
ATTI ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI
CLASSE SCIENZE FISICHE MATEMATICHE NATURALI

RENDICONTI

MARIO DENTE, ELISEO RANZI, SAURO PIERUCCI,
GIUSEPPE BIARDI

**Gli impianti chimici come sistema: problemi di de
composizione logica. Nota I: Algoritmo per la ricerca
di un insieme minimo dominante**

*Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche,
Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. 54 (1973), n.5, p. 770–786.*
Accademia Nazionale dei Lincei

<http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1973_8_54_5_770_0>

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Chimica. — *Gli impianti chimici come sistema: problemi di decomposizione logica* (*). Nota I: *Algoritmo per la ricerca di un insieme minimo dominante*. Nota di MARIO DENTE, ELISEO RANZI, SAURO PIERUCCI e GIUSEPPE BIARDI, presentata (**) dal Socio G. NATTA.

SUMMARY. — This paper is primarily concerned with finding a minimum dominant set in a directed graph with multiple variable streams. The presented algorithm, which is based on a relationship between the graph on study and a system of formal equations, enables to produce a minimum set of tearing variables without applying phases characterized by iterative decisions. Thus, as neither logical nor practical difficulties are met, the algorithm can be easily implemented in a digital program.

1. INTRODUZIONE

L'analisi di un impianto chimico nel suo aspetto formale di « sistema » o rete nel quale sono ben identificabili diversi « sotto-sistemi » componenti inter-connessi, riceve vantaggi dalla rappresentazione simbolica della struttura del sistema stesso mediante un grafo direzionato [1, 2]. In questa rappresentazione i « sotto-sistemi » (che spesso sono le apparecchiature dell'impianto) appaiono come nodi o vertici del grafo, mentre gli archi o spigoli dello stesso sono rappresentativi dei flussi materiali o energetici o, più in generale, informativi che connettono i sotto-sistemi. Nel seguito, ricordando appunto lo stretto significato degli archi o spigoli direzionati nel caso specifico qui di prevalente interesse, si preferirà denominarli flussi, senza che tuttavia tale denominazione comporti perdita di generalità.

I vantaggi di questa rappresentazione risiedono soprattutto nella sua generalità e, pertanto, nella possibilità « a priori » di utilizzare eventuali soluzioni di problemi attinenti ai grafi (ovvero a strutture rappresentabili con grafi) per gli analoghi problemi riguardanti le reti chimiche.

D'altronde al grafo stesso, a sua volta, possono essere associati altri tipi di rappresentazione formale, che sono anzi preferibili dal punto di vista dello sviluppo di algoritmi per la risoluzione di alcuni di quei problemi.

Tra queste è particolarmente vantaggiosa la rappresentazione del grafo mediante un *sistema di relazioni formali* [3] in cui:

- ogni flusso del grafo è rappresentato da una « variabile »;
- ogni vertice del grafo è rappresentato da una relazione formale in cui le variabili a sinistra rappresentano i flussi entranti e quelle a destra i flussi uscenti.

(*) Lavoro eseguito presso l'Istituto di Chimica Industriale del Politecnico di Milano nell'ambito della ricerca « L'impianto chimico come sistema ». Si ringrazia il Centro Linceo Interdisciplinare di Scienze Matematiche e loro Applicazioni per il contributo finanziario concesso.

(**) Nella seduta del 12 maggio 1973.

Un problema di importanza fondamentale riguardante i grafi, di cui si occupa questa Nota, è quello relativo alla determinazione dell'insieme costituito dal minimo numero di flussi che, se tagliati, rende completamente aciclico il grafo stesso; ovvero, in termini dell'equivalente sistema delle relazioni formali, l'insieme costituito dal numero minimo di variabili che, se date, permettono di ottenere tutte le altre per semplice sostituzione sequenziale attraverso il sistema delle relazioni.

Non può sfuggire l'importanza applicativa della ricerca di questo insieme anche, e soprattutto, per problemi di decomposizione riguardanti gli impianti chimici. Infatti questo tipo di reti è caratterizzato da una elevata complessità (in generale) dei legami intercorrenti tra i flussi in uscita e in ingresso delle varie apparecchiature (nodi della rete). Pertanto se ogni problema relativo a qualche aspetto di comportamento di un tale sistema non venisse opportunamente decomposto in sotto-problemi (ovviamente di dimensionalità inferiore) il problema originario potrebbe risultare numericamente intrattabile.

Le procedure di decomposizione passano attraverso le seguenti fasi:

- rappresentazione della struttura logica del problema (in questo caso mediante un grafo direzionato);
- partizione della struttura logica (ovvero del grafo direzionato) nel senso di determinare tutti i « cicli massimi » e la loro sequenza di risoluzione;
- individuazione, dell'insieme minimo di tagli, all'interno di ogni ciclo massimo, in grado di esplicitarne sequenzialmente la struttura.

Nell'ambito di quest'ultima fase di decomposizione, che costituisce l'oggetto di questa Nota, sono stati proposti diversi metodi di ricerca che possono risultare esaurienti ed accessibili, sia in termini di tempo di calcolo sia in termini di occupazione di memoria di elaboratori elettronici, esclusivamente per problemi di dimensioni relativamente ridotte [3-14].

Dagli Autori è già stato proposto un algoritmo basato sulla corrispondenza esistente tra il grafo ed un sistema di relazioni formali. Questo algoritmo, sufficientemente semplice sia dal punto di vista logico che dal punto di vista del calcolo automatico, consente di individuare, senza le iterazioni decisionali caratteristiche della maggior parte dei metodi precedenti [15], *almeno* un insieme minimo di tagli.

Scopo della presente Nota è migliorare e potenziare ulteriormente l'algoritmo proposto (sfruttando particolari proprietà dei grafi orientati) ed inoltre estenderlo ai grafi caratterizzati da flussi multipli (grafi pesati).

In una successiva Nota verrà trattato il problema della ricerca di tutti gli insiemi minimi di tagli.

2. NOTAZIONI E DEFINIZIONI

Indicato con S_0 l'insieme di tutti i flussi nominati nel grafo considerato, e rappresentativo di un ciclo massimo, e con t un (sotto-)insieme di S_0 :

$$t \subset S_0$$

si dirà che t è un (sotto-)insieme dominante di S_0 se detto insieme consente

l'individuazione di tutti i flussi contenuti nel sotto-insieme \bar{t} ($\bar{t} \subset S_0$) definito come il complementare di t in S_0 :

$$\bar{t} = S_0 - t \quad (S_0 = \bar{t} \cup t)$$

e si scriverà $t \rightarrow \bar{t}$.

