Σχεδιασμός Χημικών Διεργασιών και Βιομηχανιών
Διάλεξη 3

Δευτέρα, 24 Μαρτίου 2008

1. Επίλυση Μαθηματικού Μοντέλου, Αντικειμενική Συνάρτηση και Αριστοποίηση

Όπως είπαμε, η γενική μαθηματική έκφραση της διαδικασίας σχεδιασμού *για δεδομένη δομή* (διάγραμμα ροής), δηλαδή η *παραμετρική αριστοποίηση*, συνίσταται στο ακόλουθο πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας αντικειμενικής συνάρτησης F:

$$\begin{aligned} &\min F(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X}=[x_1, x_2, \ldots, x_n]^{\mathrm{T}} \\ &G_i(\mathbf{X})=0, \quad i=1,2,\ldots,m \\ &h_j(\mathbf{X})\geq 0, \quad i=1,2,\ldots,p \end{aligned} \tag{1}$$

με αριθμό βαθμών ελευθερίας είναι $k = n - m$.
Οι ανισοτικοί περιορισμοί μετατρέπονται σε εξισωτικούς εισάγοντας νέες μεταβλητές π_i, τέτοιες ώστε

$$\begin{aligned} &\min F(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X}=[x_1, x_2, \ldots, x_n]^{\mathrm{T}} \\ &G_i(\mathbf{X})=0, \quad i=1,2,\ldots,m \\ &-h_j(\mathbf{X})+\pi_i^2=0, \quad i=1,2,\ldots,p \end{aligned} \tag{2}$$

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 παριστάνουμε με **Y** (ας υποθέσουμε ότι οι ΔΜ έχουν ενσωματωθεί ως παράμετροι στις εξισώσεις G), οπότε το πρόβλημα αριστοποίησης με εξισωτικούς περιορισμούς γράφεται:

$$\begin{aligned} &\min F(\mathbf{X};\,\mathbf{Y}), \quad \mathbf{X}=[x_1, x_2, \ldots, x_k]^{\mathrm{T}},\ \mathbf{Y}=[y_1, y_2, \ldots, y_m]^{\mathrm{T}} \\ &G_i(\mathbf{Y};\,\mathbf{X})=0, \quad i=1,2,\ldots,m \end{aligned} \tag{3}$$

Αυτός ο τρόπος γραφής υποδηλώνει ότι η ΑΣ ελαχιστοποιείται ως προς **X** για δεδομένο **Y** και οι εξισώσεις του μοντέλου, G, λύνονται ως προς **Y** για δεδομένο **X**.
Τονίζεται οτι οι Εξισώσεις Σχεδιασμού, ΕΣ, G πρέπει να είναι ανεξάρτητες (δεν περιλαμβάνονται εξισώσεις που παράγονται από συνδυασμό άλλων).

Τέλος, μπορούμε να συνδυάσουμε την αρχική ΑΣ με τους εξισωτικούς περιορισμούς δίνοντας μια τροποποιημένη ΑΣ της ακόλουθης μορφής:

$$P(\mathbf{X},\mathbf{Y})=F(\mathbf{X},\mathbf{Y})+\sum_{i=1}^{m} r_i[G_i(\mathbf{Y},\mathbf{X})]^2 \tag{4}$$

ή ακόμη και με τους ανισωτικούς περιορισμούς, οπότε

$$P(\mathbf{X},\mathbf{Y})=F(\mathbf{X},\mathbf{Y})+\sum_{i=1}^{m} r_i[G_i(\mathbf{Y},\mathbf{X})]^2+\sum_{j=1}^{m} r_j[\min(h_j(\mathbf{Y},\mathbf{X}),0)]^2 \tag{5}$$

όπου οι συντελεστές r_i, r_j είναι “ποινές” για κάθε απομάκρυνση από τον περιορισμό και η νέα ΑΣ ελαχιστοποιείται ως προς **X** και **Y**, δηλαδή το πρόβλημα της αριστοποίησης γράφεται απλά ως:

$$\min F(\mathbf{X},\,\mathbf{Y}), \quad \mathbf{X}=[x_1, x_2, \ldots, x_k]^{\mathrm{T}},\ \mathbf{Y}=[y_1, y_2, \ldots, y_m]^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

