

**ΜΕΘΟΔΟΣ ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΗΣ ΑΝΟΠΤΗΣΗΣ ΜΕ ΕΞΟΥΡΥΞΗ ΚΑΙ ΑΞΙΟΠΟΙΗΣΗ  
ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ ΓΙΑ ΤΗΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΙΚΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ  
ΥΠΟ ΑΒΕΒΑΙΟΤΗΤΑ**

**Α.Ι. Παπαδόπουλος, Π. Σεφερλής**

Ινστιτούτο Τεχνικής Χημικών Διεργασιών, ΕΚΕΤΑ, Θέρμη 57001, Θεσσαλονίκη  
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη 54124

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Στην παρούσα εργασία προτείνεται μια νέα προσέγγιση για την αποτελεσματική βελτιστοποίηση διεργασιών υπό αβεβαιότητα με χρήση της μεθόδου της Στοχαστικής Προσομοιωμένης Ανόπτωσης (StA). Η προτεινόμενη προσέγγιση εστιάζει στην αποτελεσματικότερη διαχείριση της διαδικασίας λήψης και αξιοποίησης δειγμάτων από μια συνάρτηση πιθανότητας η οποία αναπαριστά την αβέβαιη συμπεριφορά διαφόρων παραμέτρων των διεργασιών που βελτιστοποιούνται με την χρήση Στοχαστικής Προσομοιωμένης Ανόπτωσης. Συγκεκριμένα, κατά το πρώτο στάδιο της προτεινόμενης προσέγγισης εφαρμόζεται διαχωρισμός των σημείων του τυχαίου δείγματος σε μικρές συμπαγείς ομάδες σημείων που έχουν όμοιες τιμές με χρήση μεθόδων εξόρυξης και ομαδοποίησης δεδομένων. Στη συνέχεια επιλέγεται ένα αντιπροσωπευτικό σημείο από κάθε ομάδα με χρήση στατιστικών κριτηρίων, το οποίο εισάγεται στο στάδιο της προσομοίωσης της διεργασίας και υπολογίζεται η τιμή της αντίστοιχης αντικειμενικής συνάρτησης. Η επανάληψη αυτής της διαδικασίας για όλα τα διαθέσιμα αντιπροσωπευτικά σημεία επιτρέπει την προσαρμογή τους σε ένα συνεχές μοντέλο με χρήση μεθόδων παλινδρόμησης. Το εν λόγω μοντέλο επιτρέπει την πρόβλεψη της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης των υπολειπόμενων σημείων που βρίσκονται μέσα στις υπάρχουσες ομάδες με μεγάλη ακρίβεια. Αποφεύγεται έτσι το χρονοβόρο στάδιο προσομοίωσης της διεργασίας για την πλειοψηφία των διαθέσιμων σημείων, αντικαθιστάμενο από την υπολογιστικά ταχεία, σε σχέση με την προσομοίωση της διεργασίας, εφαρμογή των μεθόδων ομαδοποίησης και παλινδρόμησης. Η προτεινόμενη μέθοδος υλοποιείται μέσα από παραδείγματα ακαδημαϊκού και βιομηχανικού ενδιαφέροντος.

**ΕΙΣΑΓΩΓΗ**

Η μέθοδος της Προσομοιούμενης Ανόπτωσης (Simulated Annealing) έχει χρησιμοποιηθεί ευρέως στην βελτιστοποίηση διαγραμμάτων ροής φυσικοχημικών διεργασιών και προϊόντων, ενώ η μέθοδος της Στοχαστικής Ανόπτωσης (StA) [1-4] αναπτύχθηκε ώστε να λαμβάνονται υπόψη οι συνθήκες αβεβαιότητας στην βελτιστοποίηση διεργασιών και προϊόντων. Σε αυτή την περίπτωση η προσομοίωση της αβεβαιότητας στο σχεδιαστικό πρόβλημα γίνεται με χρήση μιας κατανομής πιθανότητας η οποία αντιπροσωπεύει τις διαφορετικές πιθανές καταστάσεις των αβέβαιων παραμέτρων, που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν τις μεταβαλλόμενες λειτουργικές συνθήκες της διεργασίας ή την έλλειψη κατάλληλων σχεδιαστικών δεδομένων για τα χρησιμοποιούμενα σχεδιαστικά μοντέλα. Κατά την εκτέλεση της μεθόδου StA πραγματοποιείται δειγματοληψία τυχαίων δειγμάτων για τις αβέβαιες παραμέτρους από την κατανομή πιθανότητας, τα οποία προσομοιώνονται ένα προς ένα για κάθε σύνολο τιμών των σχεδιαστικών μεταβλητών. Προφανώς, ο αριθμός των δειγμάτων είναι ένας σημαντικός παράγοντας στην αποτελεσματικότητα εφαρμογής της StA. Μεγάλος αριθμός δειγμάτων απαιτείται ώστε να εξαχθούν βέλτιστα σχεδιαστικά αποτελέσματα διατηρώντας μια πραγματική απεικόνιση των αβέβαιων συνθηκών στο σχεδιαστικό πρόβλημα, ωστόσο αυτό οδηγεί σε μεγάλο αριθμό προσομοιώσεων και αύξηση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου. Η StA επιτρέπει την λήψη μικρού αριθμού δειγμάτων στα αρχικά στάδια εκτέλεσης του αλγορίθμου αντισταθμίζοντας την απώλεια δειγμάτων με μια ειδικά διαμορφωμένη συνάρτηση ποινής που επιβάλλεται στην αντικειμενική συνάρτηση. Όταν εντατικοποιείται η αλγοριθμική έρευνα προς την κατεύθυνση ανεύρεσης του βέλτιστου σημείου επιβάλλεται η

