



---

**BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM  
VEGYÉSZMÉRNÖKI ÉS BIOMÉRNÖKI KAR  
OLÁH GYÖRGY DOKTORI ISKOLA**

**Intervallum Módszerek Alkalmazása  
Vegyészmérnöki Számításokban**

**Tézisfüzet**

**Szerző: Baharev Ali, okleveles vegyészmérnök  
Témavezető: Rév Endre, MTA doktora**

**Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék**

**2009**

## ***Problémafelvetés és célkitűzések***

A mindennapos vegyészmérnöki munka során használt modellek vizsgálata gyakran nemlineáris egyenletrendszerek megoldását igényli. A gyakorlatban alkalmazott numerikus eljárások esetén 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. Alkalmos kezdőpontot választani esetenként igen nehéz.

(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 más megoldás is. Több megoldás feltérképezése rendszerint részletes esettanulmány fáradságos elkészítését jelenti, ami az előbbi pontokban említett problémák miatt nehézkes, bizonytalan lehet.

A fenti problémák mindegyikére megoldást kínálnak az intervallum módszerek. Alkalmazhatóságuknak azonban gátat szab, hogy a számítások már kis feladat (például 10 változó és egyenlet) esetén is a gyakorlat számára elfogadhatatlan ideig tarthatnak. Doktori munkám célja az volt, hogy tanulmányozzam és javítsam az intervallum módszerek alkalmazhatóságát vegyészmérnöki feladatok megoldására. Fontos kritérium volt a kutatás során, hogy a módszer általánosságát megtartsuk, a probléma-specifikus fejlesztéseket mindvégig igyekeztem elkerülni.

## *Irodalmi áttekintés*

A vegyiparban igen széles körben elterjedt szétválasztási művelet a desztilláció, melynek tervezése a mindennapos vegyész-mérnöki munka részét képezi. A szétválasztási folyamatot leíró részletes matematikai modell megoldására számos eljárás született. Mindezek ellenére az azeotrop desztilláció (különösen a heteroazeotrop desztilláció) és a reaktív desztilláció állandósult állapotának számításához kapcsolódó problémák részben máig sincsenek tökéletesen megoldva. Heteroazeotrop desztilláció hagyományos számításánál a bevezetőben foglaltak mellett még egy újabb nehézséggel is szembesülünk, mert a fugacitások egyenlőségét számítjuk, ami az egyensúly szükséges, de nem elégséges feltétele. Ha az iteráció konvergált és numerikus problémák sem léptek fel, akkor ellenőrizni kell a kapott megoldást a fázisok stabilitása szempontjából is, hogy kizárjuk a hamis és triviális megoldásokat. Ez az ellenőrzés egy bonyolult, nem konvex függvény globális szélsőértékének megkeresését igényelné, azonban a hagyományos módszerek csak lokális szélsőértéket garantálnak.

A fázis-stabilitás megbízható ellenőrzése intervallum módszerekkel megvalósítható.<sup>1</sup> A minimalizálandó függvényt konvex függvénnyel alulról közelítő, korlátozás és szétválasztás módszerén alapuló eljárások szintén garantálják a globális optimum megtalálását.<sup>2</sup> Az ún. homotópia-folytatásos módszerek robusztusnak bizonyultak a fázis-stabilitás ellenőrzésére,<sup>3</sup> bár nincs elméleti garancia a globális optimum megtalálására ezekkel a módszerekkel. Többfokozatú szétválasztó rendszerek esetében azonban az ellenőrizendő megoldásokat nehéz megtalálni, vagy ha a feladat nem megoldható, akkor annak igazolása körülményes.

Szétválasztó oszlopok lehetséges állandósult állapotainak megbízható felderítése fontos azok tervezésénél, szimulációjánál, szabályozásánál és üzemeltetésénél. Még professzionális folyamat-szimulátorokkal is nehéz, körülményes a lehetséges állandósult állapotok számítása. A legrobusztusabbnak a homotópia-folytatásos módszereket tartják.<sup>4</sup> A robusztusság oka az, hogy ezek a módszerek általában konvergálnak, és az iteráció kezdőpontját is könnyebb megválasztani, mint más módszereknél. Ezek a módszerek alkalmasak több megoldás megkeresésére is. A homotópia-folytatásos módszerek elméleti

---

<sup>1</sup> M. A. Stadtherr, G. Xu, G. I. Burgos-Solorzano, W. D. Haynes. **2007.** *Reliable Computation of Phase Stability and Equilibrium Using Interval Methods*. Int. J. Reliability and Safety, 1, 465–488

