

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM VEGYÉSZMÉRNÖKI ÉS BIOMÉRNÖKI KAR OLÁH GYÖRGY DOKTORI ISKOLA

Intervallum Módszerek Alkalmazása Vegyészmérnöki Számításokban

PhD Értekezés

Szerző: Baharev Ali, okleveles vegyészmérnök Témavezető: Rév Endre, MTA doktora

Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani mindazoknak, akik munkámat segítették.

Köszönöm Témavezetőmnek, hogy bármikor fordulhattam hozzá segítségért, továbbá, hogy a kutatómunkám mindig elsőbbséget élvezett, bármennyire is elfoglalt volt.

Volt témavezetőmnél, Dr. Kemény Sándornál végzett tudományos diákköri munka során jöttem rá, hogy érdekelnek a numerikus módszerek és a programozás. Ezért is, és feltétlen támogatásáért, bizalmáért köszönettel tartozom.

A házivédés bírálói, Kollárné Dr. Hunek Klára és Dr. Csendes Tibor, alapos és gondos munkájukkal sokat tettek azért, hogy az értekezés szebb és jobb legyen. Ezúton is köszönöm!

Minden volt tanítómnak köszönettel tartozom. Külön köszönetet szeretnék mondani általános iskolai matematika tanáromnak, Konrád Edénének, aki lelkiismeretes munkájával tudásomat megalapozta.

Kolev professzor útmutatása nélkül az értekezés eredményei szerényebbek lettek volna. Tobias Achterberg önzetlen segítsége is példa értékű.

Végezetül, de nem utolsó sorban, szeretnék köszönetet mondani családomnak, szeretteimnek, valamint barátaimnak türelmükért és a sok biztató, bátorító szóért.

Tartalomjegyzék

Problémafelvetés és célkitűzések	5
I. Irodalmi áttekintés	6
1. Megbízható módszereket igénylő problémák	6
1.1. Fázisok stabilitásának ellenőrzése	8
1.2. Több állandósult állapot	
2. A legrobusztusabb nem megbízható módszerek	11
2.1. Homotópia-folytatásos módszerek	
2.1.1. Homotópia függvény	11
2.1.2. A folytatás módszere	12
2.1.3. A homotópia-folytatásos módszerek előnyei	13
2.1.4. A homotópia-folytatásos módszerek hátrányai	
2.2. Relaxációs eljárások	
3. Megbízható módszerek	
3.1. Egy globális szélsőérték-keresési módszer, az α-BB	
4. Intervallum módszerek	
4.1. A függőségi probléma	
4.2. Túlbecslés csökkentése	
4.3. Egyenletrendszerek megoldása intervallum módszerrel általában	
4.4. A keresési tér szűkítése a linearizált rendszer segítségével	
4.4.1. Intervallum Newton módszerek	
4.4.2. Lineáris paraméteres közrefogás	
4.4.3. Valós együttható-mátrixú közrefogások	
4.5. Vágás	
4.6. Konzisztencia technikák.	
II. Számítási módszerek bemutatása	
1. Intervallum Newton módszer (IN/GS)	
2. Valós együttható-mátrixú közrefogás	
2.1. Linearizálás	
2.2. Szűkítési technikák	
2.2.1. Egyenletenkénti szűkítés (AA/CP)	
2.2.2. Szűkítés a legszűkebb burkoló módszerével	
2.2.3. Lineáris programozás – LP szűkítés (AA/LP)	
3. A számítások hardver és szoftver környezete	
III. Eredmények	
1. A zérushelykereső eljárás algoritmikus vázlata	
2. Linearizálási és szűkítési technikák összehasonlítása	
2.1. Folyadék-folyadék megoszlási feladat	41
2.1.1. Változók	
2.1.2. Egyenletek	
2.1.3. Implementációs részletek	
2.1.4. Numerikus eredmények és értékelésük	
2.2. Ellenáramú gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok számítása	
2.2.1. Változók	
2.2.2. Egyenletek	
2.2.3. Specifikációk és a változók kezdeti intervallumai	
2.2.4. Numerikus eredmények és értékelésük	
3. A zérushelykereső eljárás fejlesztése	
3.1. Linearizálás fejlesztése	
3.2. Az LP szűkítés fejlesztése	

Tartalomjegyzék

3.3. Implementáció fejlesztése	. 57
3.4. Vágás	
3.5. Linearizálás és az implementáció fejlesztésének hatása	. 58
4. Extraktív desztilláció számítása	. 59
4.1. Specifikációk	60
4.2. Változók	60
4.3. Egyenletek	
4.4. Tisztasági követelmények	62
4.5. Változók kiindulási intervallumának számítása	62
4.6. Numerikus eredmények és értékelésük	63
4.7. Feladatspecifikus felezési szabály	64
4.8. LP-szűkítés fejlesztésének hatása	
4.9. Az implementáció korlátai	66
5. Több állandósult állapot számítása	67
5.1. Specifikációk	
5.2. Változók	69
5.3. Egyenletek	
5.4. Változók kezdeti intervallumai	
5.5. Numerikus eredmények és értékelésük	
6. Referencia értékek általános kísérleti tervekkel kimutatható hatásokra	
6.1. Motiváció	
6.2. A számítások menete	
6.3. Numerikus példák és értékelésük	
IV. Új tudományos eredmények összefoglalása tézispontokban	
Közlemények az értekezés témájában	
Egyéb közlemények	
Irodalomjegyzék	
Függelék	96
Nyilatkozat	.97

Problémafelvetés és célkitűzések

A mindennapos vegyészmérnöki munka során használt modellek vizsgálata gyakran nemlineáris egyenletrendszerek megoldását igényli. A gyakorlatban alkalmazott numerikus eljárások esetén a következő problémák merülhetnek fel.

- (a) Ha az iterációt több különböző kezdőpontból elindítva sem találunk megoldást divergencia vagy oszcilláció miatt, akkor nem tudjuk, hogy a feladat valóban nem megoldható, vagy csak a kezdőpontot nem megfelelően becsültük. Alkalmas kezdőpontot választani esetenként igen nehéz.
- (b) Ha a feladatnak nincs megoldása és ennek oka nem triviális, akkor ezt igazolni rendszerint csak a megvalósíthatóság határainak (általában durva közelítéseken alapuló) megkeresésével lehetséges, ha egyáltalán ismert erre kidolgozott elméleti módszertan.
- (c) A véges számábrázolásból fakadó numerikus problémák és / vagy rosszul megválasztott leállási feltétel miatt a kapott végeredmény helytelen lehet, de erről nem szerzünk tudomást.
- (d) Az alkalmazott módszerek egyszerre csak egy megoldás megtalálását teszik lehetővé, és nem szolgáltatnak információt arról, hogy van-e még más megoldás is. Több megoldás feltérképezése rendszerint részletes esettanulmány fáradságos elkészítését jelenti, ami az előbbi pontokban említett problémák miatt nehézkes, bizonytalan lehet.

A fenti problémák mindegyikére megoldást kínálnak az intervallum módszerek. Alkalmazhatóságuknak azonban gátat szab, hogy a számítások már kis feladat (például 10 változó és egyenlet) esetén is a gyakorlat számára elfogadhatatlan ideig tarthatnak. Doktori munkám célja az volt, hogy tanulmányozzam és javítsam az intervallum módszerek alkalmazhatóságát vegyészmérnöki feladatok megoldására. Fontos kritérium volt a kutatás során, hogy a módszer általánosságát megtartsuk, a probléma-specifikus fejlesztéseket mindvégig igyekeztem elkerülni.

I. Irodalmi áttekintés

Az irodalmi áttekintés első felében olyan problémákat mutatok be, amelyeknél tipikusan szembesülhetünk a bevezetőben felvetett nehézségekkel, és a megoldásukra kifejlesztett (nem megbízható) módszerek közül a legjobbnak tartottakat tekintem át. A szétválasztó oszlopok állandósult állapotának számítására szolgáló módszerek közül itt csak az ún. tányéros modellek megoldására szolgáló legrobusztusabb módszereket vázolom. A fejezet második felében a bevezetőben felvetett problémák megoldására alkalmas intervallum módszereket mutatom be, különös tekintettel a legújabb kutatási eredményekre.

1. Megbízható módszereket igénylő problémák

Intervallum módszereket a vegyészmérnöki számítások több területén is sikerrel alkalmaztak (Lin, Gwaltney, Stadtherr 2006). Az általánosan elmondható (Gau, Stadtherr 2002), hogy a gyakorlat számára elfogadható időn belül megoldható modellek rendszerint kis méretűek. Több példát találunk arra, hogy korábban helyesnek vélt eredményről az intervallum módszerek alkalmazásával bebizonyították, hogy az helytelen, és a valódi megoldást is megtalálták. A teljesség igénye nélkül egy felsorolást ezekről alább adok:

- fázis-stabilitás ellenőrzése aktivitási együttható modellt és / vagy köbös állapotegyenletet használva (McKinnon, Mongeau 1998; Tessier, Brennecke, Stadtherr 2000; Stadtherr, Xu, Burgos-Solorzano, Haynes 2007; Hua, Brennecke, Stadtherr 1996, 1998; Xu, Haynes, Stadtherr 2005);
- 2. elektrolit-oldatok folyadék-folyadék egyensúlyának számítása (Simoni, Lin, Brennecke, Stadtherr 2008);
- 3. szilárd-fluidum fázisegyensúlyi számítások (Xu, Scurto, Castier, Brennecke, Stadtherr 2000; Scurto, Xu, Brennecke, Stadtherr 2003);
- 4. adott elegy összes (homogén / reaktív) azeotrop pontjának feltérképezése (Maier, Brennecke, Stadtherr 1998, 2000);
- elegyek kritikus pontjának számítása köbös állapotegyenletből (Stradi, Brennecke, Kohn, Stadtherr 2001);
- 6. modellparaméterek illesztése (Gau, Brennecke, Stadtherr 2000; Gau, Stadtherr 2000, 2002);

- 7. konformációk felderítése (Lin, Stadtherr 2005);
- 8. fázisegyensúly számítása kémiai reakció mellett (Burgos-Solorzano, Brennecke, Stadtherr 2004);
- 9. folyamat-szimulációs feladatok (Schnepper, Stadtherr 1996);
- 10. robusztus szabályozókörök tervezése (Nataraj 2002; Nataraj, Tharewal 2007);
- 11. (intervallum) paraméteres kezdetiérték-feladatok megoldása (Nedialkov, Jackson, Corliss 1999; Lin, Stadtherr 2007abc, 2009);
- 12. peremérték-feladatok megoldása (Lin, Enszer, Stadtherr 2008);
- 13. lineáris programozási feladatok megoldásának ellenőrzése (Keil, Jansson 2006; Jansson 2004; Neumaier, Shcherbina 2004);
- 14. statisztikai függvények megbízható számítása (Wang, Kennedy 1990, 1992, 1994, 1995), ezt alább bővebben kifejtem.

A kutatás és fejlesztés egyik legköltségesebb és legmunkaigényesebb lépése a kísérletek elvégzése. Ezért nagy jelentőségű a kísérletek megtervezése matematikai statisztika segítségével. A bevezető (c) pontjában írt, a véges számábrázolásból fakadó problémák az adott kísérleti tervvel – rögzített bizonyosság mellett – kimutatható legkisebb eltérések meghatározására szolgáló algoritmusoknál is jelentkeznek. Több közlemény arról számol be, hogy az alábbi problémák közül egy vagy több is fellép(het) a számítások során: túl- és / vagy alulcsordulás (Helstorm, Ritcey 1985; Ding 1997; Benton, Krishnamoorthy 2003), végeredményt meghamisító kerekítési hiba (Frick 1990), drasztikusan megugró számításigény vagy a program "lefagyása" (Chattamvelli 1995; Benton, Krishnamoorthy 2003), numerikus instabilitás jegyvesztés miatt (Knüsel, Bablok 1996). Az intervallum módszerek a számított végeredmény egy hibakorlátját automatikusan szolgáltatják, ezáltal kiváló eszközt jelentenek megbízható értékek számításához (Wang, Kennedy 1995).

A nemzetközi és a hazai napi sajtóban is visszhangra talált a Szegedi Tudományegyetem és a BME kutatói (Bánhelyi Balázs, Csendes Tibor, Garay M. Barnabás, Hatvani László 2008) által elért eredmény, J. Hubbard sejtésére adott első egzakt és teljes bizonyítás, mely szerint a kényszererős fékezett inga mutathat kaotikus viselkedést. A tétel bizonyításához intervallum módszer alkalmazására is szükségük volt.

Természetesen sok, megbízható módszerért kiáltó probléma a mai napig megoldatlan. A vegyiparban például igen széles körben elterjedt szétválasztási művelet a desztilláció, melynek tervezése a mindennapos vegyészmérnöki munka részét képezi. A szétválasztási folyamatot leíró részletes matematikai modell megoldására számos eljárás született. Mindezek

ellenére az azeotrop desztilláció (különösen a heteroazeotrop desztilláció) és a reaktív desztilláció állandósult állapotának számításához kapcsolódó problémák részben máig sincsenek tökéletesen megoldva.

Az alábbiakban néhány problémát jobban kifejtek, hogy világossá váljon a megbízható módszerek iránti igény oka. Ezekhez a problémákhoz közvetlenül vagy áttételesen kapcsolódik disszertációm anyaga is.

1.1. Fázisok stabilitásának ellenőrzése

Heteroazeotrop desztilláció hagyományos számításánál a bevezetőben foglaltak mellett még egy újabb nehézséggel is szembesülünk, mert a kémiai potenciálok egyenlőségét számítjuk, ami az egyensúly szükséges, de nem elégséges feltétele. Ha az iteráció konvergált és numerikus problémák sem léptek fel, akkor ellenőrizni kell a kapott megoldást a fázisok stabilitása szempontjából is, hogy kizárjuk a hamis és triviális megoldásokat. Ez az ellenőrzés egy bonyolult, nem konvex célfüggvény globális szélsőértékének megkeresését igényelné, azonban a hagyományos módszerek csak lokális szélsőértéket garantálnak.

A fázisegyensúlyi számításokhoz rendszerint a Michelsen (1982ab) által kidolgozott kétlépcsős módszert alkalmazzák. Ennek a módszernek egyik lépcsője a fázis-stabilitás ellenőrzése. Egy adott összetételű fázist ellenőrzünk azt vizsgálva, hogy a moláris szabadentalpia - összetétel függvényét az adott összetételű pontban érintő hipersík (*tangent plane*) azt metszi-e (Michelsen 1982a; Baker, Pierce, Luks 1982). Ha nem metszi, akkor a vizsgált fázis stabil. Ha metszi, akkor a vizsgált összetételű fázis megoszlik, instabil vagy metastabil. Ez az érintősík módszert használó stabilitás-ellenőrzés a globális minimum megkeresését igényli. Az érintősík és a moláris szabadentalpia függvény közötti előjeles távolság (*tangent-plane-distance function*, TPDF) definíciója:

$$(1.1-1) D(x) = g(x) - g(x_0) - (g'(x_0))^{\mathrm{T}}(x - x_0),$$

ahol g(x) a moláris szabadentalpiát jelöli az x összetétel mellett. A következő feltételes szélsőérték feladat globális optimumát kell megtalálni.

$$\min D(x)$$

(1.1-2)
$$s.t. \quad \sum x_i = 1$$

Ha ennek a feladatnak van olyan megengedett (tehát nem feltétlenül optimális) megoldása, amelyre D negatív, akkor a vizsgált fázis nem stabil. Ha a globális optimum nulla, akkor a fázis stabil.

Az (1.1-2) feladat összes lokális optimumát megkapjuk, ha az összes stacionárius pontot megkeressük (nyeregpont is stacionárius pont). A stacionárius pontok megkeresése akkor is hasznos, ha már tudjuk, hogy a vizsgált fázis nem stabil (már találtunk olyan stacionárius pontot melyre D negatív). A tapasztalat ugyanis azt mutatja, hogy olyan stacionárius pontok, melyekre D negatív, jó kezdőpontként szolgálnak az egyensúlyi számítások folytatásához (Sun, Seider 1995).

A fázis-stabilitás megbízható ellenőrzése intervallum módszerekkel megvalósítható. A folyadékfázis nemidealitását például Tessier, Brennecke, Stadtherr (2000) és Stadtherr, Xu, Burgos-Solorzano, Haynes (2007) közleménye aktivitási együtthatóval veszi figyelembe. A megbízható jelző arra utal, hogy mind a bevezetőben írt problémák elkerülése, mind a globális optimum megtalálása garantált. A minimalizálandó függvényt konvex függvénnyel alulról közelítő, szétválasztás és korlátozás módszerén alapuló eljárások szintén garantálják a globális optimum megtalálását, eltekintve a kerekítési hibáktól (McDonald, Floudas 1997). A módszer újabb változata képes kezelni a kerekítési hibákat is, azaz megbízható, továbbá általános is, nem használ olyan analitikus átalakításokat, melyek csak bizonyos modellek esetén végezhetők el (Harding, Floudas 2000a). Az ún. homotópia-folytatásos módszerek robosztusnak bizonyultak a fázis-stabilitás ellenőrzésére (Sun, Seider 1995), bár nincs elméleti garancia a globális optimum megtalálására ezekkel a módszerekkel. Többfokozatú szétválasztó rendszerek esetében azonban az ellenőrizendő megoldásokat nehéz megtalálni, vagy ha a feladat nem megoldható, akkor annak igazolása körülményes.

1.2. Több állandósult állapot

Szétválasztó oszlopok lehetséges állandósult állapotainak megbízható felderítése fontos azok tervezésénél, szimulációjánál, szabályozásánál és üzemeltetésénél (Bekiaris, Morari 1996). Hagyományos módszerek egyszerre csak egy állandósult állapot megtalálását teszik lehetővé, és nem szolgáltatnak információt arról, hogy van-e még más állandósult állapot is.

Szimulációnál különösnek tűnő eredményeket okozhat több állandósult állapot létezése, például a desztillátum tisztasága a reflux-arány kis változására ugrásszerűen változik, vagy az iterációt a korábbi oszlop-profillal kezdve az iteráció nem konvergál a műveleti paraméterek kis változtatása után. Dinamikus vizsgálat során azt tapasztalhatjuk, hogy az oszlop-profil hirtelen "elugrik", számunkra kedvezőtlen módon. A szétválasztási

művelet indítása során is fontos tudni, hogy milyen állandósult állapotai vannak a folyamatnak, és hogyan, milyen módon lehet elérni vagy elkerülni azokat. Az iparban az oszlop látszólag kiszámíthatatlan viselkedéseként jelentkezhet az, ha az oszlopnak több állandósult állapota van. A jelenség megértéséhez és a helyes döntések meghozatalához ezért fontos a lehetséges állandósult állapotok ismerete.

Rosenbrock (1960, 1963) bizonyította, hogy a kétkomponensű szétválasztó oszlopnak pontosan egy állandósult állapota van bizonyos specifikációk mellett, ha állandó moláris túlfolyást tételezünk fel, és ha a gőz összetétel egyértelműen meghatározza a vele egyensúlyban lévő folyadék-összetételt. Az utóbbi feltevés megenged nemideális gőzfolyadék egyensúlyt, többek között biner azeotropokat is. Később Doherty és Perkins (1982) is bizonyította erre az esetre a megoldás egyértelműségét, továbbá stabilitását is. Balashov és munkatársainak (1970) közleménye tűnik az elsőnek, amely felveti több állandósult állapot létezését háromkomponensű elegyek desztillációjánál. Petlyuk és Avet'yan (1971) a jelenséget részletesebben is elemzik és elméletileg megalapozott módszert adnak fellépésének előrejelzésére. Módszerüket később egy független kutatás pontosította (Bekiaris, Meski, Radu, Morari 1993). Számos közlemény született a témában 1970 óta, tekintettel a jelenség fontosságára; erről kimerítő áttekintést nyújt például Güttinger doktori disszertációja (1998). Gőz-folyadék egyensúlyi diagramok (például maradékgörbe térképek) elemzésével becsülhető, ha adott elegy szétválasztásánál várható, hogy az oszlopnak több állandósult állapota is lehet (Bekiaris, Meski, Radu, Morari 1993; Güttinger, Morari 1996a; Hilmen, Kiva, Skogestad 2002). Később kísérletileg is igazolták homogén azeotrop desztillációnál több állandósult állapot létezését (Güttinger, Dorn, Morari 1997; Dorn, Güttinger, Wells, Morari, Kienle 1998).

Már ideális kétkomponensű elegy desztillációjánál is lehet több állandósult állapota a desztilláló oszlopnak, rögzített műveleti paraméterek mellett (Jacobsen, Skogestad 1991), ezt később kísérleti úton is alátámasztották (Kienle, Groebel, Gilles 1995; Koggersbøl, Andersen, Bagterp, Jørgensen 1996). Továbbá heteroazeotrop desztillációnál (Kovach, Seider 1987ab; Bekiaris, Meski, Morari 1996; Müller, Marquardt 1997; Wang és munkatársai 1998), kapcsolt szétválasztó oszlopoknál (Güttinger, Morari 1996b; Esbjerg és munkatársai 1998), reaktív desztillációnál (Jacobs, Krishna 1993; Nijhuis, Kerkhof, Mak 1993; Güttinger, Morari 1999ab; Mohl és munkatársai 1999, Chen, Huss, Doherty, Malone 2002) és termikusan csatolt rendszereknél (Lin, Seader, Wayburn 1987) is ismert, hogy több állandósult létezhet és / vagy kísérletileg is igazolt a létezése.

2. A legrobusztusabb nem megbízható módszerek

Szétválasztó oszlopok részletes modelljének megoldására, a lehetséges állandósult állapotok feltérképezésére, és fázisegyensúly számítására a Perry Vegyészmérnökök kézikönyve által (Green, Perry 2007; 13. fejezet 33-34. oldalak) és az alább felsorolt irodalmi közlemények alapján is legrobusztusabbnak tartott módszerekkel foglalkozom ebben a fejezetben. Mindkét módszer általános, más mérnöki feladatok megoldására is alkalmas. Természetesen egyéb robusztus módszerek is léteznek, terjedelmi okok miatt itt nem áll módomban azokat részletezni.

2.1. Homotópia-folytatásos módszerek

A módszereknek két jól elkülöníthető lépése van (Nocedal, Wright 1999; 304-310). Az első lépésben egy homotópia függvényt választunk. Maga a homotópia folytonos, reverzibilis alakváltozást jelent. A második lépésben a homotópia függvény által meghatározott paraméteres nemlineáris egyenletrendszert oldjuk meg a folytatás módszerével.

2.1.1. Homotópia függvény

Keressük az

$$(2.1-1)$$
 $f(x) = 0$

nemlineáris egyenletrendszer megoldásait, ahol $f: \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ folytonosan differenciálható. Az ún. homotópia függvények folytonos átmenetet biztosítanak egy adott pontból egy megoldáshoz. A lineáris homotópia esetében a homotópia függvény

$$(2.1-2) H(x, t) = t f(x) + (1-t) g(x),$$

ahol f a megoldandó f(x) = 0 egyenletrendszerhez tartozik, a g egy egyszerű g(x) = 0 egyenletrendszerhez, amelynek ismert egy x_0 megoldása; t egy skalár homotópia paraméter, amely 0 és 1 között változik, miközben haladunk a kezdőponttól a megoldásig. A g függvényt gyakran az alábbi három lehetőség egyikeként választják meg:

(2.1-3)
$$H(x, t) = t f(x) + (1-t) (f(x)-f(x_0))$$
 (Newton homotópia),

(2.1-4)
$$H(x, t) = t f(x) + (1-t) (x-x_0)$$
 (fix-pont homotópia),

(2.1-5)
$$H(x, t) = t f(x) + (1-t) f'(x_0) (x-x_0)$$
 (affin homotópia),

ahol x_0 a kezdőpontot, azaz g(x) = 0 megoldását, f' a deriváltfüggvényt jelöli. Ha $x = x_0$ és t = 0, akkor definíció szerint

$$(2.1-6) H(x_0, 0) = g(x_0) = 0;$$

ha t = 1, akkor

$$(2.1-7) H(x, 1) = f(x).$$

Több megoldás megkereséséhez az ún. globális homotópia módszert használják: *t* értékét nem korlátozzuk a [0, 1] intervallumra a megoldásgörbe követése során.

Feladat-specifikus homotópia függvény is kidolgozható. Például Vickery és Taylor (1986) egy desztilláló oszlop MESH egyenleteit oldották meg oly módon, hogy ideális folyadék-fázisból indultak ki, és a homotópia paramétert használták arra, hogy fokozatosan bevegyék a modellbe a nemidealitást leíró tagokat.

2.1.2. A folytatás módszere

A nemlineáris paraméteres

$$(2.1-8) H(x, t) = 0$$

egyenletrendszer numerikus megoldása a folytatás módszerével történik. Kézenfekvő lenne az egyszerű paraméter folytatásos módszer használata (Kuno, Seader 1988): t elegendően kis Δt lépésenkénti változtatása 0-tól 1-ig, az i. lépésben a $H(x, t_{i-1} + \Delta t) = 0$ egyenletet például Newton módszerrel megoldva az előző lépésben kapott x_{i-1} megoldás vektort használva az iteráció kezdőpontjaként. Ha a számítások során a megoldásgörbe visszafordul (turning point), akkor a módszer nagy valószínűséggel csődöt mond (Vadapalli, Seader 2001; Kannan, Joshi, Reddy, Shah 2005). Éppen emiatt szokás a (2.1-8) egyenletet közönséges differenciálegyenletekké alakítani a homotópia függvény alkalmasan választott paraméter (például a megoldási görbe ívhossza) szerinti differenciálásával (Klopfeinstein 1961). Az így kapott kezdetiérték feladatot rendszerint prediktor-korrektor módszerrel oldják meg. A módszernek ezt a változatát bővebben például Wayburn és Seader (1987) közleménye tárgyalja.

2.1.3. A homotópia-folytatásos módszerek előnyei

A módszerek igen robosztusak, általában konvergálnak, és az iteráció kezdőpontját is könnyebb megválasztani, mint más módszereknél. Alkalmasak több megoldás megkeresésére is (Kuno, Seader 1988; Jalali, Seader, Khaleghi 2008). A homotópia-folytatásos módszerek elméleti háttere és gyakorlati megvalósítása is jól kidolgozott, professzionális szimulátorba is beépítették őket (HYSYS®, *sparse continuation solver*). Több irodalmi példa ismert arra, hogy a homotópia-folytatásos módszerek egyik vagy másik változatával térképezték fel az adott folyamat lehetséges állandósult állapotait, amelyeket korábban nem sikerült megtalálni más módszerekkel (termikusan csatolt rendszerek: Lin, Seader, Wayburn 1987; heteroazeotrop desztilláció: Kovach, Seider 1987ab; reaktív desztilláció: Chang, Seader 1988).

2.1.4. A homotópia-folytatásos módszerek hátrányai

A módszer változatától függően vagy nincs garancia az összes megoldás megtalálására, vagy már viszonylag kis méretű feladat esetében is kezelhetetlenül sok esetet kellene megvizsgálni (Choi, Book 1991). A heteroazeotrop desztillációról született tanulmányok arról számolnak be, hogy a módszer alkalmazása során komoly numerikus nehézségek léptek fel (Kovach, Seider 1987ab). Ha a feladat nem megoldható, azt ezekkel a módszerekkel megbízhatóan igazolni nem tudjuk. A módszer alkalmazása nagy hozzáértést kíván, továbbá a számítások igen műveletigényesek.

2.2. Relaxációs eljárások

A dinamikus műveleti modellt alkalmazó eljárások is igen robusztusak. Ezekkel a módszerekkel nem az állandósult állapotot számítjuk, hanem a rendszer állapotát követjük nyomon az idő függvényében, azt remélve, hogy a rendszer egy állandósult állapota felé halad. Az egyszerűsített dinamikus modellt alkalmazó ún. relaxációs eljárások ugyan nem használhatók a folyamat pontos időbeli leírására, de az állandósult állapotot gyorsabban közelítik meg (Green, Perry 2007; 13. fejezet, 34. oldal).

Egyszerre csak egy állandósult állapotot tudunk megkeresni, ezért a lehetséges állandósult állapotok feltérképezéséhez esettanulmányt kell készíteni. Az ilyen esettanulmányok készítése fáradságos és bizonytalansággal terhelt a numerikus problémák, valamint a hamis és triviális megoldások miatt (instabil fázisok). A módszer nem ad információt arról, hogy az összes állandósult állapotot megtaláltuk-e. Hátrányt jelent még, hogy a számítások műveletigényesek, és az állandósult állapothoz közeledve nagyon lelassulnak.

3. Megbízható módszerek

A bevezetőben írt problémák mindegyikére megoldást nyújtó általános módszereket összefoglalóan megbízható módszereknek nevezem. A megbízható módszerek sajátossága, hogy közrefogással és kimerítő kereséssel tudják a megbízhatóságukat garantálni. A megbízható módszerek egyik típusát az intervallum módszerek képezik. Az intervallum módszerek megbízható módszerek (Hansen, Walster 2004; 11. fejezet) abban az értelemben, hogy

- (*i*) általános nemlineáris egyenletrendszer adott tartományba eső összes megoldásának megtalálása garantált, szélsőérték-keresési feladat esetén a globális optimum megtalálása garantált;
- (ii) ha nincs megoldás, akkor a módszer ezt igazolja;
- (iii) a konvergencia garantált, nincs szükség kezdőpontra a kereséshez;
- (*iv*) a módszer automatikusan kezeli a véges számábrázolásból fakadó numerikus problémákat, azaz kizárt, hogy numerikus problémák miatt helytelen megoldást kapjunk.

Bővebben az intervallum módszerekről például a következő művekben olvashatunk: Moore (1979), Neumaier (1990), Kearfott (1996), Alefeld és Mayer (2000).

Számos egyéb megbízható módszer ismert az intervallum módszerek mellett. Tekintettel arra, hogy vegyészmérnöki számításokra sikerrel alkalmazták az α-BB módszert, ezért azt következő szakaszban tárgyalom. Más, konvex és / vagy lineáris alsó közelítéseken alapuló globális szélsőérték- és zérushelykereső technikákról készült alapos áttekintő tanulmány Neumaier (2004) munkája, 343 hivatkozással. Nemuaier tanulmánya után született

legújabb módszerekről tájékozódhatunk Belotti és munkatársainak (2008) kutatási jelentéséből.

