

## Ενότητα 7

# Επιλογή και αριστοποίηση φυσικών διαχωριστήρων

### 7.1 Εισαγωγή

Οι διαχωρισμοί των προϊόντων του αντιδραστήρα, αλλά και οι καθαρισμοί που απαιτούνται για τα αντιδρώντα, εξαρτώνται από τη φύση τους. Έτσι, αν έχουμε ετερογενή συστήματα, θα χρησιμοποιηθούν ανάλογες μέθοδοι, όπως:

- κατακάθιση,
- φυγοκέντρωση,
- ηλεκτροστατική απόθεση,
- διήθηση,
- έκπλυση,
- επίπλευση,
- ξήρανση.

Αν πρόκειται για ρευστά, θα γίνει διαχωρισμός φάσεων. Αυτό είναι σχετικά εύκολο και πρέπει να γίνεται πριν από κάθε άλλο διαχωρισμό, και μάλιστα ομογενών μιγμάτων.

Τα βιομηχανικά προβλήματα διαχωρισμού γενικά περιλαμβάνουν διαχωρισμούς *πολυσυστατικών* μιγμάτων σε *περισσότερα από δύο προϊόντα*.

Υπάρχουν δύο τρόποι να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα του διαχωρισμού ενός πολυσυστατικού μίγματος στα επιμέρους συστατικά του:

- Σχεδιασμός και κατασκευή ενός, πολύπλοκα σχεδιασμένου διαχωριστήρα που να δίνει όλα τα επιθυμητά προϊόντα.
- Προσδιορισμός κατάλληλης ακολουθίας διαχωριστήρων, δηλ. διαδοχής απλούστερων διαχωριστήρων συνδεδεμένων μεταξύ τους.

Συχνά, η δεύτερη λύση είναι πιο οικονομική. Μπορούμε να συνδυάσουμε συγκεκριμένους διαχωριστήρες που θα προμηθευτούμε έτοιμους. Επίσης, αν χρειαστεί, μπορούμε να τους ανασυνδέσουμε με διαφορετική τοπολογία για να κάνουμε άλλους διαχωρισμούς. Στην πρώτη περίπτωση, πρέπει να σχεδιάσουμε και παραγγείλουμε ή κατασκευάσουμε ένα συγκεκριμένο διαχωριστήρα. Ο σχεδιασμός, παραγγελία και κατασκευή μιας και μόνης εξειδικευμένης μονάδας θα κοστίσει περισσότερο και σε χρόνο και σε χρήμα. Επίσης, το πιθανότερο είναι ότι δε θα έχει την ίδια ευελιξία και δυνατότητα προσαρμογής σε απαιτήσεις για νέους διαχωρισμούς διαφορετικών μιγμάτων που είναι πιθανό ότι θα χρειαστεί να αντιμετωπίσουμε. Γι' αυτό, η πιο κοινή επιλογή είναι ο συνδυασμός διαχωριστήρων σε μια ακολουθία ή δίκτυο.

**Μία Ακολουθία Διαχωριστήρων** μπορεί να είναι

- **Απλή:** σε αυτή, κάθε διαχωριστής εκτελεί σχετικά πλήρη (sharp) διαχωρισμό δύο συστατικών-κλειδιών (δηλαδή δύο συστατικών του μίγματος που οι πτητικότητές τους διαφέρουν σαφώς αλλά και δεν υπάρχει συστατικό με ενδιάμεση τιμή πτητικότητας) και δεν υπάρχει ανακύκλωση προϊόντων ή ενέργειας.
- **Σύνθετη,** όπου οι παραπάνω παραδοχές δεν ισχύουν υποχρεωτικά.

Ο προσδιορισμός της κατάλληλης ακολουθίας διαχωριστήρων είναι πρόβλημα σχεδιασμού που υπάγεται στην κατηγορία της δομικής αριστοποίησης.

Ο σχεδιασμός μιας απλής ακολουθίας διαχωρισμού επιτρέπει την ακριβή διατύπωση και μελέτη του προβλήματος, επομένως χρησιμεύει ως βάση για τη θεωρητική ανάλυση κατά τρόπο παρόμοιο με την ανάλυση που κάνουμε π.χ. σε μια αποστακτική στήλη όταν βασιζόμαστε στις παραδοχές της ισορροπίας φάσεων και της 100% απόδοσης κάθε δίσκου.

Συνήθως, αναζητείται η ακολουθία που ικανοποιεί τα παρακάτω κριτήρια:

- Ελάχιστο κόστος (πάγιο + λειτουργικό· υπολογίζονται για κάθε διαχωριστήρα και προστίθενται).
- Αξιοπιστία (κατά πόσο θα πετύχει τον επιδιωκόμενο διαχωρισμό και δε θα αποκλίνει σημαντικά για μεταβολές των δεδομένων εισόδου).
- Ευχερής λειτουργία.
- Ασφάλεια

Συχνά προκύπτει μεγάλος αριθμός εναλλακτικών δικτύων ή ακολουθιών διαχωρισμού και αυξάνει σημαντικά τη δυσκολία του προβλήματος. Τότε, ικανοποιούμε και με λύσεις που είναι κοντά στην άριστη χωρίς να ταυτίζονται με αυτή.

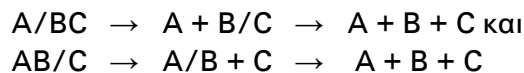
## 7.2 Η Ακολουθία Διαχωρισμού ως συνδυαστικό πρόβλημα

