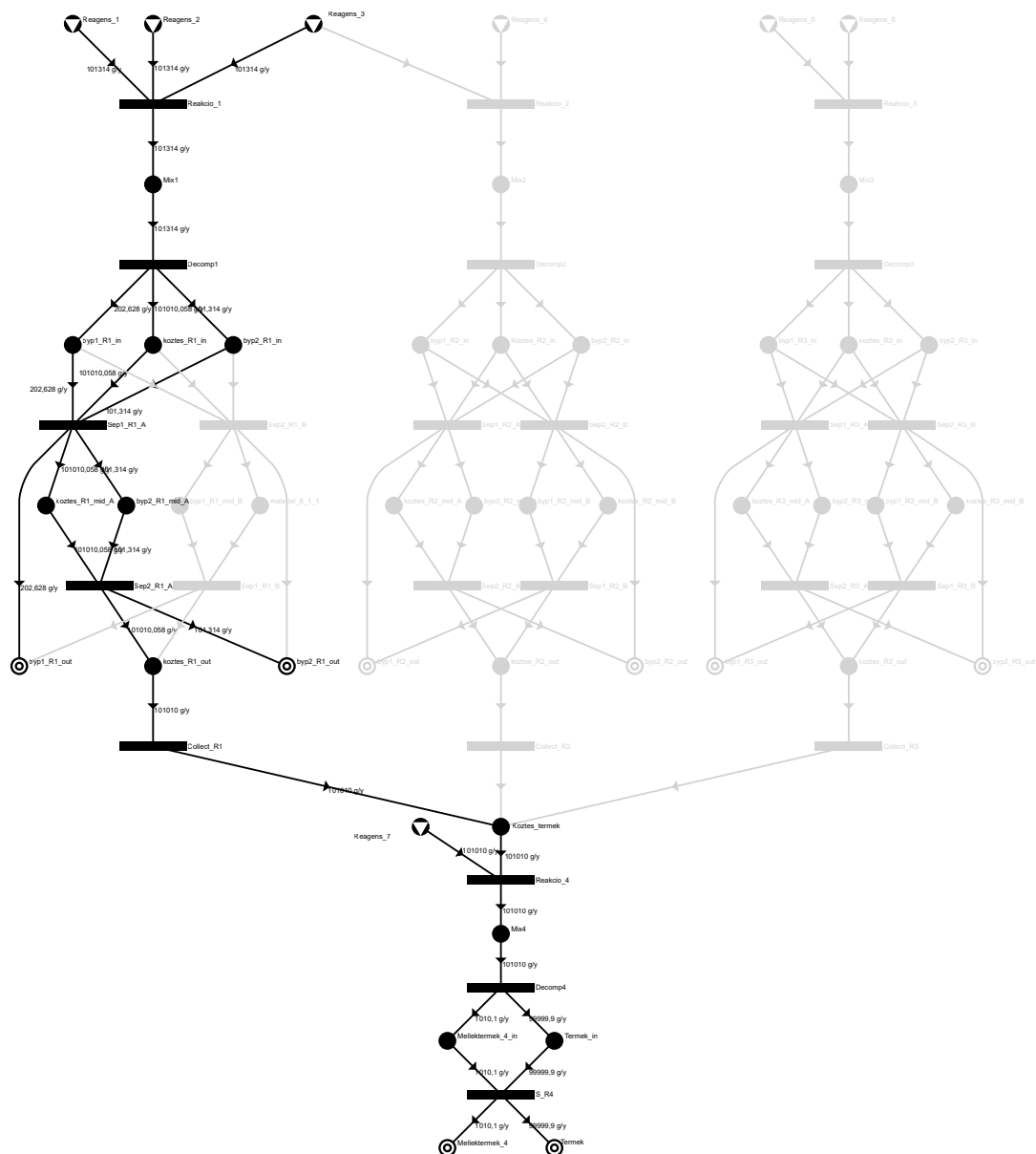
A függelék

Függelék a 3. fejezethez

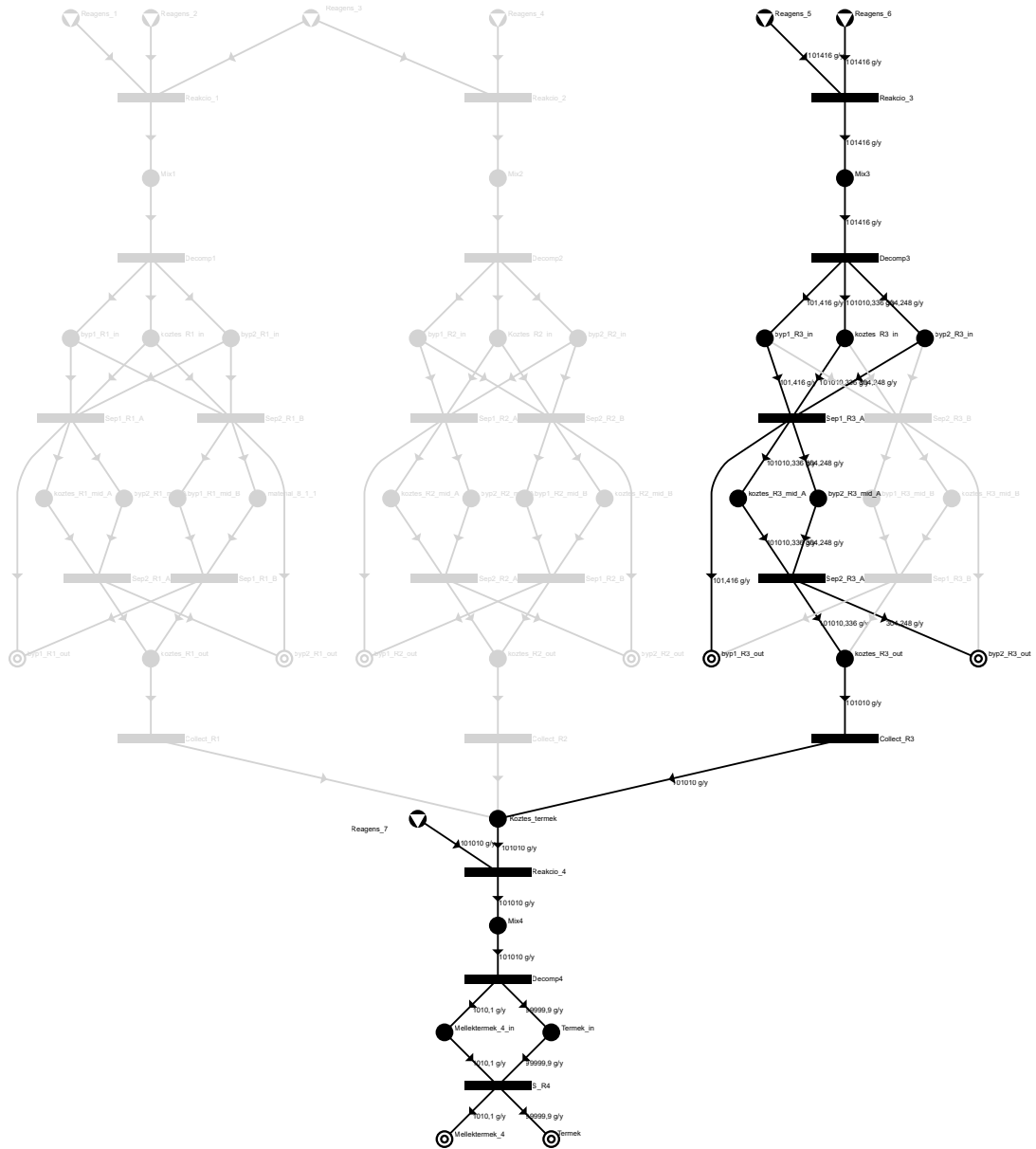