Inoltre se, in particolare, t è minimo (cioè ha il minimo numero di costituenti) viene indicato con t MIN e si può definire: *minimo insieme dominante* [4] o anche insieme minimo di tagli (« minimum tearing set ») o insieme esternamente stabile [5] o insieme non ridondante [6] e gode appunto delle proprietà precedentemente esposte.

Si definisce inoltre, « *relazione formale* » R_j (associata, almeno inizialmente, ad ogni nodo del grafo) la seguente

$$(e_1^j, e_2^j, \dots, e_{r_j}^j) \rightarrow (u_1^j, u_2^j, \dots, u_{s_j}^j)$$

in cui:

$$j = 1, \dots, n_R;$$

$$e_k^j = \text{flusso } k\text{-esimo entrante nel nodo } j\text{-esimo } (k = 1, 2, \dots, r_j);$$

$$u_l^j = \text{flusso } l\text{-esimo uscente dal nodo } j\text{-esimo } (l = 1, 2, \dots, s_j)$$

con

$$r_j = \text{grado locale « entrante »};$$

$$s_j = \text{grado locale « uscente »}$$

mentre il simbolo

$$(\dots) \rightarrow (\dots)$$

formalizza la seguente proprietà caratteristica dei flussi nei riguardi delle relazioni: *la conoscenza dell'insieme dei flussi a primo membro (entranti) determina la conoscenza dell'insieme dei flussi a secondo membro (uscanti).*

In forma compatta si può anche scrivere:

$$E_j \rightarrow U_j$$

$$E_j = e_1^j, \dots, e_{r_j}^j$$

$$U_j = u_1^j, \dots, u_{s_j}^j$$

$$F_j = E_j \cup U_j \text{ rappresenta i flussi appartenenti alla relazione } R_j.$$

Applicando tale formalismo al grafo orientato originario G_0 è possibile costruire il sistema I_0 delle relazioni R_j (con $I_0 = \{R_1, \dots, R_{n_{R_0}}\}$) che contiene tutte le informazioni di G_0 (1). Tra I_0 e G_0 la corrispondenza è biunivoca, anche se tale biunivocità si può perdere operando alcune trasformazioni, che verranno in seguito illustrate, sul sistema I_0 .

(1) Tale sistema è costituito da tante relazioni quanti sono i vertici del grafo (n_{R_0}) e coinvolge un numero di variabili pari al numero di flussi del grafo (n_{F_0}).

Affinché il sistema di relazioni, anche se trasformato, rappresenti una struttura ciclica deve godere della proprietà:

$$E \equiv U$$

dove

$$E = E_1 \cup E_2 \cup \dots \cup E_{n_R} \quad ; \quad U = U_1 \cup U_2 \cup \dots \cup U_{n_R}.$$

In particolare sul sistema I_0 sul quale non si siano operate trasformazioni

$$E_0 \equiv U_0 \equiv S_0.$$

Dopo m trasformazioni subite dal sistema di relazioni si adotteranno i simboli I_m, E_m, U_m, S_m con la proprietà (ciclica)

$$E_m \equiv U_m \equiv S_m \\ S_m \subseteq S_0$$

ad indicare la globalità dei flussi contenuti nel sistema I_m .

Si indica infine con G_0^* il grafo opposto di G_0 (cioè quello in cui tutti i flussi sono con orientamento opposto) e con I_0^* il corrispondente sistema di relazioni formali (R_J^*).

Ovviamente in I_0

$$S_0^* \equiv S_0.$$

3. IMPOSTAZIONE DEL PROBLEMA DELLA DETERMINAZIONE DI UN SOLO INSIEME MINIMO DOMINANTE ($tMIN_1$)⁽²⁾

Si tratta di sviluppare un algoritmo che opera trasformazioni su I_0 , affinché, attraverso i successivi stati trasformati I_m , si giunga a individuare gli n_i flussi componenti di $tMIN_1$ in grado di determinare sequenzialmente tutti i rimanenti, cioè tali che

$$tMIN_1 \rightarrow S_0 - tMIN_1.$$

Qui si propone, a tale scopo, un potenziamento dell'algoritmo già presentato in un recente lavoro [15] ed, inoltre, la sua estensione al caso di grafi caratterizzati dai cosiddetti « flussi multipli » o « flussi pesati ». Quest'ultima estensione risulta particolarmente importante, per i problemi relativi alla decomposizione di impianti chimici, per due ragioni principali:

– quando i flussi sono rappresentativi di vere e proprie portate materiali, a ciascuno di essi è associato un « peso » (corrispondente, dal punto di

(2) Come verrà ampiamente illustrato nella Nota II l'insieme S_0 conterrà, in generale, più di un solo insieme non ridondante. Con la notazione $tMIN_1$ si intenderà allora l'insieme minimo individuato col presente algoritmo.

vista del grafo, al numero dei flussi semplici componenti un unico flusso multiplo) che è uguale al numero di « variabili » essenziali caratterizzanti le portate;

- quando si vogliono artificialmente penalizzare certi flussi, se ne aumenta appunto il peso, al fine di indirizzare la ricerca di un insieme minimo dominante verso un $tMIN$ che non contenga quei determinati flussi; e ciò, ad esempio, per eventuali previste maggiori difficoltà di convergenza durante la fase di risoluzione numerica dell'impianto (successiva alla fase di decomposizione logica) o, comunque, per trovare flussi alternativi a quelli penalizzati.

È chiaro che l'introduzione della nozione di flusso pesato consente una maggiore sintesi nella stesura sia del grafo sia del sistema di relazioni, pur di tenere ben presente, anche al fine della utilizzazione delle definizioni già date per i flussi semplici, che *ogni flusso multiplo è l'equivalente di un numero di flussi semplici pari al suo peso.*

L'algoritmo procede alla trasformazione, per successive semplificazioni, del sistema di relazioni formali.

