Σχεδιασμός Χημικών Διεργασιών και Βιομηχανιών
Διάλεξη 4

Δευτέρα, 31 Μαρτίου 2008
Τρίτη, 1 Απριλίου 2008

Α. Δομική Αριστοποίηση

1 Εισαγωγή

Όπως έχουμε πει, η αριστοποίηση διακρίνεται σε:

- Δομική: δοκιμάζονται εναλλακτικά Διαγράμματα Ροής
- Παραμετρική (βλ. προηγούμενη διάλεξη): γίνεται για δεδομένο Διάγραμμα Ροής

Η παραμετρική αριστοποίηση μπορεί να διατυπωθεί μαθηματικά και να συστηματοποιηθεί. Η δομική αριστοποίηση είναι πιο δύσκολο να συστηματοποιηθεί και επομένως υπάρχει μεγαλύτερο περιθώριο για "τεχνάσματα" και κρίση με βάση την πείρα και διαίσθηση του μηχανικού.

Παρ' όλα αυτά και σε αυτό τον τομέα υπάρχει πρόοδος προς την κατεύθυνση της συστηματικής αντιμετώπισης.

Ειδικότερα επισημαίνουμε:

- Ενεργειακή Αριστοποίηση: έχουν βρεθεί τυποποιημένες λύσεις
- Μικτός ακέραιος προγραμματισμός: επιτρέπει τη γενική μαθηματική διατύπωση του προβλήματος της δομικής αριστοποίησης – υπό την προϋπόθεση όμως, ότι υπάρχει ένα σύνολο υποψήφιων λύσεων, δηλαδή εναλλακτικών Διαγραμμάτων Ροής.

2 Ενεργειακή Αριστοποίηση

2.1 Εισαγωγή

Για το πρόβλημα της σύνθεσης δικτύων εναλλαγής θερμότητας έχουν βρεθεί τυποποιημένες, μη-εμπειρικές λύσεις, θερμοδυναμικά τεκμηριωμένες.

Η Χημική Βιομηχανία καταναλώνει **μεγάλα ποσά ενέργειας**

Επομένως υπάρχει ενδιαφέρον για δυνατήτητα *ανακύκλωσης* της ενέργειας και *αποδοτική χρήση* της.

Η ανακύκλωση της ενέργειας επιτυγχάνεται με Μονάδες Εναλλαγής Θερμότητας (εναλλάκτες) – ΜΕΘ.

Αυτές περιλαμβάνουν:

- εναλλάκτες θερμότητας
- θερμαντήρες (εναλλαγή με εξωτερικές πηγές, διεργασίες ή το περιβάλλον)
- ψυκτήρες (εναλλαγή με εξωτερικές διεργασίες ή το περιβάλλον)

<u>Οικονομική θεώρηση:</u>

Η αύξηση του αριθμού των ΜΕΘ αυξάνει το πάγιο κόστος αλλά η ανακύκλωση μειώνει το κόστος ενέργειας. Το πάγιο κόστος αναλύεται σε ετήσιες αποσβέσεις (με βάση και τη χρονική αξία του χρήματος). Επομένως,

$$\text{κόστος λειτουργίας} = \text{ενεργειακό κόστος } (\sim 1 / \text{ΜΕΘ}) + \text{αποσβέσεις των ΜΕΘ } (\sim \text{ΜΕΘ})$$

όπου

$$\text{ενεργειακό κόστος} \propto 1 / \text{ΜΕΘ}$$
$$\text{αποσβέσεις των ΜΕΘ} \propto \text{ΜΕΘ}$$

Αυτό θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε.

Συνοπτικά, εργαζόμαστε σε δύο φάσεις:

- διαμόρφωση οικονομικά άριστου δικτύου παροχών – ρευμάτων
- τροποποιήσεις όσον αφορά λειτουργικότητα, ευελιξία, ρύθμιση, έλεγχο και ασφάλεια.