### 7.2.1 Αριθμός ακολουθιών, διαχωριστήρων και ενδιάμεσων και τελικών προϊόντων

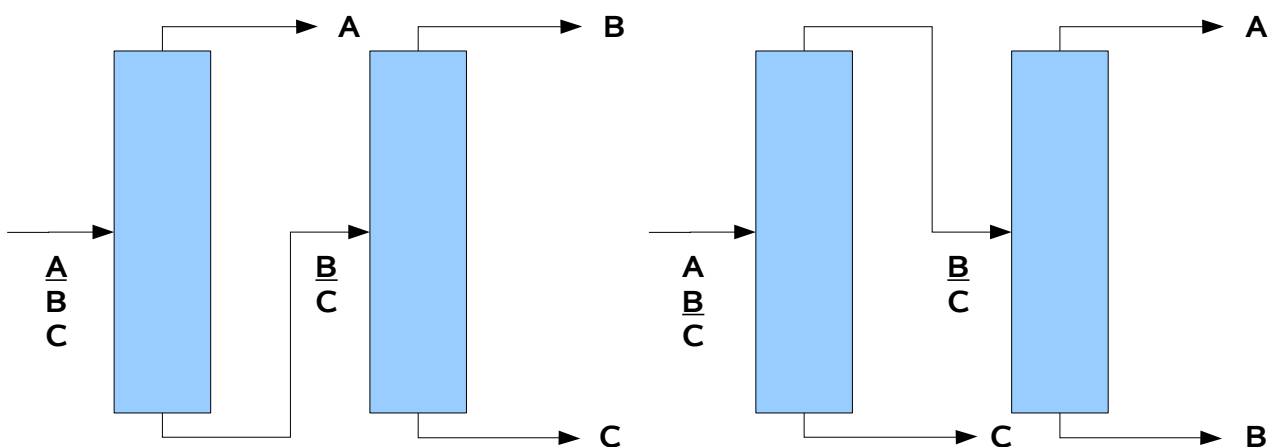
Για να απλοποιήσουμε τη διατύπωση και το χειρισμό του προβλήματος υποθέτουμε τα εξής:

- Διαχωριστήρες με μία τροφοδοσία και δύο ρεύματα εξόδου.
- Οι διαχωρισμοί είναι άμεσοι (με τη βοήθεια ενέργειας – όχι προσθήκη τρίτου συστατικού).
- Όλοι οι διαχωρισμοί βασίζονται στην ίδια μέθοδο (π.χ. απόσταση).
- Ο διαχωρισμός είναι πλήρης (sharp – δηλαδή τα συστατικά του ενός ρεύματος εξόδου δεν υπάρχουν στο άλλο).

Αναφερόμαστε στα συστατικά διατάσσοντάς τα με φθίνουσα σειρά πτητικότητας, π.χ. ABC σημαίνει  $A > B > C$ , όσον αφορά τις πτητικότητες. Για τριαδικό μίγμα ABC, οι δυνατοί διαχωρισμοί είναι:



όπου με την πλάγια / συμβολίζουμε το σημείο διαχωρισμού του μίγματος, άρα έχουμε δύο (2) δυνατές ακολουθίες διαχωρισμού, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 7.1.



Σχήμα 7.1: Δυνατές ακολουθίες διαχωρισμού για τριαδικό μίγμα

Αν έχουμε  $R$  συστατικά, τότε υπάρχουν  $R-1$  σημεία διαχωρισμού. Τόσοι είναι και οι **διαχωριστήρες** που θα χρησιμοποιηθούν σε οποιαδήποτε δυνατή ακολουθία διαχωρισμού.

Αν, για δεδομένο διαχωρισμό,  $j$  είναι τα συστατικά στο απόσταγμα, τότε απομένουν  $R-j$  συστατικά στο υπόλειμμα. Τότε, αν παραστήσουμε με  $S_i$  τον αριθμό των δυνατών ακολουθιών για  $i$  συστατικά, τότε για το δεδομένο διαχωρισμό των  $R$  συστατικών έχουμε  $S_j S_{R-j}$  δυνατές ακολουθίες.

Ο συνολικός **αριθμός δυνατών ακολουθιών** προκύπτει από το άθροισμα όρων της παραπάνω μορφής για όλους τους δυνατούς  $R-1$  διαχωρισμούς, δίνοντας την επόμενη αναδρομική σχέση:

$$S_R = \sum_{j=1}^{R-1} S_j S_{R-j} \quad (7-1)$$

Αποδεικνύεται (Wal et al, AIChE J. 36, 1601, 1990) ότι η παραπάνω σχέση δίνει ως αριθμό των δυνατών συνδυασμών διαχωριστήρων για τον πλήρη διαχωρισμό ενός μίγματος στα  $R$  συστατικά του, την ακόλουθη έκφραση:

$$S_R = \frac{(2R-2)!}{R!(R-1)!} \quad (7-2)$$

Ο διαχωρισμός πολυσυστατικών μιγμάτων δίνει υποομάδες ή ρεύματα συστατικών γειτονικών στη σειρά πτητικότητας. Αυτά μπορεί να είναι τροφοδοσίες επόμενων διαχωριστήρων (ενδιάμεσα προϊόντα) ή τελικά προϊόντα.

Ο συνολικός (για όλες τις δυνατές ακολουθίες διαχωριστήρων) αριθμός υποομάδων προϊόντων μαζί με την αρχική τροφοδοσία, δηλαδή τροφοδοσία, όλα τα ενδιάμεσα προϊόντα-μίγματα συν τα τελικά προϊόντα, είναι το άθροισμα της αριθμητικής προόδου:

$$G = \sum_{j=1}^R j = \frac{R(R+1)}{2} \quad (7-3)$$

Για παράδειγμα, αν έχουμε 4 προϊόντα ABCD, τότε οι δυνατές υποομάδες είναι οι εξής:

με 3 συστατικά:	ABC	BCD		
με 2 συστατικά:	AB	BC	CD	
με 1 συστατικό:	A	B	C	D

δηλαδή 9 και μαζί με την τροφοδοσία 10, που δίνεται και από  $4(4+1)/2 = 10$ .

Να σημειωθεί ότι δεν περιλαμβάνονται ομάδες όπως AC, AD αφού ο διαχωρισμός νοείται μόνο μεταξύ συστατικών με γειτονικές πτητικότητες.

Οι παραπάνω σχέσεις ισχύουν και αν το μίγμα υποδιαιρείται όχι στα  $R$  καθαρά συστατικά αλλά σε  $P$  πολυσυστατικά ρεύματα, εφόσον αυτά προέρχονται αποκλειστικά από διαχωρισμό και όχι από ανάμιξη αλλά αποτελούνται από διαδοχικά διαταγμένα συστατικά. Τότε, αντικαθιστούμε το  $R$  με το  $P$  στις παραπάνω σχέσεις.

