Διάλεξη 2

1. Διάγραμμα Ροής

Είναι το πληρέστερο έγγραφο επικοινωνίας μεταξύ των συμμετεχόντων στο σχεδιασμό και κωδικοποιεί/απεικονίζει τα αποτελέσματά του.
Είδη ΔΡ:
- Διάγραμμα ροής: απεικονίζει συσκευές, δίνει πληροφορίες για κατάστρωση ισοζυγίων και τη διαστασιολόγηση.
- Διάγραμμα ροής και οργάνων ελέγχου: περιλαμβάνει μετρητές και ρυθμιστές, αποτελέσματα ισοζυγίων και διαστασιολόγησης.
- Διάγραμμα σωληνώσεων και οργάνων.

Διαδικασία κατάστρωσης ΔΡ:
Απλή στη σύλληψή της και δημοφιλής είναι η "μέθοδος του κρεμμυδιού". Φανταζόμαστε την παραγωγική διαδικασία σαν ένα συνδυασμό από μια κεντρική ή *κρίσιμη* διεργασία και ένα σύνολο από "φλοιούς" που την περιβάλλουν. Με τη μέθοδο αυτή, ξεκινάμε από το κέντρο που είναι η κρίσιμη διεργασία και προχωρούμε σταδιακά προς τα έξω, προς τους "φλοιούς" (ανάποδα απ' ο,τι αν ξεφλουδίζαμε ένα κρεμμύδι).
- Συγκέντρωση δεδομένων
- Προσδιορισμός κρίσιμης διεργασίας
- Επίτευξη συνθηκών λειτουργίας πριν και μετά από την κρίσιμη διεργασία
- Ικανοποίηση προδιαγραφών προϊόντων και ροών τροφοδότησης της κύριας διεργασίας.
- Δίκτυα ανακύκλωσης (μάζας, ενέργειας)
- Αξιολόγηση εναλλακτικών ΔΡ

Εκτός από αυτό τον τρόπο έχουν αναπτυχθεί και συστηματικές αλγοριθμικές μέθοδοι που θα παρουσιαστούν σε επόμενες διαλέξεις.

Εμπειρικοί και ευρετικοί κανόνες:
- Το κόστος λειτουργίας ελαχιστοποιείται σε συνθήκες πλησιέστερες προς εκείνες του περιβάλλοντος.
- Κόστος ψύξης > κόστος θέρμανσης
- Οι μη αδρανείς προσμίξεις απομακρύνονται από την τροφοδοσία της κρίσιμης διεργασίας
- Σε σειρά διαχωρισμών, προηγούνται οι ευκολώτεροι
- Τα χρήσιμα συστατικά απομακρύνονται ως προϊόντα κορυφής
- Εγκατάσταση συστήματος απομάκρυνσης (purge system) για τα συστατικά που δε συμμετέχουν στην αντίδραση.

Προτεινόμενη διαδικασία επιλογής διεργασιών:
- 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 (διαφορετικά θα πρέπει να προνοήσουμε και για την απομάκρυνση του μέσου διαχωρισμού, πράγμα που καθιστά το σχεδιασμό πολυπλοκώτερο)
- προτιμώνται οι διεργασίες με τις ηπιώτερες συνθήκες λειτουργίας (αφ' ενός ασφαλέστερες και φιλικότερες προς το περιβάλλον, αφ' ετέρου οικονομικότερες).
- προτιμώνται οι διεργασίες για τις οποίες υπάρχει περισσότερη τεχνολογική πείρα.

Οι παραπάνω κανόνες δεν είναι απόλυτοι και συχνά αλληλοαποκλείονται.

2. Μαθηματικό Μοντέλο, Βαθμοί Ελευθερίας, Μεταβλητές Σχεδιασμού.