3.1. Egy globális szélsőérték-keresési módszer, az α -BB

A bevezetőben írt problémák mindegyékre megoldást nyújt az ún. α-BB, a szétválasztás és korlátozás módszerén (*branch and bound*, innen a BB) alapuló, a célfüggvényt konvex függvénnyel alulról közelítő (ez utóbbi konvex függvénynek paramétere az α) általános globális szélsőérték keresési módszer (Androulakis, Maranas, Floudas 1995; Adjiman, Dallwig, Floudas, Neumaier 1998; Adjiman, Androulakis, Floudas 1998). A hatékonyság növelése érdekében speciálisan az adott feladathoz kidolgozott konvex alsó közelítő függvényekkel hatékonyan oldottak meg fázisegyensúlyi számításokat (McDonald, Floudas 1994, 1995ab, 1997). A megoldandó egyenletrendszert szélsőérték-keresési feladattá alakítva egyenletrendszerek megoldására is alkalmas az α-BB (Maranas, Floudas 1995; Harding, Maranas, McDonald 1997; Harding, Floudas 2000b). Az irodalmi példák tekintetében elmondható, hogy az általános α-BB módszer és az intervallum módszerek alkalmazhatóságának területei között nincs lényeges különbség (rendszerint csak kis méretű feladatok oldhatók meg elfogadható időn belül); egymásnak jó alternatívái, noha részletes összehasonlító tanulmány az egyes módszerek hatékonyságáról nem készült.

4. Intervallum módszerek

A megbízható módszerek egyik típusát az intervallum módszerek képezik, ahogyan azt az előző, 3. fejezetben már említettem. Az intervallum módszerek megbízhatóságukat konstrukciójuknál fogva tudják biztosítani. A valós $op \in \{+, -, \cdot, /\}$ műveletnek az X = [a, b] és Y = [c, d] intervallumokon értelmezett intervallumos megfelelőjét definiáljuk így

(4-1)
$$X \text{ op } Y = \{ x \text{ op } y \mid x \in X, y \in Y \}.$$

Más szavakkal, bármely $x \in X$, $y \in Y$ valós számpáron értelmezett művelet eredményét tartalmazza $X \circ p Y$. Ez a definíció a következő szabályokat adja (Hansen, Walster 2004).

$$[a,b] + [c,d] = [a+c,b+d]$$

$$[a,b] - [c,d] = [a-d,b-c]$$

$$[a, b] \cdot [c, d] = [\min(ac, ad, bc, bd), \max(ac, ad, bc, bd)]$$

$$[a,b]/[c,d] = \\ [a,b] \cdot [1/d, 1/c] & \text{ha } 0 \notin [c,d] \\ [-\infty, +\infty] & \text{ha } 0 \in [a,b] \text{ és } 0 \in [c,d] \\ [b/c, +\infty] & \text{ha } b < 0 \text{ és } c < d = 0 \\ [-\infty, b/d] \cup [b/c, +\infty] & \text{ha } b < 0 \text{ és } c < 0 < d \\ [-\infty, b/d] & \text{ha } b < 0 \text{ és } 0 = c < d \\ [-\infty, a/c] & \text{ha } a > 0 \text{ és } c < d = 0 \\ [-\infty, a/c] \cup [a/d, +\infty] & \text{ha } a > 0 \text{ és } c < 0 < d \\ [a/d, +\infty] & \text{ha } a > 0 \text{ és } 0 = c < d \\ [a/d, +\infty] & \text{ha } a > 0 \text{ és } c = d = 0 \\ \emptyset & \text{ha } 0 \notin [a,b] \text{ és } c = d = 0 \\ \end{cases}$$

A nullát tartalmazó intervallummal történő osztásra más definíció is létezik (Pryce és Corliss 2006), mint a fent írt (Ratz 1996). Az aritmetikai műveletekhez hasonlóan az *n*-változós valós *f* függvénynek megfelelő *F* intervallum függvény eredményére teljesül, hogy

$$(4-6) F(X_1, ..., X_n) \supseteq \{ f(x_1, ... x_n) \mid x_i \in X_i, i = 1, ... n \}.$$

Ha a (4-2)–(4-5) lebegőpontos végrehajtásának pontos eredménye nem ábrázolható a használt számábrázolási pontosság mellett, akkor alsó végpontnak a legnagyobb olyan ábrázolható számot választjuk, amelyik még nem nagyobb a pontos alsó végpontnál; hasonlóan felső végpontnak azt a legkisebb számot, amelyik még nem kisebb a pontos felső végpontnál. Ezzel az ún. kifelé kerekítéssel olyan intervallumot kapunk, amelyik az elméletileg helyes végeredményt biztosan tartalmazza, figyelembe véve a kerekítési hibákat is. A kifelé kerekítéshez szükséges különböző hardveres kerekítési módokat az IEEE 754 (1985, 2008) szabvány írja le. A kifelé kerekítés szoftveresen is megvalósítható, ennek előnye, hogy a kód hordozható(bb).

4.1. A függőségi probléma

Az X-X művelet végeredményére joggal várhatnánk a [0,0] intervallumot, a (4-3) szabály alapján azonban

$$(4.1-1) X - X = [a, b] - [a, b] = [a - b, b - a] \neq [0, 0], \text{ ha } a \neq b,$$

vagyis a művelet tényleges végeredményét túlbecsüljük. Ennek oka az, hogy az intervallum aritmetika nem tárolja a változók és számított mennyiségek közötti függőséget, ezért függetlenként kell kezelnie azokat. Az előbbi kivonást az egymástól *független* X = [a, b] és

Y = [a, b] változókon végrehajtva a végeredmény változatlanul [a - b, b - a], de ennél szűkebb intervallumot most nem is lehet adni a végeredményre. A valós számok körében a szorzás az összeadásra nézve disztributív művelet, az intervallumokon értelmezett szorzás szub-disztributív, azaz

$$(4.1-2) X(Y+Z) \subseteq XY+XZ,$$

az egyenlőség csak speciális esetekben teljesül (pl.: ha Y és Z előjele megegyezik). Ha X nem degenerált (átmérője nem nulla), akkor az X/X művelet eredménye sem [1,1], ellentétben azzal, amit a valós számokon értelmezett osztás alapján várnánk.

Éppen ez a függőségi probléma az egyik, talán legfőbb oka, hogy a klasszikus intervallum módszerek általában csak igen kis méretű (például 10 változó és egyenlet) feladatok megoldására alkalmazhatók sikeresen. Zérushelykeresés során az egyes függvények erősen túlbecsült értékkészlete miatt nem tudjuk hatékonyan szűkíteni a keresési teret.

4.2. Túlbecslés csökkentése

A kiértékelendő kifejezés **analitikus átalakítás**ával a túlbecslés gyakran csökkenthető. Az ilyen szimbolikus átalakítások célja *durván szólva* az, hogy csökkentse a változók előfordulását az adott kifejezésben. Például az (X-Y)/(X+Y) kifejezést (ha $0 \notin Y$ és $0 \notin X+Y$) az 1-2/(X/Y+1) alakban felírva túlbecslés nélkül a tényleges értékkészletét tudjuk számítani (független X és Y változók esetén), míg az előző alak függőségekkel terhelt (Hansen, Walster 2004, 19. o.).

Túlbecslés csökkentésére egy módszer a **Taylor aritmetika** használata. Az ötlet egyváltozós kifejezésre a következő. Adott pont (például az intervallum középpontja) körül meghatározzuk az adott függvény *n*-edrendű Taylor polinomját, a maradéktagot pedig intervallum módszerrel korlátok közé zárjuk. Így az eredeti kifejezés értékkészlete helyett most egy polinom értékkészletét kell korlátok közé zárni. A módszer hatékonysága attól függ, hogy a Taylor polinom értékkészletét milyen hatékonyan tudjuk korlátokkal közrefogni (Neumaier 2002). A számítások a gyakorlatban nem közvetlen módon Taylor tétele szerint történnek, hanem az ún. Taylor aritmetika segítségével. A módszer ennél összetettebb, például Makino és Berz (1996, 1999, 2003) munkái taglalják bővebben a Taylor modellt.

A Taylor aritmetikával rokonságot mutat az ún. *slope* **aritmetika**. (A *slope* magyarra fordítása félreérthetővé tenné a szöveget, itt közrefogó függvényt értünk alatta. Tény, hogy az

angol kifejezés használata sem szerencsés a magyar szövegben.) A módszer ötletét itt is csak egyváltozós függvényre vázolom. Az

$$(4.2-1) f(x) = f(c) + g(c, x) (x-c)$$

egyenlet azonosság, ha

$$(4.2-2) g(c, x) = (f(x) - f(c))/(x - c)$$

és g(c, x) = f'(x) ha x = c. Amennyiben lehetséges, akkor a g ún. slope függvényt analitikusan kell meghatározni, hogy a függőséget ilyen módon is csökkentsük. Belátható (Hansen, Walster 2004, 140. o.), hogy f értékkészletére az X intervallum felett, azaz f(X)-re fennáll, hogy

(4.2-3)
$$f(X) \subseteq f(c) + g(c, X) (X-c)$$
.

Ha az X intervallum "nem túl széles", akkor a jobb oldalon álló kifejezés általában szűkebben fogja közre az értékkészletet, mint f közvetlen intervallumos kiértékelése. Máig megoldatlan kérdés, hogy mikor elegendően szűk az intervallum, hogy mindig jobb közelítést kapjunk (Hansen, Walster 2004, 32. o.). A (4.2-3) az analóg Taylor polinomnál általában jobb, de biztosan nem rosszabb eredményt ad (Hansen, Walster 2004, 141. o.).

Természeten a *slope* aritmetikát is kiterjesztették többváltozós függvényekre, és magasabb rendű *slope*-okra is. Az egyik legújabb közlemény, amelyik implementációt is tárgyal, Schichl és Neumaier közleménye (2005). Részletesen foglalkozik a Taylor és a slope aritmetikával Hansen és Walster (2004) könyvének 7. fejezete.

A *slope* aritmetikával mutat nagyfokú hasonlóságot **Hansen** (1975) általánosított intervallum aritmetikája (lásd még Hansen 1993, Krämer 2006). Az általánosított intervallum aritmetikánál a számított mennyiségeknek az eredeti változóktól való lineáris függését szimbolikus változók segítségével eltároljuk, és a számítások során azt felhasználjuk. Ennek köszönhető, hogy például az X - X művelet eredménye mindig a [0,0] intervallum lesz, vagy például az (10 + X)(10 - X) kifejezés értékkészletét is pontosan tudjuk számítani. Az általánosított intervallum aritmetikát bővebben nem tárgyalom, implementációja és annak gondos dokumentációja bárki számára hozzáférhető (El-Owny, 2006, 2007).

Az előbbiekben bemutatott aritmetikákkal ellentétben az **affin aritmetika** mindig konvex, lineáris közrefogást biztosít (Stolfi, Figueiredo 1997). A módszert a II. rész 2. *Valós együttható-mátrixú közrefogás* című fejezet tárgyalja bővebben. Itt csak érdekességképpen említem, hogy affin aritmetikával számítva az X-X művelet eredménye mindig a [0,0] intervallum lesz, az X/X műveleté az [1,1] (Kolev 2004a), amely azonosságok a hagyományos intervallum aritmetikánál nem teljesülnek.

4.3. Egyenletrendszerek megoldása intervallum módszerrel általában

Először egy tipikus algoritmust mutatok be, majd annak főbb lépéseit (linearizálás, szűkítés, vágás) a következő szakaszokban. Az algoritmus célja az f függvény összes olyan zérushelyének előre rögzített értéknél szűkebb intervallumokba zárása, amely zérushelyek az adott $X^{(0)}$ intervallum vektorba esnek. Az intervallum vektort röviden doboznak (box) hívom.

- **0. lépés** A feldolgozandó dobozok listájára helyezzük a kezdeti, kiindulási dobozt (vagy dobozokat)
- **1. lépés** Ha a feldolgozandó dobozok listája üres, akkor a keresést befejeztük, ellenkező esetben levesszük a listáról annak első elemét, $X^{(k)}$ -t.
- **2. lépés** Linearizáljuk a függvényt $X^{(k)}$ felett (linearizált rendszer). Ha az eredmény értékkészlete valamelyik komponensben nem tartalmazza a nullát, akkor töröljük $X^{(k)}$ -t és az **1. lépés**től folytatjuk tovább.
- **3. lépés** Szűkítjük a keresési teret a linearizált rendszer megoldáshalmaza alapján. Ha üres intervallum adódik a szűkítés során, akkor töröljük $X^{(k)}$ -t és az **1. lépés**től folytatjuk tovább.
- **4. lépés** Ha szűkítés után $X^{(k)}$ legszélesebb komponense nem szélesebb egy előre meghatározott értéknél, akkor a dobozt kiiratjuk (tartalmazhat megoldást). Ellenkező esetben alkalmasan választott komponens mentén kisebb részekre vágjuk, a kapott dobozokat a feldolgozandó dobozok listájára helyezzük. Az eljárást az **1. lépés**től folytatjuk tovább.

Minden lépésben csak olyan részt vágunk ki a keresési térből, ahol nem lehet megoldás, ezért az egyenletrendszer összes megoldása szerepel a kiíratott dobozok valamelyikében. Alkalmas algoritmussal azt is tudjuk vizsgálni, hogy egy adott (szűk) dobozban biztosan van-e megoldás, valamint, hogy pontosan egy megoldás van-e benne.

A zérushelykereső eljárások rendszerint valamilyen <u>konzisztencia techniká</u>t is alkalmaznak a keresési tér szűkítésére, például az *f* lineáris közrefogásának számítását megelőzően. A konzisztencia technikák a keresést több nagyságrenddel is meggyorsíthatják, bővebben a *4.6 Konzisztencia technikák* szakaszban foglalkozom velük.

4.4. A keresési tér szűkítése a linearizált rendszer segítségével

Az előző szakaszban vázolt zérushelykereső eljárás egyik kulcs eleme a keresési tér szűkítése a linearizált rendszer segítségével. Az <u>intervallum Newton módszert</u> használják a legelterjedtebben. A <u>lineáris paraméteres</u> valamint a <u>valós együttható-mátrixú közrefogás</u>okon alapuló módszerek újabb kutatások eredménye. Ez az oka annak, hogy lényegesen kevesebb alkalmazásukról szóló közlemény ismert. Itt az imént említett három módszert mutatom be.

4.4.1. Intervallum Newton módszerek

Az intervallum Newton módszerek az alábbi lineáris közrefogáson alapulnak (Hansen, Walster 2004, 11. fejezet):

$$(4.4-1) f(x) \in f(c) + J(c, X)(x - c), x \in X.$$

Itt J intervallum mátrix; $c \in X$ egy tetszőleges, számunkra kedvező módon választott pont. A J(c,X) intervallum mátrix például számítható az f függvény X fölött vett differenciálhányadosainak közrefogásával, automatikus differenciálással (Hammer, Hocks, Kulisch, Ratz 1995; I2. Automatic Differentiation for Gradients, Jacobians and Hessians). Pontosabb közrefogást eredményez (Hansen, Walster 2004, 7. fejezet), ha a J mátrixot nem differenciálással, hanem slope-okkal számoljuk. Ez utóbbi esetben ráadásul nem követelmény, hogy $c \in X$ legyen; valamint a (4.4-1) linearizálás analógja komplex számhalmazon is teljesül.

Ha x^* f-nek egy zérushelye, azaz $f(x^*) = 0$, akkor (4.4-1)-ből kapjuk a következő (intervallumos értelemben) lineáris egyenletrendszert

$$(4.4-2) f(c) + J(c, X)(x - c) = 0,$$

vagy rendezve

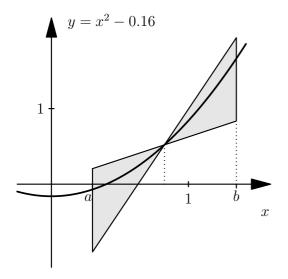
$$(4.4-3) J(c, X)(x-c) = -f(c).$$

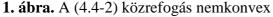
Ennek a linearizált rendszernek a megoldáshalmaza általában bonyolult, nemkonvex alakzat. A (4.4-2) közrefogás nemkonvex voltát az *1. ábra* szemlélteti. A megoldáshalmaz nemkonvex voltát az

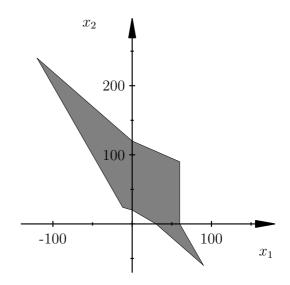
$$(4.4-4a)$$
 [2, 3] $x_1 + [0, 1]x_2 = [0, 120]$

$$(4.4-4b)$$
 [1, 2] x_1 + [2, 3] x_2 = [60, 240]

egyenletrendszer megoldáshalmazára a 2. ábra illusztrálja.







2. ábra. A (4.4-4) lineáris intervallum egyenletrendszer megoldáshalmaza nemkonvex alakzat

Legyen N(c, X) olyan intervallum vektor, amely (4.4-3) (általában) nemkonvex megoldáshalmazát (nem feltétlenül legszűkebben) közrefogja. Ha van f-nek zérushelye X-ben, akkor az N-nek is eleme. A keresési teret így szűkíteni tudjuk:

$$(4.4-5)$$
 $X_{\text{úi}} = X \cap N,$

hiszen így csak olyan részt vetünk el X-ből, ahol biztosan nem lehet zérushely. Ha X_{ij} üres halmaz, akkor X-ben biztosan nincsen zérushelye f-nek. Ha $X_{ij} \subset X$ akkor X_{ij} pontosan egy zérushelyét fogja közre a folytonosan differenciálható f-nek. Ezen állítások igazolása megtalálható például Hansen és Walster könyvének (2004) 11.15 alfejezetében.

Az egyes intervallum Newton módszerek abban különböznek egymástól, hogy milyen módszerrel számítjuk *N*-et (például intervallumos Gauss eliminációval vagy Gauss-Seidel iterációval), és hogyan határozzuk meg *J*-t (például automatikus deriválással vagy *slope*-okkal, bővebben *4.2.* szakasz). A továbbiakban röviden áttekintem a főbb változatokat.

4.4.1.1. Gauss elimináció

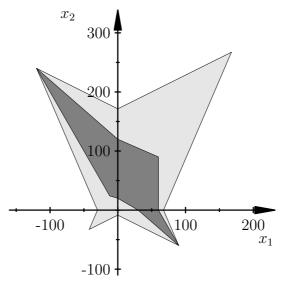
Lineáris egyenletrendszerek megoldására szolgáló direkt módszer a Gauss elimináció (és annak egyes változatai). A valós számokra kidolgozott Gauss elimináció intervallumokkal történő végrehajtása a gyakorlatban nem használható. Ennek legfőbb oka a már tárgyalt függőségi probléma, de csupán a kifelé kerekítés is (amit kerekítési hibák figyelembe vétele miatt teszünk) eredményezheti az algoritmus sikertelenségét (Hansen, Walster 2004, 5.5 alfejezet). A (valós aritmetikában ismeretlen) függőségi probléma csökkentése céljából a

linearizált rendszert alkalmasan választott nemszinguláris valós B ún. prekondícionáló mátrixszal szorozzuk meg (M = BJ; r = -Bf(c)), nevezzük az így kapott

$$(4.4-6) M(x-c) = r$$

rendszert prekondicionált rendszernek. Például a J együttható mátrix középpontjának inverzét választva prekondicionáló mátrixnak ("középpont inverz"), az M mátrix középpontja az egységmátrix. Ha az A mátrix elemei szűk intervallumok, akkor M elemei is azok lesznek, és így a megoldás i. komponense csak kevéssé tér el ($R_i/M_{ii}+c$)-től; az M nemdiagonális elemeinek a függőségi probléma miatti hatása csekély (Hansen, Walster 2004, 5.6 alfejezet). Éppen ezt akartuk elérni a prekondicionálással.

A prekondicionált rendszer megoldáshalmaza közrefogja (4.4-3) linearizált rendszer megoldáshalmazát, de általában tágabb annál, ezt szemlélteti a *3. ábra* a (4.4-4) lineáris intervallum egyenletrendszer megoldáshalmazára.



3. ábra. A (4.4-4) egyenletrendszer megoldáshalmaza prekondicionálás előtt (sötét szürke terület) és után (világos szürke terület)

A prekondicionálás miatti túlbecslés jelentős is lehet függetlenül A elemeinek szélességétől (Rohn 2005). A függőségi probléma csökkentése céljából a megoldáshalmaz növekedése ellenére is általában megéri a prekondicionálni. Viszont az imént mondottak miatt káros prekondicionálást alkalmazni, ha a Gauss elimináció prekondicionálás nélkül a legszűkebb megoldásvektort adja eredményül (Neumaier 1990). Ha a linearizált rendszer együttható mátrixának elemei széles intervallumok, akkor a Gauss elimináció valószínűleg sikertelen lesz, mert az elimináció során nullát tartalmazó intervallummal kellene osztani. A Gauss elimináció alkalmazhatóságának szükséges és elégséges feltételeit Mayer és Rohn (1998) tárgyalja.

4.4.1.2. Gauss-Seidel iteráció

A Gauss-Seidel iteráció akkor is alkalmazható, amikor a Gauss elimináció nem. Az intervallum Gauss-Seidel iteráció *i.* lépése (Hansen és Sengupta (1981) javaslatait is figyelembe véve):

(4.4-7)

$$N_{i} = c_{i} + 1 / M_{ii} [R_{i} - M_{i1}(X'_{1} - c_{1}) - \dots - M_{i,i-1}(X'_{i-1} - c_{i-1}) - M_{i,i+1}(X_{i+1} - c_{i+1}) - \dots - M_{i,n}(X_{n} - c_{n})],$$

$$(4.4-8) X'_{i} = X_{i} \cap N_{i}.$$

Kedvező lehet az (4.4-7)–(4.4-8) lépéseket az egyenletekre változó sorrendben végrehajtani az egyes iterációs lépésekben. Ha a nulla eleme M_{ii} -nek, akkor kiterjesztett intervallum aritmetikával végezzük el az osztást (4-5) szerint, ennek eredménye X'_i -re legfeljebb két intervallum: [a, c] és [d, b], azaz az eredeti $X_i = [a, b]$ intervallumból a nyílt (c, d) intervallum hiányzik. Ha c < a akkor az [a, c] intervallum üres, stb. A prekondicionáló mátrix alkalmas megválasztásával növelni tudjuk az így keletkező "rés"-ek nagyságát (ezt bővebben a következő bekezdés taglalom). A kapott (legfeljebb) két intervallumot szerencsés esetben fel tudjuk használni a doboz szűkítésére vagy később a doboz darabolásánál (Ratz 1994).

A prekondicionálás az intervallum Gauss-Seidel iterációnál is javasolt. A "középpont inverz" jó általános célú prekondicionáló mátrix. Helyette más, valamilyen szempontból optimális prekondicionáló mátrixot is választhatunk (Kearfott 1990; Kearfott, Hu, Novoa 1991; Kearfott, Shi 1996; Kearfott, Hongthong 2005, Kearfott 2008), például amelyik a legszűkebb *N*-et, vagy amelyik legnagyobb rés vágását eredményezheti stb. Egyéb módokat Hansen és Walster (2004, prekondicionálás szinguláris középpont mátrix esetén 104. o., analitikus prekondicionálás 263. o., posztkondicionálás 265. o.) továbbá Lin és Stadtherr (2004ab) tárgyal.

A Gauss-Seidel iterációhoz hasonló iteratív eljárás Krawczyk módszere (Moore 1979; Ibraev 2001). A Gauss-Seidel iteráció hatékonyabb Krawczyk módszerénél (Hansen, Sengupta 1981; Neumaier 1990, 177. o.). Bővebben Krawczyk módszerével ezért nem foglalkozom.

4.4.1.3. Legszűkebb burkoló módszere

Ha a prekondicionált rendszer *M* együtthatómátrixa reguláris (nem eleme olyan valós mátrix, amelyik szinguláris), akkor egy *viszonylag* egyszerű módszerrel meg lehet határozni a

lineáris egyenletrendszer megoldáshalmazát élesen közrefogó intervallum vektort. A módszert (*hull method*) Hansen és Walster könyvének (2004) 5.8 alfejezete írja le. Mivel a legszűkebb burkoló módszere nem alkalmazható, ha *M* nem reguláris, ezért célszerű azt kombinálni például a Gauss-Seidel iterációval, egyesítve a két módszer előnyeit (Hansen, Walster 2004, 5.9 alfejezet).

4.4.1.4. Belső és utóiteráció

A belső iteráció célja, hogy az adott dobozban f egy zérushelyének egy valós közelítését számítsa. Ezt a közelítést választjuk c pontnak amikor a (4.4-1) szerinti közrefogást számítjuk. Minél közelebb van a c pont egy zérushelyhez, várhatóan annál szűkebb az N megoldáshalmaz. A zérushelyet közelítő valós vektort valós Newton iterációval végezzük, kihasználva, hogy a prekondicionáláshoz a középpont inverz mátrixot már meghatároztuk. Belső iteráció elsősorban akkor előnyös, ha a Gauss eliminációt vagy a legszűkebb burkoló módszerét használjuk a linearizált rendszer megoldásánál. Míg a belső iteráció az aktuális, addig az intervallum Newton lépés utáni valós Newton iteráció, az utóiteráció, a soron következő intervallum Newton lépés hatékonyságát igyekszik javítani. További részletek Hansen és Walster (2004) 11.4 és 11.4.1 szakaszban olvashatók.

4.4.1.5. Lineáris programozás

Az intervallum Newton módszerek az általában nemkonvex

$$(4.4-9) f(c) + J(c, X)(x - c) = 0, x \in X$$

közrefogáson alapszanak. A (4.4-9) megoldáshalmazát legszűkebben közrefogó intervallum vektor meghatározása *NP nehéz* (Rohn, Kreinovich 1995). A következő 2*n* darab optimalizálási feladat

$$\min / \max x_i, i = 1, 2, ... n$$

s.t.

$$(4.4-10) f(c) + J(c, X)(x - c) = 0, x \in X,$$

a megoldáshalmaz éles korlátait adja, de lineáris programozás közvetlenül nem használható, mert a korlátok nem konvexek (ezt az 1. és 2. ábra szemléltette). Elméleti megfontolások után (Oettli, Prager 1964), és c alkalmas megválasztásával (X egyik csúcspontja) elérhető, hogy 2n darab lineáris programozási feladattal meg tudjuk határozni a megoldáshalmaz

komponensenkénti éles korlátait (Lin, Stadtherr 2004a). A numerikus példák alapján elmondható (Lin, Stadtherr 2004ab), hogy az így kapott módszer igen robusztus, és a Gauss-Seidel iterációnál kifejezetten hatékonyabb a módszer, ha a megoldandó egyenletrendszer sok (több mint kétszáz) független változóval rendelkezik vagy számos megoldása van.

4.4.2. Lineáris paraméteres közrefogás

Az intervallum Newton módszerek hatékonyságát két különböző helyen is ronthatja a függőségi probléma. (a) A J mátrix számításánál a deriváltak (vagy slope-ok) értékkészletét rendszerint túlbecsüljük a függőségek miatt, aminek eredménye, hogy a kapott közrefogás nem éles. (b) A linearizált rendszer megoldásánál a J elemeit függetlenként kezeljük, hiszen a közönséges intervallumok nem tárolják, hogy hogyan függnek egymástól vagy a kiindulási változóktól. A lineáris paraméteres közrefogás ez utóbbi problémát igyekszik orvosolni azzal, hogy az együtthatómátrix elemeinek függőségeit adott intervallumba eső paraméterek segítségével fejezi ki, és a linearizált rendszer megoldásánál ezt az információt felhasználja.

A paraméterezés a következőképpen értendő. A Z intervallumhoz hozzárendeljük a valós p paramétert, $p \in Z$. Míg hagyományos intervallum aritmetikával például Z– $Z \neq 0$ addig a paraméteres alakkal p-p=0. Ezzel csökkenteni tudjuk a függőségek miatti túlbecslést a linearizált rendszer megoldása során. A paraméteres közrefogás együttható-mátrixának elemei a paraméterek nemlineáris függvényei lehetnek.

Lineáris paraméteres közrefogást például az eredeti függvény Hansen és Walster (2004) könyvének 7. fejezetében leírtak szerinti kifejtésével (148-150. o.), majd az így kapott alak paraméterezésével kapunk. Ha Hansen és Walster javaslata szerint járunk el, akkor a közrefogás számításakor az analitikus átalakításoknak köszönhetően általában csökkenteni tudjuk az (a) pontban írt túlbecslést. A kifejtéssel kapott alak kvadratikus, ebből paraméterezéssel intervallumos értelemben lineáris feladatot készítünk, az együtthatómátrix elemei közötti függőségek megőrzése mellett. Alternatív mód lineáris paraméteres közrefogás számítására Hansen (1975) általánosított intervallum aritmetikája (El-Owny, 2007), amely egyben automatikusan kezeli a függőségeket a közrefogás számításakor.

Természetesen csak akkor származik előny a közrefogás paraméterezett voltából, ha az abban tárolt információt fel is tudjuk használni a

$$(4.4-11) J(c, p)(x-c) = -f(c), x \in X,$$

linearizált rendszer megoldása során. A keresési tér szűkítése a lineáris paraméteres egyenletrendszer alapján igen bonyolult feladat. Az eddig ismert direkt (Gauss elimináció: Akhmerov 2005; Kolev 2004b, 2006) és iteratív módszerek (paraméteres Gauss-Seidel: Popova 2001; fix-pont iteráció: Kolev 2004c, Popova 2004; Popova, Krämer 2007; Popova utóbbi módszerének kiterjesztése általánosított intervallum aritmetikára: El-Owny 2007) hatékonyságának megítélése nehéz a közölt mintafeladatok alapján. Egy új közlemény ebben a témában (Kolev, 2008) rámutat arra, hogy a lineáris paraméteres közrefogásnak más linearizálási technikákhoz viszonyított hatékonyságát részletesen még nem vizsgálták.