<sup>2</sup> S. T. Harding, C. A. Floudas. **2000.** *Phase Stability with Cubic Equations of State: A Global Optimization Approach*. AIChE Journal, 46 (7), 1422–1440

<sup>3</sup> F. Jalali, J. D. Seader, S. Khaleghi. **2008.** *Global solution approaches in equilibrium and stability analysis using homotopy continuation in the complex domain*. Computers and Chemical Engineering, 32, 2333–2345

<sup>4</sup> D. W. Green, R. H. Perry. **2007.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, McGraw-Hill, Chapter 13, p. 33

háttére és gyakorlati megvalósítása is jól kidolgozott, professzionális szimulátorba is beépítették őket (HYSYS®, *sparse continuation solver*). Több irodalmi példa ismert arra, hogy a homotópia-folytatásos módszerek valamelyik változatával térképezték fel az adott folyamat lehetséges állandósult állapotait, amelyeket korábban nem sikerült megtalálni más módszerekkel.

A módszer változatától függően azonban vagy nincs garancia az összes megoldás megtalálására, vagy már viszonylag kis méretű feladat esetében is kezelhetetlenül sok esetet kellene megvizsgálni. A heteroazeotrop desztillációról született tanulmányok arról számolnak be, hogy a módszer alkalmazása során komoly numerikus nehézségek léptek fel. Ha a feladat nem megoldható, azt igazolni ezzel a módszerrel nem tudjuk. A módszer alkalmazása nagy hozzáértést kíván, továbbá a számítások igen műveletigényesek.

A dinamikus / egyszerűsített dinamikus modellt alkalmazó eljárások is igen robusztusak. Egyszerre csak egy állandósult állapot megtalálása lehetséges, ezért a lehetséges állandósult állapotok feltérképezéséhez esettanulmányt kell készíteni. Az ilyen esettanulmányok készítése fáradságos és bizonytalansággal terhelt a numerikus problémák, valamint a hamis és triviális megoldások miatt (instabil fázisok). A módszer nem ad információt arról, hogy az összes állandósult állapotot megtaláltuk-e. Hátrányt jelent még, hogy a számítások műveletigényesek, és az állandósult állapothoz közeledve nagyon lelassulnak.

A bevezetőben írt problémák mindegyikére megoldást kínálnak az intervallum módszerek. Az intervallum módszerek megbízható módszerek abban az értelemben, hogy

- (i) általános nemlineáris egyenletrendszer adott tartományba eső összes megoldásának megtalálása garantált, szélsőérték-keresési feladat esetén a globális optimum megtalálása garantált;
- (ii) ha nincs megoldás, akkor a módszer ezt igazolja;
- (iii) a konvergencia garantált, nincs szükség kezdőpontra a kereséshez;
- (iv) a módszer automatikusan kezeli a véges számábrázolásból fakadó numerikus problémákat, azaz kizárt, hogy numerikus problémák miatt helytelen megoldást kapjunk.

Az intervallum számítások ezeket a garanciákat konstrukciójuknál fogva tudják biztosítani. Minden paramétert és változót alsó és felső korlát közé, azaz intervallumba zárunk. Minden egyes elemi művelet (aritmetikai művelet és függvények számítása) úgy lett megalkotva, hogy egy művelet eredményeként kapott intervallum teljes bizonyossággal közrefogja az adott műveletnek a kiindulási intervallum(ok)ba eső bármely valós szám(ok)on végrehajtott

eredményét. Ez teszi lehetővé azt, hogy a keresési térből kizárólag olyan részeket vágjunk ki, amelyekben nem lehet megoldás.

Intervallum módszereket a vegyészmérnöki számítások több területén is sikerrel alkalmazták:<sup>5</sup> fázis-stabilitás ellenőrzésére aktivitási együttható modellt, valamint köbös állapot egyenletet használva; elektrolit oldatok folyadék-folyadék egyensúlyának számítására; adott rendszer összes (homogén / reaktív) azeotróp pontjának feltérképezésére; elegyek kritikus pontjának számítására köbös állapotegyenletből; modellparaméterek illesztésre, stb. Újabban nagy érdeklődés mutatkozik (intervallum) paraméteres kezdetiérték- és peremérték-feladatok megbízható megoldása iránt, itt az intervallum módszerek szintén sikeresnek bizonyultak.