2.2 Μέθοδος pinch point

Παρουσιάζουμε τη μέθοδο του ***κρίσιμου σημείου*** (pinch point = "πιάνω κάτι με τα δάχτυλα", όπως η πένσα. Η ονομασία προέρχεται από το χαρακτηριστικό σχήμα των διαγραμμάτων θερμικών φορτίων όπου δύο καμπύλες έχουν τη μικρότερη μεταξύ τους απόσταση στο κρίσιμο σημείο). Αυτή επιτρέπει να προσδιορίσουμε:

- τις *ελάχιστες ενεργειακές καταναλώσεις* (ΕΕΚ) ενός δικτύου

– τον *ελάχιστο αριθμό* Μονάδων Εναλλαγής Θερμότητας (ΜΕΘ)
– κατά προσέγγιση, την απαιτούμενη *επιφάνεια εναλλαγής*

Αυτά προσδιορίζονται *χωρίς να χρειάζεται προηγούμενη γνώση του δικτύου εναλλαγής*, επιτρέποντας να τα χρησιμοποιήσουμε ως σχεδιαστικούς στόχους. Εφόσον γνωρίζουμε τις θερμοχωρητικότητες των ρευμάτων, τις αρχικές και τελικές θερμοκρασίες τους και ορίσουμε την ελάχιστη θερμοκρασιακή διαφορά που μπορεί να παρατηρηθεί στο δίκτυο μεταξύ των ρευμάτων, τότε ο παρακάτω αλγόριθμος επιτρέπει τη σύνθεση δομικά αριστοποιημένων δικτύων:

– Κατασκευή του *καταρράκτη θερμότητας* από τον οποίο προσδιορίζονται οι θερμοκρασίες του κρίσιμου σημείου και οι ελάχιστες ενεργειακές απαιτήσεις των βοηθητικών παροχών.
– *Σύνδεση* των ρευμάτων στην περιοχή του κρίσιμου σημείου που ικανοποιούν τα κριτήρια του αριθμού των ρευμάτων και των θερμοχωρητικοτήτων.
– εναλλαγή θερμότητας βάσει της αρχής της *εξάντλησης των φορτίων*
– σπάσιμο των βρόχων με *ενεργειακή χαλάρωση* για την *ελάττωση* του αριθμού εναλλακτών.

2.3 Σκιαγράφηση της μεθόδου

Παρουσίαση με βάση το παράδειγμα του βιβλίου:
αντιδραστήρας με είσοδο δύο ροών τροφοδοσίας
Ψ1: 50 ---> 130 °C, με θερμοχωρητικότητα (περιέχει την παροχή, δηλ. είναι το γινόμενο F Cp) 5 kw/C,
Ψ2: 80 ---> 130 °C, 15 kW/C,
και ένα ρεύμα προϊόντων που πρέπει να ψυχθεί:
Θ1: 130 ---> 50 °C. 10 kW/C

Για να εφαρμόσουμε τη μέθοδο pinch point ακολουθούμε τα εξής βήματα:
α) Περιγράφουμε τη διεργασία και χωρίζουμε τα ρεύματα σε θερμά που πρέπει να κρυώσουν και ψυχρά που πρέπει να θερμανθούν για να έρθουν στην τελική θερμοκρασία που απαιτείται – αυτό είναι πιο γενικό και όχι μόνο της συγκεκριμένης μεθόδου.

β) Υπολογίζουμε τις θερμοχωρητικότητες των ρευμάτων και από αυτές με βάση τις απαιτούμενες αλλαγές θερμοκρασίας για κάθε ρεύμα, τις διαθέσιμες θερμότητες. Κάνουμε ισοζύγιο και βρίσκουμε την απαιτούμενη θερμότητα που πρέπει να προστεθεί ή αφαιρεθεί.

γ) Ορίζουμε μια ελάχιστη θερμοκρασιακή διαφορά κάτω από την οποία θεωρούμε ότι δε γίνεται εναλλαγή θερμότητας (μεταξύ 5 και 20 βαθμών κατά περίπτωση βάσει γνωστής αποδοτικότητας αντίστοιχων διεργασιών). Γενικά, *όσο μεγαλύτερες οι θερμοκρασιακές διαφορές τόσο πιο μεγάλη ροή θερμότητας* έχουμε. Για πολύ μικρό ΔΤ θα χρειαζόταν πολύ μεγάλη επιφάνεια εναλλαγής θερμότητας (μεγάλο μέγεθος εναλλάκτη).

δ) Κάνουμε μία κλίμακα θερμοκρασιών για τα θερμά ρεύματα και μία για τα ψυχρά μετατοπισμένη κατά ΔΤ προς τα πάνω ώστε μία θερμοκρασία του ψυχρού να αντιστοιχεί σε μία κατά ΔΤ μεγαλύτερη του θερμού.

