

A számítástechnika kémiai alkalmazása

Szerkeszti: BAKOS MIKLÓS

Számítási algoritmus, számítási folyamatábra

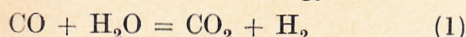
ESZTERGÁR ZSOLT* –
MEZEI MIHÁLY*

A következő cikkben az Algol programozási nyelvvel fogjuk megismertetni az olvasót. Az egyes fogalmakat egy konkrét feladat megoldására szolgáló program segítségével fogjuk illusztrálni. (A példa *J. Kjaer*: Basic Algol c. könyvében [1] leírtak alapján készült). A jelen cikkben ismertetjük a feladatot, kidolgozzuk a feladat megoldásának menetét, amúgy „vegyésmódra”, majd a számítógép adta lehetőségekre és korlátozásokra gondolva módosítunk valamit észjárásunkon.

A feladat megfogalmazása, alapadatai

Kiszámítandó, hogy mekkora lesz 450 °C hőmérsékleten és légköri nyomáson annak az egyensúlyi gázelegynek az összetétele, mely egy mól szén-monoxid és kilenc mól vízgőzből alakul ki arra alkalmas kontakt katalizátoron.

A vízgázreakció sztöchiometriai egyenlete:



A reakció egyensúlyi állandója:

$$K = \frac{m_{\text{CO}_2} \cdot m_{\text{H}_2}}{m_{\text{CO}} \cdot m_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (2)$$

ahol m az indexszel jelölt komponens móltörtje az egyensúlyban.

Az egyensúlyi állandó 450 °C hőmérsékleten:

$$K = 7,37 \quad (3)$$

A megoldás menete

A sztöchiometriai egyenletből következik, hogy az egyensúlyi elegyenben a komponensek móltörtje:

$$\left. \begin{aligned} m_{\text{CO}} &= 0,1 - \Delta \\ m_{\text{H}_2\text{O}} &= 0,9 - \Delta \\ m_{\text{CO}_2} &= \Delta \\ m_{\text{H}_2} &= \Delta \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

ahol Δ a reakció előrehaladását jellemző mennyiség.

Helyettesítsük a (4) összefüggéssorozatot az egyensúlyi állandó (2) kifejezésbe:

$$K = \frac{\Delta^2}{(0,1 - \Delta)(0,9 - \Delta)} \quad (5)$$

innen

$$\left. \begin{aligned} K(0,1 - \Delta)(0,9 - \Delta) &= \Delta^2 \\ 0,09K - 0,1K\Delta - 0,9K\Delta + K\Delta^2 &= \Delta^2 \\ (K - 1)\Delta^2 - K\Delta + 0,09K &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

A reakció előrehaladása tehát:

$$\Delta = \frac{K + \sqrt{K^2 - 0,36(K^2 - K)}}{2(K - 1)} \quad (7)$$

Ebből a (3) figyelembevételével:

$$\left. \begin{aligned} \Delta_1 &= 1,0586 \\ \Delta_2 &= 0,0983 \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Mivel Δ_1 nagyobb 1-nél, nincs fizikai értelme, így a reakció előrehaladása:

$$\Delta = 0,0983 \quad (9)$$

Ha azt (4)-be helyettesítjük, megkapjuk a keresett egyensúlyi összetételt:

$$\left. \begin{aligned} m_{\text{CO}} &= 0,0017 \\ m_{\text{H}_2\text{O}} &= 0,8017 \\ m_{\text{CO}_2} &= 0,0983 \\ m_{\text{H}_2} &= 0,9883 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Néhány elvi megfontolás

Az ismertetett feladat megoldása a vegyész számára nem okoz semmiféle nehézséget. A megoldás gondolatmenete teljesen kézenfekvő, a legnehezebb matematikai feladat egy másodfokú egyenlet megoldása, s az egyenlet két gyöke közötti választás fizikai tartalmának mondanivalója szerint teljesen egyértelmű.

Tulajdonképpen semmi más tennivaló nincs, mint a megoldás gondolatmenetének megfelelő programot írni, és segítségével a számítást számítógépen lebonyolítani. Mielőtt azonban ehhez hozzánk kezünk, érdemes néhány dolgot megjegyezni.

