Ενότητα 4

Παραμετρική αριστοποίηση και αλγόριθμος LCR

4.1 Εισαγωγή

Στην προηγούμενη ενότητα είδαμε παραδείγματα αντικειμενικών συναρτήσεων που μπορούμε να χειριστούμε ποσοτικά με κατάλληλες μαθηματικές εκφράσεις. Αυτές ήταν χρηματοοικονομικές συναρτήσεις και επελέγησαν για δύο λόγους:

α) Το ιδιωτικό οικονομικό κέρδος είναι βασική μέριμνα στο σημερινό σύστημα οργάνωσης της παραγωγής. Μερικές από τις συχνότερα απαντώμενες αντικειμενικές συναρτήσεις σε προβλήματα σχεδιασμού διεργασιών σχετίζονται με αυτό.

β) Όταν έχουμε να κάνουμε με οικονομικά μεγέθη, είναι εύκολο να ποσοτικοποιήσουμε το πρόβλημα διατυπώνοντάς το με αρκετά απλές μαθηματική εκφράσεις και να επωφεληθούμε από αυτό για να δούμε με σαφήνεια ποιες λύσεις ή σενάρια πλεονεκτούν. Σε αυτό οφείλεται και η διάδοση της μεθόδου Ανάλυσης Κόστους-Οφέλους που είδαμε στην προηγούμενη ενότητα.

Αυτή η σαφήνεια δεν είναι εύκολο να επιτευχθεί για όλες τις περιπτώσεις. Το πρόβλημα της δομικής αριστοποίησης δεν είναι τόσο απλό όσο αυτό της παραμετρικής και τα προβλήματα της ασφάλειας και υγιεινής στον εργασιακό χώρο, επίσης δε μπορούν να διατυπωθούν εύκολα ως μαθηματικά μοντέλα. Γι' αυτούς και για άλλους λόγους που έχουν να κάνουν με την πολυπλοκότητα που συνήθως χαρακτηρίζει τα μοντέλα των διεργασιών, την ανάγκη λήψης αποφάσεων σε εύλογο χρονικό διάστημα και την αδυναμία πλήρους τυποποίησης του προβλήματος του σχεδιασμού, καταφεύγουμε συχνά σε εμπειρικούς κανόνες (rules of thumb) που συμπυκνώνουν τη γνώση και πείρα την κατακτημένη από πολλά χρόνια χρήσης μιας διεργασίας. Σε αυτή και τις επόμενες δύο ενότητες εξετάζουμε το πρόβλημα της αριστοποίησης στη γενικότητά του, τόσο από αυστηρή μαθηματική σκοπιά όσο και από την αντίστοιχη εμπειρική.

4.1.1. Τα είδη αριστοποίησης

Έχουμε αναφερθεί ήδη αρκετές φορές στην παραμετρική και τη δομική αριστοποίηση. Στην πρώτη περίπτωση έχουμε ένα δεδομένο διάγραμμα ροής, δηλαδή μια συγκεκριμένη δομή της παραγωγικής διαδικασίας που υπαγορεύει συγκεκριμένα ισοζύγια μάζας και ενέργειας. Αυτά αποτελούν το μαθηματικό μοντέλο της διεργασίας και επιβάλλουν περιορισμούς ως προς την αριστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης που εκφράζει το πρόβλημα. Εκτός από τα ισοζύγια που συνδέουν τις διεργασίες, στο μοντέλο μπορεί να υπάρχουν και εξισώσεις για την περιγραφή κάθε διεργασίας χωριστά (ισορροπία φάσεων, εξισώσεις μεταφοράς μάζας, θερμότητας, ορμής, χημική κινητική, διαστασιολόγηση, κοστολόγηση).

Στη δεύτερη περίπτωση, της δομικής αριστοποίησης, ούτε το διάγραμμα ροής είναι δεδομένο. Για την ακρίβεια, έχουμε να επιλέξουμε από πιθανές εναλλακτικές λύσεις και για κάθε μία από αυτές να λύσουμε και το αντίστοιχο πρόβλημα παραμετρικής αριστοποίησης ώστε να διαλέξουμε την καλύτερη από όλες τις λύσεις.

Σε αυτή την ενότητα θα ασχοληθούμε με τις γενικές κατευθύνσεις και μεθόδους για τη λύση του προβλήματος της παραμετρικής αριστοποίησης.

4.1.2. Μεταβλητές Επίλυσης και Σχεδιασμού

Στην Ενότητα 2 ορίσαμε τις Μεταβλητές Επίλυσης και τις Μεταβλητές Σχεδιασμού. Στις πιο πολλές περιπτώσεις που παρουσιάζουν πρακτικό ενδιαφέρον διαπιστώνουμε ότι έχουμε Ν περιορισμούς και Μ > Ν μεταβλητές. Τότε, οι βαθμοί ελευθερίας του προβλήματος είναι Μ – Ν. Αυτό σημαίνει ότι αν καθορίσουμε τις Μ – Ν μεταβλητές (Μεταβλητές Σχεδιασμού) τότε μπορούμε να βρούμε και τις υπόλοιπες Ν (Μεταβλητές Επίλυσης) λύνοντας το σύστημα εξισώσεων του μοντέλου. Αν, με κάποιο τρόπο έχουμε αποφασίσει ποιες ακριβώς μεταβλητές θα παίζουν το ρόλο των ΜΣ και ποιες θα είναι οι ΜΕ, τότε μπορούμε γενικά να ακολουθήσουμε κάποια βήματα όπως τα παρακάτω, για να λύσουμε το πρόβλημα της παραμετρικής αριστοποίησης:

1. Απόδοση αρχικών τιμών στις ΜΣ
2. Επίλυση του μοντέλου και εύρεση των ΜΕ για τις δεδομένες ΜΣ
3. Εισαγωγή των ΜΕ στην ΑΣ και αριστοποίηση ως προς τις ΜΣ
4. Με τις νέες τιμές των ΜΣ, επιστροφή στο βήμα 2
5. Τερματισμός με κάποιο κριτήριο σύγκλισης, όπως μεταβολή των ΜΣ ή ΜΕ κάτω από κάποιο όριο.

Στην πραγματικότητα, υπάρχει μια ποικιλία μεθόδων και τεχνικών αριστοποίησης που μπορεί να μοιάζουν με την παραπάνω γενική μορφή ή να αποκλίνουν αρκετά από αυτή, αλλά το κοινό των περισσότερων από αυτές είναι ότι σε κάποιο σημείο καλούμαστε να λύσουμε τα εξής τρία υπο-προβλήματα:

α) Προσδιορισμός των Μεταβλητών Σχεδιασμού και των Μεταβλητών Επίλυσης. Πώς αποφασίζουμε τον τρόπο με τον οποίο θα τις χωρίσουμε;

β) Επίλυση του συστήματος εξισώσεων του μοντέλου

γ) Ελαχιστοποίηση της Αντικειμενικής Συνάρτησης ως προς κάποια ομάδα μεταβλητών που εξαρτάται από την τεχνική που επιλέξαμε.