ε) Σχεδιάζουμε τις ροές θερμότητας βάσει των υπολογισμών για κάθε ρεύμα στο βήμα (γ)

στ) Χωρίζουμε σε διαστήματα θερμοκρασιών με βάση τις αρχές και τα τέλη των ρευμάτων που συναντούμε πηγαίνοντας από το ένα άκρο της κλίμακας στο άλλο

ζ) Κάνουμε ισοζύγιο θερμότητας σε κάθε διάστημα και βρίσκουμε τη συνολικά διαθέσιμη θερμότητα σε αυτό

η) Κατασκευάζουμε τον “καταρράκτη θερμότητας”: για να μην έχουμε εξωτερικές πηγές θέρμανσης και ψύξης ώστε να γίνει η απαιτούμενη μεταβολή θερμοκρασίας για κάθε ρεύμα σε κάθε διάστημα, θεωρούμε ότι γίνεται εναλλαγή θερμότητας, δηλαδή η διαθέσιμη θερμότητα (πλεόνασμα ή έλλειμμα) σε κάθε διάστημα “ρέει” προς το αμέσως κατώτερο και προστίθεται αλγεβρικά με τη διαθέσιμη θερμότητα αυτού. Η ροή θερμότητας μεταξύ δύο διαστημάτων είναι το αλγεβρικό άθροισμα των διαθέσιμων θερμοτήτων των ανώτερων διαστημάτων.
Αυτό ικανοποιεί τον Α' Θερμοδυναμικό Νόμο

θ) Με βάση το μεγαλύτερο έλλειμμα ροής θερμότητας στον καταρράκτη καθορίζουμε την εξωτερική Θερμή Βοηθητική Παροχή (= θερμό ρεύμα). Το ποσό αυτής προστίθεται σε κάθε ροή του "καταρράκτη" τροποποιώντας τα ποσά κάθε ροής. Δηλαδή, από τη ΘΒΠ πάει όσο χρειάζεται στο πρώτο θερμοκρασιακό διάστημα που συναντάει για να συμψηφίσει τη διαθέσιμη θερμότητα, η διαφορά πάει στο επόμενο και συμψηφίζεται με την αντίστοιχη διαθέσιμη θερμότητα κ.ο.κ.

ι) Με βάση την αποβαλλόμενη θερμότητα στο κατώτατο σημείο της κλίμακας, ορίζουμε την Ψυχρή Βοηθητική Παροχή (θερμότητα που πρέπει να απαχθεί) Αυτές είναι οι ελάχιστες ενεργειακές απαιτήσεις. Τώρα, ικανοποιείται και ο Β' Θερμοδυναμικός Νόμος

Εδώ ξέρουμε πόση θερμότητα πρέπει να δώσουμε και σε ποια θερμοκρασία (την ανώτατη στη θερμή κλίμακα) καθώς και πόση θερμότητα πρέπει να απομακρύνουμε. Η γνώση των Βοηθητικών Παροχών μας επιτρέπει να γνωρίζουμε το κόστος της ενέργειας (η μία συνιστώσα του λειτουργικού κόστους).

ια) Βρίσκουμε το κρίσιμο σημείο ή σημείο σύγκλισης, δηλαδή τη θερμοκρασία θερμών και αντίστοιχη ψυχρών ροών όπου δε συμβαίνει ανταλλαγή θερμότητας. Αυτό χωρίζει τη διεργασία σε δύο ανεξάρτητα τμήματα "άνω" και "κάτω" (θερμό και ψυχρό) που μπορούν να μελετηθούν χωριστά στη συνέχεια.

ιβ) Για κάθε τμήμα υπολογίζεται ο ελάχιστος αριθμός ΜΕΘ από τη σχέση

$$N_{\min}=N_{\rho}+N_{\pi}-1$$

(άθροισμα ροών, N_ρ, και βοηθητικών παροχών, $N_\pi - 1$) από το θεώρημα Euler στη θεωρία γραφημάτων.

ιγ) Δίκτυο ελάχιστης ενεργειακής κατανάλωσης (ΕΕΚ). Ο χωρισμός σε δύο τμήματα επιτρέπει τη ροή της θερμότητας από το θερμό στο ψυχρό (ικανοποιεί και το δεύτερο θερμοδυναμικό νόμο). Εφαρμόζουμε χωριστά τη σχέση για ελάχιστο αριθμό ΜΕΘ σε κάθε ένα από τα δύο τμήματα και βρίσκουμε τον ελάχιστο αριθμό ΜΕΘ για δίκτυο ελάχιστης ενεργειακής κατανάλωσης, $N_{\min,\varepsilon\varepsilon\kappa}$.
Ισχύει ότι

$$N_{\min,\,\varepsilon\varepsilon\kappa}\geq N_{\min}$$

και μάλιστα

$N_{\min,\,\varepsilon\varepsilon\kappa} - N_{\min}$ = αριθμός βρόχων (κλειστών διαδρομών) στο δίκτυο ροών και εναλλακτών