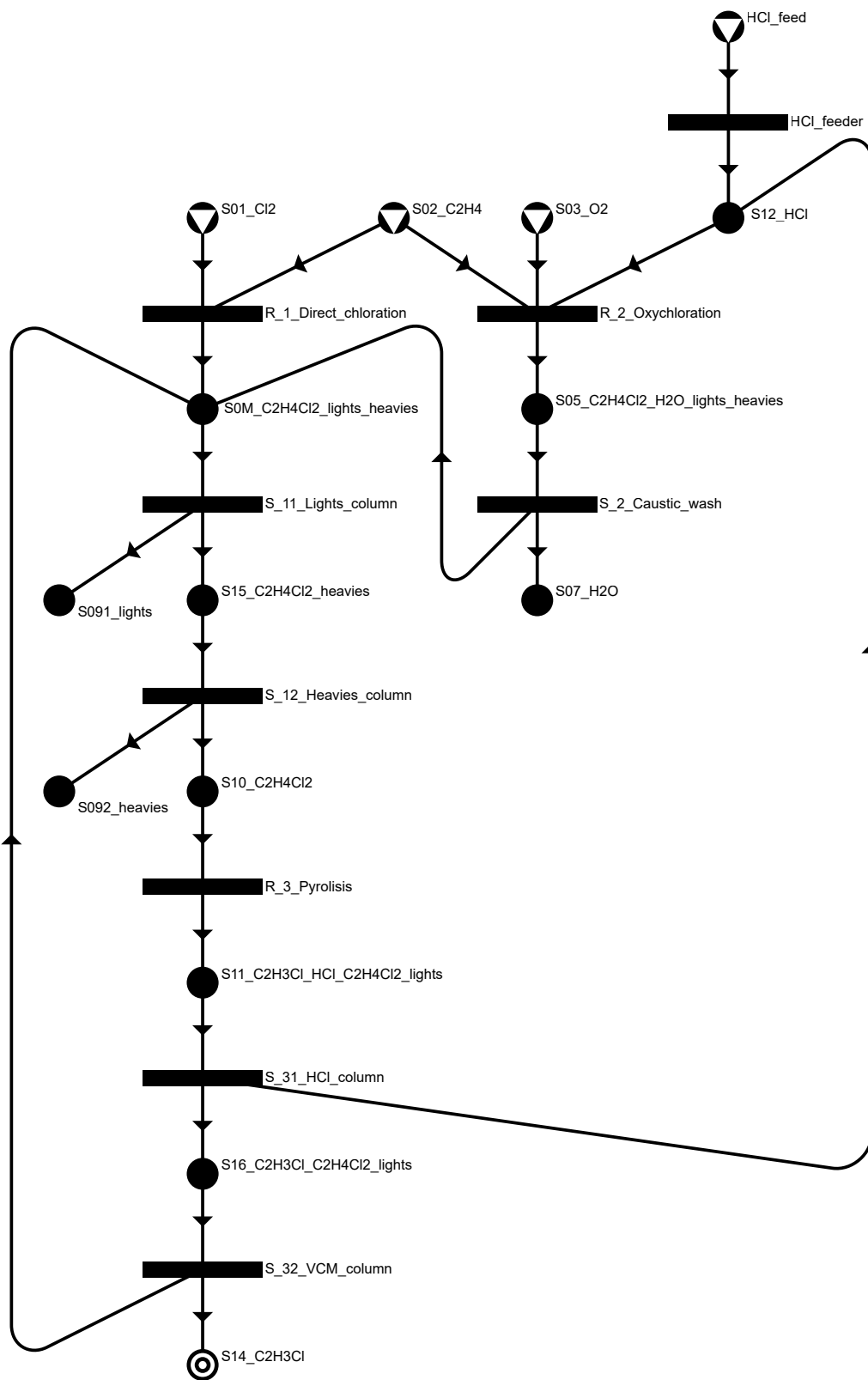
A.2. ÁBRA. A szekvenciális módszer megoldása 8 000 kg/év igény esetén