Σε αυτή την ενότητα θα ασχοληθούμε εκτενέστερα με το υποπρόβλημα (α) και θα αναφερθούμε σε συνήθεις μεθόδους κατάλληλες για τα προβλήματα (β) και (γ).

4.2. Μέθοδοι διάκρισης των Μεταβλητών Σχεδιασμού από τις Μεταβλητές Επίλυσης

Για να χωρίσουμε τις μεταβλητές του σχεδιαστικού προβλήματος σε Μεταβλητές Σχεδιασμού και Επίλυσης, μπορούμε να καταφύγουμε σε δύο ειδών λύσεις:

α) εμπειρικούς κανόνες

β) αλγοριθμικές μεθόδους.

4.2.1 Εμπειρικοί κανόνες εύρεσης των ΜΣ

Αυτοί αποτελούν συνδυασμό πείρας και κρίσης, κοινής λογικής ή πρακτικού πνεύματος που επιτρέπουν να αποφανθούμε για το ρόλο των μεταβλητών ανάλογα με τη σημασία τους και τα χαρακτηριστικά τους. Στη συνέχεια αναφέρουμε μερικούς τέτοιους κανόνες σχολιάζοντας τη λογική τους:

i. <u>Οι **διακριτές μεταβλητές** προτιμώνται ως Μεταβλητές Σχεδιασμού.</u>

Διακριτές ονομάζουμε τις μεταβλητές των οποίων τις δυνατές τιμές μπορούμε να τις απαριθμήσουμε. Π.χ. οι ακέραιοι αριθμοί αποτελούν ένα διακριτό σύνολο. Στη βιομηχανία όχι μόνο απαντώνται συχνά διακριτές μεταβλητές, αλλά τις πιο πολλές φορές έχουν και πεπερασμένο εύρος δυνατών τιμών.

Συνήθως, οι διακριτές μεταβλητές αφορούν χαρακτηριστικές διαστάσεις ή δυναμικότητες εξοπλισμού που προμηθευόμαστε από την αγορά και τις αντίστοιχες τιμές αγοράς, αφού ο κατασκευαστής προφανώς θα παράγει συγκεκριμένα μεγέθη (κατά τον ίδιο τρόπο που τα ρούχα και τα παπούτσια υπάρχουν σε συγκεκριμένα "νούμερα"). Εξαιρείται βέβαια, η περίπτωση της παραγγελίας εξοπλισμού ακριβώς στις διαστάσεις που τον θέλουμε. Όμως, έχουμε ήδη αναφέρει ότι η υπερβολική έμφαση στην ακρίβεια δεν ωφελεί ιδιαίτερα, αφού πολύ σημαντικός παράγοντας είναι και οι συχνές μεταβολές των παραμέτρων του προβλήματος, ακόμη και οι ανατροπές των υποθέσεων και παραδοχών που κάναμε για να το λύσουμε. Συνεπώς, προτιμούμε να κάνουμε μια αγορά τέτοια που να μας καλύπτει για διάφορα ενδεχόμενα. Στη λύση της παραγγελίας (η οποία συνήθως ανεβάζει σημαντικά το κόστος) θα καταφεύγαμε μάλλον σε σπάνιες περιπτώσεις, όπως π.χ. αν χρειαζόμαστε κάποια συσκευή σε τόσο μεγάλο μέγεθος που δε μπορούμε να τη βρούμε στην αγορά[1].

Έχοντας ορίσει μια διακριτή μεταβλητή ως μεταβλητή σχεδιασμού, το πρόβλημα της αριστοποίησης ανάγεται στον υπολογισμό της Αντικειμενικής Συνάρτησης για τις διάφορες τιμές της μεταβλητής αυτής και την απαρίθμηση των λύσεων από όπου διαλέγουμε την καλύτερη. Ένα τέτοιο παράδειγμα είναι αυτό του άριστου πάχους θερμικής μόνωσης, όπως περιγράφεται στην υποενότητα 3.3.2. Το ζητούμενο πάχος x έπαιρνε διακριτές τιμές μεταβαλλόμενες ανά ένα cm, γιατί προφανώς τέτοιου πάχους μονώσεις υπάρχουν στην αγορά. Το άριστο πάχος x_{opt} βρισκόταν με τον υπολογισμό της αξίας εξοικονομούμενης ενέργειας μείον το κόστος επένδυσης, συνυπολογίζοντας και τη χρονική αξία του χρήματος, για διάφορα x ώστε να βρεθεί η πιο συμφέρουσα επιλογή.

ii. Μεταβλητές που υπόκεινται σε **περιορισμούς** προτιμώνται ως Μεταβλητές Σχεδιασμού.
Παραδείγματα μεταβλητών με περιορισμούς είναι:

- θερμοκρασία που δεν πρέπει να υπερβεί κάποιο όριο για να μη συμβεί διάσπαση και αποσύνθεση χρήσιμων συστατικών,
- περιορισμοί στη σύσταση και τη θερμοκρασία ρευμάτων αποβλήτων για λόγους περιβαλλοντικής προστασίας και αποφυγής θερμικής ρύπανσης, αντίστοιχα,
- διαφορά μεταξύ θερμοκρασίας ρευστού και θερμοκρασίας βοηθητικής παροχής ψύξης/θέρμανσης σε εναλλάκτη θερμότητας που πρέπει να υπερβαίνει ένα ελάχιστο όριο ώστε αυτός να αποδίδει καλύτερα αλλά και να μη χρειάζεται μεγάλη επιφάνεια εναλλαγής,
- ελάχιστη και μέγιστη πίεση λειτουργίας ενός δοχείου διαχωρισμού

κλπ.

Καταλαβαίνουμε ότι αν μια μεταβλητή υποκείμενη σε περιορισμούς ήταν μεταβλητή επίλυσης, η διαδικασία της αριστοποίησης θα γινόταν πιο πολύπλοκη. Αν υιοθετούσαμε τα βήματα που περιγράφονται στην υποενότητα 4.1.2, τότε, κάθε φορά που φτάναμε στο βήμα 2, θα έπρεπε να ελέγχουμε αν παραβιάζονται οι περιορισμοί και σε μια τέτοια περίπτωση, να τροποποιούσαμε τις τιμές των μεταβλητών σχεδίασης, ουσιαστικά αναιρώντας τους υπολογισμούς του βήματος 3 από τον προηγούμενο επαναληπτικό κύκλο. Αν οι περιορισμένες μεταβλητές είναι μεταβλητές σχεδιασμού, τότε ο έλεγχος για την τήρηση των περιορισμών είναι πιο άμεσος γιατί υπάρχουν μέθοδοι ελαχιστοποίησης που ενσωματώνουν τα όρια μιας μεταβλητής, όπως θα δούμε στις επόμενες σελίδες.

