Ενότητα 5

Κανόνες και Μέθοδοι Αριστοποίησης Διεργασιών

Εισαγωγή

Σε αυτή την ενότητα συζητάμε πιο αναλυτικά τους τρόπους προσέγγισης, μεθόδους και τεχνικές της αριστοποίησης, παραμετρικής και δομικής. Παρουσιάζουμε εμπειρικούς κανόνες για την επιλογή κατάλληλων συνθηκών και λειτουργικών παραμέτρων (παραμετρική αριστοποίηση), σχεδιασμό συσκευών και σύνθεση αυτών (δομική αριστοποίηση). Παρουσιάζουμε επίσης αλγοριθμικές τεχνικές ελαχιστοποίησης με ή χωρίς περιορισμούς αλλά και μεθόδους με τις οποίες προσπαθούμε να εκφράσουμε σε μαθηματική μορφή και να λύσουμε το πρόβλημα της σύνθεσης του καλύτερου διαγράμματος ροής.

5.1 Εμπειρικοί κανόνες

Στη βιβλιογραφία υπάρχει ένας μεγάλος όγκος υποδείξεων για τις άριστες συνθήκες λειτουργίας των βασικών διεργασιών, το σχεδιασμό του εξοπλισμού, των επιμέρους διεργασιών και της παραγωγής σε επίπεδο εργοστασίου. Μπορούμε να πούμε ότι η παραμετρική αριστοποίηση με τη στενή έννοια, δηλαδή για δεδομένες συσκευές, διεργασίες και συνολικό διάγραμμα παραγωγής είναι το ένα άκρο του φάσματος των αποφάσεων του μηχανικού διεργασιών. Εδώ επίσης ανήκουν και διάφορες υποδείξεις και κανόνες για την αντιμετώπιση προβλημάτων που ανακύπτουν εν ώρα λειτουργίας. Στο άλλο άκρο του φάσματος ή στην κορυφή της ιεραρχίας των σχεδιαστικών προβλημάτων βρίσκεται η σύνθεση του συνολικού διαγράμματος ροής, η κατ' εξοχήν δομική αριστοποίηση. Σε αυτή, με την ευρεία έννοια, ανήκουν και οι ενδιάμεσες περιοχές του σχεδιασμού ή επιλογής εξοπλισμού και της σύνθεσης διεργασιών.

Πάντως, όσον αφορά τους εμπειρικούς κανόνες, δε θεωρούμε σκόπιμο να δώσουμε υπερβολική έμφαση στη διάκριση μεταξύ παραμετρικής και δομικής αριστοποίησης σα να ήταν δύο ξένα μεταξύ τους προβλήματα, γιατί στην πράξη είναι αλληλένδετα. Έτσι, οι συνιστώμενες εκ πείρας συνθήκες λειτουργίας θέτουν περιορισμούς αλλά και βοηθούν να καθορίσουμε στόχους για το συνολικότερο σχεδιασμό σε επίπεδο διεργασιών ή εργοστασίου απλοποιώντας σημαντικά το πρόβλημα. Επειδή θα ακολουθήσουν ενότητες αφιερωμένες στα στάδια σχεδιασμού και σύνθεσης των επιμέρους διεργασιών (αντιδραστήρες, δίκτυο φυσικών διαχωριστήρων, δίκτυο εναλλαγής θερμότητας, βοηθητικές παροχές και απόβλητα), εδώ θα περιοριστούμε να αναφέρουμε ενδεικτικά λίγους μόνο, αντιπροσωπευτικούς κανόνες και υποδείξεις, κυρίως σε ο,τι αφορά τους αντιδραστήρες διαφόρων τύπων, τις στήλες κλασματικής απόσταξης και τους εναλλάκτες θερμότητας.

5.1.1 Επιλογή παραμέτρων λειτουργίας

Όσον αφορά τις παραμέτρους λειτουργίας, υπάρχουν πολλοί εμπειρικοί κανόνες που είναι αρκετά εξειδικευμένοι γιατί, όπως είναι φυσικό, εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό όχι μόνο από το είδος της διεργασίας που αφορούν αλλά και από τη σύσταση και τις ιδιότητες των υλικών που υπεισέρχονται. Για παράδειγμα: κατά τη χρήση καυσαερίου που αποβάλλεται από μια διεργασία, σε εναλλάκτες θερμότητας για την αξιοποίηση του θερμικού φορτίου του, η θερμοκρασία του δεν πρέπει να πέφτει κάτω από το σημείο δρόσου του τριοξειδίου του θείου, SO_3, το οποίο συχνά περιέχει, γιατί αλλιώς θα σχηματιστεί θειικό οξύ που είναι διαβρωτικό.

Υπάρχουν επίσης, πολλοί κανόνες για την επιλογή παραμέτρων λειτουργίας, άσχετα από τα συγκεκριμένα υλικά που υπεισέρχονται. Για παράδειγμα, γνωρίζουμε ήδη από τις Φυσικές Διεργασίες την υπόδειξη για τον οικονομικά άριστο λόγο αναρροής σε μια στήλη κλασματικής απόσταξης που λέει ότι αυτός είναι ίσος με 1.2 επί τον ελάχιστο θεωρητικό:

$$R_{\text{opt}} = 1.2\ R_{\text{min}}$$

Στην Ενότητα 2 μάλιστα, εξηγήσαμε και γιατί αυτή η τιμή είναι ένα κάτω φράγμα των τιμών που μπορεί να επιλέξουμε: αν μικρύνει κι άλλο, ο απαιτούμενος αριθμός θεωρητικών δίσκων θα αυξηθεί απότομα τείνοντας στο άπειρο. Δηλαδή, για το διαχωρισμό που έχουμε θέσει ως στόχο, θα χρειαστεί μια τεράστια στήλη, με το ανάλογο πάγιο κόστος.

Ο επόμενος προσεγγιστικός υπολογισμός είναι χρήσιμος σε συνδυασμό με τον προηγούμενο κανόνα: για δυαδικά ή ψευδοδυαδικά μίγματα και σχεδόν πλήρη διαχωρισμό (δηλαδή, σύσταση αποστάγματος $x_D \sim 1$)

- $R_{min} = F/D(\alpha-1)$, για τροφοδοσία στη θερμοκρασία έναρξης βρασμού,
- $R_{min} +1 = F\alpha/D(\alpha-1)$, για τροφοδοσία στη θερμοκρασία έναρξης υγροποίησης,

όπου F η παροχή τροφοδοσίας, D η παροχή αποστάγματος και α η σχετική πτητικότητα.

Άλλοι κανόνες έχουν χαρακτήρα προσεγγιστικού υπολογισμού κατάλληλου για γρήγορες εκτιμήσεις και αποφάσεις. Για τους χημικούς αντιδραστήρες, αξίζει να αναφέρουμε:

- Προσεγγιστικός υπολογισμός χημικής κινητικής: ο ρυθμός μιας αντίδρασης γίνεται περίπου διπλάσιος ανά 10°C.
- Ο ρυθμός αντίδρασης σε ετερογενή αντιδραστήρα εξαρτάται κυρίως από τη μεταφορά θερμότητας και μάζας και λιγότερο από τη χημική κινητική.
- Συνιστώμενο μέγεθος σωματιδίων καταλύτη: 0.10 mm για ρευστοποιημένες κλίνες και 2-5 mm για σταθερές κλίνες.

Και επίσης:

- Οι καταλύτες είναι χρήσιμοι όχι μόνο για την επιταχυντική τους δράση αλλά και για την εκλεκτικότητά τους, κάτι που εφαρμόζεται στην περίπτωση ανεπιθύμητων παράλληλων αντιδράσεων.

Τυπικές υποδείξεις για εναλλάκτες θερμότητας αυλών-κελύφους:

- Ελάχιστη θερμοκρασιακή διαφορά: 10°C (και για ψυκτικά ρευστά, 5°C).
- Συνιστώμενη ταχύτητα του ρευστού: 1 έως 3 m/s για τα υγρά και 9 – 30 m/s για τα αέρια.
- Ρευστά που προκαλούν ανόργανες ή οργανικές επικαθήσεις, διαβρωτικά ή υπό υψηλή πίεση, διοχετεύονται στους αυλούς του εναλλάκτη. Π.χ. όσον αφορά τις επικαθήσεις, αυτές καθαρίζονται πιο εύκολα περνώντας μια ψήκτρα μέσα από τους αυλούς.
- Συμπυκνούμενα ή ιξώδη ρευστά διοχετεύονται στην πλευρά του κελύφους του εναλλάκτη

Υπάρχει μεγάλος αριθμός τέτοιων υποδείξεων για κάθε είδος διεργασίας και σε επόμενες ενότητες όπου θα αναφερόμαστε πιο συγκεκριμένα σε αντιδραστήρες, διαχωριστήρες, εναλλάκτες θερμότητας και βοηθητικές παροχές, θα έχουμε την ευκαιρία να συζητήσουμε κάποιους από αυτούς.

5.1.2 Σχεδιασμός / επιλογή εξοπλισμού

Για τις στήλες κλασματικής απόσταξης, υπάρχει κανόνας για τον αριθμό δίσκων, παρόμοιος με εκείνο για το λόγο αναρροής. Ο οικονομικά άριστος αριθμός δίσκων πρέπει να είναι ο διπλάσιος από τον ελάχιστο θεωρητικό που αντιστοιχεί στον άπειρο λόγο αναρροής:

$$N_{\text{opt}} = 2\ N_{\text{min}}$$

αλλά επίσης, ένας παράγοντας ασφάλειας της τάξης του 10% προτείνεται για τη διόρθωση του υπολογισμένου αριθμού δίσκων από πιο ακριβείς μεθόδους. Αυτό απορρέει από την ανάγκη για ευελιξία και δυνατότητα προσαρμογής σε μεταβαλλόμενες συνθήκες και απαιτήσεις, όπως έχουμε τονίσει σε προγούμενες ενότητες. Ο δε πραγματικός αριθμός δίσκων υπολογίζεται από τον θεωρητικό, βάσει της απόδοσης δίσκου. Αυτή είναι 60-90% για απόσταξη ελαφρών υδρογονανθράκων και υδατικών διαλυμάτων ενώ μπορεί να πέσει στο 10-20% για απορρόφηση αερίων. Με παρόμοια λογική (ευελιξία), οι αντλίες αναρροής επιλέγονται ώστε να έχουν τουλάχιστον κατά 25% μεγαλύτερη ισχύ από την απαιτούμενη.

Στους εμπειρικούς κανόνες περιλαμβάνονται και διάφορα "τεχνάσματα" και απλουστευτικές παραδοχές που συνηθίζονται όταν έχουμε λίγα δεδομένα στη διάθεσή μας. Για παράδειγμα, όταν θέλουμε να υπολογίσουμε τον αριθμό θεωρητικών δίσκων με τη μέθοδο McCabe-Thiele θα χρειαστούμε δεδομένα ισορροπίας. Αυτά δεν υπάρχουν πάντα για πολλά σημεία ούτε σε μεγάλο εύρος θερμοκρασιών και πιέσεων. Στη θέση τους μπορεί να έχουμε μόνο μία εκτίμηση της σταθεράς ισορροπίας K από τη σχέση y = Kx ίσως και για μία μόνο θερμοκρασία και πίεση μέσα στο εύρος των συνθηκών που μας ενδιαφέρουν. Αν έχουμε δυαδικό μίγμα του πτητικού A με το λιγότερο πτητικό B, τότε μπορούμε να κάνουμε το εξής: υποθέτοντας ότι οι σταθερές K_A και K_B δεν αλλάζουν πολύ στις συνθήκες που θα επικρατούν στην αποστακτική στήλη, γράφουμε τη σχετική πτητικότητα ως εξής:

$$\alpha_{A/B} = K_A / K_B = y_A / x_A \; / \; y_B / x_B = y_A x_B / y_B x_A = y_A (1 - x_B) \; / \; (1 - y_A) \; x_A$$

Με ανακατάταξη των όρων, η παραπάνω σχέση γράφεται και έτσι:

$$y = \frac{x\alpha}{1 + (\alpha - 1)x}$$

όπου x και y αναφέρονται στο πτητικό συστατικό και μας επιτρέπει να σχεδιάσουμε με αρκετά καλή προσέγγιση την καμπύλη ισορροπίας από πολύ λίγα δεδομένα πτητικότητας. Προφανώς, αν το α αντιπροσωπεύει τη μέση σχετική πτητικότητα για τις δεδομένες περιοχές συνθηκών, η προσέγγιση θα είναι καλύτερη. Αν δεν έχουμε δεδομένα ισορροπίας, τότε, με παραδοχή ιδανικού μίγματος και ισχύος του νόμου του Raoult προσεγγίζουμε τη σχετική πτητικότητα ως το λόγο των τάσεων ατμών: $\alpha = P_A^0 / P_B^0$. Αν γνωρίζουμε τη σχετική πτητικότητα για τις συνθήκες του αποστάγματος D και του υπολείμματος B, κάνουμε την εκτίμηση $\alpha = \sqrt{\alpha_B \alpha_D}$ ενώ αν τη γνωρίζουμε και για την τροφοδοσία, η εκτίμησή μας θα είναι $\alpha = \sqrt[3]{\alpha_B \alpha_F \alpha_D}$.

Για τους πύργους απορρόφησης προτείνεται η άριστη τιμή για τον παράγοντα απορρόφησης κατά Kremser-Brown, A = G/Lm, να λαμβάνεται μεταξύ 1.25 και 2 (όπου G, L και m, η παροχή αερίου, παροχή διαλύτη και σταθερά Henry, αντίστοιχα).

Οι πύργοι με πληρωτικό υλικό πρέπει να σχεδιαστούν για να λειτουργούν περίπου στο 70% του ρυθμού πλημμύρισης. Πληροφοριακά, **πλημμύριση** (flooding) επέρχεται όταν ο ρυθμός του ανερχόμενου ατμού είναι τόσος ώστε να εμποδίζει την κάθοδο του υγρού. Τότε, η στήλη σταδιακά γεμίζει με υγρό μέσα στο οποίο σχηματίζονται φυσαλίδες ατμού ποικίλης κατανομής ως προς το μέγεθος, προκαλώντας τόσο έντονη ανάμιξη ώστε να αναιρέσουν το διαχωρισμό και τα προϊόντα κορυφής και πυθμένα να έχουν ίδια σύσταση με την τροφοδοσία. Γι' αυτό προτείνεται οι δίσκοι να έχουν τουλάχιστον 10% της επιφάνειας τους διαθέσιμη για κάθοδο του υγρού (π.χ. διάτρητη).

Για αντιδραστήρες συνεχούς ανάδευσης (CSTR) προτείνονται:

- Ισχύς αναδευτήρα μεταξύ 0.1 και 0.3 kW / m^3 αλλά αν έχουμε και μεταφορά θερμότητας, να υπολογίζουμε το τριπλάσιο.

- Αναλογία στάθμης υγρού προς διάμετρο προτείνεται να είναι 1:1 αλλά για υψηλές πιέσεις, μεγαλύτερες τιμές αυτού του λόγου είναι πιο οικονομικές.

Επίσης, φαίνεται ότι το "5" είναι κάτι σαν μαγικός αριθμός για αντιδραστήρες CSTR σε σχέση με τους άλλους τύπους, επειδή:

- για μετατροπές κάτω από 95% της τιμής στην ισορροπία, η απόδοση συστοιχίας 5 CSTR προσεγγίζει την εμβολική ροή,
- για αντιδραστήρες με κοκκώδη καταλυτική κλίνη η κατανομή των χρόνων παραμονής συχνά δεν είναι καλύτερη από αυτή μιας συστοιχίας 5 CSTR,
- σχετικά αργές αντιδράσεις υγρών διεξάγονται σε CSTR αντιδραστήρες με μια συστοιχία από 5 CSTR σε σειρά να αντιπροσωπεύει το οικονομικό άριστο.

Μια ποικιλία από εμπειρικές μαθηματικές σχέσεις, διαγράμματα, νομογραφήματα και πίνακες μπορούν να συμπεριληφθούν στα μέσα που διαθέτει ο μηχανικός για πιο εύκολες και γρήγορες αποφάσεις. Θα ήταν, τέλος, παράλειψη αν δεν αναφέραμε και τις σχέσεις κόστους-δυναμικότητας εξοπλισμού που είναι πολύ χρήσιμες για την οικονομική ανάλυση τουλάχιστον σε στάδιο προκαταρκτικών εκτιμήσεων. Η συνηθέστερη σχέση που συνδέει το κόστος προμήθειας εξοπλισμού με τη δυναμικότητά του έχει, τη μορφή:

$$K = C_0 + C_1 Q^n$$

όπου K το κόστος, C_0 υποδηλώνει κάποιο σταθερό κόστος ανεξάρτητο από το μέγεθος του εξοπλισμού (δεν είναι απαραίτητο να υπάρχει αλλά μπορεί να αναφέρεται σε απαραίτητη συνοδευτική υποδομή όπως π.χ. σύστημα αυτόματης ρύθμισης αντιδραστήρα) και C_1 κόστος ανά μονάδα δυναμικότητας, ενώ η δυναμικότητα Q υψώνεται σε έναν εκθέτη που συνήθως έχει τιμές μεταξύ 0.55 και 0.8. Ως δυναμικότητα, εννοούμε το χαρακτηριστικό μέγεθος του εξοπλισμού, π.χ. τον όγκο ενός αντιδραστήρα CSTR ή την επιφάνεια ενός εναλλάκτη θερμότητας.

