

ΣΥΣΤΗΜΑΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΜΟΡΙΩΝ ΔΙΑΛΥΤΩΝ ΓΙΑ ΤΟΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟ ΚΑΙ ΕΛΕΓΧΟ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ

Α.Ι. Παπαδόπουλος, Π. Σεφερλής

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη 54124
και

Ινστιτούτο Τεχνικής Χημικών Διεργασιών, ΕΚΕΤΑ, Θέρμη 57001, Θεσσαλονίκη

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

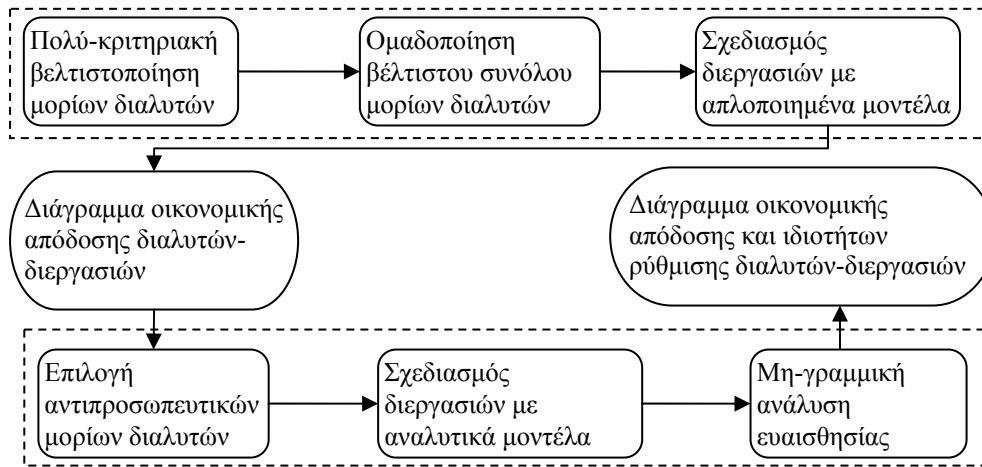
Η παρούσα εργασία στοχεύει στην ανάπτυξη μιας συστηματικής μεθόδου σχεδιασμού και επιλογής μορίων διαλυτών με βάση τον βέλτιστο σχεδιασμό και έλεγχο διεργασιών. Η προτεινόμενη μέθοδος αποτελείται από ένα πρώτο στάδιο υπολογιστικής σύνθεσης μορίων διαλυτών με βάση οικονομικά κριτήρια απόδοσης των διαλυτών, προερχόμενα από τον σχεδιασμό απλοποιημένων συστημάτων διεργασιών στα οποία χρησιμοποιούνται. Το στάδιο αυτό υλοποιείται με χρήση τεχνολογίας πολύ-κριτηριακής βελτιστοποίησης συνδυαζόμενης με μέθοδο εξόρυξης δεδομένων, με στόχο την ταχεία και αποτελεσματική αναγνώριση των βέλτιστων χαρακτηριστικών των ολοκληρωμένων συστημάτων διαλύτη-διεργασίας. Στο δεύτερο στάδιο οι διαλύτες που παρουσίασαν τις υψηλότερες οικονομικές αποδόσεις εισάγονται σε σχεδιασμό διεργασιών με χρήση αναλυτικών μοντέλων, επιτρέποντας την αποτίμηση των αποτελεσμάτων μόνιμης κατάστασης από την ταυτόχρονη εφαρμογή πολλαπλών διαταραχών στο σύστημα της διεργασίας, μέσα από ένα κεντροποιημένο σχήμα ελέγχου. Έτσι, αναγνωρίζονται οι οικονομικά βέλτιστοι διαλύτες που ταυτόχρονα διευκολύνουν τη ρύθμιση και του συστήματος στο οποίο χρησιμοποιούνται.