Με δεδομένο το διάγραμμα ροής της διεργασίας, θέλουμε να διατυπώσουμε ένα μαθηματικό μοντέλο που είναι ουσιαστικά ένα σύστημα εξισώσεων. Αυτό το σύστημα θέλουμε να το φέρουμε σε μορφή τέτοια που να μπορεί να λυθεί μονοσήμαντα (να έχει ακριβώς μία λύση) ώστε να

καθορίσουμε όλα τα μεγέθη (ροές κλπ) της παραγωγικής διαδικασίας.
Στα παραπάνω υπεισέρχονται οι εξής έννοιες:

- *Εξισώσεις σχεδιασμού*, ΕΣ. Από αυτές αποτελείται το μαθηματικό μοντέλο και είναι μεταξύ άλλων:
  - ισοζύγια μάζας και ενέργειας
  - εξισώσεις μεταφοράς μάζας, ορμής (ρευστομηχανικές), θερμότητας
  - εξισώσεις χημικής κινητικής
  - εξισώσεις ισορροπίας φάσεων
  - εξισώσεις διαστασιολόγησης
  - εξισώσεις κοστολόγησης
- *Βαθμοί ελευθερίας*, ΒΕ = αριθμός μεταβλητών – αριθμός εξισώσεων μοντέλου = αριθμός ανεξάρτητων μεταβλητών που πρέπει να καθοριστούν ώστε να οριστεί μονοσήμαντα η διεργασία.
- ΒΕ = ΔΜ + ΜΣ.
  - ΔΜ, Διδόμενες Μεταβλητές = αυτές που δίνονται από εξωτερικά αίτια (περιορισμοί)
  - ΜΣ, *Μεταβλητές Σχεδιασμού*.
  - ΜΕ, *Μεταβλητές Επίλυσης* = οι υπόλοιπες. Όταν δοθούν οι ΔΜ και ΜΣ τότε καθορίζονται και οι ΜΕ, αλλά για να γνωρίσουμε την τιμή τους πρέπει να λύσουμε το σύστημα εξισώσεων του μοντέλου.
- Θεώρημα Duhem: ΒΕ ρεύματος σε φυσικοχημική ισορροπία = C + 2, όπου C ο αριθμός των συστατικών, ανεξάρτητα από τον αριθμό των φάσεων.
- ΒΕ (διεργασίας) = ΒΕ (εισερχομένων ρευμάτων) + Παράμετροι διεργασίας.
- Προσδιορισμός ΜΣ:
  - Εμπειρικοί κανόνες:
    - προτιμώνται οι διακριτές μεταβλητές
    - προτιμώνται οι μεταβλητές για τις οποίες ισχύουν περιορισμοί
  - Κριτήριο Αριστοποίησης: προτιμώνται οι μεταβλητές που επηρεάζουν στο μεγαλύτερο βαθμό την αντικειμενική συνάρτηση προς αριστοποίηση.
  - Κριτήριο Επίλυσης: προτιμώνται οι μεταβλητές που εξασφαλίζουν την επίλυση του συστήματος και εξασφαλίζουν την ευκολία επίλυσής του. Αφορά τη δυνατότητα επίλυσης χωρίς αριθμητικές ανωμαλίες. Τυπική μέθοδος επιλογής με το κριτήριο επίλυσης: Lee-Christensen-Rudd
- Από τη στιγμή που υπάρχουν ΜΣ τίθεται θέμα αριστοποίησης. Με δεδομένες τιμές για τις ΜΣ (άριστες ή μη), το μαθηματικό μοντέλο έχει μετατραπεί σε τετραγωνικό σύστημα Ν Χ Ν. Επομένως, η ύπαρξη ΜΣ θέτει δύο αλληλένδετα προβλήματα:
  - επίλυσης συστημάτων εξισώσεων (γραμμικών ή και μη γραμμικών) ως προς τις ΜΕ για δεδομένες ΜΣ.
  - αριστοποίησης ως προς τις ΜΣ