Dallo stato iniziale il sistema I_0 , contenente n_{F_0} flussi e n_{R_0} relazioni, per effetto dell'applicazione dell'algoritmo, evolve attraverso stati di cui il generico m -esimo è caratterizzato da:

- un sistema di relazioni I_m ;
- un insieme di flussi contenuti in I_m ;

$$S_m \subseteq S_{m-1} \subseteq S_0;$$

- un numero di relazioni contenute in I_m :

$$n_{R_m} \leq n_{R_{m-1}} \leq n_{R_0};$$

- un numero di flussi contenuti in I_m :

$$n_{F_m} = |S_m| \leq n_{F_{m-1}} \leq n_{F_0};$$

- un insieme di flussi appartenenti al minimo insieme dominante:

$$|\tau_{m-1}| \leq |\tau_m| \leq n_i$$

$$\tau_{m-1} \subseteq \tau_m \subseteq tMIN_1;$$

- un insieme di flussi *dominati* (cioè completamente determinati) da S_m e da τ_m .

Lo stato finale dell'evoluzione corrisponde ad un insieme di relazioni vuoto, con $\tau_m \equiv tMIN_1$ e l'insieme di tutti i flussi di S_0 diversi da quelli contenuti in $tMIN_1$, dominati da $tMIN_1$.

La fig. 1 rappresenta graficamente gli stati evolutivi attraverso i quali passa l'insieme totale S_0 dei flussi mediante le trasformazioni operate sul sistema di relazioni.

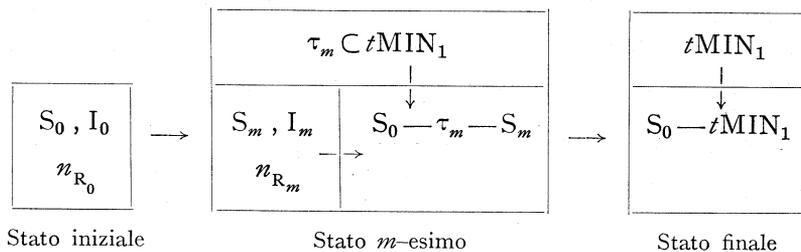


Fig. 1.

L'algoritmo utilizzato si propone di ridurre il sistema allo stato finale mediante un cammino evolutivo, tra i numerosi possibili, che garantisca:

- che l'insieme dominante sia uno minimo;
- che dopo ogni trasformazione dallo stato $(m-1)$ esimo, allo stato m -esimo si riduca almeno il numero di flussi (cioè $n_{F_m} < n_{F_{m-1}}$);
- che dopo ogni trasformazione sia possibile individuare il maggiore numero di flussi componenti $tMIN_1$

(cioè $\tau_m \supseteq \tau_{m-1}$).

Per raggiungere tale scopo con un ridotto impegno sia in termini di numero di scelte decisionali che in termini di occupazione di memoria del calcolatore a cui affidare l'analisi logica di decomposizione, l'algoritmo deve affidarsi sia a criteri di semplificazione che a operazioni logiche.

4. PROPRIETÀ DEL GRAFO OPPOSTO G_0^* E DEL SISTEMA ASSOCIATO I_0^*

Criteri di semplificazione e di individuazione di flussi appartenenti a $tMIN_1$.

Operazione di combinazione di relazioni formali.

Anzitutto si può constatare la seguente proprietà dei grafi direzionati rappresentativi di una struttura ciclica (e dei sistemi di relazioni ad essi associati).

A. - *Un insieme minimo dominante per un grafo direzionato G rappresentante una struttura ciclica è insieme minimo dominante anche per il grafo opposto G^* .*

Ciò significa che $tMIN$ è in grado di esplicitare completamente (o svuotare) I_0 oppure I_0^* ; ma, operativamente, ciò significa che flussi appartenenti a $tMIN_1$ possono essere ottenuti da trasformazioni eseguite su I_0 oppure su I_0^* , a seconda della convenienza. Gli stati evolutivi presentati a seguito di trasformazioni progressive eseguite su I_0^* verranno indicati comunque con un *: importa rilevare che *non necessariamente* I_m^* è l'opposto di I_m , mentre si può sempre fare in modo che sia $\tau_m \equiv \tau_m^*$ (I_m^* è il sistema di relazioni proveniente da I_0^* , e che ha subito una evoluzione analoga a I_m).

Adottando questa proprietà, che arricchisce la gamma delle scelte decisionali facendone comparire eventualmente di più « economiche », la sequenza operativa della fig. 1 va completata come nella fig. 2.

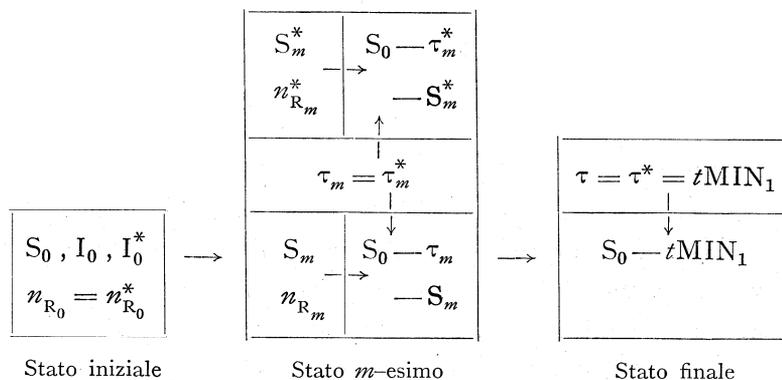


Fig. 2.

Un primo criterio di scelta presente nell'algoritmo, fondato sulla proprietà A e sullo schema di fig. 2, è quello di procedere ad ogni stato con il sistema I_m oppure I_m^* a seconda che l'uno o l'altro offrano la maggior possibilità di semplificazione (in termini di riduzione di S_m o S_m^* e di accrescimento di τ_m).

Le altre proprietà, su cui sono fondati altri criteri di semplificazione, vanno opportunamente distinte a seconda che si tratti di proprietà di flussi o di relazioni.