Τέλος, ο αριθμός των σημείων διαχωρισμού (splits) δίνεται από τη σχέση

$$U = \sum_{j=1}^R j = \frac{(R-1)R(R+1)}{6} \quad (7-4)$$

Παρατηρούμε ότι η τιμή του αριθμού των δυνατών ακολουθιών αυξάνει εκθετικά με τον αριθμό συστατικών. Για 10 συστατικά έχουμε 4,862 ακολουθίες, ενώ για 11 συστατικά φτάνουμε τις 16,796. Πρέπει να πούμε ότι ο αριθμός των 10 ή 11 συστατικών κάθε άλλο παρά υπερβολικός είναι για τη βιομηχανική πρακτική. Μίγματα όπως το αργό πετρέλαιο μπορεί να περιέχουν

εκατοντάδες διαφορετικά συστατικά. Μίγματα που παράγονται σε χημικό αντιδραστήρα ενδέχεται να περιέχουν παραπροϊόντα, υπολείμματα από μέσα διαχωρισμού για προηγούμενους διαχωρισμούς, αδρανή, προσμίξεις που υπήρχαν στην τροφοδοσία.

Από τους παραπάνω αριθμούς καταλαβαίνουμε ότι η επιλογή της ακολουθίας διαχωριστήρων αντί για το μοναδικό, ενιαίο, πολύπλοκο διαχωριστήρα, οδηγεί σε υπολογιστική πολυπλοκότητα ως συνάρτηση του αριθμού δυνατών ακολουθιών που αυξάνεται σε μεγάλο βαθμό.

Αν στις διεργασίες που μελετήσαμε εισάγουμε και την πιθανότητα έμμεσων διαχωρισμών, όπου ο *Παράγοντας Διαχωρισμού*, π.χ. διαλύτης ως μέσον εκχύλισης, ανακτάται για ανακύκλωση στον διαχωριστήρα που έπεται αυτού όπου χρησιμοποιήθηκε, τότε ο αριθμός δυνατών ακολουθιών είναι

$$S = T^{R-1} S_R \quad (7-5)$$

όπου T είναι ο αριθμός των θεωρούμενων διαφορετικών μεθόδων διαχωρισμού.

Για να μειώσουμε το μέγεθος του προβλήματος χρησιμοποιούμε κριτήρια για τον αποκλεισμό διαφόρων δυνατών εναλλακτικών λύσεων στη βάση της αποδοτικότητας και άλλων παραγόντων.

### 7.2.2 Μέθοδος Souders

Αυτή η μέθοδος αποκλείει διάφορες δυνατές περιπτώσεις στη βάση τεχνικών κριτηρίων και αξιολογεί αυτές που απομένουν.

Τα βήματα είναι τα εξής:

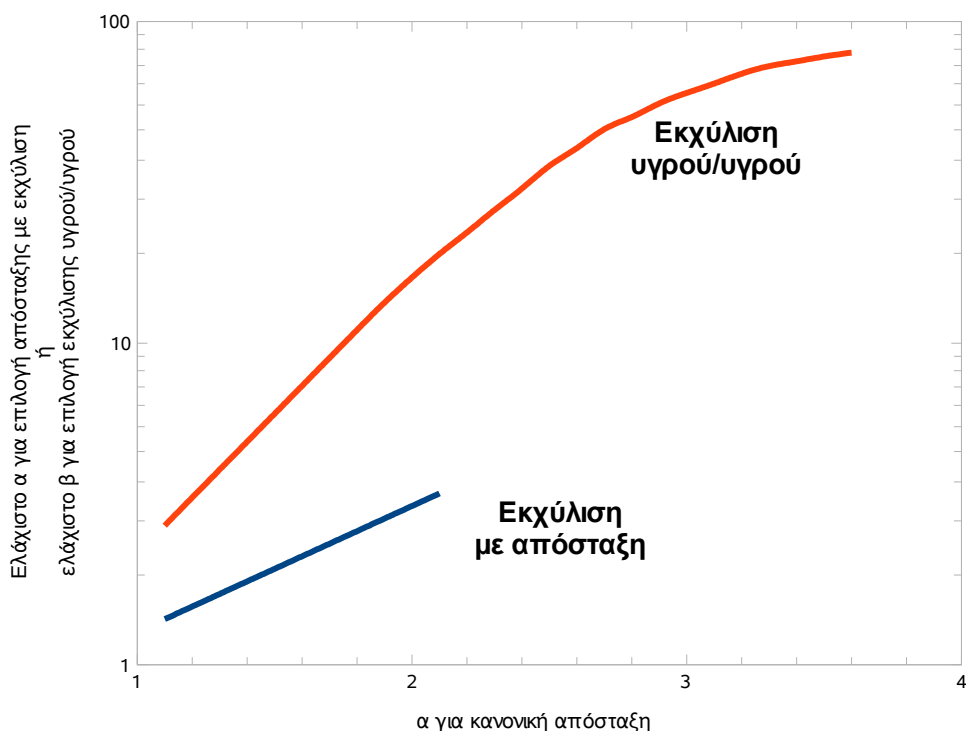
1. Αρχικά επιλέγεται ως μέθοδος διαχωρισμού η *απλή απόσταξη* (επειδή είναι εφαρμόσιμη σε όλη την περιοχή συνύπαρξης ατμού-υγρού) και προσδιορίζεται η πίεση λειτουργίας.
2. Αν απαιτείται κατάψυξη στον συμπυκνωτήρα κορυφής μπορεί να εξεταστεί εναλλακτική λύση όπως η απορρόφηση (γιατί το λειτουργικό κόστος ψύξης αυξάνεται γρήγορα με τη ζητούμενη πώση θερμοκρασίας).
3. Αν η στήλη πρέπει να λειτουργεί σε κενό (υποπίεση) μπορεί να εξεταστεί η εκχύλιση με διάφορους διαλύτες (γιατί το κενό απαιτεί ανθεκτικότερα υλικά και χρήση αντλίας που συνεπάγονται αύξηση του πάγιου και λειτουργικού κόστους).
4. Αν η σχετική πηκτικότητα μεταξύ δυο συστατικών κλειδιών είναι  $< 1.05$ , τότε η απόσταξη θεωρείται μη εφικτή (απαιτούνται πάρα πολύ θεωρητικοί δίσκοι, δηλαδή υπερβολικά μεγάλο πάγιο).
5. Αν η σχετική πηκτικότητα είναι  $> 2$ , τότε είναι ασφαλές να χρησιμοποιήσουμε απόσταξη (ο πιο εύκολος διαχωρισμός).
6. Αν η σχετική πηκτικότητα είναι μεταξύ των δύο παραπάνω τιμών, τότε υπολογίζεται ο αντίστοιχος *δείκτης διαχωρισμού* για απόσταξη με εκχύλιση ή εκχύλιση υγρού-υγρού. Αν υπερβαίνει αντίστοιχες ελάχιστες αποδεκτές τιμές που δίνονται σε σχετικό διάγραμμα (βλ. αμέσως μετά), ως συνάρτηση του αντίστοιχου δείκτη για συνήθη απόσταξη, τότε αποτελούν ελκυστικές εναλλακτικές λύσεις.
7. Αν η χρήση μέσου διαχωρισμού μεταβάλλει τις σχετικές πηκτικότητες και άρα τη σειρά κατάταξης των συστατικών ώστε να επιτρέπει διαχωρισμό των επιθυμητών μιγμάτων χωρίς να χρειαστεί ανάμιξη μετά, τότε επίσης είναι ελκυστική λύση.