A.3. ÁBRA. Az integrált maximális struktúra megoldása 100 000 kg/év igény esetén



A.4. ÁBRA. A szekvenciális módszer megoldása 100 000 kg/év igény esetén



A.5. ÁBRA. A szakirodalomban szereplő hálózat maximális struktúrája





## B függelék

# A 4. fejezetben szereplő esettanulmány matematikai modellje

Az anyagáramok megnevezése 3 részből tevődik össze. Ezek a következőket rövidítik:

- Az első rész a műveleti egységre utal:  $P$  a pelletálót,  $M$  a vegyestüzelésű kazánt,  $G$  a gázkazánt,  $C$  a széntüzelésű kazánt jelöli.
- A második rész a folyam irányára utal: Az  $in$  a bejövő anyagáramot, az  $out$  a kilépő anyagáramot jelöli.
- A harmadik rész az anyagra utal:  $st$  a szalmát,  $en$  az energiafüvet,  $su$  a napraforgó szárat,  $wo$  a fát,  $wp$  a fapelletet,  $co$  a kukoricacsutkát,  $gr$  a szőlővenyigét,  $na$  a földgázt,  $li$  a lignitet,  $br$  a barnaszént és  $an$  a feketeszént rövidíti.

Például,  $var\_stream\_size[C\_in\_li]$  jelöli a lignit és széntüzelésű kazán közötti anyagáram méretét. Továbbá  $p\_pen[1]$  és  $p\_pen[2]$  jelölik a kibocsájtott szén-dioxidhoz és kénsavhoz tartozó büntetés mértékét.

```
minimize
/*Cost of raw materials*/
p_RawCost["straw"] * (var_stream_size["P_in_st"]) +
p_RawCost["energy_crop"] * (var_stream_size["P_in_en"]) +
```

```

p_RawCost["sunflower_stem"] * (var_stream_size["P_in_su"]) +
p_RawCost["wood"] * (var_stream_size["M_in_wo"]) +
p_RawCost["wood_pellet"] * (var_stream_size["M_in_wp"]) +
p_RawCost["corn_cob"] * (var_stream_size["M_in_co"]) +
p_RawCost["grape_cane"] * (var_stream_size["M_in_gr"]) +
p_RawCost["natural_gas"] * (var_stream_size["G_in_na"]) +
p_RawCost["lignite"] * (var_stream_size["C_in_li"]) +
p_RawCost["brown_coal"] * (var_stream_size["C_in_br"]) +
p_RawCost["anthracite"] * (var_stream_size["C_in_an"]) +
/*Cost of operating units*/
sum(j in Opunits) (p_FixedCost[j] * var_opunit_included[j] +
p_ProportionalCost[j] * var_opunit_size[j])+
/*Penalties for emitted pollutants*/
var_stream_size["C_out_su"]*p_pen[2] + (var_stream_size["M_out_co"]
+var_stream_size["G_out_co"]+var_stream_size["C_out_co"])*p_pen[1]

subject to{
/*maximum amount of available raw materials*/
var_stream_size["P_in_st"] <= p_Rawupperbound["straw"];
var_stream_size["P_in_en"] <= p_Rawupperbound["energy_crop"];
var_stream_size["P_in_su"] <= p_Rawupperbound["sunflower_stem"];
var_stream_size["M_in_wo"] <= p_Rawupperbound["wood"];
var_stream_size["M_in_wp"] <= p_Rawupperbound["wood_pellet"];
var_stream_size["M_in_co"] <= p_Rawupperbound["corn_cob"];
var_stream_size["M_in_gr"] <= p_Rawupperbound["grape_cane"];
var_stream_size["G_in_na"] <= p_Rawupperbound["natural_gas"];
var_stream_size["C_in_li"] <= p_Rawupperbound["lignite"];
var_stream_size["C_in_br"] <= p_Rawupperbound["brown_coal"];
var_stream_size["C_in_an"] <= p_Rawupperbound["anthracite"];
/*material balance for mixed pellet*/
var_stream_size["M_in_mp"] <= var_stream_size["P_out_mp"];
/*minimum desired amount of product heat*/
var_stream_size["M_out_he"] + var_stream_size["G_out_he"] +
var_stream_size["C_out_he"] >= p_Productminsize["heat"];
/*relative lower and upper bounds for the inputs of pelletizer */
var_opunit_size["Pelletizer"] * p_Streamcoeflower["P_in_st"] <=
var_stream_size["P_in_st"];
var_opunit_size["Pelletizer"] * p_Streamcoefupper["P_in_st"] >=
var_stream_size["P_in_st"];
var_opunit_size["Pelletizer"] * p_Streamcoeflower["P_in_en"] <=
var_stream_size["P_in_en"];