B. Proprietà dei flussi.

- B1. *Flussi che sono simultaneamente presenti sia a primo membro (entranti) che a secondo membro (uscanti) di una relazione fanno necessariamente parte di $tMIN_1$ (autocicli).*
- B2. *Flussi pesati (cioè flussi multipli di collegamento tra due nodi) completamente determinati da insiemi di flussi con peso complessivo minore (o uguale) sono (o possono essere) da questi dominati [8, 9].*
- B3. *Proprietà ciclica dei flussi: affinché il sistema I_m (I_m^*) di relazioni sia sempre rappresentativo di una struttura ciclica (non necessariamente rappresentabile con un grafo se si è già adottata la proprietà B2) occorre che $E_m = U_m = S_m$ ($E_m^* = U_m^* = S_m^*$).*

C. Proprietà delle relazioni.

- C1. *Proprietà ciclica delle relazioni: ogni relazione R_j deve avere entrambi i gradi locali a primo membro r_j (entrante) e a secondo membro s_j (uscante) diversi da zero; ($r_j > 0$; $s_j > 0$).*

In ogni stato m -esimo si ha infine la seguente proprietà:

C2. *Il numero di flussi appartenenti a MIN_1 , ancora non individuati è maggiore o al più eguale al minimo grado locale entrante del sistema.*

Poiché la suddetta proprietà deve valere anche nei riguardi del sistema I_m^* si avrà:

$$n_i - n_{\tau}^{(m)} \geq \max(r_{\min}^{(m)}, r_{\min}^{*(m)}) \quad (\text{con } n_{\tau}^{(m)} = |\tau_m|).$$

Le proprietà precedenti possono essere utilizzate durante la transizione da uno stato (m) al successivo ($m + 1$) del sistema per produrre: riduzioni di S_m e S_m^* , estensioni di τ_m e dell'insieme a questi complementare. I criteri di riduzione di I_m (I_m^*) in fase di transizione vengono governati dalla applicazione delle precedenti proprietà e precisamente risultano, nell'ordine:

R1) I flussi soddisfacenti (in I_m o I_m^*) alla proprietà B1 vengono soppressi in I_m , I_m^* e aggiunti a τ_m .

R2) Se in conseguenza della soppressione di flussi in S_m comunque prodotta alcune relazioni risultano vuote (a primo o secondo membro) in I_m , I_m^* in base alle proprietà C1 e B3 si possono sopprimere i flussi restanti in tutte le relazioni e trasferirli nell'insieme complementare così che sia: $E_m = U_m = S_m$. In seguito alla applicazione di tale criterio si ha una riduzione di n_{F_m} , n_{R_m} e $n_{R_m}^*$.

R3) In base alla proprietà B2, *i flussi multipli, dominati in una generica relazione da insiemi di flussi di peso complessivo inferiore o eguale, possono essere sostituiti, nelle rimanenti relazioni, dai loro precursori* [14]. Conseguentemente, in base alla proprietà B3, la relazione così utilizzata potrà essere soppressa dal sistema I_m (o I_m^*) e i flussi dominati entrano a far parte dell'insieme complementare.

A seguito della applicazione del criterio di sostituzione R3) i sistemi I_m , I_m^* possono perdere la proprietà di contenere nell'insieme dei flussi a primo membro ogni singolo flusso nominato una sola volta e, pertanto, non hanno più necessariamente una immediata corrispondenza con un grafo, pur continuando a rappresentare strutture cicliche.

I criteri precedenti provocano riduzioni su I_m , I_m^* , e accrescono τ_m introducendovi flussi appartenenti ad un insieme dominante che deve essere anche *minimo*.

Allo scopo di avere la massima efficienza delle trasformazioni, i criteri R1), R2) e R3) vanno applicati gerarchicamente nell'ordine indicato, ed in modo *esaustivo* (cioè fino al punto in cui una ulteriore applicazione dei criteri non provoca altre trasformazioni). Inoltre essi vanno applicati fino alla *equilibratura* completa dei due sistemi I_m ed I_m^* (cioè fino al punto in cui l'adozione dei criteri stessi e l'introduzione, in ciascuno dei due sistemi, dei flussi di τ_m evidenziati con l'altro, non provoca ulteriori transizioni): al termine della fase di equilibratura risulta $\tau_m = \tau_m^*$.

L'applicazione dei criteri precedenti non è sufficiente, in generale, a provocare le transizioni fino allo stato finale del sistema. Un completamento

del processo di transizione viene operato utilizzando opportunamente una operazione logica sulle relazioni all'interno del sistema $I_m (I_m^*)$. L'operazione viene condotta in modo tale da provocare durante la transizione la massima riduzione su $I_m (I_m^*)$ e, nel contempo, in modo tale da non introdurre flussi in τ_m estranei a $tMIN_1$ (cioè in modo da assicurare che l'insieme dominante finale sia minimo).

Viene definita *operazione di combinazione di due relazioni formali* R_i, R_j (con $r_i \leq r_j$) la costruzione di una nuova relazione R_l , tale che:

- a) $F_l = F_i \cup F_j$ (cioè R_l contiene tutti i flussi propri di R_i ed R_j).
- b) Se $E_j' = E_j - (E_j \cap F_i)$ allora $E_l = E_i \cup E_j'$ (cioè il primo membro di R_l contiene il primo membro di R_i e quei flussi a primo membro di R_j non contenuti in F_i).
- c) $U_l = U_i \cup U_j$ (cioè il secondo membro di R_l contiene entrambi i secondi membri di R_i ed R_j).

L'operazione in generale non è commutativa, e si indicherà con il simbolo

$$R_l = R_i \text{ } \mathfrak{A} \text{ } R_j \quad (r_i \leq r_l \leq r_i + r_j).$$

Nel caso particolare in cui risulti $r_l = r_i$ si parlerà di *operazione di compattamento*.

Evidentemente, l'operazione di compattamento porta a sostituire l'insieme di due relazioni con un'unica relazione il cui grado entrante è il minore dei due originari, ed è pertanto quella che riduce più efficientemente il sistema, non alterando il grado minimo r_{\min} .

Gli scopi con cui l'operazione di combinazione viene applicata sul sistema I_m o I_m^* sono:

- ridurre direttamente le dimensioni (in termini di flussi e relazioni);
- predisporre il sistema all'applicazione dei tre criteri di riduzione R_1 , R_2 , R_3 ;
- porre in evidenza nuovi flussi che appartengono a $tMIN_1$, e pertanto, soddisfacendo alla proprietà B_1 , possano essere aggiunti (secondo il criterio R_1) a τ_m ;
- provocare nuove transizioni verso lo stato finale.