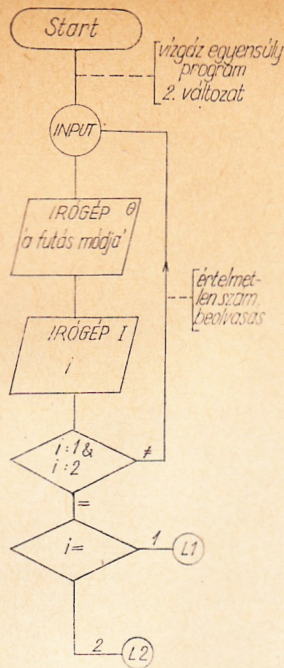
1. Ha valakinek ez a feladat ad hoc és várhatóan egyszer fordul elő a praxisában, annak nem érdemes a feladatot gépre vinnie, hiszen az papíron ceruzával néhány perc alatt megoldható. Ellenben, ha ezt a feladatot sok konkrét esetre kell alkalmazni, — például vízgázkonverter számítása során — annak úgy kifizetődő a géprevitel, ha a megoldó programot nem konkrét, hanem általános alakban fogalmazza meg. Ezen most két dolgot értünk:

a) legyen a bemenő gáz összetétele tetszésszerű (vagyis a program ne csak 0,1 mól CO és 0,9 mól H₂O esetében legyen használható).

b) legyen az egyensúlyi hőmérséklet tetszés szerinti (vagyis a program ne csak 450 °C-ra legyen érvényes).

Az *a*) igény azt jelenti, hogy a reakcióelegy négy komponens móltörtjének kiinduló értéke a feladat paramétere lesz s ezeket változókként kezeljük. Jelöljük ezeket éppen úgy mint a változókat, a

* Magyar Vegyipari Egyesülés Mérnöki Irodája, Budapest



1. ábra. Vizgázegyensúly programjának 2. változata

* indexszel kiegészítve. Akkor (5) egyenletünk a következőképpen alakul:

$$K = \frac{(m_{CO_2}^* + \Delta)(m_{H_2O}^* + \Delta)}{(m_{CO}^* - \Delta)(m_{H_2O}^* - \Delta)} \quad (11)$$

2. Itt rögtön egy technikai természetű megjegyzést teszünk. A kidolgozott programot lyukszalag-írógépen lemásoljuk, hogy a lyukszalagot a számítógép beviteli egységébe befűzve, betáplálhassuk a programot a számítógépbe. Ezért olyan jelöléseket kell a programban használni, amelyeket az írógépen le lehet írni. Szándékosan használtunk (11-ben) legépelhetetlen jeleket. Pl: $m_{CO_2}^*$ kétszer felsoros soremelést igényelne, a * jel hiányzik az írógépről. Mivel teljesen lényegtelen, hogy egy változót miképpen jelölünk, jelöljük például a széndioxid mólszámát így: MCO_2 , míg a görög betűt írjuk: delta. A celsiusban mért hőmérséklet jele legyen: t.

3. A program általános jellegét az biztosítja, ha (11)-ben nem az egyensúlyi állandó szerepel paraméterként, hanem a hőmérséklet, hiszen

$$K = K(t) \quad (12)$$

Ezt a függvényt kell a maga konkrét alakjában programunkban elhelyezni. Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggvénye a következő alakban áll rendelkezésre:

$$\ln(K) = 0,768 \times \ln(T) + \frac{10}{10} - 10 \times 1,4752 \times T - \frac{10}{10} - 7 \times 9,6605 \times T + \frac{10}{10} - 3 \times 3,012 \times T - 1,5065 + 4943,3/T \quad (13)$$

Azt látjuk, hogy itt kelvinben mért hőmérséklet szerepel, a feladatban pedig a celsiusfokban kifejezett. Tudomásul vesszük, hogy a mérőszám átszámítást:

$$T = t + 243,16 \quad (14)$$

meg kell majd valósítanunk.