```

```
var_opunit_size["Pelletizer"] * p_Streamcoefupper["P_in_en"] >=
var_stream_size["P_in_en"];
var_opunit_size["Pelletizer"] * p_Streamcoeflower["P_in_su"] <=
var_stream_size["P_in_su"];
var_opunit_size["Pelletizer"] * p_Streamcoefupper["P_in_su"] >=
var_stream_size["P_in_su"];
/*the size of the pelletizer is the sum of input stream sizes*/
var_stream_size["P_in_st"] + var_stream_size["P_in_en"] +
var_stream_size["P_in_su"] == var_opunit_size["Pelletizer"];
/*relative lower and upper bounds for the inputs of mixed furnace */
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoeflower["M_in_wo"] <=
var_stream_size["M_in_wo"];
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoefupper["M_in_wo"] >=
var_stream_size["M_in_wo"];
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoeflower["M_in_wp"] <=
var_stream_size["M_in_wp"] + var_stream_size["M_in_mp"];
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoefupper["M_in_wp"] >=
var_stream_size["M_in_wp"] + var_stream_size["M_in_mp"];
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoeflower["M_in_co"] <=
var_stream_size["M_in_co"];
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoefupper["M_in_co"] >=
var_stream_size["M_in_co"];
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoeflower["M_in_gr"] <=
var_stream_size["M_in_gr"];
var_opunit_size["Mixed_furnace"] * p_Streamcoefupper["M_in_gr"] >=
var_stream_size["M_in_gr"];
/*the size of the mixed furnace is the sum of input stream sizes*/
var_stream_size["M_in_wo"] + var_stream_size["M_in_wp"] +
var_stream_size["M_in_mp"] + var_stream_size["M_in_co"] +
var_stream_size["M_in_gr"] == var_opunit_size["Mixed_furnace"];
/*relative lower and upper bounds for the input of gas furnace */
var_opunit_size["Gas_furnace"] * p_Streamcoeflower["G_in_na"] <=
var_stream_size["G_in_na"];
var_opunit_size["Gas_furnace"] * p_Streamcoefupper["G_in_na"] >=
var_stream_size["G_in_na"];
/*the size of the gas furnace is the sum of input stream sizes*/
var_stream_size["G_in_na"] == var_opunit_size["Gas_furnace"];
/*relative lower and upper bounds for the inputs of coal furnace */
var_opunit_size["Coal_furnace"] * p_Streamcoeflower["C_in_li"] <=
var_stream_size["C_in_li"];
var_opunit_size["Coal_furnace"] * p_Streamcoefupper["C_in_li"] >=
```

```

var_stream_size["C_in_li"];
var_opunit_size["Coal_furnace"] * p_Streamcoeflower["C_in_br"] <=
var_stream_size["C_in_br"];
var_opunit_size["Coal_furnace"] * p_Streamcoefupper["C_in_br"] >=
var_stream_size["C_in_br"];
var_opunit_size["Coal_furnace"] * p_Streamcoeflower["C_in_an"] <=
var_stream_size["C_in_an"];
var_opunit_size["Coal_furnace"] * p_Streamcoefupper["C_in_an"] >=
var_stream_size["C_in_an"];
/*the size of the coal furnace is the sum of input stream sizes*/
var_stream_size["C_in_li"] + var_stream_size["C_in_br"] +
var_stream_size["C_in_an"] == var_opunit_size["Coal_furnace"];
/*output stream sizes of pelletizer in the function of input streams*/
var_stream_size["P_out_mp"] == var_stream_size["P_in_st"] +
var_stream_size["P_in_en"] + var_stream_size["P_in_su"];
/*output stream sizes of mixed furnace in the function of input streams*/
var_stream_size["M_out_as"] ==
var_stream_size["M_in_wo"] * p_in_out_params[16] +
var_stream_size["M_in_wp"] * p_in_out_params[17] +
var_stream_size["M_in_mp"] * p_in_out_params[18] +
var_stream_size["M_in_co"] * p_in_out_params[19] +
var_stream_size["M_in_gr"] * p_in_out_params[20];
var_stream_size["M_out_he"] == var_stream_size["M_in_wo"] * p_in_out_params[4] +
var_stream_size["M_in_wp"] * p_in_out_params[5] +
var_stream_size["M_in_mp"] * p_in_out_params[6] +
var_stream_size["M_in_co"] * p_in_out_params[7] +
var_stream_size["M_in_gr"] * p_in_out_params[8];
var_stream_size["M_out_co"] == var_stream_size["M_in_wo"] * p_in_out_params[28] +
var_stream_size["M_in_wp"] * p_in_out_params[29] +
var_stream_size["M_in_mp"] * p_in_out_params[30] +
var_stream_size["M_in_co"] * p_in_out_params[31] +
var_stream_size["M_in_gr"] * p_in_out_params[32];
/*output stream sizes of gas furnace in the function of input streams*/
var_stream_size["G_out_he"] == var_stream_size["G_in_na"] * p_in_out_params[9];
var_stream_size["G_out_co"] == var_stream_size["G_in_na"] * p_in_out_params[33];
/*output stream sizes of coal furnace in the function of input streams*/
var_stream_size["C_out_as"] == var_stream_size["C_in_li"] * p_in_out_params[22] +
var_stream_size["C_in_br"] * p_in_out_params[23] +
var_stream_size["C_in_an"] * p_in_out_params[24];
var_stream_size["C_out_he"] == var_stream_size["C_in_li"] * p_in_out_params[10] +
var_stream_size["C_in_br"] * p_in_out_params[11] +