Αν δεν υπάρχουν διαθέσιμες εκτιμήσεις από τη σχετική βιβλιογραφία που να συσχετίζει τα δεδομένα της αγοράς, χρησιμοποιείται η τιμή των 2/3. Τότε, υποθέτοντας μηδενικό σταθερό κόστος ή απλά αναφερόμενοι στο μεταβλητό μέρος του ολικού κόστους, μπορούμε να συσχετίσουμε την τιμή του εξοπλισμού που θέλουμε να πάρουμε με αυτή κάποιας συσκευής του ίδιου είδους και γνωστής δυναμικότητας και τιμής ως

$$C_1 / C_2 = (Q_1 / Q_2)^{2/3}.$$

5.1.3 Σύνθεση διεργασιών και κατάστρωση διαγράμματος ροής

Σε αυτή την υποενότητα παρουσιάζουμε μερικούς σημαντικούς κανόνες επιλογής και σύνθεσης διεργασιών που μπορεί να αποδειχθούν ιδιαίτερα χρήσιμη στην απλοποίηση του σχεδιασμού πολύπλοκων εγκαταστάσεων. Κατ' αρχήν, για να συνθέσουμε το διάγραμμα ροής, πρέπει να επιλέξουμε τις καταλληλότερες διεργασίες. Π.χ. για διαχωρισμούς υγρών μπορούμε να επιλέξουμε μεταξύ απόσταξης και εκχύλισης. Αφού επιλέξουμε τις διεργασίες θα προβούμε στο σχεδιασμό του εξοπλισμού με τρόπους και φιλοσοφία όπως αυτή των κανόνων που εκθέσαμε πιο πάνω. Πώς γίνεται η επιλογή της κατάλληλης διεργασίας από το σύνολο των διαθέσιμων εναλλακτικών λύσεων; Ο πιο βασικός εμπειρικός κανόνας που απαντά σε αυτό το ερώτημα μπορεί να συνοψιστεί ως εξής:

Κανόνας: Το κόστος λειτουργίας ελαχιστοποιείται σε συνθήκες πλησιέστερες προς εκείνες του περιβάλλοντος.

Πρακτικά, αυτό σημαίνει ότι όταν επιλέγουμε κάποια διεργασία, π.χ. διεργασία διαχωρισμού, προτιμούμε τη μέθοδο που μπορεί να λειτουργήσει με τις πιο ήπιες συνθήκες.

Εξήγηση: για να θερμάνουμε ή να ψύξουμε απαιτείται ενέργεια που κοστίζει. Παρόμοια και για να αυξήσουμε την πίεση ή να δημιουργήσουμε κενό. Επιπλέον οι μη ήπιες συνθήκες δημιουργούν πρόβλημα ασφάλειας σε περίπτωση ατυχήματος, αλλά και απαιτούν ανθεκτικότερα υλικά στις πιέσεις ή τη διάβρωση λόγω υψηλών θερμοκρασιών που θα επιταχύνουν ορισμένες αντιδράσεις ή λόγω συνθηκών που θα ευνοήσουν το σχηματισμό διαβρωτικών ενώσεων.

Αν πρέπει να αποκλίνουμε από τις συνθήκες περιβάλλοντος, είναι καλό να γνωρίζουμε και την οικονομική επίπτωση που θα έχει αυτό. Για να συγκρίνουμε διαφορετικές επιλογές σε ο,τι αφορά τη μεταβολή της θερμοκρασίας, μπορούμε να έχουμε υπ' όψι το εξής:

Κανόνας: κόστος ψύξης > κόστος θέρμανσης

Εξήγηση: Αυτό μπορούμε να το στηρίξουμε με τη βοήθεια της θερμοδυναμικής. Κατ' αρχήν, δίνουμε ένα ποιοτικό επιχείρημα. Όπως γνωρίζουμε, στο απόλυτο μηδέν δε μπορούμε να φτάσουμε. Άρα, περιμένουμε ότι όσο πλησιάζουμε σε χαμηλότερες θερμοκρασίες το απαιτούμενο έργο για απομάκρυνση της θερμότητας θα είναι όλο και περισσότερη και κοντά στο απόλυτο μηδέν θα τείνει στο άπειρο. Αντίθετα, για το ίδιο θερμοκρασιακό εύρος, μερικών εκατοντάδων βαθμών δεν υπάρχει τέτοιος φραγμός και περιμένουμε ότι το απαιτούμενο έργο θέρμανσης θα αυξάνεται πιο αργά σε σχέση με την επιχειρούμενη μεταβολή της θερμοκρασίας.

Για μια πιο ποσοτική ανάλυση σκεφτόμαστε ως εξής: ο συντελεστής απόδοσης για αντλία θερμότητας που εκτελεί ψυκτικό έργο είναι

$$COP_{ψύξη} \leq T_ψ \ / \ (T_π - T_ψ)$$

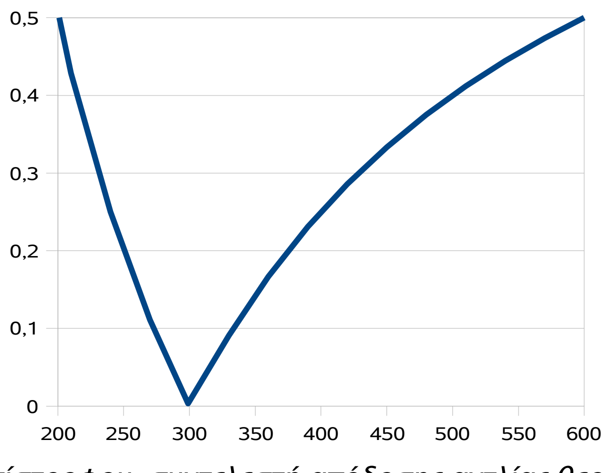
ενώ για αντλία θερμότητας που εκτελεί θερμαντικό έργο δίνεται από

$$COP_{θέρμανση} \leq T_θ \ / \ (T_θ - T_π)$$

όπου $T_π$ η θερμοκρασία περιβάλλοντος και $T_θ$ και $T_ψ$ η υψηλή και χαμηλή θερμοκρασία που θέλουμε να επιτύχουμε με τις δύο αντλίες. Το έργο που απαιτείται και στις δύο περιπτώσεις είναι

$$W = ΔQ \ / \ COP$$

όπου ΔQ η μεταφερόμενη θερμότητα. Οι συντελεστές απόδοσης μπορούν να ερμηνευθούν ως διακινούμενη θερμότητα ανά μονάδα έργου ή απαιτούμενο έργο ανά μονάδα θερμότητας (αν τους αντιστρέψουμε). Άρα, το έργο μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία όπως οι αντίστροφοι συντελεστές 1/COP. Αν το λειτουργικό κόστος είναι ανάλογο του έργου, τότε και η μεταβολή του θα είναι παρόμοια, όπως φαίνεται για παράδειγμα στο Σχήμα 5.1, με τις καμπύλες που υπολογίστηκαν για θερμοκρασία περιβάλλοντος ίση με 300 K:



Σχήμα 5.1 *Μεταβολή αντίστροφου συντελεστή απόδοσης αντλίας θερμότητας σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία-στόχο, αν η θερμοκρασία περιβάλλοντος είναι 300K.*

Όπως βλέπουμε, η κλίση της καμπύλης για ψύξη είναι πιο απότομη από την αντίστοιχη για τη θέρμανση (χονδρικά, η αύξηση του κόστους ψύξης είναι τρεις φορές πιο γρήγορη από την αντίστοιχη για τη θέρμανση, στις θεωρούμενες θερμοκρασιακές περιοχές). Φυσικά, ο παραπάνω υπολογισμός είναι προσεγγιστικός γιατί δεν παίρνει υπ' όψιν τη μεταβολή της θερμοχωρητικότητας των χρησιμοποιούμενων ρευστών και πιθανές αλλαγές φάσης που θα μεταβάλλουν τους COP. Πάντως η μορφή της καμπύλης για το κόστος ψύξης και θέρμανσης διατηρεί τα ίδια βασικά χαρακτηριστικά, όπως έχει φανεί στην πράξη.

Στη συνέχεια, παραθέτουμε μια σειρά κανόνων με εφαρμογή στην επιλογή διεργασιών διαχωρισμού.

Κανόνας: Οι αδρανείς προσμίξεις απομακρύνονται από την τροφοδοσία της κρίσιμης διεργασίας (δηλαδή πρέπει να προσθέσουμε ένα διαχωρισμό)

Εξήγηση: Συχνά έχουμε ανακύκλωση προϊόντος για την αύξηση της απόδοσης. Τότε θα είχαμε συσσώρευση αδρανών. Επίσης, τα αδρανή μπορεί να δυσχεραίνουν την αντίδραση, ανάμιξη, μεταφορά θερμότητας ή να επιφέρουν μείωση ρυθμού λόγω ελάττωσης της συγκέντρωσης κλπ καθώς και απομακρύνουν τις πραγματικές συνθήκες από αυτές της θεωρητικής ανάλυσης και του πιλοτικού πειράματος οδηγώντας σε λανθασμένες επιλογές λειτουργικών παραμέτρων.

Κανόνας: Σε σειρά διαχωρισμών, προηγούνται οι ευκολώτεροι (δηλαδή αυτοί που έχουν μεγαλύτερη κινητήρια δύναμη, όπως μεγάλη σχετική πτητικότητα).

Εξήγηση: Αυτό συνεπάγεται λιγότερη μάζα προς διακίνηση όταν έχουν απομείνει τα "δύσκολα" συστατικά. Για το δύσκολο διαχωρισμό έχουμε μεγαλύτερες απαιτήσεις ενέργειας ανά μονάδα μάζας μίγματος, άρα καλύτερα να έχουμε λιγότερο μίγμα.

Κανόνας: Τα χρήσιμα συστατικά απομακρύνονται ένα-ένα ως προϊόντα κορυφής (οι διαχωρισμοί πρέπει να συνδυαστούν έτσι ώστε τα χρήσιμα να απομακρύνονται ως πτητικά)

Εξήγηση: Έτσι μειώνονται οι απαραίτητοι διαχωρισμοί, όπως και η απαιτούμενη ενέργεια. Επίσης, μέσω του λόγου αναρροής έχουμε πιο άμεσο έλεγχο της σύστασης του προϊόντος. Αρχίζουμε από το πιο πτητικό γιατί είναι πιο εύκολο ενεργειακά και αναγκαστικά το επόμενο θα είναι προϊόν κορυφής, οπότε συνεχίζουμε με την ίδια λογική.

Κανόνας: Επιβάλλεται εγκατάσταση συστήματος απομάκρυνσης (purge system) για τα συστατικά που δε συμμετέχουν στην αντίδραση ή τα δηλητήρια του καταλύτη.

Εξήγηση: Για τα συστατικά που δε μετέχουν στην αντίδραση, βλ. και το σχόλιο σχετικά με τα αδρανή. Οι ακαρθαρσίες μπορεί να δώσουν παραπροϊόντα. Για τα δηλητήρια είναι επίσης προφανές ότι θα βλάψουν την εκλεκτικότητα όσο και την απόδοση του καταλύτη.

Κανόνας: Πρέπει να προνοήσουμε για την ανάκτηση χρήσιμων συστατικών που παρασύρονται κατά το διαχωρισμό αδρανών/δηλητηρίων

Εξήγηση: Αυτονόητη, εφόσον δεν είναι τόσο δύσκολη ώστε να μη συμφέρει οικονομικά. Πρόκειται περισσότερο για υπενθύμιση που μπορεί να υπάρχει σε ένα κατάλογο από ανάλογες οδηγίες του τύπου "να μην ξεχάσω..."

Κανόνας: Μεταξύ άμεσων και έμμεσων μεθόδων διαχωρισμού προτιμώνται οι άμεσες.

Εξήγηση: Διαφορετικά θα πρέπει να κάνουμε άλλον ένα διαχωρισμό για να απομακρύνουμε το υλικό μέσον διαχωρισμού, πράγμα που αυξάνει την πολυπλοκότητα του σχεδιασμού και το πάγιο ή και λειτουργικό κόστος. Επίσης, επειδή κανένας διαχωρισμός δεν είναι τέλειος, θα έχουμε πρόβλημα καθαρότητας του τελικού προϊόντος (προσμίξεις διαχωριστικού μέσου).

Βάσει των παραπάνω κανόνων, η διαδικασία επιλογής διεργασιών μπορεί να βασιστεί στα παρακάτω κριτήρια και ενέργειες:

- Περιορισμός στις μεθόδους διαχωρισμού (ή άλλης διεργασίας) που ανταποκρίνονται στα χαρακτηριστικά του συστήματος (π.χ. στερεά, υγρά, αέρια, μίγματα και συνδυασμοί αυτών κλπ).
- Μεταξύ αμέσων και εμμέσων διεργασιών (που απαιτούν προσθήκη τρίτου συστατικού) προτιμώνται οι άμεσες. Π.χ. η απόσταξη που ως μέσο διαχωρισμού χρησιμοποιεί θερμότητα είναι προτιμώτερη από την εκχύλιση όπου διαχωριστικό μέσο είναι κάποιος διαλύτης.
- Προτιμώνται οι διεργασίες με τις ηπιώτερες συνθήκες λειτουργίας.
- Προτιμώνται οι διεργασίες για τις οποίες υπάρχει περισσότερη τεχνολογική πείρα.

Κλείνουμε αυτή την υποενότητα υπενθυμίζοντας ότι οι παραπάνω κανόνες δεν είναι απόλυτοι και συμβαίνει να αλληλοαποκλείονται ή να αναιρούνται σε ειδικές περιπτώσεις. Επομένως δεν πρέπει και, στην πραγματικότητα, ούτε είναι δυνατό να τους ακολουθούμε τυφλά, αλλά χρειάζεται να βλέπουμε κριτικά τις υποδείξεις του στο γενικότερο πλαίσιο της κατάστασης που αντιμετωπίζουμε. Για άλλη μια φορά τονίζεται ότι η πιο βασική αρχή που χαρακτηρίζει τη δουλειά του μηχανικού διεργασιών είναι η συγκεκριμένη ανάλυση της ιδιαίτερης κατάστασης.

5.2 Μέθοδοι για παραμετρική και δομική αριστοποίηση

5.2.1 Οι δύο προσεγγίσεις: "συγχώνευση" και διαχωρισμός ΑΣ-περιορισμών

Αντίθετα από τους εμπειρικούς κανόνες και τεχνάσματα/ευρήματα, οι μέθοδοι που θα συζητηθούν στη συνέχεια χαρακτηρίζονται από μεγάλη γενικότητα και δεν περιορίζονται στο πεδίο του σχεδιασμού χημικών διεργασιών αλλά επεκτείνονται σχεδόν σε κάθε τομέα του οποίου τα προβλήματα επιδέχονται μαθηματική διατύπωση.

Θα συζητήσουμε το πρόβλημα της αριστοποίησης

- θεωρητικά
- σε επίπεδο παραμετρικής αριστοποίησης
- σε επίπεδο δομικής αριστοποίησης

και θα δούμε ότι σε κάθε επίπεδο, μπορούμε να διακρίνουμε δύο βασικές κατηγορίες ή "φιλοσοφίες" λύσεων: μία κατά την οποία οι περιορισμοί "συγχωνεύονται" με την αρχική Αντικειμενική Συνάρτηση δίνοντας μια τροποποιημένη συνάρτηση η οποία είναι και το μόνο μαθηματικό "αντικείμενο" προς χειρισμό. Και μία κατά την οποία η Αντικειμενική Συνάρτηση και το μαθηματικό μοντέλο ή σύστημα περιοριστικών εξισώσεων παραμένουν ως διακριτά αντικείμενα και αυτοτελή αν και αλληλοσυνδεόμενα προβλήματα που λύνονται το καθένα με τις δικές του, αντίστοιχες τεχνικές.

Όπως έχουμε πει, τα προβλήματα που συζητάμε μπορούν να διατυπωθούν ως προβλήματα ελαχιστοποίησης συναρτήσεων. Έχουμε ήδη αναφερθεί στο πρόβλημα του δεσμευμένου ακρότατου (αριστοποίηση υπό περιορισμούς). Σκιαγραφούμε τους δύο τρόπους προσέγγισης αυτού, κατ' αρχήν σε κάπως πιο θεωρητικό επίπεδο.

Μετατροπή δεσμευμένου σε αδέσμευτο ακρότατο – πολλαπλασιαστές Lagrange.