Το διάγραμμα που αναφέρεται στο βήμα 6 μαζί με σχετικές εξηγήσεις δίνεται στο Σχήμα 7-2.

Τα επόμενα στάδια σκιαγραφούνται με το επόμενο

**ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 7-1:** Δίκτυο διαχωριστήρων για μίγμα έξη υδρογονανθράκων.

Θέλουμε να διαχωρίσουμε μίγμα έξη συστατικών με κατάλληλη ακολουθία διαχωριστήρων. Η τροφοδοσία είναι στους 37.8°C και σε πίεση 1.03 Μρα, ενώ η σύστασή και τα σημεία ζέσεως των συστατικών συνοψίζονται στον πίνακα:



**Σχήμα 7.2** Διάγραμμα παράγοντα διαχωρισμού για εκχύλιση με απόσταξη ( $\alpha$ ) και για εκχύλιση υγρού-υγρού ( $\beta$ ), ως συνάρτηση του αντίστοιχου παράγοντα για συνήθη απόσταξη. Χρησιμοποιείται στα πλαίσια της μεθόδου Souders για επιλογή μεθόδων φυσικού διαχωρισμού. Για παράδειγμα, έστω ότι για την εναλλακτική της εκχύλισης υγρού/υγρού σε κάποια διεργασία βρήκαμε παράγοντα διαχωρισμού  $\alpha_{LL}$  και για τη συνήθη απόσταξη βρήκαμε αντίστοιχη τιμή  $\alpha_D$ . Η εκχύλιση επιλέγεται μόνο αν το σημείο ( $\alpha_{LL}, \alpha_D$ ) βρίσκεται πάνω από την αντίστοιχη καμπύλη.

Θέλουμε να πάρουμε τα παρακάτω ρεύματα και αντίστοιχα ποσοστά ανάκτησης (ποσοστά σε παρένθεση):

- Προπάνιο (99%)
- n-Βουτάνιο (96%)
- Μίγματα Βουτενίων (95%)
- n-Πεντάνιο (98%)

	Συστατικό	kgmol / h	Σημείο Βρασμού (°C)
A	Προπάνιο	4,5	-42,1
B	Βουτένιο-1	45,4	-6,3
C	n-Βουτάνιο	154,7	-0,5
D	trans-Βουτένιο-2	48,1	0,9
E	cis-Βουτένιο-2	36,7	3,7
F	n-Πεντάνιο	18,1	36,1
	<b>Σύνολο</b>	<b>307,5</b>	

**Λύση:**

Τα βουτένια-2 είναι διαδοχικά όσον αφορά την πτητικότητα και τελικά θα βρίσκονται στο μίγμα βουτενίων, άρα δε χρειάζεται να διαχωριστούν. Επίσης, βρίσκεται ότι αν όλοι οι διαχωρισμοί

γίνουν με συνήθη απόσταξη, τότε αυτή είναι εφικτή σε ατμοσφαιρική πίεση και με υδρόψυξη για το απόσταγμα

Τα δεδομένα που έχουμε στη διάθεσή μας για τις σχετικές πητικότητες των συστατικών που θα διαχωριστούν βρίσκονται για τη θερμοκρασία των 65.6 °C (150 F) και είναι τα ακόλουθα:

Ζεύγος	Σχετική πητικότητα	Επιλογή μεθόδου
Προπάνιο/Βουτένιο-1 (A/B)	2,45	συνήθης απόσταξη (βήμα 5)
1-Βουτένιο/n-Βουτάνιο (B/C)	1,18	απόσταξη δυνατή αλλά πιθανότητα καλύτερης λύσης (βήμα 6)
κ-Βουτάνιο/trans-βουτένιο-2 (C/D)	1,03	απόσταξη ακατάλληλη (βήμα 4)
cis-Βουτένιο-2/n-Πεντάνιο (E/F)	2,5	συνήθης απόσταξη (βήμα 5)

*Εναλλακτικά*, η χρήση 96% κ.β. υδατικής φουρφουράλης ως διαλύτη σε εκχυλιστική απόσταξη αυξάνει την πητικότητα των παραφινών έναντι των ολεφινών και η σειρά των πητικότητων αντιστρέφεται και γίνεται A C B D E F – βλ. βήμα 7 ανωτέρω. Τότε, οι τρεις ολεφίνες (βουτένια, B, D, E) ομαδοποιούνται ως προς τη σειρά πητικότητας, δίνουν δε προσεγγιστικά σχετική πητικότητα για το διαχωρισμό C/B ίση με 1.17.

Αν στο μίγμα προς διαχωρισμό υπάρχει και A, έχουμε σχετική πητικότητα A/C ίση με 2.89 (πολύ καλή).