Mivel (11) baloldalán K szerepel, alakítsuk át (13) egyenletünket:

$$K = \exp(-0,7685 \times \ln(T) + [(10 - 10 \times 1,4752 \times T - 10 - 7 \times 9,6605) \times T + 10 - 3 \times 3,012] \times T - 1,5065) \times T + 4943,3 / T)$$

Látjuk, hogy K explicit kifejezésén kívül kiemelés is végrehajtottunk. Ez ugyan a képletet látszólag bonyolítja, de hamar észre lehet venni, hogy az ily módon felírt kifejezés kiszámításához lényegesen kevesebb műveletet kell végrehajtanunk, mint az eredeti alakkal való számítás esetén. Érdeemes megjegyezni, hogy általában, ha egy n -ed fokú polinom értékét kell kiszámítani, a direkt kiszámítás esetén n összeadást, és $n-1$ hatványozást kell végrehajtani, míg ha a fenti kiemeléseket végrehajjtjuk (vagyis az ún. Horner-sémával számolunk), az n összeadás mellett csupán $n-1$ szorzást kell elvégeznünk.

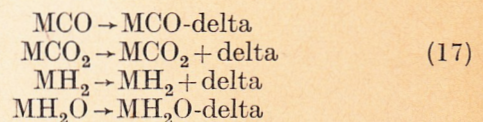
Az ilyen és ehhez hasonló fogások természetesen csak számítástechnikai jelentőségűek, a megoldás elvén nem változtatnak.

4. Észrevettük, hogy a másodfokú egyenlet megoldása során két gyököt kapunk, és a két gyök közül fizikai megfontolások alapján választottuk ki a valódit. A gép „trotlisága” miatt azonban nem képes fizikai megfontolásokra, tehát igen körültekintően, megfelelő logikai vizsgálatokat kellene végeztetni a géppel, hogy a megfelelő gyököt ki tudjuk választani. Ennek elkerülésére a gépi számításokor egy másik algoritmust célszerű használni. Ennek az a lényege, hogy a számítás egy fizikailag realizálható állapotból indul ki, lépésről lépésre halad a megoldás felé (iterál), de minden lépése olyan, hogy az az előző állapotból fizikailag megvalósítható. Ezzel biztosítottuk, hogy fizikai értelemmel bíró megoldást kapunk végeredményül is.

Az eljárás abból indul ki, hogy ha delta értéke kicsi, delta² már elhanyagolható lesz delta mellett (delta = 0,001 esetén delta² = 0,000001). Ezért ha az egyensúlyi egyenletből úgy fejezzük ki deltát, hogy delta²-es tagokat elhanyagoljuk, akkor a kifejezés már elég pontos lesz abban az esetben, ha a móltörtök már közel vannak az egyensúlyihoz.

$$\text{delta} = \frac{K \times MCO \times MH_2O - MCO_2 \times MH_2}{K \times (MCO + MH_2O) + MCO_2 + MH_2} \quad (16)$$

Minden számítási lépésben a móltörtöket ezzel az értékkel változtatjuk:



Ez tehát fizikailag értelmes, megvalósítható állapotot jelent.

Ha az elhanyagolást nem végeztük volna, akkor az első lépésben már eljutottunk volna az egyensúlyi móltörthöz, így viszont csak közelítést kapunk az egyensúlyi értékekre, amelyet tovább kell finomítanunk.

A következő lépésben delta értékét az új móltörtökkel számoljuk, és a számítást addig folytat-

jük (addig végezzük az újabb és újabb lépéseket), amíg delta értéke a koncentrációra megkívánt pontosság értéke alá nem süllyedt. Ahhoz azonban, hogy biztosak lehessünk az egyes lépésekben kapott móltörtök fizikai realizálhatóságában, be kell bizonyítanunk, hogy a deltára kapott (16) képlet nem ad olyan értéket, amelyet a CO_2 , ill. H_2O móltörökből levonva negatív számot, a CO_2 , ill. H_2O móltörtökhöz hozzáadva 1-nél nagyobb számot adna.

A bizonyítás elvégezhető, de viszonylag hosszú, ezért itt nem közöljük.