λήψη μεγάλων δειγμάτων με χρήση μιας ανάλογης συνάρτησης ποιής. Ωστόσο, η τυχαία επιλογή νέου αριθμού δειγμάτων σε κάθε αλγοριθμική επανάληψη, που επιβάλλεται στην StA με τον ίδιο τρόπο που γίνεται και η επιλογή νέας τιμής σχεδιαστικών μεταβλητών, δεν εμπεριέχει κάποιον αλγοριθμικό μηχανισμό που να αποτρέπει την λήψη μεγάλου αριθμού δειγμάτων ακόμη και στα αρχικά στάδια εκτέλεσης του αλγορίθμου. Επιπλέον, η επιβεβλημένη λήψη μεγάλου αριθμού δειγμάτων κατά την εντατικοποίηση της αλγοριθμικής έρευνας καθιστά την χρήση της StA υπολογιστικά ασύμφορη σε περίπλοκα προβλήματα σχεδιασμού διεργασιών με πολλαπλές αβέβαιες μεταβλητές.

### ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ

Η υπολογιστική απόδοση της StA μπορεί να βελτιωθεί σημαντικά με χρήση μεθόδων εξόρυξης δεδομένων για την κατάλληλη διαχείριση της διαδικασίας λήψης και αξιοποίησης δειγμάτων από μια συνάρτηση πιθανότητας, η οποία αναπαριστά την αβέβαιη συμπεριφορά διαφόρων παραμέτρων των διεργασιών που βελτιστοποιούνται. Τα βασικά στάδια της μεθόδου που προτείνεται ώστε να μειωθεί δραστικά ο χρόνος που απαιτείται για την εφαρμογή της StA σε προβλήματα βελτιστοποίησης διεργασιών φαίνονται στο Σχήμα 1. Τα στάδια της προτεινόμενης μεθόδου οριοθετούνται ανάμεσα στις διακεκομμένες γραμμές, ενώ τα υπόλοιπα στάδια χρησιμοποιούνται και στην υπάρχουσα μέθοδο [1-4].

<p>1. Αρχικοποίηση παραμέτρων και μεταβλητών</p> <p>2. Όσο <math>T &gt; T_\tau</math>, εκτέλεση των παρακάτω <math>m=1, N</math> επαναλήψεων:</p> <p>2.1 Υπολογισμός των τιμών <math>x_m</math> των σχεδιαστικών μεταβλητών με εφαρμογή μεταβολών στις τιμές <math>x_{m-1}</math> (συνεχής, διακριτές) των σχεδιαστικών μεταβλητών.</p> <p>-----</p> <p>2.2 Εκτέλεση δειγματοληψίας σταθερού αριθμού δειγμάτων <math>i=1, N_{samp}</math> από τις κατανομές πιθανότητας που αντιπροσωπεύουν τις αβέβαιες παραμέτρους</p> <p>2.3 Εφαρμογή της μεθόδου ομαδοποίησης, διαχωρισμός των <math>N_{samp}</math> δειγμάτων σε <math>k=1, N_{clust}</math> ομάδες και καθορισμός της τιμής του στατιστικού κέντρου <math>u_k</math> της κάθε ομάδας</p> <p>2.4 Εκτέλεση των παρακάτω <math>k=1, N_{clust}</math> επαναλήψεων:</p> <p>2.4.1 Προσομοίωση του σχεδιαστικού μοντέλου</p> <p>2.4.2 Υπολογισμός της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης <math>OF(x_m, u_k)</math></p> <p>2.5 Προσαρμογή μοντέλου συσχέτισης της μορφής <math>OF(x_m, u_k) = f(u_k)</math> με εφαρμογή μεθόδου παλινδρόμησης για <math>k=1, N_{clust}</math> σημεία</p> <p>2.6 Πρόβλεψη της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης <math>OF(x_m, u_i)</math> για όλα τα διαθέσιμα δείγματα <math>i=1, N_{samp}</math> με χρήση του μοντέλου συσχέτισης</p> <p>-----</p> <p>2.7 Υπολογισμός της τροποποιημένης αντικειμενικής συνάρτησης</p> $F(x_m) = \frac{\sum_{i=1}^{N_{samp}} OF(x_m, u_i)}{N_{samp}}$ <p>2.8 Υπολογισμός της διαφοράς <math>\Delta E = F(x_m) - F(x_{m-1})</math> και έλεγχος των παρακάτω περιπτώσεων:</p> <p>2.8.1 Αν <math>\Delta E \leq 0</math> η νέα κατάσταση γίνεται αποδεκτή με <math>P=1</math></p> <p>2.8.2 Αν <math>\Delta E &gt; 0</math> η νέα κατάσταση γίνεται αποδεκτή με πιθανότητα <math>P = \exp(-\Delta E/T)</math></p> <p>3. Ανάνεωση της <math>T</math> και έλεγχος των παρακάτω περιπτώσεων:</p> <p>3.1 Αν <math>T &gt; T_\tau</math> επιστροφή στο βήμα 2</p> <p>3.2 Αν <math>T &lt; T_\tau</math> παύση εκτέλεσης αλγορίθμου και λήψη βέλτιστης λύσης υπο αβεβαιότητα</p>
---