Αν I παριστάνει την απόσταξη και II την εκχυλιστική απόσταξη, τότε (...C/D...)<sub>I</sub> = 1.03 ενώ (...C/D...)<sub>II</sub> = 1.70 και από το σχετικό διάγραμμα Souders (βλ. βήμα 6) υπερβαίνει την ελάχιστη αποδεκτή τιμή που αντιστοιχεί σε σχετική πητικότητα 1.03 για απόσταξη, άρα είναι πιο ελκυστικός διαχωρισμός (βήμα 6, ανωτέρω και Σχήμα 7-2).

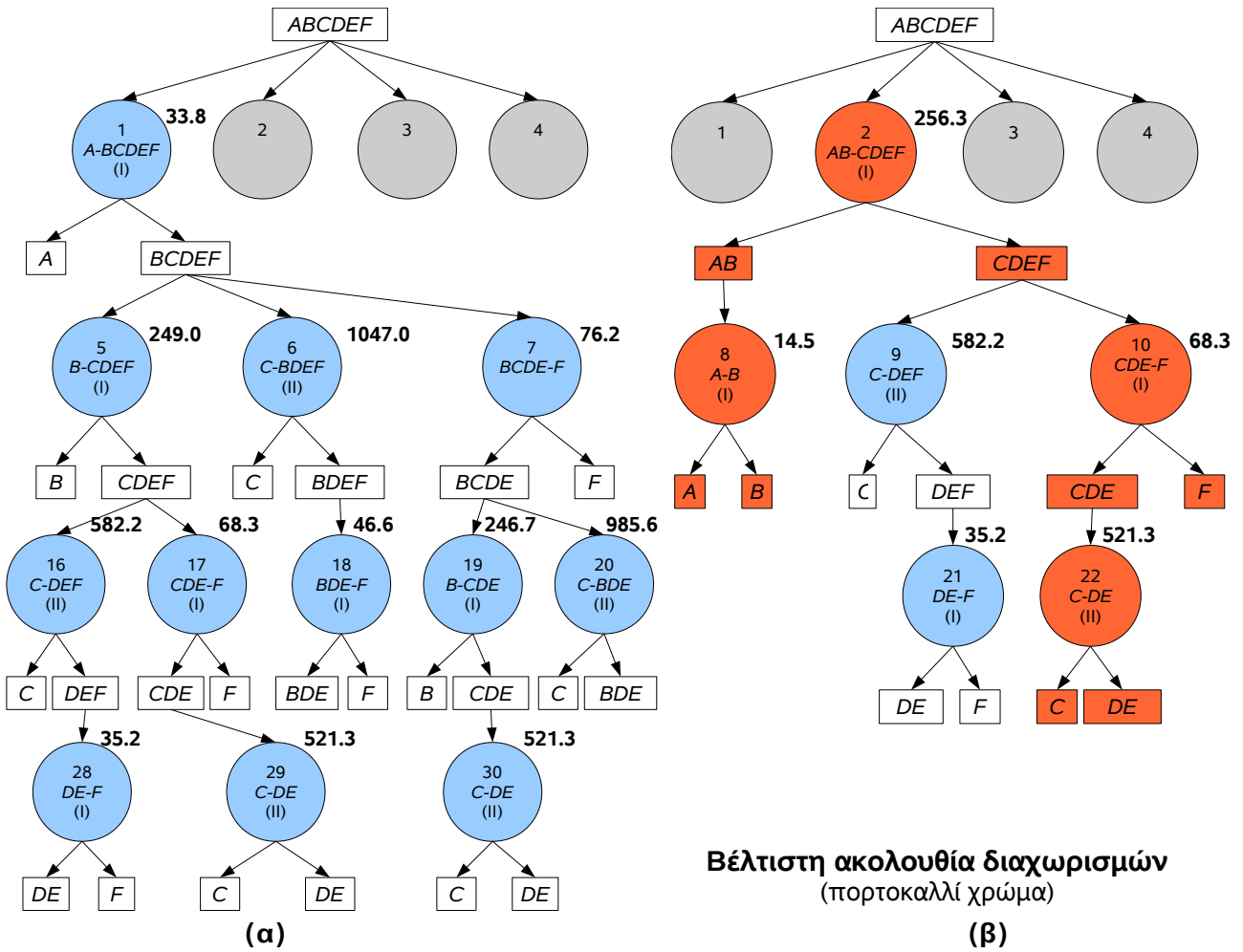
Συνοψίζοντας, οι επιτρεπτοί διαχωρισμοί είναι

- για απλή απόσταξη: (...A/B...)<sub>I</sub>, (...B/C...)<sub>I</sub>, (...E/F...)<sub>I</sub> και (...A/C...)<sub>I</sub>
- για εκχυλιστική απόσταξη: (...C/B...)<sub>II</sub> και (...C/D...)<sub>II</sub>

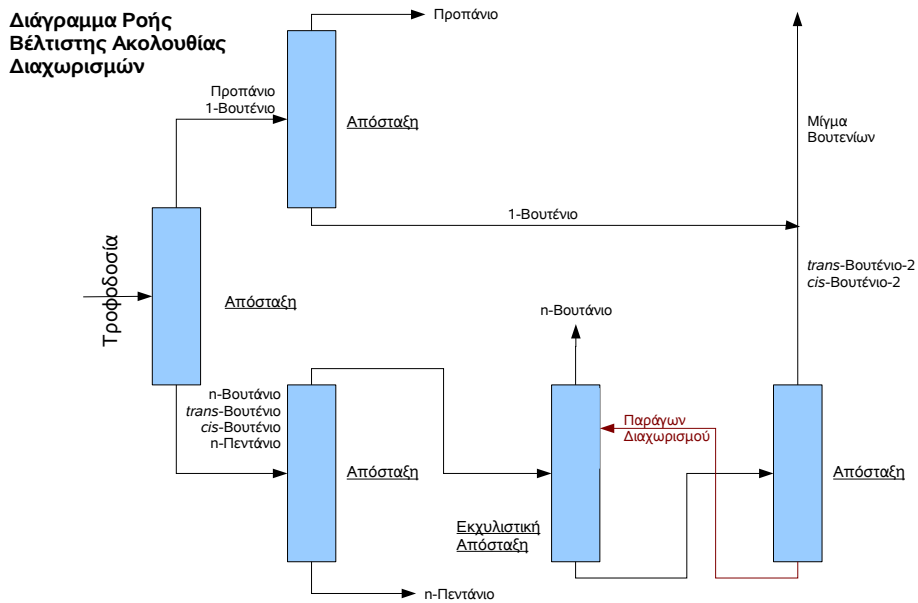
ενώ όλοι οι άλλοι θεωρούνται "απαγορευμένοι".