3. Επίλυση Μαθηματικού Μοντέλου, Αντικειμενική Συνάρτηση και Αριστοποίηση

Κάθε σύνολο τιμών για τις ΜΣ καθορίζει και μία λύση του συστήματος. Το σύστημα πρέπει να λυθεί για διάφορες τιμές και να βρεθεί αυτή που εξασφαλίζει την άριστη λειτουργία της μονάδας. Το κριτήριο για την άριστη λειτουργία εκφράζεται ως μια ποσότητα ή μέγεθος που θέλουμε να πάρει μέγιστη ή ελάχιστη τιμή. Αυτό το μέγεθος είναι συνάρτηση διαφόρων μεταβλητών του μοντέλου και δίνει αυτό που ορίσαμε ως αντικειμενική συνάρτηση, ΑΣ.

Βασικό συστατικό της διαδικασίας αριστοποίησης είναι η επίλυση του μαθηματικού μοντέλου, δηλαδή η επίλυση ενός συστήματος εξισώσεων. Μεταξύ των υπομονάδων μιας παραγωγικής διαδικασίας υπάρχει εν γένει χαλαρή σύζευξη (αλληλεξάρτηση), και κάθε συσκευή ή υπομονάδα αποτελεί ένα σύστημα που για δεδομένες εισόδους μπορεί να μελετηθεί χωριστά. Για λίγες εισόδους υπάρχουν αρκετές μεταβλητές που καθορίζονται από αυτές τις εισόδους. Το αποτέλεσμα είναι ότι καταλήγουμε στα λεγόμενα *αραιά συστήματα*.
Οι εξισώσεις στα αραιά συστήματα μπορούν να ομαδοποιηθούν και να καθοριστεί η σειρά επίλυσής τους, πράγμα που τελικά διευκολύνει τη λύση. Αυτό μπορεί να γίνει με διάφορους

αλγορίθμους, π.χ. τροποποιημένος LCR.
Μέθοδοι επίλυσης μοντέλων:
- Διαδοχική Επίλυση Μονάδων ή Διαδοχική Αρθρωτή Προσέγγιση
- Ταυτόχρονη Επίλυση Μονάδων
- Επίλυση Εξισώσεων Μοντέλου.

Ο πυρήνας της αριστοποίησης είναι ο *αλγόριθμος αριστοποίησης* της αντικειμενικής συνάρτησης. Το σύστημα εξισώσεων του μαθηματικού μοντέλου ονομάζεται και *σύνολο εξισωτικών περιορισμών* του προβλήματος αριστοποίησης επειδή περιορίζει τις δυνατές τιμές των υπόλοιπων μεταβλητών από τη στιγμή που έχουμε ορίσει τις ΜΣ. Στη γενικότερη περίπτωση, εκτός από εξισωτικούς έχουμε και ανισωτικούς περιορισμούς, δηλαδή ορισμένες μεταβλητές πρέπει να είναι μικρότερες ή μεγαλύτερες από κάποια όρια (ή και τα δύο). Υπενθυμίζουμε ότι η γενική μορφή ενός προβλήματος αριστοποίησης γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned} &\min F(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X}=[x_{1,}x_{2,}\dots,x_n]^{\mathrm{T}} \\ &G_i(\mathbf{X})=0, \quad i=1,2,\dots,m \\ &h_j(\mathbf{X})\geq 0, \quad i=1,2,\dots,p \end{aligned} \tag{1}$$

και οι βαθμοί ελευθερίας είναι $k = n - m$.
Οι ανισωτικοί περιορισμοί μετατρέπονται σε εξισωτικούς εισάγοντας νέες μεταβλητές π_i, τέτοιες ώστε

$$\begin{aligned} &\min F(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X}=[x_{1,}x_{2,}\dots,x_n]^{\mathrm{T}} \\ &G_i(\mathbf{X})=0, \quad i=1,2,\dots,m \\ &-h_j(\mathbf{X})+\pi_i^2=0, \quad i=1,2,\dots,p \end{aligned} \tag{2}$$