```

```
var_stream_size["C_in_an"] * p_in_out_params[12];
var_stream_size["C_out_co"] == var_stream_size["C_in_li"] * p_in_out_params[34] +
var_stream_size["C_in_br"] * p_in_out_params[35] +
var_stream_size["C_in_an"] * p_in_out_params[36];
var_stream_size["C_out_su"] == var_stream_size["C_in_li"] * p_in_out_params[46] +
var_stream_size["C_in_br"] * p_in_out_params[47] +
var_stream_size["C_in_an"] * p_in_out_params[48];
/*threshold values for emitted pollutants*/
var_stream_size["C_out_su"] <= 1000;
var_stream_size["M_out_co"] + var_stream_size["G_out_co"] +
var_stream_size["C_out_co"] <= 125000;
/*Size of operating units is 0 if excluded*/
forall (j in Opunits) var_opunit_size[j] <= var_opunit_included[j] * M;
}
```

# Irodalomjegyzék

- [1] Jeffrey J. Sirola. Industrial Applications of Chemical Process Synthesis. In *Advances in Chemical Engineering*, volume 23, pages 1–62. 1996. doi: 10.1016/S0065–2377(08)60201–X.
- [2] Naonori Nishida, George Stephanopoulos, and A. W. Westerberg. A review of process synthesis. *AIChE Journal*, 27(3):321–351, 1981. doi: 10.1002/aic.690270302.
- [3] Jiahong Liu, L. T. Fan, Paul Seib, Ferenc Friedler, and Botond Bertok. Holistic Approach to Process Retrofitting: Application to Downstream Process for Biochemical Production of Organics. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(12):4200–4207, 2006. doi: 10.1021/ie051014m.
- [4] L. T. Fan, Tengyan Zhang, Jiahong Liu, Paul Seib, Ferenc Friedler, and Botond Bertok. Price-Targeting Through Iterative Flowsheet Syntheses in Developing Novel Processing Equipment: Pervaporation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47(5):1556–1561, 2008. doi: 10.1021/ie070976l.
- [5] B. Bertok, M. Barany, and F. Friedler. Generating and analyzing mathematical programming models of conceptual process design by p-graph software. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52:166–171, 2013. doi: 10.1021/ie301155n.
- [6] Gangyi Feng and L. T. Fan. On Stream Splitting in Separation System Sequencing. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 35(6):1951–1958, 1996. doi: 10.1021/ie950549k.
- [7] J.M. Douglas. A hierarchical decision procedure for process synthesis. *AIChE Journal*, 31(3):353–362, 1985. doi: 10.1002/aic.690310302.

