

Н. Н. Зиятдинов, Т. В. Лаптева, Г. М. Островский

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ПОДГОТОВКЕ СИСТЕМНЫХ ИНЖЕНЕРОВ В ОБЛАСТИ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Ключевые слова: системотехника химических производств, химико-технологическая система, методы оптимизации, синтез, многовариантность, неопределенность, многоэкстремальность.

В статье даются постановки оптимизационных задач, имеющих место на всех этапах жизненного цикла технических систем, и описание современных подходов к их решению. Показана важность обучения будущих специалистов в области системотехники химических производств современным методам оптимизации технических систем.

Key words: process system engineering, optimization methods, synthesis, multiple options, uncertainty, multiple extreme points.

The paper describes optimization problem statements at all phases of the engineering system lifecycle and describes modern approaches to their solution. The importance of teaching future process system engineers the techniques of using modern methods of engineering system optimization is emphasized.

Введение

Сегодня инженер в области химической технологии должен обладать широким кругозором и быть способным применить свои теоретические знания в реальных жизненных ситуациях. На всех этапах жизненного цикла химико-технологических систем (ХТС) инженеры сталкиваются с необходимостью решать проблемы, связанные с многовариантностью принимаемых решений, неопределенностями в исходных данных, многоэкстремальностью, многокритериальностью и т.д. Применение современных методов компьютерного моделирования и оптимизации может быть эффективным подходом к решению указанных проблем. Таким образом, в учебные планы подготовки современных инженеров-химиков должны быть включены новые дисциплины, направленные на освоение компетенций для математической формализации инженерных задач, требующих принятия оптимальных решений, современных методов и компьютерных средств их решения. При этом компьютерные классы должны быть оснащены современным программным обеспечением для решения задач моделирования и оптимизации. Однако это программное обеспечение оказывается бесполезным, если инженер не знает современных методов компьютерного моделирования и оптимизации и не владеет необходимым уровнем знания английского профессионального языка.

В последние десятилетия разработан ряд новых эффективных методов оптимизации, которые могут быть применены для решения задач системной инженерии на всех этапах жизненного цикла химических предприятий [1, 2]. В этой статье мы рассмотрим проблемы, с которыми сталкиваются инженеры-технологи и проектировщики в процессе создания новых и эксплуатации существующих энерго- и ресурсосберегающих химических производств, и методы решения этих проблем с применением современных методов оптимизации. Эти проблемы должны быть изучены студентами во время

практических занятий, используя проектный подход к обучению [3]. На этих занятиях с применением компьютерного моделирования рассматриваются реальные проблемы химической технологии на различных этапах жизненного цикла производства, подходы к решению которых могут быть использованы обучаемыми, когда они столкнутся с ними в будущем.

Проблемы оптимизации на этапах жизненного цикла химико-технологических систем

Жизненный цикл ХТС включает два основных укрупненных этапа: проектирования и функционирования. Студенты должны уметь их различать. На каждом из этих этапов возникают проблемы, связанные с необходимостью принятия оптимальных решений.

Этап проектирования. Будем считать, что этот этап также включает в себя предпроектные научно-исследовательские работы. Здесь следует прежде отметить, что студентам важно знать, что любая задача оптимального проектирования технических систем, в том числе и ХТС, заключается в поиске компромисса между капитальными единовременными затратами и эксплуатационными затратами. Наглядным примером данного утверждения является задача оптимального проектирования ректификационной колонны по критерию минимальных приведенных капитальных и эксплуатационных затрат. Ректификационные колонны для разделения многокомпонентных смесей являются высоко металло- и энергоемкими установками. Капитальные затраты пропорциональны металлоемкости установки и зависят от числа ступеней разделения и флегмового числа (потока флегмы) в ректификационных колоннах. Увеличение флегмы первоначально приводит к снижению стоимости колонны, поскольку уменьшается число тарелок. Однако дальнейшее увеличение внутренних жидкостных и паровых потоков в колонне приводит к увеличению диаметра колонны, что ведет к увеличению стоимости

колонны. Эксплуатационные затраты складываются из затрат на организацию паровых потоков в колоннах, подогрев и охлаждение целевых и промежуточных потоков и возрастают с увеличением потока флегмы. Очевидно, что существует компромисс между капитальными и эксплуатационными затратами, при которых суммарные приведенные капитальные и эксплуатационные затраты примут минимальное значение.