άρα είναι το ίδιο σα να ασχολούμαστε με πρόβλημα που υπόκειται σε εξισωτικούς περιορισμούς. Περαιτέρω, χωρίζουμε τις μεταβλητές σε ΜΣ για τις οποίες διατηρούμε το συμβολισμό **X** και ΜΕ τις οποίες εδώ θα παριστάνουμε με **Y**, οπότε το πρόβλημα αριστοποίησης με εξισωτικούς περιορισμούς γράφεται:

$$\begin{aligned} &\min F(\mathbf{X};\mathbf{Y}), \quad \mathbf{X}=[x_{1,}x_{2,}\dots,x_k]^{\mathrm{T}},\ \mathbf{Y}=[y_{1,}y_{2,}\dots,y_m]^{\mathrm{T}} \\ &G_i(\mathbf{Y};\mathbf{X})=0, \quad i=1,2,\dots,m \end{aligned} \tag{3}$$

Μέθοδοι επίλυσης του προβλήματος αριστοποίησης με περιορισμούς:
- επιλύουμε το σύστημα των εξισώσεων G ως προς **Y**, αντικαθιστούμε στην F και καταλήγουμε σε ένα πρόβλημα αριστοποίησης χωρίς περιορισμούς, της μορφής
$$\min F(\mathbf{X},\mathbf{Y}), \quad \mathbf{X}=[x_{1,}x_{2,}\dots,x_k]^{\mathrm{T}} \tag{4}$$
- Αν το σύστημα G είναι μη-γραμμικό, η προηγούμενη μέθοδος μπορεί να είναι πολύ αργή. Τότε, ορίζουμε μια τροποποιημένη ΑΣ της μορφής
$$P(\mathbf{X})=F(\mathbf{X})+\sum_{i=1}^{m} r_i[G_i(\mathbf{X})]^2+\sum_{j=1}^{m} r_j[\min(h_j(\mathbf{X}),0)]^2 \tag{5}$$
Οι συντελεστές r_i, r_j είναι “ποινές” για κάθε απομάκρυνση από τον περιορισμό, εξ ου και η ονομασία “μέθοδος των ποινών”. Παρατηρούμε ότι το πρόβλημα ανάγεται και πάλι σε ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμό.
- Γενικευμένη μέθοδος ανηγμένης βαθμίδας. Και εδώ έχουμε επίλυση του συστήματος G και αναγωγή σε πρόβλημα χωρίς περιορισμούς
- Μέθοδος διαδοχικού τετραγωνικού προγραμματισμού.

Επειδή ένα πρόβλημα με περιορισμούς ανάγεται σε πρόβλημα χωρίς περιορισμούς, απομένει να δούμε τις μεθόδους ελαχιστοποίησης συναρτήσεων για αυτή την περίπτωση. Αυτές μπορεί να είναι:
- αναλυτικός υπολογισμός πρώτων και δεύτερων παραγώγων· είναι εφικτή μόνο για απλά προβλήματα.
- Τοπικοί επαναληπτικοί αλγόριθμοι χωρίς χρήση παραγώγων. Απλοί αλλά αργοί.
- Τοπικοί επαναληπτικοί αλγόριθμοι με υπολογισμό παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης, όπως:
  - Μεγίστης καθόδου
  - Συζυγών κλίσεων

  - Newton
  - Marquardt-Levenberg
- Γραμμικός προγραμματισμός
- Μη τοπικοί ή καθολικοί αλγόριθμοι (π.χ. προσομοιωμένη ανόπτηση, γενετικοί αλγόριθμοι κλπ).

Αλγόριθμοι της τελευταίας κατηγορίας υπάρχουν και για προβλήματα όπου υπεισέρχονται και διακριτές εκτός από συνεχείς μεταβλητές.