Τους περιορισμούς με τη μορφή ανισότητας μπορούμε να τους μετατρέψουμε σε εξισώσεις και να τους ενσωματώσουμε στο σύστημα εξισώσεων του μοντέλου που καλούμαστε να λύσουμε σε κάθε κύκλο μιας επαναληπτικής τεχνικής. Πράγματι, αν για τη μεταβλητή x έχουμε την ανισότητα

$$x \leq c$$

1 Ακόμη και τότε θα ήταν προτιμώτερο να επιλέξουμε τη λύση του συνδυασμού δύο ή περισσότερων συσκευών μικρότερης δυναμικότητας αντί για μία μεγάλη. Έτσι, μια αποστακτική στήλη με διάμετρο άνω των 4 m πρέπει να συναρμολογηθεί επί τόπου ανεβάζοντας κατά πολύ το κόστος. Το δε ύψος της στήλης δεν πρέπει να είναι πάνω από 50 m για λόγους στήριξης. Αν η διαστασιολόγηση δώσει τέτοια απαγορευτικά αποτελέσματα, θα επιλεγεί αντί αυτών, συστοιχία δύο ή περισσότερων μικρότερων στηλών με τα προϊόντα της μίας να τροφοδοτούν τις επόμενες.

μπορούμε επίσης να γράψουμε

$$(x-c) + h^2 = 0$$

εισάγοντας μια νέα μεταβλητή h, γιατί η παραπάνω σχέση συνεπάγεται ότι για οποιαδήποτε τιμή της h η παράσταση x-c θα είναι πάντα ίση ή μικρότερη από το μηδέν. Αυτό όμως, κάνει το μοντέλο πιο πολύπλοκο με την ανάλογη επίπτωση στη λύση γενικότερα. Εξ άλλου, αν οι περιορισμένες μεταβλητές είναι μεταβλητές σχεδιασμού, μπορούμε, για μια γρήγορη εκτίμηση, να προβούμε σε **διακριτοποίηση** του προβλήματος. Δηλαδή, παίρνοντας τις οριακές τιμές καθώς και κάποιες ενδιάμεσες, να υπολογίσουμε την αντικειμενική συνάρτηση για να δούμε πώς περίπου μεταβάλλεται, στο ίδιο πνεύμα με τη μέθοδο που συζητήσαμε αναφορικά με τις διακριτές μεταβλητές.

iii. Κριτήριο αριστοποίησης: οι μεταβλητές με τη μεγαλύτερη επίπτωση στην Αντικειμενική Συνάρτηση προτιμώνται ως Μεταβλητές Σχεδιασμού.

Σύμφωνα με αυτό το κριτήριο, επιλέγονται ως μεταβλητές σχεδιασμού εκείνες που μεταβάλλουν περισσότερο την Αντικειμενική Συνάρτηση, γιατί τότε είναι πιο σαφής η διάκριση του άριστου. Αν επιλέγαμε μια μεταβλητή η οποία επιφέρει πολύ μικρή ποσοστιαία αλλαγή στην αντικειμενική συνάρτηση, τότε η συνεισφορά της μπορεί να υπερκαλυφθεί από τα σφάλματα που εμπεριέχονται στις προσεγγίσεις και τις παραδοχές που κάνουμε για να διατυπώσουμε το μοντέλο της διεργασίας. Μεταβλητές οι οποίες μπορούν να μεταβάλλουν σημαντικά τις αντικειμενικές συναρτήσεις είναι:

- σύσταση ρευμάτων εισόδου
- βαθμός μετατροπής χημικής αντίδρασης
- θερμοκρασία, πίεση
- λόγος αναρροής στις αποστακτικές στήλες και ανακύκλωση στις χημικές διεργασίες
- ποσοστό ανάκτησης προϊόντος

Τελειώνοντας την αναφορά στους εμπειρικούς κανόνες, πρέπει να πούμε ότι αυτοί δεν είναι απόλυτοι και μερικές φορές μπορεί να δίνουν αντικρουόμενα αποτελέσματα. Γι' αυτό δεν ωφελεί να τους ακολουθούμε τυφλά και δογματικά σα να ήταν "νόμοι" ακατάλυτοι και καθολικής ισχύος αλλά ως υποδείξεις για μια λύση που είναι *πολύ πιθανά* η προτιμώτερη. Τις υποδείξεις αυτές πρέπει να τις συνδυάσουμε με την ιδιαιτερότητα του προβλήματος που ενδέχεται υπό συγκεκριμένες συνθήκες να αναδείξει κάποιες πτυχές ως σημαντικότερες από άλλες, ακόμη και αν αυτές συνήθως υποβαθμίζονται. Μπορούμε να πούμε ότι ο γενικός εμπειρικός κανόνας που είναι εφαρμόσιμος κάθε εργασία μας αναφορικά με το σχεδιασμό είναι η συγκεκριμένη ανάλυση και κατανόηση του κάθε συγκεκριμένου προβλήματος.

4.2.2. Αλγόριθμοι εύρεσης των ΜΣ – αλγόριθμος LCR

Οι κανόνες που εκθέσαμε πιο πάνω αναφέρονται στη διεργασία, το φυσικό της "περιεχόμενο" και τις ιδιαιτερότητές της. Όσον αφορά τη μαθηματική της έκφραση, μπορούμε να διατυπώσουμε άλλο ένα κριτήριο που ταιριάζει να ονομάσουμε "κριτήριο επιλυσιμότητας". Το κριτήριο επιλυσιμότητας είναι και αυτό έκφραση ενός πρακτικού πνεύματος, με την έννοια ότι η επιλογή των Μεταβλητών Σχεδιασμού γίνεται έτσι ώστε να μας διευκολύνει να λύσουμε το πρόβλημα. Πιο συγκεκριμένα, επιλέγουμε τις Μεταβλητές Σχεδιασμού έτσι ώστε:

α) το μοντέλο να έχει μαθηματική λύση ως προς τις ΜΕ

β) αυτή να βρίσκεται όσο το δυνατόν πιο εύκολα.