4.4.3. Valós együttható-mátrixú közrefogások

Az f függvényt affin aritmetikával (Stolfi, Figueiredo 1997) kiértékelve az X intervallum felett a következő alakú lineáris közrefogást kapjuk:

$$(4.4-12) f(x) \in A(X) \ x + B(X), \ x \in X.$$

Itt A valós mátrix; B intervallum vektor. A korábban tárgyalt, az intervallum Newton módszerek alapját adó közrefogás

$$(4.4-13) f(x) \in f(c) + J(c, X)(x - c), x \in X$$

esetében *J* együttható mátrix elemei intervallumok. Fontos következményei vannak annak, hogy az *A* mátrix *valós*, míg a *J intervallum* mátrix.

A (4.4-12) közrefogás a (4.4-13) közrefogással szemben a következő kedvező tulajdonságokkal rendelkezik.

- (a) A (4.4-12) közrefogás mindig konvex és lineáris. Következésképpen lineáris programozás *közvetlenül* alkalmazható a keresési tér szűkítésére.
- (*b*) A

$$(4.4-14) A(X) x = -B(X)$$

linearizált rendszer megoldáshalmazát a lehető legszűkebben közrefogó *N* intervallum vektor könnyen számítható:

$$(4.4-15) N = A^{-1}B.$$

(c) Az affin aritmetika *automatikusan* nyomon követi, és a számítások során felhasználja a kiindulási változók és számított mennyiségek közötti affin függőségeket, ezzel csökkentve a túlbecslést. A módszert bővebben a II. rész 2. *Valós együttható-mátrixú közrefogás* című fejezetben tárgyalom.

Ha az egyenletrendszer szeparabilis alakban adott (csak egyváltozós függvények lineáris kombinációi szerepelnek az egyenletekben), akkor affin aritmetika nélkül is számolható valós együttható-mátrixú lineáris közrefogás. Ha az egyenletek között vannak nem szeparabilis alakban lévő egyenletek, azok *automatikusan* szeparabilis alakra hozhatók új változók és kiegészítő egyenletek bevezetésével (Yamamura (1996a) és (1996b)). Ennek elvi lehetőségét már Kolmogorov (1957) nevezetes tétele kimondta, de a tétel bizonyítása nem konstruktív.

Kolev a szeparabilis alakban adott egyenletekben szereplő egyváltozós nemlineáris függvényeket a szelővel párhuzamos egyenespárral fogta közre korábbi közleményeiben (paralelogramma vagy "szendvics" közrefogás, elsőrendű módszer; Kolev 1997, 1998ab, 1999, 2000; Kolev, Mladenov 1998; Kolev, Nenov 2000). A lineáris közrefogás *automatikus* számítását így affin aritmetika nélkül oldotta meg, bár az egyváltozós nemlineáris függvényeket közrefogó egyenespár számításának menete lényegében azonos azzal, ahogyan az affin aritmetikával történik. A szeparabilis alakra transzformálás során bonyolult feladatoknál számos új változót és egyenletet kell bevezetni, ezért a közrefogás automatikus számításához célszerűbbnek látszik az affin aritmetika (Kolev 2004a).

Yamamura és munkatársai (Yamamura 1997; Yamamura, Kawata, Tokue 1998; Yamamura, Tanaka 2002; Yamamura, Fujioka 2003; Yamamura, Igarashi 2004; Yamamura, Suda 2007ab) Kolevtől eltérően az egyváltozós nemlineáris függvényeket új változóval helyettesítette, és az új változó korlátait az egyváltozós függvény intervallum aritmetikával történő kiértékelésével kapta ("téglalap" közrefogás, nullad-rendű módszer). A Yamamura javaslata szerinti linearizálás érdekessége, hogy a linearizált rendszer

$$(4.4-16) A x = -B(X), x \in X,$$

alakú, azaz A kizárólag csak a feladat alakjától függ, az X-től nem. Ez teszi lehetővé, hogy a keresési tér lineáris programozással történő szűkítése során a felezést megelőző iterációs lépésben megoldott lineáris programozási feladat optimális megoldását induló bázis megoldásnak használjuk fel, nagyságrendekkel meggyorsítva ezzel a számításokat (Yamamura, Tanaka 2002; Yamamura, Fujioka 2003; Yamamura, Igarashi 2004; Yamamura, Suda 2007ab).

Gyengén nemlineáris feladatoknál Yamamura és munkatársainak javaslata hatékonyan működik, bár a tesztfeladatok egy részén az affin linearizálás és szűkítés (Kolev 2008) valamint a konzisztencia technikák (Trombettoni, Araya, Neveu 2008) is összemérhetően hatékonyak. Erősen nemlineáris feladatokra Yamamura módszerét eddig nem vizsgálták – feltehetően nem véletlenül. Ugyanis erősen nemlineáris feladatoknál egyrészt sok

segédváltozót és egyenletet kellene bevezetni, számottevően megnövelve ezzel a feladat méretét, másrészt a "téglalap" alakú közrefogás túlságosan durva lehet, ha a feladat nemlineáris jellege dominál; mindezek együttesen a módszer hatékonyságának romlását eredményezhetik.

4.5. Vágás

Ha a vizsgált dobozt nem sikerült "elegendő mértékben" (*rate of progress*; Hansen, Walster 2004, 11.7 szakasz) szűkíteni, akkor azt kisebb dobozokra osztjuk, és azokon újra megismételjük a szűkítési algoritmus(oka)t, remélve, hogy kisebb dobozok esetén azok hatékonyabban működnek. A legkézenfekvőbb stratégia, hogy mindig a legszélesebb komponens mentén felezzük meg a dobozt. A feladat lehet globálisan és lokálisan is rosszul skálázott, így ez a szabály ilyen formában könnyen rossz választásnak bizonyulhat. Kearfott és Novoa (1990) a függvény deriváltjait is figyelembe véve módosították ezt a felezési szabályt, így egyfajta automatikus skálázást biztosítva. A kapott felezési szabályt már elegendően robusztus. A vágási stratégiák kombinációján alapuló robusztus szabályt dolgozott ki Beelitz, Bischof és Lang (2004), a skálázást és a megoldás (feltételezett) elhelyezkedését figyelembe véve.

Ratz (1994) felezési szabálya a Gauss-Seidel iteráció során keletkező összes rést figyelembe veszi, legfeljebb n+1 kisebb új dobozt képezve. Az ötlet lényege az, hogy ha a dobozt egy komponense mentén két részre osztjuk (a Gauss-Seidel iterációnál írt rés mentén vágunk), akkor az egyik dobozt már nem daraboljuk tovább, hanem a későbbiekben feldolgozandó dobozok listájára tesszük és a Gauss-Seidel iterációt a doboz másik részével folytatjuk tovább. Ha minden rés mentén a triviális módon vágnánk, az akár 2^n dobozt is eredményezhet, ez nyilván még a kevés változójú feladatok esetében sem célszerű. Hansen és Walster (2004, 11.8 szakasz) kifinomult felezési szabálya Ratz felezési szabályának ötletét veszi alapul, de figyelembe veszi a skálázást is, és nem egyenlő részekre osztja a dobozt az adott komponens mentén, valamint a rések menti vágást is feltételhez köti. A rések nagyságát alkalmas, ún. S prekondicionáló mátrixszal befolyásolni tudjuk, ahogyan azt a Gauss-Seidel iterációnál már korábban említettem.

Lokális keresővel kapott *közelítő* megoldásokat fel tudunk használni a zérushely- és szélsőérték-kereső eljárások hatékonyságának javítására (Jansson 1994; van Iwaarden 1996; Kearfott 1997; Figueiredo, van Iwaarden, Stolfi 1997; Schichl, Neumaier 2004, Kolev 2008).

I. Irodalmi áttekintés 4.5. Vágás

A közelítő megoldást először egy olyan intervallum vektorral fogjuk közre, amelyikben pontosan egy megoldás van, majd ezt a dobozt kivágjuk a keresési térből, legfeljebb 2n darab dobozt létrehozva. A hatékonyság javulása attól várható, hogy a megoldást tartalmazó dobozt kivágva a visszamaradó kisebb dobozok feldolgozása könnyebb és gyorsabb lesz.

Globális szélsőérték-keresésnél a lokális keresés eredménye segíthet abban, hogy pusztán az optimumra így kapott korlát ismeretében töröljünk dobozokat a feldolgozásra várók listájáról. Ha egy doboz felett a célfüggvény értékkészletére intervallum aritmetikával kapott alsó korlát nagyobb, mint a lokális keresővel kapott és megbízható módszerrel igazolt és korrigált érték, akkor az adott dobozban nem lehet a globális minimum. Részben emiatt lényeges, hogy a dobozokat milyen sorrendben dolgozzuk fel szélsőérték keresésénél, míg az egyenletrendszer megoldásnál a vizsgálandó dobozok számát (általában) nem befolyásolja a dobozok feldolgozásának sorrendje. A szélsőérték keresés vágási stratégiái összetettebbek lehetnek az egyenletrendszer megoldó algoritmus stratégiáinál (Ratz, Csendes 1995; Csendes, Ratz 1997; Csallner, Csendes, Markót 2000; Markót, Csendes, Csallner 2000; Markót, Fernandez, Casado, Csendes 2006).

4.6. Konzisztencia technikák

A zérushelykereső algoritmust több nagyságrenddel meggyorsíthatja, ha nem csak a linearizálással kapott rendszert használjuk a keresési tér szűkítésére, hanem valamilyen konzisztencia technikát is. A konzisztencia például a következőképpen definiálható. Adott a z(x, y) = 0 egyenlet. Azt mondjuk, hogy az X és Y intervallumok konzisztensek a z egyenletre nézve, ha tetszőleges $x \in X$ mellett van olyan $y \in Y$, hogy z(x, y) = 0, és tetszőleges $y \in Y$ mellett van $x \in X$ olyan, hogy z(x, y) = 0. A módszer természetesen általánosítható több változóra is. A konzisztencia másféleképpen is definiálható és általánosítható (Hansen, Walster 2004, 10. fejezet).

Ha $x \in X$ bizonyos értékeire nincsen olyan $y \in Y$, hogy z(x, y) = 0, akkor x ezen értékeit kizárhatjuk a későbbi vizsgálatokból egyenlet(rendszer) megoldás során. Egyenletrendszer megoldásánál ezt annak minden egyes egyenleténél és minden változóra alkalmazhatjuk. Az ún. burkoló konzisztencia (*Hull Consitency*, HC) ötlete a következő. A vizsgált egyváltozós függvény legyen a következő alakú: f(x) = x - h(x). Ha x^* zérushelye f-nek, azaz $f(x^*) = 0$, akkor $x^* = h(x^*)$. Következésképpen f-nek az X intervallumba eső zérushelye benne van az $X \cap h(X)$ intervallumban is. Ha az előbbi metszet üres halmaz, akkor

az X intervallumban biztosan nincsen zérushelye f-nek. Ha az f függvény f(x) = g(x) - h(x) alakú, ahol g könnyen invertálható függvény, akkor az X-beli zérushely az $X \cap g^{-1}(h(X))$ intervallumban is benne van. A g és h függvények megválasztása nagyban befolyásolja a módszer hatékonyságát, de sajnos nem adható rá általános recept, hogyan érdemes őket megválasztani. Többváltozós függvényeknél egy kiszemelt változó kivételével a többi változót azok intervallumával helyettesítjük, így egyváltozós intervallum függvényt kapunk, melyre már alkalmazható az imént leírt ötlet. Az ún. doboz konzisztencia (Box Consistency, BC) ötlete durván szólva az, hogy a többváltozós $f(x_1, x_2, ..., x_n) = 0$ egyenlet egy kiszemelt változójára alkalmaz egyváltozós intervallum Newton iterációt, a többi változót azok intervallumával helyettesítve.

Mind a HC (most vázolt formája), mind a BC egyetlen egyenlet felhasználásával igyekszik szűkíteni a kiszemelt változó intervallumát, a többi egyenlet figyelmen kívül hagyásával. Az egyik egyenlet által hordozott információ csak a közös változók intervallumának szűkülésével tud eljutni egy másik egyenlethez. A konzisztencia technikák használatát Hansen és Walster (2004) elsősorban – de nem kizárólag – "széles" dobozok felett javasolja, ahol az intervallum Newton módszer várhatóan nem, vagy csak elhanyagolható mértékben képes szűkíteni a keresési teret, míg a konzisztencia technikák rendszerint képesek nagy részeket elvetni a keresési térből. Sajnos nincs általános válasz arra a kérdésre, hogy mikor "széles" egy doboz. Gyümölcsöző a konzisztencia technikák és az intervallum Newton módszer együttes használata (Hansen, Walster 2004, 11.12 szakasz).

A továbbiakban csak azokat a konzisztencia technika változatokat említem, melyeket Hansen és Walster (2004) könyvének konzisztencia technikákról szóló 10. fejezete nem tárgyalja vagy nem hivatkozza. Ha minden elemi lépésre új változót és egyenletet vezetünk be, akkor a kapott egyenletekre könnyű alkalmazni a HC koncepcióját. Ez a konzisztencia technika könnyen automatizálható és hatékony (Kearfott 1991), a megalkotója nemlineáris Gauss-Seidel lépésnek nevezte el. Kearfott ötletét irányított aciklikus gráfon is szemléltethetjük (DAG). Újabb közlemények közül említhetők Benhamou, Goualard, Granvilliers, Puget (1999), Schichl, Neumaier (2005), Beelitz, Frommer, Lang, Willems (2005), Vu, Schichl, Sam-Haroud (2008) munkái. Az újdonság ezekben a közleményekben főként abban rejlik, hogy a gráf csomópontjait mely esetekben és milyen sorrendben vesszük figyelembe.

II. Számítási módszerek bemutatása

A zérushelykereső eljárások *Irodalmi áttekintés*ben írt komponenseinek a számításaim során alkalmazott változatait, valamint az alkalmazott szoftvereket írja le ez a rész.

1. Intervallum Newton módszer (IN/GS)

A következő szakaszban bemutatott affin linearizálási technika hatékonyságának vizsgálatához viszonyítási pontul a *C-XSC* nevű, C++ programozási nyelven írt osztálykönyvtárral megvalósított intervallum Newton módszert választottam (Hammer, Hocks, Kulisch, Ratz 1995; *13. Nonlinear Systems of Equations*). A *C-XSC*-ben egy általános célú zérushelykereső eljárást implementáltak. Prekondicionálás után a linearizált rendszer

(1-1)
$$RJ(c, X)(x - c) = -Rf(c)$$

alakú. A linearizált rendszerhez a *C-XSC* a *J* mátrixot automatikus differenciálással számítja (Hammer, Hocks, Kulisch, Ratz 1995; *12. Automatic Differentiation for Gradients, Jacobians and Hessians*), a prekondicionáló *R* mátrix a "középpont inverz", a linearizálás számításához használt *c* pont az *X* doboz középpontja. A keresési tér szűkítése intervallum Gauss-Seidel iterációval történik. Az egész eljárást **IN/GS**-sel jelölöm. A nullát tartalmazó intervallumokkal való osztás végrehajtásához a kiterjesztett intervallum aritmetikát (Ratz 1996) alkalmazza az eljárás, és a rések menti vágást Ratz szabályának megfelelően hajtja végre (Ratz 1994).

Az eredeti implementációt módosítottam, mert a gőz-folyadék egyensúlyi feladatoknál a változók intervallumainak szélessége között több nagyságrend eltérés lehet. A vágás során nem a legszélesebb komponenst felezem (eredeti implementáció), hanem Kearfott és Novoa (1990) javaslata szerint a J mátrix elemeit is figyelembe veszem: azt a j indexű komponenst felezem, melyre s_i maximális (1-2)-ben (diam: átmérő, az intervallum szélessége).

$$(1-2) s_j = \max_i \{ |J_{i,j}| \operatorname{diam}(X_j) \}$$

Ez a felezési szabály egyfajta automatikus skálázást biztosít.

2. Valós együttható-mátrixú közrefogás

2.1. Linearizálás

Számításaimhoz az affin aritmetikán alapuló újfajta linearizálási technikát használtam. Az Olvasónak minden szempontból kiváló bevezetést nyújt az affin aritmetikába Stolfi és Figueiredo (1997) monográfiája. Terjedelmi okok miatt itt csak a későbbiekben bemutatott eredmények megértéséhez szükséges jelöléseket és elnevezéseket vezetem be.

Az affin aritmetika

$$(2.1-1) x = x_0 + x_1 \varepsilon_1 + x_2 \varepsilon_2 + \ldots + x_n \varepsilon_n$$

alakú elsőfokú polinomokkal valósítja meg a kiindulási és számított mennyiségek közötti elsőrendű függőségek automatikus nyomon követését. Az x_i együtthatók (2.1-1)-ben valós számok, melyek értéke ismert (számított). Az ε_i -k *független* szimbolikus változókat, ún. zajváltozókat jelölnek, melyek értékei nem ismertek de a [-1, 1] intervallumba esnek.

Az imént elmondottakat a következő példa szemlélteti. Legyenek X és Y olyan intervallumok, melyek tartalmazzák rendre az x és y független változókat, $x \in X$ és $y \in Y$. Határozzuk meg affin aritmetikával az x-y mennyiség intervallumát! Ehhez először a kiindulási változóknak megfeleltethető affin formákat definiálunk:

$$(2.1-2) x = x_0 + x_1 \varepsilon_1, \varepsilon_1 \in [-1, 1],$$

$$(2.1-3) y = y_0 + y_1 \varepsilon_2, \varepsilon_2 \in [-1, 1],$$

ahol x_0 , y_0 rendre az X, Y intervallum középpontja; x_1 , y_1 rendre az X, Y intervallum sugara, tehát x_1 és y_1 pozitív. A változók függetlenségét a független ε_1 és ε_2 zajváltozók fejezik ki. A kérdéses intervallum így

$$(2.1-4) x - y = (x_0 - y_0) + x_1 \, \varepsilon_1 - y_1 \, \varepsilon_2 \in [(x_0 - y_0) - x_1 - y_1, (x_0 - y_0) + x_1 + y_1] = [(x_0 - x_1) - (y_0 + y_1), (x_0 + x_1) - (y_0 - y_1)],$$

azaz visszakaptuk a hagyományos intervallum aritmetika korábban bemutatott szabályai szerint adódó X - Y intervallumot (I. rész, 4. Intervallum módszerek, (4-3)).

Az *Irodalmi áttekintés 4.1. A függőségi probléma* című részében említettem meg, hogy az x-x művelet eredményére nem kapjuk vissza a [0,0] intervallumot a hagyományos intervallum aritmetika szabályai szerint, ha az x változó a nem degenerált X intervallumba esik. Az x-x művelet eredménye affin aritmetikával:

$$(2.1-5) x - x = (x_0 + x_1 \varepsilon_1) - (x_0 + x_1 \varepsilon_1) = (x_0 - x_0) + (x_1 - x_1) \varepsilon_1 = 0,$$

azaz visszakaptuk a valós aritmetikában megszokott azonosságot.

Az $\alpha x + \beta y + \gamma$ affin művelet eredményét (a kerekítési hibáktól eltekintve) pontosan meg tudjuk határozni:

(2.1-6)
$$\alpha x + \beta y + \gamma = (\alpha x_0 + \beta y_0 + \gamma) + \sum_{i=1}^{n} (\alpha x_i + \beta y_i) \varepsilon_i.$$

A nem affin $f^*(\varepsilon_1, ..., \varepsilon_n)$ függvényt egy gondosan megválasztott

(2.1-7)
$$f^{a}(\varepsilon_{1},...,\varepsilon_{n}) = z_{0} + z_{1}\varepsilon_{1} + ... + z_{n}\varepsilon_{n}$$

affin függvénnyel közelítjük, és egy új $z_k \mathcal{E}_k$ tagot is bevezetünk, hogy a közelítés hibáját közrefogjuk:

$$(2.1-8) |z_k| \ge \sup\{|f^*(\varepsilon_1, ..., \varepsilon_n) - f^a(\varepsilon_1, ..., \varepsilon_n)|\}.$$

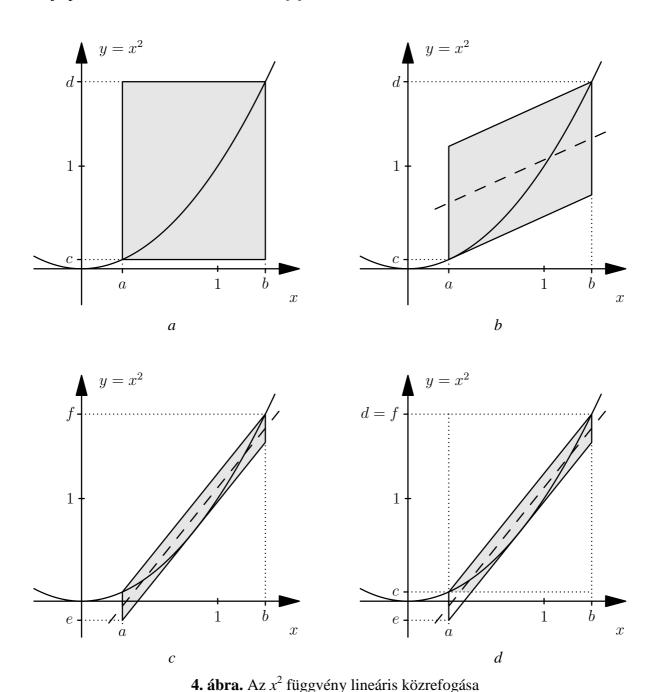
Az ε_k minden korábbi zajváltozótól független. A $f^*(\varepsilon_1,...,\varepsilon_n)$ nem affin függvény affin közrefogása így:

$$(2.1-9) f^*(\varepsilon_1, ..., \varepsilon_n) = f^a(\varepsilon_1, ..., \varepsilon_n) + z_k \varepsilon_k = z_0 + z_1 \varepsilon_1 + ... + z_n \varepsilon_n + z_k \varepsilon_k.$$

A közelítő f^a függvény megválasztásánál, azaz a valós $z_0, z_1, ..., z_n$ számok megválasztásánál a szabadsági fokok száma n+1. Ésszerű tehát valamilyen szempontból optimális függvényt választani. A *Csebisev* vagy *minimax* közelítésnél az f^a függvénynek f^* -tól vett maximális eltérését minimalizáljuk, azaz $|z_k|$ -t. A *min-range* közelítésnél a végeredményt közrefogó hagyományos intervallum szélességét minimalizáljuk.

Az x² függvény minimax és min-range közelítését szemlélteti a 4b és 4c ábra. Az x² függvény a vizsgált intervallum felett szigorúan pozitív, de látható, hogy a minimax közelítéssel kapott linearizált alak negatív értékeket is közrefog, az eredmény értékkészletét túlbecsli. A kapott értékkészlet a hagyományos intervallum aritmetikával kapottnál rosszabb. Aktivitási együtthatómodellek kiértékelését könnyen lehetetlenné teheti a részeredmények értékkészletének hasonló túlbecslése (nullával osztás vagy negatív argumentum a logaritmus függvény számításánál). A min-range közelítéssel kapott linearizált alak ugyan az értékkészlet tekintetében optimális, de a minimax közelítéshez képest kevesebb információt őriz meg a függőségekről (a szürke terület nagyobb). Ha a minimax közelítés esetében az eredmény értékkészletét hagyományos intervallum aritmetikával is számítjuk, akkor kapjuk a vegyes affin- és intervallum-aritmetikai modellt (röviden vegyes modellt), ezt szemlélteti a 4d ábra. A vegyes modellnél a részeredmények értékkészletét nemcsak számítjuk intervallum aritmetikával, hanem el is tároljuk, és a későbbi számítások során fel is használjuk azt, amikor erre lehetőség nyílik (Stolfi és Figueiredo 1997, 75-76. o.). A vegyes modell további előnyei,

hogy egyéb korlátokat is figyelembe tudunk venni a függvény kiértékelése során, erre mutat majd példát a III. rész *3.1. Linearizálás fejlesztése* című szakasz.



(a) hagyományos intervallum aritmetikával, (b) affin aritmetikával és min-range közelítéssel, (c) affin aritmetikával és Csebisev közelítéssel, (d) vegyes affin és intervallum aritmetikával (Csebisev közelítés).

2.2. Szűkítési technikák

2.2.1. Egyenletenkénti szűkítés (AA/CP)

A megoldandó egyenletrendszer *i*-ik egyenletét linearizáljuk affin aritmetikával, ennek eredménye a

$$(2.2-1) \sum_{k=1}^{n} a_{i,k} \, \varepsilon_k = B_i,$$

lineáris egyenlet, ahol $a_{i,k}$ valós számok; B_i intervallum; ε_k az x_k , k-ik független változóhoz rendelt zajváltozó:

$$(2.2-2) x_k = x_{0,k} + x_{1,k} \varepsilon_k.$$

Ha nulla nem eleme az i-ik függvény értékkészletét közrefogó intervallumnak, akkor a (2.2-1) egyenletnek nincs megoldása, és ekkor az adott dobozban biztosan nem lehet megoldása az eredeti egyenletrendszernek sem. Ellenkező esetben a j-ik változó X_j intervallumát a (2.2-1) linearizált alak segítségével (várhatóan) szűkíteni tudjuk. Tekintsük a következő átrendezéseket:

(2.2-3)
$$\sum_{k=1}^{n} a_{i,k} \, \varepsilon_k = a_{i,j} \varepsilon_j + \sum_{k \neq j} a_{i,k} \, \varepsilon_k = B_i,$$

$$(2.2-4) a_{i,j}\varepsilon_j = B_i - \sum_{k \neq j} a_{i,k} \varepsilon_k,$$

(2.2-5)
$$\varepsilon_{j} = \frac{1}{a_{i,j}} \left(B_{i} - \sum_{k \neq j} a_{i,k} \, \varepsilon_{k} \right), \quad \text{ha } a_{i,j} \neq 0.$$

Innen adódik a szűkítés lépése:

(2.2-6)
$$e_{j} = [-1, 1] \cap \frac{1}{a_{i,j}} \left(B_{i} - \sum_{k \neq j} a_{i,k} [-1, 1] \right), \quad \text{ha } a_{i,j} \neq 0,$$

$$(2.2-7) X_j^{ij} = x_{0,j} + x_{1,j}e_j.$$

Az imént leírtakat minden változóra alkalmazzuk, minden egyenlet esetében. A most bemutatott eljárás Kolev (2000) A5 algoritmusának affin aritmetikára átírt változata. A konzisztencia technikák szemszögéből nézve (2.2-6) nem más, mint a *j*-ik linearizált egyenlet változói intervallumának konzisztenssé tétele a *j*-ik egyenletre nézve.

2.2.2. Szűkítés a legszűkebb burkoló módszerével

A megoldandó egyenletrendszer affin aritmetikával történő linearizálásával kapjuk az

$$(2.2-8) A \varepsilon = B$$

lineáris intervallum egyenletrendszert, ahol az A együtthatómátrix $n \times n$ -es valós mátrix, B intervallum vektor. A (2.2-8) megoldásának intervallum burkolója ($box\ hull$)

$$(2.2-9) e = A^{-1} B,$$

az így kapott *e* intervallum vektort (várhatóan) fel tudjuk használni a zajváltozók [–1, 1] korlátainak szűkítésére.

Az eljárást geometriailag szemlélteti az 5. ábra, két esetet bemutatva: amikor lehet megoldás (5a) és amikor nincs megoldás (5b) a vizsgált dobozban. Az eredeti dobozt (változókat közrefogó intervallum vektort) X jelöli, a (2.2-8) megoldáshalmazát W, a megoldáshalmazt közrefogó legszűkebb intervallum vektort Y. A legszűkebb burkoló módszerével történő szűkítés eredménye az X' intervallum vektor: $X' = X \cap Y$.

2.2.3. Lineáris programozás – LP szűkítés (AA/LP)

Az affin aritmetikával történő linearizálás előnye a hagyományos intervallum Newton módszerekhez képest, hogy *közvetlenül* lehetővé teszi a keresési tér szűkítését lineáris programozással, melyet röviden csak *LP szűkítés*ként hívok a későbbiekben. A (2.2-8) linearizált rendszer a zajváltozók –1 és 1 alsó- és felső korlátjaival adja a lineáris programozási feladat korlátjait, és a szűkítés során változatlan marad, egyedül a célfüggvényt változtatjuk. Ha az LP feladatnak nincs megengedett megoldása, akkor az adott dobozban nincs megoldása az eredeti nemlineáris feladatnak.

$$\min / \max e_j \qquad \qquad \min den j-re (1, 2, ..., n)$$

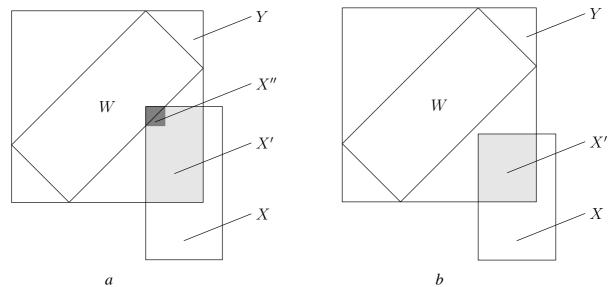
$$s.t.$$

$$(2.2-10) \qquad \qquad B_L \le A \ e \le B_U \qquad \qquad (ahol \ B = [B_L, B_U])$$

$$-1 \le e \le 1$$

Az eredeti változók intervallumát (2.2-7) szerint újítjuk fel, az e_j -k kapott szélsőértékeit használva. A konzisztencia technikák szemszögéből nézve a fenti eljárás úgy is felfogható, hogy az összes változó intervallumát tesszük konzisztenssé a teljes linearizált rendszerre nézve. A lineáris programozási feladatok megoldására a GNU GLPK nevű szoftvert használtam, amit ANSI C nyelven írtak.