Приведенный пример иллюстрирует первую проблему, которая возникает при решении задачи оптимального проектирования, как отдельных аппаратов химической технологии, так и ХТС в целом. Это возможное присутствие, наряду с непрерывными поисковыми переменными (режимы работы аппаратов), дискретных поисковых переменных. В рассматриваемом примере это число тарелок в ректификационной колонне, которое не может быть дробной величиной. Наличие дискретных поисковых переменных приводит формализованную постановку задачи оптимального проектирования к задаче смешанного дискретно-непрерывного нелинейного программирования, решение которой является существенно более сложной и трудоемкой процедурой, чем задача нелинейного программирования с непрерывными поисковыми переменными.

Вторая проблема тесно связана с первой и заключается в многовариантности решений задачи синтеза ХТС [2, 4]. Так, в химической технологии одни и те же продукты при заданном виде сырья могут быть получены с использованием различных аппаратов, технологических схем и конструктивных параметров аппаратов. Здесь тоже присутствует дискретность, связанная с рассмотрением различных топологий синтезируемой ХТС.

Третья проблема связана с многоэкстремальностью задач оптимального проектирования, возможными источниками которой являются невыпуклости зависимостей капитальных затрат оборудования ХТС от характерных размеров [4].

Четвертая проблема заключается в том, что проектирование проводится при частичной неопределенности исходной физико-химической и технологической информации [2].

Этап функционирования. На этом этапе решается задача поиска оптимальных режимов работы и осуществления оптимального управления ХТС. Также, в условиях изменения внешних и внутренних воздействий на химико-технологический процесс необходимо проводить анализ его работоспособности или гибкости, либо выявлять область изменения внешних воздействий, при которых сохраняется работоспособность химико-технологического процесса.

Из сказанного следует, что на каждом этапе жизненного цикла ХТС имеются проблемы, связанные с принятием оптимальных решений. Будущий инженер должен четко их идентифицировать. А именно: сформулировать

математическую постановку задачи, включающую построение (или выбор из существующих) математической модели ХТС, сформулировать критерий оптимизации, ограничения, определить число степеней свободы и выбрать поисковые переменные; определить к какому классу оптимизационных задач она относится; выбрать эффективный метод ее решения и программные средства, ее реализующие.

Оптимизационные задачи, которые должен уметь ставить и решать специалист в области системной инженерии

А. Задача синтеза оптимальной химико-технологической системы. Задача заключается в необходимости из предложенного набора выбрать аппараты химической технологии и соединить их между собой в химико-технологическую систему, а также подобрать такой режим их работы u , чтобы полученная ХТС выполняла предъявляемые к ней требования по переработке исходного сырья в конечный либо промежуточный продукт, и работала эффективно в смысле заданного критерия. Это многовариантная задача. Вследствие множества вариантов реализации технологических схем простой перебор по дискретным переменным является исключительно трудоемкой процедурой, а при большом числе вариантов зачастую и бессмысленной.

Студент должен знать, что для решения данной задачи существует два класса методов. Первый класс методов основан на использовании эвристических правил [4], которые обобщают накопленный опыт проектировщиков. Эти правила представляют собой логические процедуры типа (if ___ then ___ else ___) и лежат в основе экспертных систем, используемых при проектировании. Недостатком эвристических правил является тот факт, что они зачастую противоречат друг другу. Подходы, позволяющие избежать противоречий эвристических правил, рассмотрены в работе [5].

Вторым классом решения задач оптимального синтеза ХТС являются алгоритмические методы. В этом случае задача синтеза формулируется как математическая, и развиваются математические методы ее решения. Формализация задачи оптимального синтеза приводит к задаче дискретно-непрерывного нелинейного программирования (MINLP), где дискретными переменными являются переменные α_{kj} , ($k=1,...,N$, $j=1,...,N$), N – число аппаратов в схеме), определяющие наличие или отсутствие аппарата или его части, а непрерывными переменными являются оптимизируемые режимные параметры u_j , $j=1,...,N$. Для ее решения широкое применение нашел метод ветвей и границ. Для его использования строится гиперструктура ХТС, которая включает все возможные варианты топологий синтезируемой ХТС. Методы построения гиперструктур рассмотрены в работах [4, 6, 9]. Метод ветвей и границ не является полностью формализованной процедурой. Для его применения

необходима разработка оригинальных подходов к ветвлению и к вычислению нижней оценки критерия оптимальности. Отметим, что разработка этих подходов является элементом творчества и невозможна без глубокого понимания физико-химической сущности проектируемого объекта [7]. Примером оригинального подхода к вычислению нижней оценки критерия оптимальности может служить метод проектирования систем ректификационных колонн, предложенный в работе [8]. Нельзя не отметить также метод обобщённого дизъюнктивного программирования как эффективного метода решения задач синтеза [9].