- 
- [8] I.E. Grossmann and J. Santibanez. Applications of mixed-integer linear programming in process synthesis. *Computers & Chemical Engineering*, 4(4):205–214, 1980. doi: 10.1016/0098–1354(80)85001–0.
- [9] A. Azapagic and R. Clift. The application of life cycle assessment to process optimisation. *Computers & Chemical Engineering*, 23(10):1509–1526, 1999. doi: 10.1016/S0098–1354(99)00308–7.
- [10] C.A. Petri. *Kommunikation mit Automaten*. PhD thesis, Universität Bonn, 1962.
- [11] S. Gyapay and A. Pataricza. A combination of Petri nets and process network synthesis. In *SMC'03 Conference Proceedings. 2003 IEEE International Conference on Systems, Man and Cybernetics. Conference Theme - System Security and Assurance (Cat. No.03CH37483)*, volume 2, pages 1167–1174. IEEE. doi: 10.1109/ICSMC.2003.1244569.
- [12] S. Gyapay, A. Pataricza, J. Sziray, and F. Friedler. No Title. In *Intelligent Systems at the Service of Mankind. Volume II.*, pages 157–167. Augsburg: UBooks, 2005.
- [13] F. Friedler, K. Tarjan, Y.W. Huang, and L.T. Fan. Combinatorial algorithms for process synthesis, 1992.
- [14] F. Friedler, K. Tarjan, Y.W. Huang, and L.T. Fan. Graph-theoretic approach to process synthesis: Polynomial algorithm for maximal structure generation, 1993.
- [15] F. Friedler, J.B. Varga, and L.T. Fan. Decision-mapping: A tool for consistent and complete decisions in process synthesis, 1995.
- [16] F. Friedler, J.B. Varga, E. Feher, and L.T. Fan. *State of the Art in Global Optimization*, volume 7 of *Nonconvex Optimization and Its Applications*. Springer US, Boston, MA, 1996. doi: 10.1007/978–1–4613–3437–8.
- [17] M.H. Brendel, F. Friedler, and L.T. Fan. Combinatorial foundation for logical formulation in process network synthesis. *Computers and Chemical Engineering*, 24:1859–1864, 2000. doi: 10.1016/S0098–1354(00)00569–X.
- [18] H.J. Huang, S. Ramaswamy, U.W. Tschirner, and B.V. Ramarao. A review of separation technologies in current and future biorefineries, 2008.



- [19] A. Marty, D. Combes, and J.S. Condoret. Continuous reaction-separation process for enzymatic esterification in supercritical carbon dioxide. *Biotechnology and Bioengineering*, 43(6):497–504, 1994. doi: 10.1002/bit.260430610.
- [20] K. Sutherland. Life sciences: Separations in biotechnology. *Filtration & Separation*, 44(6):27–29, 2007. doi: 10.1016/S0015–1882(07)70182–9.
- [21] A. Kostova and H. Bart. Preparative chromatographic separation of amino acid racemic mixturesII. Modelling of the separation process. *Separation and Purification Technology*, 54(3):315–321, 2007. doi: 10.1016/j.seppur.2006.10.002.
- [22] J.C. Brunet and Y.A. Liu. Studies in chemical process design and synthesis. 10. An expert system for solvent-based separation process synthesis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 32(2):315–334, 1993. doi: 10.1021/ie00014a010.
- [23] T. Netterfield and A.K. Sunol. An Expert System for Separation Technology Selection. *AIChE Annual Meeting, New York*, Conference, 1987.
- [24] A.W. Westerberg, G. Stephanopoulos, and J. Shah. The synthesis problem with some thoughts on evolutionary synthesis in the design of engineering systems. *W. R. Spillers: Basic questions of design theory*, 1974.
- [25] J. D. Seader and A. W. Westerberg. A combined heuristic and evolutionary strategy for synthesis of simple separation sequences. *AIChE Journal*, 23(6):951–954, 1977. doi: 10.1002/aic.690230628.
- [26] M. Muraki and T. Hayakawa. Separation process synthesis for multicomponent products. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 17:533–538, 1984.
- [27] Masaaki Muraki, Kenichi Kataoka, and Toyohiko Hayakawa. Evolutionary synthesis of a multicomponent multiproduct separation process. *Chemical Engineering Science*, 41(7):1843–1851, 1986. doi: 10.1016/0009–2509(86)87064–6.
- [28] E.S. Fraga and K.I.M. McKinnon. Process synthesis using parallel graph traversal. *Computers & Chemical Engineering*, 18:S119–S123, 1994. doi: 10.1016/0098–1354(94)80020–0.
- [29] C.A. Floudas. Separation synthesis of multicomponent feed streams into multicomponent product streams. *AIChE Journal*, 33(4):540–550, 1987. doi: 10.1002/aic.690330403.

- [30] I. Quesada and I.E. Grossmann. Global optimization of bilinear process networks with multicomponent flows. *Computers & Chemical Engineering*, 19(12):1219–1242, 1995. doi: 10.1016/0098–1354(94)00123–5.
- [31] I. Heckl, Z. Kovacs, F. Friedler, L.T. Fan, and J. Liu. Algorithmic synthesis of an optimal separation network comprising separators of different classes. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 46:656–665, 2007. doi: 10.1016/j.cep.2006.06.013.
- [32] I. Heckl, F. Friedler, and L.T. Fan. Solution of separation-network synthesis problems by the P-graph methodology. *Computers and Chemical Engineering*, 34(5):700–706, 2010. doi: 10.1016/j.compchemeng.2010.01.019.
- [33] Z. Kovacs, Zs. Ercsey, F. Friedler, and L.T. Fan. Separation-network synthesis: Global optimum through rigorous super-structure. *Computers and Chemical Engineering*, 24(8):1881–1900, 2000. doi: 10.1016/S0098–1354(00)00568–8.
- [34] I. Heckl, F. Friedler, and L.T. Fan. Reduced super-structure for a separation network comprising separators effected by different methods of separation. *Computers and Chemical Engineering*, 33:687–698, 2009. doi: 10.1016/j.compchemeng.2008.08.003.
- [35] J.J. Klemes and S. Pierucci. Emission reduction by process intensification, integration, P-Graphs, micro CHP, heat pumps and advanced case studies. *Applied Thermal Engineering*, 28(16):2005–2010, 2008. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2008.06.010.
- [36] H.L. Lam, P.S. Varbanov, and J.J. Klemes. Optimisation of regional energy supply chains utilising renewables: P-graph approach. *Computers & Chemical Engineering*, 34(5):782–792, 2010. doi: 10.1016/j.compchemeng.2009.11.020.
- [37] D. Yue and F. You. Planning and scheduling of flexible process networks under uncertainty with stochastic inventory: MINLP models and algorithm. *AIChE Journal*, 59(5):1511–1532, 2013. doi: 10.1002/aic.13924.
- [38] F. You, J.M. Pinto, I.E. Grossmann, and L. Megan. Optimal Distribution-Inventory Planning of Industrial Gases. II. MINLP Models and Algorithms for Stochastic Cases. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50(5):2928–2945, 2011. doi: 10.1021/ie101758u.