A kutatás és fejlesztés egyik legköltségesebb és legmunkaigényesebb lépése a kísérletek elvégzése. Ezért nagy jelentőségű a kísérletek megtervezése matematikai statisztika segítségével. A bevezető (c) pontjában írt, a véges számábrázolásból fakadó problémák az adott kísérleti tervvel – rögzített bizonyosság mellett – kimutatható legkisebb eltérések meghatározására szolgáló algoritmusoknál is jelentkeznek. Emiatt ezek az algoritmusok esetenként teljesen hibás értéket adnak. Az intervallum módszerek a számított végeredmény hibakorlátját automatikusan szolgáltatják, ezáltal kiváló eszközt jelentenek megbízható referenciaértékek számításához.

Az intervallum módszerek alkalmazhatóságának gátat szab, hogy a számítások már kis feladat (például 10 változó és egyenlet) esetén is a gyakorlat számára elfogadhatatlan ideig tarthatnak. Ennek oka részben az ún. függőségi probléma: a változók közötti függőséget a hagyományos intervallum aritmetika közvetlenül nem tudja figyelembe venni. A függőségi probléma következménye, hogy az egyes függvények, részeredmények értékészlete esetenként erősen túlbecsült, és ezért nem tudjuk hatékonyan szűkíteni a keresési teret. A túlbecslés csökkentésére született, hagyományos intervallum aritmetikán alapuló módszerek közül a dekompozíciós technikák<sup>6</sup> és a konzisztencia technikák<sup>7</sup> igen hatékonyak. Egy viszonylag új módszer a függőségi probléma orvoslására az affin aritmetika. Ez a módszer a kiindulási változóktól való lineáris függőséget automatikusan nyomon követi, amire a hagyományos intervallum aritmetika közvetlenül nem képes.

---

<sup>5</sup> Y. Lin, C. R. Gwaltney, M. A. Stadtherr. **2006.** *Reliable Modeling and Optimization for Chemical Engineering Applications: Interval Analysis Approach*. *Reliable Computing*, 12, 427–450

<sup>6</sup> T. Beelitz, A. Frommer, B. Lang, P. Willems. **2005.** *Symbolic-Numeric Techniques for Solving Non-linear Systems*. *PAMM*, 5, 705–708

<sup>7</sup> E. R. Hansen, G. W. Walster. **2004.** *Global Optimization Using Interval Analysis*. Marcel Dekker, Chapter 10.

Az intervallum módszereken alapuló, nemlineáris egyenletrendszerek megoldását célzó eljárások egyik lépése rendszerint a nemlineáris függvények (intervallum) lineáris közrefogása, linearizálása. Az eredeti egyenletrendszerből linearizálással kapott rendszert nevezzük a továbbiakban linearizált rendszernek. A linearizált rendszer megoldáshalmaza az eredeti nemlineáris egyenletrendszer megoldáshalmazát közrefogja. A linearizált rendszer megoldáshalmaza az intervallum Newton módszer esetében általában bonyolult, nemkonvex alakzat. Ezzel szemben az affín aritmetika konvex közrefogó függvényt ad. Ebből több előny is származik, például lineáris programozás közvetlenül alkalmazható a keresési tér szűkítésére.

### *Számítási módszerek*

A gőz-folyadék egyensúlyi egységek és kaszkádok állandósult állapotának számítását a részletes egyensúlyi-, komponens- és hőmérleg-egyenletek (MESH egyenletek) intervallum módszerekkel történő szimultán megoldásával valósítottam meg. A folyadék-folyadék megoszlási feladatok számítását a fázisegyensúly szükséges feltételének, a fugacitások egyenlőségét kifejező egyenletrendszernek direkt megoldásával végeztem, intervallum módszerek alkalmazásával.

A bevezetőben írt problémák megoldására az intervallum módszerek korlátozottan alkalmasak nagy számításigényük miatt. Az irodalomban fellelhető, az intervallum módszerek általános jellegét megtartó és viszonylag könnyen automatizálható fejlesztési javaslatok közül az affín aritmetikára esett a választásom. Az affín aritmetika implementációját C++ programozási nyelven készítettem el. Az implementáció alapjául Stolfi és Figueiredo kiváló monográfiája<sup>8</sup> szolgált, de az újabb kutatási eredményeket is figyelembe vettem.<sup>9</sup> A számításaim során kétfajta linearizálási technikát használtam. Az egyik az affín aritmetikán alapuló linearizálás volt. A másik a széleskörűen elterjedt intervallum Newton módszer volt, ennek implementációját *C-XSC* nevű, C++ programozási nyelven írt osztálykönyvtár biztosította.