Az LP szűkítést geometriailag szemlélteti az 5. ábra, két esetet bemutatva: amikor lehet megoldás (a) és amikor nincs megoldás (b) a vizsgált dobozban. Az ábrák egyben összehasonlítást is adnak az előző szakaszban írt szűkítési technikával. Az eredeti dobozt (változókat közrefogó intervallum vektort) X jelöli, a (2.2-8) megoldáshalmazát W, a W-t közrefogó legszűkebb intervallum vektort Y. Az LP szűkítés eredménye az X és W metszetét közrefogó legszűkebb X'' intervallum vektor. Az (a) esetben abban mutatkozik meg az LP szűkítés előnye, hogy $X'' \subset X'$. A (b) esetben X-nek és W-nek a metszete üres halmaz, azaz a X-ben biztosan nincsen megoldása az eredeti nemlineáris egyenletrendszernek. Az LP szűkítés ezt kimutatja: az LP feladatoknak nincs megengedett megoldása. A legszűkebb burkoló módszerével nem tudjuk kimutatni, hogy X-ben nincs megoldás: X'-t kapjuk a szűkítés eredményeként.



5. ábra. A legszűkebb burkoló és az LP szűkítési technikák geometriai szemléltetése. Magyarázat a szövegben.

3. A számítások hardver és szoftver környezete

Minden számítást az alábbi hardver és szoftver környezetben végeztem.

Processzor: Intel Pentium 4 530 Prescott @ 3.00 GHz, L1 cache 16 KB, L2 cache 1024 KB

Memória: 2×512 MB PC3200 DDR RAM (dual channel interleaved), bus speed 800 MHz

Chipset: Intel i915P

Operációs rendszer: Kubuntu 5.04 (in text mode), Ubuntu kernel 2.6.10-5-686-smp

Fordító program: Intel C++ Compiler for Linux 8.1, compiler flags: -O2 -ip -static -xP

III. Eredmények

Az eredményeket a kutatás időrendjében mutatom be. Így nem csak az eredmények, hanem az odáig vezető út is nyomon követhetővé válik. A kutatás során döntéseket kellett hoznunk egyes módszerek alkalmazásáról vagy éppen elvetéséről. Az időrendbeli bemutatás remélhetőleg jobban megvilágítja az egyes döntések mögötti motivációt.

1. A zérushelykereső eljárás algoritmikus vázlata

- **0. lépés** A feldolgozandó dobozok listájára helyezzük a kezdeti, kiindulási dobozt (vagy dobozokat)
- **1. lépés** Ha a feldolgozandó dobozok listája üres, akkor a keresést befejeztük, ellenkező esetben levesszük a listáról annak első elemét, $X^{(k)}$ -t.
- **2. lépés** Linearizáljuk a függvényt $X^{(k)}$ felett. Ha az eredmény értékkészlete nem tartalmazza a nullát, akkor töröljük $X^{(k)}$ -t és az **1. lépés**től folytatjuk tovább.
- **3. lépés** Alkalmazzuk az egyenletenkénti szűkítést. Ha üres intervallum adódik a szűkítés során, akkor töröljük $X^{(k)}$ -t és az **1. lépés**től folytatjuk tovább.
- **4. lépés** Újra linearizáljuk a függvényt immár a (remélhetőleg) szűkebb $X^{(k)}$ felett. Ezután lineáris programozást alkalmazunk a doboz szűkítésére. Ha az első LP feladat infizibilis, akkor töröljük $X^{(k)}$ -t és az **1. lépés**től folytatjuk tovább.
- **5. lépés** Ha szűkítés után $X^{(k)}$ legszélesebb komponense nem szélesebb egy előre meghatározott értéknél, akkor a dobozt kiíratjuk (tartalmazhat megoldást). Ellenkező esetben a legszélesebb komponens mentén megfelezzük a dobozt és a kapott két dobozt a feldolgozandó dobozok listájára helyezzük. Az eljárást az **1. lépés**től folytatjuk tovább.

Megjegyzések

A fenti algoritmust a későbbiekben **AA/LP**-vel jelölöm. Megtehetjük, hogy nem alkalmazunk lineáris programozást a keresési tér szűkítésére, azaz a 4. lépést kihagyjuk, ezt az algoritmust a későbbiekben **AA/CP**-vel jelölöm. Azt is megtehetjük, hogy a 4. lépésben nem lineáris programozást alkalmazunk a keresési tér szűkítésére, hanem a legszűkebb burkoló módszerét.

Az 5. lépésben, ha a dobozt "elegendő mértékben" sikerült szűkíteni a megelőző lépésekben, akkor dönthetünk a 2., 3., 4. lépések megismétlése mellett is a doboz megfelezése helyett. Nehéz számszerűsíteni, hogy mikor "elegendő mértékű" a szűkítés, útmutatással hagyományos intervallum aritmetikánál Hansen és Walster (2004) szolgál (255–257. oldal).

Azt is megtehetjük, hogy a 2., 3., 4. lépéseket a szűkülés mértékétől függetlenül minden iterációs lépésben előre definiált véges számú lépésben megismételjük. Ez utóbbi ugyan közel sem a legjobb megközelítés, viszont könnyű implementálni.

2. Linearizálási és szűkítési technikák összehasonlítása

Korábbi számításaim azt mutatták (Baharev, Diplomamunka 2005), hogy az általános célú intervallum Newton módszer (*C-XSC*) közvetlen alkalmazása folyadék-folyadék egyensúlyi egységek számítására, vagy gőz-folyadék egyensúlyi egységek és kaszkádjaik számítására a gyakorlat számára elfogadhatatlanul hosszú számítást eredményez. Ez megfelelt a várakozásaimnak. Döntést kellett hoznom, hogy a számos fejlesztési javaslat közül, amelyeket az *Irodalmi áttekintés*ben tételesen fel is soroltam, melyiket válasszam. Választásom az affin aritmetikára esett. Ennek okai a következők voltak. Az irodalomban közölt numerikus példák szerint az affin aritmetikán alapuló zérushelykereső eljárás a hagyományos intervallum Newton módszernél nagyságrendileg hatékonyabbnak bizonyult (Kolev 1997, 1998ab, 1999, 2000, 2004a; Kolev, Mladenov 1998; Kolev, Nenov 2000; Nenov, Fylstra 2003; Yamamura, Kumakura, Inoue 2001; Yamamura, Tanaka 2006; Miyajima, Kashiwagi 2007), és az összehasonlításhoz használt mintafeladatok egy része nagyméretű egyenletrendszer volt, néhány ezer változóval.

Egy másik ok az volt, hogy várakozásaim szerint a lineáris programozás a keresési tér szűkítésére – amit az affin aritmetika *közvetlenül* lehetővé is tesz – hatékonynak bizonyul majd kaszkádok számításánál. A lineáris programozás ilyen irányú alkalmazása nem minden feladattípus esetén kifizetődő. Feltehető, hogy erősen csatolt egyenletek esetében megéri alkalmazni, egyhén csatoltak esetében nem, de nem ismert egyértelmű kritérium erre vonatkozóan. Az erős csatoltság alatt itt azt értem, hogy van(nak) olyan változó(k), mely(ek) számos egyenletet kapcsol(nak) össze. Kaszkádok esetében az egyenletrendszer nagyméretű (legalább néhány száz változó), és az egyenletek erősen csatoltak, ezt azok linearizálása után a lineáris programozás ideálisan kezeli.

Egy újabb érv volt az affin aritmetika mellett, hogy *automatikusan* mérsékli a függőségi probléma miatt túlbecslést. A túlbecslés az aktivitási együttható számításánál komoly probléma, nagyban rontja az intervallumos zérushelykereső eljárások hatékonyságát. A doktori munkámat a linearizálási technikák és a keresési tér szűkítésére szolgáló technikák összehasonlításával kezdtem. Ezt olyan módon valósítottam meg, hogy az egyes linearizálási

és szűkítési technikákat zérushelykereső eljárásba ágyaztam be, majd egyensúlyi egységek és kaszkádjaik számításán keresztül vizsgáltam hatékonyságukat. Az összehasonlításhoz használt algoritmusok az összehasonlítás tárgyát képező összetevőtől (azaz linearizálás vagy szűkítés) eltekintve azonosak, vagy ahol ez nem lehetséges, ott igyekeztem analóg összetevőt használni. Ha nem így jártam volna el, akkor az eredmények nem lettek volna összehasonlíthatók, és nem tudtam volna levonni következtetést. Más szavakkal: ha több szempontból is különböznek az összehasonlítandó algoritmusok, akkor nem tudjuk egyértelműen azonosítani, hogy mi az oka a hatékonyságbeli eltérésnek. Az összehasonlításhoz használt algoritmusok csak a legszükségesebb összetevőket tartalmazzák, így például nem alkalmaztam fejlett konzisztencia technikákat.

Az intervallum aritmetika egyik úttörője, Ralph Baker Kearfott különböző fejlesztési változatokat összehasonlító cikkének *összegzésében* az alábbiakat írja.

"An effective algorithm involves several acceleration techniques that interact. Assessment of a particular technique would change depending on what other techniques are present and when they are applied."

(*Kearfott 1997*)

A korszerű zérushelykereső eljárások számos összetevőből állnak, ezen összetevők között bonyolult kölcsönhatás van. Egy fejlesztési javaslat hatékonyságának megítélését befolyásolhatja, hogy milyen egyéb összetevőket használunk, és az iteráció melyik fázisában. Bár itt az idézett mondatban nem szerepel, de nyilvánvaló, hogy az összehasonlításhoz használt feladatoktól is függhet, hogy az egyes módszerek egymáshoz hogyan viszonyulnak hatékonyság tekintetében.

Az összehasonlításhoz használt feladatok professzionális szimulátorokkal vagy az adott feladat típusra kidolgozott speciális algoritmussal nehézség nélkül megoldhatók. Erre azért volt szükség, hogy ismerjem a feladat megoldását, e nélkül ugyanis az általam írt algoritmus hibakeresése reménytelen lett volna. Nem a feladatok számszerű megoldása az érdekes tehát, hanem a megoldáshoz szükséges idő és iterációszám. A kutatómunka során készített első, affin aritmetikát implementáló C++ osztálynak részben az is célja volt, hogy a módszert megértsem, és azonosítsam azokat a részeket az algoritmusban, amelyek fejlesztésével tovább javítható a hatékonyság.

2.1. Folyadék-folyadék megoszlási feladat

Adott bruttó összetétel (z) mellett keressük az egymással egyensúlyban lévő fázisok arányát (λ) és összetételét (x és y), feltételezve, hogy két folyadékfázis alakul ki. Az egyensúly szükséges feltételét kifejező ún. izoaktivitási feltétel egyenleteit oldjuk meg a komponensmérlegegyenletekkel és a moltörtösszegzési egyenletekkel együtt állandó nyomáson, adott hőmérsekleten (T). A triviális megoldás (x=y=z) számunkra érdektelen, és sajnos a módszernek problémát okoz. Ugyanis a triviális megoldás folytonos halmazát tartalmazó, rengeteg apró doboz kerülne a megoldások listájára. Ez egyrészt sokáig tartana és értelmetlen, másrészt rendszerint a tárhely sem elég ehhez. Ezt el tudjuk kerülni például úgy, hogy a keresési térből kivágunk egy, a triviális megoldást tartalmazó szűk dobozt. Kaszkádok számításánál ez közvetlenül nem lehetséges, hiszen ekkor nem ismert az egyes egységek bruttó táplálása. Azonban kaszkádoknál is lehetséges egy egyenlőtlenség hozzáadása az egyenletekhez, amelyik kizárja, hogy a megoldásban a fázisok összetétele azonos lehessen.

2.1.1. Változók

A komponensek számát C jelöli. Az i index 1-től C-ig fut.

- x_i az i-ik komponens moltörtje az I. fázisban
- y_i az *i*-ik komponens moltörtje a II. fázisban
- *λ* a fázisarány
- r segédváltozó a triviális megoldás kivágásához

Összesen 2C+2 változónk van. A moltörtek kezdeti intervalluma $[\delta, 1.0]$, ahol δ kis pozitív szám, számításaimhoz 10^{-6} -nak választottam, λ intervalluma [0.0, 1.0]. Az r segédváltozó kezdeti intervallumát a segédváltozóhoz tartozó egyenletnél adom meg. A kezdeti intervallumok alsó- és felső végpont értéke nem kerekítve értendő, hanem azt a lebegőpontos számot értjük alatta, amelyik rendre nem nagyobb illetve nem kisebb, mint a megadott alsó- és felső végpont.

2.1.2. Egyenletek

Moltörtösszegzési egyenletek

- (2.1-1) $\sum x_i = 1$
- (2.1-2) $\Sigma y_i = 1$

Komponens-mérlegegyenletek

(2.1-3)
$$\lambda x_i + (1 - \lambda) y_i = z_i \qquad (i = 1 \dots C)$$

Aktivitások egyenlőségét kifejező egyenletek

(2.1-4)
$$\ln \gamma_i (x_1, x_2, \dots x_C) + \ln x_i = \ln \gamma_i (y_1, y_2, \dots y_C) + \ln y_i$$

Az aktivitási együtthatókat NRTL modellel számítottam.

(2.1-5a)
$$\ln \gamma_i(x_1, x_2, ..., x_C) = \frac{\sum_{j=1}^C \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^C G_{ki} x_k} + \sum_{j=1}^C \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^C G_{kj} x_k} \cdot \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_{l=1}^C \tau_{lj} G_{lj} x_l}{\sum_{k=1}^C G_{kj} x_k}\right)$$

$$(2.1-5c) G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \cdot \tau_{ij})$$

A modell paramétereket a ChemCAD 5.5.4 (Chemstations, Inc.) szoftver adatbázisából vettem. A hőmérsékletet 298.15 K-nek specifikáltam.

1a. táblázat. NRTL modell paraméterek

Biner rendszer: (1) metanol, (2) ciklohexán

B_{12} (cal/mol)	B_{21} (cal/mol)	$\alpha_{12} = \alpha_{21}$
593.739	668.941	0.3995

1b. táblázat. NRTL modell paraméterek

Terner rendszer: (1) aceton, (2) toluol, (3) víz

i	j	B_{ij} (cal/mol)	B_{ji} (cal/mol)	$\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$
1	2	-124.774	366.098	0.2950
1	3	377.577	653.885	0.5856
2	3	2839.37	2160.78	0.2000

A triviális megoldást elvető egyenlet

(2.1-6)
$$\sum_{i=1}^{C-1} (x_i - y_i)^2 = r$$

Az r segédváltozó kezdeti intervalluma [Δ_{\min} , C–1], ahol Δ_{\min} önkényesen választott kis pozitív szám, számításaimhoz (C–1)·10⁻⁴-nek választottam. Az egyenlet tulajdonképpen a következő egyenlőtlenséggel egyenértékű:

(2.1-7)
$$\sum_{i=1}^{C-1} (x_i - y_i)^2 \ge \Delta_{\min}.$$

Így ugyan azokat a nem triviális megoldásokat is elvetjük, amelyekre $\sum_{i=1}^{C-1} (x_i - y_i)^2 < \Delta_{\min}$ teljesül, de ez a gyakorlat számára elfogadható.

Megjegyzések

Biner rendszer esetében az NRTL modell a következő alakot ölti:

(2.1-8a)
$$\ln \gamma_1(x_1, x_2) = x_2^2 \left(\tau_{21} \frac{G_{21}^2}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right),$$

(2.1-8b)
$$\ln \gamma_2(x_1, x_2) = x_1^2 \left(\tau_{12} \frac{G_{12}^2}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right).$$

Itt $x_2 = 1 - x_1$. A számítások során felhasználtam, hogy a fenti egyenletekben a következő kifejezések többször is előfordulnak:

$$(2.1-9) (x_1 + x_2 G_{21})^2 \text{ és } (x_2 + x_1 G_{12})^2,$$

ezeket csak egyszer szükséges kiértékelni egy iterációs lépésben. A (2.1-1)-(2.1-4), (2.1-6) egyenletrendszert egyszerűbb alakra hozhatjuk:

$$(2.1-10) z_1 - \lambda x_1 - (1-\lambda)y_1 = 0,$$

$$(2.1-11) \qquad (\ln \gamma_1(x_1, x_2) + \ln x_1) - (\ln \gamma_1(y_1, y_2) + \ln y_1) = 0,$$

$$(2.1-12) \qquad (\ln \gamma_2(x_1, x_2) + \ln x_2) - (\ln \gamma_2(y_1, y_2) + \ln y_2) = 0,$$

$$(2.1-13) (x_1 - y_1)^2 = r,$$

az
$$x_2 \leftarrow 1 - x_1, y_2 \leftarrow 1 - y_1$$
 értékadások mellett; változók x_1, y_1, λ, r .

Háromkomponensű rendszer esetében az NRTL modell egyenleteit analitikusan átalakítottam, abban a reményben, hogy a kapott alak a számításoknál kedvezőbb lesz (csökken a függőségek miatti túlbecslés).

$$\ln \gamma_1 = \frac{G_{21}^2 \tau_{21} x_2^2 + G_{21} G_{31} (\tau_{21} + \tau_{31}) x_2 x_3 + G_{31}^2 \tau_{31} x_3^2}{(x_1 + G_{21} x_2 + G_{31} x_3)^2} + \frac{G_{12} \tau_{12} x_2^2 + G_{12} G_{32} (\tau_{12} - \tau_{32}) x_2 x_3}{(G_{12} x_1 + x_2 + G_{32} x_3)^2} + \frac{G_{13} \tau_{13} x_3^2 + G_{13} G_{23} (\tau_{13} - \tau_{23}) x_2 x_3}{(G_{13} x_1 + G_{23} x_2 + x_3)^2}$$

$$\ln \gamma_2 = \frac{G_{21}\tau_{21}x_1^2 + G_{21}G_{31}(\tau_{21} - \tau_{31})x_1x_3}{(x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3)^2} + \frac{G_{12}^2\tau_{12}x_1^2 + G_{12}G_{32}(\tau_{12} + \tau_{32})x_1x_3 + G_{32}^2\tau_{32}x_3^2}{(G_{12}x_1 + x_2 + G_{32}x_3)^2} + \frac{G_{23}\tau_{23}x_3^2 + G_{23}G_{13}(\tau_{23} - \tau_{13})x_1x_3}{(G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + x_3)^2}$$

$$\ln \gamma_3 = \frac{G_{31}\tau_{31}x_1^2 + G_{31}G_{21}(\tau_{31} - \tau_{21})x_1x_2}{\left(x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3\right)^2} + \frac{G_{32}\tau_{32}x_2^2 + G_{12}G_{32}(\tau_{32} - \tau_{12})x_1x_2}{\left(G_{12}x_1 + x_2 + G_{32}x_3\right)^2} + \frac{G_{13}^2\tau_{13}x_1^2 + G_{13}G_{23}(\tau_{13} + \tau_{23})x_1x_2 + G_{23}^2\tau_{23}x_2^2}{\left(G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + x_3\right)^2}$$

A számítások során felhasználtam, hogy a fenti egyenletekben a következő kifejezések többször is előfordulnak:

$$(2.1-14) x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3,$$

$$(2.1-15) (x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3)^2, (G_{12}x_1 + x_2 + G_{32}x_3)^2, (G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + x_3)^2,$$

ezeket csak egyszer szükséges kiértékelni egy iterációs lépésben.

2.1.3. Implementációs részletek

Az affin műveleteket C++ programozási nyelven implementáltam, a Szabvány Sablon Könyvtár (STL) map nevű tárolóját használva az affin változókban előforduló nem nulla együtthatók indexének és értékének tárolására. Az affin változók együtthatóinak számítását a kerekítési hibák figyelembe vételével számítottam, ehhez a *C-XSC* osztálykönyvtár biztosította az eljárásokat. A négy alapműveletet és három nem affin függvényt kellett implementálnom. Ez utóbbiak az exponenciális függvény (*minimax*), természetes logaritmus függvény (*minimax*), és a négyzetfüggvény (*min-range*). A szorzás és osztás szabályait Kolev (2004a) közleménye szerint valósítottam meg. Egyéb részletek tekintetében Stolfi és Figueiredo (1997) monográfiáját követtem.

A II. rész 2.2.3. *Lineáris programozás – LP szűkítés (AA/LP)* szakaszban bemutatott, lineáris programozással történő szűkítést (röviden LP szűkítést) a következőképpen realizáltam.

$$\min / \max e_j \qquad \min den j-re (1, 2, ..., n)$$

$$s.t.$$

$$B_L \le A e \le B_U$$

$$-1 \le e \le 1$$

A szűkítés során a korlátok változatlanok maradnak, ezért elegendő pontosan egyszer kezdeti megengedett bázismegoldást számítani a primál szimplex algoritmus első lépcsőjével, a célfüggvényt konstansként rögzítve. Ha nincs megengedett bázismegoldás, akkor a vizsgált dobozban nem lehet megoldás. Bármelyik megengedett bázismegoldás a célfüggvény tetszőleges megváltoztatása után is megengedett marad, ezért minden részfeladat az előző részfeladat optimális bázismegoldását használja kezdeti bázismegoldásnak, és a primál szimplex algoritmusnak csak a második lépcsőjét kell alkalmazni. A számításokhoz a GNU GLPK 4.10 szoftvert használtam.

A lineáris programozási feladatok megoldása hagyományos lebegőpontos számításokkal történik, a numerikus problémák miatt a kapott eredmény helytelen lehet. Több javaslat is született az LP megoldó motor eredményének korrekciójára intervallum módszerekkel (Jansson 2004; Neumaier, Shcherbina 2004). Neumaier és Shcherbina algoritmusát implementáltam, de nem használtam az alábbi számításoknál.

Kearfott és Novoa (1990) szabályának affin analógját használtam vágási szabálynak. Annak a j indexű változónak a mentén felezek, melyre $\max_i (\operatorname{diam}(a_{i,j} e_j))$ maximális a szűkítési lépések után (diam: átmérő, az intervallum szélessége).

2.1.4. Numerikus eredmények és értékelésük

2. táblázat. Változók kiindulási intervallumai. Komponensek a C = 2 esetben: (1) metanol, (2) ciklohexán, bruttó összetétel z = [0.5, 0.5]; C = 3 esetben: (1) aceton, (2) toluol, (3) víz, bruttó összetétel [0.2, 0.4, 0.4]. Hőmérséklet mindkét esetben T = 298.15K. A táblázatban csak egy nem triviális megoldást tüntettem fel. Leállási feltétel: az eredményben megmaradó relatív bizonytalanság kisebb legyen, mint 0.001.

	C = 2		C = 3	
Változó	Kiindulási	Megoldás	Kiindulási	Megoldás
	intervallum	(3 jegy)	intervallum	(3 jegy)
x_1	[1.0e-6, 0.999999]	0.841	[1.0e-6, 1.0]	0.0446
x_2	_		[1.0e-6, 1.0]	0.000603
x_3	_	_	[1.0e-6, 1.0]	0.955
y_1	[1.0e-6, 0.999999]	0.108	[1.0e-6, 1.0]	0.311
y_2	_		[1.0e-6, 1.0]	0.686
y_3	_		[1.0e-6, 1.0]	0.00284
λ	[0.0, 1.0]	0.535	[0.0, 1.0]	0.417
r	[0.0001, 1.00]	0.538	[0.0002, 2.0]	0.541

3. táblázat. Linearizálási technikák összehasonlítása, C = 2

/ daman	: 4% []	idő	:4 = 4 = : 4	iteráció	ciklusidő	ciklusidő
módszer	idő [s]	idő _{AA/CP}	iteráció	iteráció _{AA/CP}	$[\mu s]$	ciklusidő _{AA/CP}
IN/GS*	26.1	22.7	120234	85.5	217	0.27
AA/CP*	1.15	1.00	1407	1.00	817	1.00

^{*} Az IN/GS és AA/CP módszereket a II. rész 1., 2.2.1, és a III. rész 1. fejezetében tárgyaltam.

4. táblázat. Szűkítési technikák összehasonlítása, C = 2

módszer	idő [s]	idő	iteráció	iteráció	ciklusidő	ciklusidő
		$id{\Ho}_{AA/LP}$	пстасто	iteráció _{AA/LP}	$[\mu s]$	ciklusidő _{AA/LP}
AA/CP*	1.15	0.852	1407	1.04	817	0.82
AA/LP*	1.35	1.00	1355	1.00	996	1.00

^{*} Az AA/CP és AA/LP módszereket a II. rész 2.2. és a III. rész 1. fejezetében tárgyaltam.

5. táblázat. Linearizálási technikák összehasonlítása, C = 3

módszer	idő [s]	$\frac{id\H{o}}{id\H{o}_{AA/CP}}$	iteráció	iteráció iteráció _{AA/CP}	ciklusidő [ms]	ciklusidő ciklusidő _{AA/CP}
IN/GS	>318000	$>1.36\cdot10^4$	_	_		_
AA/CP	23.3	1.00	7715	1.00	3.01	1.00

6. táblázat. Szűkítési technikák összehasonlítása, C = 3

módszer	idő [s]	idő	iteráció	iteráció	ciklusidő	ciklusidő
		idő _{AA/LP}		iteráció _{AA/LP}	[ms]	ciklusidő _{AA/LP}
AA/CP	23.3	1.05	7715	1.33	3.01	0.79
AA/LP	22.1	1.00	5795	1.00	3.82	1.00

7. táblázat. Vizsgált eljárások összehasonlítása két és három komponens esetében

módszer	$\frac{\mathrm{id} \ddot{o}_{C=3}}{\mathrm{id} \ddot{o}_{C=2}}$	$\frac{\mathrm{iter\acute{a}ci\acute{o}}_{C=3}}{\mathrm{iter\acute{a}ci\acute{o}}_{C=2}}$	$\frac{\text{ciklusid} \ddot{0}_{C=3}}{\text{ciklusid} \ddot{0}_{C=2}}$
IN/GS	$>1.22\cdot10^4$	_	
AA/CP	20.2	5.48	3.69
AA/LP	16.4	4.28	3.83

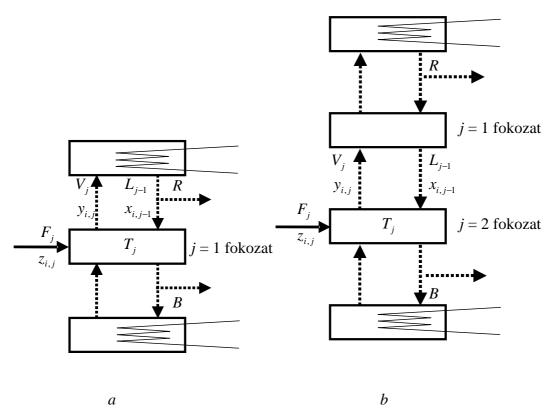
A linearizálási technikákat tekintve az AA/CP (II. rész 2.2, III. rész 1. fejezet) nagyságrendileg gyorsabban szolgáltatta a megoldásokat az IN/GS-nél (II. rész 1. fejezet) biner elegy esetében. Ez annak köszönhető, hogy kevesebb iterációra volt szüksége a megoldáshoz, az egy iterációra eső átlagos időigénye ugyanis mintegy négyszerese az IN/GS-ének. Terner elegy esetében az IN/GS három nap alatt sem talált megoldást, míg az AA/CP 24 másodpercen belül sikerrel oldotta meg a feladatot. A 7. táblázatból az is kiolvasható, hogy a komponensek számának növekedése miatti méret és bonyolultságbeli növekedés az IN/GS esetében több nagyságrenddel növelte a megoldáshoz szükséges időt, az AA/CP esetében ez egy nagyságrend volt.

A szűkítési technikákat illetően az AA/CP és az AA/LP (II. rész 2.2, III. rész 1. fejezet) esetében nincs lényeges különbség ezeknek a feladatoknak az esetében, az adott kiindulási doboz és alkalmazott implementáció mellett. Az AA/LP valamivel kevesebb iterációt igényel a megoldás megtalálásához, de az egy iterációra eső átlagos idő több, azt eredményezve, hogy a megoldáshoz szükséges összes idő a két módszernél nem tér el számottevő mértékben.

2.2. Ellenáramú gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok számítása

Az összehasonlításhoz használt kaszkádok a *6. ábrán* láthatók. A kaszkádok totálkondenzátorból, teljes visszaforralóból és egy vagy két egyensúlyi fokozatból állnak. A állandósult állapot számítását a részletes egyensúlyi, komponens- és hőmérleg-egyenletek, az ún. MESH egyenletek szimultán megoldásával számítottam. A gőzfázist ideális gázként

modelleztem, a folyadék nemidealitását aktivitási együttható modellel vettem figyelembe. Egyszerűsített entalpiamodellt használtam. A forrásponti folyadék entalpiáját nullának vettem, a gőzfázis moláris entalpiáját a komponensek konstans párolgáshőjének (λ_i) a moláris összetétellel (y_i) súlyozott összegeként számítottam: $H = \sum \lambda_i y_i$. Az entalpiamodell mögötti feltevés az, hogy a párolgáshők legalább egy nagyságrenddel nagyobbak, mint a folyadékvagy gőzfázis egyéb entalpiaváltozásai. Ez a feltevés desztillációnál ésszerű. Az egyszerűsített modellel kapott eredményeket a részletes és termodinamikailag konzisztens entalpiamodellt használó professzionális szimulátorok eredményeivel összehasonlítva azt tapasztaltam, hogy az eredmények 2-3 értékes jegyre megegyeznek, ami összemérhető a leállási feltétel által megszabott pontossággal.



6. ábra. Kaszkád totálkondenzátorral, teljes visszaforralóval, és (*a*) egy elméleti, (*b*) két elméleti fokozattal. A folytonos nyilak specifikált, a szaggatott nyilak ismeretlen áramokat jelölnek.

2.2.1. Változók

Az i = 1, 2, ... C indexet a komponensekhez, a j = 1, 2, ... N indexet az elméleti tányérokhoz rendeltem; C a komponensek, N az elméleti tányérok száma. A tányérok számozását felülről kezdtem, a 0. tányér a kondenzátor, az N+1. tányér a visszaforraló.

 $x_{i,j}$ az i. komponens moltörtje a folyadékfázisban a j. tányéron

 $y_{i,j}$ az i. komponens moltörtje a j. tányérról felszálló gőzben

 V_i a j. tányérról felszálló gőz molárama

T_i hőmérséklet a *j*. tányéron

2.2.2. Egyenletek

Az alábbi egyenletek i = 1, 2, ... C és j = 1, 2, ... N indexek mellett érvényesek.