Οι υποομάδες συστατικών, οι διαχωρισμοί και οι ακολουθίες διαχωρισμών προκύπτουν με τη βοήθεια λογικών γραφημάτων τύπου δέντρου (and/or-directed graphs) όπου τα παραλληλόγραμμα υποδηλώνουν μίγματα συστατικών και οι κύκλοι διαχωρισμούς. Στη μέθοδο II, ο κάθε διαχωρισμός περιλαμβάνει και το διαχωριστήρα για την ανάκτηση του διαλύτη που χρησιμοποιήσαμε ως μέσο διαχωρισμού για την εκχύλιση. Οι κόμβοι μιγμάτων ισοδυναμούν με λογική διάζευξη "Η" και οι κόμβοι διαχωρισμού με λογική σύζευξη "ΚΑΙ". Ετσι, ξεκινώντας από τον κόμβο της τροφοδοσίας κατασκευάζουμε όλες τις δυνατές ακολουθίες που περιλαμβάνουν επιτρεπτούς διαχωρισμούς όπως τους ορίσαμε πιο πάνω.

Στο Σχήμα 7.3 (α), επειδή δε χωράει όλο στη σελίδα, απεικονίζεται μόνο το *υποδέντρο* που εκκινεί από τον κόμβο 1, αλλά εννοείται ότι υπάρχουν και ακολουθίες διαχωρισμών που εκκινούν από τους κόμβους 2, 3 και 4, οι οποίες δεν απεικονίζονται. Οι δεκαδικοί αριθμοί δίπλα από τους κόμβους των διαχωρισμών είναι κόστη σε €/έτος από βιβλιογραφικά δεδομένα. Ο κόμβος διαχωρισμού "1" (A-BCDEF) διακλαδίζεται προς τους κόμβους των μειγμάτων A και BCDEF



**Σχήμα 7.3 (α)** Υποδέντρο των δυνατών ακολουθιών διαχωρισμών πολυσυστατικού μίγματος υδρογονανθράκων, ABCDEF **(β)** Βέλτιστη ακολουθία διαχωρισμών για το εν λόγω μίγμα.



**Σχήμα 7.4** Διάγραμμα ροής για την υλοποίηση της βέλτιστης ακολουθίας διαχωρισμών του Σχήματος 7.2 (β)

οπότε διαβάζεται: “ABCDEF δίνει A και BCDEF με τη μέθοδο (I) (απόσταση)”. Ο κόμβος του μείγματος BCDEF διακλαδίζεται προς τους κόμβους διαχωρισμών 5 (B-CDEF (I)), 6 (C-BDEF (II)) και 7 (BCDE-F(I)), άρα διαβάζεται: “Το μείγμα BCDEF μπορεί να διαχωριστεί με απόσταση (I) προς B και CDEF ή με εκχυλιστική απόσταση (II) προς C και BDEF ή με απόσταση (I) προς BCDE και F”. Παρόμοια ερμηνεύονται και οι υπόλοιποι κόμβοι.

Το Σχήμα 7.3 (β) απεικονίζει το δεύτερο υποδέντρο που περιέχει και τη βέλτιστη ακολουθία (με πορτοκαλλί χρώμα) . Η ακολουθία με το υψηλότερο κόστος είναι κατά 31% ακριβότερη από αυτή με το χαμηλότερο. Το κόστος αυτής της λύσης (όπως και όλων των άλλων) είναι το άθροισμα από τα κόστη δίπλα από κάθε κόμβο διαχωρισμού, που απαντώνται κατά μήκος της ακολουθίας (διάσχιση δέντρου).

Το Σχήμα 7.4 δείχνει το διάγραμμα ροής της βέλτιστης ακολουθίας διαχωρισμού. Τα βουτένια που απομακρύνονται ως ένα προϊόν έχουν διαχωριστεί ξεχωριστά και πρέπει να αναμιχθούν στο τέλος της ακολουθίας. Διακρίνεται επίσης και η αναρροή του διαχωριστικού μέσου (με την ετικέτα “παράγων διαχωρισμού”).

Αν επιτρέπαμε όλους τους διαχωρισμούς εκτός από τους  $(A/C)_{II}$  και  $(...E/F)_{II}$  τότε θα είχαμε 64 υποπροβλήματα διαχωρισμού και 227 ακολουθίες αλλά όλες οι 215 επιπλέον ακολουθίες θα είχαν τουλάχιστον 350% μεγαλύτερο κόστος από τη βέλτιστη. Αυτό δείχνει τη μεγάλη σημασία των κριτηρίων αποκλεισμού.

Όπως είδαμε, τα κριτήρια αποκλεισμού εξαρτώνται από το συγκεκριμένο πρόβλημα επομένως ποικίλουν κατά περίπτωση. Το γεγονός ότι οι διαφορετικές ακολουθίες μπορούν να διαταχθούν σε μορφή δέντρου δείχνει τη δυνατότητα *αλγορίθμησης* του προβλήματος και χειρισμού του με υπολογιστές. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο όταν τα δεδομένα είναι τέτοια ώστε να μη μπορούμε να διατυπώσουμε εύκολα κριτήρια αποκλεισμού.