Γενικά, το πρόβλημα δεσμευμένου ακρότατου μπορεί να αναχθεί σε πρόβλημα αδέσμευτου ακρότατου. Αν έχουμε το πρόβλημα ελαχιστοποίησης

$$\min F(\mathbf{x}),$$

$$G_i(\mathbf{x}) = 0 \text{ (περιορισμοί)}$$

αποδεικνύεται ότι μπορούμε να το ξαναγράψουμε ως εξής:

$$\min \Phi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = F(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\Sigma}_i \lambda_i G_i(\mathbf{x}) = 0$$

(χωρίς άλλους περιορισμούς)

Οι συντελεστές λ_i ονομάζονται **πολλαπλασιαστές Lagrange** και *προστίθενται στις μεταβλητές του προβλήματος* (δηλαδή ελαχιστοποιούμε τη νέα Αντικειμενική Συνάρτηση *και* ως προς αυτούς). Η λύση αυτού του προβλήματος, δηλαδή το άριστο άνυσμα ($\mathbf{x}_{opt}$, $\boldsymbol{\lambda}_{opt}$), μας δίνει επίσης και την άριστη λύση $\mathbf{x}_{opt}$ για το αρχικό πρόβλημα. Σημειώνουμε επίσης, ότι παρόμοια λύνεται το πρόβλημα όταν εκτός από τις εξισώσεις $G_i(\mathbf{x}) = 0$, στους περιορισμούς περιλαμβάνονται και ανισότητες $H_i(\mathbf{x}) \geq 0$. Όπως έχουμε αναφέρει, αυτές μπορούν να γραφούν ως εξισώσεις αν ορίσουμε νέες μεταβλητές h_i και γράψουμε $H_i(\mathbf{x}) - h_i^2 = 0$ (υψώνουμε στο τετράγωνο για να είναι πάντα θετικές ποσότητες). Τότε, μιλάμε για συνθήκες, θεώρημα και πολλαπλασιαστές **Kuhn-Tucker**. Και στις δύο περιπτώσεις πρόκειται για αναγκαίες και όχι ικανές συνθήκες εύρεσης του ελαχίστου, αλλά υπάρχει θεώρημα που υποδεικνύει πότε ακριβώς οι συνθήκες γίνονται και ικανές. Για τις περισσότερες περιπτώσεις με πρακτική αξία, είναι και ικανές. Πάντως, με τη μέθοδο αυτή *αυξάνεται η διαστατικότητα* και εν γένει πολυπλοκότητα του προβλήματος, πράγμα που είναι και το κόστος που πληρώνουμε για τη συγχώνευση των περιορισμών στην ΑΣ.

Το συμπέρασμα είναι ότι κατ' αρχήν μπορούμε να αναφερθούμε μόνο σε μεθόδους αδέσμευτου ακρότατου χωρίς να βλάψουμε τη γενικότητα της ανάλυσής μας όσον αφορά το πρόβλημα του σχεδιασμού.

Μείωση της διαστατικότητας.

Αν έχουμε Μ μεταβλητές και Ν περιορισμούς, τότε μπορούμε να λύσουμε το σύστημα των εξισώσεων των περιορισμών ως προς τις Ν που θα εκφραστούν ως συναρτήσεις των Μ-Ν. Έχουμε ήδη συζητήσει πώς μπορούμε να διακρίνουμε Μ-Ν Μεταβλητές Σχεδιασμού ως συνάρτηση των οποίων θα εκφράσουμε τις Ν Μεταβλητές Επίλυσης. Τότε, το αρχικό πρόβλημα μετασχηματίζεται στο εξής:

$$\min F(\mathbf{d}; \mathbf{s}(\mathbf{d})),\ \{s_i\} \cup \{d_i\} = \{x_i\}$$

όπου με **d** παριστάνουμε τις Μεταβλητές Σχεδιασμού και με **s** τις Μεταβλητές Επίλυσης οι οποίες έχουν εκφραστεί ως συναρτήσεις των ΜΣ, λύνοντας το σύστημα εξισώσεων G_i. Το συμπέρασμα είναι και πάλι το ίδιο: κατ' αρχήν μπορούμε να λύσουμε, στη θεωρία, το πρόβλημα του αδέσμευτου ακρότατου και αυτό αρκεί για να διαπραγματευτούμε όλα τα προβλήματα που μας ενδιαφέρουν, ανεξαρτήτως περιορισμών. Όλα μπορούν να αναχθούν σε προβλήματα αδέσμευτου ακρότατου.

5.2.2 Από τη θεωρία στην πράξη – παραμετρική αριστοποίηση

Στην πράξη, ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης μπορεί να λυθεί αναλυτικά, γραφικά ή αριθμητικά (με χρήση επαναληπτικών αλγόριθμων που συνήθως εκτελούνται σε υπολογιστή). Τα περισσότερα προβλήματα σχεδιασμού διεργασιών περιλαμβάνουν πολύπλοκα μη γραμμικά μοντέλα οπότε είναι αναπόφευκτη η χρήση αριθμητικών μεθόδων. Το ίδιο ισχύει και για την περίπτωση μείωσης της διαστατικότητας που αναφέραμε γιατί ένα σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων κατά κανόνα δε μπορεί να λυθεί αναλυτικά, οπότε χρειάζονται αριθμητικές μέθοδοι, όπως αυτές που συζητήσαμε στην προηγούμενη ενότητα. Αλλά και όταν αυτό γίνεται, το κόστος είναι να πάρουμε μια πιο πολύπλοκη Αντικειμενική Συνάρτηση.

Γενικά, λοιπόν, θα χρειαστούν τα εξής, που θα αποτελέσουν και τους "δομικούς λίθους" κάθε λύσης του προβλήματος αριστοποίησης:

- αλγοριθμικές μέθοδοι επίλυσης συστημάτων μη γραμμικών εξισώσεων

- αλγοριθμικές μέθοδοι ελαχιστοποίησης συναρτήσεων

Για την επίλυση των συστημάτων είδαμε ότι με τη βοήθεια του αλγόριθμου LCR μπορούμε να πάρουμε τη σειρά με την οποία πρέπει να λυθούν οι εξισώσεις ή τον τρόπο με τον οποίο μπορούμε να "σπάσουμε" το αρχικό σύστημα εξισώσεων σε μικρότερα. Στη συνέχεια, απέμεινε να συζητηθούν μέθοδοι επίλυσης μεμονωμένων εξισώσεων ή συστημάτων εξισώσεων που θα εφαρμόζονται στα υποσυστήματα τα οποία μας δίνει ο αλγόριθμος LCR, για τις οποίες και αποκτήσαμε μια γενική εικόνα στην προηγούμενη ενότητα.

Η αριθμητική προσέγγιση για την επίλυση τέτοιων προβλημάτων συνίσταται στον κατάλληλο συνδυασμό των παραπάνω μεθόδων. Γενικά, μπορούμε να καταστρώσουμε τη λύση του προβλήματος, είτε αναλυτική είναι αυτή είτε αριθμητική, με δύο τρόπους που παρουσιάζουν ομοιότητα με τις δύο θεωρητικές προσεγγίσεις αύξησης και μείωσης της διαστατικότητας τις οποίες συζητήσαμε, χωρίς να ταυτίζονται απόλυτα:

Α. Μετατροπή σε πρόβλημα αδέσμευτου ακρότατου.

Β. Ξεχωριστή εφαρμογή υπολογισμών ελαχιστοποίησης και επίλυσης συστήματος εξισώσεων περιορισμών. Στην περίπτωση αριθμητικής λύσης, έχουμε επαναληπτική εφαρμογή της ελαχιστοποίησης και της λύσης συστήματος εναλλάξ μέχρι να επέλθει η επιθυμητή σύγκλιση.

Α. Αριστοποίηση υπό περιορισμό με τη μορφή αδέσμευτου ακρότατου.
Το "τέχνασμα" συνίσταται στην ενσωμάτωση των περιορισμών στην ΑΣ με τρόπο τέτοιο ώστε κάθε απομάκρυνση από τους περιορισμούς να οδηγεί σε μεγάλη αύξηση των τιμών της τροποποιημένης ΑΣ. Ένα παράδειγμα θα είναι πιο διαφωτιστικό.

Μέθοδος των ποινών:
Έστω η ελαχιστοποίηση της $F(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 + 10$ με περιορισμό $G(x, y) = x\text{-}y = 0$. Φυσικά αυτό είναι ένα απλό πρόβλημα και μπορεί να αντιμετωπιστεί λύνοντας τη $G = 0$ ως προς μία από τις δύο μεταβλητές για να γράψουμε π.χ. $F(x, y, z) = 2x^2 + z^2 + 10$, αλλά εδώ θέλουμε απλώς να σκιαγραφήσουμε τη μέθοδο που παραμένει βασικά η ίδια και σε πολυπλοκώτερα προβλήματα.

Για να ενσωματώσουμε τους περιορισμούς στην ΑΣ, μπορούμε να γράψουμε την τροποποιημένη συνάρτηση

$$\Phi(x, y, z; \lambda) = F(x, y, z) + \lambda^2\,[G(x, y)]^2,\ \lambda = \text{πραγματικός}.$$

Τότε, θα συμβεί το εξής: όταν δεν ισχύει ο περιορισμός $G = 0$, ο όρος $\lambda^2\,[G(x, y)]^2$ θα έχει θετική τιμή που θα αυξάνει την τιμή της τροποποιημένης Αντικειμενικής Συνάρτησης. Όσο πιο μεγάλη είναι η παράμετρος λ τόσο πιο έντονη θα είναι η αύξηση της Αντικειμενικής Συνάρτησης για μη ικανοποίηση του περιορισμού (δηλαδή για $y \neq x$). Με άλλα λόγια, για κάθε απομάκρυνση από τον περιορισμό επιβάλλουμε μια **"ποινή"** στη συνάρτηση, εξ ου και η ονομασία. Τώρα, η Φ έχει γενικά ελάχιστο για άλλες τιμές των μεταβλητών από την αρχική F αλλά αποδεικνύεται ότι όταν το λ τείνει στο άπειρο, τόσο το σημείο εμφάνισης του ελαχίστου όσο και η τιμή του συμπίπτουν. Στην πράξη, πρέπει να κάνουμε ελαχιστοποίηση για όλο και μεγαλύτερες τιμές του λ (π.χ. 10, 100, 1000) μέχρι να παρατηρήσουμε ότι η λύση δε διαφοροποιείται σημαντικά.

Να σημειωθεί ότι το λ *δεν είναι μεταβλητή* (αντίθετα από τους πολλαπλασιαστές Lagrange) αλλά *σταθερή παράμετρος*, δηλαδή η ελαχιστοποίηση εξακολουθεί να γίνεται ως προς x, y και z. Ανάλογη είναι η εφαρμογή της μεθόδου για περισσότερες μεταβλητές και περισσότερους περιορισμούς της μορφής $G_i(\mathbf{x})\leq 0$. Τότε, η "συνάρτηση ποινής" που προστίθεται στην αρχική ΑΣ για να δώσει την τροποποιημένη μορφή της ορίζεται ως:

$$P(x) = \boldsymbol{\Sigma}_i[\max(0, G_i(\mathbf{x}))]^2$$

Αυτή η συνάρτηση έχει την ιδιότητα ότι είναι μηδέν στον υπόχωρο των σημείων **x** όπου επαληθεύονται ταυτόχρονα όλοι οι περιορισμοί και θετική σε κάθε άλλο σημείο. Για παράδειγμα, αν είχαμε ένα πρόβλημα μιας μεταβλητής και δύο περιορισμούς που συνοψίζονται στη σχέση $a < x < b$, τότε η συνάρτηση ποινής παίρνει την εξής μορφή:

$$P(x) = [\max(0, a\text{-}x)]^2 + [\max(0, x\text{-}b))]^2$$

θα είναι μηδέν στο διάστημα (a, b) και θετική, και μάλιστα με σχήμα παραβολής (δοκιμάστε να κάνετε το σχήμα!), για τους υπόλοιπους πραγματικούς αριθμούς. Απομένει να οριστεί μια ακολουθία παραμέτρων λ_k, $k = 1, 2, 3, \ldots$ που να τείνει στο άπειρο για αυξανόμενο k, π.χ. $\lambda_k, = 2^k$, για να βρεθεί και η οριακή τιμή του ζητούμενου ελάχιστου.

Προϋπόθεση εφαρμογής της μεθόδου ποινών είναι η Αντικειμενική Συνάρτηση και οι περιορισμοί να δίνονται από συνεχείς συναρτήσεις με συνεχείς πρώτες παραγώγους.

Μέθοδος των φραγμάτων:

Είναι παρόμοιας φιλοσοφίας με τη μέθοδο των ποινών. Θεωρούμε το πρόβλημα

$$\min F(\mathbf{x})$$

$$G_i(\mathbf{x}) <= 0$$

όπου *στους περιορισμούς δεν περιλαμβάνεται καμία εξίσωση* και ορίζουμε τη συνάρτηση φράγματος

$$B(\mathbf{x}) = -\boldsymbol{\Sigma}_i[G_i(\mathbf{x})]^{-1}$$

Αυτή είναι θετική και πλησιάζοντας στα όρια των περιορισμών (στις τιμές του **x** που μηδενίζουν τις συναρτήσεις των περιορισμών) τείνει στο άπειρο. Ορίζουμε την τροποποιημένη ΑΣ της μορφής

$$\Phi(\mathbf{x}; \mu_k) = F(\mathbf{x}) + B(\mathbf{x}) \,/\, \mu_k$$

όπου μ_k μια ακολουθία παραμέτρων που τείνει στο άπειρο. Αποδεικνύεται ότι το ελάχιστο της Φ τείνει στο ελάχιστο της F καθώς η παράμετρος μ αυξάνεται.

Β. Αριστοποίηση υπό περιορισμό με εναλλάξ χειρισμό ΑΣ και περιορισμών.

Εδώ εκμεταλλευόμαστε τη διάκριση των μεταβλητών σε Μεταβλητές Σχεδιασμού και Μεταβλητές Επίλυσης και ακολουθούμε τα εξής βήματα:

1. Ορισμός αρχικών τιμών για τις ΜΣ
2. Επίλυση του μοντέλου για τις δεδομένες ΜΣ και εύρεση αντίστοιχων τιμών των ΜΕ
3. Με δεδομένες τις ΜΕ που βρέθηκαν, ελαχιστοποίηση της ΑΣ
4. Αν η μεταβολή των ΜΣ και των ΜΕ σε σχέση με την προηγούμενη φορά που πήραν τιμή είναι κάτω από μια ανοχή που θέσαμε αρχικά, τότε έχουμε σύγκλιση και τερματίζουμε, αλλιώς επιστροφή στο βήμα 2.

5.2.3 Αλγόριθμοι ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς

Είτε λύσουμε το πρόβλημα με περιορισμούς οπότε έχουμε εναλλαγή επίλυσης των Εξισώσεων Σχεδιασμού (περιορισμών) και ελαχιστοποίησης της Αντικειμενικής Συνάρτησης είτε το ανάγουμε σε πρόβλημα χωρίς περιορισμούς (π.χ. μέθοδος ποινών, μέθοδος φραγμάτων), καταλήγουμε στο ίδιο: ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς. Τίθεται το ερώτημα πώς υλοποιείται αυτή. Οι μέθοδοι για αυτό μπορεί να είναι:

- αναλυτικός υπολογισμός πρώτων και δεύτερων παραγώγων· είναι εφικτή μόνο για απλά προβλήματα.
- Γραφική λύση. Παρόμοια, είναι εφικτή για απλά προβλήματα όταν ο αναλυτικός

υπολογισμός είναι δύσκολος.

- Αριθμητική λύση με επαναληπτικούς αλγόριθμους. Αυτή είναι και η συνηθέστερη περίπτωση.

Οι αλγόριθμοι ελαχιστοποίησης αποτελούν διαδοχή βημάτων της μορφής $\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{X}_{k+1}+\lambda_k \mathbf{S}_k$ όπου *λ* είναι το "μήκος βήματος" και **S** ένα άνυσμα κατεύθυνσης ορισμένο στο χώρο των μεταβλητών. Ας θυμηθούμε εδώ και όσα είχαμε πει στην προηγούμενη ενότητα για την εύρεση των ριζών μιας εξίσωσης ή για τη λύση ενός συστήματος εξισώσεων. Εκεί, ο πυρήνας της μεθόδου ήταν η πρόσθεση μιας διόρθωσης στην εκάστοτε τιμή του x. Το ίδιο ακριβώς γίνεται και εδώ. Η διόρθωση είναι το γινόμενο του μήκους του βήματος επί το άνυσμα της κατεύθυνσης. Καθώς πλησιάζουμε στο ελάχιστο, αυτά τα δύο μπορεί να μεταβάλλονται μέχρι να μας οδηγήσουν σε μια πολύ καλή προσέγγιση. Φυσικά, το θέμα είναι πώς επιλέγουμε το μήκος βήματος και την κατεύθυνση σε κάθε επανάληψη. Γι' αυτό, κάθε μεθοδολογία προσφέρει εναλλακτικούς τρόπους καθορισμού

- του μήκους του βήματος και
- της κατεύθυνσης κατά την οποία γίνεται η διόρθωση των μεταβλητών,

δηλαδή της στρατηγικής αναζήτησης του ελαχίστου, ενώ χρειάζεται επίσης

- καθορισμός αρχικών τιμών
- κριτήριο σύγκλισης ή τερματισμού το οποίο μπορεί με τη σειρά του να είναι:
  - μεταβολή, από επανάληψη σε επανάληψη, των X κάτω από ένα όριο,
  - μεταβολή της συνάρτησης κάτω από ένα όριο,
  - μέτρο των παραγώγων κάτω από ένα όριο,
  - μέγεθος του βήματος κάτω από ένα όριο.