A programok

A feladat megoldására a fent vázolt módszer alapján két programot írtunk. Az első az Algol nyelvnek csupán legegyszerűbb elemeit használja, a másodikban viszont a nyelv bonyolultabb eszközeinek felhasználására igyekeztünk példákat mutatni. A két program működése abban különbözik egymástól, hogy az 1. változat mindössze írógépről beolvassa a hőmérséklet és koncentráció adatokat, majd írógépre írja ki az egyensúlyi koncentrációkat, a 2. változat viszont kétféleképpen is használható:

Az első módon használva írógépen meg kell adni, hogy hány adatrendszert kívánunk számoltatni, ezután a gép ezeket papírszalagról beolvassa, majd egymásután kiszámítja az egyensúlyi értékeket, és sornymotatón kiírja. A második módon használva írógépen kell megadni a négy koncentráció adatot, a program 400, 425, 450, 475, 500 °C hőmérsékleten kiszámítja az egyensúlyi koncentrációkat, és sornymotatón kiírja azokat. Azt, hogy a programot milyen módon kívánjuk használni, egy — a számítás indulásakor — írógépen beírt szám (mely 1 vagy 2 lehet) határozza meg.

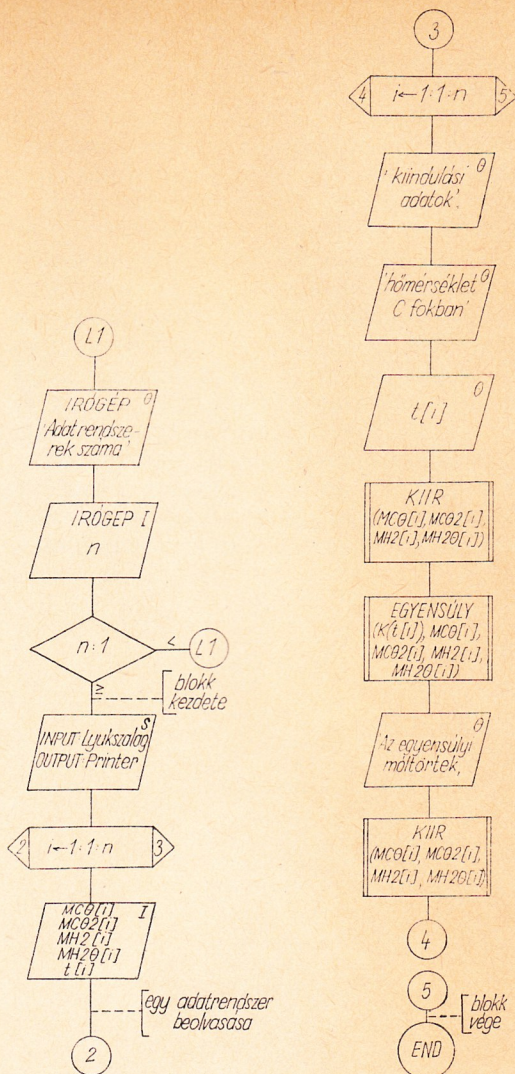
Ezt a két programot az Algol nyelv ismertetése után fogjuk közölni.

Számítási folyamatábra

Miután megbeszéltük, hogy miképpen oldjuk meg a feladatot és mielőtt hozzákezdénénk egy már megírt program olvasásához, célszerűnek mutatkozik, ha előbb a komplikáltabb 2. program lényeges lépéseit feltüntető egyezményes jelképekből felépített számítási folyamatábrát mutatjuk meg. A számítási folyamatábra elkészítése tulajdonképpen a program felvázolása: a program terve.

A folyamatábra (amelyet felülről lefelé olvasunk) felsorol minden elvégzendő számítási tevékenységet, mégpedig ezek sorrendjére vonatkozó megállapításokkal együtt.