ιδ) κατασκευή σύνθετων θερμικών καμπυλών (θερμοκρασίας T ως προς θερμότητα H) και προσεγγιστικός υπολογισμός επιφάνειας εναλλαγής θερμότητας (και άρα πάγιου κόστους εναλλακτών)
Οι καμπύλες επιτρέπουν τη γραφική απεικόνιση των αποτελεσμάτων μας μέσω της σχέσης τελικής θερμοκρασίας T_f με αρχική θερμοκρασία T_i.

$$T_f=\frac{H}{F\,C_p}+T_i$$

Η επιφάνεια εναλλαγής δίνεται από τη γνωστή σχέση

$$A=\frac{Q}{U\,\Delta T_L}, \quad \Delta T_L=\frac{(T2-T1)-(T4-T3)}{\ln[(T2-T1)-(T4-T3)]}$$

όπου ο συντελεστής U είναι κατά προσέγγιση γνωστός δεδομένων των συνθηκών όπου γνωρίζουμε ότι θα γίνει η εναλλαγή. Αυτό μας παρέχει ικανοποιητική εκτίμηση της επιφάνειας εναλλαγής και του πάγιου κόστους.
Τα παραπάνω είναι γνωστά χωρίς καν να γνωρίζουμε την ακριβή μορφή του δικτύου εναλλαγής θερμότητας.

ιε) Σύνθεση δικτύου εναλλακτών. Για το σκοπό αυτό υπάρχει καλά ορισμένος αλγόριθμος. Συνοπτικά:
- Εξετάζουμε χωριστά το άνω (κάτω) τμήμα.
- Εξετάζουμε αν ισχύει η σχέση: αριθμός θερμών ροών >= αριθμός ψυχρών ροών (ή <= για το κάτω τμήμα)
- Αν δεν ισχύει διαιρούμε μία ψυχρή (θερμή) ροή
- Αναζητούμε ζεύγη για τα οποία ισχύει (FCp)H <= (FCp)C (ή >=για το κάτω τμήμα)
- Αν δεν υπάρχει τέτοιο ζεύγος, χωρίζουμε μία θερμή ροή
- Κάθε ζεύγος που βρίσκουμε τελικά, το συνδέουμε με εναλλάκτη
- Εξετάζουμε τη ροή θερμότητας στους εναλλάκτες και εντοπίζουμε τα ρεύματα που έχουν περίσσεια

φορτίου μετά την εναλλαγή, τη θερμοκρασία τους μετά την εναλλαγή και το απομένον φορτίο.
- Καλύπτουμε τα υπόλοιπα θερμικά φορτία που εντοπίσαμε πιο πάνω, κατανέμοντας κατάλληλα τις ΘΒΠ και ΨΒΠ.

Η παραπάνω διαδικασία οδηγεί σε συνολικό αριθμό ΜΕΘ (εναλλακτών, θερμαντήρων και ψυκτήρων) ίσο με τον προβλεπόμενο $N_{\text{min, εεκ}}$.
Στο τρέχον παράδειγμα δε χρειάζεται χωρισμός ρευμάτων.
Η περίπτωση χωρισμού ρευμάτων θα εξεταστεί σε μελλοντικά παραδείγματα.

ιστ) Ελέγχουμε αν υπάρχουν βρόχοι και αν ναι, προβαίνουμε σε *Ενεργειακή Χαλάρωση* με απαλοιφή ΜΕΘ (και ανακατανομή του θερμικού φορτίου τους), άρα μικρότερο πάγιο κόστος – αλλά μεγαλύτερες ενεργειακές καταναλώσεις (= ενεργειακό κόστος) λόγω επιβάρυνσης των βοηθητικών παροχών.
Για να αποφανθούμε τελειωτικά καταφεύγουμε σε οικονομική ανάλυση των δύο εναλλακτικών λύσεων.

3 Μικτός Ακέραιος Προγραμματισμός

3.1 Εισαγωγή

Αν για ένα ή περισσότερα στάδια μιας παραγωγικής διαδικασίας υπάρχουν εναλλακτικές δομικές λύσεις, τότε μπορούμε να κάνουμε ένα "υπερ-διάγραμμα ροής" που περιέχει όλες τις δυνατές λύσεις ως επιμέρους κλάδους του διαγράμματος και σε κάθε τέτοιο κλάδο αποδίδουμε μία μεταβλητή που μπορεί να πάρει τιμή 1 ή 0, ανάλογα με το αν θα υπάρχει ή όχι στο τελικό ΔΡ.
Με τη βοήθεια αυτών των μεταβλητών μπορούμε να επιτύχουμε μαθηματική διατύπωση και χειρισμό ακόμη και για το πρόβλημα της δομικής αριστοποίησης – εφόσον έχουμε προσδιορίσει τις πιθανές εναλλακτικές λύσεις μεταξύ των οποίων καλούμαστε να επιλέξουμε.
Οι μεταβλητές αυτές είναι *διακριτές* επειδή επιτρέπεται να παίρνουν μόνο ορισμένες τιμές, και μάλιστα είναι *δυαδικές* μεταβλητές.