Κατηγορίες επαναληπτικών αλγόριθμων

Στην πρώτη ενότητα είχαμε πει ότι μια συνάρτηση μπορεί να έχει πολλά τοπικά ελάχιστα. Το ένα από αυτά που έχει τη χαμηλότερη τιμή, είναι το ολικό ελάχιστο και είναι αυτό που θα θέλαμε να βρούμε στην ιδανική περίπτωση. Αλλά αυτό δεν είναι πάντα δυνατό. Υπάρχουν αλγόριθμοι που μπορούν να βρούν εγγυημένα ένα τοπικό ακρότατο αν ξεκινήσουν από κάποιο όχι πολύ μακρινό σημείο, αλλά θα σταματήσουν εκεί. Υπάρχουν και αλγόριθμοι που βασίζονται σε διάφορες ευρηματικές τεχνικές και μπορούν να "αποδράσουν" από ένα τοπικό ακρότατο, να "εξερευνήσουν" μεγαλύτερες περιοχές του χώρου των μεταβλητών για να βρούνε ακόμη καλύτερες τιμές. Στην ιδανική περίπτωση θα εντοπίσουν το ολικό ακρότατο.

Βάσει των παραπάνω, οι αλγόριθμοι ελαχιστοποίησης κατατάσσονται σε τοπικούς και μη τοπικούς. Επίσης, κριτήριο κατάταξης είναι και η χρήση ή όχι παραγώγων. Στη συνέχεια αναφέρουμε μερικούς από τους πιο γνωστούς αλγόριθμους ελαχιστοποίησης

- Τοπικοί επαναληπτικοί αλγόριθμοι χωρίς χρήση παραγώγων. Αυτοί είναι προγραμματιστικά απλοί αλλά αργοί. Πιο γνωστός είναι ο αλγόριθμος των Nelder – Mead που βασίζεται στη διόρθωση όχι ενός αλλά N+1 σημείων όπου N ο αριθμός των μεταβλητών. Τα σημεία αυτά σταδιακά "περικυκλώνουν" το ελάχιστο μέχρι να το εντοπίσουν σε μια πολύ μικρή περιοχή. Άλλη μέθοδος είναι η κίνηση κατά μήκος των διευθύνσεων των συντεταγμένων με σταθερό ή μειούμενο βήμα. Π.χ. στην περίπτωση δύο μεταβλητών, κινούμαστε κατά τον άξονα των x και μετά κατά τον άξονα των y κατά ένα βήμα ±λ και διαλέγουμε το σημείο με τη χαμηλότερη τιμή. Από εκεί επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία με μικρότερο λ μέχρι να επιτευχθεί κάποιο κριτήριο σύγκλισης.

- Τοπικοί επαναληπτικοί αλγόριθμοι με υπολογισμό παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης, όπως:
    - Μεγίστης καθόδου: κατάλληλη για γρήγορο εντοπισμό της περιοχής όπου ευρίσκεται το ελάχιστο – θα περιγραφεί αναλυτικά στη συνέχεια.
    - Συζυγών κλίσεων: κατάλληλη για λεπτομερέστερη "εξερεύνηση" της περιοχής του ελαχίστου· συχνά συνδυάζεται με την προηγούμενη.
    - Μέθοδος Newton: χρησιμοποιεί όρους δεύτερης τάξης που λαμβάνουν υπ' όψιν την καμπυλότητα της συνάρτησης για καλύτερη επιλογή κατευθύνσεων μεταβολής.
    - Μέθοδοι Marquardt-Levenberg και BFGS: βελτιώσεις της μεθόδου Newton.
- Γραμμικός προγραμματισμός: μόνο για γραμμικές σχέσεις.
- Μη τοπικοί ή καθολικοί αλγόριθμοι. Έχει ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε ότι χρησιμοποιούν τεχνάσματα βασισμένα σε έννοιες και παρατηρήσεις από τα πεδία της φυσικοχημείας, της βιολογίας και της οικολογίας:
    - Προσομοιωμένη ανόπτηση (simulated annealing): έχει δανειστεί έννοιες της στατιστικής θερμοδυναμικής για να μιμηθεί τη διαδικασία με την οποία ένα φυσικό σύστημα, και συγκεκριμένα ένα υλικό που έχει υποστεί ανόπτηση, ελαττώνει την ενέργειά του – θα περιγραφεί αναλυτικά στη συνέχεια.
    - Μέθοδος κατωφλίου (threshold optimization): ουσιαστικά είναι απλούστευση της προσομοιωμένης ανόπτησης.
    - Γενετικοί αλγόριθμοι (genetic algorithms): βασίζονται στη σταδιακή "μετάλλαξη" μιας αρχικής λύσης συνδυάζοντάς την με άλλες μέχρι να βελτιωθεί αρκετά. Είναι προφανής ο παραλληλισμός με τις μεταλλάξεις του γενετικού υλικού των ζωντανών οργανισμών.
    - Μέθοδος του σμήνους (swarm optimization): θα μπορούσαμε να πούμε ότι είναι το αντίστοιχο της μεθόδου Nelder-Mead στους μη τοπικούς αλγόριθμους. Χρησιμοποιεί ένα σύνολο σημείων που συμπεριφέρεται όπως τα σμήνη των πτηνών τα οποία κινούνται ομαδικά αποφεύγοντας κινδύνους (μέγιστα) και αναζητώντας τροφή (ελάχιστα).

Αλγόριθμοι της δεύτερης κατηγορίας (καθολικοί ή μη τοπικοί) υπάρχουν και για προβλήματα όπου υπεισέρχονται και διακριτές εκτός από συνεχείς μεταβλητές. Στη συνέχεια περιγράφουμε πιο αναλυτικά αντιπροσωπευτικές μεθόδους και από τις δύο κατηγορίες:

Παράδειγμα τοπικού αλγόριθμου: μέθοδος μέγιστης κλίσης

Αυτή η τεχνική εκμεταλλεύεται το γεγονός ότι η μέγιστη μεταβολή της συνάρτησης γίνεται κατά μήκος του ανύσματος των μερικών παραγώγων (κλίση ή ανάδελτα της συνάρτησης, grad) που παίζει και το ρόλο του ανύσματος κατεύθυνσης **S**. Αυτό μετατρέπεται σε μοναδιαίο και πολλαπλασιάζεται με ένα μήκος βήματος λ πριν χρησιμοποιηθεί σε κάθε στάδιο επανάληψης. Η πιο απλή υλοποίηση της μεθόδου περιλαμβάνει τα εξής βήματα:

α. Απόδοση αρχικών τιμών x και βήματος λ (π.χ. μέση ή μέγιστη απόλυτη τιμή των παραγώγων της Αντικειμενικής Συνάρτησης στο σημείο **x**). Επίσης, ορίζεται ο λόγος μεταβολής βήματος, *r*, που θα χρειαστεί στα επόμενα βήματα.

β. Υπολογισμός του grad F και μετατροπή του σε μοναδιαίο άνυσμα: $\mathbf{S}=\nabla F/\|\nabla F\|$

γ. Υπολογισμός της νέας θέσης $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \lambda S$ και της νέας τιμής της Αντικειμενικής Συνάρτησης εκεί δ. Αν η Αντικειμενική Συνάρτηση έχει μειωθεί τότε:

δ1. Αν το βήμα είναι μικρότερο από κάποια ανοχή που έχουμε ορίσει, θεωρούμε ότι επήλθε σύγκλιση και τερματίζουμε τον αλγόριθμο.

δ2. Αν το βήμα είναι πάνω από την ανοχή, το μικραίνουμε κατά ένα συγκεκριμένο λόγο r που έχουμε θέσει μαζί με την ανοχή: $\lambda' = r\lambda$.

ε. Επιστροφή στο βήμα (β).

Σε άλλες παραλλαγές, το βήμα υπολογίζεται κάνοντας δοκιμές (ή και λύνοντας ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης) κατά μήκος του grad F και επιλέγοντας την τιμή που επιφέρει τη μεγαλύτερη μεταβολή στην Αντικειμενική Συνάρτηση. Επίσης, τα κριτήρια σύγκλισης μπορούν να είναι άλλα, σύμφωνα με όσα είπαμε πιο πάνω.

Παράδειγμα μη τοπικού αλγόριθμου: προσομοιωμένη ανόπτηση.
Η ιδέα λαμβάνεται από τη συμπεριφορά των φυσικοχημικών συστημάτων που βρίσκουν την κατάσταση ελάχιστης ενέργειας αν και αποτελούνται από τεράστιο αριθμό ατόμων και αντίστοιχα βαθμών ελευθερίας (=μεταβλητών). Όπως γνωρίζουμε από τη μεταλλουργία, ένα υλικό που υφίσταται απότομη ψύξη θα παγιδευτεί σε κάποιο τοπικό ελάχιστο και δε θα έχει τέλεια κρυσταλλική δομή. Ενώ με θέρμανση και ελεγχόμενη ψύξη (ανόπτηση) θα σχηματιστούν τελειότεροι και μεγαλύτεροι κρύσταλλοι, κατάσταση που αντιστοιχεί και σε χαμηλότερη ενέργεια. Άρα, μπορούμε να προσπαθήσουμε να μιμηθούμε τη φύση για να ελαχιστοποίησουμε μια αντικειμενική συνάρτηση που θα την ονομάσουμε "ενέργεια" - χωρίς να έχει σχέση αναγκαστικά με ενέργεια, στην κυριολεξία.

Η διαδικασία είναι η εξής: ξεκινώντας από ένα αρχικό σημείο κινούμαστε δοκιμαστικά προς κάποιο άλλο (το βήμα μπορεί να επιλεγεί τυχαία από κάποιο διάστημα επιτρεπτών τιμών από 0 μέχρι ένα μέγιστο όριο, αλλά επιτρέπονται και άλλες τακτικές). Τότε, ελέγχουμε αν η συνάρτηση μειώθηκε. Αν ναι, η "κίνηση" γίνεται δεκτή, δηλαδή κρατάμε τις νέες συντεταγμένες. Αν όχι, τότε υπολογίζουμε τη μεταβολή $\Delta E > 0$, που επήλθε στην "ενέργεια" (δηλαδή την Αντικειμενική Συνάρτηση) και μετά υπολογίζουμε τον παράγοντα Boltzmann της μορφής $\exp(-\Delta E/T)$ όπου T η "θερμοκρασία" του προβλήματος – δεν έχει σχέση με πραγματική θερμοκρασία αλλά είναι μια παράμετρος όπου δίνουμε εμείς τιμή στην αρχή και μπορούμε να την τροποποίησουμε ανάλογα με τη συμπεριφορά της σύγκλισης του αλγόριθμου. Σύμφωνα με τη στατιστική μηχανική, αυτός ο παράγοντας δίνει την πιθανότητα μετάβασης από μια κατάσταση σε μια άλλη με διαφορά ενέργειας ΔE για δεδομένη θερμοκρασία. Υπολογίζουμε έναν τυχαίο αριθμό στο διάστημα (0,1) και αν αυτός είναι μικρότερος από τον παράγοντα Boltzmann τότε η κίνηση γίνεται δεκτή αλλιώς απορρίπτεται και κρατάμε την προηγούμενη τιμή του x.

Αν η "θερμοκρασία" είναι υψηλή, τότε πιο εύκολα θα υπερπηδηθούν εμπόδια, όπως ακριβώς και στα φυσικά συστήματα και ο αλγόριθμος θα περάσει από υψηλές τιμές της Αντικειμενικής Συνάρτησης για να φτάσει σε άλλα ελάχιστα. Αν είναι χαμηλή θα εγκλωβιστεί και θα συγκλίνει σε ένα τοπικό ελάχιστο. Άρα, μπορούμε να συνδυάσουμε διάφορες στρατηγικές όσον αφορά τη θερμοκρασία για να ανακαλύψουμε περιοχές με χαμηλές τιμές και μετά να κατευθυνθούμε προς ένα ελάχιστο.

Απλούστερη παραλλαγή αυτής της μεθόδου είναι η **μέθοδος του κατωφλίου**: δεχόμαστε κινήσεις όπου $\Delta E < \Phi$ όπου Φ κάποιος θετικός αριθμός. Όσο πιο κοντά στο μηδέν το Φ τόσο πιο αυστηρό το κριτήριο, ενώ υψηλό Φ επιτρέπει "εξερεύνηση" του ευρύτερου χώρου και απόδραση από τα τοπικά ελάχιστα. Και πάλι μπορούμε να συνδυάσουμε διαφορετικές στρατηγικές ξεκινώντας με μεγαλύτερο Φ και συνεχίζοντας με μικρότερο ή ακόμη και με κάποιο κλασσικό τοπικό αλγόριθμο όπως της μέγιστης κλίσης για να καταλήξουμε στο ελάχιστο μιας περιοχής με αρκετά “καλές” τιμές.

5.3 Ένα ειδικό πρόβλημα: βελτιστοποίηση χωροχρονικών κατανομών (profile optimization)
Έχουμε δει μέχρι εδώ το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης ως προς μία ή περισσότερες μεταβλητές, το οποίο δίνει ως λύση ένα σύνολο τιμών για κάποιες μεταβλητές ή ένα άριστο σημείο $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_M)$ και την αντίστοιχη τιμή $F(\mathbf{x})$. Έχουμε αναφέρει επίσης και το πιο δύσκολο να διατυπωθεί μαθηματικά πρόβλημα της άριστης “τοπολογίας” ή αλληλοσύνδεσης επιμέρους διεργασιών και συσκευών στα πλαίσια μιας ολόκληρης παραγωγικής διαδικασίας. Υπάρχει ένα ακόμη ενδιαφέρον, όσο και ασυνήθιστο, πρόβλημα ελαχιστοποίησης που αφορά πάλι το χειρισμό μιας μαθηματικής συνάρτησης, αυτή τη φορά όχι για την εύρεση της άριστης τιμής της και του αντίστοιχου σημείου, αλλά για το “τέλειο” σχήμα της γραφικής της παράστασης.

Υπάρχουν ορισμένα προβλήματα όπου μας ενδιαφέρει η *κατανομή* των τιμών μιας ιδιότητας στο χώρο, στο χρόνο ή και στα δύο. Σε αυτά τα προβλήματα μας ενδιαφέρει συχνά η κατανομή αυτή να έχει συγκεκριμένη μορφή. Για παράδειγμα, ας φανταστούμε έναν αυλωτό αντιδραστήρα σταθερής καταλυτικής κλίνης. Αυτός θα μοιάζει με ένα κυλινδρικό σωλήνα γεμάτο με τεμαχίδια στερεού καταλύτη μέσα από τον οποίο διοχετεύεται κάποιο ρευστό αντιδρόν μίγμα. Η θερμοκρασία κατά μήκος του αντιδραστήρα γενικά μεταβάλλεται, επομένως μπορούμε να τη γράψουμε ως συνάρτηση της απόστασης από το σημείο εισόδου και να κατασκευάσουμε τη γραφική της παράσταση. Τώρα, μας ενδιαφέρει αυτή η κατανομή να είναι όσο το δυνατόν πιο ομοιόμορφη και μέσα σε ορισμένα όρια γιατί πιθανή τοπική υπερθέρμανση μπορεί να βλάψει τον καταλύτη και να μειώσει τη διάρκεια ζωής του. Γι' αυτό χρησιμοποιούμε εξωτερική ψύξη. Αν έχουμε ισχυρά εξώθερμη αντίδραση , τότε στην είσοδο μπορεί να υπάρχει υπερθέρμανση από το απότομο ξεκίνημά της με τη βοήθεια του καταλύτη αφού το ψυκτικό δεν προλαβαίνει να απάγει όλη τη θερμότητα. Δηλαδή, η κατανομή δε θα είναι ομοιόμορφη αλλά θα έχει ένα τοπικό μέγιστο. Μία λύση θα ήταν στην αρχή να βάλουμε λιγότερο δραστικά τεμαχίδια καταλύτη ή να αναμείξουμε τον καταλύτη με αδρανή τεμαχίδια ώστε να μην έχουμε τόσο γρήγορο ξεκίνημα της αντίδρασης και απότομη έκλυση θερμότητας. Αυτό θα έκανε την κατανομή πιο ομοιόμορφη.