### **7.3 Ευρετικοί κανόνες, εξελικτική σύνθεση, αλγοριθμικές μέθοδοι**

#### **7.3.1 Ευρετικοί κανόνες**

Οι εμπειρικοί ευρετικοί κανόνες αποσκοπούν και αυτοί επίσης στο να αποκλείσουν μαζικά περιπτώσεις και να δώσουν γρήγορα μία καλή λύση που μπορεί να είναι και η άριστη ή πολύ κοντά σε αυτή. Αποτελούν εναλλακτικό τρόπο σύνθεσης ως προς τη μέθοδο Souders

Για διαχωρισμούς με **συνήθη απόσταση**

1. Όταν οι σχετικές πητικότητες μεταβάλλονται σημαντικά, οι διαχωρισμοί να διαταχθούν με σειρά μειούμενης σχετικής πητικότητας.
2. Όταν οι σχετικές πητικότητες δε μεταβάλλονται σημαντικά αλλά τα μοριακά κλάσματα μεταβάλλονται σημαντικά, οι διαχωρισμοί να διαταχθούν ώστε η απομάκρυνση να γίνεται με σειρά μειούμενου κλάσματος.
3. Αν δεν ισχύουν τα παραπάνω, τότε τα συστατικά να απομακρύνονται ένα-ένα ως αποστάγματα (πρώτα τα πιο πητικά δηλαδή).

Για διαχωρισμούς με **άλλες μεθόδους**

4. όταν περιλαμβάνεται παράγοντας (μέσον) διαχωρισμού, να απομακρύνεται στον αμέσως επόμενο διαχωρισμό από αυτόν όπου εισήχθη.
5. Για πολυσυστατικά μίγματα να προτιμηθούν μέθοδοι που δίνουν τα προϊόντα απευθείας ή με την ελάχιστη ανάμιξη εκτός αν οι σχετικές πητικότητες είναι πολύ χαμηλότερες σε σχέση με άλλες λύσεις.



Οι παραπάνω οδηγίες 1 έως 3 αποτελούν εξειδικεύσεις ενός εμπειρικού κανόνα που μας είναι γνωστός από προηγούμενη Ενότητα και υποδεικνύει ότι οι ευκολώτεροι διαχωρισμοί πρέπει να γίνονται πρώτοι. Πράγματι, έτσι καταναλώνουμε λιγότερη ενέργεια στην αρχή όπου έχουμε μεγάλα διακινούμενα ποσά και μετά, όταν ο διαχωρισμός είναι πιο δύσκολος και απαιτεί περισσότερη ενέργεια ανά μονάδα μάζας, τα συνολικά διακινούμενα ποσά έχουν ελαττωθεί, άρα και η απαιτούμενη ενέργεια. Επίσης, με αυτή τη σειρά μειώνονται οι απαιτούμενες βαθμίδες διαχωρισμού στους πρώτους διαχωρισμούς και οι διαστάσεις της στήλης γενικότερα στους επόμενους. Επίσης, αν είχαμε ακολουθήσει άλλη σειρά, οι πρώτοι διαχωρισμοί δε θα ήταν τόσο καλοί και έτσι στους επόμενους θα είχαμε και ποσοστά από συστατικά που παρέμειναν λόγω ατελούς διαχωρισμού στην αρχή, με συνέπεια πρόβλημα καθαρότητας για τα τελικά προϊόντα. Άρα, ακολουθώντας αυτές τις οδηγίες τείνει να μειωθεί τόσο το λειτουργικό όσο και το πάγιο κόστος ενώ εξασφαλίζουμε και υψηλότερη καθαρότητα στο προϊόν.

Παρόμοιο σκεπτικό, σχετικά με προβλήματα καθαρότητας, υπάρχει και στην οδηγία 4 που αποσκοπεί στο να απλοποιήσει το πρόβλημα του σχεδιασμού. Τέλος, ο κανόνας 5 αποσκοπεί στο να επιλέξουμε λύσεις με όσο το δυνατό λιγότερα βήματα (διαχωρισμούς και αναμίξεις) γιατί οι αποκλίσεις από το ιδανικό (τέλειο διαχωρισμό) προστίθενται σε κάθε νέο στάδιο και έτσι, πολλά διαδοχικά στάδια συνεπάγονται περισσότερη απόκλιση από την επιθυμητή καθαρότητα στο τέλος. Αλλά, αν ο παράγοντας διαχωρισμού είναι πολύ μικρός, τότε δεν έχει νόημα αυτή η επιλογή γιατί ο διαχωρισμός θα είναι έτσι κι αλλιώς κακός, οπότε πρέπει να αναζητηθεί κάποιος πολυπλοκώτερος συνδυασμός με την ελπίδα ότι θα έχει συνολικά καλύτερη απόδοση.

### 7.3.2. Εξελικτική σύνθεση

Από τη στιγμή που έχουμε μία καλή αρχική λύση είτε με τη μέθοδο Souders είτε με άλλες, ευρετικές μεθόδους μπορούμε να επιχειρήσουμε να τη βελτιώσουμε κάνοντας διαδοχικά βήματα όπου σε καθένα από αυτά προσθέτουμε μία μικρή μετατροπή.

Στο παραπάνω σκεπτικό βασίζεται η μέθοδος της **εξελικτικής σύνθεσης**: εφαρμόζουμε κάποιους κανόνες “διαταραχής” ή διαφοροποίησης της τρέχουσας λύσης και κάνουμε αξιολόγηση της νέας μέχρι να καταλήξουμε σε κάποια περισσότερο ικανοποιητική. Αν δε βρούμε

Οι κανόνες “κίνησης” (τροποποίησης της τρέχουσας ακολουθίας) είναι πολύ απλοί:

1. Εναλλαγή σχετικών θέσεων δύο διαδοχικών διαχωρισμών
2. Για δεδομένο διαχωρισμό με κάποια μέθοδο 1 δοκίμασε μία εναλλακτική μέθοδο 2.

Για να αποφανθούμε αν θα αποδεχτούμε ή όχι μια μετατροπή έναντι μιας άλλης, και γενικότερα για να ταξινομήσουμε με μια ορισμένη σειρά τους διαχωρισμούς, πρέπει να κάνουμε κοστολόγηση. Γρήγορη αξιολόγηση μπορεί να γίνει και με τη βοήθεια των σχετικών ευρετικών κανόνων.