Az 1. ábrán az első egyezményes jelkép a START szót tartalmazza. Ez egyelőre csak annyit jelent, hogy minden programnak van kezdete (és persze vége is). A kezdetet vagy véget jelző egyezményes elkép után az INPUT szót tartalmazó kör a következő egyezményes jelkép. A kör mindig kapcsolót jelent, amelynek elnevezését beleírtuk. Az ábrán látható következő jelkép: az ÍRÓGÉP feliratú trapéz. A trapéz mindig input vagy output műveletet jelent. Az aktuális esetben a trapéz jobb



2. ábra. Az L1 kapcsolónál kezdődő programrész folyamatábrája

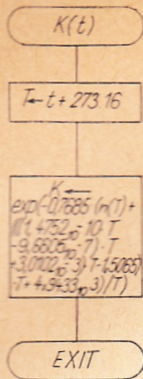
felső sarkában levő outputra utaló 0 jel azt jelenti, hogy az írógépen megjelenik valami közlés. Hogy mi, az is látható a trapézban:

„a futás módja”

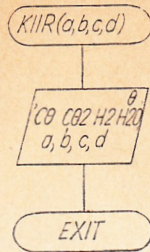
szöveget írja le az írógép. Ez az a szöveg, amely azt jelenti, hogy a program felhasználójának most közlést kell adnia arról, hogy az 1. vagy a 2. futási módot választja az imént említett lehetőségek közül. Legegyszerűbb, ha az írógépet használja fel e közlés megtételére. Ez input művelet lesz, tehát a folyamatábrán megjelenik a következő trapéz, felső sorában az ÍRÓGÉP szöveggel, felső jobb sarkában az inputra utaló I jellel. Az alsó sorban egy i betű azt mutatja, hogy az i aktuális értékét kell az írógépen leütöni. Ezzel meg is adtuk a választott futási módot.

A program felhasználója ilyen-olyan oknál fogva a futási mód megadásakor tévedhet. A program készüljön fel a tévedés kivédésére és hívja fel a figyelmet a tévedésre. Legegyszerűbben ezt úgy lehet megtenni, hogy a futás módjának írógépi közlése után vizsgálatot iktatunk közbe.

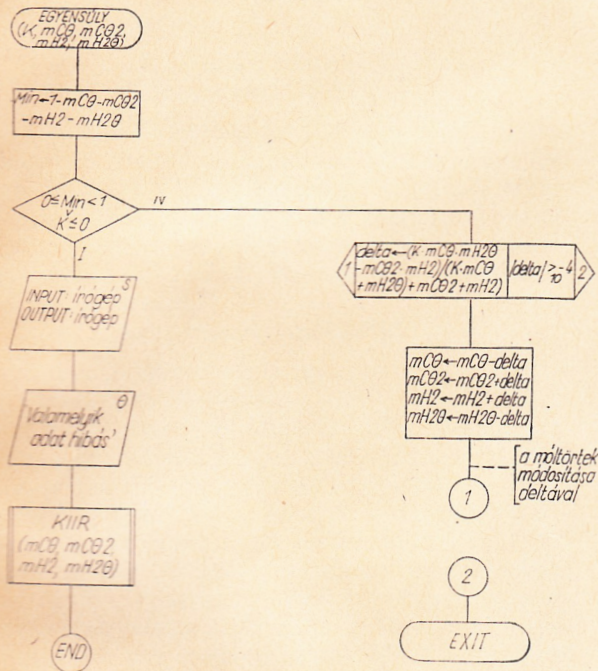
A következő jelkép, a csúcsára állított rombusz mindig vizsgálatot, összehasonlítást jelen. Aktuális esetben azt, hogy vajon a futás módja 1. vagy



3. ábra. Az egyensúlyi állandók számításának folyamatábrája



4. ábra. A KIIR eljárás folyamatábrája



5. ábra. Az EGYENSÜLY eljárás folyamatábrája

2. Bármilyen más jelet ütött le a program felhasználója, az értelmetlen szám beolvasás, amivel a program nem tud mit kezdeni. Mi legyen ilyenkor — kezdődjék újra a játék, vagyis térjünk vissza az INPUT-hoz. Ezzel a felhasználó új lehetőségeket kapott arra, hogy nyilatkozzék a futás módjáról. Ha a vizsgálat nem talál értelmetlen szám beolvasást, akkor most a választott futási mód szerint (lásd ismét a csúcson álló rombuszt) halad tovább a számítás. Ha $i=1$, akkor az L_1 jelű kapcsolónál, ha $i=2$, akkor pedig az L_2 jelű kapcsolónál kezdődik a folytatás.