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η ανάπτυξη μεθοδολογιών ολοκληρωμένου σχεδιασμού διαλυτών και συστημάτων διεργασιών έχει παρουσιάσει έντονο ερευνητικό ενδιαφέρον, γιατί η συνεκτίμηση των συνεργειών που αναπτύσσονται κατά την υπολογιστική σύνθεση διαλυτών και τον σχεδιασμό των διεργασιών στις οποίες χρησιμοποιούνται οδηγεί σε ολοκληρωμένα σχήματα διαλυτών διεργασιών βέλτιστης οικονομικής απόδοσης [1-8]. Οι υπάρχουσες μέθοδοι εστιάζουν στην βελτιστοποίηση των χαρακτηριστικών των διεργασιών, οι οποίες πρόκειται να χρησιμοποιήσουν μόρια διαλυτών με βέλτιστες ιδιότητες, σχεδιασμένα με χρήση υπολογιστικών μεθόδων σύνθεσης μορίων. Έτσι, γίνεται εξερεύνηση και αναγνώριση των επιδράσεων διαφορετικών μορίων διαλυτών στον οικονομικό σχεδιασμό του συστήματος διεργασιών στο οποίο χρησιμοποιούνται. Ωστόσο, οι διεργασίες είναι δυναμικά περιβάλλοντα, ευπαθή σε εξωγενείς διαταραχές και διακυμάνσεις σε λειτουργικές παραμέτρους. Οι διαθέσιμες μέθοδοι που στοχεύουν στον ολοκληρωμένο σχεδιασμό διαλυτών-διεργασιών συχνά παραβλέπουν τα αποτελέσματα τέτοιου είδους διαταραχών, καθώς γενικά θεωρείται ότι ένα εκ των υστέρων σχεδιασμένο σύστημα ελέγχου θα τις αντιμετωπίσει αποτελεσματικά. Οι υπάρχουσες σχεδιαστικές μέθοδοι δεν λαμβάνουν υπόψη τις επιδράσεις της χρήσης διαφορετικών επιλογών διαλυτών στον σχεδιασμό διεργασιών υπό συνθήκες λειτουργικών διαταραχών με συστηματικές μεθόδους που να επιτρέπουν την διεξοδική αξιολόγηση των ιδιοτήτων ρύθμισης του ολοκληρωμένου συστήματος διαλύτη-διεργασίας και ελέγχου.

ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ

Η μέθοδος που προτείνεται για τον συστηματικό σχεδιασμό και επιλογή μορίων διαλυτών με βάση την βελτιστοποίηση των στατικών ιδιοτήτων ρύθμισης και της οικονομικής απόδοσης του συστήματος διεργασιών στο οποίο πρόκειται να χρησιμοποιηθούν παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.



Σχήμα 1. Προτεινόμενη μέθοδος επιλογής μορίων διαλυτών με βάση ιδιότητες οικονομικής απόδοσης και ρύθμισης διεργασιών

Σχεδιασμός και επιλογή διαλυτών βάσει οικονομικών κριτηρίων

Στο πρώτο στάδιο της προτεινόμενης μεθόδου γίνεται χρήση υπολογιστικών εργαλείων σύνθεσης μορίων διαλυτών (CAMD) σε συνδυασμό με τεχνολογίες πολύ-κριτηριακής βελτιστοποίησης και εξόρυξης δεδομένων για την επιλογή οικονομικά βέλτιστων διαλυτών [6-7]. Η χρησιμοποιούμενη τεχνολογία πολυ-κριτηριακής βελτιστοποίησης παρουσιάζει πλεονεκτήματα σε σχέση με τις μεθόδους βελτιστοποίησης με μία αντικειμενική συνάρτηση που έχουν αναφερθεί στο παρελθόν για την επίλυση αυτού του προβλήματος. Οι διαφορετικές αντικειμενικές συναρτήσεις, που αναπαριστούν τους σχεδιαστικούς στόχους του προβλήματος, χρησιμοποιούνται ταυτόχρονα αλλά ανεξάρτητα, χωρίς να υπόκεινται σε μη-αναγκαίες παραδοχές και υποθέσεις που καθοδηγούν αυθαίρετα τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης προς συγκεκριμένες κατευθύνσεις. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να αναδεικνύονται όλες οι τάσεις και συσχετίσεις ανάμεσα στις ιδιότητες των υποψηφίων βέλτιστων μορίων, ενώ το περιεκτικό σύνολο διαλυτών στο οποίο καταλήγει η βελτιστοποίηση αντιπροσωπεύει ένα ευρύ φάσμα δομικών, φυσικών και οικονομικών χαρακτηριστικών ανεξάρτητα από την διεργασία στην οποία πρόκειται να χρησιμοποιηθούν. Στη συνέχεια το σύνολο των διαλυτών εισάγεται στον σχεδιασμό διεργασιών με χρήση απλοποιημένων μοντέλων, με στόχο την ταχεία και αποτελεσματική αναγνώριση βασικών δομικών βέλτιστων χαρακτηριστικών των ολοκληρωμένων συστημάτων διαλύτη-διεργασίας. Οι διαλύτες χωρίζονται σε συμπαγείς ομάδες (clusters) μορίων με όμοιες ιδιότητες με εφαρμογή μεθόδου εξόρυξης δεδομένων, ενώ ένα αντιπροσωπευτικό μόριο επιλέγεται από κάθε ομάδα με βάση τη σχεδιαστική πληροφορία που υπάρχει στις ομάδες υπό την μορφή θερμοδυναμικών ιδιοτήτων. Τα αντιπροσωπευτικά μόρια εισάγονται στο σχεδιασμό διεργασιών ως διακριτές επιλογές, οπότε η βέλτιστη οικονομική λύση που εξάγεται για κάθε αντιπροσωπευτικό μόριο θεωρείται κατά προσέγγιση αντιπροσωπευτική για όλα τα μόρια της ομάδας. Η επαναληπτική εφαρμογή της μεθόδου ομαδοποίησης οδηγεί σταδιακά στον διαχωρισμό του αρχικού συνόλου διαλυτών σε ομάδες μικρού μεγέθους, επιτρέποντας την ανάπτυξη ενός δενδροειδούς διαγράμματος που συνδυάζει δομικά και φυσικά μοριακά χαρακτηριστικά με τον οικονομικό σχεδιασμό διεργασιών. Οι αποφάσεις σχετικά με το ποιοί κλάδοι της δενδροειδούς αναπαράστασης πρέπει να αναπτύσσονται σε κάθε επανάληψη βασίζονται σε έναν δείκτη που ονομάζεται πιθανότητα ομαδοποίησης [6]. Ο δείκτης αυτός συνδυάζει την στατιστική πληροφορία που εμπεριέχεται στις ομάδες με την οικονομική απόδοσή τους και αντιπροσωπεύει την πιθανότητα της κάθε ομάδας να εμπεριέχει μόρια βέλτιστης οικονομικής απόδοσης.

Σχεδιασμός και επιλογή διαλυτών βάσει οικονομικών κριτηρίων και ιδιοτήτων ρύθμισης