Γενικά, τόσο στο σχεδιασμό όσο και στη λειτουργία και τον προγραμματισμό της παραγωγής 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 (βλ. 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* όπου εν γένει έχουμε συνδυασμούς συνεχών και διακριτών μεταβλητών.
Κατηγορίες ΜΑΠ:
- Ακέραιος Προγραμματισμός (μόνο διακριτές μεταβλητές)
- Δυαδικός Ακέραιος Προγραμματισμός (μόνο δυαδικές μεταβλητές)
- Μικτός Ακέραιος Γραμμικός Προγραμματισμός (ΑΣ 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 σχεδιασμού της παραγωγής (planning) είναι τα παρακάτω:
- Πρόβλημα του σάκκου: 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 χημική βιομηχανία, μπορούμε να φανταστούμε την κατανομή δεδομένης ποσότητας από διάφορες πρώτες ύλες σε διαφορετικές διεργασίες για την παραγωγή ποικίλων προϊόντων ώστε το μεγιστοποιηθεί το κέρδος (διαφορά εσόδων από κόστος παραγωγής).
- Περιοδεύων πωλητής: 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 τα έξοδα μετακίνησης ή ο χρόνος να είναι ο ελάχιστος.
Σε όρους χημικής μηχανικής, 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: επιλογή από μια λίστα 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
- Επιλογή μεταξύ τόπων άντλησης πρώτης ύλης (αποθεμάτων, κοιτασμάτων) ως προς τον αριθμό, τα σημεία, ρυθμούς παργωγής ώστε η παραγωγή να είναι όσο το δυνατό πλησιέστερα στη ζήτηση ή τις ανάγκες που θα καλύψει.

κλπ

3.2 Μέθοδοι ΜΑΠ και Δομική Αριστοποίηση
Πολλά προβλήματα σχεδιασμού εργοστασίων περιλαμβάνουν μη γραμμικές σχέσεις συνεχών μεταβλητών και γραμμικές σχέσεις δυαδικών ή εν γένει ακέραιων μεταβλητών.
Συνεχείς = συνήθως ροές ή συνθήκες. Δυαδικές = αποφάσεις Ναι/Όχι.
Γενική διατύπωση:

$$\begin{aligned} &\min\ F(\mathbf{x})+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \\ &G_i(\mathbf{x})=0 \\ &h_j(\mathbf{x})+\mathbf{M}\,\mathbf{y}=0 \end{aligned} \qquad (1)$$

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

3.2.1 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 που έχουμε βρει σε προηγούμενα βήματα και χρησιμεύει και 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).

3.2.2 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:

$$\begin{aligned} &\max\ F(\mathbf{x})+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}^k \\ &G_i(\mathbf{x})=0 \\ &h_j(\mathbf{x})+\mathbf{M}\,\mathbf{y}^k=0 \end{aligned} \qquad (2)$$

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**:

$$\begin{aligned} &\max\ z+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}^k \\ &z\geq F(\mathbf{x}^i)+\nabla F^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^i)(\mathbf{x}-\mathbf{x}^i), \quad i=1,2,\dots,k \\ &G_i(\mathbf{x}^i)+\nabla G_i^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^i)(\mathbf{x}-\mathbf{x}^i)=0 \\ &h_j(\mathbf{x}^i)+\nabla h_j^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^i)(\mathbf{x}-\mathbf{x}^i)+\mathbf{M}\,\mathbf{y}^k\leq 0 \end{aligned} \qquad (3)$$

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.

3.2.3 Generalized Benders Decomposition και άλλες μέθοδοι αποσύνθεσης

Παραλλαγή της ΟΑ ανωτέρω, 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.