Σχήμα 1: Βασικά στάδια προτεινόμενης μεθόδου

### Περιγραφή μεθόδου

Αρχικά, το σύνολο δειγμάτων, που αποτελείται από  $N_{samp}$  σημεία, παράγεται από τις κατανομές πιθανότητας που επιλέχθηκαν ως αντιπροσωπευτικές των αβέβαιων παραμέτρων ( $u$ ) και διαχωρίζεται σε έναν αριθμό από ομάδες  $N_{clust}$  με χρήση αλγορίθμου ομαδοποίησης (clustering). Για κάθε μια από τις διαθέσιμες ομάδες υπολογίζεται το στατιστικό κέντρο ( $u_k$ ), η τιμή του οποίου θεωρείται κατά προσέγγιση αντιπροσωπευτική για όλα τα σημεία που υπάρχουν σε κάθε ομάδα. Αυτή η προσέγγιση είναι βάσιμη, γιατί ο αλγόριθμος ομαδοποίησης διαχωρίζει το σύνολο των δειγμάτων με στόχο την δημιουργία ομάδων που αποτελούνται από

σημεία με όμοιες τιμές, ενώ οι τιμές των κέντρων των ομάδων διαφέρουν σημαντικά μεταξύ τους, αναδεικνύοντας ποσοτικά τον ξεκάθαρο διαχωρισμό ανάμεσα στις ομάδες. Το κέντρο της κάθε ομάδας εισάγεται στην προσομοίωση του σχεδιαστικού μαθηματικού μοντέλου που χρησιμοποιείται για τη διεργασία και υπολογίζεται η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης  $OF(x_m, u_k)$  που αντιστοιχεί στο κέντρο της κάθε ομάδας ( $u_k$ ) (όπου  $x_m$  είναι ο πίνακας που περιέχει τις τιμές των σχεδιαστικών μεταβλητών). Στη συνέχεια γίνεται προσαρμογή και υπολογισμός των σταθερών συντελεστών ενός συνεχούς μοντέλου που συσχετίζει τις τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων, η οποία έχει τον ρόλο των εξαρτημένων μεταβλητών του μοντέλου, με τα αντίστοιχα κέντρα των ομάδων τα οποία είναι οι ανεξάρτητες μεταβλητές στο μοντέλο. Με βάση αυτό το μοντέλο είναι δυνατό να προβλεφτούν οι τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων  $OF(x_m, u_i)$  για όλο το σετ των διαθέσιμων σημείων ( $u_i$ ), αποφεύγοντας έτσι την προσομοίωση της πλειοψηφίας των τιμών των αβέβαιων παραμέτρων που αντιστοιχούν στα σημεία ( $u_i$ ) και εμπεριέχονται στο δείγμα. Στη συνέχεια ακολουθεί ο υπολογισμός της τροποποιημένης αντικειμενικής συνάρτησης  $F(x_m)$  ως μέσος όρος των τιμών των  $OF(x_m, u_i)$ , χωρίς να απαιτείται η επιβολή ποινών στην αντικειμενική συνάρτηση, όπως τυπικά γίνεται στον αλγόριθμο StA.