Σε αυτό το στάδιο επιλέγονται αντιπροσωπευτικά μόρια από ομάδες υψηλής οικονομικής απόδοσης με βάση το διάγραμμα οικονομικής απόδοσης του ολοκληρωμένου συστήματος διαλύτη-διεργασίας. Τα μόρια αυτά εισάγονται πλέον στον σχεδιασμό διεργασιών με χρήση αναλυτικών μοντέλων που αντανακλούν ρεαλιστικότερα τις συνθήκες παραγωγής, επιτρέποντας την εξαγωγή βελτιωμένων πληροφοριών σχετικά με την οικονομική απόδοση των διαλυτών. Πρόκειται για μοντέλα στηλών διαχωρισμού που βασίζονται σε τεχνικές ορθογώνιας ταξινόμησης σε πεπερασμένα στοιχεία, τα οποία επιτρέπουν μείωση των χρησιμοποιούμενων εξισώσεων με ταυτόχρονη διατήρηση ακριβούς σχεδιαστικής πληροφορίας. Ο επαναπολογισμός της πιθανότητας ομαδοποίησης με βάση την διαθέσιμη λεπτομερή αποτίμηση της απόδοσης του συστήματος διαλύτη-διεργασίας ξεκαθαρίζει περαιτέρω τις ομάδες μορίων που εμπεριέχουν διαλύτες υψηλής απόδοσης, οπότε ομάδες που περιέχουν μόρια χαμηλότερης απόδοσης είναι δυνατόν να αναγνωρισθούν με μεγάλη βεβαιότητα και να απορριφθούν. Επιπλέον, η διαθέσιμη λεπτομερής σχεδιαστική πληροφορία σχετικά με την επίδραση των διαλυτών στο σύστημα της διεργασίας επιτρέπει τον προσδιορισμό χαρακτηριστικών παραμέτρων ελέγχου για το ολοκληρωμένο σύστημα διαλυτών-διεργασίας όπως και την αξιολόγηση της συμπεριφοράς του συστήματος για πολλαπλές, ταυτόχρονες διαταραχές στη διεργασία, ώστε να ανευρεθούν σχεδιαστικοί στόχοι για βασικές μεταβλητές ελέγχου που δεν είναι δυνατό να αξιολογηθούν με χρήση απλοποιημένων μοντέλων. Η αξιολόγηση των ιδιοτήτων ρύθμισης του συστήματος για τις υποβαλλόμενες διαταραχές βασίζεται σε μια μέθοδο μη γραμμικής ανάλυσης ευαισθησίας για το ολοκληρωμένο σύστημα διαλύτη-διεργασίας [10-11]. Οι διακυμάνσεις σε μόνιμη κατάσταση για ένα επιλεγμένο σετ ρυθμιζόμενων μεταβλητών y , και χειραγωγούμενων μεταβλητών u , που απαιτούνται για την ελαχιστοποίηση των επιδράσεων των διαταραχών στους στόχους του εφαρμοζόμενου ελέγχου υπολογίζεται σύμφωνα με το παρακάτω μη-γραμμικό σύστημα:

$$\text{Min}_{\mathbf{y}, \mathbf{u}} f = (\mathbf{y} - \mathbf{y}_{sp})^T \mathbf{W}_y (\mathbf{y} - \mathbf{y}_{sp}) + (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{ss})^T \mathbf{W}_u (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{ss}) \quad (1)$$

υποκείμενη στο αναλυτικό μοντέλο διεργασίας

$$\mathbf{y}^l \leq \mathbf{y} \leq \mathbf{y}^u, \quad \mathbf{u}^l \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}^u$$

όπου \mathbf{y}_{sp} and \mathbf{u}_{ss} είναι τα σημεία αναφοράς των ρυθμιζόμενων και των χειραγωγούμενων μεταβλητών, αντίστοιχα, ενώ τα βάρη \mathbf{W}_y και \mathbf{W}_u δίνουν συγκριτική προτεραιότητα στη χρήση στόχων ρύθμισης και των χειραγωγούμενων μεταβλητών. Η ανάλυση της ρυθμισιμότητας σε μόνιμη κατάσταση είναι ανεξάρτητη από τον ελεγκτή και αντιμετωπίζεται ως μια επιπρόσθετη ιδιότητα της επιλογής διαλυτών και του σχεδιασμού διεργασιών. Η πραγματοποιούμενη ανάλυση ευαισθησίας προσφέρει χρήσιμες πληροφορίες σχετικά με την επιβαλλόμενη μέθοδο ελέγχου και το εύρος των διακυμάνσεων των περμέτρων μέσα στο οποίο οι δυαλύτες επιδικνύουν βέλτιστη απόδοση. Η ικανότητα της απόρριψης των διαταραχών από το σύστημα σιλύτη-διεργασίας-ελεγκτή σε μόνιμη κατάσταση περιγράφεται από έναν δείκτη με βάση το εύρος της συντεταγμένης διακύμανσης, z .