Στο παραπάνω παράδειγμα, η άριστη κατανομή θα ήταν η ομοιόμορφη. Σε άλλες περιπτώσεις μπορεί να εξυπηρετούσε κάποια άλλη μορφή. Αυτή την κατανομή της θερμοκρασίας κατά μήκος του αντιδραστήρα τη λέμε και “**προφίλ**” της ιδιότητας αυτής. Για αυτό το λόγο ο αγγλικός όρος για το πρόβλημα της άριστης χωρικής κατανομής είναι “**profile optimization**”. Υπάρχουν επίσης περιπτώσεις όπου μας ενδιαφέρει η μεταβολή μιας ιδιότητας όχι στο χώρο, αλλά στο χρόνο. Π.χ, ποια θα έπρεπε να είναι η άριστη θερμοκρασία ως συνάρτηση του χρόνου σε ένα καταλυτικό αντιδραστήρα διαλείποντος έργου: σταθερή, αυξανόμενη, ελαττούμενη; Αυτό το πρόβλημα λέγεται και **δυναμική αριστοποίηση**. Πώς όμως μπορεί να διενεργηθεί αυτού του είδους η αριστοποίηση κατά το σχεδιασμό; Μια πρώτη σκέψη είναι ότι αν έχουμε μια χωροχρονική κατανομή-στόχο $f_{opt}(\mathbf{r}, t)$ που αντιπροσωπεύει το επιθυμητό άριστο, θα μπορούσαμε να ορίσουμε τη συνολική απόκλιση της εκάστοτε κατανομής $f(\mathbf{r}, t; \mathbf{p})$ από την άριστη γενικεύοντας το τετραγωνικό σφάλμα με την παρακάτω έκφραση (χωρίς έμφαση στη μαθηματική αυστηρότητα)

$$F(\mathbf{p}) = \int_{\mathbf{r}} \int_0^t \left(f(\mathbf{r}, t; \mathbf{p}) - f_{\mathrm{opt}}(\mathbf{r}, t) \right)^2 d\,\mathbf{r}\, dt$$

όπου $\mathbf{p}$ είναι το σύνολο των παραμέτρων της διεργασίας ως προς τις οποίες κάνουμε κάποιου είδους παραμετρική αριστοποίηση. Τότε, αρκεί να ελαχιστοποίησουμε κάπως αυτή τη συνάρτηση απόκλισης.

Ακόμη και αν είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε την κατανομή της υπό μελέτη ιδιότητας $f(\mathbf{r}, t; \mathbf{p})$ για διάφορες τιμές των παραμέτρων, η παραπάνω λύση δεν εξυπηρετεί αν η συναρτησιακή μορφή της άριστης κατανομής περιλαμβάνεται και αυτή στα άγνωστα ζητούμενα του σχεδιασμού. Πράγματι, το πιθανότερο είναι ότι για δεδομένη κατανομή εκτιμούμε την απόδοση της διεργασίας (ή κάποια άλλη αντικειμενική συνάρτηση) ως συναρτησιακό αυτής της κατανομής και μετά προσπαθούμε να αριστοποιήσουμε την απόδοση ή άλλη συνάρτηση ως προς την κατανομή. Ενας πρακτικός τρόπος είναι να χρησιμοποιήσουμε μια "γεννήτρια κατανομών", δηλαδή μια συνάρτηση που περιέχει κάποιους συντελεστές, εκθέτες και γενικά παραμέτρους **g** μέσω των οποίων μπορούμε να τους αλλάξουμε το σχήμα. Οι επόμενες δύο συναρτήσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε συνδυασμό για να παράγουν μια πληθώρα από καμπύλες με πρακτικό ενδιαφέρον για το σχεδιασμό στη χημική τεχνολογία:

Τύπος Ι

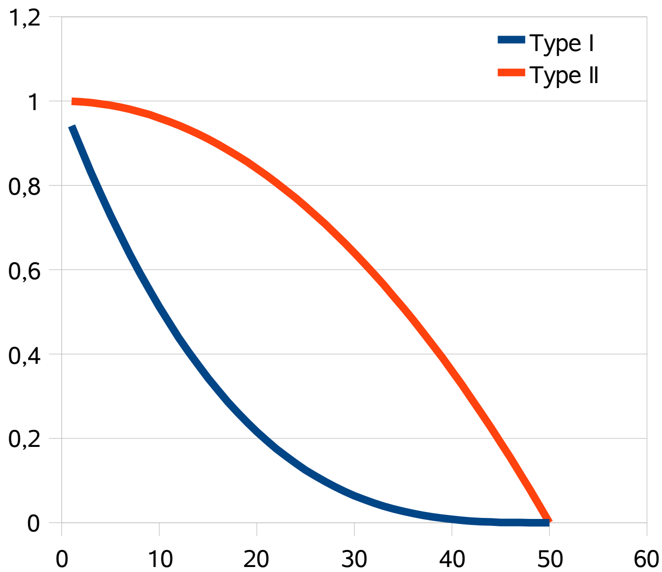
$$x = x_F - (x_F - x_0)\ [1 - s/s_{total}]^{a1}$$

Τύπος ΙΙ

$$x = x_0 - (x_0 - x_F)\ [s/s_{total}]^{a2}$$

Με x παριστάνεται η στιγμιαία τιμή της μεταβλητής ελέγχου που μας ενδιαφέρει, όπως θερμοκρασία, πίεση, παροχή αντιδρώντος, ανταλλασσόμενη θερμότητα κλπ, σε δεδομένο σημείο στο χώρο ή δεδομένη χρονική στιγμή, s. Με δείκτη 0 παριστάνεται η αρχική και με F η τελική τιμή, ενώ s_{total} είναι η ολική απόσταση ή ολικός χρόνος που θεωρούμε. Στο Σχήμα 5.2 φαίνονται τυπικές μορφές για αυτά τα δύο είδη καμπυλών.

Για να μεταβάλλουμε την κυρτότητα των παραπάνω συναρτήσεων χρησιμοποιούμε τους εκθέτες a_1 και a_2. Αν συνδυάσουμε τις δύο καμπύλες, χρειάζονται άλλες δύο παράμετροι: ο χρόνος (ή απόσταση) s_{inter} όπου συναντώνται οι καμπύλες και η τιμή x_{inter} της μεταβλητής ελέγχου στο σημείο αυτό. Συνολικά, έχουμε έξη παραμέτρους (μαζί με την αρχική και τελική τιμή της x και τους δύο εκθέτες) ως προς τις οποίες μπορούμε πλέον να κάνουμε αριστοποίηση και να πάρουμε την άριστη κατανομή. Μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει και άλλες γεννήτριες κατανομών αν και οι παραπάνω μπορεί να αποδειχτούν υπερεπαρκείς στις πιο πολλές περιπτώσεις.



Σχήμα 5.2 *"Γεννήτριες" κατανομών.* $x_0 = 1$, $x_F = 0$, $a_1 = 3$, $a_2 = 2$, $s_{total} = 50$

Πάντως, όπως και στην παραμετρική αριστοποίηση, έχουμε και εδώ κάποιου είδους περιορισμούς αν και αυτοί είναι πιο ποιοτικοί παρά αυστηρά ποσοτικοί και έχουν να κάνουν με τη δυνατότητα υλοποίησης της υπολογισμένης κατανομής. Πράγματι, συναρτήσεις με ασυνέχειες ή ακόμη και συνεχείς αλλά με πολύ απότομες μεταβολές δε μπορούν να γίνουν αποδεκτές ως λύσεις. Ακόμη, συναρτήσεις με πολύπλοκες μορφές δε μας είναι κατάλληλες. Κι αυτό γιατί τελικά υπάρχει και το πρακτικό ζήτημα της υλοποίησης αυτών των κατανομών. Δεν έχει νόημα να βρούμε ακόμη και το ολικό ελάχιστο μιας αντικειμενικής συνάρτησης αν αυτό αντιστοιχεί σε μια απραγματοποίητη κατανομή ιδιοτήτων. Πάντα πρέπει να έχουμε κατά νου τη διεργασία που σχεδιάζουμε και το αν και κατά πόσο είναι εύκολο να τη χειριστούμε για να επιβάλλουμε κάποια συγκεκριμένη κατανομή μεταβλητών.

Έτσι, στην αριστοποίηση κατανομών στο χώρο, πρέπει να κατασκευάσουμε τον εξοπλισμό έτσι ώστε με κατάλληλο χειρισμό παροχών, απαγωγής ή πρόσδωσης θερμότητας, επιτάχυνσης ή επιβράδυνσης των αντιδράσεων μέσω των συγκεντρώσεων στο μίγμα κλπ να πετύχουμε τη ζητούμενη κατανομή. Αντίστοιχα, στο πρόβλημα της δυναμικής αριστοποίησης θα χρειαστεί ένα σύστημα ελέγχου σχεδιασμένο έτσι ώστε να εξασφαλίσει ότι η χρονική κατανομή θα είναι η προσδιορισμένη ως άριστη. Αν δεν είναι εφικτό να επιτευχθεί μια τέτοια κατανομή, θα πρέπει να ξαναγίνει αριστοποίηση με επιπλέον περιορισμούς (και δεν υπάρχει κάποια γενική συνταγή γι' αυτό!) ώστε να αποκλειστούν τα ανέφικτα χαρακτηριστικά.

5.4 Μέθοδοι Δομικής Αριστοποίησης

5.4.1. Διάγραμμα Ροής

Σε αυτή την ενότητα δίνουμε έμφαση σε μεθόδους που μπορούν να αυτοματοποιήσουν την αριστοποίηση του ίδιου του διαγράμματος ροής. Το Διάγραμμα Ροής είναι η γραφική απεικόνιση του μαθηματικού μοντέλου της διεργασίας ή του εργοστασίου. Στο Διάγραμμα Ροής απεικονίζονται οι διάφορες διεργασίες με κατάλληλο χαρακτηριστικό συμβολισμό, καθώς και η μεταξύ τους διασύνδεση. Σε επόμενες ενότητες θα έχουμε την ευκαιρία να δείξουμε διαγράμματα ροής διαφόρων διεργασιών που θα μελετήσουμε. Επειδή η διασύνδεση των διεργασιών, δηλαδή η τοπολογία της συνολικής παραγωγικής διαδικασίας, σε συνδυασμό με τη φύση και εσωτερική δομή των ίδιων των επιμέρους διεργασιών, καθορίζει και τη μορφή των ισοζυγίων, γι' αυτό υπάρχει αντιστοιχία μεταξύ μοντέλου και διαγράμματος ροής. Επιπλέον, στο διάγραμμα ροής αποτυπώνονται και πληροφορίες που προέκυψαν ή χρησιμεύουν στο σχεδιασμό και στην αριστοποίηση (παροχές, συστάσεις, συνθήκες κλπ).

Υπάρχουν τρία είδη Διαγραμμάτων Ροής:

- Φύλλο ροής: απεικονίζει βασικές πληροφορίες, δηλαδή τις συσκευές και δεδομένα χρήσιμα για κατάστρωση ισοζυγίων και τη διαστασιολόγηση (συστάσεις, συνθήκες και μεταβολές αυτών). Αυτό χρησιμοποιείται στον προκαταρκτικό σχεδιασμό ή μελέτη σκοπιμότητας όπου θέλουμε να δούμε αν η επένδυση είναι βιώσιμη και συμφέρουσα.
- Διάγραμμα ροής και οργάνων ελέγχου: περιλαμβάνει μετρητές και ρυθμιστές, αποτελέσματα ισοζυγίων και διαστασιολόγησης.
- Διάγραμμα σωληνώσεων και οργάνων, όπου αναγράφονται λεπτομέρειες όπως διάμετροι σωληνώσεων, βαλβίδες, γραμμές πεπιεσμένου αέρα κλπ.

Ήδη από την πρώτη ενότητα έχουμε αναφέρει το μοντέλο ή "μέθοδο του κρεμμυδιού" ως μια αποτελεσματική μέθοδο για την κατάρτιση ενός διαγράμματος ροής που είναι βέβαιο ότι θα δουλεύει στην πράξη. Στο πνεύμα αυτό θα γίνει και η παρουσίαση του σχεδιασμού των διεργασιών στις επόμενες ενότητες. Όμως, εκτός από αυτό τον τρόπο, έχουν αναπτυχθεί και συστηματικές αλγοριθμικές μέθοδοι που θα παρουσιαστούν αμέσως πιο κάτω.

5.4.2 Αλγόριθμοι για δομική αριστοποίηση

Γενικά, μπορούμε να διακρίνουμε δύο βασικές "φιλοσοφίες" λύσεων

1. Να ενσωματώσουμε όλες τις πιθανές εναλλακτικές λύσεις για το Διάγραμμα Ροής σε μια "**υπερδομή**" ή "υπερδιάγραμμα" που περιέχει όλα τα υποψήφια ΔΡ ως κλάδους του και να

καθορίσουμε το ποσοστό με το οποίο αυτά θα συμμετέχουν στο τελικό, βέλτιστο Διάγραμμα Ροής. Αυτό το ποσοστό συμμετοχής μπορεί να είναι ακέραια μεταβλητή π.χ. 0 ή 1, "μηδενίζοντας" δηλαδή αποκλείοντας όλες τις λύσεις που δεν είναι αρκετά αποδοτικές σύμφωνα με τα κριτήρια που αναπαριστά η Αντικειμενική Συνάρτηση. Μπορεί να είναι και πραγματική μεταβλητή οδηγώντας έτσι, σε συνδυασμούς λύσεων που είναι πιο αποδοτικοί από τις μεμονωμένες αρχικές λύσεις. Εννοείται ότι ταυτόχρονα γίνεται βελτιστοποίηση και των άλλων μεταβλητών (συνθήκες, παροχές, συστάσεις) δηλαδή στην πραγματικότητα κάνουμε παραμετρική και δομική αριστοποίηση παράλληλα.

2. Να εφαρμόσουμε κάποιον αλγόριθμο αναζήτησης στο "χώρο" των λύσεων με στόχο της βελτίωση της ΑΣ, κατ' αναλογία προς τους τοπικούς και μη τοπικούς αλγόριθμους, π.χ. εκκινώντας από κάποια αρχική λύση και μεταβαίνοντας με διάφορες μετατροπές αυτής σε άλλες λύσεις. Αυτή τη μεθοδολογία θα τη συζητήσουμε με συγκεκριμένα παραδείγματα στην ενότητα που θα αφορά τη σύνθεση δικτύου φυσικών διαχωριστήρων.

Πριν παρουσιάσουμε συγκεκριμένες τεχνικές, θα κάνουμε ένα σχόλιο για τη σχέση των παραπάνω με τη "μεθοδο του κρεμμυδιού". Η τελευταία επιτρέπει το μεθοδικό χτίσιμο ενός Διαγράμματος Ροής αποφεύγοντας την υπερβολική πολυπλοκότητα. Τελικά οδηγεί σε μία και μοναδική λύση, δηλαδή δεν τίθεται θέμα δομικής αριστοποίησης. Αυτό έχει το πλεονέκτημα ότι διευκολύνει το σχεδιασμό, σε συνδυασμό μάλιστα και με εμπειρικούς κανόνες επιβεβαιωμένους από πολυετή πείρα και από τις αναγκαιότητες των διεργασιών. Αλλά είναι πολύ πιθανό ότι δεν είναι η καλύτερη λύση, ούτε καν ένα τοπικό άριστο. Σε κάθε βήμα (χημικός αντιδραστήρας, δίκτυο διαχωριστήρων, δίκτυο εναλλαγής θερμότητας, εξωτερικές βοηθητικές παροχές, διαχείριση αποβλήτων) προχωρούμε με ο,τι ξέρουμε από τα προηγούμενα στάδια μόνο, ενώ για την πλήρη αξιολόγηση θα έπρεπε να έχουμε εκ των προτέρων στη διάθεσή μας όλο το Διάγραμμα Ροής.

Η κατάσταση μπορεί να βελτιωθεί με τη μερική εισαγωγή μεθόδων όπως η υπερδομή ή η εξερεύνηση του χώρου των λύσεων σε κάθε στάδιο, π.χ. στη σύνθεση του άριστου δικτύου διαχωριστών για δεδομένη κρίσιμη διεργασία ή του άριστου δικτύου εναλλακτών θερμότητας και βοηθητικών παροχών με τη μέθοδο pinch-point (η τελευταία είναι ειδική περίπτωση μεθόδου που δεν υπάγεται στις παραπάνω κατηγορίες και θα περιγραφεί αναλυτικά σε επόμενη ενότητα).