#### **Κύριες παράμετροι εφαρμογής μεθόδου**

Ο αριθμός των ομάδων  $N_{clust}$  στις οποίες διαχωρίζεται το αρχικό σύνολο των δειγμάτων είναι μια παράμετρος που εισάγεται από το χρήστη και επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό την εφαρμογή της προτεινόμενης μεθόδου. Αφενός απαιτείται ένας μεγάλος αριθμός ομάδων ώστε να υπάρχουν λίγα σημεία σε κάθε ομάδα και να γίνεται καλύτερη αντιπροσώπηση των σημείων από το στατιστικό κέντρο της κάθε ομάδας, οπότε και θα διευκολυνθεί η ανάπτυξη ενός μοντέλου συσχέτισης με βελτιωμένες δυνατότητες πρόβλεψης στο επόμενο στάδιο. Αφετέρου, μεγάλος αριθμός ομάδων θα οδηγήσει σε αυξημένο αριθμό προσομοιώσεων και επιβράδυνση της εκτέλεσης του αλγορίθμου βελτιστοποίησης. Για να διατηρηθεί μια ισορροπία ανάμεσα στον απαιτούμενο αριθμό των δημιουργούμενων ομάδων και στον αριθμό των προσομοιώσεων επιλέγεται από το χρήστη ένα εύρος από τιμές πιθανών ομάδων  $[k_{min}, k_{max}]$  μέσα στο οποίο εφαρμόζεται η ομαδοποίηση. Ο αριθμός των ομάδων που περιγράφει με βέλτιστο τρόπο το διαθέσιμο σύνολο των δειγμάτων μέσα σε αυτό το εύρος αποφασίζεται με βάση μια μαθηματική μέθοδο που υπολογίζει τα στατιστικά χαρακτηριστικά των δημιουργούμενων ομάδων και ονομάζεται κανόνας εγκυρότητας ομαδοποίησης [5]. Ο βέλτιστος αριθμός των ομάδων που επιλέχθηκε με αυτό τον τρόπο εισάγεται στο στάδιο της προσομοίωσης του σχεδιαστικού μοντέλου ώστε να υπολογιστεί η τιμή των αντίστοιχων αντικειμενικών συναρτήσεων. Η προσαρμογή του μοντέλου συσχέτισης που ακολουθεί και η αξιολόγηση της ποιότητας των προβλέψεών του μέσω κατάλληλου δείκτη (π.χ. συντελεστής πολλαπλής εξάρτησης  $R^2$ ) επιτρέπει την ανεύρεση, μέσα από δοκιμές, του εύρους  $[k_{min}, k_{max}]$  με τη βοήθεια του οποίου επιτυγχάνεται η ανάπτυξη ενός μοντέλου ακριβών προβλέψεων που προκύπτει από όσο το δυνατό λιγότερες προσομοιώσεις της διεργασίας.

Η ακρίβεια των προβλέψεων του μοντέλου προσδιορίζεται από υπολογισμό του συντελεστή πολλαπλής εξάρτησης  $R^2$  (coefficient of multiple determination), ο οποίος απαιτείται για τον προσδιορισμό του κατάλληλου αριθμού των χρησιμοποιούμενων ομάδων  $N_{clust}$ , όπως αναφέρθηκε προηγουμένα. Ο συντελεστής  $R^2$  σε αυτή την περίπτωση δεν συγκρίνει τις τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων που προήλθαν από προσομοίωση της διεργασίας για τα κέντρα της κάθε ομάδας με τις αντίστοιχες τιμές που προήλθαν από άμεση πρόβλεψή τους από το μοντέλο συσχέτισης, όπως θα αναμενόταν. Αντίθετα, μετά την πρόβλεψη των τιμών των αντικειμενικών συναρτήσεων  $OF(x_m, u_i)$  με χρήση του μοντέλου, τα σημεία ( $u_i$ ) που εμπεριέχονται σε κάθε ομάδα αντικαθίστανται από τις αντίστοιχες τιμές των  $OF(x_m, u_i)$ , οπότε υπολογίζονται τα κέντρα των ομάδων με βάση τις τιμές των διαθέσιμων αντικειμενικών συναρτήσεων που έχουν προέλθει από τις προβλέψεις του μοντέλου. Έτσι, ενσωματώνονται στον υπολογισμό του  $R^2$  πληροφορίες σχετικά με τη δυνατότητα του μοντέλου να παρέχει ακριβείς προβλέψεις. Σημειώνεται ότι ο υπολογισμός του  $R^2$  δεν ενσωματώνεται στην επαναληπτική αλγοριθμική διαδικασία του Σχήματος 1, γιατί δεν επηρεάζει τις επαναληπτικές λειτουργίες λήψης αποφάσεων της προτεινόμενης μεθόδου, αλλά χρησιμοποιείται σε δοκιμές που άπτονται της ποιότητας των παρεχόμενων προβλέψεων, όπως εξηγήθηκε παραπάνω.