Με αυτό το σκεπτικό περνάμε στις αλγοριθμικές μεθόδους επιλογής των Μεταβλητών

Σχεδιασμού. Μία μέθοδος επιτυχής όσο και εύκολη και κατανοητή είναι αυτή που διατύπωσαν το 1966 οι Lee, Christensen και Rudd, την οποία θα αναφερουμε για συντομία ως "μέθοδο LCR". Αυτή μας παρέχει ένα τρόπο όχι μόνο για να διακρίνουμε τις Μεταβλητές Σχεδιασμού από τις Μεταβλητές Επίλυσης αλλά και για να λύσουμε το σύστημα των εξισώσεων του μοντέλου.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4-1 "Άκυκλο" γραμμικό υποορισμένο σύστημα.
Για να σκιαγραφήσουμε τη μέθοδο LCR, θα δώσουμε το παράδειγμα ενός μικρού γραμμικού υποορισμένου συστήματος (με την υπενθύμιση ότι δεν είναι όλα τα μοντέλα διεργασιών γραμμικά!). Έστω το παρακάτω σύστημα 3 εξισώσεων με 4 αγνώστους:

$$
\begin{array}{ll}
2x + 3y + 4z = 10 & (1) \\
3x + 5w = 12 & (2) \\
y - z = 6 & (3)
\end{array}
$$

Έχουμε τις εξισώσεις (1), (2) και (3) και τις μεταβλητές x, y, z και w, επομένως οι βαθμοί ελευθερίας είναι 4 – 3 = 1 και θα έχουμε *μία* Μεταβλητή Σχεδιασμού που πρέπει να προσδιορίσουμε. Καταρτίζουμε τον παρακάτω **πίνακα απεικόνισης** του συστήματος όπου φαίνονται οι μεταβλητές που εμφανίζονται σε κάθε εξίσωση και οι συνολικές συχνότητες εμφάνισης για κάθε μεταβλητή:

	x	y	z	w	
	1	1	1		(1)
	1			1	(2)
		1	1		(3)
Συχνότητες:	2	2	2	1	

Η διαδικασία αποτελείται από διαδοχικά βήματα απλοποίησης του συστήματος και ξεκινά από τα σημεία που είναι πιο εύκολα και προφανή:

Βήμα 1: Αν είχαμε στο σύστημα κάποια εξίσωση με μία και μόνη μεταβλητή, δηλαδή της μορφής $f(x_i) = 0$, είναι προφανές ότι δεν έχουμε άλλη επιλογή παρά να λύσουμε αυτή την εξίσωση ως προς x_i, άρα η x_i θα οριστεί ως Μεταβλητή Επίλυσης. Στο παραπάνω σύστημα δεν έχουμε τέτοια περίπτωση οπότε προχωρούμε στο επόμενο στάδιο.

Βήμα 2: Αν μια μεταβλητή x_i εμφανίζεται μόνο μία φορά σε όλο το σύστημα, σε μία μόνο από τις εξισώσεις του συστήματος, έστω την e_j, τότε δεν υπάρχει άλλος τρόπος εύρεσης της x_i από το να λύσουμε ως προς αυτή, τη μοναδική εξίσωση e_j που την περιέχει. Οι μεταβλητές αυτές ξεχωρίζουν από τη συχνότητα εμφάνισής τους που είναι ίση με 1. Έτσι, στην προκειμένη περίπτωση, η w θα βρεθεί λύνοντας τη (2) ως προς w γιατί δεν υπάρχει σε καμία άλλη εξίσωση του συστήματος. Διαγράφουμε από τον πίνακα απεικόνισης την εξίσωση (2) και τη στήλη w και βάζουμε αυτό το βήμα στη στοίβα γράφουμε τα εξής:

(2) →→→ w (λύνουμε τη (2) ως προς w, απαιτεί γνώση της x)

καθώς και το νέο πίνακα απεικόνισης:

	x	y	z	
	1	1	1	(1)
		1	1	(3)
Συχνότητες:	1	2	2	(*αναθεωρημένες*)

Εδώ, μπορεί να παρατηρήσει κάποιος ότι για να βρούμε τη w λύνοντας την εξίσωση (2) θα πρέπει να γνωρίζουμε την τιμή της x. Αυτό είναι σωστό, αλλά όπως θα δούμε αμέσως τώρα, ο αλγόριθμος τακτοποιεί όλες τις εκκρεμότητες αυτού του είδους. Το "μυστικό" του, όπως θα πούμε και μετά πιο αναλυτικά, είναι ότι ξεχωρίζει πρώτα τις εξισώσεις που θα λυθούν τελευταίες.

Βήμα 3: Παρατηρούμε ότι στο νέο πίνακα απεικόνισης, η μεταβλητή x έχει νέα συχνότητα 1, οπότε επαναλαμβάνουμε την ίδια διαδικασία για τη x, διαγράφοντας τη στήλη της και την εξίσωση (1). Βάζουμε και αυτό το βήμα στη στοίβα, πάνω από το προηγούμενο:

(1) →→→ x (λύνουμε την (1) ως προς x, απαιτεί γνώση των y και z)
(2) →→→ w

Όπως υποσχεθήκαμε πιο πάνω, η εκκρεμότητα της x τακτοποιήθηκε, αν και το ζήτημα μετατέθηκε στη γνώση των y και z. Αλλά και αυτών επίσης θα έρθει η σειρά. Τώρα παίρνουμε τον εξής πίνακα:

	y	z	
	1	1	(3)
Συχνότητες:	1	1	

Βήμα 4: Τώρα, έμεινε μία εξίσωση και λύνουμε ως προς όποια μεταβλητή θέλουμε. Αυτή που θα περισσέψει θα είναι και η ζητούμενη Μεταβλητή Σχεδιασμού. Εδώ, αν θέλουμε, μπορούμε να κάνουμε την επιλογή μας και με βάση τους εμπειρικούς κανόνες που προαναφέρθηκαν. Έστω ότι λύνουμε ως προς y και βάζουμε αυτό το βήμα στη στοίβα:

(3) →→→ y (λύνομε την (3) ως προς y, απαιτεί γνώση της z)
(1) →→→ x
(2) →→→ w

Έμεινε η μεταβλητή z που είναι απροσδιόριστη και αυτή είναι η Μεταβλητή Σχεδιασμού στην οποία θα δίνουμε τιμές κάθε φορά που θέλουμε να λύσουμε το σύστημα εξισώσεων. Γενικά, κάθε φορά που απομένει μεταβλητή που δεν περιέχεται σε καμία από τις εξισώσεις που απομένουν μετά από τις διαγραφές που κάνουμε, την ορίζουμε ως Μεταβλητή Σχεδιασμού.

Παρατηρούμε ότι η στοίβα που σχηματίσαμε, μας δίνει και την κατάλληλη σειρά επίλυσης των εξισώσεων του συστήματος, δηλαδή: δίνουμε αρχική τιμή στη z και την εισάγουμε στην (3) για να λύσουμε ως προς y. Μετά εισάγουμε τις y και z στην (1) για να λύσουμε ως προς x και τις x, y, z στη (2) και λύνουμε ως προς w.