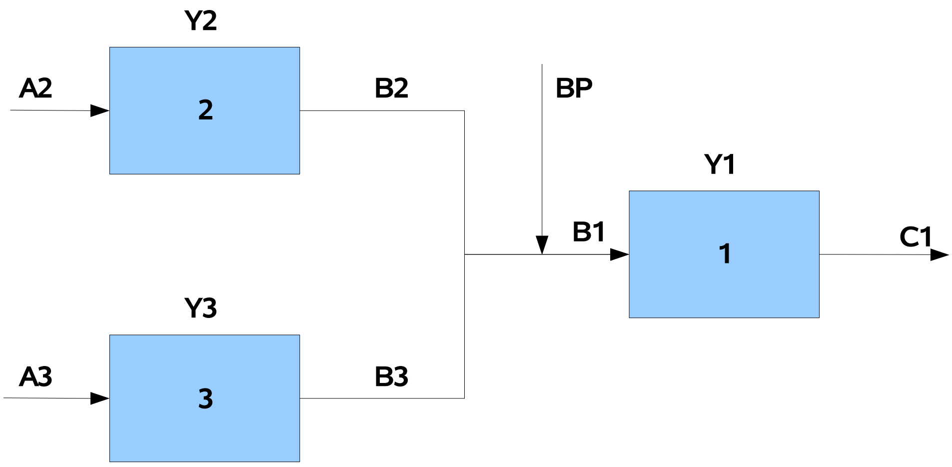
Έτσι, κάθε κύρια επανάληψη διαρκεί λιγότερο από ο,τι στην ΟΑ. Αλλά συνήθως χρειάζεται περισσότερες τέτοιες επαναλήψεις.

3.2.4 Διαζευκτικός προγραμματισμός (disjunctive programming)

Αφορά προβλήματα όπου από ένα σύνολο περιορισμών πρέπει να ικανοποιηθεί ένα και μόνο 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) <= 0 είναι ένας τέτοιος περιορισμός, τότε μπορούμε να γράψουμε f(x) <= M(1-y) όπου M πολύ μεγάλος αριθμός και y δυαδική μεταβλητή που αν είναι αληθής (τιμή 1) δίνει τον αρχικό περιορισμό.

3.3 Παράδειγμα:

Παραγωγή συστατικού C σε διεργασία 1 με χρήση πρώτης ύλης B.
B μπορεί να αγοραστεί ή να παρασκευαστεί από διεργασία 2 ή 3.
Οι 2 και 3 χρησιμοποιούν συστατικό A
<u>Ζητείται</u>: ποια διαδικασία (διεργασίες 2, 3 ή αγορά) πρέπει να επιλεγεί για την παραγωγή του C;



<u>Μεταβλητές</u>:
<u>Συνεχείς</u>: A2, A3 το ποσό πρώτης ύλης που καταναλώνεται στις διεργασίες 2 και 3. B2 και B3 τα ποσά που παράγονται από τις 2, 3. BP το ποσό του B που μπορεί να αγοραστεί. C1 το ποσό που θα παραχθεί τελικά από το συστατικό που μας ενδιαφέρει.
<u>Διακριτές</u>: Y1, Y2, Y3 = δυαδικές μεταβλητές που υποδηλώνουν ύπαρξη ή μη κάθε μίας από τις διεργασίες 1, 2 και 3.
<u>Περιορισμοί</u>
<u>Μετατροπή</u>:

$$C1 = 0.9B1, \quad B2 = \ln(1 + A2), \qquad B3 = 1.2 \ln(1 + A3)$$

<u>Ισοζύγιο μάζας του B</u>:

$$B1 = B2 + B3 + BP$$

<u>Περιορισμός προσήμου ή φυσικής σημασίας</u>:

όλες οι συνεχείς μεταβλητές > = 0

Ακέραιοι περιορισμοί:

Y1, Y2, Y3 = 0 ή 1

Μέγιστη ζήτηση:

C <= 1 (π.χ. μονάδα = 1000000)

Περιορισμοί δυναμικότητας:

B2 <= 4Y2, B3 <= 5Y3, C1 <= 2Y1

Αντικειμενική Συνάρτηση:
Έσοδα από πωλήσεις του C: 13C
Εξοδα για αγορά του B: 7BP
Εξοδα για αγορά του A: 1.8 A2 + 1.8 A3
Ετήσιες αποσβέσεις και λειτουργικό κόστος των τριών διεργασιών:
3.5Y1 + 2C1 + Y2 + B2 + 1.5Y3 + 1.2B3

ΑΣ προς μεγιστοποίηση: 11C1 -3.5Y1 -Y2 -B2 -1.5Y3 -1.2B3 -7BP -1.8A2 -1.8A3

Λύση: το πρόβλημα μπορεί να λυθεί βάσει της μεθόδου branch and bound με το solver του Excel (ή και του OOo Calc;) όπου μπορεί κανείς να πειραματιστεί και με τιμές διαφορετικές από αυτές που δίνονται στην εκφώνηση. Βρίσκεται ότι Y1 = Y3 = 1,Y2 = 0 και BP = 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.
Στο συγκεκριμένο παράδειγμα, η διεργασία 2 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.