Moltörtösszegzési egyenletek (S_x és S_y egyenletek)

$$\sum_{i=1}^{C} x_{i,j} = 1 (j = 1, 2, ... N)$$

$$\sum_{i=1}^{C} y_{i,j} = 1 (j = 1, 2, ... N)$$

Komponens-mérlegegyenletek (*M* egyenletek)

$$L_{j-1}X_{i,j-1} + V_{j+1}Y_{i,j+1} + F_{j}Z_{i,j} = L_{j}X_{i,j} + V_{j}Y_{i,j} \quad (i = 1, 2, ... C; j = 1, 2, ... N)$$

Itt L_j és F_j rendre a j. tányérnál a folyadék és a táplálás moláramát jelöli, $z_{i,j}$ az i. komponens moltörtjét jelöli a j. tányér táplálásában.

Hőmérlegegyenletek (H egyenletek)

$$V_{j} \sum_{i=1}^{C} \lambda_{i} \ y_{i,j} = V_{j+1} \sum_{i=1}^{C} \lambda_{i} \ y_{i,j+1}$$

Az egyszerűsített entalpiamodell paraméterei az atmoszférikus nyomáson, forrásponton mért párolgáshők. Ezek a *8. táblázatban* találhatók.

8. táblázat. A komponensek atmoszférikus nyomáson, forrásponton mért párolgáshői. Az adatok a ChemCAD 5.5.4 (Chemstations, Inc.) szoftver adatbázisából származnak.

Komponens i	λ_i (cal/mol)	λ_i (kJ/mol)
(1) aceton	6960	29.12
(2) metanol	8426	35.25
(3) víz	9717	40.66

Egyensúlyt leíró egyenletek (*E* egyenletek)

Az egyensúlyi összefüggést a módosított Raoult-Dalton összefüggéssel modelleztem.

$$\ln(\gamma_i(x_{1,j}, x_{2,j}, ..., x_{C,j}, T_j)) + \ln(x_{i,j}) + \ln(p_i(T_j)) = \ln(y_{i,j}) + \ln P$$

A γ_i aktivitási együtthatót a *Wilson* aktivitási együttható modell kétparaméteres változatával számítottam, a tiszta komponensek p_i gőznyomását az *Antoine* egyenlettel. Ezeket bővebben a kiegészítő egyenleteknél részletezem. Az oszlopban a nyomásesést elhanyagoltam, a *P* nyomás minden tányérnál rögzített, értékét a számításoknál 101325 Pa-nak vettem.

Kiegészítő egyenletek

A folyadékoldali nemidealitást a Wilson modellel vettem figyelembe.

$$\ln(\gamma_i(x_1, x_2, ..., x_C, T)) = -\ln\left(\sum_{a=1}^C x_a \Lambda_{ia}\right) + 1 - \sum_{b=1}^C \frac{x_b \Lambda_{bi}}{\sum_{a=1}^C x_a \Lambda_{ia}}$$

$$\Lambda_{ab}(T) = \frac{V_b^m}{V_a^m} \exp\left(-\frac{k_{ab}}{R_G T}\right) \quad (a = 1, 2, ..., C; b = 1, 2, ..., C)$$

A k_{ab} és V_i^m modellparaméterek értékeit a 9. és 10. táblázatban tüntettem fel; az R_G az egyetemes gázállandót (Regnault állandó, 1.98721 cal/($mol \cdot K$)) jelöli; T a hőmérsékletet jelöli a j. tányéron, a j indexet az egyszerűség kedvéért elhagytam.

9. táblázat. A Wilson modell paraméterei. Az adatok a ChemCAD 5.5.4 (Chemstations, Inc.) adatbázisából valók. Komponensek: (1) aceton, (2) metanol, (3) víz

i	j	k_{ij} (cal/mol)	k_{ji} (cal/mol)
1	2	-157.981	592.638
1	3	393.27	1430.0
2	3	-52.605	620.63

10. táblázat. Tiszta komponensek moláris térfogata folyadék fázisban. Az adatok a ChemCAD 5.5.4 (Chemstations, Inc.) termodinamikai adatbázisából valók.

Komponens i	V_i^m (cm ³ /mol)
Aceton	74.05
Metanol	40.729
Víz	18.069

11. táblázat. Az $\ln p = A - B/(T + C)$ Antoine egyenlet paraméterei, ahol p a gőznyomás mmHg-ben, T a hőmérséklet Kelvinben. Az adatok a ChemCAD 5.5.4 (Chemstations, Inc.) termodinamikai adatbázisából valók.

Komponens i	A_{i}	$B_i(K)$	$C_i(K)$
Aceton	16.732	2975.9	-34.523
Metanol	18.51	3593.4	-35.225
Víz	18.304	3816.4	-46.13

A tiszta komponensek gőznyomásának számításához használt

$$\ln(p_i(T)) = A_i - \frac{B_i}{C_i + T}$$

Antoine egyenletek paramétereit a *11. táblázat* tartalmazza. Itt is *T* a hőmérsékletet jelöli a *j*. tányéron, a *j* indexet az egyszerűség kedvéért elhagytam.

A specifikált *R* refluxarányból és *B* visszaforralási arányból következő anyagáramok az alábbiak.

$$L_0 = \frac{R}{R+1}V_1$$

$$V_{N+1} = \frac{B}{B+1}L_N$$

A teljes anyagmérlegből következő anyagáramok pedig a következők:

$$L_{N} = (B+1)\left(-\frac{1}{R+1}V_{1} + \sum_{k=1}^{N} F_{k}\right),$$

$$L_{j} = V_{j+1} - \frac{1}{R+1}V_{1} + \sum_{k=1}^{j} F_{k} \qquad (j=1, 2, ..., N-1).$$

Megjegyzések

Minden iterációs ciklusban egyszer kell kiszámítani a következő kifejezéseket:

$$\frac{1}{T},$$

$$\Lambda_{ab}, \qquad (a = 1, 2, ..., C; b = 1, 2, ..., C), \text{ és}$$

$$\sum_{a=1}^{C} x_a \Lambda_{ia} \qquad (i = 1, 2, ..., C).$$

A *j* indexet az áttekinthetőség érdekében elhagytam.

2.2.3. Specifikációk és a változók kezdeti intervallumai

Három egységből álló kaszkád

A rendszer a korábban bemutatott *6a ábrán* látható. A kondenzátor és a forraló között egy elméleti fokozat található. Komponensek: (1) aceton, (2) metanol, (3) víz, C = 3. Specifikációk: refluxarány R = 3; visszaforralási arány B = 4; táplálás $F_1 = 1.0$ mol/s, összetétele $z_{1,1} = 0.33$, $z_{2,1} = 0.34$, $z_{3,1} = 0.33$. Az oszlopban a nyomás minden tányéron 101325 Pa. A kiindulási dobozok a *12. táblázatban* találhatók.

12. táblázat. Változók kezdeti intervallumai a 3 fokozatból álló, *6a ábrán* látható kaszkádnál.

Változó	Kezdeti intervallum	Megoldás (3 jegy)
$x_{1,1}$	[0.02, 0.98]	0.164
$x_{2,1}$	[0.02, 0.98]	0.318
$x_{3,1}$	[0.02, 0.98]	0.517
$y_{1,1}$	[0.02, 0.98]	0.478
$y_{2,1}$	[0.02, 0.98]	0.359
$y_{3,1}$	[0.02, 0.98]	0.162
V_1	[1.5, 2.8]	2.11
T_1	[300.0, 350.0]	337

Négy egységből álló kaszkád

A rendszer a korábban bemutatott *6b ábrán* látható. A kondenzátor és a forraló között két elméleti fokozat található. Komponensek: (1) aceton, (2) metanol, (3) víz, C = 3. Specifikációk: refluxarány R = 3; visszaforralási arány B = 4; táplálások $F_1 = 0.0$ mol/s,

 $F_2 = 1.0 \text{ mol/s}$, összetétele $z_{1,2} = 0.33$, $z_{2,2} = 0.34$, $z_{3,2} = 0.33$. Az oszlopban a nyomás minden tányéron 101325 Pa.

A számításokat három különböző szélességű tartománnyal ("szűk", "közepes", "széles") hajtottam végre annak érdekében, hogy vizsgálható legyen az egyes módszerek hatékonysága a kiindulási doboz szélességétől függően. A kiindulási dobozok a *13. táblázatban* találhatók.

13. táblázat. Változók kezdeti intervallumai a 4 fokozatból álló, 6b ábrán látható kaszkádnál.

Változó	Ke	Megoldás (3 jegy)		
	"szűk"	"közepes"	"széles"	
	intervallumok	intervallumok	intervallumok	
$x_{1,1}$	[0.31, 0.34]	[0.25, 0.40]	[0.02, 0.98]	0.327
$x_{2,1}$	[0.41, 0.44]	[0.35, 0.50]	[0.02, 0.98]	0.428
$x_{3,1}$	[0.22, 0.25]	[0.15, 0.35]	[0.02, 0.98]	0.245
$x_{1,2}$	[0.07, 0.10]	[0.02, 0.15]	[0.02, 0.98]	0.0891
$x_{2,2}$	[0.28, 0.31]	[0.20, 0.40]	[0.02, 0.98]	0.297
$x_{3,2}$	[0.60, 0.63]	[0.50, 0.70]	[0.02, 0.98]	0.614
$y_{1,1}$	[0.52, 0.55]	[0.45, 0.60]	[0.02, 0.98]	0.536
$y_{2,1}$	[0.36, 0.39]	[0.30, 0.45]	[0.02, 0.98]	0.377
$y_{3,1}$	[0.07, 0.10]	[0.02, 0.15]	[0.02, 0.98]	0.0876
$y_{1,2}$	[0.37, 0.40]	[0.30, 0.45]	[0.02, 0.98]	0.382
$y_{2,2}$	[0.40, 0.43]	[0.35, 0.50]	[0.02, 0.98]	0.414
$y_{3,2}$	[0.19, 0.22]	[0.15, 0.25]	[0.02, 0.98]	0.204
V_1	[2.0, 2.3]	[1.6, 2.8]	[1.6, 2.8]	2.16
V_2	[1.9, 2.2]	[1.5, 2.7]	[1.5, 2.7]	2.06
T_1	[330.0, 335.0]	[327.0, 337.0]	[300.0, 350.0]	333
T_2	[339.0, 344.0]	[336.0, 346.0]	[325.0, 375.0]	341

2.2.4. Numerikus eredmények és értékelésük

14. táblázat. Linearizálási technikák összehasonlítása 3 fokozat esetén.

/ 1	: 17 [-1	idő	:4	iteráció	ciklusidő	ciklusidő	klaszter
módszer idő [s		$\overline{id\mathring{o}_{AA/CP}}$	iteráció	iteráció _{AA/CP}	[ms]	ciklusidő _{AA/CP}	doboz
IN/GS	280.7	63.2	271491	160.9	1.03	0.39	3
AA/CP	4.44	1.00	1687	1.00	2.63	1.00	8

15. táblázat. Szűkítési technikák összehasonlítása 3 fokozat esetén.

módszer	idő	idő	iteráció	iteráció	ciklusidő	ciklusidő	klaszter
mouszei	[s]	$id{\rm \ddot{o}}_{AA/LP}$	Heracio	$iter\'aci\'o_{AA/LP}$	[ms]	$ciklusid \ddot{o}_{AA/LP}$	doboz
AA/CP	4.44	4.23	1687	5.68	2.63	0.74	8
AA/LP	1.05	1.00	297	1.00	3.54	1.00	1

16. táblázat. Szűkítési technikák összehasonlítása 4 fokozat esetén. A változók kezdeti intervallumai a *13. táblázatban* adott "szűk" intervallumok.

á da-an	: 4 % 6 ~ 1	idő	:4 :	iteráció	ciklusidő	ciklusidő	klaszter
mouszer	100 [8]	idő _{AA/LP}	iteráció	iteráció _{AA/LP}	[ms]	$\overline{\text{ciklusid} \ddot{\text{o}}_{\text{AA/LP}}}$	doboz
AA/CP	633.1	3332	116481	6131	5.43	0.54	3123
AA/LP	0.19	1.00	19	1.00	10.0	1.00	0

17. táblázat. Szűkítési technikák összehasonlítása 4 fokozat esetén. A változók kezdeti intervallumai a *13. táblázatban* adott "közepes" intervallumok.

ź do o	: 4% [.1	idő	:4 - 4 - : 4	iteráció	ciklusidő	ciklusidő	klaszter
mouszer	ido [S]	$\overline{id \ddot{o}_{AA/LP}}$	neracio	iteráció _{AA/LP}	[ms]	$\overline{ciklusid\H{o}_{AA/LP}}$	doboz
AA/CP	1132.2	364	210677	577	5.37	0.63	2496
AA/LP	3.11	1.00	365	1.00	8.52	1.00	1

18. táblázat. Szűkítési technikák összehasonlítása 4 fokozat esetén. A változók kezdeti intervallumai a *13. táblázatban* adott "széles" intervallumok.

módszer	idő [s]	$\frac{id\H{o}}{id\H{o}_{AA/LP}}$	iteráció	iteráció iteráció AA/IP	ciklusidő [ms]	ciklusidő ciklusidő	klaszter doboz
AA/CP			721501	22.2	5.45	0.63	2560
AA/LP	281.5	1.00	32471	1.00	8.67	1.00	0

A linearizálási technikákat összehasonlító *14. táblázatot* tekintve látható, hogy az AA/CP egy nagyságrenddel gyorsabban szolgáltatta a megoldást, mint az IN/GS. Mivel az AA/CP-nél az egy iterációra eső átlagos idő mintegy 2.5-szeres az IN/GS-hez képest, a két nagyságrenddel kevesebb iterációszámnak köszönhető, hogy a megoldást gyorsabban találta meg az AA/CP. Mindkét módszer esetében jelentéktelen mértékű klasztereződés figyelhető meg, azaz a megoldás közelében néhány kis dobozban nem sikerült kizárni a megoldás létezését.

A szűkítési technikákat összehasonlító *15. táblázatból* kiolvasható, hogy három egység esetében az AA/LP mind a megoldáshoz szükséges idő, mind az iterációszám tekintetében jobban teljesített az AA/CP-nél, de a különbség egy nagyságrenden belüli. Az

AA/CP esetében az egy iterációra eső átlagos idő mintegy háromnegyede az AA/LP-nél mért időnek. Mindkét módszer esetében jelentéktelen mértékű klasztereződés figyelhető meg. Négy fokozat esetében az AA/CP módszernél nagymértékű klasztereződés jelentkezett, ez ellehetetleníti az AA/LP-vel történő összehasonlítást. Egy dolgot azonban a táblázatok jól demonstrálnak, az AA/LP robusztusságát.

Az imént írt, nagymértékű klasztereződésnek feltehetően az oka az, hogy a CP (egyenletenkénti szűkítés) egy egyszerű, és viszonylag kis számításigényű szűkítési technika, de nem túl hatékony. Ahogyan azt az *Irodalmi áttekintésben* is írtam: az egyik egyenlet által hordozott információ csak a közös változók intervallumának szűkülésével tud eljutni egy másik egyenlethez. Az AA/LP módszernél az összes (linearizált) egyenletet egyidejűleg vesszük figyelembe a szűkítés során. A kaszkádok egyenletei erősen csatoltak. A klasztereződés feltehetően csökkenthető lenne az AA/CP esetében is, ha szűk dobozok esetében a szűkítés megismétlését részesítenénk előnyben a vágás helyett, egy alkalmasan választott iterációhatásfoktól függően.

3. A zérushelykereső eljárás fejlesztése

Az előző, linearizálási és szűkítési technikákat összehasonlító fejezet numerikus eredményeit tömören úgy tudom összegezni, hogy az affin linearizálási technika a vizsgált esetekben az egyszerűbb feladatoknál egy nagyságrenddel, nehezebb feladatoknál több nagyságrenddel bizonyult hatékonyabbnak a hagyományos intervallum Newton módszernél. A kaszkádok vizsgálata azt mutatta, hogy az LP szűkítés a kaszkádok számításánál hatékony és robusztus eljárás. Ezért az affin linearizálási technika további fejlesztése és a keresési tér lineáris programozással történő szűkítésének hatékonyabbá tétele mellett döntöttem.

3.1. Linearizálás fejlesztése

A *Számítási módszerek* című fejezetben rámutattam, hogy a vegyes affin- és intervallum aritmetikai modell (röviden: vegyes modell) előnyösebb a *minimax* közelítésnél, mert megszünteti annak túlbecslését elemi függvények esetében. A vegyes modell értékkészlet tekintetében a *min-range* közelítéssel azonos (optimális) eredményt ad, de szorosabb lineáris közrefogás mellett. Az implementációnak ettől a fejlesztésétől így azt várhatjuk, hogy a megoldás megtalálásához kevesebb iterációra lesz szükség a korábbi

implementációhoz képest. A következő, 3.5. szakaszban bemutatott numerikus példák ezt a várakozást alátámasztják.

A vegyes modellben az értékkészletet közrefogó intervallumot is eltároljuk egy, a lineáris polinomtól független intervallumban, és ha alkalom nyílik rá, felhasználjuk a számítások során. Lehetőség nyílik így arra is, hogy figyelembe vegyünk egyéb, adott feltételekből következő korlátokat is. Így például az aktivitási együttható modellek kiértékelésénél lehetővé teszi, hogy figyelembe vegyük, hogy a moltörtek összege 1. Ezt szemlélteti a 19. táblázat, a Wilson aktivitási együttható modell közös részkifejezésére (common subexpression).

19. táblázat. A Wilson modell $\sum_{j=1}^{C} x_j \Lambda_{ij}(T)$ közös részkifejezésének értékkészletének számítása a $x_j \in [0, 1]$ (j = 1, 2, 3), $T \in [300, 380]$ (Kelvin) doboz felett.

Módszer	i	$\sum_{j=1}^{C} x_{j} \Lambda_{ij} \text{ \'ert\'ekk\'eszlete}$	relatív szélesség a vegyes modellhez képest (azonos <i>i</i> indexhez)
	1	[-0.020901, 1.853065]	2.08
affin aritmetika ¹	2	[-0.085791, 2.319595]	3.96
	3	[-0.247357, 2.639316]	3.40
	1	[0.000000, 1.861866]	2.06
intervallum aritmetika ¹	2	[0.000000, 2.314005]	3.81
	3	[0.000000, 2.607750]	3.07
vacuus offin ás	1	[0.116456, 1.019514]	1.00
vegyes affin- és intervallum aritmetika	2	[0.436081, 1.043752]	1.00
mici vanum antinetika	3	[0.331738, 1.180088]	1.00

¹Az $x_1 + x_2 + x_3 - 1 = 0$ korlátot figyelmen kívül hagyjuk az értékkészlet számításakor

A táblázat első két sorában látható értékekkel az együttható modellben szereplő osztás vagy a logaritmus függvény kiértékelése (közvetlenül) nem lehetséges. A korábbi implementációban ezért minden egyes ilyen problémás esetben külön kellett kódolnom a vegyes modell műveleteit: ideiglenes változókkal kellett nyilvántartani a részeredmény értékkészletét, majd felhasználni az osztás és a logaritmus számítás során. A javított implementációban a számítások során már mindvégig vegyes modellt használunk. Az objektum orientált megvalósításnak köszönhetően a korábban egyedileg írt kódrészleteket már a fordítóprogram automatikusan generálja. A linearizálás fejlesztése mögötti motiváció

elsősorban az volt, hogy az előbb említett, problémás részeken történő egyedi kódolást elkerüljem, a szorosabb közrefogás csak másodlagos szerepet játszott.

3.2. Az LP szűkítés fejlesztése

A keresési tér szűkítése lineáris programozással igen műveletigényes, fontos volt tehát ennek hatékonyságát is javítani. Az ebben a szakaszban bemutatott ötletek Tobias Achterbergtől származnak (levele a *Függelék*ben olvasható). Látszólag 2n darab LP feladatot kell megoldanunk az LP szűkítés során, a korábbi implementáció ténylegesen ezt is valósította meg.

$$\min / \max e_j \qquad \min \text{ minden } j\text{-re } (1, 2, \dots, n)$$

$$s.t.$$

$$(3.2-1) \qquad B_L \le A \ e \le B_U$$

$$-1 \le e \le 1$$

Azonban ha egy változó *bármelyik* megengedett bázismegoldásban valamelyik korlátjának értékét felveszi, akkor a megfelelő optimalizálási részfeladatot kihagyhatjuk. Más szavakkal: ha egy megengedett bázismegoldásban e_k értéke -1, akkor értelmetlen megoldani a min e_k részfeladatot, hiszen már tudjuk, hogy van olyan értéke a többi változónak (az aktuális megengedett bázismegoldás ilyen), hogy e_k a megengedett legkisebb értékét felvegye.

A korábbi 2.1.3. Implementációs részletek című szakaszban írtaknak megfelelően a kezdeti megengedett bázismegoldást a primál szimplex algoritmus első lépcsőjével számítjuk, a célfüggvényt konstansként rögzítve. Minden részfeladat az előző részfeladat optimális bázismegoldását használja kezdeti bázismegoldásnak, és a primál szimplex algoritmusnak csak a második lépcsőjét kell alkalmazni. A korábbi implementációban a könnyen megvalósítható min e_1 , max e_1 , min e_2 , max e_2 , ... stb. sorrend szerint dolgoztam fel a változókat. Azonban a min e_1 és a max e_1 feladatok optimális megoldása nagy valószínűséggel lényegesen különbözik ("messze" vannak egymástól), azaz a max e_1 részfeladat megoldásához várhatóan nem a legszerencsésebb választás a min e_1 optimális megoldása induló bázismegoldásnak. Egy egyszerű heurisztika a következő: keressük meg azt a (bázis) változót, amelyikhez tartozó optimalizálási feladatot vagy feladatokat még nem oldottuk meg, és amelyik a legközelebb van alsó vagy felső korlátjához az aktuális bázismegoldásban, majd oldjuk meg a megfelelő optimalizálási részfeladatot (azaz minimalizálunk ha az alsó, maximalizálunk ha a felső korlátjához van közel a változó értéke).

A heurisztika mögötti feltevés az, hogy így egy olyan részfeladatot kell megoldanunk, amelyik optimális megoldása "nincs messze" a kiindulási bázismegoldástól. A 4.8. szakaszban bemutatott numerikus példák tanulsága szerint a feltevés helytálló.

A korábbi megvalósításhoz képest változás még, hogy a zérushely keresés során egyetlen LP feladat számára foglalunk memóriát és ezt újrahasznosítjuk (*memory pool*). Korábban minden egyes vizsgált doboz esetében egy LP feladatnak foglaltam memóriát, majd a szűkítés lépése után felszabadítottam azt.

3.3. Implementáció fejlesztése

Az előző implementációban a Szabvány Sablon Könyvtár (STL) map nevű tárolóját használtam az affin változókban előforduló nem nulla együtthatók indexének és értékének tárolására. Az új implementációban az adatok tárolását beépített adattípusok (int és double) előre lefoglalt, és a program futása során újrahasznosított tömbjeivel oldottam meg (memory pool). A tömbök automatikus újrahasznosítását az affin osztály konstruktora és destruktora biztosítja, itt mutatkozik meg az objektum orientált C++ programozási nyelv előnye, az operátorok túlterhelése mellett (operator overloading), a C vagy FORTRAN nyelvekkel szemben. Az implementációnak ez a fejlesztése az iterációszámra nincs – nem lehet – hatással. A 3.5. szakaszban bemutatott numerikus példák azt mutatják, hogy az egy iterációra eső idő a korábbihoz képest nagyságrendileg csökken.

3.4. Vágás

A fejlesztések hatásának vizsgálatához a korábbi implementációban használt vágási szabályt kellett használnom az összehasonlíthatóság fenntartása érdekében. A szétválasztó oszlop számításához egy másik, talán a legkézenfekvőbb felezési szabályt használtam: mindig a legszélesebb komponens mentén felezzük a dobozt. A gőz-folyadék egyensúlyi számításoknál a változók intervallumainak szélessége között több nagyságrend eltérés lehet, ezért az egyes komponensekben a hossz egységének az első LP szűkítés után az adott komponens szélességét vettem. Ha az első LP szűkítés után választok egységet, akkor az esetleg erősen túlbecsült intervallumok skálázást rontó hatása várhatóan kevésbé érvényesül. Ugyanis az első LP szűkítés olyan széles dobozokat töröl a keresési térből, amit valójában eredetileg is megtehetünk volna.

III. Eredmények 3.4. Vágás

Sajnos a legszélesebb komponenst felező szabály nem minden esetben elegendően robusztus, erre a numerikus példák rámutattak. Nehéz általános és hatékony felezési szabályt alkotni, több máig nyitott kérdés kapcsolódik ehhez a témakörhöz (is). A vizsgált szétválasztó oszlop esetében sikerült egyszerű és hatékony feladatspecifikus felezési szabályt konstruálni abban az esetben, ha az előbbi egyszerű felezési szabály nem elég hatékony. Ezt bővebben a szétválasztó oszlopszámításoknál részletezem a 4.7. fejezetben.

3.5. Linearizálás és az implementáció fejlesztésének hatása

A 2. fejezetben bemutatott folyadék-folyadék megoszlási feladatok és a gőz-folyadék egyensúlyi egységből álló háromfokozatú kaszkád számításán keresztül vizsgáltam az egyes fejlesztések hatását. Az összehasonlításhoz csak a korábbi AA/CP módszer eredményeit használtam, és az új implementációban sem használtam LP-t a szűkítésnél. Az ok egyszerű: az összehasonlításhoz használt módszerek csak az összehasonlítás tárgyát képező összetevőben különbözhetnek, viszont az új implementációban az LP szűkítést is módosítottam. Az LP szűkítés módosításának hatását a 4.8. szakaszban tárgyalom.

Az eredmények a 20-22. táblázatokban láthatók. A linearizálás fejlesztésének hatása a csökkent iterációszámban jelentkezik, bár mint azt korábban írtam, ennek a fejlesztésnek a célja elsősorban a könnyebb kódolás lehetővé tétele volt.

20. táblázat. A korábbi és az átdolgozott implementáció összehasonlítása (folyadék-folyadék megoszlási feladat, biner elegy)

	imple	mentáció	
	lvouálski	44dalaa-44	korábbi
	korábbi	átdolgozott	átdolgozott
idő (s)	1.15	0.010	115
iterációk száma	1407	627	2.24
ciklus idő (μs)	817	15.9	51.3

21. táblázat. A korábbi és az átdolgozott implementáció összehasonlítása (folyadék-folyadék megoszlási feladat, terner elegy)

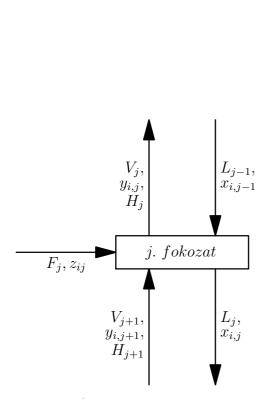
	imple	mentáció	
	المعالمة الم	44dalaa-44	korábbi
	korábbi	átdolgozott	átdolgozott
idő (s)	23.3	0.790	29.5
iterációk száma	7715	6513	1.18
ciklus idő (μs)	3010	121	24.9

22. táblázat. A korábbi és az átdolgozott implementáció összehasonlítása (gőz-folyadék egyensúlyi kaszkád, 3 fokozat)

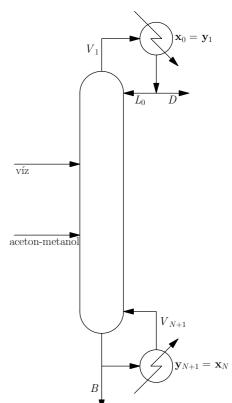
	imple	mentáció	
	korábbi	átdolgozott	korábbi átdolgozott
		0.000	
idő (s)	4.44	0.099	44.8
iterációk száma	1687	645	2.62
ciklus idő (μs)	2630	153	17.1

4. Extraktív desztilláció számítása

A vizsgált művelet célja az aceton-metanol azeotrop szétválasztása víz oldószerrel. Az alkalmazott egyensúlyi egység modelljének sematikus rajza a 7. *ábrán*, a folytonos üzemű szétválasztó oszlop rajza a 8. *ábrán* látható.



7. ábra. Az elméleti tányér modellje



8. ábra. Folyamatos üzemű extraktív desztilláció

4.1. Specifikációk

Az oszlop egyensúlyi fokozatainak száma adott (N), a tányérok számozását felülről kezdjük. Totálkondezátort és teljes visszaforralót használunk. A refluxarány R=5; desztillátum áram D=0.73 mol/s; a felső táplálás tiszta víz, árama 2.0 mol/s; az alsó táplálás moláramai: 0.783 mol/s aceton, 0.217 mol/s metanol, vizet nem tartalmaz. A táplálások helye adott.

4.2. Változók

Az i index az 1, 2, ... C tartományt futja be, ahol C a komponensek száma. A j=0 fokozat a kondenzátor, a j=N+1 a visszaforraló.

		Része a linearizált	rendszernek?
		igen	nem
$x_{i,j}$	az i -ik komponens moltörtje a j -ik	$j = 1 \ldots N$	j = 0
	tányéron a folyadék fázisban		
$y_{i,j}$	az i -ik komponens moltörtje a j -ik	$j = 1 \dots N$	j = N+1
	tányérról felszálló gőzben		
$K_{i,j}$	egyensúlyi arány	$j = 1 \dots N$	
$l_{i,j}$	az <i>i-</i> ik komponens molárama a <i>j-</i> ik	$j = 1 \dots N$	j = 0
	tányérról lecsorgó folyadékban		
$v_{i,j}$	az <i>i-</i> ik komponens molárama a <i>j-</i> ik	$j = 2 \ldots N+1$	j = 1
	tányérról felszálló gőzben		
V_{j}	a j -ik tányérról felszálló gőz molárama	$j = 2 \ldots N+1$	j = 1
H_j	a gőz moláris entalpia tartalma a j-ik	$j = 2 \ldots N+1$	j = 1
	tányérról felszálló gőzben		
Q_j	a j-ik tányérról felszálló gőz entalpia	$j = 2 \ldots N+1$	j = 1
	árama		
T_{j}	hőmérséklet a <i>j</i> -ik tányéron	$j = 1 \dots N$	

4.3. Egyenletek

Az ún. MESH egyenleteket az alábbi alakban írtam fel.