Επίσης, η προσαρμογή του μοντέλου συσχέτισης γίνεται με τη μέθοδο της γραμμικής παλινδρόμησης πολλαπλών μεταβλητών με χρήση ελαχίστων τετραγώνων. Για τον προσδιορισμό της τάξης των χρησιμοποιούμενων μοντέλων και τον αριθμό των όρων που θα περιλαμβάνονται γίνονται δοκιμές με γνώμονα την τιμή του  $R^2$  σχετικά την τελική μορφή που χρησιμοποιείται στον προτεινόμενο αλγόριθμο, ανάλογα με το πρόβλημα βελτιστοποίησης που επιλύεται. Έτσι, απαιτούνται δοκιμές με χρήση ενός τεστ σημαντικότητας (π.χ. F-test) ώστε να προσδιοριστεί αν η βελτίωση που παρατηρείται στην τιμή του  $R^2$  κατά την προσθήκη όρων στο χρησιμοποιούμενο μοντέλο εξηγεί τις διακυμάνσεις των δεδομένων και δεν είναι αποτέλεσμα χρήσης μεγάλου αριθμού παραμέτρων στο μοντέλο.

### ΕΠΙΛΥΣΗ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

Η προτεινόμενη μέθοδος υλοποιείται με χρήση ενός αριθμητικού παραδείγματος στο οποίο τον ρόλο του μαθηματικού μοντέλου προσομοίωσης παίρνει η παρακάτω συνάρτηση κόστους [1]:

$$OF_1(y_1, y_2, y_3, u_1, u_2) = \sum_{i=1}^{y_1} ((y_1 - 3)^2 + (u_1 y_2^i - 3)^2 + (u_2 y_3^i - 3)^2) \quad (1)$$

Η διακριτή μεταβλητή  $y_1$  της εξίσωσης (1) παίρνει τιμές στο διάστημα [1,5], ενώ οι διακριτές μεταβλητές  $y_2^i$  και  $y_3^i$  μπορούν να πάρουν οποιαδήποτε τιμή στο ίδιο διάστημα ανάλογα με την τιμή της  $y_1$ . Οι αβέβαιες παράμετροι  $u_1$  και  $u_2$  ακολουθούν τις κατανομές που φαίνονται στον Πίνακα 1, καθώς επίσης φαίνεται και το εύρος ομαδοποίησης που χρησιμοποιήθηκε σε κάθε περίπτωση και το μοντέλο συσχέτισης που έδωσε τις υψηλότερες τιμές  $R^2$ , όπως αυτά καθορίστηκαν μετά από δοκιμές. Οι συντελεστές  $a_i$  ( $i=1,6$ ) υπολογίζονται από τον αλγόριθμο παλινδρόμησης σε κάθε επανάληψη. Συνολικά, εξετάζονται τρεις περιπτώσεις, όπου η απόδοση του προτεινόμενου αλγορίθμου, που θα ονομάζεται StACMF για τις ανάγκες του παραδείγματος, δοκιμάζεται σε σχέση με τον αλγόριθμο StA ως προς τον αριθμό των προσομοιώσεων της εξίσωσης (1) που απαιτούνται από τους δύο αλγορίθμους για την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Τα αποτελέσματα αυτής της σύγκρισης φαίνονται στον Πίνακα 2 στη στήλη με τίτλο «Λόγος απόδοσης», που δείχνει τον λόγο του αριθμού των προσομοιώσεων που απαιτούνται από τον αλγόριθμο StACMF ως προς τον αντίστοιχο αριθμό που απαιτούνται από τον αλγόριθμο StA. Επίσης, ο Πίνακας 2 δείχνει τη βέλτιστη λύση που βρέθηκε και από τους δύο αλγορίθμους και την ελάχιστη τιμή του  $R^2$  που υπολογίστηκε ενδεικτικά για όλες τις επαναλήψεις σε κάθε εκτέλεση του αλγορίθμου. Ο αριθμός δειγμάτων που λαμβάνονται από τις χρησιμοποιούμενες κατανομές είναι σταθερά 150 για τον αλγόριθμο StACMF, ενώ επιτρέπεται η διακύμανσή του στο διάστημα [20,150] για τον αλγόριθμο StA.

**Πίνακας 1:** Δεδομένα παραδείγματος

Περίπτωση	$u_1$	$u_2$	Εύρος ομαδοποίησης	Μοντέλο συσχέτισης
1	N(0,2)	N(0,2)	25-35	$OF(u_1, u_2) = a_1 + a_2 u_1 + a_3 u_2 + a_4 u_1 u_2 + a_5 u_2^2 + a_6 u_1 u_2^2$
2	N(0,2)	N(0,2)	15-25	
3	N(0,2)	U(1.5,3)	20-30	

**Πίνακας 2:** Αποτελέσματα βελτιστοποίησης παραδείγματος

Περίπτωση	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$R^2$	Λόγος απόδοσης
1	3	3,3,3	3,3,3	>0.999	0.39
2	3	3,3,3	3,3,3	>0.999	0.26
3	3	3,3,3	1,1,1	>0.996	0.28