B. Ρύθμιση Διεργασιών και Εγκαταστάσεων

Η ρύθμιση αποσκοπεί στη διατήρηση σταθερών τιμών σε ορισμένες μεταβλητές ώστε να επιτευχθεί ο αντικειμενικός στόχος (απόδοση, σταθερότητα, ασφάλεια λειτουργίας) και ειδικότερα:
– σταθερότητα λειτουργίας σύμφωνα με τα αποτελέσματα της αριστοποίησης.
– τήρηση ποιοτικών προδιαγραφών
– ασφάλεια
– τήρηση περιβαλλοντικών περιορισμών

Η ανάγκη ρύθμισης προκύπτει από αναπόφευκτες διαταραχές, εξωγενείς και ενδογενείς.
Κατάταξη μεταβλητών ως προς τη φύση τους:
- Εισερχόμενες
  - εκ χειρισμού
  - διαταραχές
- Εξερχόμενες
  - μετρήσιμες
  - μη μετρήσιμες

Κατάταξη ως προς το χειρισμό τους:
- Χειριζόμενες μεταβλητές = ροές, αποκλειστικά.
- Ρυθμιζόμενες μεταβλητές = διαταραχές, εξωτερικές μεταβλητές = εκείνες που έχουν σχέση με την απόδοση της διεργασίας.

Παράδειγμα: αναδευόμενος αντιδραστήρας συνεχούς λειτουργίας. Εξώθερμη αντίδραση A---> B
Τροφοδοσία: F_i (Z_i) σε θερμοκρασία T_i.
Συγκρατούμενος όγκος στον αντιδραστήρα: V
Προϊόν: $F(Z)$, T
Ψυκτικό για διατήρηση σταθερής θερμοκρασίας: F_c, T_{co} κατά την είσοδο και T_c κατά την έξοδο.

Μεταβλητές εισόδου: οι 3 παροχές, σύσταση εισόδου Z_i, θερμοκρασία εισόδου τροφοδοσίας T_i και ψυκτικού T_{co}.

Μεταβλητές εξόδου: παροχή F, σύσταση Z και θερμοκρασία εξόδου T προϊόντος, θερμοκρασία εξόδου ψυκτικού, συγκρατούμενος όγκος V

Έστω ότι μεταβάλλουμε τις τρεις παροχές με βάνες. Τότε:
Χειριζόμενες: οι παροχές
Διαταραχές: *οι μεταβλητές εισόδου που δεν είναι χειριζόμενες*, δηλαδή σύσταση και θερμοκρασία εισόδου τροφοδοσίας και ψυκτικού,
Μετρήσιμες: όλες εκτός, ενδεχομένως από τη σύσταση εξόδου.

Αντικειμενικός στόχος ρύθμισης: σταθερές T, Z και V. Ρυθμιζόμενες κάποιες από ή όλες οι εκ χειρισμού.

Βρόχος ρύθμισης: Η ρύθμιση επιτυγχάνεται με ανατροφοδότηση σημάτων που συνδέει δύο μεταβλητές .
Απλό παράδειγμα: αναλογικός ρυθμιστής (στάθμη – παροχή).

Ένας βρόχος ρύθμισης συνδυάζει τη μεταβλητή εκ χειρισμού με τη ρυθμιζόμενη μεταβλητή.

Ο αριθμός των μεταβλητών εκ χειρισμού είναι ίσος με τον αριθμό των ρυθμιζόμενωνμεταβλητών.

Για το σχεδιασμό ενός συστήματος ρύθμισης χρειάζεται η κατάστρωση ενός *δυναμικού μαθηματικού μοντέλου* της διεργασίας ή εγκατάστασης και χρησιμοποιείται η τεχνική της *αποσύνθεσης* της εγκατάστασης στις επιμέρους διεργασίες της.
Κάθε διεργασία ρυθμίζεται αυτόνομα και μετά επανασυντίθενται οι διεργασίες.

Σε κάθε διεργασία διακρίνουμε τη ***μεταβατική*** και τη ***μόνιμη*** κατάσταση.