Τώρα, υπάρχει περίπτωση να φτάσουμε σε ένα σημείο όπου όλες οι απομένουσες μεταβλητές υπάρχουν πάνω από 1 φορά και δε μπορούμε να εφαρμόσουμε τον προηγούμενο απλό κανόνα για τη διαγραφή μεταβλητών. Αυτό το σύστημα είναι **κυκλικό** (ενώ το προηγούμενο ήταν **άκυκλο**) δηλαδή χρειάζεται "κυκλική" επαναληπτική διαδικασία για να λυθεί. Αλγεβρικά, αυτό γίνεται με τον τρόπο που ξέρουμε από το γυμνάσιο (λύνουμε ως προς μία μεταβλητή, αντικαθιστούμε σε κάποια άλλη εξίσωση κ.ο.κ.). Αριθμητικά, αν θέλουμε να λύσουμε ένα μεγάλο πρόβλημα με υπολογιστή, θα χρειαστεί να δώσουμε αρχικές δοκιμαστικές τιμές σε κάποιες μεταβλητές και να εφαρμόσουμε κάποια επαναληπτική διαδικασία μέχρι να λύσουμε το σύστημα ως προς όλες. Αυτές που θα πάρουν δοκιμαστικές τιμές τις λέμε **Διδόμενες Μεταβλητές**. Είναι και αυτές Μεταβλητές Επίλυσης, μόνο που θα πάρουν κάποιες αρχικές δοκιμαστικές τιμές για να αρχίσει ο αλγόριθμος επίλυσης του συστήματος.

Για να βρούμε και τις μεταβλητές όπου θα δώσουμε αρχικές τιμές, κάνουμε το εξής: Βρίσκουμε αυτή που εμφανίζεται τις λιγότερες φορές, έστω K. Διαγράφουμε K-1 από τις εξισώσεις που την περιέχουν, δοκιμάζοντας διάφορους συνδυασμούς μέχρι να πετύχουμε άκυκλο σύστημα. Αν δεν προκύψει άκυκλο σύστημα, αυξάνουμε το K κατά 1 και ξαναδοκιμάζουμε.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 4-2 "Κυκλικό" γραμμικό υποορισμένο σύστημα.
Ας τροποποιήσουμε το σύστημα του παραδείγματος 4-1, ώστε να πάρει την εξής μορφή:

$$2x + 3y + 4z \quad = 10 \qquad (1)$$
$$3x \qquad\qquad + 5w = 12 \qquad (2)$$
$$y \quad -z + w \ = 6 \qquad (3)$$

με πίνακα απεικόνισης:

	x	y	z	w	
	1	1	1		(1)
	1			1	(2)
		1	1	1	(3)
Συχνότητες:	2	2	2	2	

Εδώ, όλες οι μεταβλητές εμφανίζονται με συχνότητα 2. Ας πάρουμε πάλι τη w. Γι' αυτήν ισχύει αριθμός εμφανίσεων K = 2, άρα θα κρατήσουμε μόνο τη μία εξίσωση από αυτές που την περιέχουν. Διώχνουμε την εξίσωση (2) και το σύστημα γίνεται

	x	y	z	w	
	1	1	1		(1)
		1	1	1	(3)
Συχνότητες:	1	2	2	1	

Εδώ, μπορούμε να εφαρμόσουμε τον προηγούμενο αλγόριθμο αρχίζοντας είτε από τη x είτε από τη w. Αρχίζουμε από τη w. Διαγράφουμε την (3) και τη βάζουμε στη στοίβα.

(3) →→→ w (λύνουμε ως προς w, για δεδομένες y και z)

	x	y	z	
	1	1	1	(1)
Συχνότητες:	1	1	1	

Λύνουμε την τελευταία εξίσωση που απομένει, π.χ. ως προς x

(1)→→→ x (λύνουμε ως προς x, για δεδομένες y και z)
(3) →→→ w

και έχουν απομείνει οι y και z. Οι K-1 μεταβλητές από αυτές που έχουν μείνει θα είναι Διδόμενες Μεταβλητές για την επίλυση K-1 εξισώσεων, όσες και αυτές που διαγράψαμε αρχικά και οι υπόλοιπες θα είναι Μεταβλητές Σχεδιασμού. Εδώ K = 2, άρα μία θα είναι η Διδόμενη Μεταβλητή. Ορίζουμε ως τέτοια την y και κρατάμε τη z ως Μεταβλητή Σχεδιασμού όπως πριν.

Πώς λύνεται τώρα το σύστημα; Πάλι ξεκινάμε με μια αρχική τιμή για τη z (που μπορεί να προέρχεται από την ελαχιστοποίηση κάποιας Αντικειμενικής Συνάρτησης), αλλά θα πρέπει τώρα να κάνουμε χρήση επαναληπτικής διαδικασίας με διάφορες δοκιμαστικές τιμές για την y ώστε να λύσουμε το σύστημα. Επομένως, για δεδομένη τιμή της Μεταβλητής Σχεδιασμού z, ακολουθούμε τα παρακάτω βήματα:

- Δίνουμε μια δοκιμαστική τιμή στην y
- Λύνουμε την (1) ως προς x
- Λύνουμε την (3) ως προς w
- Ελέγχουμε αν επαληθεύεται η εξίσωση (2) που δώσαμε αρχικά, από τις x και w, αλλιώς μεταβάλλουμε τη δοκιμαστική τιμή της y και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία.

Φυσικά, το παραπάνω απλό και μικρό σε μέγεθος γραμμικό σύστημα, μπορούμε ευκολώτατα να λύσουμε "με το χέρι" χωρίς να καταφύγουμε σε επαναληπτικές μεθόδους. Αλλά, η ίδια διαδικασία διαγραφής και χαρακτηρισμού των μεταβλητών και του καθορισμού της σειράς επίλυσης των εξισώσεων, είναι εξίσου εφαρμόσιμη και για μετάλα πολύπλοκα, μη γραμμικά συστήματα. Σε αυτή την περίπτωση, μια επαναληπτική διαδικασία υλοποιημένη σε κάποια γλώσσα προγραμματισμού θα ήταν η πιο ενδεδειγμένη διαδικασία.

Τα παραπάνω παραδείγματα ήταν απλά, π.χ. είχαμε μία το πολύ μεταβλητή σε κάθε βήμα που είχε συχνότητα 1. Γενικά, μπορεί να έχουμε περισσότερες από μία μεταβλητές που εμφανίζονται μία φορά. Αυτό που χρειάζεται είναι για να λειτουργήσει σωστά η λογική του αλγόριθμου είναι η ομοιόμορφη και συνεπής εφαρμογή της σε κάθε βήμα. Κλείνουμε, λοιπόν, αυτή την υποενότητα προτείνοντας κάποιες γενικές οδηγίες για την εφαρμογή του LCR αλγόριθμου στον πίνακα απεικόνισης οποιουδήποτε υποορισμένου συστήματος εξισώσεων:

- Σε κάθε βήμα, εντοπίζουμε την ομάδα εξισώσεων που περιέχουν μεταβλητές με συχνότητα 1 και τις διαγράφουμε πρώτα όλες πριν ξαναμετρήσουμε συχνότητες μεταβλητών.
- Για τη σειρά διαγραφής των εξισώσεων σε κάθε τέτοια ομάδα, τις διαβάζουμε από πάνω προς τα κάτω.
- Αν μια εξίσωση προς διαγραφή περιέχει περισσότερες από μία μεταβλητές με συχνότητα 1 τη λύνουμε ως προς τη μεταβλητή στην πιο αριστερή θέση (δηλαδή διαβάζουμε τις μεταβλητές κατά τη φορά ανάγνωσης και λύνουμε ως προς την πρώτη που θα συναντήσουμε και δεν έχει ήδη διαγραφεί αλλά έχει συχνότητα 1)
- Αν δεν υπάρχει ούτε μία μεταβλητή που να εμφανίζεται μόνο μία φορά, ισχύουν όσα αναφέραμε προηγουμένως για τον προσδιορισμό των Διδόμενων Μεταβλητών.