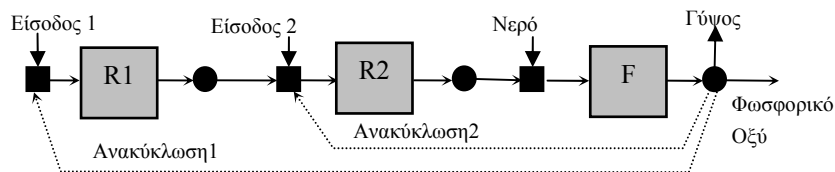
Τα αποτελέσματα του Πίνακα 2 δείχνουν Λόγους απόδοσης 0.39, 0.26 και 0.28 για τις περιπτώσεις 1, 2, 3, αντίστοιχα, που υποδεικνύουν την επίτευξη αντίστοιχων μειώσεων της τάξης 61%, 74% και 72% για τον αριθμό των προσομοιώσεων που απαιτούνται για την εύρεση της βέλτιστης λύσης από τον αλγόριθμο StACMF. Επίσης, η τιμή του  $R^2$  είναι πολύ υψηλή σε όλες τις περιπτώσεις, δείχνοντας ότι το χρησιμοποιούμενο μοντέλο πραγματοποιεί ακριβείς προβλέψεις. Το γεγονός ότι και οι δύο αλγόριθμοι βρίσκουν τη βέλτιστη λύση δείχνει ότι οι

πολύ μικρές αποκλείσεις που παρατηρούνται στις προβλέψεις κατά την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης από τον αλγόριθμο StACMF, όπως αυτές εκφράζονται μέσα από το  $R^2$ , δεν είναι ικανές να αποτρέψουν τον StACMF από την εύρεση των βέλτιστων σημείων. Επιπλέον, η χρήση μικρότερου εύρους ομαδοποίησης στην περίπτωση 2 οδηγεί σε καλύτερη απόδοση από ότι στην περίπτωση 1, χωρίς αυτό να έχει επιπτώσεις στην βέλτιστη λύση.

## ΕΠΛΥΣΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

### Περιγραφή προβλήματος και στόχοι βελτιστοποίησης

Η προτεινόμενη μέθοδος χρησιμοποιείται για την επίλυση προβλήματος βιομηχανικού ενδιαφέροντος που αφορά τον σχεδιασμό και βελτιστοποίηση διεργασίας παραγωγής φωσφορικού οξέος (ΦΟ) υπό αβεβαιότητα. Το διάγραμμα ροής παραγωγής ΦΟ απεικονίζεται στο Σχήμα 2. Οι πρώτες ύλες (Είσοδος 1,2) εισέρχονται στους αντιδραστήρες R1 και R2 και αποτελούνται από ορυκτό πλούσιο σε φωσφορικά άλατα, θειϊκό οξύ και αραιωμένο φωσφορικό οξύ (Ανακύκλωση 1,2). Τα προϊόντα του αντιδραστήρα R2 οδηγούνται στο φίλτρο (F) όπου διαχωρίζεται με μηχανικό διαχωρισμό το ΦΟ από το θειϊκό ασβέστιο (φωσφογύψο), που είναι και το κύριο παραπροϊόν της αντίδρασης. Ανάμεσα στα κύρια συστατικά που περιέχονται στους αντιδραστήρες περιλαμβάνεται το θειϊκό ασβέστιο σε κρυσταλλική μορφή που συνυπάρχει με υγρό ΦΟ. Οι συνθήκες αντίδρασης επηρεάζονται σε μεγάλο βαθμό από το μέγεθος των κόκκων του ορυκτού που εισέρχονται στους αντιδραστήρες και από το ποσοστό ανακύκλωσης του ανακτώμενου από το φίλτρο ΦΟ στους αντιδραστήρες. Οι δύο αυτοί παράγοντες καθορίζουν τον βαθμό της ανάκτησης του φωσφόρου από το ορυκτό υπό την μορφή ΦΟ και τον σχηματισμό των κρυστάλλων θειϊκού ασβεστίου, τα φυσικοχημικά χαρακτηριστικά των οποίων καθορίζουν τη βέλτιστη λειτουργία του φίλτρου. Έτσι, στα πλαίσια της παρούσας εργασίας ως στόχος της βελτιστοποίησης καθορίζεται η ανεύρεση του ποσοστού ανακύκλωσης του ανακτώμενου από το φίλτρο ΦΟ προς τους αντιδραστήρες (Ανακύκλωση 1 και 2), για την ελαχιστοποίηση του κόστους του παραγόμενου προϊόντος. Επιπλέον, το μέγεθος των εισερχόμενων κόκκων στους αντιδραστήρες είναι μια παράμετρος με μεγάλη αβεβαιότητα λόγω των παρουσιαζόμενων διακυμάνσεων, που οφείλονται στις μεθόδους και συνθήκες εξόρυξης και κονιορτοποίησης, ανάμεσα σε άλλα. Έτσι, το μέγεθος των κόκκων θεωρείται ως αβέβαιη παράμετρος και εκφράζεται μαθηματικά στο πρόβλημα βελτιστοποίησης υπό αβεβαιότητα από τη μέση ακτίνα κόκκου. Τα πολύπλοκα μαθηματικά μοντέλα που απαιτούνται για την προσομοίωση του διαγράμματος ροής αναλύονται στο [6], ενώ λεπτομέρειες σχετικά με το γενικευμένο σχεδιαστικό πλαίσιο και την λεπτομερή αντικειμενική συνάρτηση που χρησιμοποιούνται για την βελτιστοποίηση του διαγράμματος ροής παρέχονται στα [6-7]. Ο στόχος αυτής της εργασίας είναι να παρουσιαστεί η εφαρμογή της προτεινόμενης μεθόδου StACMF στο συγκεκριμένο πρόβλημα βελτιστοποίησης και να συγκριθεί η απόδοσή της σε σχέση με την μέθοδο StA.