Ανάλογη με τη μέθοδο των ποινών είναι και η μέθοδος των φραγμάτων κατά την οποία η τροποποιημένη ΑΣ γράφεται ως

$$P(\mathbf{X},\mathbf{Y})=F(\mathbf{X},\mathbf{Y})-\frac{1}{\mu}\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{G_i(\mathbf{Y},\mathbf{X})} \tag{7}$$

Επομένως, το πρόβλημα της αριστοποίησης μπορεί να αντιμετωπιστεί ως πρόβλημα ελαχιστοποίησης με περιορισμούς ή πρόβλημα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Στην πρώτη περίπτωση η διαδικασία είναι σχηματικά η εξής:

- δίνουμε αρχικές τιμές στις ΜΣ **X**,
- επιλύουμε το σύστημα των εξισώσεων G ως προς **Y**,
- αντικαθιστούμε τις **Y** που βρήκαμε στην F την οποία και ελαχιστοποιούμε ως προς **X**:
  $\min F(\mathbf{X};\,\mathbf{Y})$,
- αντικαθιστούμε τις νέες τιμές των **Y** στο σύστημα εξισώσεων G και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία μέχρι να επέλθει σύγκλιση.

Παρατηρούμε ότι και σε αυτή την περίπτωση τελικά έχουμε να λύσουμε ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, αλλά σε συνδυασμό με την επίλυση ενός συστήματος εξισώσεων. Αν το σύστημα εξισώσεων είναι μη γραμμικό και η λύση του είναι δύσκολη και χρονοβόρος, τότε μπορεί να είναι προτιμώτερη η αναγωγή σε πρόβλημα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς (μέθοδος ποινών).

Βάσει των παραπάνω, τα “συστατικά” ή επιμέρους υποπροβλήματα ενός προβλήματος αριστοποίησης όσον αφορά το μαθηματικό του σκέλος, είναι:

- εύρεση του πιο κατάλληλου διαχωρισμού των μεταβλητών σε ΜΣ και ΜΕ
- επίλυση συστήματος εξισώσεων
- ελαχιστοποίηση δεδομένης συνάρτησης

2. Επίλυση συστήματος ΕΣ

<u>Ορισμοί</u>:

ευθύ πρόβλημα (δίνονται είσοδοι ζητούνται έξοδοι)
μη ευθύ (δίνονται και μερικές έξοδοι και ζητούνται μεταξύ άλλων κάποιες είσοδοι)

Τυπική περίπτωση σχεδιασμού είναι το μη ευθύ πρόβλημα επειδή π.χ. θέλουμε να πάρουμε δεδομένη ποσότητα προϊόντος, συγκεκριμένες προδιαγραφές κλπ.

Για την εύρεση των ΜΣ υπάρχουν ορισμένοι εμπειρικοί κανόνες αλλά και τυποποιημένοι αλγόριθμοι. Χονδρικά, μπορούμε να διακρίνουμε δύο όψεις του προβλήματος:

- Εύρεση αριθμού ΒΕ που είναι και ο αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών (ΔΜ και ΜΣ)
- Εύρεση των ίδιων των ΜΣ

Εύρεση *αριθμού* βαθμών ελευθερίας:

- αναλυτική μέθοδος: προσδιορισμός μεταβλητών προβλήματος και εξισώσεων που το περιγράφουν και υπολογισμός αριθμού βαθμών ελευθερίας ως διαφορά αριθμού εξισώσεων από αριθμό μεταβλητών
- απλουστευμένη μέθοδος:
  - ΒΕ διεργασίας = ΒΕ εισερχομένων ρευμάτων + πλήθος παραμέτρων διεργασίας
  - Ισοδύναμο με προηγούμενο: ΒΕ διεργασίας = ΒΕ ρευμάτων + ΒΕ παραμέτρων – εξισώσεις
  - Θεώρημα Hanson: με καθορισμένα εισερχόμενα ρεύματα και γνωστές τις παραμέτρους της διεργασίας καθορίζονται και τα εξερχόμενα ρεύματα· με άλλα λόγια:
    εξισώσεις διεργασίας = ΒΕ εξερχόμενων ρευμάτων
  - Ανάλογα ισχύουν και για ολόκληρη χημική εγκατάσταση
  - Σημείωση: ΒΕ ρεύματος = C + 2 (C = αριθμός συστατικών)· θεώρημα Duhem.