Η μέθοδος της υπερδομής εφαρμοζόμενη για το σύνολο του Διαγράμματος Ροής ενέχει τον κίνδυνο να μην περιλάβει όλες τις λύσεις που μερικές φορές είναι πάρα πολλές σε αριθμό. Αν αντιμετωπιστεί αυτό, τότε έχουμε το πρόβλημα ενός εξαιρετικά σύνθετου μοντέλου και μιας ιδιαίτερα πολύπλοκης Αντικειμενικής Συνάρτησης και είναι πολύ δύσκολο να βρούμε με βεβαιότητα ακόμη και ένα τοπικό άριστο. Εξαιτίας του τεράστιου αριθμού δυνατών Διαγραμμάτων Ροής, ίσως είναι καλύτερα να χρησιμοποιηθεί, ως τελευταία εναλλακτική, η φιλοσοφία της εξερεύνηση του χώρου λύσεων. Αλλά αυτές οι λύσεις έχουν όλα τα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των αλγορίθμων που είδαμε και στην ενότητα για την παραμετρική αριστοποίηση, δηλαδή ούτε τώρα υπάρχει εγγύηση ότι δε θα αφήσουν κάποια "καλά" Διαγράμματα Ροής απ' έξω.

Τέλος, τόσο οι μέθοδοι υπερδομής όσο και αυτές της αναζήτησης, όντας καθαρά μαθηματικές μέθοδοι μπορούν να αυτοματοποιηθούν ως προγράμματα και να εξετάσουν γρήγορα πολλές δομές, αλλά αφήνουν απ' έξω θέματα όπως διαχείριση αποβλήτων και προστασία περιβάλλοντος ή υγιεινή και ασφάλεια που είναι πιο δύσκολο να διατυπωθούν με μαθηματικά μοντέλα και επομένως απαιτούν τη λήψη αποφάσεων με βάση την κρίση και την πείρα του μηχανικού σχεδιασμού.

Συμπερασματικά, δεν υπάρχουν τέλειες μέθοδοι για τη δομική αριστοποίηση, αλλά όλες έχουν πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα, οπότε η επιλογή του καταλληλότερου συνδυασμού τους θα υπαγορευτεί σε μεγάλο βαθμό και από τις ιδιαιτερότητες του προβλήματος, δηλαδή της συγκεκριμένης διεργασίας ή παραγωγικής μονάδας.

Μέθοδοι υπερδομής

Για να υλοποιήσουμε την ενσωμάτωση μίας ή περισσότερων εναλλακτικών δομικών παραλλαγών στη λύση, χρησιμοποιούμε *δυαδικές* μεταβλητές y_i με δυνατές τιμές 0 ή 1 για να παραστήσουμε την ύπαρξη ή μη κάθε εναλλακτικής (π.χ. ύπαρξη αναδευόμενου και εμβολικού αντιδραστήρα σε δύο παράλληλους κλάδους εκ των οποίων τελικά θα υπάρχει μόνο ο ένας). Τότε, υπάρχουν οι εξής τρόποι χρήσης τους για να εκφράσουμε τους πιθανούς περιορισμούς:

- Επιλογή μόνο μίας από K παραλλαγές:

$$y_1 + y_2 + y_3 + \ldots + y_K = 1$$

Είναι ευνόητο ότι μόνο ένα από τα y_i μπορεί να είναι 1 για να ισχύει η παραπάνω.

- Επιλογή k από K παραλλαγές:

$$y_1 + y_2 + y_3 + \ldots + y_K = k$$

Το σκεπτικό ανάλογο, όπως πριν.

- Επιλογή τ*ο πολύ* k παραλλαγών:

$$y_1 + y_2 + y_3 + \ldots + y_K \le k$$

- Επιλογή *τουλάχιστον* k παραλλαγών:

$$y_1 + y_2 + y_3 + \ldots + y_K \ge k$$

- Αν επιλεγεί η λύση j να επιλεγεί και η k αλλά όχι το αντίστροφο:

$$y_j - y_k \le 0$$

- Μηδενισμός συνεχούς μεταβλητής x για την οποία ισχύει $0 \le x \le U$:

$$x - Uy \le 0$$

- Διαζευκτικοί περιορισμοί. Π.χ. ή $-M \le g_1(x) \le 0$ ή $-M \le g_2(x) \le 0$, όπου M πολύ μεγάλος αυθαίρετος θετικός αριθμός:

$$g_1(x) - My \le 0$$

  και

$$g_2(x) - M(1-y) \le 0$$

Τα παραπάνω γίνονται αμέσως κατανοητά αν πάρουμε πίνακες με όλες τις δυνατές περιπτώσεις.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 5-1 Δομική αριστοποίηση διεργασίας διαχωρισμού με μέθοδο υπερδομής.

Αέριο ρεύμα αποβλήτων περιέχει υδρογόνο που θέλουμε να ανακτήσουμε πριν την απόρριψη του ρεύματος. Προτείνονται οι διαχωρισμοί: προσρόφηση υπό πίεση (swing pressure adsorption – psa), μεμβράνη (membrane separation – ms), συμπύκνωση με ψύξη (cryogenic condensation – cc). Η προσρόφηση και ο διαχωρισμός με μεμβράνη μπορούν να χρησιμοποιηθούν χωριστά ή σε συνδυασμό. Να γραφεί σύνολο ακέραιων σχέσεων (εξισώσεων ή ανισοτήτων) που επιτρέπει κάθε μία από τις τρεις επιλογές αλλά και το συνδυασμό προσρόφησης και μεμβρανών.

Λύση:

Αφού δύο από τις τρεις μεθόδους επιτρέπεται να συνυπάρχουν θα ισχύει $y_{psa} + y_{ms} + y_{cc} \le 2$. Αυτή η σχέση όμως, καλύπτει και ανεπιθύμητους συνδυασμούς. Άρα, εξετάζω και τους συνδυασμούς ανά δύο. Ισχύει πάντα ότι $y_{psa} + y_{ms} \le 2$ αφού επιτρέπεται από την εκφώνηση, άρα δε συνιστά περιορισμό και δε χρειάζεται να τη γράψουμε. Για να επιλέξουμε μόνο μία μεταξύ των psa και cc, γράφουμε: $y_{psa} + y_{cc} \le 1$. Με όμοιο σκεπτικό, γράφουμε: $y_{ms} + y_{cc} \le 1$. Προφανώς ισχύει επίσης ότι $y_{psa} + y_{ms} + y_{cc} > 0$ (ή ≥ 1) αφού θα επιλεγεί τουλάχιστον μία μέθοδος. Άρα, οι ζητούμενες σχέσεις είναι:

$$y_{psa} + y_{ms} + y_{cc} > 0 \ (\text{ή} \ge 1), \quad y_{psa} + y_{cc} \le 1 \quad \text{και} \quad y_{ms} + y_{cc} \le 1.$$

5.4.3 Μικτός Ακέραιος Προγραμματισμός

Γενικά, τόσο στο σχεδιασμό όσο και στη λειτουργία και τον **προγραμματισμό παραγωγής** των χημικών βιομηχανιών, προκύπτουν συχνά μεταβλητές που παίρνουν διακριτές αντί για συνεχείς τιμές:

- δυαδικές μεταβλητές (0 ή 1, Ναι ή Όχι: εγκατάσταση ή όχι νέου εξοπλισμού;)
- ακέραιες τιμές εν γένει, π.χ. αριθμός βαθμίδων σε μια αποστακτική στήλη
- πραγματικές τιμές αλλά από διακριτό σύνολο τιμών, π.χ. δυναμικότητες συσκευών που υπάρχουν στο εμπόριο κλπ

Όταν το εύρος των τιμών μιας διακριτής μεταβλητής είναι μεγάλο (π.χ. βαθμίδες αποστακτικής στήλης) μπορούμε να το χειριστούμε σαν πραγματικό αριθμό και μετά να στρογγυλοποιήσουμε στον πλησιέστερο ακέραιο. Αλλά όταν το εύρος είναι μικρό (π.χ. δυαδικές μεταβλητές, περιορισμένος αριθμός δυναμικοτήτων μιας ορισμένης συσκευής) κάτι τέτοιο δεν είναι ασφαλές.

Αυτό απαιτεί διαφορετικές μεθόδους προσέγγισης που εμπίπτουν στη γενική κατηγορία του **Μικτού Ακέραιου Προγραμματισμού** (ΜΑΠ) όπου εν γένει έχουμε συνδυασμούς συνεχών και διακριτών μεταβλητών. Οι τεχνκές αυτές κατατάσσονται στις επόμενες υποκατηγορίες:

- Ακέραιος Προγραμματισμός (μόνο διακριτές μεταβλητές)
- Δυαδικός Ακέραιος Προγραμματισμός (μόνο δυαδικές μεταβλητές)
- Μικτός Ακέραιος Γραμμικός Προγραμματισμός (Αντικειμενική Συνάρτηση και περιορισμοί εκφρασμένοι ως γραμμικές εξισώσεις)
- Μικτός Ακέραιος Μη-Γραμμικός Προγραμματισμός (υπάρχουν και μη-γραμμικές εξισώσεις στο μοντέλο)

Μερικά τυπικά προβλήματα ΜΑΠ που σχετίζονται με τη Χημική Βιομηχανία τόσο στα πλαίσια του σχεδιασμού διεργασιών και εγκαταστάσεων (design) όσο και του προγραμματισμού της παραγωγής (planning) είναι τα παρακάτω:

- **Πρόβλημα του σάκκου** (knapsack problem): ένας... διαρρήκτης (!) θέλει να βάλει στο σάκκο του αντικείμενα από ένα διακριτό σύνολο που μεγιστοποιούν τη συνολική αξία των κλοπιμαίων αλλά δεν υπερβαίνουν το βάρος που μπορεί να μεταφέρει.

  Σε σχέση με τη βιομηχανική παραγωγή υλικών, μπορούμε να φανταστούμε την κατανομή δεδομένης ποσότητας από διάφορες πρώτες ύλες σε διαφορετικές διεργασίες για την παραγωγή ποικίλων προϊόντων ώστε να μεγιστοποιηθεί το κέρδος (διαφορά εσόδων από κόστος παραγωγής).

- **Περιοδεύων πωλητής** (travelling salesman): Με δεδομένο ένα σύνολο πόλεων, να αποδοθούν τιμές 0 ή 1 σε κάθε διαδρομή από μια πόλη Α σε μια πόλη Β ώστε ένας πωλητής να περάσει από όλες τις πόλεις μία και μόνο μία φορά και να ελαχιστοποιηθούν τα έξοδα μετακίνησης ή ο χρόνος για τη συνολική διαδρομή.

  Σε όρους βιομηχανικής παραγωγής, μπορούμε να μιλήσουμε για μια διαλείπουσα διεργασία που πρέπει να γίνει Ν φορές για αντίστοιχες παρτίδες διαφορετικών προϊόντων και θέλουμε να βρούμε τη σειρά που ελαχιστοποιεί το χρόνο μεταξύ τερματισμού και επανεκκίνησης μεταξύ δύο διαδοχικών παρτίδων.

- **Πρόβλημα ανάμιξης** (blending): επιλογή από μια λίστα, των συστατικών (0 ή 1 για χρήση ή μη) που θα αναμιχθούν κατά την παρασκευή ενός προϊόντος ώστε να πετύχουμε καταλληλότερο βάρος και σύσταση και ελάχιστο κόστος ή τις βέλτιστες ιδιότητες ενός υλικού
- Επιλογή μεταξύ τόπων άντλησης πρώτης ύλης (αποθεμάτων, κοιτασμάτων) ως προς τον αριθμό, τα σημεία, τους ρυθμούς παργωγής ώστε η παραγωγή να είναι όσο το δυνατό πλησιέστερα στη ζήτηση ή τις ανάγκες που θα καλύψει,

κλπ

Μικτός Ακέραιος Προγραμματισμός και Δομική Αριστοποίηση
Όπως είπαμε, πολλά προβλήματα σχεδιασμού εργοστασίων περιλαμβάνουν μη γραμμικές σχέσεις συνεχών μεταβλητών και γραμμικές σχέσεις δυαδικών ή εν γένει ακέραιων μεταβλητών. Οι συνεχείς συνήθως είναι παροχές υλικών και συστάσεις ρευμάτων, ροές ενέργειας ή πιέσεις και θερμοκρασίες. Οι δυαδικές αφορούν αποφάσεις του τύπου Ναι/Όχι, π.χ. να χρησιμοποιηθεί ή όχι ο τάδε κλάδος στο Διάγραμμα Ροής μιας υπερδομής.

Η γενική διατύπωση αυτών των προβλημάτων έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned} &\min\ F(\mathbf{x})+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \\ &G_i(\mathbf{x})=0 \\ &h_j(\mathbf{x})+\mathbf{M}\,\mathbf{y}=0 \end{aligned}$$

όπου **x** παριστάνει τις συνεχείς και **y** τις διακριτές μεταβλητές οι οποίες "αναγκάζουν" κάποιες από τις συνεχείς να μηδενιστούν ή να πάρουν θετικές τιμές.

Αναφέρουμε μερικές τυπικές τεχνικές Μικτού Ακέραιου Προγραμματισμού.

Διακλάδωση και Φραγμός (Branch and bound)
Η πιο δημοφιλής προσέγγιση είναι η οικογένεια μεθόδων Branch-and-bound. Τα βήματα για δυαδικό πρόβλημα περιλαμβάνουν τα εξής:

- Χαλαρώνουμε τον περιορισμό των δυαδικών μεταβλητών ώστε να μεταβάλλονται σα να ήταν συνεχείς μεταξύ 0 και 1.
- Επίλυση του προβλήματος συνεχών μεταβλητών (με ανισωτικούς περιορισμούς) που προκύπτει.
- Αν οι δυαδικές μεταβλητές πάρουν τιμές 0 ή 1 αυτή είναι και η λύση
- Αν υπάρχουν δυαδικές μεταβλητές που παίρνουν κλασματική τιμή τότε κάνουμε *διακλάδωση* (branch) σε δύο υποπροβλήματα: επιλέγουμε μία από τις κλασματικές δυαδικές και τη σταθεροποιούμε στο 0 ή στο 1.
- Επαναλαμβάνουμε τα προηγούμενα βήματα για κάθε ένα από τα υποπροβλήματα
- Στη διαδικασία, κρατάμε, υπό ορισμένες προϋποθέσεις, το καλύτερο μέγιστο ή ελάχιστο από τα προηγούμενα βήματα, το οποίο και χρησιμεύει ως *άνω* ή *κάτω φράγμα* (bound) για τα επόμενα βήματα, ώστε να απορρίπτουμε λύσεις.
- Το "χάσμα" μεταξύ άνω και κάτω φράγματος αποτελεί κριτήριο τερματισμού (κατά πόσον ελαττώνεται).

Outer Approximation

Σε κάθε επανάληψη *k* αυτής της μεθόδου *ελαχιστοποίησης* οι ακέραιες μεταβλητές σταθεροποιούνται σε ορισμένες τιμές και λύνουμε τα αντίστοιχα προβλήματα συνεχούς *μεγιστοποίησης* της μορφής:

$$\begin{aligned} &\max\ F(\mathbf{x})+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}^{k} \\ &G_i(\mathbf{x})=0 \\ &h_j(\mathbf{x})+\mathbf{M}\,\mathbf{y}^{k}=0 \end{aligned}$$

Αυτό δίνει ένα *κάτω φράγμα* της λύσης.

Με τη λύση τους, γραμμικοποιούμε τις μη γραμμικές σχέσεις γύρω από τις λύσεις που βρήκαμε και λύνουμε το *γραμμικό* πρόβλημα ως προς αμφότερα τα x και y:

$$\begin{aligned} &\max\ z+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}^{k} \\ &z\geq F(\mathbf{x}^{i})+\nabla F^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^{i})(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{i}),\quad i=1,2,\ldots,k \\ &G_i(\mathbf{x}^{i})+\nabla G_i^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^{i})(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{i})=0 \\ &h_j(\mathbf{x}^{i})+\nabla h_j^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^{i})(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{i})+\mathbf{M}\,\mathbf{y}^{k}\leq 0 \end{aligned}$$

Τις γραμμικές σχέσεις κρατάμε και για τα επόμενα βήματα και η λύση που βρίσκουμε είναι ένα *άνω φράγμα*. Λόγω της προσθήκης νέων γραμμικών περιορισμών, το άνω φράγμα ελαττώνεται και τα δύο φράγματα συγκλίνουν σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων.

Γενικευμένη μέθοδος αποσύνθεσης κατά Benders (Generalized Benders Decomposition) **και άλλες μέθοδοι αποσύνθεσης**

Αυτή αποτελεί παραλλαγή της Outer Approximation. Στο δεύτερο σκέλος, λύνει το γραμμικό πρόβλημα μόνο ως προς τις διακριτές μεταβλητές y. Επίσης, οι περιορισμοί διαφέρουν:

- προκύπτουν από χρήση πολλαπλασιαστών Lagrange
- δεν προστίθενται στους προηγούμενους σε κάθε νέο βήμα αλλά τους αντικαθιστούν.

Έτσι, κάθε κύρια επανάληψη διαρκεί λιγότερο από ο,τι στην Outer Approximation. Αλλά συνήθως χρειάζεται περισσότερες τέτοιες επαναλήψεις.