Σχήμα 2: Διάγραμμα ροής παραγωγής φωσφορικού οξέος

### Συζήτηση αποτελεσμάτων

Τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης υπό αβεβαιότητα του διαγράμματος ροής παραγωγής ΦΟ και της υπολογιστικής απόδοσης παρουσιάζονται συγκριτικά για τους αλγόριθμους στους Πίνακες 3,4. Συγκεκριμένα, ο Πίνακας 3 παρουσιάζει τις βέλτιστες λύσεις για τις σχεδιαστικές μεταβλητές (Ανακύκλωση 1 και 2) που βρέθηκαν από τους δύο αλγόριθμους, καθώς και τις τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων (ΑΣ) που αντιστοιχούν σε αυτές. Οι μικρές διαφορές



που παρατηρούνται στην βέλτιστη λύση και στην αντικειμενική συνάρτηση οφείλονται στα γενικότερα χαρακτηριστικά του αλγορίθμου της Προσομοιωμένης Ανόπτησης, που δεν καταλήγει σε αυστηρώς μαθηματικά βέλτιστες λύσεις, αλλά σε μια κατανομή βέλτιστων σεναρίων τα οποία παρουσιάζουν μικρές αποκλίσεις [8]. Το βέλτιστο ποσοστό ανακύκλωσης από το ρεύμα εξόδου του φίλτρου προς τους αντιδραστήρες κυμαίνεται προσεγγιστικά στο 56% και 15% για τα ρεύματα ανακύκλωσης 1 και 2, αντίστοιχα. Στις περιπτώσεις 2 και 3 αναφέρεται η τιμή της βέλτιστης αντικειμενικής συνάρτησης που προβλέφθηκε με βάση τα αλγοριθμικά βήματα του StACMF. Για να διασταυρωθούν οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης που προέκυψαν από χρήση του μοντέλου συσχέτισης επιβλήθηκε υπολογισμός της αντικειμενικής συνάρτησης στη βέλτιστη λύση μέσα από προσομοίωση των ίδιων δειγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν και από τον αλγόριθμο StACMF. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην τελευταία στήλη του Πίνακα 1 για τις περιπτώσεις 2 και 3 δείχνουν ότι το ποσοστό της διαφοράς που προκύπτει ανάμεσα στις αντικειμενικές συναρτήσεις που προέκυψαν από το μοντέλο συσχέτισης και την προσομοίωση όλων των δειγμάτων είναι πολύ μικρό. Συμπερασματικά, φαίνεται ότι οι πολύ μικρές αποκλίσεις που παρουσιάζονται κατά τον υπολογισμό της αντικειμενικής συνάρτησης από τον αλγόριθμο StACMF δεν αποτρέπουν την ανεύρεση της βέλτιστης λύσης, ενώ η χρήση λιγότερων ομάδων στην περίπτωση 3 οδηγεί επίσης στην ανεύρεση της βέλτιστης λύσης, πάντα στα πλαίσια της χρήσης ενός αλγορίθμου τύπου Προσομοιωμένης Ανόπτησης.

**Πίνακας 3:** Συγκριτικά αποτελέσματα βελτιστοποίησης διαγράμματος ροής ΦΟ

Περίπτωση	Ανακύκλωση 1 (% του ρεύματος εξόδου φίλτρου)	Ανακύκλωση 2 (% του ρεύματος εξόδου φίλτρου)	Κόστος προϊόντος (\$/τόνο ΦΟ)	% διαφοράς από ΑΣ υπολογισμένης από προσομοίωση
1-StA	56.3	14.8	616.49	-
2-StACMF (30-40 ομάδες)	56.1	15.1	615.19	0.06
3-StACMF (20-30 ομάδες)	56.1	15.0	615.46	0.04