$$\Omega_{SC}(z) = \sum_i w_{u,i}(z) \left\| \frac{u_i^*(z) - u_i^*(0)}{u_i^*(0)} \right\|^2 + \sum_i w_{y,i}(z) \left\| \frac{y_i^*(z) - y_i^*(0)}{y_i^*(0)} \right\|^2 \quad (2)$$

Με βάση τον υπολογισμό του δείκτη Ω μέσα από την εξίσωση (2), αναπτύσσεται ένα ολοκληρωμένο διάγραμμα απόδοσης του συστήματος διαλύτη-διεργασίας που επιτρέπει τη λήψη αποφάσεων με βάση την βέλτιστη οικονομική συμπεριφορά και τις ιδιότητες ρύθμισης του.

ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Η προτεινόμενη μέθοδος εφαρμόζεται στον σχεδιασμό διαλυτών για τον διαχωρισμό ενός μίγματος κυκλοεξανίου-βενζολίου με χρήση εκχυλιστικής απόσταξης. Στο πρώτο στάδιο γίνεται σχεδιασμός διαλυτών με στόχο την μεγιστοποίηση της σχετικής πτητικότητας του μείγματος και της διαλυτότητας του βενζολίου στον διαλύτη ώστε να διευκολυνθεί ο διαχωρισμός των συστατικών. Ταυτόχρονα η θερμότητα εξάτμισης και το μοριακό βάρος του διαλύτη ελαχιστοποιούνται για να διευκολυνθεί η ανάκτησή του καθώς και να επιτευχθεί σχεδιασμός δομικά απλούστερων μορίων, αντίστοιχα. Η εφαρμογή της μεθόδου του σχεδιασμού διαλυτών με χρήση πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης οδηγεί σε ένα αρχικό σύνολο διαλυτών που αποτελείται από 109 μόρια, ενώ η εφαρμογή της μεθόδου ομαδοποίησης (clustering) οδηγεί σε διαχωρισμό του αρχικού συνόλου σε 6 ομάδες (C_1) κατά την πρώτη επανάληψη ομαδοποίησης, όπως φαίνεται στον Πίνακα 1 που δείχνει και τον αριθμό των μορίων (N_m) που εμπεριέχονται σε κάθε ομάδα. Αντιπροσωπευτικά μόρια από κάθε ομάδα εισάγονται στη συνέχεια στο σχεδιασμό διεργασίας εκχυλιστικής απόσταξης, οπότε οι πληροφορίες που εξάγονται σχετικά με την οικονομική απόδοση της κάθε ομάδας επιτρέπουν τον υπολογισμό της πιθανότητας ομαδοποίησης (P_c) που δείχνει τις ομάδες οι οποίες εμπεριέχουν μόρια που πιθανόν να οδηγήσουν σε υψηλή οικονομική απόδοση της διεργασίας. Με βάση τις τιμές της πιθανότητας ομαδοποίησης (P_c) για την πρώτη επανάληψη του Πίνακα 1, οι ομάδες 2, 3 και 5 εισάγονται στην δεύτερη επανάληψη ομαδοποίησης, ενώ οι ομάδες 1, 4 και 6 μπορούν να απορριφθούν. Στο δεύτερο στάδιο της προτεινόμενης μεθόδου γίνεται σχεδιασμός της διεργασίας εκχυλιστικής απόσταξης με χρήση πλέον αναλυτικών σχεδιαστικών μοντέλων, οπότε επιτρέπεται ο επαναυπολογισμός της πιθανότητας ομαδοποίησης (P_r) με βάση μιας επίσης αναλυτικότερης αντικειμενικής συνάρτησης. Όπως φαίνεται στον Πίνακα 1, οι τιμές της πιθανότητας ομαδοποίησης P_r επαληθεύουν την επιλογή των ομάδων 2, 3 και 5 για εισαγωγή στην δεύτερη επανάληψη ομαδοποίησης, αφού η φθίνουσα σειρά κατάταξης των ομάδων με βάση την P_r παραμένει η ίδια με την αντίστοιχη σειρά κατάταξης με βάση την P_c .