4.2.3 Η δομή των χημικών διεργασιών αιτία της επιτυχίας του LCR

Από τα παραπάνω παραδείγματα μπορούμε να δούμε ότι η λογική της μεθόδου LCR είναι η "αποσύνθεση" του αρχικού συστήματος σε μικρότερα υποσυστήματα και, αν είναι εφικτό, σε μεμονωμένες εξισώσεις, με ταυτόχρονο καθορισμό της σειράς με την οποία αυτά τα υποσυστήματα και οι εξισώσεις πρέπει να λυθούν. Η σωστή σειρά είναι αυτή κατά την οποία κάθε υποσύστημα ή μεμονωμένη εξίσωση βασίζεται στα αποτελέσματα από το αμέσως προηγούμενο τμήμα του αρχικού συστήματος που απομονώσαμε κατά τη διαδικασία αποσύνθεσης. Έτσι, το αρχικό πρόβλημα ανάγεται σε μια διαδοχή από μικρότερα και ευκολώτερα υποπροβλήματα τα οποία είναι αλληλένδετα και πρέπει να λυθούν διαδοχικά.

Αυτό που καθιστά τον αλγόριθμο αποτελεσματικό δεν είναι άσχετο από τη φύση και το είδος των προβλημάτων που μελετάμε. Πράγματι, μπορούμε να φανταστούμε ένα οσοδήποτε μεγάλο σύστημα εξισώσεων που να είναι κυκλικό και να μην επιδέχεται περαιτέρω απλοποίηση. Για να έχει επιτυχία ο αλγόριθμος LCR σημαίνει ότι υπάρχει κάποια αιτία που επιτρέπει να δούμε το πρόβλημα ως σύνθεση σχετικά ανεξάρτητων αν και αλληλοσυνδεόμενων υποπροβλημάτων. Και πράγματι, αυτό συμβαίνει σε μια παραγωγική μονάδα που αποτελείται από φυσικές και χημικές διεργασίες. Μια διεργασία μπορεί να περιγράφεται από το δικό της μοντέλο, με τις εξισώσεις του και τις μεταβλητές του. Αλλά κάθε διεργασία συνδέεται με τις άλλες μέσω λίγων μόνο ρευμάτων εισόδου/εξόδου, άρα υπάρχει αυτό που λέμε χαλαρή σύζευξη (loose coupling).

Τα παραπάνω σημαίνουν ότι για κάθε διεργασία θα υπάρχουν κάποιες εξισώσεις, λίγες αριθμητικά σε σχέση με το μέγεθος του μοντέλου κάθε διεργασίας, που να τη συνδέουν με την υπόλοιπη παραγωγική διαδικασία. Αυτές, συνήθως θα είναι κάποια ισοζύγια μάζας και ενέργειας και μπορεί να περιέχουν μεταβλητές δύο γειτονικών διεργασιών που σχετίζονται μεταξύ τους, ενδεχομένως και κάποιες άλλες που έχουν να κάνουν με βοηθητικές παροχές για παράδειγμα, ενώ όλες οι άλλες μεταβλητές που περιγράφουν τη μονάδα στο σύνολό τους θα απουσιάζουν.

Έτσι, οι μεταβλητές τείνουν να ομαδοποιηθούν σε μικρά "μπλοκ" μέσα στον πίνακα και καταλήγουμε στα λεγόμενα **αραιά** (sparse) **συστήματα εξισώσεων**, των οποίων ο πίνακας απεικόνισης έχει κενές τις περισσότερες θέσεις. Μάλιστα, συμβαίνει συχνά αυτός ο πίνακας να είναι ή με κατάλληλες αντιμεταθέσεις να μπορεί να έρθει σε μορφή τέτοια όπου τα "μπλοκ" των μεταβλητών εμφανίζονται κοντά στην κύρια διαγώνιο. Τη διάταξη ενός αραιού συστήματος μπορούμε να την εκμεταλλευτούμε ώστε να αποσυνθέσουμε το σύστημα σε μικρότερα, τα οποία μάλιστα μπορεί να αντιστοιχούν στις επιμέρους διεργασίες. Ο αλγόριθμος LCR δεν είναι παρά ένας συστηματικός τρόπος για να το πετύχουμε. Στο Σχήμα 4-1 φαίνεται ένας τυπικός πίνακας απεικόνισης του μοντέλου μιας διεργασίας για την κατεργασία υδατικών αποβλήτων (πηγή: Μαρίνου-Κουρή, Ζ. Β. Μαρούλη "Σχεδιασμός Χημικών Βιομηχανιών"). Διακρίνεται σαφώς η συσσώρευση των μεταβλητών γύρω από την κύρια διαγώνιο. Στο 4-2 απεικονίζεται το διάγραμμα ροής της διεργασίας.