Az egyensúlyi kaszkádok állandósult állapotát leíró egyenletrendszert a változók bonyolult, erős függősége jellemzi. Ennek a függőségnek a keresési tér szűkítése során történő kezelésére lineáris programozást választottam. A lineáris programozás alkalmazását

---

<sup>8</sup> L. H. Figueiredo, J. Stolfi. **1997.** *Self-Validated Numerical Methods and Applications*. Brazilian Mathematics Colloquium monographs, IMPA/CNPq, Rio de Janeiro, Brazil

<sup>9</sup> L. V. Kolev. **2004.** *An improved interval linearization for solving non-linear problems*. Numerical Algorithms, 37, 213–224

az affin aritmetika közvetlenül lehetővé is teszi. A lineáris programozási részfeladatok megoldására a GNU GLPK nevű szoftvert használtam, amit ANSI C nyelven írtak.

## ***Eredmények***

### *Zérushelykereső eljárás megvalósítása*

Nemlineáris egyenletrendszerek adott tartományba eső összes megoldásának megkeresésére intervallum módszert dolgoztam ki. A módszer kulcsfontosságú elemei az eredeti nemlineáris egyenletrendszer linearizálása vegyes intervallum-affin aritmetikával (Figueiredo és Stolfi, 1997; 75-76. o.), és a keresési tér szűkítése lineáris programozás segítségével. Több implementációs kérdésre is választ kellett találnom, ez különösen igaz a keresési tér lineáris programozással való szűkítésére. A kutatás eredményeit az **1. tézispontban** összegeztem.

### *Egyensúlyi egységek és kaszkádok, szétválasztó oszlopok számítása*

Gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok, és folyadék-folyadék egyensúlyi egységek számítását két különböző linearizálási technikát használva végeztem el. Az egyik linearizálási technika az intervallum Newton módszer volt

$$f(x) \in A(x-z) + f(z), \quad \forall x \in X,$$

ahol  $f(x)$  a linearizálni kívánt nemlineáris  $\mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$  függvényt jelöli, az  $A$  együttható mátrixnak elemei intervallumok,  $x$  egy tetszőleges valós vektor a változókra adott  $X$  intervallum vektorból,  $z$  pedig az  $X$  egy rögzített belső pontja. Az így kapott linearizált rendszer megoldáshalmaza nemkonvex, továbbá a számított mennyiségek közötti függőségeket is figyelmen kívül hagyja.

A másik linearizálási technika az affin aritmetikán alapuló linearizálás volt

$$f(x) \in A x + \mathbf{b}, \quad \forall x \in X,$$

ahol az előbbi linearizálással szemben az  $A$  együtthatómátrix valós, a  $\mathbf{b}$  intervallum vektort jelöl. Az affin aritmetika automatikusan kezeli a számított mennyiségek kiindulási változóktól való lineáris függését, továbbá konvex közrefogást ad. A kutatás eredményeit a **2. tézispontban** foglaltam össze.

A gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok részletes egyensúlyi-, komponens- és hőmérleg-egyenletei (MESH egyenletek) közötti függőség erős és bonyolult. A lineáris programozás ezt

a függőséget képes kezelni a keresési tér szűkítése során. A megoldandó lineáris programozási részfeladatok (látszólag  $2n$  darab) az alábbiak.

$$\min / \max x_i \quad \forall i\text{-re}$$

*s.t.*

$$A x + b = 0$$

$$x \in X$$

Azt vizsgáltam, hogy a MESH egyenletek megoldása során a lineáris programozás lehet-e hatékony eszköz a szűkítésre, alkalmas implementációval és az affin linearizálási technikát használva. A kutatás eredményeit a **3. tézispont**ban foglaltam össze.

Nem ismert korábbi irodalmi példa desztilláló oszlopok részletes modelljének intervallum módszerrel történő számítására, ennek oka feltehetően a feladat mérete és bonyolultsága. Vizsgáltam, hogy a folyamatos üzemű extraktív desztilláció állandósult állapotát leíró MESH egyenletrendszer az affin aritmetika és lineáris programozás kombinációján alapuló intervallum módszerrel megoldható-e a gyakorlat számára elfogadható idő alatt. A kutatás eredményeit a **4. tézispont**ban foglaltam össze.