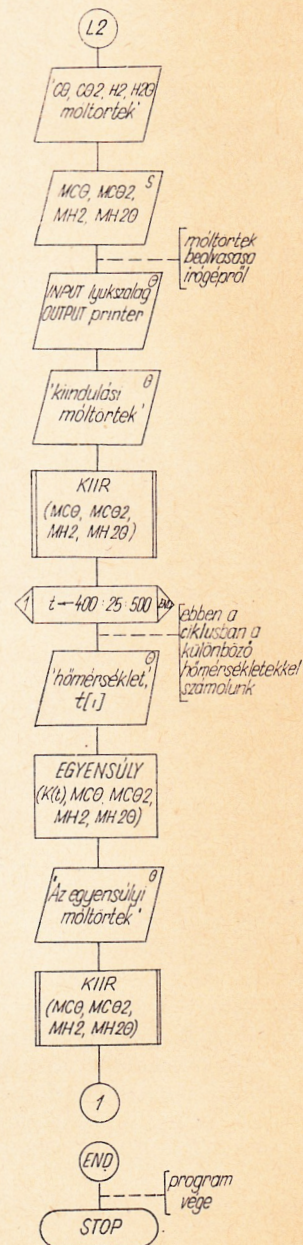
A 2. ábrán dolgozzuk ki az L_1 kapcsolónál kezdődő programrész folyamatábráját. Itt, mint mondtunk az imént, arról van szó, hogy az írógépen megadjuk, mennyi az adatrendszerek száma, majd előkészített lyukszalagról a gép ezeket az adatrendszereket beolvassa, azután egymás után kiszámítja az egyensúlyi értékeket és ezeket végül a sornymutatón kiírja. A folyamatábra szerint írógépen kérjük az

„Adatrendszerek száma”-t,

erre írógépen megadjuk az adatrendszerek számát. Ha ez 1-nél kisebb, L_1 -nél a ciklus újratekődik, ha egynél nagyobb, új blokkot kezdünk, melyben az adatrendszereket lyukszalagról (ezt jelenti a trapéz jobb felső sarkában az S betű) beolvassuk.

Az adatrendszereket egymásután olvassuk be, vagyis ugyanazt a műveletet kell egymás után n -szer megismételni. Ezt a ciklust jelöljük a folyamatábrán most következő jelképpel: téglalap amelynek jobb, ill. bal oldalai egyszersmind egy-egy háromszögnek is oldala. A háromszögekbe írt szám (ezúttal 2, ill. 3) egy-egy kapcsolót jelent. A téglalapon jelöltük azt, hogy egymásután n adatrendszert olvasunk be.

Mi egy-egy adatrendszer tartalma? Ezt a következő trapézban soroljuk fel. Egy adatrendszer beolvasása után a 2 kapcsolóhoz jutunk és beolvassuk a következő adatrendszert. Az n -edik adat-



6. ábra. A 2. futásmód folyamatábrája

rendszer beolvasása után a ciklusból kilépünk és a ciklus jelképi ábráján jobb oldalt látjuk, hogy a 3 kapcsolónál folytatódik a program.

Nyilvánvaló, hogy most fel kell dolgozni a beolvasott és egyelőre tárolt adatrendszereket. Az is nyilvánvaló, hogy megintcsak egymás után valósíthatjuk meg a feldolgozást, összesen n alkalommal, tehát ismét egy ciklus következik.

Gondoljuk meg mit is akarunk!

Írassuk vissza a kiindulási adatokat, számítsuk ki az adatrendszerhez tartozó egyensúlyi adatokat és ezeket is írassuk ki. Célszerű lesz a kiíratásra és az egyensúly számításra egy-egy eljárást megkomponálnunk. Ezzel egyelőre ráérünk, de feltételezve, hogy ezek azonosító elvezése KIÍR, ill. EGYENSÚLY lesz, már tovább folytathatjuk a folyamatábra kidolgozását. A ciklusban kinyomtatjuk a következő szöveget:

„Kiindulási adatok
Hőmérséklet C fokban”

majd a hőmérsékletet C fokban és a KIÍR eljárás segítségével rendre a kiinduló móltörteket. Ezt követi az EGYENSÚLY eljárás, amellyől elvárjuk, hogy számítsa ki korábbi megfontolásainknak megfelelően az adatrendszernek megfelelő egyensúlyi móltörteket. Ezután kinyomtatjuk a következő szöveget:

„Az egyensúlyi móltörtek”,

majd a KIÍR-eljárás segítségével kiíratjuk rendre az egyensúlyi móltörteket.