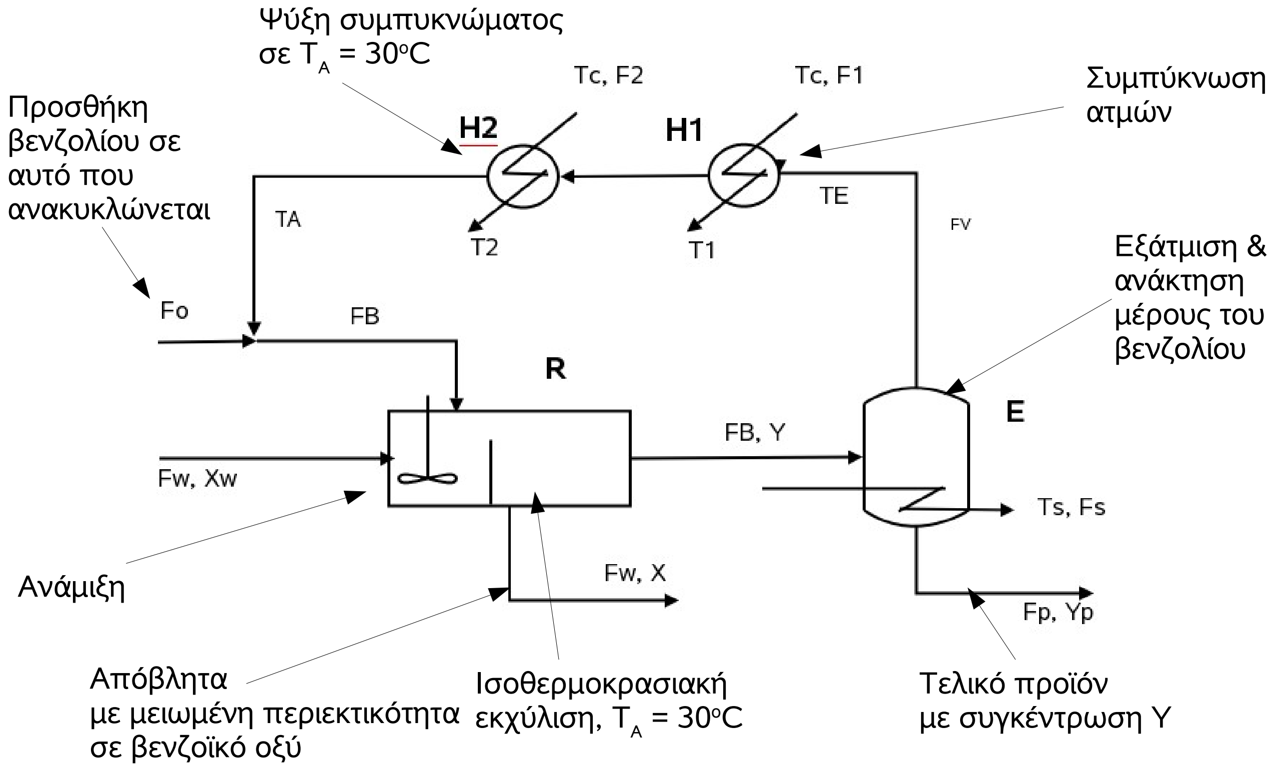
μεταβλητές:

εξισώσεις:

συχνότητα εμφάνισης μεταβλητών:

	X	Y	F_B	M_R	F_p	F_V	Q_E	F_S	A_E	Q_1	T_1	F_1	A_1	Q_2	T_2	F_2	A_2	F_0
1	X	X	X															
2	X	X																
3			X	X														
4		X	X		X													
5			X		X	X												
6		X	X			X	X											
7							X	X										
8							X		X									
9						X				X								
10										X	X	X						
11										X	X		X					
12						X								X				
13														X	X	X		
14														X	X		X	
15			X			X												X
	2	4	6	1	2	5	3	1	1	3	2	1	1	3	2	1	1	1

Σχήμα 4.1 *Πίνακας απεικόνισης μοντέλου για διεργασία ανάκτησης βενζοϊκού οξέος από υδατικά απόβλητα. Ο αναγνώστης καλείται να εφαρμόσει τη μέθοδο LCR για την επίλυση του αντίστοιχου συστήματος και την εύρεση των ΜΣ και ΜΕ του μοντέλου.*



(β)

Σχήμα 4.2 *Το διάγραμμα ροής της διεργασίας που μοντελοποιείται στον πίνακα του Σχ. 4-1.*

4.3 Μέθοδοι λύσης εξισώσεων και συστημάτων

Όπως είδαμε, το μοντέλος μιας σύνθετης διεργασίας μπορεί να αναχθεί στην επίλυση μιας εξίσωσης ή συστημάτων εξισώσεων, σημαντικά μικρότερων από το αρχικό. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε μερικές από τις πιο συνηθισμένες μεθόδους για την επίλυση συστημάτων ή μεμονωμένων εξισώσεων. Γενικά, διακρίνουμε σε γραμμικά και μη γραμμικά προβλήματα. Τα γραμμικά προβλήματα ανήκουν σε ειδική κατηγορία, γνωστή ως **γραμμικός προγραμματισμός**. Η αριστοποίηση με γραμμμικούς περιορισμούς αντιμετωπίζεται επιτυχώς με τη λεγόμενη **μέθοδο Simplex**.

Τα μη γραμμικά συστήματα και εξισώσεις είναι η τυπική περίπτωση που συναντούμε κατά το σχεδιασμό διεργασιών. Η πολυπλοκότητα των μαθηματικών εκφράσεων που υπεισέρχονται, σχεδόν πάντα αποκλείει την αναλυτική λύση, επομένως οι αριθμητικές μέθοδοι που προσφέρονται για υλοποίηση στον υπολογιστή, είναι μονόδρομος. Οι σχετικοί αλγόριθμοι που έχουν αναπτυχθεί από πολύ παλιά για μεμονωμένες εξισώσεις μιας μεταβλητής επεκτείνονται σχετικά εύκολα και σε συστήματα εξισώσεων. Κοινό σημείο όλων των τεχνικών είναι η επαναληπτική εφαρμογή τους για τη σταδιακή προσέγγιση της λύσης (το ίδιο ακριβώς συμβαίνει και με τις αντίστοιχες μεθόδους ελαχιστοποίησης που θα δούμε αργότερα). Τα βήματα που ακολουθούνται για την προσέγγιση της λύσης είναι τα εξής:

Βήμα 1: επιλογή αρχικής δοκιμαστικής τιμής x_0 και υπολογισμός της $f(x_0)$

Βήμα n (1): διόρθωση της τιμής x_{n-1} με κάποιο κριτήριο για τη λήψη της νέας τιμής x_n και υπολογισμός της $f(x_n)$: $x_n = x_{n-1}$ + διόρθωση

Βήμα n (2): έλεγχος σύγκλισης. Αν η τρέχουσα τιμή της f είναι κοντά στο 0 στα όρια μιας ανοχής που έχουμε θέσει, τότε το x_n είναι ικανοποιητική προσέγγιση μιας ρίζας της εξίσωσης.

Διαφορετικά, επαναλαμβάνουμε το προηγούμενο βήμα με την τρέχουσα τιμή του x.