Komponensmérleg egyenletek (M egyenletek)

$$(4.3-1) l_{i,i-1} + v_{i,i+1} + f_{i,j} = (l_{i,j} + v_{i,j}) i = 1 \dots C; j = 1 \dots N$$

$$(4.3-2) l_{i,j} = L_j x_{i,j} i = 1 ... C; j = 0 ... N$$

$$(4.3-3) v_{i,j} = V_j y_{i,j} i = 1 \dots C; j = 1 \dots N+1$$

ahol $f_{i,j}$ az i. komponens molárama a j. tányérra, a specifikáció szerint.

Gőz-folyadék egyensúlyi összefüggések (E egyenletek)

$$(4.3-4) y_{i,j} = K_{i,j} x_{i,j} i = 1 ... C; j = 1 ... N$$

Moltörtösszegzési egyenletek (S egyenletek)

(4.3-5)
$$\Sigma x_{i,j} = 1$$
 $j = 1 \dots N$

(4.3-6)
$$\Sigma y_{i,j} = 1$$
 $j = 1 \dots N$

<u>Hőmérlegegyenletek</u> (*H* egyenletek)

$$(4.3-7) Q_i = Q_{i+1} j = 1 \dots N$$

Kiegészítő egyenletek

$$(4.3-8) Hi = \sum \lambda_{i,i} y_{i,i} j = 2 \dots N+1$$

$$(4.3-9) Q_i = V_i H_i j = 2 ... N+1$$

(4.3-10)
$$K_{i,j} = \gamma_{i,j} p_{i,j}/P$$
 $i = 1 \dots C; j = 1 \dots N$

Az aktivitási együtthatót és a tiszta komponensek gőznyomását a 2.2. Ellenáramú gőzfolyadék egyensúlyi kaszkádok számítása című szakaszban írtak szerint számítottam. A (4.3-10) egyenletben szereplő $K_{i,j}$ linearizált alakjának számításakor azokat a zajváltozókat, amelyek nem valódi változónak felelnek meg (tehát nem x-nek vagy T-nek), összevonjuk egyetlen új zajváltozóba (Stolfi és Figueiredo, 81-82. oldal). Ez információ-veszteség, de egyszerűbb szerkezetűvé és jobban skálázottá teszi a linearizált rendszert, megkönnyítve az LP megoldó motor, azaz a GNU GLPK solver munkáját a szűkítés során.

Értékadások

Az alábbi változók a következő értékadásokkal kapnak értéket.

A j = 0 fokozatnál (totálkondezátor)

$$(4.3-11) x_{i,0} \leftarrow y_{i,1} i = 1 \dots C$$

$$(4.3-12)$$
 $l_{i,0} \leftarrow RDy_{i,1}$ $i = 1 \dots C$

A j = 1 fokozatnál (legfelső egyensúlyi egység)

$$(4.3-13) v_{i,1} \leftarrow (R+1)Dy_{i,1} i = 1 \dots C$$

$$(4.3-14) V_1 \leftarrow (R+1)D$$

$$(4.3-15) H_1 \leftarrow \sum \lambda_i y_{i,1}$$

$$(4.3-16)$$
 $Q_1 \leftarrow Q_2$

A j = N+1 fokozatnál (teljes visszaforraló)

$$(4.3-17) y_{i,N+1} \leftarrow x_{i,N} i = 1 \dots C$$

4.4. Tisztasági követelmények

A számítások során a specifikációk mellett egyéb, redundáns tisztasági követelményt is előírtam az aceton moltörtjére a desztillátumban. Három esetet vizsgáltam, ezekre rendre $0.96 \le x_{aceton}$, $0.92 \le x_{aceton}$, $0.78 \le x_{aceton}$. Az utolsó előírást kizárólag a módszer numerikus teszteléséhez használtam, mivel a művelet célja az, hogy acetonban lényegesen gazdagabb legyen a desztillátum az azotropnál, ezért ez az előírás műszakilag értelmetlen.

4.5. Változók kiindulási intervallumának számítása

Azt kell csak biztosítanunk, hogy minden lehetséges megoldást magukban foglaljanak a változókra adott kiindulási intervallumok. Várható, hogy minél szűkebb dobozokat becslünk, annál gyorsabban megtaláljuk a keresett megoldás(oka)t. A V_j változók kezdeti intervallumait az alábbi feltételezés szerint számítottam:

$$(4.5-1) | V_i - V_1 | / V_1 \le 0.32$$

teljesüljön, ahol $V_1 = (R+1)D = 4.38 \text{ mol/s}$. Az állandó moláris túlfolyásnak

$$(4.5-2) | V_j - V_1 | / V_1 = 0.0$$

felel meg. Az egyensúlyi arányok kezdeti intervallumai: $K_{1,j} \in [0.98, 38.97]$, $K_{2,j} \in [0.80, 7.53]$, és $K_{3,j} \in [0.26, 1.01]$; ezek az intervallumok tartalmazzák $K_{i,j}$ összes lehetséges értékét az $\mathbf{x} \in [0, 1]^C$ térben. Ezeket a numerikus értékéket a K_i implicit függvény diagramjáról olvastam le. Az értékek helyességét a zérushelykereső algoritmussal könnyen igazolni tudtam. Például a K_1 alsó korlátjánák, 0.98-nak az igazolásához, a buborékpontot meghatározó egyenletrendszerhez az $K_1 = [-\infty, 0.98]$ egyenletet fűztem, majd igazoltam, hogy az így kapott egyenletrendszernek nincs megengedett megoldása. A többi korlátot is hasonlóan igazoltam, a számításokhoz egy másodperc sem kellett összesen. A T_i változók

kezdeti intervalluma [327, 374], ez tartalmazza az összes lehetséges forráspontot az adott nyomáson. A moltörtekről feltettem, hogy egyik sem kisebb, mint 0.01. Minden egyéb kezdeti intervallum nem-informatív, azaz $[-\infty, +\infty]$.

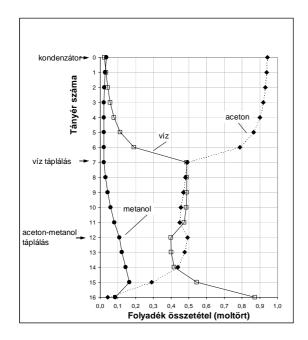
4.6. Numerikus eredmények és értékelésük

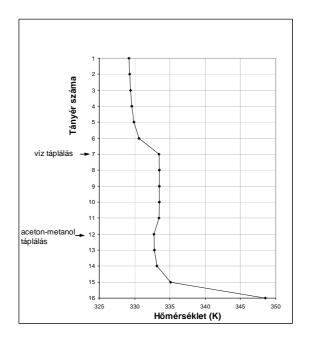
A számítási eredményeket a 23. táblázat tartalmazza. A 16 elméleti tányérból álló oszlop profiljait mutatja a 9. és 10. ábra. Az $0.96 \le x_{aceton}$ feltevés túl szigorú a 12 és a 16 elméleti tányérból álló oszlopnál, a feladatnak nincs megoldása, ezt a program eredményként szolgáltatta. A feladat mindhárom esetben megoldható a kevésbé szigorú, de mérnöki szempontból még értelmes $0.92 \le x_{aceton}$ követelmény mellett. A gyakorlat szempontjából értelmetlen, pusztán a módszer tesztelése végett használt $0.78 \le x_{aceton}$ követelmény mellett 3 órán belül sem sikerült megtalálni a megoldást az alkalmazott szoftver és hardver környezetben (az LP megoldó motor a GNU GLPK 4.28 volt). A legegyszerűbb, mindig a skálázás utáni legszélesebb komponenst felező vágási stratégiát használtam ezekhez a számításokhoz, viszont egy feladatspecifikus felezési szabály alkalmazásával néhány percen belül megtalálható a megoldás, ezt a következő szakasz tárgyalja.

23. táblázat. A folyamatos üzemű extraktív desztilláció állandósult állapotának számítása, különböző specifikációk mellett, az általános vágási stratégiával.

tányérszám	desztillátum tisztasági követelmény	desztillátum összetétel	idő (s)	vizsgált dobozok száma	szimplex iteráció
12 ¹	$0.96 \le x_{aceton}$	nem megvalósítható	2.77	3	23891
12	$0.92 \le x_{aceton}$	[0.923, 0.0430, 0.0342]	22.10	19	247522
12	$0.78 \le x_{aceton}$	<u> </u>	>12000		
16^2	$0.96 \le x_{aceton}$	nem megvalósítható	9.49	9	78803
16	$0.92 \le x_{aceton}$	[0.942, 0.0343, 0.0234]	54.15	29	500041
16	$0.78 \le x_{aceton}$	_	>12000		
22^{3}	$0.96 \le x_{aceton}$	[0.961, 0.0212, 0.0179]	52.86	15	459290
22	$0.92 \le x_{aceton}$	[0.961, 0.0212, 0.0179]	92.13	33	709058
22	$0.78 \le x_{aceton}$	_	>12000	_	

- (1) Az oldószer táplálása az 5., az aceton-metanol elegy táplálása a 9. tányérra történik
- (2) Az oldószer táplálása az 7., az aceton-metanol elegy táplálása a 12. tányérra történik
- (3) Az oldószer táplálása az 9., az aceton-metanol elegy táplálása a 16. tányérra történik





9. ábra. Összetétel profil

10. ábra. Hőmérséklet profil

4.7. Feladatspecifikus felezési szabály

A skálázás utáni legszélesebb komponenst felező vágási stratégia nem bizonyult megfelelőnek a gyenge, és a gyakorlat szempontjából értelmetlen $0.78 \le x_{aceton}$ előírás mellett. A feladat azonban ez utóbbi esetben is megoldható, ha a desztillátumban az aceton moltörtjére adott intervallum szélességét egy alkalmas w súllyal szorozzuk a vágási szabály alkalmazásakor. Ezt mutatja a 24. táblázat. Ha a súly túlságosan nagy, például 50 vagy nagyobb, akkor mindig a w-vel szorzott intervallumot felezzük, ez nem ideális, ezzel indokolhatók a nagy súlyoknál a kicsit rosszabb eredmények. Még a "túl nagy" súlyokkal is megoldható a feladat néhány perc alatt. A 25. táblázat jól mutatja az intervallum módszerek egyik sajátosságát: a keresési tér növekedésével robbanásszerűen növekedhet a számítások időigénye. Feladatspecifikus módosításokkal esetenként ezen a problémán felül lehet kerekedni, mint például itt is.

A gyakorlat szempontjából értelmes tisztasági követelményeknél általában rosszabb eredményt kapunk ezzel a feladatspecifikus szabállyal, de a számítás időigénye elfogadható marad. Ezt mutatja a 25. táblázat. Az eredeti, mindig a legszélesebb komponenst felező szabálynak a w=1 súly felel meg.

24. táblázat. A vágási stratégiánál alkalmazott w szorzótényező változtatásának hatása. Specifikációk: tányérszám 16, víz táplálása a 7. tányérra, az aceton-metanol elegy táplálása a 12. tányérra történik; a desztillátumra előírt tisztasági követelmény: $0.78 \le x_{aceton}$

w	idő (s)	vizsgált dobozok száma	szimplex iteráció
1	>12000	_	_
10	>12000	—	_
20	157.5	99	1424169
≥50	187.8	113	1787940

25. táblázat. Számítási munka összehasonlítása w = 1 és w = 20 szorzótényezőkre a vágási stratégiánál.

tányérok	desztillátumra	idő (s)	idő (s)	vizsgált	vizsgált	szimplex	szimplex	idő _{w=1}	szimp. iter $_{w=1}$
száma	tisztasági előírás	(w = 1)	(w = 20)	tart.	tart.	iteráció	iteráció	idő _{w=20}	szimp. iter _{$w=20$}
				száma	száma	(w = 1)	(w = 20)		
				(w = 1)	(w = 20)				
12 ¹	$0.96 \le x_{aceton}$	2.77	4.19	3	7	23891	40601	0.66	0.59
12	$0.92 \le x_{aceton}$	22.10	17.37	19	17	247522	200165	1.27	1.24
12	$0.78 \le x_{aceton}$	>12000	67.50	—	67		759990	>177.78	
16 ²	$0.96 \le x_{aceton}$	9.49	16.48	9	13	78803	152683	0.58	0.52
16	$0.92 \le x_{aceton}$	54.15	56.51	29	31	500041	577726	0.96	0.87
16	$0.78 \le x_{aceton}$	>12000	157.5		99		1424169	>76.19	
22^{3}	$0.96 \le x_{aceton}$	52.86	210.94	15	55	459290	1934330	0.25	0.24
22	$0.92 \le x_{aceton}$	92.13	230.26	33	61	709058	2029564	0.40	0.35
22	$0.78 \le x_{aceton}$	>12000	498.03		147	_	3968612	>24.09	

- (1) Az oldószer táplálása az 5., az aceton-metanol elegy táplálása a 9. tányérra történik
- (2) Az oldószer táplálása az 7., az aceton-metanol elegy táplálása a 12. tányérra történik
- (3) Az oldószer táplálása az 9., az aceton-metanol elegy táplálása a 16. tányérra történik

4.8. LP-szűkítés fejlesztésének hatása

A Tobias Achterberg által javasolt heurisztikától, amit a 3.2. szakasz részletezett, az LP megoldó motor által végzett szimplex iterációszámának csökkenése és így a számítások időigényének csökkenése várható. Mivel a korábbi, 3.5. szakasznál részletezett feladatok egy másodpercen belül megoldhatók az átdolgozott implementációval (20-22. táblázatok), ezért azok nem alkalmasak a fejlesztés hatásának tanulmányozásához. Így az extraktív desztilláció számításán keresztül vizsgáltam a heurisztikát. A 26. táblázat tanulsága szerint a zérushely-

kereső eljárás körülbelül 5-ször lett gyorsabb a heurisztika alkalmazásával a vizsgált feladat esetében. Ez a sebesség-növekedés összemérhető a csökkent szimplex iterációszámmal.

26. táblázat. Számítási munka összehasonlítása Acterberg heurisztikája nélkül, és azzal együtt. A tányérok száma 16.

	heur. nélkül.	heurisztikával.	heur. nélkül	
			heur.	
$0.96 \le x_{aceton}$ és $w = 1$				
idő (s)	44.0	9.49	4.63	
szimplex iteráció	505424	78803	6.41	
$0.92 \le x_{aceton}$ és $w = 1$				
idő (s)	301.43	54.15	5.57	
szimplex iteráció	3376560	500041	6.75	
$0.78 \le x_{aceton}$ és $w = 20$				
idő (s)	769.56	157.5	4.89	
szimplex iteráció	9102883	1424169	6.39	

4.9. Az implementáció korlátai

A kidolgozott zérushelykereső eljárás általános, nem kell – műszaki értelemben véve – szigorú feltevéseket tenni a függvényre. A numerikus eredmények is biztatóak. Az új implementáció azonban még gyermekcipőben jár. Az affin osztály és műveleteinek implementációja körülbelül 3000 sor C++ nyelven írt forráskód, annak ellenére, hogy kizárólag csak azokat a függvényeket írtam meg, amelyek szükségesek voltak a számításokhoz. Gondot jelent, hogy nem ismerek alternatív vegyes affin- és intervallum-aritmetikai számításokat megvalósító szoftvert, amelyik egy feltételezett hiba keresésénél referencia értékkel szolgálhatna.

A szétválasztó oszlop kódja mintegy 2300 sor, és itt is csak a legszükségesebb funkcionalitást biztosítottam. A tanyérszámot viszonylag könnyen lehet változtatni, de például egy újabb, negyedik komponens hozzáadása már a teljes oszlopszámító kód újraírását igényelné, ami legalább több hetes munkát jelentene. A kód megírásának célja a módszer hatékonyságának tanulmányozása volt, rövid távon ez jó döntésnek bizonyult, de hosszú távon nem megtérülő a bővíthetőség korlátozottsága miatt.

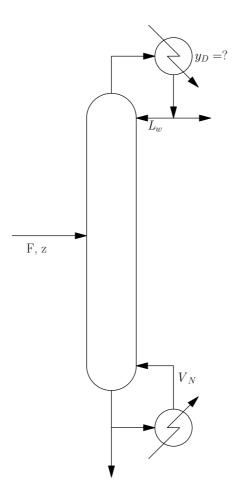
A megoldó motor használhatóságát nagyban megkönnyítené, ha sikerülne modellező nyelvhez csatolni. Sajnos az általam ismert modellező nyelvek fordítói és fejlesztői környezetei, amelyek támogatják külső megoldó motorok csatolását, egy kivételével mind valós aritmetika használatát tételezik fel (64 bites double adattípust), ezzel nem kompatibilis absztrakt adattípust (mint például az affin adattípus) nem lehet velük használni. Részleges kivételt csak az AMPL modellező nyelv fordítója jelent, itt – igaz még itt is kerülő úton – megvalósíthatónak tűnik az affin adattípus használata. A tényleges csatolás megvalósíthatóságának vizsgálata későbbi feladat lehet.

5. Több állandósult állapot számítása

Szétválasztó oszlopok lehetséges állandósult állapotainak megbízható felderítése fontos azok tervezésénél, szimulációjánál, szabályozásánál és üzemeltetésénél (Bekiaris, Morari 1996). Már ideális kétkomponensű elegy desztillációjánál is lehet több állandósult állapota a desztilláló oszlopnak, rögzített műveleti paraméterek mellett (Jacobsen, Skogestad 1991). Ezt később kísérleti úton is alátámasztották (Kienle, Groebel, Gilles 1995; Koggersbøl, Andersen, Bagterp, Jørgensen 1996). Még professzionális folyamat-szimulátorokkal is nehéz, körülményes a lehetséges állandósult állapotok számítása (Vadapalli, Seader 2001; Kannan, Joshi, Reddy, Shah 2005). Az általam javasolt zérushelykereső módszer ezek mindegyikét egyszerre szolgáltatja, ezt a Jacobsen és Skogestad (1991) által közölt modell számításán keresztül mutatom be. Három esetet vizsgálunk, ezek láthatók az alábbi táblázatban.

	Refluxáram specifikációja	Entalpiamérleg
1.	tömegáram	nincs (állandó moláris túlfolyás)
2.	moláram	van
3.	tömegáram	van

5.1. Specifikációk



11. ábra. Ideális kétkomponensű elegy szétválasztása

A metanol-propanol elegyet ideálisnak tekintjük, a metanol propanolra vonatkoztatott relatív illékonysága $\alpha=3.55$. (Sajnos Jacobsen és Skogestad közleményéből nem derül ki, hogy n-propanolról vagy i-propanolról van szó, mindvégig csak propanolról írnak. Kienle, Groebel és Gilles (1995) n-propanollal számoltak és végezték el a kísérleteket; Koggersbøl, Andersen, Bagterp, Jørgensen (1996) i-propanollal.) Az oszlop egyensúlyi fokozatainak száma adott: N=8, a tányérok számozását felülről kezdjük (ellentétben a Jacobsen és Skogestad közleményével). Totálkondezátort és egyensúlyi forralót használunk. A táplálás az $N_F=5$ tányérra történik. A táplálás molárama F=1.0 kmol/min, melyben a metanol moltörtje z=0.50, hőállapotát tekintve buborékponti folyadék. Adott az üstből felszálló gőz V_N molárama, és adott vagy a reflux L_W tömegárama, vagy L molárama. A metanol moltömege $M_1=32.04$ g/mol, a propanolé $M_2=60.10$ g/mol. A refluxáram buborékponti folyadék.

5.2. Változók

 x_j metanol moltörtje az j. tányéron a folyadék fázisban $j = 1 \dots N$

 V_j j. tányérról felszálló gőz molárama (ha nincs $j=1 \dots N-1$ entalpiamérleg, akkor $V_i=V$)

D desztillátum molárama

Q kondenzátorban elvont hőteljesítmény (ha van entalpiamérleg)

d metanol molárama a desztillátumban

 q_D desztillátum entalpiaárama (ha van entalpiamérleg)

A változók száma entalpiamérleg esetén 2N+3, azaz esetünkben 19, állandó moláris túlfolyás esetén N+2, esetünkben 10.

5.3. Egyenletek

Komponensmérleg egyenletek (*M* egyenletek)

(Ha állandó moláris túlfolyással számolunk, akkor $V_j = V$.) A j. tányéról felszálló gőzben a metanol moltörtjét y_i jelöli.

$$(5.3-1) d = D y_1$$

$$(5.3-2) V_{j+1} y_{j+1} = d + (V_{j+1} - D) x_j j = 1 ... N_F - 1$$

(5.3-3)
$$F z + V_{j+1} y_{j+1} = d + (F + V_{j+1} - D) x_j \qquad j = N_F \dots N - 1$$

(5.3-4)
$$F z = d + (F - D) x_N$$

Specifikációból adódó mérleg-egyenletek:

(5.3-5)
$$L_w = (V_1 - D) (M_1 y_1 + M_2 (1 - y_1))$$
 (ha L_w van megadva)

$$(5.3-6) L = (V_1 - D) (ha L van megadva)$$

Hőmérlegegyenletek (*H* egyenletek)

(Ezek az egyenletek nincsenek, ha állandó moláris túlfolyással számolunk.)

(5.3-7)
$$q_D = D H^L(y_1)$$

$$(5.3-8) V_1 (H^V(x_1) - H^L(y_1)) = Q$$

$$(5.3-9) V_{j+1} H^{V}(x_{j+1}) = Q + q_D + (V_{j+1} - D) H^{L}(x_j) j = 1 \dots N_F - 1$$

(5.3-10)
$$F H^{L}(z) + V_{j+1} H^{V}(x_{j+1}) = Q + q_{D} + (F + V_{j+1} - D) H^{L}(x_{j}) \quad j = N_{F} \dots N - 1$$

Kiegészítő egyenletek

A kiegészítő egyenletek közvetlenül nem részei a linearizált rendszernek, az implementációban ezeknek értékadások felelnek meg.

$$(5.3-11) y_j \leftarrow y^*(x_j) j = 1 ... N$$

Itt az $y^*(x)$ függvényt a következő egyenlet írja le:

$$(5.3-12) y^* = \alpha x/(1 + (\alpha - 1) x).$$

Ez a kifejezés az egyetlen *x* változó függvénye. Az (5.3-12)-t elemi függvénynek tekintve készítettem el a lineáris közrefogást vegyes affin- és intervallum aritmetikához.

A Jacobsen és Skogestad közleménye az (5.3-13) szerinti entalpiamodellt használta. Telített moláris entalpiák (kJ/mol) 1 atm nyomáson a metanol-propanol rendszerre, rendre a gőz és a folyadék fázisban:

(5.3-13a)
$$H^{V}(x) = 13.49 e^{-3.98 x} + 43.97 e^{-0.088 x}$$

(5.3-13b)
$$H^{L}(x) = 16.67 e^{-1.087 x}$$

ahol *x* a metanol moltörtje. A modell érdekessége, hogy a gőz entalpiatartalmát a vele egyensúlyban lévő folyadék összetételéből számítjuk. A feladat globális skálázottsága érdekében az (5.3-13) függvényeket 10⁻²-nal szoroztam a numerikus számításaim során. Természetesen ez a skálázás a végeredmények helyességét nem befolyásolja.

5.4. Változók kezdeti intervallumai

Azt kell csak biztosítanunk, hogy minden lehetséges megoldást magukban foglaljanak a változókra adott kiindulási intervallumok. Várható, hogy minél szűkebb dobozokat becslünk, annál gyorsabban megtaláljuk a keresett megoldás(oka)t.

Specifikációtól függetlenül:

$$(5.4-1) 0.0001 \le x_i \le 1.0$$

(5.4-2)
$$0.0 \le D \le 1.0 \text{ (kmol/min)}$$

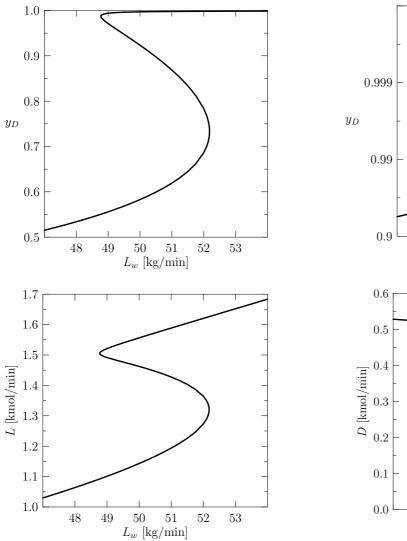
(5.4-3)
$$0.0 \le d \le 0.5 \text{ (kmol/min)}$$

(5.4-4)
$$0.0 \le q_d \le +\infty$$
 (kJ/min)

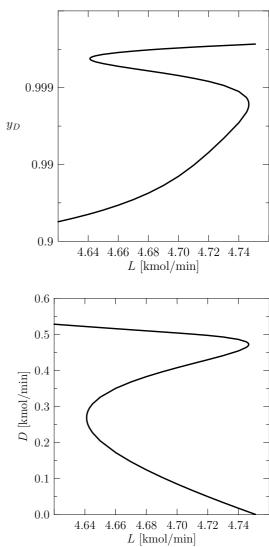
Specifikációtól függően:

	V_i [kmol/min]	Q [kJ/min]
$V_N = 2.0 \text{ kmol/min}$	[1.5, 2.5]	[70, 90]
$V_N = 3.0 \text{ kmol/min}$	[2.0, 4.0]	[100, 140]
$V_N = 4.5 \text{ kmol/min}$	[3.5, 5.5]	[140, 210]

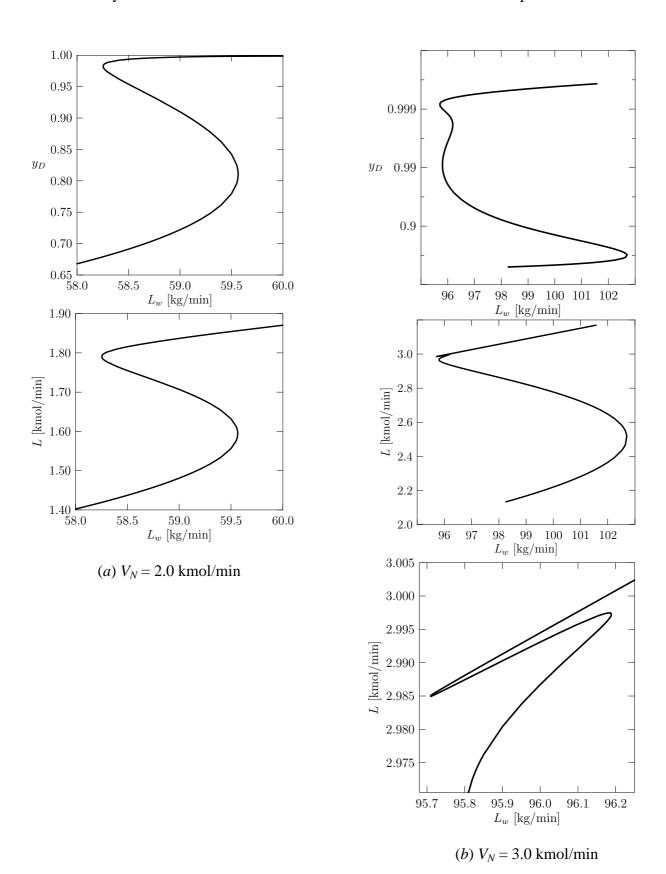
5.5. Numerikus eredmények és értékelésük



12. ábra. Több állandósult állapot; reflux tömegárama specifikált; állandó moláris túlfolyás; $V_N = 2.0 \text{ kmol/min}$



13. ábra. Több állandósult állapot; reflux molárama specifikált; (5.3-13) szerinti entalpiamodell; $V_N = 4.5 \text{ kmol/min}$



14. ábra. Több állandósult állapot; reflux tömegárama specifikált; (5.3-13) szerinti entalpiamodell

Jacobsen és Skogestad (1991) az eredményeket az alábbiak szerint értelmezik. A szétválasztó oszlopok számításánál az áramokat moláramban adottnak tételezzük fel. Ennek a feltevésnek az az oka, hogy a modellegyenletekben moláramokkal dolgozunk. A gyakorlatban azonban különösen a folyadékáramok térfogatáramként vagy tömegáramként adottak. A tömegáramok transzformációja molban kifejezett komponensáramokra függ az oszlopban kialakuló összetételektől, és nemlineáris. Ahogyan az a 12. ábrán látható, ez a transzformáció szingulárissá válhat, ami multiplicitáshoz és instabilitáshoz vezet, már ideális kétkomponensű elegy esetében is.

Ha az anyagáramok moláramban specifikáltak, akkor is szembesülhetünk több állandósult állapottal, erre mutat példát a *13. ábra*. Ezt a típusú multiplicitást akkor is tapasztalhatjuk, ha az üstből felszálló gőz molárama (ami jó közelítéssel arányos forralási teljesítménnyel) és a reflux moláram adottak, és a hőmérleg egyenleteket nem hanyagoljuk el (nem élünk az állandó moláris túlfolyás feltevésével).

Az imént tárgyalt, különböző okokra visszavezethető multiplicitások egyszerre is felléphetnek. A *14. ábrán* egy ilyen esetet látunk. A modellnek egy dobozban 5 megoldása van, amelyikből egy fizikailag értelmetlen, a másik 4 megoldás látható az ábrán.

A kapott numerikus eredmények megfelelnek a cikkben közölt adatoknak. A cikkből nem derül ki, hogy milyen szoftverrel és milyen módon oldották meg a modell egyenleteket. A modellegyenletek intervallumos szempontból lényegesen egyszerűbbek, mint a korábban tárgyalt extraktív desztilláció egyenletei. A bonyolult aktivitási együttható modell és három komponens helyett itt állandó relatív illékonyságot tételeztünk fel, és csak két komponens van, azaz egyetlen moltört egyértelműen meghatározza az összetételt (a tányéron vagy az áramét). Ezeknek együttes eredménye, hogy a túlbecslés kevesebb problémát okoz a számítások során, mint az extraktív desztilláció számításánál.