Szétválasztó oszlopok lehetséges állandósult állapotainak megbízható felderítése fontos azok tervezésénél, szimulációjánál, szabályozásánál és üzemeltetésénél. A folyadékáramok rendszerint térfogatáramként vagy tömegáramként adóttak a gyakorlatban. A tömegáramok transzformációja molban kifejezett komponensáramokra függ az oszlopban kialakuló összetételektől, és nemlineáris. Ez a transzformáció szingulárisvá válhat, ami multiplicitáshoz és instabilitáshoz vezet, már ideális kétkomponensű elegy esetében is. Ha az anyagáramok moláramban specifikáltak, akkor is szembesülhetünk több állandósult állapottal. Ezt a típusú multiplicitást akkor tapasztalhatjuk, ha az üstből felszálló gőz moláram (ami jó közelítéssel arányos a forralási teljesítménnyel) és a reflux moláram adóttak, és a hőmérleg egyenleteket nem hanyagoljuk el (nem élünk az állandó moláris túlfolyás feltevésével). Vizsgáltam az általam javasolt módszer alkalmazhatóságát több állandósult állapot felderítésére. A kutatás eredményeit a **4. tézispont**ban foglaltam össze.

*Referencia értékek általános kísérleti tervekkel kimutatható eltérésekre*

A kísérlettervezés során felmerülő kérdés, hogy egy adott kísérleti tervvel mekkora hatás mutatható ki rögzített  $\beta$  másodfajú hibavalószínűség mellett. A hatások szignifikanciájának vizsgálatára szolgáló  $F$  próba  $F_0$  próbastatisztikája nemcentrális  $F$  eloszlást követ,  $F_0 \sim F^{nc}(v_1, v_2, \lambda)$ . Itt a  $v_1, v_2, \lambda$  paraméterek rendre a próbastatisztika



számlálójának és nevezőjének szabadsági fokát,  $\lambda$  a nemcentralitási paramétert jelöli, ez utóbbi a faktorok hatásával áll egyértelmű kapcsolatban. A másodfajú hiba elkövetésének valószínűsége

$$\beta = P[F_0 < F_\alpha(v_1, v_2)] = P[F^{\text{nc}}(v_1, v_2, \lambda) < F_\alpha(v_1, v_2)],$$

itt  $F_\alpha(v_1, v_2)$  a  $v_1, v_2$  paraméterű  $F$ -eloszlás  $\alpha$  kvantilise,  $\alpha$  az előírt szignifikancia szint. Innen, felhasználva a nemcentrális  $F$  és béta eloszlások közötti kapcsolatot, a kimutatható legkisebb eltérés számítása az

$$(1) \quad I_z(a, b; \lambda) = \beta$$

egyenlet  $\lambda$ -ra történő megoldását igényli;  $I_x(a, b; \lambda)$  az  $a, b, \lambda$  paraméterekkel nemcentrális béta eloszlást követő valószínűségi változó eloszlásfüggvényét jelöli,  $a = v_1/2$ ,  $b = v_2/2$ ,  $z$  a centrális béta eloszlás  $\alpha$  kvantilise. A számításokra több algoritmus is született, a véges számábrázolásból fakadó problémák miatt ezek teljesen hibás értéket adhatnak. Szükség van tehát megbízható referencia értékekre ahhoz, hogy az ismert algoritmusok helyességét tesztelni tudjuk.

Ha  $b$  egész, akkor

$$(2) \quad I_x(a, b) = x^a \left( 1 + \sum_{n=1}^{b-1} \left( \prod_{m=1}^n \frac{a+m-1}{m} \right) (1-x)^n \right),$$

$$(3) \quad I_x(a, b; \lambda) = e^{-(\lambda/2)(1-x)} \sum_{i=0}^{b-1} \frac{((\lambda/2)(1-x))^i}{i!} I_x(a+i, b-i).$$

A centrális béta eloszlás  $\alpha$  kvantilisét, azaz  $I_z(a, b) = \alpha$  egyenlet megoldását  $z$ -re, a (2) képlettel, egyváltozós intervallum Newton iterációval szűk intervallumba zárjuk. A  $z$ -re így kapott szűk intervallumot (1)-be helyettesítjük, majd (1) megoldását  $\lambda$ -ra szintén egyváltozós intervallum Newton iterációval szűk intervallumba zárjuk, ehhez (2) és (3) képleteket használjuk. Ez utóbbi intervallum Newton iterációval a kimutatható eltérésre megbízható, az elméletileg helyes értéket matematikai bizonyossággal közrefogó intervallumot kapunk. Az eredményeket az **5. tézispont**ban foglaltam össze.