Οι αριθμητικές μέθοδοι αξιολογούνται ως προς την ταχύτητα σύγκλισής τους. Τρεις κλασσικές τεχνικές επίλυσης εξισώσεων μιας μεταβλητής είναι οι παρακάτω:

Μέθοδος regula-falsi. Ξεκινά με ένα διάστημα [a,b] που είναι γνωστό ότι περικλείει μία ρίζα της εξίσωσης επειδή f(a)f(b) < 0 και μεταβάλλει σταδιακά το b μέχρι να προσεγγίσει ικανοποιητικά τη ρίζα. Το σημείο a δεν πρέπει να είναι πολύ μακριά από τη ρίζα. Αντίθετα από άλλες μεθόδους δε χρησιμοποιεί παραγώγους και έτσι χρειάζεται λιγότερες πράξεις ανά βήμα, αλλά αυτό αντισταθμίζεται από τα περισσότερα βήματα που απαιτούνται μέχρι να συγκλίνει. Η σχέση που για το στάδιο της διόρθωσης του x δίνεται από τις παρακάτω, απολύτως ισοδύναμες, εκφράσεις:

$$x_{n+1}=\frac{x_0 f(x_n)-x_n f(x_0)}{f(x_n)-f(x_0)}=x_0-\frac{f(x_0)(x_n-x_0)}{f(x_n)-f(x_0)}=x_n-\frac{f(x_n)(x_n-x_0)}{f(x_n)-f(x_0)}$$

Μέθοδος Newton-Raphson. Αυτή χρησιμοποιεί την εφαπτόμενη στο γράφημα της συνάρτησης για να εντοπίσει το επόμενο σημείο που προσεγγίζει σταδιακά τη ρίζα. Γι' αυτό απαιτεί υπολογισμό και της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης που επιβαρύνει τον υπολογισμό σε κάθε βήμα, αλλά μας αποζημιώνει με πολύ ταχύτερη **σύγκλιση**. Η σχέση για τη διόρθωση του x δίνεται από:

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

ενώ με αριθμητική προσέγγιση της παραγώγου μπορεί να γίνει

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)(x_{n-1}-x_n)}{f(x_n)-f(x_{n-1})}$$

δίνοντας την παραλλαγή που ονομάζεται **μέθοδος της αποτέμνουσας** (secant). Αυτή χρειάζεται περισσότερα βήματα από την αρχική μέθοδο Newton αλλά λιγότερες πράξεις και μόνο έναν υπολογισμός της συνάρτησης ανά βήμα ενώ δε χρειάζεται υπολογισμό της παραγώγου. Έτσι, συνολικά η ταχύτητα σύγκλισης είναι περίπου ίδια.

Μέθοδος Richmond. Αν υπάρχει η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης, τότε μπορεί να εφαρμοστεί μια διαδικασία ανάλογη με αυτή για την εξαγωγή της μεθόδου Newton-Raphson που οδηγεί στην ακόλουθη σχέση για τη διόρθωση του x:

$$x_{n+1}=x_n-\frac{2f(x_n)f'(x_n)}{2[f'(x_n)]^2-f(x_n)f''(x_n)}$$

Αυτή έχει πολύ γρήγορη σύγκλιση αλλά απαιτεί πολλές πράξεις ανά βήμα λόγω της δεύτερης παραγώγου.

Δε θα ήταν λάθος αν λέγαμε ότι κι εδώ υπάρχει ένα πρόβλημα αριστοποίησης (αν και όχι στο πεδίο της χημικής τεχνολογίας!) λόγω της ύπαρξης δύο ανταγωνιστικών παραγόντων, της ταχύτητας σύγκλισης και του υπολογιστικού φόρτου ανά βήμα. Φαίνεται ότι συνήθως η μέθοδος Newton-Raphson συμβιβάζει καλύτερα αυτά τα δύο και γι' αυτό είναι δημοφιλέστερη. Η μέθοδος regula-falsi συνήθως αναφέρεται ως η "κακή" ή απλοϊκή επιλογή έναντι της "καλής" Newton-Raphson, ενώ η μέθοδος Richmond είναι σχεδόν άγνωστη στους περισσότερους.

Η γενίκευση της Newton-Raphson σε συστήματα εξισώσεων οδηγεί στο ακόλουθο επαναληπτικό βήμα διόρθωσης του **x** = (x_1, x_2, ..., x_M):

$$\mathbf{x}^{n} = \mathbf{x}^{n-1} - J(\mathbf{x}^{n-1})\ \mathbf{f}(\mathbf{x}^{n-1})$$

όπου $\mathbf{f} = (f_1, f_2, ..., f_M)$ και $J(\mathbf{x})$ παριστάνει τον Ιακωβιανό πίνακα του οποίου το στοιχείο ij είναι ίσο με $\partial f_i / \partial x_j$ για δεδομένο $\mathbf{x}$. Επειδή η αντιστροφή του πίνακα που απαιτεί η παραπάνω σχέση είναι πιο δύσκολη και απαιτητική σε υπολογισμούς, η διορθωτική σχέση μετασχηματίζεται στην παρακάτω, πιο χρήσιμη μορφή:

Λύση του γραμμικού συστήματος: $J(\mathbf{x}^{n-1})\ \mathbf{y} = -\ \mathbf{f}(\mathbf{x}^{n-1})$ ως προς $\mathbf{y}$

$$\mathbf{x}^{n} = \mathbf{x}^{n-1} + \mathbf{y}$$

Αυτή η υλοποίηση είναι ταχύτερη επειδή για τη λύση γραμμικών συστημάτων υπάρχουν αποδοτικές αριθμητικές μέθοδοι που δεν απαιτούν αντιστροφή πίνακα.

Με αυτά τα παραδείγμα, δώσαμε μια ιδέα για τη φύση και λειτουργία των επαναληπτικών αριθμητικών μεθόδων. Εκτός από την παραπάνω υπάρχουν και άλλες αρκετά αποδοτικές μέθοδοι επίλυσης συστημάτων εξισώσεων, άλλες γενικότερες και άλλες πιο εξειδικευμένες σε ειδικές περιπτώσεις, ενώ η έρευνα σε αυτό τον τομέα παράγει και νέες βελτιώσεις. Η βιβλιογραφία πάνω σε αυτό το θέμα είναι πάρα πολύ μεγάλη και οι ενδιαφερόμενοι για λεπτομέρειες θα πρέπει να αρχίσουν από κάποιο βιβλίο αριθμητικής ανάλυσης.

Κλείνουμε την υποενότητα για τη λύση εξισώσεων και συστημάτων με μια σημαντική παρατήρηση στο γενικότερο πνεύμα της κριτικής ανάλυσης των αποτελεσμάτων κάθε υπολογισμού: στην ενότητα 1 είχαμε υπενθυμίσει ότι οι συναρτήσεις μπορεί να έχουν περισσότερα του ενός τοπικά ακρότατα. Το ίδιο συμβαίνει και με τις ρίζες τους: συχνά έχουν περισσότερες από μία. Δεν είναι απαραίτητο ότι έχουν όλες φυσική σημασία και ένας αλγόριθμος που ξεκινά από μια αρχική τιμή την οποία δώσαμε, μπορεί να καταλήξει ακριβώς σε εκείνη τη ρίζα που δε μας κάνει. Ενώ μερικές φορές αυτό είναι προφανές (αν π.χ. προκύψει αρνητική τιμή για οποιαδήποτε ποσότητα είναι εξ ορισμού θετική), σε άλλες περιπτώσεις η παραβίαση κάποιων περιορισμών μπορεί να είναι λιγότερο προφανής. Μια αριθμητική μέθοδος πρέπει να δοκιμάζεται με διάφορες τιμές των παραμέτρων της όπως η αρχική τιμή του x και η ανοχή στο κριτήριο σύγκλισης και τερματισμού.