Egy adatrendszer feldolgozása után a 4 kapcsolóhoz jutunk és feldolgozzuk a következő adatrendszert. Az n -edik adatrendszer feldolgozása után a ciklusból kilépünk és az 5 kapcsolónál folytatódik a program. Azonban nincs mivel, hiszen az 1. futásmód szerint kitűzött feladatot megoldottuk: END. Az END azonosító után következik a program végének jelzése: STOP. A 2. futásmód folyamatábrájáról még nem esett szó. Mielőtt erre sort kerítünk tervezzük meg rendre az eljárások folyamatábráját.

Az 3. ábra egy rövid eljárás: az egyensúlyi állapotok számításának folyamatábrája. Megértéséhez a „Néhány elvi megfontolás” fejezet 3. pontjában mondottak elegendőek.

A 4. ábra a KIÍR eljárás folyamatábrája. Azt mondja csupán, hogy a komponensek móltörtjének aktuális értékét milyen fejléc alatt kívánjuk kiíratni.

Az EGYENSÚLY eljárás folyamatábráját az 5. ábra mutatja. Érdemes ezt az eljárást két adatellenőrző vizsgálattal kezdeni. Ha egy adatrendszerben a móltörtök összege nem egy, vagy az egyensúlyi állandó értéke negatív, írógépén kiíratjuk a következő szöveget:

„Valamelyik adat hibás”

majd a KIÍR-eljárással a kiindulási móltörteket.

Ha az adatellenőrző vizsgálat nem derített fel hibát, kiszámítjuk az egyensúlyi móltörteket „Néhány elvi megfontolás” c. fejezete 4. pontjában mondott módon. A ciklusból akkor lépünk ki, ha delta abszolút értéke tízezred alá csökken.

Az eljárások folyamatábrájának megtervezése után térjünk át a 2. futásmód folyamatábrájának kidolgozásához. Javaslatunk a 6. ábrán látható és nem igényel kommentárt.

IRODALOM

[1] *Kjaer J.*: Basic Algol, 2nd ed. Haldor Topsøe, Vedbaek 1968.

РЕЗЮМЕ

В сообщении разработана задача из практики химической технологии, решение которой разбито на такие шаги, которые уже поддаются решению с помощью ЭВМ.

SUMMARY

A problem arising in the practice of chemical engineering is elaborated and the solution offered is analysed reducing it into steps which are convenient for computing.

Új gépek és készülékek

Szivattyú hordó ürtítésre

A vegyipari üzemvitel egyik nagy problémája a hordós tételben felhasznált robbanásveszélyes vagy mérgező anyagok adagolása, hordó ürtítése. E probléma megoldására fejlesztettek ki egy speciális 50 liter/min teljesítményű szivattyút. A szivattyú csatlakozó része megegyezik a hordó ürtítő csomagtárolójának méretével. A berendezésbe szűrőt, ellenőrző szelepet, úszó alumínium forgórészt, amely megakadályozza a szívócső eltömődését légbeszívó szelepet mennyiségmérőt építettek bele. A szivattyú használatával a hordók ürtítésénél fellépő balesetveszély teljesen megszüntethető.

A hordó záró kupakjának helyére beillesztve a szivattyú szívó csövét és azt légmentesen zárva, a berendezés használatra kész. A szivattyú indítása után a mérgező vagy robbanásveszélyes anyag a szívócsövön, szűrőn keresztül jut a szivattyúba, ahonnan a mérés után a felhasználás helyére továbbítható. A szívócsőben helyezkedik el a légbeszívó szelep, mely megakadályozza a dob, hordó vákuum alá helyezését és egyben a mérgező levegő kiáramlását is.

A szivattyút jelenleg a 2" méretű hordó csatlakozáshoz készítik.

[Chem. Eng. 79., 36. (1972)]

J. Á.