- Στη μόνιμη κατάσταση, οι ρυθμοί μεταφοράς μάζας, θερμότητας και ορμής παραμένουν σταθεροί σε κάθε σημείο της διεργασίας, όπως και τα μεγέθη των ροών (παροχές μάζας, θερμότητας) που παρατηρούνται και οι συστάσεις των εισερχόμενων και εξερχόμενων ρευμάτων.
- Στη μη μόνιμη ή μεταβατική κατάσταση έχουμε χρονικές μεταβολές των παραπάνω μεγεθών. Μεταβατική κατάσταση μπορεί να έχουμε κατά την εκκίνηση ή τον τερματισμό μιας διεργασίας, καθώς επίσης και σε κάθε περίπτωση διαταραχής μιας ή περισσότερων εισόδων για οποιεσδήποτε αιτίες.

Οι εξισώσεις ισοζυγίων μάζας και ενέργειας μπορούν να γραφούν
– ως ***στατικές*** για ***μόνιμη*** κατάσταση ή...
– ως ***δυναμικές*** για ***μεταβατική*** κατάσταση.
Στην πρώτη περίπτωση, λόγων των σταθερών ρυθμών, αρκούν ***αλγεβρικές*** εξισώσεις για την ορθή περιγραφή των ισοζυγίων,
ενώ στη δεύτερη περίπτωση απαιτούνται ***διαφορικές*** εξισώσεις.

- Το στατικό μαθηματικό μοντέλο επιτρέπει τον προσδιορισμό των *παροχών* και *συστάσεων*, καθώς και των *συνθηκών λειτουργίας*.
- Το δυναμικό μοντέλο χρειάζεται στον προσδιορισμό του *συστήματος αυτόματης ρύθμισης* που θα επιτρέψει τη διατήρηση των τιμών του στατικού μοντέλου.

Το δυναμικό, όπως και το στατικό μοντέλο, έχει βαθμούς ελευθερίας
f = M – E = μεταβλητές – εξισώσεις (διαφορικές και αλγεβρικές)
f = δ + ε = διαταραχές + χειριζόμενες μεταβλητές που χρησιμοποιεί το σύστημα ρύθμισης

Για κάθε ρυθμιζόμενη μεταβλητή αντιστοιχεί μία χειριζόμενη, άρα
f = δ + ρ = διαταραχές + αριθμός ρυθμιζόμενων

Στο δυναμικό μοντέλο λαμβάνονται υπ' όψιν στα ισοζύγια και οι όροι συσσώρευσης και καταστροφής/δημιουργίας που δεν είναι πλέον μηδενικοί.
Για τον αντιδραστήρα:

$$\frac{dV}{dt} = F_i - F \tag{4}$$

$$V\frac{dZ}{dt}=F_{\mathrm{i}}(Z_{\mathrm{i}}-Z)-VZk_0e^{\frac{-E}{RT}} \qquad (5)$$

(εδώ υπεισέρχεται και ο ρυθμός της αντίδρασης)

$$C_pV\frac{dT}{dt}=C_pF_{\mathrm{i}}(T_{\mathrm{i}}-T)-Q+VZ\Delta H_rk_0e^{\frac{-E}{RT}} \qquad (6)$$

$$Q=F_cC_{p,\mathrm{c}}(T_{\mathrm{c},0}-T_{\mathrm{c}})=\text{απομακρυνόμενη θερμότητα}=AU\Delta T(T\mathrm{c},0,T_{\mathrm{c}},T) \qquad (7)$$

ΔH_r = θερμοτονισμός αντίδρασης

5 εξισώσεις και 11 μεταβλητές (πλην των σχεδιασμένων όπως επιφάνεια εναλλάκτη) => f = 6.

Επιλογή μεταβλητών:

- οι χειριζόμενες μεταβλητές είναι σχεδόν αποκλειστικά ροές.
- οι ρυθμιζόμενες επιλέγονται βάσει του αντικειμενικού σκοπού. Αν αυτός δεν είναι σαφής, τότε:
  - ως αυτές από όπου εξαρτάται η απόδοση της διεργασίας
  - ως αυτές που επηρεάζουν άμεσα και σημαντικά τις ρυθμιζόμενες μεταβλητές

Σύζευξη μεταβλητών:

Εκλέγουμε το βρόχο (συνδυασμό ρυθμιζόμενης με χειριζόμενη) που έχει αμεσότερη και ταχύτερη επίδραση στη ρυθμιζόμενη. Μεταξύ δύο ισότιμων ως προς το αποτέλεσμα, επιλέγεται ο απλούστερος.
Κατά την ανασύνθεση σε επίπεδο εργοστασίου απομακρύνουμε τους υπεράριθμους βρόχους, δηλαδή εκείνους που έχουν ίδια ρυθμιζόμενη ή χειριζόμενη μεταβλητή με άλλους.