Affinché tale operazione possa raggiungere i suoi scopi, essa va applicata secondo i seguenti criteri gerarchici (deducibili dalla proprietà C_2), che assicurano di ottenere flussi (da aggiungere a τ_m) appartenenti a $tMIN_1$.

D. Criteri gerarchici.

- D1. *L'operazione di compattamento, che deve essere eseguita prioritariamente sulle relazioni con il minimo possibile grado entrante r_i , deve procedere le altre operazioni di combinazione.*
- D2. *L'operazione di combinazione deve essere applicata in modo da individuare almeno un flusso appartenente a $tMIN_1$ producendo il grado risultante r_l minimo possibile.*

5. SCHEMA OPERATIVO DELL'ALGORITMO

I criteri gerarchici e di semplificazione, oltre all'operazione di combinazione delle relazioni, generano lo schema logico operativo dell'algoritmo rappresentato nella fig. 3, adeguato ad individuare un insieme minimo dominante.

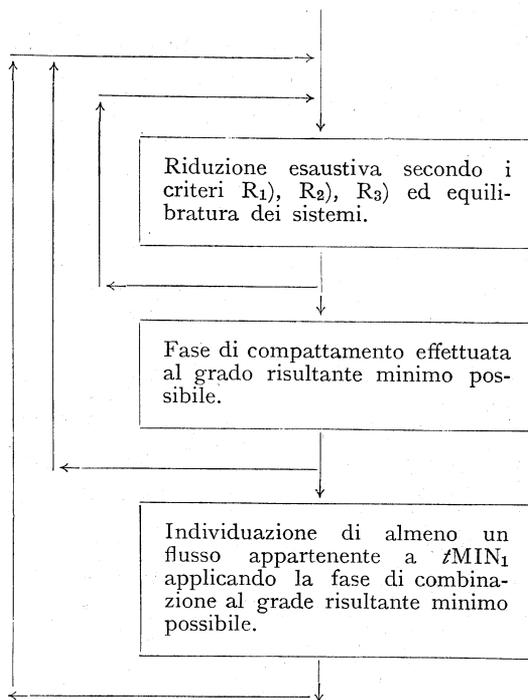


Fig. 3.

Tale schema logico, nel quale sono ben evidenziate le tre fasi che si susseguono ciclicamente (fino allo svuotamento completo del sistema) e che sono organizzate in modo gerarchico, è stato sviluppato fino alla messa a punto di un programma di calcolo per un calcolatore digitale. [Denominazione del programma: GRAFO 1].

Il programma è stato utilizzato per individuare un insieme minimo dominante per esempi di grafi (non necessariamente corrispondenti a impianti chimici) di diversa complessità. Tre di questi esempi vengono riportati in Appendice.

CONCLUSIONI

In questo lavoro è stato presentato un nuovo algoritmo per la ricerca di un insieme minimo dominante relativo ad un grafo direzionato (eventualmente a flussi multipli). Il vantaggio di tale metodo, già individuabile

nell'estrema semplicità delle operazioni logiche che vengono condotte, risulta ancor più evidente dal confronto della completa sequenzialità del metodo stesso con le iterazioni decisionali caratteristiche dei metodi precedenti.

L'algoritmo proposto risolve dunque il problema della determinazione di un insieme minimo di «tearing» e vengono riportati in appendice tre esempi di cui l'ultimo relativo ad un impianto chimico.

Poiché in generale un grafo può possedere più di un solo insieme minimo dominante in una prossima Nota verrà proposto un algoritmo per la individuazione di tutti gli insiemi minimi così, nell'ambito di tali insiemi che rispettano ancora il criterio generale ottimale proposto, è possibile effettuare una nuova scelta basata, ad esempio, su opportuni criteri legati alla possibilità o facilità di convergenza.

APPENDICE

Esempio I.

Il grafo riportato in fig. 4 permette la costruzione dei due seguenti sistemi di relazioni formali:

$$I_0 \left\{ \begin{array}{l} (W_2) \rightarrow (W_1) \\ (W_1, W_3) \rightarrow (W_5, W_7) \\ (W_4, W_5) \rightarrow (W_3, W_6, W_8) \\ (W_6, W_9) \rightarrow (W_4, W_2) \\ (W_7, W_{12}) \rightarrow (W_{10}) \\ (W_8, W_{10}) \rightarrow (W_{11}) \\ (W_{11}) \rightarrow (W_9, W_{12}) \end{array} \right. \quad I_0^* \left\{ \begin{array}{l} (W_1) \rightarrow (W_2) \\ (W_5, W_7) \rightarrow (W_1, W_3) \\ (W_3, W_6, W_8) \rightarrow (W_4, W_5) \\ (W_4, W_2) \rightarrow (W_6, W_9) \\ (W_{10}) \rightarrow (W_7, W_{12}) \\ (W_{11}) \rightarrow (W_8, W_{10}) \\ (W_9, W_{12}) \rightarrow (W_{11}) \end{array} \right.$$

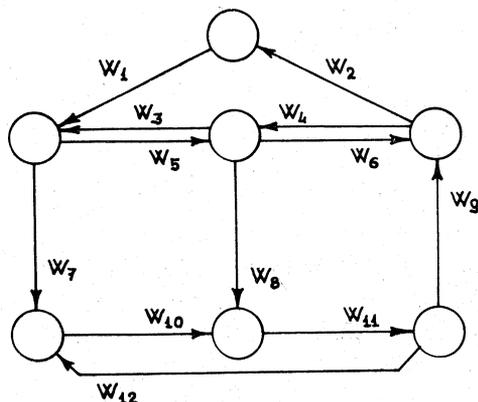


Fig. 4.

La ricerca di autocicli condotta sul sistema originario I_0 , potendo effettuare semplicemente due riduzioni secondo R_3 e non consentendo alcuna riduzione nella fase di compattamento prevederebbe, secondo l'algoritmo presentato in [15], una fase di combinazione da condurre sul sistema di 5 relazioni formali ottenibile riconoscendo i flussi W_2 e W_{11} come precursori rispettivamente del flusso W_1 e dei flussi W_9 e W_{12} .