Στον Πίνακα 4 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της υπολογιστικής απόδοσης των αλγορίθμων σε συνδυασμό με τον συντελεστή  $R^2$  για τον StACMF. Σημειώνεται το επιτρεπόμενο διάστημα δειγματοληψίας για τον StA ήταν [20,70] για κάθε επανάληψη, ενώ για τον StACMF λαμβανόταν σταθερά 150 δείγματα σε κάθε επανάληψη. Αυτό έγινε γιατί όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα του Πίνακα 4 ο StA είναι ήδη πιο αργός από τον StACMF για το συγκεκριμένο διάστημα δειγματοληψίας, υποδεικνύοντας ότι για μεγαλύτερο διάστημα δειγματοληψίας ο StA θα χρειαζόταν πολύ μεγαλύτερο χρόνο εκτέλεσης. Συγκεκριμένα, ο Πίνακας 4 δείχνει ότι εκτελούνται κατά μέσο όρο 55 προσομοιώσεις ανά επανάληψη από τον StA στο διάστημα δειγματοληψίας [20,70], σε αντίθεση με τον StACMF που απαιτεί 38 και 26 για τις περιπτώσεις 2 και 3, αντίστοιχα. Επιπλέον, ο συνολικός χρόνος που απαιτείται ανά επανάληψη με βάση τον μέσο όρο των προσομοιώσεων είναι στα 2.684 sec για τον StA και στα 1.884 sec και 1.226 sec για τις περιπτώσεις 2 και 3 του StACMF, αντίστοιχα, όπου έχει συνυπολογιστεί και ο χρόνος που χρειάζεται για εφαρμογή των αλγορίθμων ομαδοποίησης και παλινδρόμησης. Αυτό δείχνει μία μείωση από 30% έως 55% στον χρόνο εκτέλεσης του αλγορίθμου με χρήση του StACMF έναντι του StA, που αναμένεται να αυξηθεί σημαντικά σε περίπτωση εκτέλεσης του StA στο διάστημα [20,150]. Μειώσεις αυτού του μεγέθους είναι πολύ σημαντικές δεδομένου ότι ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για τον σχεδιασμό διαγραμμάτων ροής διεργασιών υπό αβεβαιότητα μπορεί να ανέλθει σε πολύ υψηλά επίπεδα (της τάξης πολλών ωρών ή ημερών). Επιπλέον, αναφέρεται και ο συντελεστής  $R^2$ , που επιβεβαιώνει τις ακριβείς προβλέψεις του χρησιμοποιούμενου μοντέλου συσχέτισης για τις τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης.

**Πίνακας 4:** Συγκριτικά αποτελέσματα απόδοσης αλγορίθμων

Περίπτωση	Μέσος όρος προσομοιώσεων ανά επανάληψη	Συνολικός χρόνος (sec) ανά επανάληψη	Συντελεστής πολλαπλής εξάρτησης R <sup>2</sup>
1-StA	55	2.684	-
2-StACMF (30-40 ομάδες)	38	1.884	>0.998
3-StACMF (20-30 ομάδες)	26	1.229	>0.997

**ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ**

Η εφαρμογή της μεθόδου στην επίλυση ενός αριθμητικού προβλήματος και ενός προβλήματος βιομηχανικού ενδιαφέροντος δείχνει ότι ο προτεινόμενος αλγόριθμος βρίσκει τη βέλτιστη λύση εκτελώντας σημαντικά λιγότερες προσομοιώσεις σε σύγκριση με τον υπάρχοντα αλγόριθμο Στοχαστικής Ανόπτησης (StA). Η ομαδοποίηση που υφίσταται το αρχικό σύνολο δειγμάτων επιτρέπει τη μείωση του αριθμού των προσομοιώσεων, ενώ η χρήση ενός στατιστικά αντιπροσωπευτικού σημείου από κάθε ομάδα διευκολύνει την ανάπτυξη ενός μοντέλου ικανού να παρέχει ακριβείς προβλέψεις. Οι ελάχιστες αποκλίσεις που παρουσιάζονται στις τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων που προκύπτουν από το μοντέλο συσχέτισης σε σχέση με εκείνες που προκύπτουν από προσομοίωση των ίδιων σημείων του δείγματος δεν αποτρέπουν τον αλγόριθμο από την εύρεση της βέλτιστης λύσης.

**ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ**

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

**ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**

1. Painton, L., Diwekar, U., (1995), *Europ. J. Oper. Res.*, 83, 489-502.
2. Chaudhuri, P., Diwekar, U., (1996), *AIChE J.*, 42, 3, 742-752.
3. Chaudhuri, P., Diwekar, U., (1999), *AIChE J.*, 45, 8, 1671-1687.
4. Diwekar, U.M., (2003), *Comp. Opt. App.*, 24(2-3), 335-371.
5. Papadopoulos A.I. and P. Linke (2006a), *Chem. Eng. Science*, 61(19), 6316-6336.
6. Papadopoulos A.I. and P. Seferlis (2009), *Chem. Eng. Proc.* 48(1), 493-506.
7. Papadopoulos A.I. and P. Seferlis (2009), *Chem. Prod. Proc. Mod.* 3(1), Art. 52.
8. Papadopoulos A.I. and P. Linke (2004), *Comp. Chem. Eng.*, 28(11), 2391-2406.