Εύρεση των *ίδιων* των ΜΣ και των ΜΕ

- Εμπειρικοί κανόνες
  - Προτιμώνται οι διακριτές μεταβλητές (π.χ. δυναμικότητες συσκευών έχουν διακριτές τιμές λόγω των μοντέλων που κυκλοφορούν στην αγορά)
  - Προτιμώνται οι υποκείμενες σε περιορισμούς (π.χ. μέγιστη επιτρεπτή θερμοκρασία για μια διεργασία ώστε να μην έχουμε διάσπαση και αποσύνθεση χρήσιμων συστατικών)
- Κριτήριο Αριστοποίησης: προτιμώνται αυτές που έχουν μεγαλύτερη επίπτωση (μεταβολή) στην Αντικειμενική Συνάρτηση (βαθμός μετατροπής χημικής αντίδρασης, αναλογία αντιδρώντων, θερμοκρασία, πίεση, ποσοστό ανάκτησης προϊόντων, λόγος αναρροής,
- Κριτήριο Επιλυσιμότητας: προτιμώνται οι μεταβλητές που εξασφαλίζουν ότι α) το σύστημα των ΕΣ έχει λύση β) θα λυθεί πιο εύκολα.
  Πιο επιτυχής θεωρείται η μέθοδος LCR. Η ουσία της μεθόδου έγκειται στο κατά πόσον το σύστημα των ΕΣ μπορεί να μετασχηματιστεί σε τριγωνικό. Θα αναφερθούμε αναλυτικότερα σε επόμενα μαθήματα.

<u>Επίλυση του συστήματος:</u>

Αρχικές τιμές, για την επίλυση για πρώτη φορά = αυτές που δίνουν τοπικά άριστα.
Τυπικά γνωρίσματα των συστημάτων των ΕΣ

1. Συνήθως μη γραμμικά

2. Συνήθως αραιά (η μήτρα απεικόνισης έχει τις πιο πολλές θέσεις κενές). Ένα σύστημα N X N είναι αραιό όταν μπορούμε να βρούμε μία ή περισσότερες υποοομάδες ν < N εξισώσεων αυτού με ν αγνώστους που να αποτελούν αυτοτελές σύστημα εξισώσεων.

Επίλυση αραιών συστημάτων:

1. ομαδοποίηση
2. διαδοχική επίλυση επιμέρους συστημάτων

Τρεις πιθανές περιπτώσεις:

- Αν υπάρχει μόνο μία ομάδα τριγωνοποιείται (άκυκλο)
- Αν υπάρχουν περισσότερες από μία ομάδες => δίνει υποσυστήματα (κυκλικό, λύνεται επαναληπτικά)
- Αν δεν υπάρχει ομάδα => δομική ανωμαλία, αδύνατο.

Μεταβλητές Δοκιμής, ΜΔ, είναι αυτές που υπεισέρχονται στον επαναληπτικό αλγόριθμο επίλυσης των κυκλικών συστημάτων και η σύγκλιση αυτών ή μη, αποτελεί κριτήριο τερματισμού ή συνέχισης.

Ο αλγόριθμος LCR επιτρέπει τον καθορισμό τόσο των ΜΣ όσο και των ΜΔ (που είναι υποσύνολο των ΜΕ)

Ο τροποποιημένος αλγόριθμος LCR επιτρέπει την ομαδοποίηση και καθορισμό σειράς επίλυσης για το σύστημα των ΕΣ μαζί με τον καθορισμό των ΜΔ και ΜΣ.