Viceversa conducendo l'analisi sul sistema opposto I_0^* (che presenta tre relazioni con un solo flusso nominato a primo membro) è possibile ricavare il seguente sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} (W_5, W_{11}) \rightarrow (W_1, W_3) \\ (W_3, W_6, W_{11}) \rightarrow (W_4, W_5) \\ (W_4, W_1) \rightarrow (W_6, W_9) \\ (W_9, W_{11}) \rightarrow (W_{11}) \end{array} \right.$$

che consente la diretta individuazione dapprima del flusso W_{11} come flusso di tearing e successivamente dei due flussi W_5 e W_6 senza far ricorso alle fasi di compattamento o combinazione.

Esempio 2.

Si consideri il grafo riportato in fig. 5 al quale sono associati i due sistemi:

$$I_0 \left\{ \begin{array}{l} (W_3) \rightarrow (W_1, W_2) \\ (W_{17}, W_1, W_{10}) \rightarrow (W_9, W_{11}, W_{18}) \\ (W_{11}, W_{12}) \rightarrow (W_{13}) \\ (W_5) \rightarrow (W_3, W_4) \\ (W_6, W_2) \rightarrow (W_5) \\ (W_4, W_7, W_9) \rightarrow (W_8, W_{10}, W_{14}) \\ (W_{14}, W_{13}) \rightarrow (W_{15}) \\ (W_{15}) \rightarrow (W_{16}, W_{12}) \\ (W_{18}, W_{16}, W_8) \rightarrow (W_6, W_7, W_{17}) \end{array} \right. \quad I_0^* \left\{ \begin{array}{l} (W_1, W_2) \rightarrow (W_3) \\ (W_9, W_{11}, W_{18}) \rightarrow (W_{17}, W_1, W_{10}) \\ (W_{13}) \rightarrow (W_{11}, W_{12}) \\ (W_3, W_4) \rightarrow (W_5) \\ (W_5) \rightarrow (W_6, W_2) \\ (W_8, W_{10}, W_{14}) \rightarrow (W_4, W_7, W_9) \\ (W_{15}) \rightarrow (W_{14}, W_{13}) \\ (W_{16}, W_{12}) \rightarrow (W_{15}) \\ (W_6, W_7, W_{17}) \rightarrow (W_{18}, W_{16}, W_8) \end{array} \right.$$

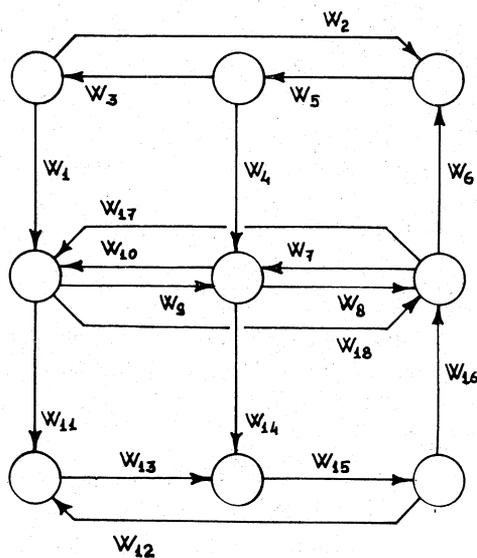


Fig. 5.

Poiché entrambi questi sistemi presentano tre relazioni contenenti un solo flusso a primo membro viene arbitrariamente effettuata l'analisi (limitata come detto alla sola prima fase di riduzione secondo i criteri R_1 , R_2 ed R_3) sul sistema I_0 . Tale analisi porta all'individuazione del tearing W_5 e successivamente ai seguenti sistemi semplificati:

$$I_1 \left\{ \begin{array}{l} (W_{17}, W_{10}) \rightarrow (W_9, W_{11}, W_{18}) \\ (W_{11}, W_{15}) \rightarrow (W_{13}) \\ (W_7, W_9) \rightarrow (W_8, W_{10}, W_{14}) \\ (W_{14}, W_{13}) \rightarrow (W_{15}) \\ (W_{15}, W_{18}, W_8) \rightarrow (W_7, W_{17}) \end{array} \right. \quad I_1^* \left\{ \begin{array}{l} (W_9, W_{15}, W_{18}) \rightarrow (W_{10}, W_{17}) \\ (W_8, W_{10}, W_{15}) \rightarrow (W_7, W_9) \\ (W_{16}, W_{15}) \rightarrow (W_{15}) \\ (W_7, W_{17}) \rightarrow (W_8, W_{16}, W_{18}). \end{array} \right.$$

Mentre il sistema I_1 richiederebbe l'applicazione della fase di combinazione l'analisi del sistema I_0^* mostra come il flusso W_{15} può far parte di almeno un insieme di tearing minimo.

Effettuata allora tale nuova eliminazione i due sistemi diventano:

$$I_2 \left\{ \begin{array}{l} (W_{10}, W_{17}) \rightarrow (W_9, W_{18}) \\ (W_7, W_9) \rightarrow (W_8, W_{10}) \\ (W_8, W_{18}) \rightarrow (W_7, W_{17}) \end{array} \right. \quad I_2^* \left\{ \begin{array}{l} (W_9, W_{18}) \rightarrow (W_{10}, W_{17}) \\ (W_8, W_{10}) \rightarrow (W_7, W_9) \\ (W_7, W_{17}) \rightarrow (W_8, W_{18}). \end{array} \right.$$

Su uno di questi sistemi deve essere necessariamente applicata la fase di combinazione che consente di ottenere, ad esempio, i flussi W_{10} , W_{17} e W_7 come ulteriori flussi di tearing da aggiungere ai due flussi (W_5 e W_{15}) già evidenziati.

È interessante rilevare come i sistemi I_2 e I_2^* sui quali deve essere applicata la fase di combinazione godono di una particolare struttura simmetrica per cui può essere scelta in maniera completamente arbitraria almeno una delle nuove variabili di tearing. In altri termini qualunque flusso nominato nel sistema I_2 deve appartenere ad almeno un insieme minimo di tearing.

È possibile generalizzare una tale proprietà per qualsiasi grafo riconducibile ad un sistema nel quale in ogni relazione figurano a primo e a secondo membro sempre lo stesso numero di flussi.

Anche in questo secondo esempio le modifiche apportate sull'algoritmo consentono l'individuazione diretta di un maggior numero di variabili di tearing e conseguentemente una sensibile riduzione del sistema su cui applicare la fase di combinazione.