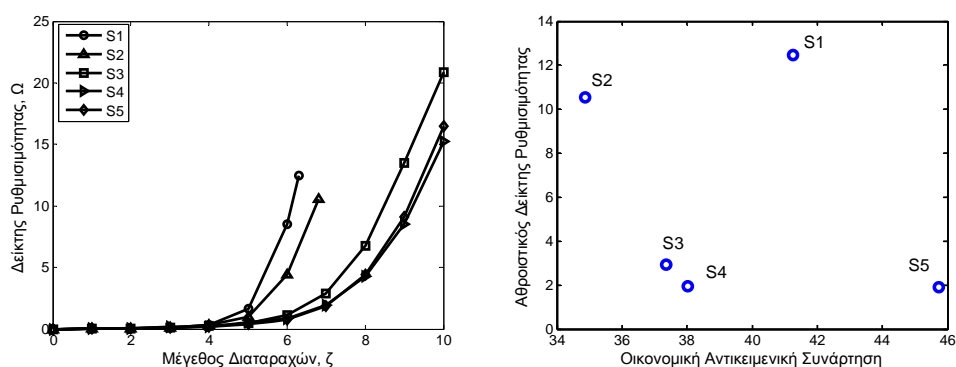
Πίνακας 1. Αποτελέσματα εφαρμογής μεθόδου ομαδοποίησης σε δύο επαναλήψεις

1 ^η επανάληψη ομαδοποίησης					→	2 ^η επανάληψη ομαδοποίησης				
C_1	N_m	P_c	P_r	x_d		C_1	N_m	P_c	P_r	x_d
1	1	0.00	0.00	0.77		1	8	0.94	0.51	0.96
2	14	0.99	0.95	0.96		2	6	0.99	0.90	0.96
3	23	0.97	0.94	0.8		3	6	1.00	1.00	0.96
4	34	0.92	0.89	0.72		4	1	0.00	0.00	0.77
5	6	1.00	1.00	0.96		5	1	0.00	0.00	0.92
6	31	0.88	0.85	0.91		6	21	0.96	0.70	0.96

Κατά τη δεύτερη επανάληψη ομαδοποίησης, οι τιμές που λαμβάνονται για την P_r με χρήση του αναλυτικού σχεδιαστικού μοντέλου για την διεργασία υποδεικνύουν ότι οι ομάδες 2 και 3 είναι πιθανό να εμπεριέχουν τα μόρια με την μεγαλύτερη οικονομική απόδοση. Τα συμπεράσματα που εξάγονται με βάση την πιθανότητα P_r στη δεύτερη επανάληψη αναφορικά με την οικονομική απόδοση των διαλυτών επιτρέπουν την γρηγορότερη εστίαση της περαιτέρω επίλυσης του σχεδιαστικού προβλήματος σε ομάδες που είναι πιθανό να περιέχουν μόρια με βέλτιστη οικονομική απόδοση. Αντίθετα η πιθανότητα P_c αφήνει ανοικτό το ενδεχόμενο να υπάρχουν μόρια υψηλής οικονομικής απόδοσης και στις ομάδες 1 και 6, οπότε απαιτείται και τρίτη επανάληψη για την ανεύρεση των βέλτιστων μορίων. Η χρήση του αναλυτικού σχεδιαστικού μοντέλου επιτρέπει τον ακριβή υπολογισμό μιας κύριας παραμέτρου ελέγχου, όπως είναι το κλάσμα μάζας του κυκλοεξανίου, στο ρεύμα απόσταξης (x_d) και επιτρέπει την εξαγωγή σχεδιαστικών πληροφοριών σχετικά με ομάδες που εμπεριέχουν μόρια με υψηλή λειτουργική απόδοση. Το κλάσμα μάζας στο ρεύμα απόσταξης παρέχει πληροφορίες για την καθαρότητα του ρεύματος και μπορεί να συνεκτιμηθεί με την πιθανότητα ομαδοποίησης P_r ώστε να αλλάξει ο τρόπος επιλογής των ομάδων που θα εισαχθούν στη δεύτερη επανάληψη ομαδοποίησης. Με συνυπολογισμό του x_d η επιλογή των ομάδων 2 και 5 για τη δεύτερη επανάληψη αποδεικνύεται σωστή και από την πλευρά της βέλτιστης

