

Intervallum Módszerek Alkalmazása Vegyészmérnöki Számításokban

Baharev Ali

A mindennapos vegyészmérnöki munka során használt modellek megoldása gyakran nemlineáris egyenletrendszerek megoldását igényli. A gyakorlatban alkalmazott numerikus eljárásoknál a következő problémák merülhetnek fel. **(a)** Ha az iterációt több különböző kezdőpontból elindítva sem találunk megoldást divergencia vagy oszcilláció miatt, akkor nem tudjuk, hogy a feladat valóban nem megoldható, vagy csak a kezdőpontot nem megfelelően becsültük. **(b)** Ha a feladatnak nincs megoldása és ennek oka nem triviális, akkor ezt igazolni rendszerint csak a megvalósíthatóság határainak (általában durva közelítéseken alapuló) megkeresésével lehetséges, ha egyáltalán ismert erre kidolgozott elméleti módszertan. **(c)** A véges számábrázolásból fakadó numerikus problémák és / vagy rosszul megválasztott leállási feltétel miatt a kapott végeredmény helytelen lehet, de erről nem szerzünk tudomást. **(d)** Az alkalmazott módszerek egyszerre csak egy megoldás megtalálását teszik lehetővé, és nem szolgáltatnak információt arról, hogy van-e még megoldás. Több megoldás feltérképezése rendszerint részletes esettanulmány fáradságos elkészítését jelenti, ami az előbbi pontokban említett problémák miatt nehézkes, bizonytalan lehet. Az **(a)**-**(d)** problémákkal szembesülhetünk például az azeotrop desztilláció (különösen a heteroazeotrop desztilláció) és a reaktív desztilláció állandósult állapotának számításánál.

A felsorolt problémák mindegyikére megoldást kínálnak az intervallum módszerek. Mivel az intervallum módszerekkel lényegében kimerítő keresést végzünk, ezért nem meglepő, hogy a számítások már kis feladat (például 10 változó és egyenlet) esetén is a gyakorlat számára elfogadhatatlan ideig tarthatnak. Munkám célja az volt, hogy tanulmányozzam és javítsam az intervallum módszerek alkalmazhatóságát vegyészmérnöki feladatok megoldására. Nemlineáris egyenletrendszerek megoldására affin aritmetika és lineáris programozás kombinációján alapuló, általános módszert fejlesztettem ki és implementáltam C++ programozási nyelven [1, 2, 5, 6, 7, 8]. A módszer általános, nemcsak vegyészmérnöki, hanem más tudományterületeken is alkalmazható.

Nem ismert korábbi publikáció desztilláló oszlopok részletes számítására intervallum módszerrel, feltehetően a feladat mérete és bonyolultsága miatt. Folyamatos üzemű extraktív desztilláló oszlop részletes számítását sikerrel végeztem el az elkészült programmal [1, 5, 6, 7]. A konvergencia garantált, nem kell oszlopprofil becsülni. Ha a specifikációk nem teljesíthetők, akkor a módszer ezt igazolja.

Szétválasztó oszlopok lehetséges állandósult állapotainak megbízható felderítése fontos azok tervezésénél, szimulációjánál, üzemeltetésénél és szabályozásánál. Már ideális kétkomponensű elegy desztillációjánál is lehet több állandósult állapota a desztilláló oszlopnak, rögzített műveleti paraméterek mellett. A hagyományos módszerekkel ellentétben az általam javasolt módszer ezek mindegyikét szolgáltatja megoldásként [5, 6, 7].

Az általános kísérleti tervekkel kimutatható legkisebb eltérések meghatározására (nemcentrális F -eloszlás számítására) szolgáló algoritmusok teljesen hibás értéket adhatnak. Megbízható referencia értékek ismerete elengedhetetlen ahhoz, hogy ezen algoritmusok helyességét tesztelhesük. Rámotattam, hogy egy zárt képlettel, véges számú lépésben, viszonylag könnyen számolhatók referencia értékek, ha a próbastatisztika nevezőjének szabadsági foka páros. A módszer lehetővé teszi más algoritmusok gyors, automatizált ellenőrzését széles paraméter-tartományban, erre gyakorlati példákat is bemutattam [3, 4, 9, 10, 11].