In fig. 6 vengono riportati gli stati evolutivi attraverso i quali passa l'insieme S_0 dei flussi del grafo considerato fino alla completa individuazione di un insieme di dimensione minima.

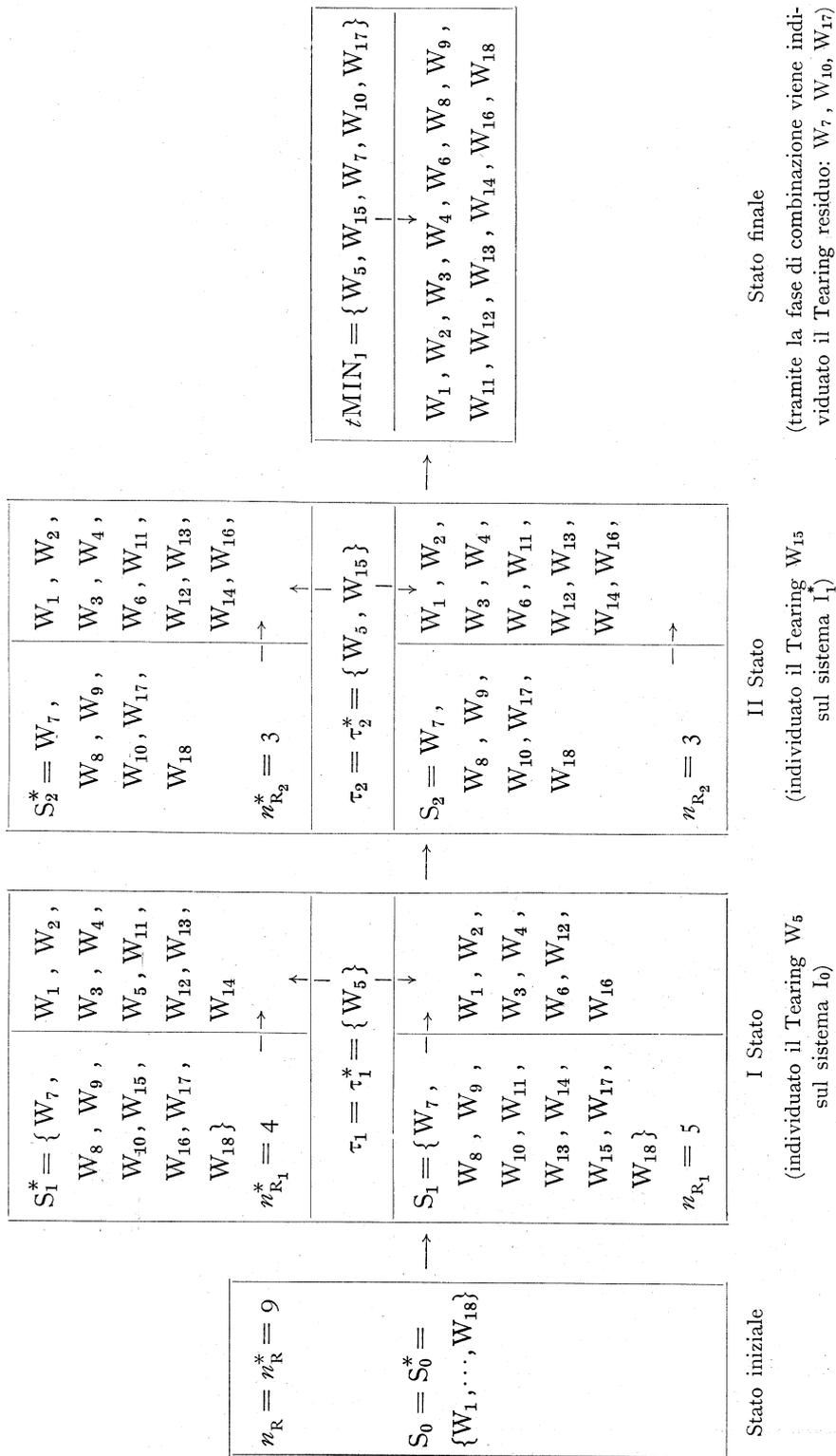


Fig. 6.

(tramite la fase di combinazione viene individuato il Tearing residuo: W_7, W_{10}, W_{17})

Esempio 3.

Come ultimo esempio è stato analizzato il grafo di fig. 7 corrispondente all'impianto di produzione di acido solforico riportato in fig. 8.

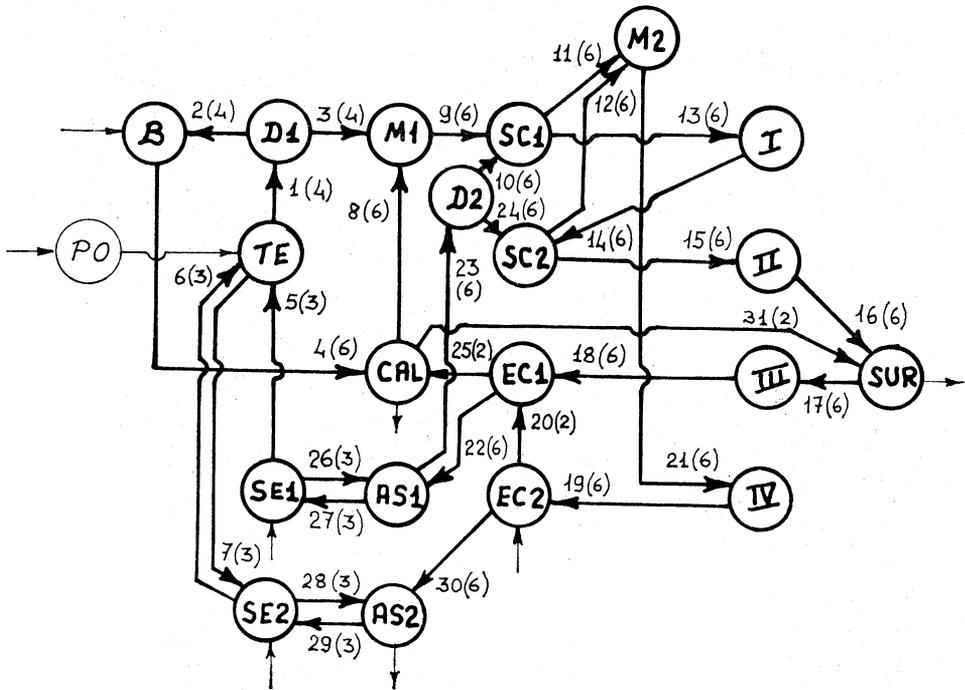


Fig. 7.