- [39] F. You and I.E. Grossmann. Stochastic inventory management for tactical process planning under uncertainties: MINLP models and algorithms. *AIChE Journal*, 57(5):1250–1277, 2011. doi: 10.1002/aic.12338.
- [40] R. Karuppiah and I.E. Grossmann. Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. *Computers & Chemical Engineering*, 30(4):650–673, 2006. doi: 10.1016/j.compchemeng.2005.11.005.
- [41] Yin Lun Huang and L. T. Fan. HIDEN: A Hybrid Intelligent System for Synthesizing Highly Controllable Exchanger Networks. Implementation of a Distributed Strategy for Integrating Process Design and Control. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 33(5):1174–1187, 1994. doi: 10.1021/ie00029a014.
- [42] Y. L. Huang and L. T. Fan. Analysis of a Work Exchanger Network. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 35(10):3528–3538, 1996. doi: 10.1021/ie9507383.
- [43] L.R. Partin. Combinatorial Analysis Application for Flowsheet Synthesis of Chemical Plants. *Maple Tech. Newsl.*, 5:15–26, 1998.
- [44] G.E. Keller and P.F. Bryan. Process engineering: Moving in new directions. *Chemical Engineering Progress*, 96(1):41–49, 2000.
- [45] R. Sargent. Process systems engineering: A retrospective view with questions for the future. In *Computers and Chemical Engineering*, volume 29, pages 1237–1241, 2005.
- [46] I. Halim and R. Srinivasan. Systematic Waste Minimization in Chemical Processes. 1. Methodology. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 41(2):196–207, 2002. doi: 10.1021/ie010207g.
- [47] I. Halim and R. Srinivasan. Systematic Waste Minimization in Chemical Processes. 2. Intelligent Decision Support System. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 41(2):208–219, 2002. doi: 10.1021/ie0102089.
- [48] D.Y. Lee, L.T. Fan, S. Park, S.Y. Lee, S. Shafie, B. Bertok, and F. Friedler. Complementary Identification of Multiple Flux Distributions and Multiple Metabolic Pathways. *Metabolic Engineering*, 7(3):182–200, 2005.

- [49] H. Seo, D.Y. Lee, S. Park, L.T. Fan, S. Shafie, B. Bertok, and F. Friedler. Graph-Theoretical Identification of Pathways for Biochemical Reactions. *Biotechnology Letters*, 23(19):1551–1557, 2001. doi: 10.1023/A:1011913225764.
- [50] F. Rossello and G. Valiente. Graph Transformation in Molecular Biology. pages 116–133. 2005. doi: 10.1007/978-3-540-31847-7\_7.
- [51] W. Xu and U.M. Diwekar. Environmentally Friendly Heterogeneous Azeotropic Distillation System Design: Integration of EBS Selection and IPS Recycling. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44(11):4061–4067, 2005. doi: 10.1021/ie049467z.
- [52] J. Tick, Z. Kovacs, and F. Friedler. Synthesis of Optimal Workflow Structure. *Journal Of Universal Computer Science*, 12(9):1385–1392, 2006. doi: 10.3217/jucs-012-09-1385.
- [53] K. Kalauz, Z. Sule, B. Bertok, F. Friedler, and L.T. Fan. Extending process-network synthesis algorithms with time bounds for supply network design. *Chemical Engineering Transactions*, 29:259–264, 2012. doi: 10.3303/CET1229044.
- [54] B. Bertok, K. Kalauz, Z. Sule, and F. Friedler. Combinatorial algorithm for synthesizing redundant structures to increase reliability of supply chains: Application to biodiesel supply. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52(October 2012):181–186, 2013. doi: 10.1021/ie301393d.
- [55] L. Vance, H. Cabezas, I. Heckl, B. Bertok, and F. Friedler. Synthesis of sustainable energy supply chain by the P-graph framework. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52:266–274, 2013. doi: 10.1021/ie3013264.
- [56] Leisha Vance, Istvan Heckl, Botond Bertok, Heriberto Cabezas, and Ferenc Friedler. Designing Energy Supply Chains with the P-graph Framework under Cost Constraints and Sustainability Considerations. pages 1009–1014. 2014. doi: 10.1016/B978-0-444-63455-9.50003-9.
- [57] H. Cabezas, I. Heckl, B. Bertok, and F. Friedler. Use the P-graph Framework to Design Supply Chains for Sustainability. *Chemical Engineering Progress*, 111: 41–47, 2015.