Με δεδομένες τις ΜΕ, ΜΔ και ΜΣ μπορούμε να λύσουμε το σύστημα. Αυτό εν γένει είναι μη γραμμικό και καταφεύγουμε σε αριθμητικές επαναληπτικές μεθόδους. Δύο βασικές κατηγορίες:

α) Γραμμικοποίηση. Σε κάθε βήμα το σύστημα αντικαθίσταται με μία γραμμική προσέγγιση

β) Διαδοχική αντικατάσταση. Εφόσον το σύστημα μπορεί να γραφεί ως **X** = **f**(**X**), μπορεί να λυθεί επαναληπτικά ως **X** <--- a **f**(**X**) + (1-a) **f**(**X**) με την παράμετρο a να επιλέγεται έτσι ώστε να επιτρέπει σύγκλιση.

3. Μέθοδοι ελαχιστοποίησης

Είτε λύσουμε το πρόβλημα με περιορισμούς οπότε έχουμε εναλλαγή επίλυσης των ΕΣ και ελαχιστοποίησης της ΑΣ είτε το ανάγουμε σε πρόβλημα χωρίς περιορισμούς (π.χ. μέθοδος ποινών, μέθοδος φραγμάτων), καταλήγουμε στο ίδιο: ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς. Οι μέθοδοι για αυτό μπορεί να είναι:

- αναλυτικός υπολογισμός πρώτων και δεύτερων παραγώγων· είναι εφικτή μόνο για απλά προβλήματα.
- Επαναληπτικοί αλγόριθμοι. Αυτή είναι και η συνηθέστερη περίπτωση. Αυτοί αποτελούν διαδοχή βημάτων της μορφής $\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{X}_{k+1}+\lambda_k \mathbf{S}_k$ όπου λ είναι το "βήμα" και **S** ένα άνυσμα κατεύθυνσης ορισμένο στο χώρο των μεταβλητών. Κάθε μεθοδολογία προσφέρει εναλλακτικούς τρόπους καθορισμού
  - του βήματος και
  - της κατεύθυνσης κατά την οποία γίνεται η μεταβολή των μεταβλητών,

  δηλαδή της στρατηγικής αναζήτησης του ελαχίστου, ενώ χρειάζεται επίσης
  - καθορισμός αρχικών τιμών
  - κριτήριο σύγκλισης ή τερματισμού το οποίο μπορεί να είναι:
    - μεταβολή των **X** κάτω από ένα όριο
    - μεταβολή της συνάρτησης κάτω από ένα όριο
    - μέτρο των παραγώγων κάτω από ένα όριο

Κατηγορίες επαναληπτικών αλγόριθμων

- Τοπικοί επαναληπτικοί αλγόριθμοι χωρίς χρήση παραγώγων. Απλοί αλλά αργοί. Πιο γνωστός: αλγόριθμος των Nelder – Mead.
- Τοπικοί επαναληπτικοί αλγόριθμοι με υπολογισμό παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης, όπως:
  - Μεγίστης καθόδου: κατάλληλη για γρήγορο εντοπισμό της περιοχής όπου ευρίσκεται το ελάχιστο
  - Συζυγών κλίσεων: κατάλληλη για λεπτομερέστερη "εξερεύνηση" της περιοχής του ελαχίστου· συχνά συνδυάζεται με την προηγούμενη.
  - Newton: χρησιμοποιεί όρους δεύτερης τάξης που λαμβάνουν υπ' όψιν την καμπυλότητα της συνάρτησης για καλύτερη επιλογή κατευθύνσεων μεταβολής.
  - Marquardt-Levenberg και BFGS: βελτιώσεις της μεθόδου Newton.
- Γραμμικός προγραμματισμός: μόνο για γραμμικές σχέσεις.
- 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.

Αν εφαρμόσουμε μία μέθοδο όπως αυτή των ποινών ή των φραγμάτων τότε εκτελούμε ελαχιστοποίηση της τροποποιημένης ΑΣ για αύξουσες συναρτήσεις των συντελεστών ποινής ή φράγματος.
Θεώρημα: όταν οι ανωτέρω συντελεστές τείνουν στο άπειρο, το ελάχιστο της τροποποιημένης συνάρτησης τείνει σε αυτό του αρχικού προβλήματος ελαχιστοποίησης υπό περιορισμό.