Διαζευκτικός προγραμματισμός (disjunctive programming)

Αφορά προβλήματα όπου από ένα σύνολο περιορισμών πρέπει να ικανοποιηθεί ένας και μόνο ένας σε κάθε λύση, π.χ.: "αν επιλεγεί ο αντιδραστήρας 1 η πίεση λειτουργίας πρέπει να είναι μεταξύ 10 και 15 και το πάγιο κόστος είναι 20, ενώ αν επιλεγεί ο 2 η πίεση πρέπει να είναι από 5 ως 10 και το πάγιο κόστος 30". Αν $f(x) \leq 0$ είναι ένας τέτοιος περιορισμός, τότε μπορούμε να γράψουμε $f(x) \leq M(1-y)$ όπου M πολύ μεγάλος αριθμός και y δυαδική μεταβλητή που αν είναι αληθής (τιμή 1) δίνει τον αρχικό περιορισμό. Αν είναι ψευδής τόε θα ισχύει $f(x) \leq M$ αλλά έχουμε επιλέξει τόσο μεγάλη τιμή του M ώστε πρακτικά να μη μας περιορίζει.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 5-2: Επιλογή Άριστου Συνδυασμού Διεργασιών.

Ας θεωρήσουμε την παραγωγή ενός προϊόντος για το οποίο η πρώτη ύλη μπορεί να αποκτηθεί με τρεις διαφορετικές μεθόδους: Το συστατικό C παράγεται στη διεργασία 1 με χρήση της πρώτης ύλης B. Η πρώτη ύλη B μπορεί να αγοραστεί (B_P) ή να παρασκευαστεί από τη διεργασία 2 ή τη διεργασία 3. Οι 2 και 3 χρησιμοποιούν συστατικό A. Αυτά απεικονίζονται στο Σχήμα 5.3.

Ζητείται: ποια διαδικασία (διεργασίες 2, 3 ή αγορά) πρέπει να επιλεγεί για την παραγωγή του C;

Δεδομένα: Οι μεταβλητές κατατάσσονται σε συνεχείς και διακριτές ως εξής:

<u>Συνεχείς</u>: A_2 και A_3, το ποσό πρώτης ύλης A που καταναλώνεται στις διεργασίες 2 και 3 για την παρασκευή B. B_2 και B_3 τα ποσά που παράγονται από τις 2, 3. B_P το ποσό του B που μπορεί να

αγοραστεί. C_1 το ποσό που θα παραχθεί τελικά από το συστατικό που μας ενδιαφέρει.

Διακριτές: Y_1, Y_2, Y_3 = δυαδικές μεταβλητές που υποδηλώνουν ύπαρξη ή μη κάθε μίας από τις διεργασίες 1, 2 και 3.

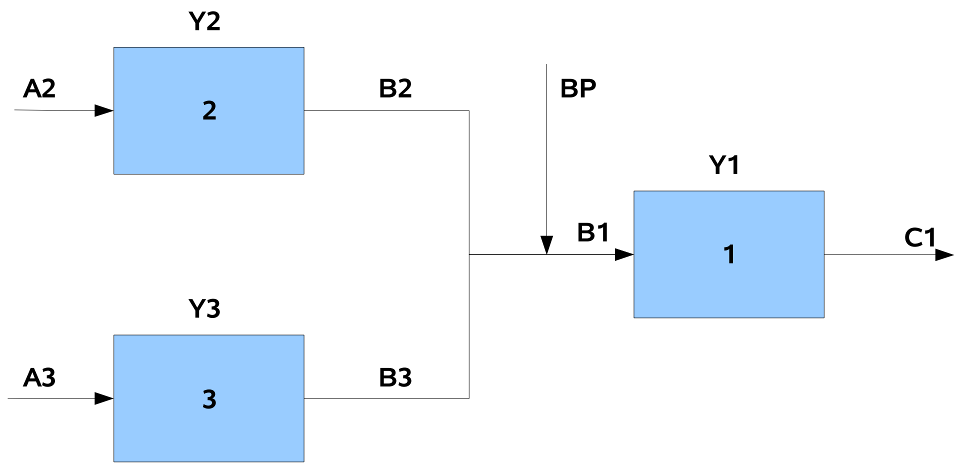
Οι περιορισμοί του προβλήματος είναι οι εξής:

Μετατροπή (τόννοι ανά ώρα):

$$C_1 = 0.9B_1, \quad B_2 = \ln(1 + A_2), \quad B_3 = 1.2 \ln(1 + A_3)$$

Ισοζύγιο μάζας του B:

$$B_1 = B_2 + B_3 + B_P$$



Σχήμα 5.3 *Διαφορετκές δυνατότητες απόκτησης πρώτης ύλης για την παρασκευή ζητούμενου τελικού προϊόντος συνοψίζονται εδώ σε ένα διάγραμμα υπερδομής από όπου μπορούν να ληφθούν διαφορετικές υποψήφιες δομές, ανάλογα με τις τιμές των δυαδικών μεταβλητών* Y_i.

Περιορισμός προσήμου ή φυσικής σημασίας:

όλες οι συνεχείς μεταβλητές > = 0 [1]

Ακέραιοι περιορισμοί:

$$Y_1, Y_2, Y_3 = 0 \text{ ή } 1$$

Μέγιστη ζήτηση:

C <= 1 (σε τόννους ανά ώρα)

Περιορισμοί δυναμικότητας (τόννοι ανά ώρα):

$$B_2 \le 4Y_2, \quad B_3 \le 5Y_3, \quad C1 \le 2Y_1$$

1 Η μεταβλητή B_P θα μπορούσε να εξαιρεθεί από αυτό τον περιορισμό γιατί ενδεχομένως να προέκυπτε λύση κατά την οποία παράγεται αρκετό ενδιάμεσο προϊόν Β ώστε να πωληθεί μέρος του στην αγορά, πράγμα που θα μπορούσε να αναπαρασταθεί με μια αρνητική παροχή B_P.

(λόγω χρήσης των Yi, αν επιλεγεί η i-στή διεργασία ισχύει ο περιορισμός που περιέχει την Yi, αλλιώς η αντίστοιχη ποσότητα τίθεται από τον περιορισμό ίση με μηδέν).

Αντικειμενική Συνάρτηση (η μονάδα τιμών θεωρείται 1000 ευρώ ανά ώρα):

Έσοδα από πωλήσεις του C: $13C_1$

Εξοδα για αγορά του B: $7B_P$

Εξοδα για αγορά του A: $1.8\ A_2 + 1.8\ A_3$

<u>Ετήσιες αποσβέσεις και λειτουργικό κόστος των τριών διεργασιών</u>:

$$3.5Y_1 + 2C_1 + Y_2 + B_2 + 1.5Y_3 + 1.2B_3$$

ΑΣ προς μεγιστοποίηση: $11C_1 -3.5Y_1 -Y_2 -B_2 -1.5Y_3 -1.2B_3 -7B_P -1.8A_2 -1.8A_3$

Λύση: το πρόβλημα μπορεί να λυθεί βάσει της μεθόδου branch and bound με το solver του Excel όπου μπορεί κανείς να πειραματιστεί και με τιμές διαφορετικές από αυτές που δίνονται στην εκφώνηση. Τελικά, βρίσκεται ότι $Y_1 = Y_3 = 1, Y_2 = 0$ και $B_P = 0$, δηλαδή θα χρησιμοποιηθεί η διεργασία 3 για την τροφοδοσία της 1, η 2 δε χρησιμοποιείται και δε θα χρειαστεί προμήθεια του συστατικού B από την αγορά. Η διεργασία 3 έχει μεγαλύτερο κόστος αλλά και πολύ μεγαλύτερη απόδοση που αντισταθμίζει το κόστος. Επίσης, σημαντικό ρόλο παίζει το κόστος του συστατικού A, ενώ και η τιμή αγοράς του B αποδεικνύεται πολύ υψηλή σε σχέση με το μοναδιαίο κόστος παραγωγής του B.

Αρκετές φορές, παρατηρώντας προσεκτικά τη διατύπωση του προβλήματος, θα δούμε ότι μπορεί να απλοποιηθεί σε μεγάλο βαθμό ώστε δε χρειάζεται να καταφύγουμε σε εξεζητημένες μεθόδους. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα παρατηρούμε ότι η μεταβλητή Y_1 είναι υποχρεωτικά ίση με 1 (αλλιώς δε θα είχαμε παραγωγή του C!). Επομένως, απομένουν οι Y_2 και Y_3. Αφού είναι δυαδικές μεταβλητές, μπορούμε να εξετάσουμε τους συνδυασμούς που προκύπτουν από τις δυνατές τιμές τους, 0 και 1 ως αυτοτελή προβλήματα και απλά να επιλέξουμε την καλύτερη λύση. Οι συνδυασμοί αυτοί για το ζεύγος (Y_2, Y_3) είναι: (0, 0), (0, 1), (1, 0) και (1, 1) και τους εξετάζουμε αναλυτικά στη συνέχεια.

<u>Περίπτωση 1</u>: $Y_2 = Y_3 = 0$, δηλαδή προμηθευόμαστε την πρώτη ύλη B αποκλειστικά από την αγορά. Τότε, η αντικειμενική συνάρτηση γίνεται $F = 11C_1 - 7B_P - 3.5$ και από τα δεδομένα για τη μετατροπή της διεργασίας 1, $C_1 = 0.9B_1 = 0.9B_p$, παίρνει τη μορφή $F = 2.9B_p - 3.5$. Αυτό σημαίνει ότι έχουμε κέρδος για αγορά ποσότητας $B_p > 1.207$ ton/h. Αλλά επειδή ισχύει ο περιορισμός για τη ζήτηση, $C_1 < 1$, από τη σχέση που δίνεται για τη μετατροπή, συνεπάγεται $B_P < 1/0.9 = 1.111$ και η διεργασία είναι πάντα ζημιογόνος. Άρα, η πρώτη λύση απορρίπτεται.

<u>Περίπτωση 2</u>: $Y_2 = 1$, $Y_3 = 0$ (το B προέρχεται από την αγορά και από τη διεργασία 2). Τότε, η αντικειμενική συνάρτηση γράφεται έτσι:

$$F= 11C_1 - 4.5 - B_2 - 7B_P -1.8A_2$$

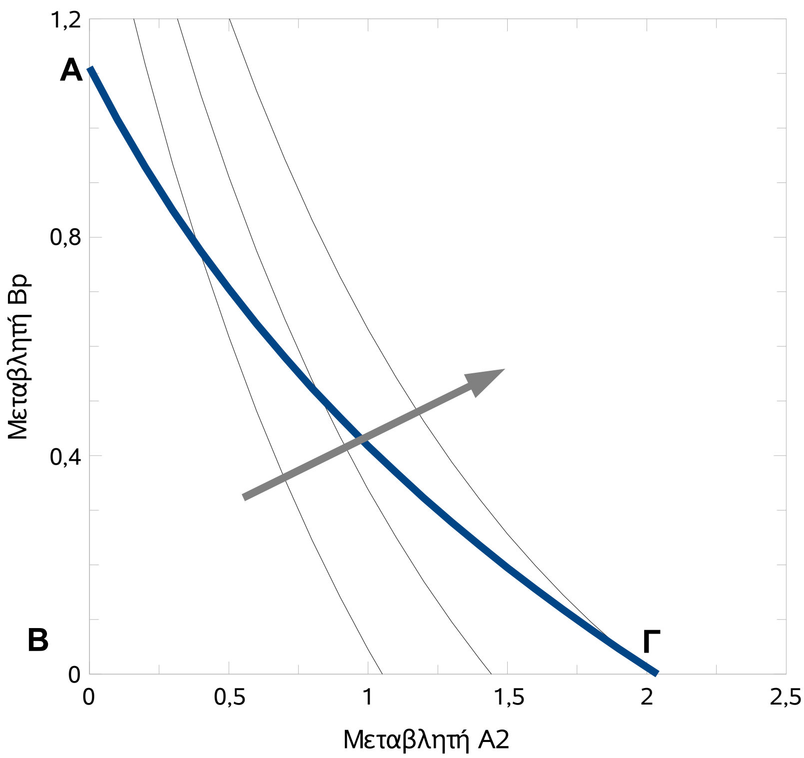
και από τις σχέσεις $C_1 = 0.9B_1$ (μετατροπή στη διεργασία 1), $B_1 = B_2 + B_P$ (ισοζύγιο μάζας) και $B_2 = \ln(1+A_2)$ (μετατροπή στη διεργασία 2), γίνεται:

$$F = 2.9B_P + 8.9\ln(1+A_2) -1.8A_2 - 4.5$$

Αυτή η συνάρτηση είναι αύξουσα ως προς τη B_P ενώ όσον αφορά την A_2 εύκολα βρίσκουμε ότι έχει μέγιστο στην τιμή 3.944, η οποία όμως οδηγεί σε παραβίαση του περιορισμού για τη ζήτηση του προϊόντος, $C_1 < 1$, επομένως πρέπει να λύσουμε το αντίστοιχο πρόβλημα του δεσμευμένου ακρότατου. Ο περιορισμός για τη ζήτηση σε συνδυασμό με τη μετατροπή και τα ισοζύγια γράφεται:

$$C_1 = 0.9(\ln(1+A_2) + BP) \leq 1 \text{ ή } B_P + \ln(1 + A_2) \leq 10/9$$

Αυτή η ανισότητα μαζί με τους περιορισμούς $A_2 \geq 0$ και $B_P \geq 0$ ορίζουν ένα χωρίο του επιπέδου (A_2, B_P). Επειδή η αντικειμενική συνάρτηση αυξάνεται και ως προς τις δύο μεταβλητές καταλαβαίνουμε ότι οι μεγαλύτερες τιμές της και άρα το μέγιστο που αναζητούμε θα είναι πάνω στο σύνορο αυτού του χωρίου που ορίζεται αν στην παραπάνω σχέση κρατήσουμε μόνο το σύμβολο της ισότητας. Τότε, το πρόβλημα μπορεί να λυθεί αλγεβρικά αντικαθιστώντας τη B_P από τη σχέση του περιορισμού για την περίπτωση της ισότητας, στην έκφραση της ΑΣ που έτσι θα γίνει συνάρτηση μιας μεταβλητής και είναι εύκολο να τη χειριστούμε. Αξίζει όμως να εξετάσουμε το πρόβλημα και γεωμετρικά γιατί αυτό θα καταστήσει την επιχειρηματολογία μας πιο κατανοητή.



Σχήμα 5.4 *Περιορισμός για τις μεταβλητές* A_2 *και* B_P *(παχειά γραμμή) και ισοϋψείς της Αντικειμενικής Συνάρτησης (λεπτές γραμμές). Το βέλος δείχνει την κατεύθυνση αύξησης της ΑΣ. Οι ισοϋψείς σχεδιάστηκαν για τιμές της ΑΣ ίσες με 0, 0.85 και 1.7 (από αριστερά προς δεξιά) .*

Όπως ξέρουμε, αν κρατήσουμε σταθερή την τιμή μιας συνάρτησης δύο μεταβλητών μπορούμε να σχεδιάσουμε την ισοϋψή καμπύλη που αντιστοιχεί σε αυτή την τιμή. Στο Σχ. 5.4 σχεδιάζουμε τις ισοϋψείς της αντικειμενικής μας συνάρτησης για διάφορες τιμές $F = c$ αυτής, που περιγράφονται από τη σχέση η οποία λαμβάνεται λύνοντας ως προς B_P:

$$B_P = 4.5/2.9 + 1.8A_2/2.9 - 8.9\ln(1+A_2)/2.9 + c/2.9$$

Επίσης, σχεδιάζουμε την εξίσωση για το σύνορο του συνόλου των σημείων (B_P, A_2) που ικανοποιούν τους περιορισμούς (χωρίο ΑΒΓ στο σχήμα), δηλαδή:

$$B_P = 10/9 - \ln(1+A_2)$$

Το ζητούμενο δεσμευμένο μέγιστο θα βρίσκεται στην τομή της καμπύλης του περιορισμού με την ισοϋψή για τη μεγαλύτερη τιμή της ΑΣ που διέρχεται μέσα από το χωρίο ΑΒΓ. Εύκολα βλέπουμε ότι όταν σχεδιάζουμε ισοϋψείς της ΑΣ αυτές μετατοπίζονται προς τα δεξιά όταν διαλέγουμε μεγαλύτερς τιμές της (αυτό το “πείραμα” μπορεί να γίνει πολύ εύκολα με προγράμματα όπως Excel, OpenOffice Calc, gnuplot και άλλα). Από το Σχ. 5.4 καταλαβαίνουμε αμέσως ότι η ΑΣ μεγιστοποιείται στο σημείο Γ κάτω δεξιά, όπου $B_P = 0$. Τότε από την εξίσωση για το σύνορο των περιορισμών βρίσκουμε ότι $A_2 = 2.038$ και αντικαθιστώντας στη σχέση για την αντικειμενική συνάρτηση, παίρνουμε την τιμή $F = 1.7205$. (Ο αναγνώστης καλείται να επιβεβαιώσει την ισχύ των περιορισμών που δεν εξετάστηκαν, για τη λύση αυτή).