- [58] Z. Sule, B. Bertok, F. Friedler, and L.T. Fan. Optimal design of supply chains by P-graph framework under uncertainties. *Chemical Engineering Transactions*, 25: 453–458, 2011. doi: 10.3303/CET1125076.
- [59] K.H. Kettl, N. Niemetz, N. Sandor, M. Eder, I. Heckl, and M. Narodoslowsky. Regional Optimizer (RegiOpt) - Sustainable energy technology network solutions for regions. In *Computer Aided Chemical Engineering*, volume 29, pages 36–40. 2011. doi: 10.1016/B978-0-444-53711-9.50008-0.
- [60] J.C. Garcia-Ojeda, B. Bertok, and F. Friedler. Planning evacuation routes with the P-graph framework. *Chemical Engineering Transactions*, 29:1531–1536, 2012. doi: 10.3303/CET1229256.
- [61] J.C. Garcia-Ojeda, B. Bertok, F. Friedler, and L.T. Fan. Building-evacuation-route planning via time-expanded process-network synthesis. *Fire Safety Journal*, 61(48): 338–347, 2013. doi: 10.1016/j.firesaf.2013.09.023.
- [62] R.R. Wehe and A.W. Westerberg. An algorithmic procedure for the synthesis of distillation sequences with bypass. *Computers & Chemical Engineering*, 11:619–627, 1986.
- [63] Tomio Umeda, Akira Hirai, and Atsunobu Ichikawa. Synthesis of optimal processing system by an integrated approach. *Chemical Engineering Science*, 27(4):795–804, 1972. doi: 10.1016/0009-2509(72)85013-9.
- [64] Atsunobu Ichikawa and L.T. Fan. Optimal synthesis of process systems Necessary condition for optimal system and its use in synthesis of systems. *Chemical Engineering Science*, 28(2):357–373, 1973. doi: 10.1016/0009-2509(73)80036-3.
- [65] Ignacio E. Grossmann. Mixed-integer programming approach for the synthesis of integrated process flowsheets. *Computers & Chemical Engineering*, 9(5):463–482, 1985. doi: 10.1016/0098-1354(85)80023-5.
- [66] Christodoulos A. Floudas and Spiros H. Anastasiadis. Synthesis of distillation sequences with several multicomponent feed and product streams. *Chemical Engineering Science*, 43(9):2407–2419, 1988. doi: 10.1016/0009-2509(88)85175-3.
- [67] F. Friedler, K. Tarjan, Y.W. Huang, and L.T. Fan. Graph-theoretic approach to process synthesis: axioms and theorems, 1992.

- [68] M. Peters, K. Timmerhaus, and R. West. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. McGraw-Hill chemical engineering series. McGraw-Hill Education, 5th editio edition, 2003.
- [69] R.W. McPherson, C.M. Starks, and G.J. Fryar. Vinyl Chloride Monomer... What you should know. *Hydrocarbon Process*, 75:75–88, 1979.
- [70] W.D. Seider, J.D. Seider, and D.R. Lewin. *Process Design Principles*. John Wiley, New York, 1999.
- [71] A. Lakshmanan, W.C. Rooney, and L.T. Biegler. A case study for reactor network synthesis: the vinyl chloride process. *Computers & Chemical Engineering*, 23(4-5): 479–495, 1999. doi: 10.1016/S0098–1354(98)00287–7.
- [72] F. Borelli. Vinyl Chloride, Vinyl Monomers. In *Encyclopedia of Chemical Processing and Design*, volume 62, pages 313–340. 1997.
- [73] J.A. Cowfer and A.J. Magistro. Vinyl Chloride and Poly (Vinyl Chloride). *Kirk Othmer Encyclopedia*, 23:865–885, 1983.
- [74] Z. Kovacs, F. Friedler, and L.T. Fan. Parametric study of separation network synthesis: Extreme properties of optimal structures, 1995.
- [75] T. Csendes and D. Ratz. Subdivision Direction Selection in Interval Methods for Global Optimization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 34(3):922–938, 1997. doi: 10.1137/S0036142995281528.
- [76] D. Kroshko. [www.openopt.org](http://www.openopt.org), 2012.
- [77] N. Z. Shor and N. Zhurbenko. The minimization method using space dilatation in direction of difference of two sequential gradients. *Kibernetika*, 3:51–59, 1971.
- [78] T. Csendes. Nonlinear Parameter Estimation by Global Optimization - Efficiency and Reliability. *Acta Cybernetica*, 8(4):361–370, 1988.
- [79] T. Csendes. Optimization Methods for Process Network Synthesis - a Case Study. In *In Christer Carlsson and Inger Eriksson (eds.): Global*, pages 113–132. 1998.
- [80] Ministry of National Development. Hungarian National Energy Strategy 2020. Technical report, 2010.