λειτουργίας του συστήματος λόγω τις υψηλής τιμής του x_d (0.96). Η ομάδα 3 που συνεπιλέχθηκε λόγω της υψηλής τιμής P_r δείχνει να έχει μια σχετικά μικρή τιμή για το x_d (0.8), ωστόσο ο μεγάλος αριθμός μορίων που εμπεριέχονται στην ομάδα ($N_m=23$) αφήνει ανοικτό το ενδεχόμενο της ύπαρξης μορίων με υψηλότερη τιμή για το x_d σε αυτή την ομάδα. Αντίθετα η ομάδα 6 που απορρίφθηκε λόγω της χαμηλής τιμής P_r θα μπορούσε να συμπεριληφθεί στο σύνολο διαλυτών της δεύτερης επανάληψης ομαδοποίησης λόγω της υψηλής τιμής x_d (0.91) και του μεγάλου αριθμού μορίων που εμπεριέχονται στην ομάδα ($N_m=31$) που αφήνει ανοικτό το ενδεχόμενο της ύπαρξης μορίων με υψηλότερη τιμή για το x_d σε αυτή την ομάδα. Σε κάθε περίπτωση, η χρησιμότητα της μεθόδου έγκειται στο ότι επιτρέπει την συστηματική εξαγωγή και τον συνδυασμό οικονομικών και λειτουργικών πληροφοριών σχετικά με την επίδραση των διαλυτών στο σύστημα της διεργασίας όπου χρησιμοποιούνται. Επιπλέον, παραδίδει στην ευχέρεια του χρήστη τον τρόπο εφαρμογής της μεθόδου, ελαχιστοποιώντας τα περιθώρια απώλειας χρήσιμης σχεδιαστικής πληροφορίας καθώς και ισορροπώντας την εξαγωγή αυτής της πληροφορίας με την ταχύτητα επίλυσης του ολοκληρωμένου σχεδιαστικού προβλήματος.

Η εφαρμογή της μεθόδου μέχρι αυτό το στάδιο επιτρέπει μια προκαταρκτική αξιολόγηση των διαθέσιμων μορίων διαλυτών με βάση τα οικονομικά και λειτουργικά χαρακτηριστικά της διεργασίας εκχυλιστικής απόσταξης όπου χρησιμοποιούνται εισάγοντας μόνο 12 από τα 109 διαθέσιμα μόρια στο στάδιο σχεδιασμού της διεργασίας. Τα μόρια που παρουσιάζουν βέλτιστη απόδοση μέχρι αυτό το σημείο έχουν τον εξής χημικό τύπο: (S1: $FCH_2O-C(CH=O)_3$, S2: $(CH=O)_3C-O-CH_3$, S3: $Cl-C(CH=O)_2-O-CH_2-CH=O$, S4: $(CH=O)_2CH-O-CH(CH=O)-Cl$, S5: $(CH=O)_2CH-CH(CH=O)-Cl$). Τα μόρια αυτά διερευνώνται σχετικά με την επίδρασή τους στην διευκόλυνση της στατικής ρυθμισιμότητας του συστήματος της διεργασίας υπό συνθήκες διαταραχών στη σύσταση του ρεύματος εισόδου και στη θερμοκρασία. Οι ρυθμιζόμενες μεταβλητές είναι η καθαρότητα του κυκλοεξανίου στο ρεύμα απόσταξης και το ποσοστό της ανάκτησής του. Οι χειραγωγούμενες μεταβλητές περιλαμβάνουν το θερμικό φορτίο του αναβραστήρα, το ρυθμό ροής του ρεύματος επαναροής και τον ρυθμό ροής εισόδου του διαλύτη. Ο υπολογισμός του δείκτη ρυθμισιμότητας ως συνάρτηση του εύρους των διαταραχών για τα πέντε διαθέσιμα συστήματα διαλύτη-διεργασίας αναδεικνύει την προσπάθειά τους σε μόνιμη κατάσταση να αντισταθμίσουν τα αποτελέσματα των επιβαλλόμενων διαταραχών, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2α. Επιπλέον, η συγκριτική απεικόνιση της οικονομικής απόδοσης των διαλυτών με τον δείκτη ρυθμισιμότητας, στο Σχήμα 2β, δείχνει ότι οι διαλύτες S3 και S4 συνδυάζουν την υψηλότερη δυνατή οικονομική απόδοση με την υψηλότερη δυνατή ανταπόκριση σε διαταραχές. Αντίθετα, ο διαλύτης S2 παρουσιάζει την υψηλότερη οικονομική απόδοση σε συνδυασμό με την χειρότερη ανταπόκριση στις διαταραχές, ενώ ο διαλύτης S5 παρουσιάζει την ακριβώς αντίστροφη συμπεριφορά.



ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η προτεινόμενη μέθοδος επιτρέπει την συστηματική εξαγωγή και τον συνδυασμό οικονομικών και λειτουργικών πληροφοριών σχετικά με την επίδραση των διαλυτών στο σύστημα της διεργασίας όπου χρησιμοποιούνται. Επίσης, δίνεται η δυνατότητα στον χρήστη να προσαρμόσει την μέθοδο στις σχεδιαστικές ανάγκες του προβλήματος που αντιμετωπίζει, επιτρέποντας είτε τη γρήγορη αναζήτηση μορίων διαλυτών με ευεργετικές ιδιότητες για το

σύστημα της διεργασίας στο οποίο θα χρησιμοποιηθούν είτε την ενδεδειγμένη εξέταση των συνεργειών που αναπτύσσονται ανάμεσα στους διαλύτες, τη διεργασία και το σύστημα ρύθμισης, εμπλουτίζοντας έτσι τη γνώση του για την συμπεριφορά του ολοκληρωμένου συστήματος. Τα παραπάνω επιτυγχάνονται με ταυτόχρονη μεταφορά περιεκτικής σχεδιαστικής πληροφορίας ανάμεσα στα διαφορετικά στάδια σχεδιασμού της μεθόδου, ενώ εξισορροπείται η εξαγωγή αυτής της πληροφορίας με την ταχύτητα επίλυσης του ολοκληρωμένου σχεδιαστικού προβλήματος.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα εργασία χρηματοδοτήθηκε από το πρόγραμμα της Ευρωπαϊκής Επιτροπής ECORHOS (INCO-CT-0133259)

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Buxton A., Livingston A.G. and E.N. Pistikopoulos (1999), *AIChE Journal*, 45(4), 817.
2. Hostrup M., Harper P.M. and R. Gani (1999), *Comp. Chem. Eng.*, 23, 1395.
3. Markoulaki E.C. and A.C. Kokossis (2000), *Chem. Eng. Sci.*, 55(13), 2529.
4. Wang Y. and L.E.K. Achenie (2002) *Fluid Phase Equilibria*, 201, 1.
5. Eden M.R., Jorgensen S.B., Gani R. and M.M. El-Halwagi (2004), *Chem. Eng.Proc.*, 43, 595.
6. Papadopoulos A.I. and P. Linke (2006a), *Chem. Eng. Science*, 61(19), 6316.
7. Papadopoulos A.I. and P. Linke (2006b), *AIChE J.*, 52(3), 1057.
8. Cheng H.C. and F.S. Wang (2007), *Chem. Eng. Sci.*, 62(16), 4316.
9. Seferlis P. and J. Grievink, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40, 1673-1685, 2001.
10. Seferlis P. and J. Grievink, *Comput. Chem. Eng.*, 25, 177-188, 2001.
11. Seferlis P., and J. Grievink, 326-351, "*The Integration of Process Design and Control*", P. Seferlis and M. C. Georgiadis (Eds), Elsevier Science B.V., Amsterdam, 2004.