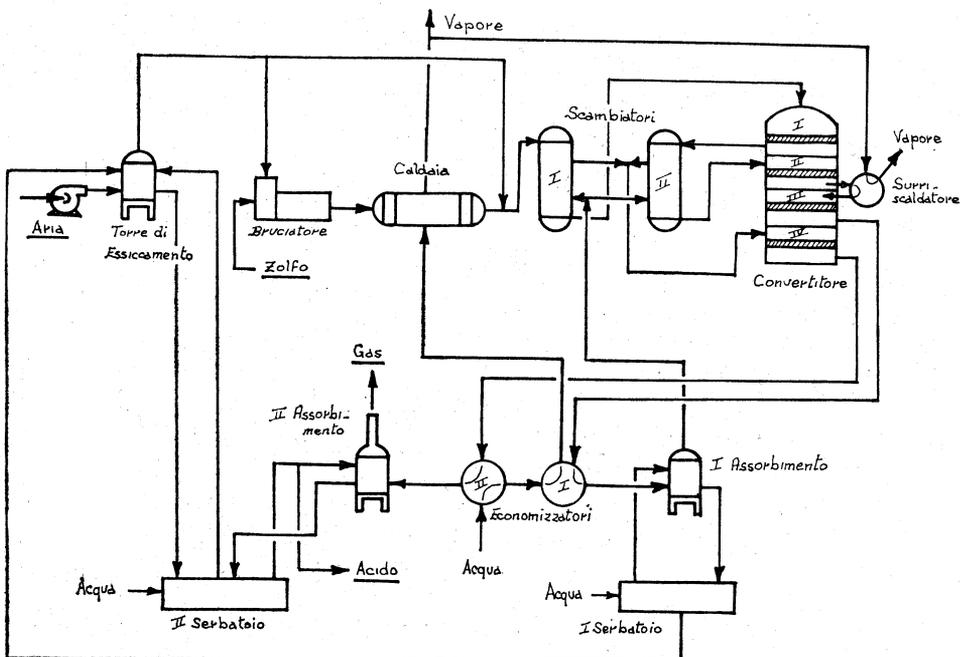


Fig. 8.

I singoli flussi sono contrassegnati da due numeri: il primo caratteristico del flusso e il secondo, in parentesi, caratteristico del peso e cioè del numero di variabili essenziali atte a definire la corrente considerata. Nel tabulato è

* SISTEMA ORIGINARIO *

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
1	0	4	0	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	4	-4	-4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	4	0	0	0	0	6	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	-4	0	0	0	3	3	-3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	-3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-3	3	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	-6	0	0	3	-3	0	0	0	0	0
7	0	0	0	6	0	0	0	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-2
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	2	0	-6	0	0	-2	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-6
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	-3	6	0
11	0	0	0	0	0	-3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-3	3	0
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-6	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-6	0	6	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	-6	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	0	0	6	6	-6	0	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

PESI DEI FLUSSI (INDICE/PESO)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
	4	4	4	6	3	3	3	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	2	6	6	6	6	2	3	3	3	3	6	2

TROVA IL FLUSSO 29 DI TEARING

TROVA IL FLUSSO 6 DI TEARING

TROVA IL FLUSSO 25 DI TEARING

TROVA IL FLUSSO 22 DI TEARING

TROVA IL FLUSSO 26 DI TEARING

** SONO STATI INDIVIDUATI I SEGUENTI FLUSSI DI TEARING FLUSSO (PESO)

29(3) 6(3) 25(2) 22(6) 26(3)

5 FLUSSI DI TEARING

17 IL PESO COMPLESSIVO

riportato il sistema originario caratteristico del grafo esaminato e l'insieme minimo dominante individuato, senza far ricorso né all'opposizione né alla fase di combinazione, dal programma GRAFO I con un tempo complessivo di 523 millisecondi su calcolatore UNIVAC 1108.

BIBLIOGRAFIA

- [1] D.M. HIMMELBLAU e K. B. BISCHOFF, *Process Analysis and Simulation*, Wiley, New York 1967.
- [2] E. S. HENLEY e E. M. ROSEN, *Material and Energy Balance Computations*, Prantice Hall, Englewood Cliffs, New York 1971.
- [3] A. K. KEVORKIAN e J. SNOEK, Lavoro presentato al Convegno: «Decomposition as a tool for solving large-scale problems», Cambridge (GB), luglio 17-26 (1972).

- [4] A. LEMPBEL e I. CEDERBAUM, « IEE Trans. on Circuit Theory », *CT-10*, 399 (1966).
- [5] I. B. PYNE e J. E. MCCLUSKEY, « IRE Trans. on Electronic Computers », *EC-II*, 473 (1962).
- [6] F. LUCCIO, « IRE Trans. on Electronic Computers », *EC-I5*, 205 (1966).
- [7] W. H. SARGENT e A. W. WESTERBERG, « Trans. Inst. Chem. Engrs. » *42*, 190 (1964).
- [8] W. LEE e D. F. RUDD, « A.I. Ch. E.J. », *12*, 1184, (1966).
- [9] J. H. CHRISTENSEN e D. F. RUDD, « A.I. Ch. E.J. », *15*, 94 (1969).
- [10] D. V. STEWARD e J. SIAM, « Ser. B. », *2*, 345 (1965).
- [11] G. J. FORDER e H. P. HUTCHINSON, « Chem. Eng. Science », *24*, 771 (1969).
- [12] R. S. UPADHYE e E. A. GRENS II, « A.I. Ch. E.J. », *18*, 533 (1972).
- [13] G. BIARDI, S. PIERUCCI, R. RUGGIERI e M. DENTE, « Ing. Chim. Ital. », *9*, 5 (1973).
- [14] R. W. BARKLEY e R. L. MOTARD, Lavoro presentato al Convegno: « Decomposition as a tool for solving large-scale problems », Cambridge (GB), luglio 17-26 (1972).
- [15] S. PIERUCCI, E. RANZI, G. BIARDI e M. DENTE, « Ing. Chim. Ital. », *9*, 73 (1973).