6. Referencia értékek általános kísérleti tervekkel kimutatható hatásokra

6.1. Motiváció

A kutatás és fejlesztés egyik legköltségesebb és legmunkaigényesebb lépése a kísérletek elvégézése. Ezért nagy jelentőségű a kísérletek megtervezése matematikai statisztika segítségével. A kísérlettervező kérdezheti azt, hogy mekkora mintát kell vennie a

hatások egy adott nagyságú különbségének – valamilyen bizonyossággal történő – kimutatásához. Kíváncsi lehet arra is, hogy mekkora eltérés mutatható ki egy adott kísérleti tervvel. Az irodalomban táblázatokat találunk, amelyek segítségével ezek a kérdések megválaszolhatók. Az egyik ilyen táblázat adatai (Lorenzen, Anderson 1993, Appendix 12, 374. o.) és a közelítő összefüggésekkel (Patnaik 1949) végzett számítások között nagyságrendi eltérés mutatkozott. Azonban nem volt nyilvánvaló, hogy ez a közelítés hibája, vagy a táblázatban közölt adatok tévesek, a kutatás kiinduló pontja ez volt.

Az irodalomban körülbelül 20 algoritmust találunk a (nem közelítő összefüggéseken alapuló) számítások elvégzésére. Több közlemény arról számol be, hogy az alábbi problémák közül egy vagy több is fellép(het) a számítások során: túl- és / vagy alulcsordulás (Helstorm, Ritcey 1985; Ding 1997; Benton, Krishnamoorthy 2003), végeredményt meghamisító kerekítési hiba (Frick 1990), drasztikusan megugró számításigény vagy a program "lefagyása" (Chattamvelli 1995; Benton, Krishnamoorthy 2003), numerikus instabilitás jegyvesztés miatt (Knüsel, Bablok 1996). A fellelhető kevés és nehezen hozzáférhető táblázat számításának menete vagy nem ismert, vagy kifogásolható, és a táblázatok nem szolgálják ki maradéktalanul a gyakorlat igényeit. Megbízható referencia értékek ismerete elengedhetetlen ahhoz, hogy az algoritmusok, táblázatok helyességét és pontosságát tesztelni tudjuk.

Az intervallum módszerek a számított végeredmény egy hibakorlátját automatikusan szolgáltatják, ezáltal kiváló eszközt jelentenek megbízható értékek számításához Az intervallum módszereket több eloszlás számítására is kidolgozták (Wang, Kennedy 1990, 1992, 1994), legjobb tudomásom szerint nemcentrális F eloszlás számításával egyetlen közlemény foglalkozik (Wang, Kennedy 1995). Ez utóbbi közleményben bemutatott algoritmus számos más függvény intervallumos számítását követeli meg. Az algoritmus, amit alább részletezek, pusztán a négy alapműveletnek, a hatvány- és az exponenciális függvénynek intervallum aritmetikával történő számítását igényli csupán, nincs szükség egyéb függvényekre, de csak akkor alkalmazható, ha a próbastatisztika nevezőjének szabadsági foka páros.

6.2. A számítások menete

Arra a kérdésre keressük a választ, hogy egy adott kísérleti tervvel mekkora hatás mutatható ki rögzített α első- és β másodfajú hibavalószínűség mellett. A hatások szignifikanciájának vizsgálatára szolgáló F próba F_0 próbastatisztikája nemcentrális F

eloszlást követ, $F_0 \sim F^{\rm nc}(v_1, v_2, \lambda)$. Itt a v_1, v_2, λ paraméterek rendre a próbastatisztika számlálójának és nevezőjének szabadsági fokát, λ a nemcentralitási paramétert jelöli, ez utóbbi a faktorok hatásával áll egyértelmű kapcsolatban. A másodfajú hiba elkövetésének valószínűsége

(6.2-1)
$$\beta = P[F_0 < F_\alpha(v_1, v_2)] = P[F^{\text{nc}}(v_1, v_2, \lambda) < F_\alpha(v_1, v_2)],$$

itt $F_{\alpha}(v_1, v_2)$ a v_1, v_2 paraméterű F-eloszlás α felső kvantilise, α az előírt szignifikancia szint. Innen, felhasználva a nemcentrális F és béta eloszlások közötti kapcsolatot, a kimutatható legkisebb eltérés számítása az

(6.2-2)
$$I_z(a, b; \lambda) = \beta$$

egyenlet λ -ra történő megoldását igényli; $I_x(a, b; \lambda)$ az a, b, λ paraméterekkel nemcentrális béta eloszlást követő valószínűségi változó eloszlásfüggvényét jelöli, $a = v_1/2$, $b = v_1/2$, z a centrális béta eloszlás α felső kvantilise.

Ha a próbastatisztika nevezőjének szabadsági foka páros, akkor az alábbi összefüggésekkel egy olyan algoritmushoz jutunk, amely a négy alapműveletnek, a hatvány-és az exponenciális függvénynek intervallum aritmetikával történő számítását igénylik csupán, nincs szükség egyéb függvényekre, ezért az implementáció egyszerű.

Ha b egész, akkor

(6.2-3)
$$I_x(a,b) = x^a \left(1 + \sum_{n=1}^{b-1} \left(\prod_{m=1}^n \frac{a+m-1}{m} \right) (1-x)^n \right),$$

(6.2-4)
$$I_{x}(a,b;\lambda) = e^{-(\lambda/2)(1-x)} \sum_{i=0}^{b-1} \frac{\left((\lambda/2)(1-x)\right)^{i}}{i!} I_{x}(a+i,b-i).$$

Hagyományos lebegőpontos eljárással kapott értékről például a következőképpen tudjuk eldönteni, hogy az bizonyos hibahatáron belül helyes vagy sem. A vizsgált értéket előre definiált szélességű intervallumba zárjuk, majd ebben a szűk intervallumban zérushely keresést végzünk intervallum Newton módszerrel. Ennek az intervallum Newton módszerrel végzett zérushely keresésnek három kimenetele lehetséges, mindig egyértelmű, hogy melyik esettel állunk szemben (Hammer, Hocks, Kulisch, Ratz 1995; 6. Nonlinear Equations in One Variable).

A eset. Minden zérushelyet sikerült intervallumba zárni, és minden intervallum pontosan egy zérushelyet tartalmaz. A zérushely keresés eredménye ezen intervallumokat tartalmazó lista. (Ha az *A esettel* állunk szembe, akkor a listán pontosan egy elem lesz számításainknál, a vizsgált függvények monotonitása miatt.)

B eset. A függvénynek biztosan nincsen zérushelye az adott kiindulási intervallumban. A zérushely keresés eredménye tehát az, hogy nincs megoldás.

C eset. A zérushely keresés eredményeként kapott listán van legalább egy olyan intervallum, amelyben nem sikerült teljes bizonyossággal igazolni vagy cáfolni, hogy van megoldás.

Nem intervallum módszerel számított eredmények helyességének tesztelésére szolgáló intervallumos algoritmus alább látható.

0. lépés. A kezdeti x_0 és λ_0 intervallumokat úgy kapjuk, hogy a vizsgált (nem intervallum) módszerrel számított valós \widetilde{x}_{α} és $\widetilde{\lambda}$ értékeket intervallumba zárjuk a következőképpen:

(6.2-5)
$$x_0 = [(1 - \varepsilon_x)\widetilde{x}_\alpha, (1 + \varepsilon_x)\widetilde{x}_\alpha]$$

(6.2-6)
$$\lambda_0 = [(1 - \varepsilon_{\lambda})\widetilde{\lambda}, (1 + \varepsilon_{\lambda})\widetilde{\lambda}]$$

ahol, ε_x és ε_λ rögzített kis pozitív számok, például 10^{-6} ; \widetilde{x}_α és $\widetilde{\lambda}$ pozitív kell, hogy legyen.

- **1. lépés.** Intervallum Newton módszerrel egy olyan intervallumot számítunk a (6.2-3) képlet alapján, amelyik közrefogja x_{α} elméletileg helyes értékét, x kiindulási intervalluma x_0 . Ha a B vagy C eset állna elő, akkor a megfelelő hibaüzenettel befejezzük az eljárást.
- **2. lépés.** Intervallum Newton módszerrel megoldjuk (6.2-2) egyenletet λ -ra, a (6.2-3) és (6.2-4) képleteket használva, λ kiindulási intervalluma λ_0 . Ha a B vagy C eset állna elő, akkor a megfelelő hibaüzenettel befejezzük az eljárást; ellenkező esetben a λ -ra kapott intervallum közrefogja annak elméletileg helyes értékét.

Ha a kiindulási intervallumok tartalmazzák az elméletileg helyes értékeket és az intervallum Newton módszer ezt sikerrel igazolni tudja (az 1. és 2. lépésben is az A eset áll elő), akkor a tesztelt nem intervallum módszer rendre ε_x és ε_λ pontos, a vizsgált esetben. Hasonlóan, ha a kiindulási intervallumok nem tartalmazzák az elméletileg helyes értékeket és az intervallum Newton módszer ezt sikerrel igazolni tudja (B eset), akkor a tesztelt nem intervallum módszer pontossága rosszabb, mint ε_x vagy ε_λ , a vizsgált esetben. Ilyen módon nem intervallum módszerek automatikus tesztelésére nyílik lehetőség. Ha a szerencsétlen C eset áll elő, akkor nem tudunk megbízható következtetést levonni, de az ε_x és ε_λ paraméterek növelésével *várhatóan* megszüntethető a C eset szerinti kimenetel. Számításaim során nem lépett fel a C eset.

A (6.2-3) és (6.2-4) egyenletek közvetlen kiértékelését intervallum aritmetikával egyszerű megvalósítani, bár korántsem ideális a műveletigény tekintetében. Például jelentősen

csökkenthető a kerekítési módok közötti váltás, ha figyelembe vesszük, hogy $a>0,\ b>0,\ 0\le x\le 1$ minden esetben. A rövidesen bemutatásra kerülő eredmények azt tanúsítják, hogy a számítások elegendően gyorsak az alkalmazott hardver és szoftver környezetben, ezért az egyszerű intervallumos kiértékelést valósítottam meg. A számításokhoz kizárólag az IEEE double (64 bit) típusát használtam. A kezdeti intervallumok számításához a Baharev, Kemény (2008) nem intervallumos módszert használtam.

6.3. Numerikus példák és értékelésük

1. példa

A 27. táblázatban a kutatás kiinduló pontját jelentő Lorenzen és Anderson (1993) táblázat (Appendix 12) egy kiragadott hibás sora látható. A megadott adatokhoz előírás szerint 0.10 másodfajú hibavalószínűség kellene, hogy tartozzon. Az előzőekben írt algoritmussal megbízható (helyes) referencia értékeket számítottam, valamint azt is számítottam, hogy mekkora tényleges másodfajú hibavalószínűség tartozik a helytelen értékekhez. Például az (50, 2) szabadsági fokokhoz tartozó esetben 85.1%-os hibavalószínűség mellett dolgoznánk *tudtunkon kívül* az előírt 10% helyett, ha a hibás adatot használnánk. Durva hibával állunk tehát szemben.

27. táblázat. Lorenzen és Anderson (1993) táblázatának egy kiragadott hibás sora, a θ értékek a próbastatisztika számlálójának (oszlopok) és nevezőjének (sor) szabadsági fokának függvényében. A θ értékből λ így számítható $\lambda = \theta^2 v_{\text{számláló}}$.

Hibás $ heta$ értékek										
v	1	2	3	4	5	6	10	20	50	
2	6.795	6.711	5.986	5.184	4.637	4.233	3.279	2.318	1.466	
•										
Helyes θ értékek										
ν	1	2	3	4	5	6	10	20	50	
2	6.796	6.710	6.682	6.668	6.659	6.653	6.642	6.633	6.628	
A hibás értékekhez tartozó tényleges másodfajú hibavalószínűség										
(0.10-nek kellene lennie előírás szerint)										
v	1	2	3	4	5	6	10	20	50	
2	0.100	0.100	0.156	0.244	0.319	0.382	0.549	0.722	0.851	

A Lorenzen és Anderson táblázat minden, az itt javasolt módszerrel számítható adatát is ellenőriztem (ezek: a = 0.5(0.5)3, 5, 10, 25; b = 1(1)15, 20(10)50, 100, 250, 500; $\alpha = 0.05$; $\beta = 0.10$), minden vizsgált esetben a Baharev, Kemény (2008) algoritmus 6 értékes jegyre

III. Eredmények 6. Referencia értékek általános kísérleti tervekkel kimutatható hatásokra

pontosnak bizonyult. A számításokhoz 30 másodpercnél kevesebb időre volt szükség. Ez jól mutatja, hogy a javasolt intervallumos eljárás lehetővé teszi más algoritmusok gyors, automatizált ellenőrzését széles paraméter-tartományban.

2. példa

Chattamvelli és Shanmugam (1997) 1. táblázatának célja részben az volt, hogy bizonyítsa, hogy algoritmusuk pontosabb értékeket ad, mint Frick algoritmusa, ha a λ paraméter értéke nagy ($\lambda \geq 54$). A 28. táblázat azt bizonyítja, hogy a szerzők ezen állítása téves. Chattamvelli és Shanmugam algoritmusa nagy λ értékeknél az ún. kifelé haladó összegzést használja (bővebben: Baharev, Kemény 2008), amelyik numerikus értelemben a legrosszabb: jelentős relatív hibát okozhat, ha egyszeres pontosságú változókat használunk. Mivel a szerzők számításaik menetét és körülményeit nem elegendő mértékben részletezték, így a pontatlanság oka a cikkben közölt információk alapján nem felderíthető.

28. táblázat. Nemcentrális béta eloszlást követő valószínűségi változó eloszlásfüggvénye¹

а	b	λ	X	Eredmények az alábbi algoritmusokkal:							
				$Frick (1990)^2$	<i>Lenth</i> (1987) ²	Chatt. (1997) ^{2,3}	Ref. érték ⁴				
5	5	54	0.8640	$0.4563026 (7)^{1}$	0.4563029 (6)	0.4563021 (5)	0.4563026				
5	5	140	0.9000	0.1041342 (6)	0.1041331 (5)	0.1041337 (6)	0.1041335				
5	5	170	0.9560	0.6022421 (6)	0.6022414 (5)	0.6022353 (5)	0.6022422				
10	10	54	0.8686	0.9187790 (6)	0.9187794 (6)	0.9187770 (5)	0.9187791				
10	10	140	0.9000	0.6008050 (5)	0.6008078 (5)	0.6008106 (5)	0.6008071				
10	10	250	0.9000	0.0902795 (3)	$0.0000000 (0)^5$	0.0902850 (4)	0.0902899				
20	20	54	0.8787	0.9998677 (7)	0.9998677 (7)	0.9998655 (5)	0.9998677				
20	20	140	0.9000	0.9925930 (4)	0.9925973 (5)	0.9925997 (5)	0.9925975				
20	20	250	0.9220	0.9641169 (5)	$0.0000000 (0)^5$	0.9641113 (4)	0.9641191				

⁽¹⁾ A zárójelben feltüntetett érték a helyes értékes jegyek száma.

⁽²⁾ Az értékek Chattamvelli és Shanmugam (1997) közleményének 1. táblázatából valók, melyeket egyszeres pontosságú változókkal számítottak.

⁽³⁾ Chattamvelli and Shanmugam (1997) algoritmusa.

⁽⁴⁾ Az intervallum számítások eredménye, 7 decimális jegy pontossággal. Az alkalmazott intervallum módszer csak egész *b* értékekre használható, a többi algoritmusra nincs ilyen megkötés.

⁽⁵⁾ Alulcsordulás eredménye

IV. Új tudományos eredmények összefoglalása tézispontokban

Zérushelykereső eljárás megvalósítása

1. tézis. Nemlineáris egyenletrendszerek megoldására affin aritmetika és lineáris programozás kombinációján alapuló, általános módszert fejlesztettem ki és implementáltam C++ programozási nyelven [1, 2, 5, 6, 7, 8]. A hagyományos módszerekkel ellentétben ez a módszer (a) nem igényel kezdőpontot az iterációhoz, (b) garantált a konvergencia, (c) igazolni tudja, ha nincs megoldás, (d) ha a feladatnak több megoldása van, akkor ezeket mind szolgáltatja. A módszer általános, nemcsak vegyészmérnöki, hanem más tudományterületeken is alkalmazható.

Egyensúlyi egységek és kaszkádok, szétválasztó oszlopok számítása

- **2. tézis.** Gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok és folyadék-folyadék egyensúlyi egységek számítását elvégeztem az újfajta, affin aritmetikán alapuló módszerrel és az intervallum Newton-módszerrel is. Az affin linearizálási technika a vizsgált esetekben az egyszerűbb feladatoknál egy nagyságrenddel, nehezebb feladatoknál több nagyságrenddel bizonyult hatékonyabbnak a hagyományos intervallum Newton módszernél [2, 5, 6, 7, 8].
- **3. tézis.** Gőz-folyadék egyensúlyi kaszkádok állandósult állapotát számítottam az affin aritmetika és lineáris programozás kombinációját használva. Megállapítottam, hogy a szűkítés megfelelő implementációja esetén a lineáris programozás hatékony és ajánlható módszer a keresési tér szűkítésére [2, 5, 6, 7, 8]. Nem ismert korábbi irodalmi példa egyensúlyi kaszkádok részletes számítására intervallum módszerrel.
- **4. tézis.** Folyamatos üzemű extraktív desztilláló oszlop részletes számítását sikerrel végeztem el az affin aritmetika és lineáris programozás kombinációján alapuló zérushelykereső eljárással [1, 5, 6, 7]. A konvergencia garantált, nem kell oszlopprofilt becsülni. Ha a specifikációk nem teljesíthetők, akkor a módszer ezt igazolja. Lehetséges intervallum specifikációkat is előírni (például a desztillátumban a célkomponens moltörtje legyen *legalább* 0.92), ez hagyományos módszereknél nem, vagy csak körülményesen lehetséges. Nem ismert korábbi publikáció desztilláló oszlopok részletes számítására intervallum módszerrel, feltehetően a feladat mérete és bonyolultsága miatt.

Szétválasztó oszlopok lehetséges állandósult állapotainak megbízható felderítése fontos azok tervezésénél, szimulációjánál, szabályozásánál és üzemeltetésénél. Már ideális kétkomponensű elegy desztillációjánál is lehet több állandósult állapota a desztilláló oszlopnak, rögzített műveleti paraméterek mellett. A hagyományos módszerekkel ellentétben az általam javasolt módszer ezek mindegyikét szolgáltatja megoldásként [5, 6, 7].

Referencia értékek általános kísérleti tervekkel kimutatható eltérésekre

5. tézis. Az általános kísérleti tervekkel kimutatható legkisebb eltérések meghatározására szolgáló algoritmusok teljesen hibás értéket adhatnak. Megbízható referencia értékek ismerete elengedhetetlen ahhoz, hogy ezen algoritmusok helyességét tesztelhessük. Rámutattam, hogy egy zárt képlettel, véges számú lépésben, viszonylag könnyen számolhatók referencia értékek, ha a próbastatisztika nevezőjének szabadsági foka páros. A módszer lehetővé teszi más algoritmusok gyors, automatizált ellenőrzését széles paraméter-tartományban, erre gyakorlati példákat is bemutattam [3, 4, 9, 10, 11].

Közlemények az értekezés témájában

Angol nyelvű folyóiratcikkek

- [1] **A. Baharev**, T. Achterberg, E. Rév; *Computation of an extractive distillation column with affine arithmetic*; AIChE Journal, *in press*
- [2] **A. Baharev**, E. Rév; *Reliable Computation of Equilibrium Cascades with Affine Arithmetic*; AIChE Journal, 2008, **54** (7), 1782–1797
- [3] **A. Baharev**, E. Rév; Rigorous enclosures of minimal detectable differences for general ANOVA models; submitted to Reliable Computing
- [4] **A. Baharev**, S. Kemény; *On the computation of the noncentral F and noncentral beta distribution*; Statistics and Computing, 2008, **18** (3), 333–340

Előadások, konferencia-kiadványok

- [5] **Baharev A.**; Intervallum módszerek alkalmazása vegyészmérnöki számításokban; az MTA Vegyipari Műveleti Munkabizottságának, a Műszaki Kémiai Komplex Bizottságának és a Magyar Kémikusok Egyesülete Műszaki Kémiai Szakosztályának együttes ülése; Veszprém, 2009. április 23.
- [6] **Baharev A.**; *Intervallum módszerek alkalmazása vegyészmérnöki számításokban*; Oláh György Doktori Iskola VI. konferenciája, Budapest, 2009. február 4.
- [7] **A. Baharev**, E. Rév; *Comparing inclusion techniques on chemical engineering problems*; 13th GAMM IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations SCAN'2008; El Paso, Texas, USA, Sept 29 Oct 3, 2008; pp. 17–18.
- [8] **Baharev A.**, Rév E.; *Egyensúlyi egységek és kaszkádok számítása affin aritmetikával*; Műszaki Kémiai Napok'07, Veszprém, 2007. április 25–27. 105–107. o.
- [9] **Baharev A.**, Kemény S.; *Nemcentrális F-eloszlás számításához kapcsolódó numerikus problémák*; IV. Alkalmazott Informatika Konferencia, Kaposvár, 2005. május 27.
- [10] **Baharev A.**; *Számítások nemcentrális F-eloszlással*; XXVII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia; FiFöMa szekció, Valószínűségszámítás, statisztika és pénzügyi matematika tagozata; 186. o.; Témavezető: Kemény Sándor; III. helyezés, kiemelt dícséret; Budapest, 2005. március 21–23.
- [11] **A. Baharev**; Conference of MSc Students; *On Computing the noncentrality parameter of the noncentral F-distribution*; Supervisor: S. Kemény; Periodica Polytechnica Ser. Chem. Eng. **48** (2), pp. 119–120, 2004

Egyéb közlemények

Előadások, konferencia-kiadványok

- [12] **Baharev A.**, Frits E., Lelkes Z., Rév E.; *Megbízható fázisegyensúlyi számítások*; Műszaki Kémiai Napok'06, Veszprém, 2006. április 25–27. 288–289. o.
- [13] **A. Baharev**, E. R. Frits, Cs. Stéger, Z. Lelkes, E. Rév; *Application of interval arithmetics for exploring feasibility region of extractive distillation*; 10. International Workshop on Chemical Engineering Mathematics; Budapest, Hungary, Aug 18–20, 2005
- [14] E. R. Frits, **A. Baharev**, Z. Lelkes, M. Markót, Z. Fonyó, E. Rév, T. Csendes; *Feasibility Study by interval arithmetics: Application of interval arithmetics for exploring feasibility of extractive distillation variants*; International Workshop on Global Optimization; Almería, Spain, Sep 18–22, 2005 (G05); in Proceedings of the International Workshop on Global Optimization; Ed. I. García et al., pp. 103–108, 2005
- [15] Frits E. R., **Baharev A.**, Rév E., Lelkes Z., Markót M., Csendes T.; *Intervallum-aritmetika alkalmazása vegyipari számítási feladatok megoldására*; Műszaki Kémiai Napok'05, Veszprém, 2005. április 26–28. 216. o.

Irodalomjegyzék

- C. S. Adjiman, I. P. Androulakis, C. A. Floudas; A Global Optimization Method, αBB, for General Twice-Differentiable Constrained NLPs II. Implementation and Computational Results; Computers and Chemical Engineering, 1998, 22 (9), 1159–1179
- C. S. Adjiman, S. Dallwig, C. A. Floudas, A. Neumaier; *A Global Optimization Method*, *αBB*, for General Twice-Differentiable Constrained NLPs I. Theoretical Advances; Computers and Chemical Engineering, 1998, **22** (9), 1137–1158
- R. R. Akhmerov; *Interval-Affine Gaussian Algorithm for Constrained Systems*; Reliable Computing, 2005, **11** (5), 323–341
- G. Alefeld, G. Mayer; *Interval analysis: theory and applications*; Journal of Computational and Applied Mathematics, 2000, **121**, 421–464
- I. P. Androulakis, C. D. Maranas, C. A. Floudas; *αBB: A Global Optimization Method for General Constrained Nonconvex Problems*; Journal of Global Optimization, 1995, **7** (4), 337–363
- Baharev A.; *Intervallum-aritmetika alkalmazása vegyészmérnöki számításokban*; Diplomamunka, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyipari Műveletek Tanszék, 2005
- L. E. Baker, A. C. Pierce, K. D. Luks; *Gibbs energy analysis of phase equilibria*; Society of Petroleum Engineers Journal, 1982, **22** (5), 731–742
- M. I. Balashov, A. V. Grishunin, A. V. Ryazanova and L. A. Serafimov; *On the Investigation of Continuous and Batch Distillation Regions* (in Russian); Physical-Chemical Foundations of Distillation, 1970, Moscow Lomonosov Institute of Fine Chemical Technology, Moscow pp. 205–215
- B. Bánhelyi, T. Csendes, B. M. Garay, L. Hatvani; A computer-assisted proof for Σ_3 -chaos in the forced damped pendulum equation; SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, 2008, 7 (3), 843–867
- T. Beelitz, C. H. Bischof, B. Lang; A Hybrid Subdivision Strategy for Result-Verifying Nonlinear Solvers; PAMM, 2004, 4 (1), 632–633
- T. Beelitz, A. Frommer, B. Lang, P. Willems; *Symbolic-Numeric Techniques for Solving Nonlinear Systems*; PAMM, 2005, **5** (1), 705–708
- N. Bekiaris, G. A. Meski, C. M. Radu, M. Morari; *Multiple Steady States in Homogeneous Azeotropic Distillation*; Ind. Eng. Chem. Res. 1993, **32**, 2023–2038
- N. Bekiaris, G. A. Meski, M. Morari; *Multiple Steady-States in Heterogeneous Azeotropic Distillation*; Ind. Eng. Chem. Res. 1996, **35** (1), 207–227

- N. Bekiaris, M. Morari; *Multiple Steady States in Distillation:* ∞/∞ *Predictions, Extensions, and Implications for Design, Synthesis, and Simulation*; Ind. Eng. Chem. Res., 1996, **35** (11), 4264–4280
- P. Belotti, J. Lee, L. Liberti, F. Margot, A. Waechter; *Branching and Bounds Tightening Techniques for Non-Convex MINLP*; IBM Research Report, RC24620, 2008
- F. Benhamou, F. Goualard, L. Granvilliers, J.-F. Puget; *Revising hull and box consistency*; Proceedings of the 1999 international conference on Logic programming, Las Cruces, New Mexico, United States, The MIT Press, 1999, 230–244
- D. Benton, K. Krishnamoorthy; Computing discrete mixtures of continuous distributions: noncentral chisquare, noncentral t and the distribution of the square of the sample multiple correlation coefficient; Comput. Stat. Data Anal. 2003, 43, 249–267
- G. I. Burgos-Solorzano, J. F. Brennecke, M. A. Stadtherr; *Validated Computing Approach for High-Pressure Chemical and Multiphase Equilibrium*; Fluid Phase Equilibria, 2004, **219**, 245–255
- Y. A. Chang, J. D. Seader; Simulation of continuous reactive distillation by a homotopy-continuation method; Comp. Chem. Eng. 1988, 12 (12), 1243–1255
- R. Chattamvelli; *On the doubly noncentral F distribution*; Comput. Stat. Data Anal. 1995, **20**, 481–489
- F. Chen, R. S. Huss, M. F. Doherty, M. F. Malone; *Multiple steady states in reactive distillation: kinetic effects*; Computers and Chemical Engineering, 2002, **26**, 81–93
- S. H. Choi, N. L. Book; *Unreachable Roots for Global Homotopy Continuation Methods*; AIChE Journal, 1991, **37** (7), 1093–1095
- A. E. Csallner, T. Csendes, M. Cs. Markót; *Multisection in Interval Branch-and-Bound Methods for Global Optimization–I. Theoretical Results*; Journal of Global Optimization, 2000, **16**, 371–392
- T. Csendes, D. Ratz; Subdivision Direction Selection in Interval Methods for Global Optimization; SIAM Journal on Numerical Analysis, 1997, **34** (3), 922–938
- C. G. Ding; On using Newton's method for computing the noncentrality parameter of the noncentral F distribution; Commun. Stat. Simul. Comput. 1997, **26** (1), 259–268
- M. F. Doherty, J. D. Perkins; On the dynamics of distillation processes IV. Uniqueness and stability of the steady state in homogeneous continuous distillations; Chem. Eng. Science, 1982, 37 (3), 381–392
- C. Dorn, T. E. Güttinger, G. J. Wells, M. Morari, A. Kienle, E. Klein, E.-D. Gilles; *Stabilization of an Unstable Distillation Column*; Ind. Eng. Chem. Res., 1998, **37** (2), 506–515