Παρατηρούμε ότι σε αυτή την περίπτωση υπάρχει κέρδος.

Περίπτωση 3: $Y_2 = 0$, $Y_3 = 1$ (το B προέρχεται από την αγορά και από τη διεργασία 3). Τότε, η αντικειμενική συνάρτηση γράφεται έτσι:

$$F= 11C_1 – 5 – 1.2B_3 – 7B_P -1.8A_3$$

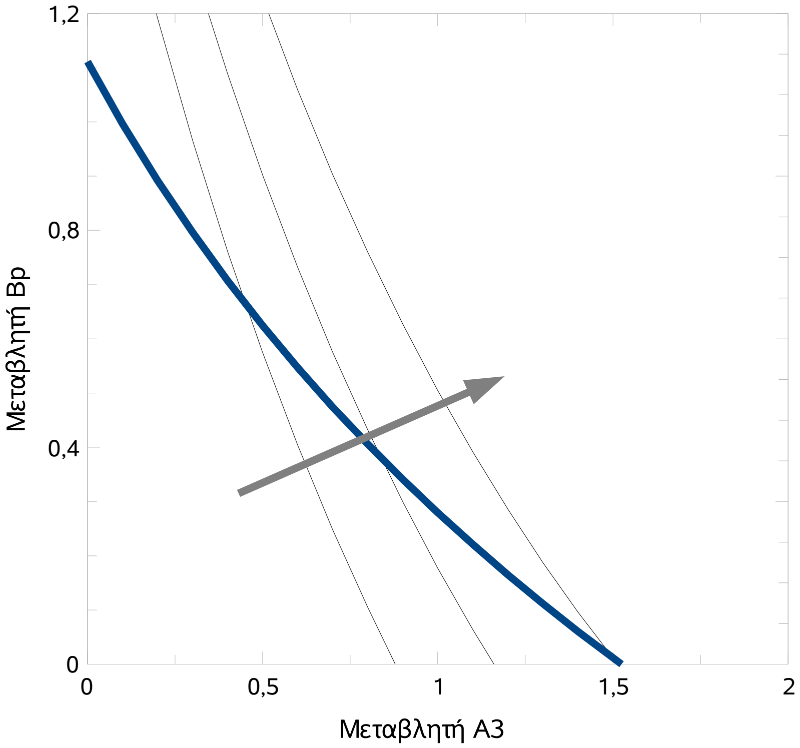
και από τις σχέσεις $C_1 = 0.9B_1$ (μετατροπή στη διεργασία 1), $B_1 = B_3 + B_P$ (ισοζύγιο μάζας) και $B_3 = 1.2\ln(1+A_3)$ (μετατροπή στη διεργασία 3), γίνεται:

$$F = 2.9B_P + 10.44\ln(1+A_3) -1.8A_3 – 5$$

Ο περιορισμός για τη ζήτηση σε συνδυασμό με τη μετατροπή και τα ισοζύγια γράφεται:

$$C_1 = 0.9(1.2\ln(1+A_3) + B_P) \le 1 \text{ ή } B_P +1.2 \ln(1 + A_3) \le 10/9$$

Η περίπτωση αυτή είναι εντελώς ανάλογη με την προηγούμενη και επομένως ισχύει το ίδιο σκεπτικό με το οποίο αναλύσαμε το δεύτερο υπο-πρόβλημα. Δίνουμε το σχετικό διάγραμμα:



Σχήμα 5.5 *Περιορισμός για τις μεταβλητές* A_3 *και* B_P *(παχειά γραμμή) και ισοϋψείς της Αντικειμενικής Συνάρτησης (λεπτές γραμμές). Το βέλος δείχνει την κατεύθυνση αύξησης της ΑΣ. Οι ισοϋψείς σχεδιάστηκαν για τιμές της ΑΣ ίσες με 0, 0.95 και 1.9 (από αριστερά προς δεξιά) .*

Βρίσκουμε και πάλι ότι $B_P = 0$ από όπου προκύπτει ότι $A_3 = 1.524$ και $F = 1.923$. Παρατηρούμε βελτίωση της ΑΣ σε αυτό το σενάριο. (Ο αναγνώστης καλείται να επιβεβαιώσει την ισχύ των περιορισμών που δεν εξετάστηκαν, για τη λύση αυτή).

Περίπτωση 4: $Y_2 = Y_3 = 1$ (το B προέρχεται από την αγορά και από τις διεργασίες 2 καιι 3). Τότε, η αντικειμενική συνάρτηση γράφεται έτσι:

$$F = 11C_1 - 6 - B_2 - 1.2B_3 - 7B_P - 1.8A_2 - 1.8A_3$$

και από τις σχέσεις $C_1 = 0.9B1$ (μετατροπή στη διεργασία 1), $B_1 = B_2 + B_3 + B_P$ (ισοζύγιο μάζας), $B_2 = \ln(1+A_2)$ (μετατροπή στη διεργασία 2), και $B_3 = 1.2\ln(1+A_3)$ (μετατροπή στη διεργασία 3), γίνεται:

$$F = 2.9B_P + 8.9\ln(1+A_2) + 10.44\ln(1+A_3) - 1.8A_2 - 1.8A_3 - 6$$

Ο περιορισμός για τη ζήτηση σε συνδυασμό με τη μετατροπή και τα ισοζύγια γράφεται:

$$C_1 = 0.9(\ln(1+A_2) + 1.2\ln(1+A_3) + B_P) \le 1 \text{ ή } B_P + \ln(1+A_2) + 1.2\ln(1+A_3) \le 10/9$$

Τώρα, έχουμε τρεις μεταβλητές αλλά το πρόβλημα είναι εντελώς ανάλογο γιατί τόσο η αντικειμενική συνάρτηση όσο και ο περιορισμός είναι αθροίσματα όρων που σχημάτιζαν τις αντίστοιχες παραστάσεις στα προηγούμενα υποπροβλήματα. Δεν είναι εύκολο ούτε πρακτικό να σχεδιάσουμε τον περιορισμό στις τρεις διαστάσεις αλλά παρατηρούμε ότι αν π.χ. κρατήσουμε σταθερή τη μεταβλητή $A_3 = c$, θα πάρουμε μια σχέση ανάλογη με αυτή της δεύτερης περίπτωσης:

$$B_P \le 10/9 - 1.2\ln(1+c) - \ln(1+A_2) = \text{σταθερά} - \ln(1+A_2)$$

η οποία μπορεί να μελετηθεί με τον ίδιο τρόπο για να μας οδηγήσει στο συμπέρασμα ότι $B_P = 0$ για κάθε τιμή του A_3 που δεν οδηγεί σε αρνητικές τιμές του B_P. (Το ίδιο συμπεραίνουμε αν σταθεροποιήσουμε την A_2 και μεταβάλλουμε την A_3).

Θέτοντας $B_P = 0$, η εξίσωση για το σύνορο του περιορισμού (που τώρα είναι, γενικά, μια επιφάνεια) παίρνει τη μορφή

$$\ln(1+A_2) + 1.2\ln(1+A_3) = 10/9$$

Αν λύσουμε ως προς τη μία μεταβλητή, π.χ. την A_2 και αντικαταστήσουμε στην F, μπορούμε να βρούμε το μέγιστο με απλή παραγώγιση (με την αντικατάσταση αυτή, ο περιορισμός ενσωματώνεται στην F). Η παράσταση που θα πάρουμε είναι πολύπλοκη και θα χρειαστεί να καταφύγουμε σε μεθόδους της αριθμητικής ανάλυσης. Μπορούμε όμως και είναι πιο απλό, να πάρουμε αντιπροσωπευτικές τιμές με ένα λογιστικό φύλλο, καθώς και να κάνουμε μια γραφική παράσταση για να βρούμε το μέγιστο με μια καλή προσέγγιση. Το σκεπτικό μας είναι απλό. Κάνοντας τις απαραίτητες αντικαταστάσεις, μπορούμε εύκολα να γράψουμε την ΑΣ ως εξής:

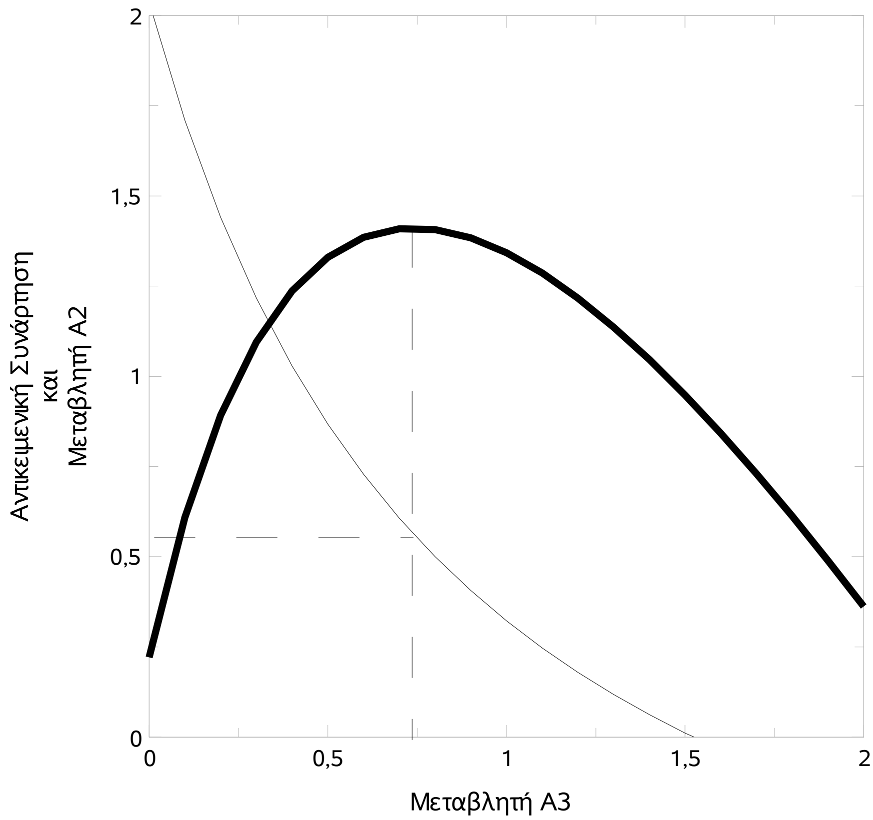
$$F = 10.44x + 8.9y - 1.8A_2 - 1.8A_3 - 6$$

όπου $x = \ln(1+A_3)$, $y = \ln(1+A_2) = 10/9 - 1.2x$ (από τον περιορισμό) και $A_2 = \exp(y) - 1$. Τώρα, είναι συνάρτηση μιας μεταβλητής, της A_3. Για να βρούμε το μέγιστο, υπολογίζουμε και σχεδιάζουμε τόσο την F όσο και την A_2 σε συνάρτηση με την A_3 και εκεί όπου η F παίρνει τη μεγαλύτερη τιμή εντοπίζουμε και την αντίστοιχη τιμή της A_3. Το σκεπτικό είναι ανάλογο με αυτό που χρησιμοποιήσαμε στο Παράδειγμα 3.2 για τη διαστασιολόγηση δοχείου και η εφαρμογή του δείχνεται στο Σχήμα 5.6 (επόμενη σελίδα).

Με την παραπάνω προσεγγιστική μέθοδο βρίσκουμε $A_3 = 0.75$, $A_2 = 0.56$ και $F = 1.41$. (Ο αναγνώστης καλείται να επιβεβαιώσει την ισχύ των περιορισμών που δεν εξετάστηκαν, για τη λύση αυτή).

Συμπεραίνουμε ότι καλύτερη είναι η λύση 3 που έδωσε $B_P = A_2 = 0$, $A_3 = 1.524$ και $F = 1.923$.

Το παραπάνω παράδειγμα δείχνει την εφαρμογή του πρακτικού πνεύματος που πρέπει να διέπει την ανάλυση και επίλυση των προβλημάτων που αντιμετωπίζει ο μηχανικός. Αυτό το πνεύμα πρέπει επίσης να χαρακτηρίζεται από τη σαφή επίγνωση του πώς θα πρέπει να μοιάζει μια ρεαλιστική λύση. Με άλλα λόγια, τα αριθμητικά αποτελέσματα δεν πρέπει να γίνονται δεκτά με τυφλή εμπιστοσύνη αλλά να αναλύονται και να κρίνονται. Μερικές φορές τα πιθανά λάθη είναι



Σχήμα 5.6 *Τιμές Αντικειμενικής Συνάρτησης (παχειά γραμμή) και μεταβλητής* A_2 *(λεπτή γραμμή) υποκείμενης σε περιορισμό από κοινού με την ανεξάρτητη μεταβλητή* A_3. *Η κατακόρυφη διακεκομμένη συνδέει το μέγιστο της ΑΣ με την τιμή της* A_3 *όπου αυτό παρατηρείται. Η τομή της κατακόρυφης με την καμπύλη της* A_3*, δίνει την αντίστοιχη τιμή της τελευταίας για το μέγιστο (οριζόντια διακεκομμένη)*

προφανή, άλλες πάλι όχι. Σε αυτό το σημείο μπορούν και πάλι να φανούν χρήσιμοι οι γνωστοί μας εμπειρικοί κανόνες. Αν το αποτέλεσμα των υπολογισμών και προσομοιώσεων μιας διεργασίας είναι σε χαρακτηριστική αντίθεση με αυτό που θα περιμέναμε βάσει των εμπειρικών δεδομένων, δε θα ήταν κακή ιδέα να ελέγχαμε τα βήματα που ακολουθήσαμε, τα δεδομένα που χρησιμοποιήσαμε και τις παραδοχές στις οποίες βασιστήκαμε.

Κλείνουμε το παραπάνω σχόλιο και αυτή την ενότητα υπενθυμίζοντας πως ακόμη και αν το τελικό μας αποτέλεσμα είναι από κάθε άποψη σωστό και αξιόπιστο, η δουλειά μας δεν έχει τελειώσει ακόμη. Τα δεδομένα στις πραγματικές συνθήκες της βιομηχανικής παραγωγής δεν είναι σταθερά και επομένως πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν οι διακυμάνσεις τους και η επίπτωσή τους στις άριστες τιμές των μεγεθών που εξετάζουμε. Είναι πολύ πιθανό μια κατά τα άλλα ομαλή συνάρτηση να έχει πολύ απότομες μεταβολές σε ορισμένες περιοχές συνθηκών και άλλων παραμέτρων που είναι πολύ κοντά στο άριστο. Αν οι διακυμάνσεις που θα οδηγούσαν σε αυτές τις μεταβολές είναι πιθανές, τότε το θεωρητικό άριστο ίσως είναι μια ατυχής ή ακόμη και επικίνδυνη επιλογή. Αντί γι'αυτό, πρέπει να επιλέξουμε μια πιο ασφαλή τιμή λίγο μεγαλύτερη ή μικρότερη από εκείνη που βρήκαμε στην αρχή, για να εξασφαλιστούμε από κάθε κίνδυνο (βλ. σχετικά και το παράδειγμα του άριστου λόγου αναρροής που αναφέραμε στην Ενότητα 2).

Για να κάνουμε τους σχετικούς ελέγχους, καταφεύγουμε στην **ανάλυση ευαισθησίας** και την **ανάλυση κινδύνου** για τις οποίες μιλήσαμε ήδη στην Ενότητα περί οικονομικής αξιολόγησης. Το σκεπτικό είναι το ίδιο: μεταβάλλουμε μία μεταβλητή κρατώντας τις άλλες σταθερές, κατά ένα ποσοστό που έχουμε ορίσει και παρατηρούμε την απόκλιση από το άριστο που επέρχεται. Με συνδυασμό στοιχείων που έχουμε στη διάθεσή μας, εύλογων παραδοχών και καλής γνώσης της διεργασίας και των φυσικοχημικών φαινομένων σε αυτή και των αρχών που τα διέπουν, εκτιμούμε την πιθανότητα να συμβούν οι πιο επικίνδυνες ή ανεπιθύμητες από τις αλλαγές που υπολογίσαμε και επιλέγουμε τιμές των αντίστοιχων παραμέτρων κατά ένα ποσοστό προς την αντίθετη κατεύθυνση μεταβολής, ώστε να ελαχιστοποιήσουμε τον κίνδυνο. Ιδιαίτερα σε θέματα ασφάλειας, θα ήταν σκόπιμο να μελετήσουμε και σενάρια συνδυασμένων αλλαγών των μεταβλητών και να προετοιμαστούμε για το χειρότερο από αυτά με τις κατάλληλες επιλογές συνθηκών λειτουργίας κλπ ή έχοντας προσδιορίσει τις κατάλληλες ενέργειες για κάθε τέτοιο ενδεχόμενο.