Közlemények az értekezés témájában

Angol nyelvű folyóiratcikkek

- [1] **A. Baharev**, T. Achterberg, E. Rév; *Computation of an extractive distillation column with affine arithmetic*; AIChE Journal, *in press*
- [2] **A. Baharev**, E. Rév; *Reliable Computation of Equilibrium Cascades with Affine Arithmetic*; AIChE Journal, 2008, **54** (7), 1782–1797
- [3] **A. Baharev**, E. Rév; *Rigorous enclosures of minimal detectable differences for general ANOVA models*; submitted to Reliable Computing
- [4] **A. Baharev**, S. Kemény; *On the computation of the noncentral F and noncentral beta distribution*; Statistics and Computing, 2008, **18** (3), 333–340

Előadások, konferencia-kiadványok

- [5] **Baharev A.**; *Intervallum módszerek alkalmazása vegyészmérnöki számításokban*; az MTA Vegyipari Műveleti Munkabizottságának, a Műszaki Kémiai Komplex Bizottságának és a Magyar Kémikusok Egyesülete Műszaki Kémiai Szakosztályának együttes ülése; Veszprém, 2009. április 23.
- [6] **Baharev A.**; *Intervallum módszerek alkalmazása vegyészmérnöki számításokban*; Oláh György Doktori Iskola VI. konferenciája, Budapest, 2009. február 4.
- [7] **A. Baharev**, E. Rév; *Comparing inclusion techniques on chemical engineering problems*; 13th GAMM - IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations SCAN'2008; El Paso, Texas, USA, Sept 29 - Oct 3, 2008; pp. 17–18.
- [8] **Baharev A.**, Rév E.; *Egyensúlyi egységek és kaszkádok számítása affin aritmetikával*; Műszaki Kémiai Napok'07, Veszprém, 2007. április 25–27. 105–107. o.
- [9] **Baharev A.**, Kemény S.; *Nemcentrális F-eloszlás számításához kapcsolódó numerikus problémák*; IV. Alkalmazott Informatika Konferencia, Kaposvár, 2005. május 27.
- [10] **Baharev A.**; *Számítások nemcentrális F-eloszlással*; XXVII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia; FiFöMa szekció, Valószínűségszámítás, statisztika és pénzügyi matematika tagozata; 186. o.; Témavezető: Kemény Sándor; III. helyezés, kiemelt dícséret; Budapest, 2005. március 21–23.
- [11] **A. Baharev**; Conference of MSc Students; *On Computing the noncentrality parameter of the noncentral F-distribution*; Supervisor: S. Kemény; Periodica Polytechnica Ser. Chem. Eng. **48** (2), pp. 119–120, 2004

Egyéb közlemények

Előadások, konferencia-kiadványok

- [12] **Baharev A.**, Frits E., Lelkes Z., Rév E.; *Megbízható fázisegyensúlyi számítások*; Műszaki Kémiai Napok'06, Veszprém, 2006. április 25–27. 288–289. o.
- [13] **A. Baharev**, E. R. Frits, Cs. Stéger, Z. Lelkes, E. Rév; *Application of interval arithmetics for exploring feasibility region of extractive distillation*; 10. International Workshop on Chemical Engineering Mathematics; Budapest, Hungary, Aug 18–20, 2005
- [14] E. R. Frits, **A. Baharev**, Z. Lelkes, M. Markót, Z. Fonyó, E. Rév, T. Csendes; *Feasibility Study by interval arithmetics: Application of interval arithmetics for exploring feasibility of extractive distillation variants*; International Workshop on Global Optimization; Almería, Spain, Sep 18–22, 2005 (G05); in Proceedings of the International Workshop on Global Optimization; Ed. I. García et al., pp. 103–108, 2005
- [15] Frits E. R., **Baharev A.**, Rév E., Lelkes Z., Markót M., Csendes T.; *Intervallum-aritmetika alkalmazása vegyipari számítási feladatok megoldására*; Műszaki Kémiai Napok'05, Veszprém, 2005. április 26–28. 216. o.