## **Tézisek**

**1. tézis.** 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 hagyományos módszerekkel ellentétben ez a módszer (a) nem igényel kezdőpontot az iterációhoz, (b) garantált a konvergencia, (c) igazolni tudja, ha nincs megoldás, (d) ha a feladatnak több megoldása van, akkor ezeket mind

szolgáltatja. A módszer általános, nemcsak vegyészmérnöki, hanem más tudományterületeken is alkalmazható.

**2. tézis.** Gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok és folyadék-folyadék egyensúlyi egységek számítását elvégeztem az újfajta, affin aritmetikán alapuló módszerrel és az intervallum Newton-módszerrel is. Az affin linearizálási technika – a vizsgált esetekben – az egyszerűbb feladatoknál egy nagyságrenddel, nehezebb feladatoknál több nagyságrenddel bizonyult hatékonyabbnak a hagyományos intervallum Newton módszernél [2, 5, 6, 7, 8].

**3. tézis.** Gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok állandósult állapotát számítottam az affin aritmetika és lineáris programozás kombinációját használva. Megállapítottam, hogy a szűkítés megfelelő implementációja esetén a lineáris programozás hatékony és ajánlható módszer a keresési tér szűkítésére [2, 5, 6, 7, 8]. Nem ismert korábbi irodalmi példa egyensúlyi kaszkádok részletes számítására intervallum módszerrel.

**4. tézis.** Folyamatos üzemű extraktív desztilláló oszlop részletes számítását sikerrel végeztem el az affin aritmetika és lineáris programozás kombinációján alapuló zérushelykereső eljárással [1, 5, 6, 7]. A konvergencia garantált, nem kell oszlopprofil becsülni. Ha a specifikációk nem teljesíthetők, akkor a módszer ezt igazolja. Lehetséges intervallum specifikációkat is előírni (például a desztillátumban a célkomponens moltörtje legyen *legalább* 0.92), ez hagyományos módszereknél nem, vagy csak körülményesen lehetséges. Nem ismert korábbi publikáció desztilláló oszlopok részletes számítására intervallum módszerrel, feltehetően a feladat mérete és bonyolultsága miatt.

Szétválasztó oszlopok lehetséges állandósult állapotainak megbízható felderítése fontos azok tervezésénél, szimulációjánál, szabályozásánál és üzemeltetésénél. 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].

**5. tézis.** Az általános kísérleti tervekkel kimutatható legkisebb eltérések meghatározására szolgáló algoritmusok teljesen hibás értéket adhatnak. Megbízható referencia értékek ismerete elengedhetetlen ahhoz, hogy ezen algoritmusok helyességét tesztelhesük. Rámutattam, 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].

## ***Alkalmazási lehetőségek***

Az 1. tézispontban hivatkozott, nemlineáris egyenletrendszerek megoldására kidolgozott módszer általános, más tudományterületeken is alkalmazható. A jelenlegi C++ implementáció modellező környezethez csatolása a használatot nagyban megkönnyítené: lehetővé tenné azt, hogy az intervallum számításokban vagy a C++ programozási nyelvben nem jártas felhasználók is alkalmazhassák feladataik megoldására.

A gőz-folyadék-folyadék (VLLE) egyensúlyi egységek kaszkádjának számítása ugrásszerűen nehezebb, mint a gőz-folyadék egységek számítása. Jelenleg is folyamatban lévő, nemzetközi kapcsolatokra is támaszkodó kutatás a VLLE kaszkádok számításának megvalósítása intervallum módszerrel. Ettől a kutatástól részben azt is reméljük, hogy a különböző intervallum módszereken alapuló linearizálási technikákat jobban megértjük, és a hozzájuk kapcsolódó nyitott kérdésekre legalább részben választ tudunk adni.

Az 5. tézispontban hivatkozott módszerrel mutattam rá arra, hogy a hagyományos lebegőpontos számításokkal végzett algoritmusok pontosságát nem lehet megítélni úgy, hogy a velük kapott eredményeket egymáshoz és nem a megbízható referencia értékhez hasonlítjuk. Az 5. tézispontban írt módszer könnyű megvalósíthatóságánál fogva alkalmas arra, hogy a kísérlettervezés számára fontos algoritmusok pontosságát ellenőrizhessük.

## ***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* (IF: 1.607)
- [2] **A. Baharev**, E. Rév; *Reliable Computation of Equilibrium Cascades with Affine Arithmetic*; AIChE Journal, 2008, **54** (7), 1782–1797 (IF: 1.607)
- [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 (IF: 1.136)

### *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 díjszerűt; 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.