H. El-Owny; Hansen's Generalized Interval Arithmetic Realized in C-XSC; Preprint, BUW-WRSWT 2006/2

http://www.math.uni-wuppertal.de/org/WRST/literatur/lit_wrswt.html

H. El-Owny; *Verified Solution of Parametric Interval Linear Systems*; PhD thesis, University of Wuppertal, 2007

http://elpub.bib.uni-

wuppertal.de/edocs/dokumente/fbc/mathematik/diss2007/elowny/dc0709.pdf

- K. Esbjerg, T. R. Andersen, D. Müller, W. Marquardt, S. B. Jørgensen; *Multiple Steady States in Heterogeneous Azeotropic Distillation Sequences*; Ind. Eng. Chem. Res. 1998, **37**, 4434–4452
- L. H. de Figueiredo, R. Van Iwaarden, J. Stolfi; *Fast interval branch-and-bound methods for unconstrained global optimization with affine arithmetic*; Technical report IC-97-08, Institute of Computing, Univ. of Campinas; June 1997
- H. Frick; AS R84. A remark on Algorithm AS 226, computing noncentral beta probabilities; Appl. Stat. 1990, **39**, 311–312
- C.-Y. Gau, J. F. Brennecke and M. A. Stadtherr; *Reliable Parameter Estimation in VLE Modeling*; Fluid Phase Equilibria, 2000, **168**, 1–18
- C.-Y. Gau and M. A. Stadtherr; *Reliable Nonlinear Parameter Estimation Using Interval Analysis: Error-in-Variable Approach*; Comput. Chem. Eng., 2000, **24**, 631–638
- C.-Y. Gau, M. A. Stadtherr; *Deterministic Global Optimization for Error-in-Variables Parameter Estimation*; AIChE J. 2002, **48**, 1192–1197
- D. W. Green, R. H. Perry; Perry's Chemical Engineers' Handbook; 2007, McGraw-Hill
- T. E. Güttinger; *Multiple Steady States in Azeotropic and Reactive Distillation, PhD Thesis*; 1998, ETH No. 12720, ETH Zürich, Switzerland. available via http://control.ee.ethz.ch/index.cgi?page=publications&action=details&id=334
- T. E. Güttinger, C. Dorn, M. Morari; *Experimental Study of Multiple Steady States in Homogeneous Azeotropic Distillation*; Ind. Eng. Chem. Res. 1997, **36** (3), 794–802
- T. E. Güttinger, M. Morari; Comments on "Multiple Steady States in Homogeneous Azeotropic Distillation"; Ind. Eng. Chem. Res. 1996a, 35, 2816
- T. E. Güttinger, M. Morari; *Multiple Steady States in Homogeneous Separation Sequences*; Ind. Eng. Chem. Res. 1996b, **35**, 4597–4611
- T. E. Güttinger, M. Morari; *Predicting Multiple Steady States in Equilibrium Reactive Distillation. 1. Analysis of Nonhybrid Systems*; Ind. Eng. Chem. Res., 1999a, **38** (4), 1633–1648
- T. E. Güttinger, M. Morari; *Predicting Multiple Steady States in Equilibrium Reactive Distillation*. 2. *Analysis of Hybrid Systems*; Ind. Eng. Chem. Res., 1999b, **38** (4), 1649–1665

- R. Hammer, M. Hocks, U. Kulisch, D. Ratz; *C++ Toolbox for Verified Computing I, Basic Numerical Problems*; Springer-Verlag, Berlin, 1995
- E. R. Hansen; *Generalized Interval Arithmetic*; In Nickel, K. L. (ed.), Interval Mathemantics, Springer, Lecture Notes in Computer Science, 1975, Vol. **29**., 7–18
- E. R. Hansen; *Computing Zeros of Functions Using Generalized Interval Arithmetic*; Interval Computations, 1993, **3**, 3–28
- E. Hansen, S. Sengupta; *Bounding solutions of systems of equations using interval analysis*; BIT Numerical Mathematics, 1981, **21** (2), 203–211
- E. R. Hansen, G. W. Walster; *Global Optimization Using Interval Analysis*; Marcel Dekker, Inc., 2004
- S. T. Harding, C. A. Floudas; *Phase stability with cubic equations of state: Global optimization approach*; AIChE Journal, 2000a, **46**, 1422–1440.
- S. T. Harding, C. A. Floudas; *Locating Heterogeneous and Reactive Azeotropes*; Industrial and Engineering Chemistry Research, 2000b, **39** (6), 1576–1595
- S. T. Harding, C. D. Maranas, C. M. McDonald, C. A. Floudas; *Locating All Homogeneous Azeotropes in Multicomponent Mixtures*; Industrial and Engineering Chemistry Research, 1997, **36** (1), 160–178
- C. W. Helstorm, J. A. Ritcey; *Evaluation of the noncentral F distribution by numerical contour integration*; SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1985, **6** (3), 505–514
- E. K. Hilmen, V. N. Kiva, S. Skogestad; *Topology of ternary VLE diagrams: Elementary cells*; AIChE Journal, 2002, **48** (4), 752–759
- J. Z. Hua, J. F. Brennecke, M. A. Stadtherr; *Reliable Prediction of Phase Stability Using an Interval-Newton Method*; Fluid Phase Equilibria, 1996, **116**, 52–59
- J. Z. Hua, J. F. Brennecke, M. A. Stadtherr; *Enhanced Interval Analysis for Phase Stability: Cubic Equation of State Models*; Ind. Eng. Chem. Res. 1998, **37**, 1519–1527
- S. Ibraev; A new parallel method for verified global optimization; PhD thesis, University of Wuppertal, 2001
- *IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic*; IEEE Std. 754-1985
- IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic; IEEE Std. 754-2008; Revision of 754-1985
- R. Jacobs, R. Krishna; *Multiple solutions in reactive distillation for methyl tert-butyl ether synthesis*; Ind. Eng. Chem. Res., 1993, **32** (8), 1706–1709
- E. W. Jacobsen, S. Skogestad; *Multiple steady states in ideal two-product distillation*; AIChE Journal, 1991, **37** (4), 499–511

- F. Jalali, J. D. Seader, S. Khaleghi; *Global solution approaches in equilibrium and stability analysis using homotopy continuation in the complex domain*; Computers and Chemical Engineering, 2008, **32** (10), 2333–2345
- C. Jansson; *On self-validating methods for optimization problems*; pp.381–438 in: Topics in validated computation (J. Herzberger, ed.), Elsevier, Amsterdam 1994
- C. Jansson; *Rigorous Lower and Upper Bounds in Linear Programming*; SIAM J. Optim. 2004, **14**, 914–935
- A. Kannan, M. R. Joshi, G. R. Reddy, D. M. Shah; *Multiple-Steady-States Identification in Homogeneous Azeotropic Distillation Using a Process Simulator*; Ind. Eng. Chem. Res. 2005, **44**, 4386–4399
- R. B. Kearfott; *Preconditioners for the Interval Gauss-Seidel Method*; SIAM J. Numer. Anal. 1990, **27** (3), 804–822
- R. B. Kearfott; Decomposition of Arithmetic Expressions to Improve the Behavior of Interval Iteration for Nonlinear Systems; Computing 1991, **47** (2), 169–191
- R. B. Kearfott; *Rigorous Global Search: Continuous Problems*; Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1996
- R. B. Kearfott; *Empirical Evaluation of Innovations in Interval Branch and Bound Algorithms for Nonlinear Systems*; SIAM Journal on Scientific Computing, 1997, **18** (2), 574–594
- R. B. Kearfott; A comparison of some methods for bounding connected and disconnected solution sets of interval linear systems; Computing, 2008, 82, 77–102
- R. B. Kearfott, S. Hongthong; *On preconditioners and splitting in the interval Gauss–Seidel method*; tech. report, University of Louisiana at Lafayette, 2005 http://interval.louisiana.edu/preprints/2005 new S preconditioner.as submitted.pdf
- R. B. Kearfott, C. Y. Hu, M. Novoa; *A review of preconditioners for the interval Gauss-Seidel method*; Interval Comput. 1991, **1** (1), 59–85
- R. B. Kearfott and M. Novoa; *Algorithm 681: INTBIS, a Portable Interval Newton/Bisection Package*; ACM Trans. Math. Software, 1990, **16** (2), 152–157
- R. B. Kearfott, X. Shi; *Optimal Preconditioners for Interval Gauss-Seidel Methods*; Scientific Computing and Validated Numerics, ed. G. Alefeld and A. Frommer, Akademie Verlag, pp. 173–178, 1996
- C. Keil and C. Jansson; *Computational Experience with Rigorous Error Bounds for the Netlib Linear Programming Library*; Reliable Computing, 2006, **12** (4), 303–321
- A. Kienle, M. Groebel, E. Gilles; *Multiple Steady States in Binary Distillation Theoretical and Experimental Results*; Chem. Eng. Sci. 1995, **50** (17), 2691–2703

- R. W. Klopfenstein; Zeros of Nonlinear Functions; Journal of the ACM, 1961, 8 (3), 366–373
- L. Knüsel, B. Bablok; *Computation of the noncentral gamma distribution*; SIAM J. Sci. Comput. 1996, **17** (5), 1224–1231
- A. Koggersbøl, T. Andersen, J. Bagterp, S. Jørgensen; *An Output Multiplicity in Binary Distillation: Experimental Verification*; Comput. Chem. Eng. 1996, **20**, Supplement 2, S835–S840.
- L. V. Kolev; *A general interval method for global nonlinear dc analysis*; Proc. of the 1997 European Conf. on Circuit Theory and Design, ECCD'97, Technical University of Budapest, 30th August 3rd Sept., 1997, Budapest, Hungary, volume 3, pp. 1460–1462
- L. V. Kolev; A New Method for Global Solution of Systems of Non-Linear Equations; Reliable Computing, 1998a, 4, 125–146
- L. V. Kolev; *An efficient interval method for global analysis of non-linear resistive circuits*; Int. J. Circuit Theory Appl., 1998b, **26**, 81–92
- L. V. Kolev; An Improved Method for Global Solution of Non-Linear Systems; Reliable Computing, 1999, 5, 103–111
- L. V. Kolev; *An Interval Method for Global Nonlinear Analysis*; IEEE Transactions on Circuits and Systems-I: Fundamental Theory and Applications, 2000, **47**, 675–683
- L. V. Kolev; *An improved interval linearization for solving non-linear problems*; Numerical Algorithms, 2004a, **37**, 213–224
- L. V. Kolev; Solving Linear Systems whose elements are nonlinear functions of interval parameters; Numerical Algorithms, 2004b, **37**, 199–212
- L. V. Kolev; A method for outer interval solution of linear parametric systems; Reliable Computing, 2004c, 10, 227–239
- L. V. Kolev; *Improvement of a Direct Method for Outer Solution of Linear Parametric Systems*; Reliable Computing, 2006, **12** (3), 193–202
- L. V. Kolev; A novel approach to globally solving a class of nonlinear systems; submitted to Reliable Computing, 2008
- L. V. Kolev, V. M. Mladenov; *A linear programming implementation of an interval method for global non-linear DC analysis*; IEEE International Conference on Electronics, Circuits and Systems, 1998, **1**, 75–78
- L. V. Kolev, I. Nenov; *A combined interval method for global solution of nonlinear systems*; Proc. of the XXIII International Conference on Fundamentals of Electronics and Circuit Theory SPETO 2000, Gliwice, Poland, 24-27 May 2000, pp. 365–368
- A. N. Kolmogorov; On the representation of continuous functions of many variables by superposition of continuous functions of one variable and addition; Doklady Akademii Nauk

- SSSR, 1957, **144** (5), 953–956. Translated in American Mathematical Society Translations Issue Series 2, 1963, **28**, 55–59
- J. W. Kovach, W. D. Seider; *Heterogeneous Azeotropic Distillation: Homotopy-Continuation Mtehods*; Comput. Chem. Eng. 1987a, **11** (6), 593–605
- J. W. Kovach, W. D. Seider; *Heterogeneous Azeotropic Distillation: Experimental and Simulation Results*; AIChE Journal, 1987b, **33** (8), 1300–1314
- W. Krämer; *Generalized Intervals and the Dependency Problem*; PAMM Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, 2006, **6** (1), 685–686
- M. Kuno, J. D. Seader; *Computing All Real Solutions to Systems of Nonlinear Equations with a Global Fixed-Point Homotopy*; Ind. Eng. Chem. Res. 1988, **27**, 1320–1329
- W.-J. Lin, J. D. Seader, T. L. Wayburn; *Computing Multiple Solutions to Systems of Interlinked Separation Columns*; AIChE Journal, 1987, **33** (6), 886–897
- Y. Lin, J. A. Enszer, M. A. Stadtherr; *Enclosing All Solutions of Two-Point Boundary Value Problems for ODEs*; Comput. Chem. Eng., 2008, **32**, 1714–1725
- Y. Lin, C. R. Gwaltney, M. A. Stadtherr; *Reliable Modeling and Optimization for Chemical Engineering Applications: Interval Analysis Approach*; Reliable Computing, 2006, **12**, 427–450
- Y. Lin, M. A. Stadtherr; *LP Strategy for Interval-Newton Method in Deterministic Global Optimization*; Ind. Eng. Chem. Res., 2004a, **43**, 3741–3749
- Y. Lin, M. A. Stadtherr; *Advances in Interval Methods for Deterministic Global Optimization in Chemical Engineering*; J. Global Optimization, 2004b, **29**, 281–296
- Y. Lin, M. A. Stadtherr; *Deterministic Global Optimization of Molecular Structures Using Interval Analysis*; J. Comput. Chem., 2005, **26**, 1413–1420
- Y. Lin, M. A. Stadtherr; *Validated Solutions of Initial Value Problems for Parametric ODEs*; Appl. Numer. Math. 2007a, **58**, 1145–1162
- Y. Lin, M. A. Stadtherr; *Deterministic global optimization of nonlinear dynamic systems*; AIChE J. 2007b, 53, 866–875
- Y. Lin, M. A. Stadtherr; Guaranteed State and Parameter Estimation for Nonlinear Continuous-Time Systems with Bounded-Error Measurements; Ind. Eng. Chem. Res., 2007c, 46, 7198–7207
- Y. Lin, M. A. Stadtherr; *Rigorous Model-Based Safety Analysis for Nonlinear Continuous-Time Systems*; Comput. Chem. Eng., 2009, **33**, 493–502
- T. J. Lorenzen, V. L. Anderson; *Design of Experiments: A No-Name Approach*; Marcel Dekker, Inc. 1993

- R. W. Maier, J. F. Brennecke, M. A. Stadtherr; *Reliable Computation of Homogeneous Azeotropes*; AIChE J. 1998, **44**, 1745–1755
- R. W. Maier, J. F. Brennecke and M. A. Stadtherr; *Reliable Computation of Reactive Azeotropes*; Comput. Chem. Eng., 2000, **24**, 1851–1858
- K. Makino, M. Berz; *Remainder differential algebras and their applications*; In M. Berz, C. Bishof, G. Corliss, & A. Griewank, eds., Computational Differentiation: Techniques, Applications, and Tools, Philadelphia: SIAM, 1996, 63–74
- K. Makino, M. Berz; *Efficient control of the dependency problem based on Taylor model methods*; Reliable Computing, 1999, 5, 3–12
- K. Makino, M. Berz; *Taylor models and other validated functional inclusion methods*; International Journal of Pure and Applied Mathematics, 2003, **4**, 379–456
- C. D. Maranas, C. A. Floudas; *Finding All Solutions of Nonlinearly Constrained Systems of Equations*; Journal of Global Optimization, 1995, **7** (2), 143–182
- M. Cs. Markót, T. Csendes, A. E. Csallner; *Multisection in Interval Branch-and-Bound Methods for Global Optimization II. Numerical Tests*; Journal of Global Optimization, 2000, **16**, 219–228
- M. Cs. Markót, J. Fernandez, L. G. Casado, T. Csendes; *New interval methods for constrained global optimization*; Mathematical Programming, Ser. A, 2006, **106** (2), 287–318
- G. Mayer, J. Rohn; On the Applicability of the Interval Gaussian Algorithm; Reliable Computing, 1998, 4, 205–222
- C. M. McDonald, C. A. Floudas; *Decomposition Based and Branch and Bound Global Optimization Approaches for the Phase Equilibrium Problem*; Journal of Global Optimization, 1994, **5** (3), 205–251
- C. M. McDonald, C. A. Floudas; *Global Optimization and Analysis for the Gibbs Free Energy Function for the UNIFAC, Wilson, and ASOG Equations*; Industrial and Engineering Chemistry Research, 1995a, **34** (5), 1674–1687
- C. M. McDonald, C. A. Floudas; *Global Optimization for the Phase and Chemical Equilibrium Problem : Application to the NRTL Equation*; Computers and Chemical Engineering, 1995b, **19** (11), 1111–1141
- C. M. McDonald, C. A. Floudas; *GLOPEQ: A New Computational Tool for the Phase and Chemical Equilibrium Problem*; Computers and Chemical Engineering, 1997, **21**, 1–23
- K. McKinnon, M. Mongeau; A Generic Global Optimization Algorithm for the Chemical and Phase Equilibrium Problem; Journal of Global Optimization, 1998, 12 (4), 325–351
- M. L. Michelsen; *The Isothermal Flash Problem. Part I. Stability*; Fluid Phase Equilibria, 1982a, **9**, 1–19

- M. L. Michelsen; *The Isothermal Flash Problem. Part II. Phase Split Calculation*; Fluid Phase Equilibria, 1982b, **9**, 21–35
- S. Miyajima, M. Kashiwagi; *Existence test for solution of nonlinear systems applying affine arithmetic*; J. Comput. Appl. Math. 2007, **199**, 304–309
- K.-D. Mohl, A. Kienle, E.-D. Gilles, P. Rapmund, K. Sundmacher, U. Hoffmann; *Steady-state multiplicities in reactive distillation columns for the production of fuel ethers MTBE and TAME: theoretical analysis and experimental verification*; Chemical Engineering Science, 1999, **54**, 1029–1043
- R. E. Moore; Methods and Applications of Interval Analysis; SIAM, Philadelphia, 1979
- D. Müller, W. Marquardt; Experimental Verification of Multiple Steady States in Heterogeneous Azeotropic Distillation; Ind. Eng. Chem. Res. 1997, **36**, 5410–5418
- P. S. V. Nataraj; *Interval QFT: A mathematical and computational enhancement of QFT*; International Journal of Robust and Nonlinear Control, 2002, **12** (4), 385–402
- P. S. V. Nataraj, S. Tharewal; An Interval Analysis Algorithm for Automated Controller Synthesis in QFT Designs; Trans. ASME J. Dynamic Systems, Measurement, and Control, 2007, 129 (3), 311–321
- N. S. Nedialkov, K. R. Jackson, G. F. Corliss; *Validated solutions of initial value problems for ordinary differential equations*; Appl. Math. Comput. 1999, **105**, 21–68
- I. P. Nenov, D. H. Fylstra; *Interval Methods for Accelerated Global Search in the Microsoft Excel Solver*; Reliable Computing, 2003, **9**, 143–159
- A. Neumaier; *Interval Methods for Systems of Equations*; Cambridge University Press, Cambridge, 1990
- A. Neumaier; Taylor forms use and limits; Reliable Computing, 2002, 9, 43–79
- A. Neumaier; Complete Search in Continuous Global Optimization and Constraint Satisfaction; pp. 271-369 in: Acta Numerica 2004 (A. Iserles, ed.), Cambridge University Press 2004
- A. Neumaier, O. Shcherbina; *Safe bounds in linear and mixed-integer programming*; Math. Programming A. 2004, **99**, 283–296
- S. A. Nijhuis, F. P. J. M. Kerkhof, A. N. S. Mak; *Multiple steady states during reactive distillation of methyl tert-butyl ether*; Ind. Eng. Chem. Res., 1993, **32** (11), 2767–2774
- J. Nocedal, S. J. Wright; *Numerical Optimization*; 1999, Springer, New York
- W. Oettli, W. Prager; Compatibility of Approximate Solution of Linear Equations with Given Error Bounds for Coefficients and Right-Hand Sides; Numerische Mathematik, 1964, **6**, 405–409

- P. B. Patnaik; The non-central χ^2 and F distribution and their applications; Biometrika, 1949, **36**, 202–232
- F. B. Petlyuk, V. S. Avet'yan; *Investigation of the Rectification of Three-Component Mixtures with Infinite Reflux*; Theor. Found. Chem. Eng. 1971, **5** (4), 499–507
- E. D. Popova; *On the Solution of Parametrised Linear Systems*; In: W. Kraemer, J. Wolff von Gudenberg (Eds.): Scientific Computing, Validated Numerics, Interval Methods. Kluwer Acad. Publishers, 2001, pp. 127–138
- E. Popova; *Generalizing the Parametric Fixed-Point Iteration*; Proceedings in Applied Mathematics & Mechanics (PAMM), 2004, **4** (1), 680–681
- E. Popova, W. Krämer; *Inner and outer bounds for the solution set of parametric linear systems*; Journal of Computational and Applied Mathematics, 2007, **199** (2), 310–316
- J. D. Pryce, G. F. Corliss; *Interval Arithmetic with Containment Sets*; Computing, 2006, **78** (3), 251–276
- D. Ratz; *Box-Splitting strategies for the interval Gauss-Seidel step in a global optimization method*; Computing, 1994, **53**, 337–353
- D. Ratz; *Inclusion Isotone Extended Interval Arithmetic A Toolbox Update —*; Institut für Angewandte Mathematik, Univ. Karlsruhe (TH), Germany, 1996 http://www.uni-karlsruhe.de/~iam/html/reports/rep9605.ps.gz
- D. Ratz, T. Csendes; On the selection of subdivision directions in interval branch-and-bound methods for global optimization; Journal of Global Optimization, 1995, 7 (2), 183–207
- J. Rohn; Linear Interval Equations: Midpoint Preconditioning May Produce a 100% Overestimation for Arbitrarily Narrow Data Even in Case n=4; Reliable Computing, 2005, 11, 129–135
- J. Rohn, V. Kreinovich; Computing Exact Componentwise Bounds on Solutions of Linear Systems with Interval Data is NP-Hard; SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 1995, 16, 415–420
- H. H. Rosenbrock; *A Theorem of "Dynamic Conversation" for Distillation*; Chemical Engineering Research and Design, 1960, **38a**, 279–287
- H. H. Rosenbrock; *A Lyapunov Function with Applications to some Nonlinear Physical Systems*; Automatica, 1963, **1**, 31–53
- H. Schichl, A. Neumaier; *Exclusion regions for systems of equations*; SIAM J. Numer. Anal., 2004, **42**, 383–408
- H. Schichl, A. Neumaier; *Interval Analysis on Directed Acyclic Graphs for Global Optimization*; J. Global Optimization, 2005, **33**, 541–562

- C. A. Schnepper, M. A. Stadtherr; *Robust Process Simulation Using Interval Methods*; Comput. Chem. Eng., 1996, **20**, 187–199
- A. M. Scurto, G. Xu, J. F. Brennecke and M. A. Stadtherr; *Phase Behavior and Reliable Computation of High Pressure Solid-Fluid Equilibrium with Cosolvents*; Ind. Eng. Chem. Res., 2003, **42**, 6464–6475
- L. D. Simoni, Y. Lin, J. F. Brennecke, M. A. Stadtherr; *Modeling Liquid-Liquid Equilibrium of Ionic Liquid Systems with NRTL, Electrolyte-NRTL, and UNIQUAC*; Ind. Eng. Chem. Res. 2008, **47**, 256–272
- M. A. Stadtherr, G. Xu, G. I. Burgos-Solorzano, W. D. Haynes; *Reliable Computation of Phase Stability and Equilibrium Using Interval Methods*; Int. J. Reliability and Safety, 2007, 1, 465–488
- J. Stolfi, L. H. Figueiredo; *Self-Validated Numerical Methods and Applications*; Monograph for the 21st Brazilian Mathematics Colloquium (CBM'97), IMPA, Rio de Janeiro, Brazil; 1997
- B. A. Stradi, J. F. Brennecke, J. P. Kohn, M. A. Stadtherr; *Reliable Computation of Mixture Critical Points*; AIChE J. 2001, **47**, 212–221
- A. C. Sun, W. D. Seider; *Homotopy-continuation method for stability analysis in the global minimization of the Gibbs free energy*; Fluid Phase Equilibria, 1995, **103**, 213–249
- S. R. Tessier, J. F. Brennecke, M. A. Stadtherr; *Reliable Phase Stability Analysis for Excess Gibbs Energy Models*; Chem. Eng. Sci. 2000, **55**, 1785–1796
- G. Trombettoni, I. Araya, B. Neveu; personal communication, Oct 29, 2008
- A. Vadapalli, J. D. Seader; A generalized framework for computing bifurcation diagrams using process simulation programs; Computers and Chemical Engineering, 2001, **25**, 445–464
- R. J. Van Iwaarden; *An improved unconstrained global optimization algorithm*; PhD. Thesis, University of Colorado at Denver, Denver, CO, 1996
- D. J. Vickery, R. Taylor; *Path-following approaches to the solution of multicomponent, multistage separation process problems*; AIChE Journal, 1986, **32** (4), 547–556
- X.-H. Vu, H. Schichl, D. Sam-Haroud; *Interval propagation and search on directed acyclic graphs for numerical constraint solving*; Journal of Global Optimization, DOI 10.1007/s10898-008-9386-7
- C. J. Wang, D. S. H. Wong, I-L. Chien, R. F. Shih, W. T. Liu, C. S. Tsai; *Critical Reflux, Parametric Sensitivity, and Hysteresis in Azeotropic Distillation of Isopropyl Alcohol* + *Water* + *Cyclohexane*; Ind. Eng. Chem. Res. 1998, **37**, 2835–2843

- M. C. Wang, W. J. Kennedy; Comparison of algorithms for bivariate normal probability over a rectangle based on self-validated results from interval analysis; Journal of Statistical Computation and Simulation, 1990, 37, 13–25
- M. C. Wang, W. J. Kennedy; *A numerical method for accurately approximating multivariate normal probabilities*; Computational Statistics and Data Analysis, 1992, **13**, 197–210
- M. C. Wang, W. J. Kennedy; Self-Validating Computations of Probabilities for Selected Central and Noncentral Univariate Probability Functions; Journal of the American Statistical Association, 1994, 89, 878–887
- M. C. Wang, W. J. Kennedy; A self-validating numerical method for computation of central and non-central F probabilities and percentiles; Statistics and Computing, 1995, 5, 155–163
- T. L. Wayburn, J. D. Seader; *Homotopy Continuation Methods for Computer-Aided Process Design*; Comp. Chem. Eng. 1987, **11**, 7–25
- G. Xu, W. D. Haynes, M. A. Stadtherr; *Reliable Phase Stability Analysis for Asymmetric Models*; Fluid Phase Equilibria, 2005, **235**, 152–165.
- G. Xu, A. M. Scurto, M. Castier, J. F. Brennecke, M. A. Stadtherr; *Reliable Computation of High Pressure Solid-Fluid Equilibrium*; Ind. Eng. Chem. Res., 2000, **39**, 1624–1636, 2000
- K. Yamamura; An Algorithm for Representing Functions of Many Variables by Superpositions of Functions of One Variable and Addition; IEEE Transactions on Circuits and Systems-I: Fundamental Theory and Applications, 1996a, **43** (4), 338–340
- K. Yamamura; An Algorithm for Representing Nonseparable Functions by Separable Functions; IEICE Trans. Fundamentals, 1996b, Vol. **E79-A**, No. 7, 1051–1059
- K. Yamamura; *Interval solution of nonlinear equations using linear programming*; Proceedings of IEEE 1997 International Symposium on Circuits and Systems, June 1997, 837–840
- K. Yamamura, T. Fujioka; *Finding all solutions of nonlinear equations using the dual simplex method*; Journal of Computational and Applied Mathematics, 2003, **152**, 587–595
- K. Yamamura, and N. Igarashi; *An interval algorithm for finding all solutions of non-linear resistive circuits*; International Journal of Circuit Theory and Applications, 2004, **32**, 47–55
- K. Yamamura, H. Kawata and A. Tokue; *Interval solution of nonlinear equations using linear programming*; BIT, 1998, **38** (1), 186–199
- K. Yamamura, T. Kumakura, Y. Inoue; Finding All Solutions of Nonlinear Equations Using Inverses of Approximate Jacobian Matrices; IEICE Trans. Fundamentals, 2001, **E84-A**(11), 2950–2952
- K. Yamamura, K. Suda; An efficient algorithm for finding all solutions of separable systems of nonlinear equations; BIT Numerical Mathematics; 2007a, 47 (3), 681–691

- K. Yamamura, K. Suda; An Efficient and Practical Algorithm for Finding All DC Solutions of Nonlinear Circuits; Communications, Circuits and Systems, 2007b. ICCCAS 2007. 1111–1115
- K. Yamamura and S. Tanaka; Finding all solutions of systems of nonlinear equations using the dual simplex method; BIT, 2002, **42** (1), 214–230
- K. Yamamura, K. Tanaka; *Finding all solutions of weakly nonlinear equations using the dual simplex method*; Electronics and Communications in Japan (Part III: Fundamental Electronic Science), 2006, **89**, 1–7

Függelék

Message-ID: <45DD60AD.6000407@zib.de> Date: Thu, 22 Feb 2007 10:21:49 +0100

From: Tobias Achterberg Organization: ZIB To: Ali Baharev

Subject: Re: LP feasibilty test

Hi Ali,

I can only think of one important issue: do not process the objective functions in the order

min x_1, max x_1, min x_2, max x_2, ...

because min x_1 and max_x1 are likely to produce completely different solutions, because the optimal solutions are located in a very different area of the polyhedron.

You should do it as follows:

- 1. for i = 1, ..., n:
 - (a) if min x_i already solved, continue with next i
 - (b) solve min x_i, let x^* be the optimal solution
 - (c) tighten lower bound of x_i to be l_i = x^*_i
 - (d) for j = 1, ..., n:
 - (i) if $x^*_j = l_j$, mark "min x_j " to be solved (ii) if $x^*_j = u_j$, mark "max x_j " to be solved
- 2. for i = 1,...,n:

analogous to 1. with max x_i

Recording the cases in step (d) where you find feasible solutions with values that coincide witht the bounds lets you skip some of the min/max LP solves. This should happen quite frequently, since always some (usually many) variables will be non-basic which means they are at one of their bounds.

To go a step further, you can use the following considerations. For simplicity, let's talk only about the minimization loop where we want to tighten the lower bounds. After having processed the first LP, you only need to look at those variables that are either basic or non-basic at their upper bound. The ones that are non-basic at lower bound do not need to be processed due to step (d). It is probably the case that the LP resolve from the current basis is faster if you pick a variable x_i as next candidate that is basic and has a small value. Then it should not be so far to a minimal solution for this variable.

Tobias

Nyilatkozat

Alulírott **BAHAREV ALI** kijelentem, hogy ezt a doktori értekezést magam készítettem és abban csak a megadott forrásokat használtam fel. Minden olyan részt, amelyet szó szerint, vagy azonos tartalomban, de átfogalmazva más forrásból átvettem, egyértelműen, a forrás megadásával megjelöltem.

Budapest, 2009. május 7.