Αν αποδεχτούμε την εξεταζόμενη μετατροπή τότε η νέα ακολουθία αντικαθιστά την παλιά και συνεχίζουμε με αυτή τις δοκιμαστικές μετατροπές. Έτσι κάνουμε “βήματα” στο “χώρο” των δομικών λύσεων όπως ένας συμβατικός αλγόριθμος ελαχιστοποίησης κινείται στο χώρο των πραγματικών μεταβλητών διορθώνοντας μια αρχική λύση.

Η εξελικτική σύνθεση μπορεί να θεωρηθεί συγγενής και προς τις μεθόδους αριστοποίησης τύπου προσομοιωμένης απόκτησης ή Monte Carlo εν γένει.

### 7.3.3. Αλγοριθμικές μέθοδοι.

Οι προηγούμενες μέθοδοι δεν εγγυώνται εύρεση του άριστου. Για τον τελικό σχεδιασμό μπορεί να απαιτείται τόσο δομική όσο και παραμετρική αριστοποίηση των επιμέρους λύσεων.

Συνήθεις Μεταβλητές Σχεδιασμού για απλές αποστάξεις είναι:

- πίεση λειτουργίας
  - ρυθμός ή λόγος αναρροής
  - βαθμός υπόψυξης της αναρροής
  - βαθμός προθέρμανσης ή πρόψυξης τροφοδοσίας ή θερμικής κατάστασης (α)
  - βαθμίδα τροφοδοσίας
- κλπ

Για άλλες μεθόδους υπάρχουν και Μεταβλητές Σχεδιασμού για τον παράγοντα διαχωρισμού:

- ρυθμός εισόδου
- βαθμός προθέρμανσης ή πρόψυξης
- βαθμίδα τροφοδοσίας

Γενικά, η ελαχιστοποίηση του κόστους δεν είναι πολύ ευαίσθητη στις παραπάνω ΜΣ όσο αυτές παραμένουν σε εύλογα διαστήματα τιμών.

Τότε, μπορεί να εφαρμοστεί η μέθοδος των *Rodrigo και Seader* (μέθοδος διατεταγμένης αναζήτησης κατά κλάδο – ordered branch search).

Αυτή είναι αποτελεσματική αν:

- έχουν αποκλειστεί οι μη αποτελεσματικοί διαχωρισμοί
- η παρουσία μικρών ποσών από άλλα συστατικά πέραν των συστατικών-κλειδιών<sup>1</sup>, δεν επηρεάζει σημαντικά το κόστος.

Η μέθοδος αποτελείται από δύο βήματα:

1) Αναζήτηση κατά πλάτος με κριτήριο *ελάχιστου κόστους*<sup>2</sup> σε ένα δέντρο σαν αυτό που παρουσιάστηκε στα Σχήματα 7..2 (α) και (β) πιο πάνω. Δηλαδή, σε κάθε επίπεδο κόμβων του δέντρου, επιλέγεται η διακλάδωση με το μικρότερο κόστος. Από εκεί διακλαδώνουμε στα δύο υποσύνολα συστατικών και αν για καθένα από αυτά υπάρχουν εναλλακτικοί διαχωρισμοί επαναλαμβάνουμε την επιλογή με το κριτήριο ελάχιστου κόστους.

Στα πολυσυστατικά μίγματα επιτρέπουμε και ανάμιξη ρευμάτων.

Αυτό το βήμα δίνει το *αρχικό άνω φράγμα*.

2) Επιστροφή σε ανώτερα επίπεδα (backtracking) και αναζήτηση κατά βάθος σε συνδυασμό και πάλι με κριτήριο *ελάχιστου κόστους* για λύσεις με χαμηλότερο κόστος, δηλαδή αξιολόγηση μιας ακολουθίας που ορίζεται από ένα κλάδο του δέντρου – μια διαδρομή από τον αρχικό κόμβο (ρίζα) μέχρι κάποιον τελικό κόμβο (φύλλο). Όταν δε βρίσκουμε καλύτερη λύση σε ένα επίπεδο ή έχουμε εξαντλήσει τις διαδρομές ανεβαίνουμε στο αμέσως ανώτερο επίπεδο και κάνουμε από εκεί αναζήτηση κατά βάθος. Κάθε νέα καλύτερη λύση παίρνει τη θέση του προηγούμενου άνω φράγματος.

Αν το κόστος μιας ακολουθίας υπερβεί αυτό του άνω φράγματος πριν φτάσουμε στο τέλος, τότε απορρίπτεται χωρίς να χρειαστεί να κάνουμε την υπόλοιπη αξιολόγηση-σύγκριση αλλά προχωρούμε στην επόμενη ακολουθία εξοικονομώντας υπολογισμούς.

---

1 Όταν σχεδιάζουμε διεργασίες απόσταξης πολυσυστατικού μείγματος, επιλέγουμε δύο συστατικά που η σύστασή τους αποτελεί, κατά την εκτίμησή μας, καλό δείκτη διαχωρισμού του μείγματος. Αυτά πρέπει να έχουν αρκετά διαφορετική πητικότητα και τα ονομάζουμε *συστατικά κλειδιά* (key components). Το πητικότερο ονομάζεται *ελαφρύ κλειδί* (LK – light key) και το λιγότερο πητικό είναι το *βαρύ κλειδί* (HK – heavy key). Η επιλογή τους μας επιτρέπει να εφαρμόσουμε κατά προσέγγιση, μεθόδους των δυαδικών μειγμάτων στα πολυσυστατικά.

2 Σε προβλήματα αυτού του είδους, για να αποφύγουμε την εξαντλητική αναζήτηση που είναι η μόνη σίγουρη μέθοδος για τα προβλήματα αυτού του είδους αλλά γενικά, πάρα πολύ χρονοβόρος, εφαρμόζουμε τις τεχνικές της *αναζήτησης κατά πλάτος* (breadth first) και *κατά βάθος* (depth first) για να βρούμε κάποια “αρκετά καλή” λύση. Τα κριτήρια που εφαρμόζονται στα πλαίσια αυτών των τεχνικών μπορεί να είναι της *μέγιστης ανάβασης* (hill climbing) ή του *ελάχιστου κόστους* (least cost).