Б. Задача проектирования оптимальных ХТС с учетом неопределенности в исходной информации [2]. В этой задаче структура ХТС считается заданной, и необходимо определить такие конструктивные параметры d_j , $j=1, \dots, N$, и режимы работы аппаратов ХТС $\bar{u}_j$, $j=1, \dots, N$, при которых будут выполняться предъявляемые к ХТС требования $g_s(d, \bar{x}, \bar{u}) \leq 0$, $s=1, \dots, m$, и ХТС будет работать эффективно в смысле заданного критерия $f(d, \bar{x}, \bar{u})$, несмотря на изменения в условиях функционирования. Здесь переменные $\bar{x}$ характеризуют состояние аппаратов ХТС.

На этапе проектирования нам неизвестны значения неопределенных параметров θ_i , $i=1, \dots, p$, мы можем знать только диапазоны их изменения $\theta_i^L \leq \theta_i \leq \theta_i^U$ и, возможно, закон и характеристики распределения параметров. Также на этапе проектирования на часть проектных требований налагается условие безусловного выполнения, а часть требований могут выполняться с заданной вероятностью или в среднем.

Различают задачи оптимального проектирования ХТС в одноэтапной и двухэтапной постановках задачи [2]. В отличие от одноэтапной, в двухэтапной постановке предполагается возможность на этапе функционирования оптимальной подстройки некоторых найденных на этапе проектирования режимных параметров.

Перечисленные особенности задач проектирования с учетом неопределенности приводят к задачам оптимизации с многомерными интегралами в критерии и ограничениях [12], а также к появлению недифференцируемости в функциях ограничений, представляющих собой требования к работоспособности проектируемой ХТС [2].

В. Задача анализа гибкости проектируемых и действующих ХТС [2]. Задача заключается в проверке, существования таких режимов работы ХТС u_j , $j=1, \dots, N$, при которых все предъявляемые к ней требования $g_s(d, x, u, \theta) \leq 0$, $s=1, \dots, m$, будут выполняться, несмотря на изменения в условиях функционирования ХТС. Такая ХТС называется гибкой или работоспособной.

Необходимость выполнения ограничений $g_s(d, x, u, \theta) \leq 0$, $s=1, \dots, m$, представляющих

требования к ХТС, при любых значениях неопределенных параметров θ_i , $i=1, \dots, p$, из заранее заданной области неопределенности $T = \{\theta_i: \theta_i^L \leq \theta_i \leq \theta_i^U, i=1, \dots, p\}$, вносит в формируемые задачи бесконечное количество ограничений вследствие бесконечного количества значений неопределенных параметров θ_i в заданном диапазоне $\theta_i^L \leq \theta_i \leq \theta_i^U$.

Формализация задачи анализа работоспособности ХТС приводит к задаче многоэкстремальной недифференцируемой оптимизации

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_u \max_s g_s(d, u, x, \theta),$$

$$\chi(d) \leq 0.$$

Здесь $\chi(d)$ – функция гибкости, впервые предложенная в работе [10]. Один из подходов к ее решению требует решения последовательности задач с бесконечным числом ограничений, то есть задач полубесконечного программирования. Для ее решения используются различные модификации методов внешней аппроксимации. В работе [11] дан обзор методов решения задач полубесконечного программирования.

Г. Задача определения оптимальных стационарных режимов проектируемых и действующих ХТС. Следует сразу отметить, что данная задача является внутренней фундаментальной процедурой рассмотренных выше задач. Предполагается что известна топология рассматриваемой ХТС и конструкции аппаратов, в нее входящих. В силу сложности и нелинейности математических моделей аппаратов, входящих в состав ХТС, рассматриваемая задача представляет собой задачу нелинейного программирования (NLP). Формализованная постановка может быть записана в следующем виде: $\min_{u \in S} f(u)$, где f –

критерий оптимальности, вещественная функция вектора поисковых переменных $u \in E^n$, $S \subseteq E^n$ ($S \neq \emptyset$),

$$S = \{u: u \in E^n, \phi_i(u) = 0, i=1, \dots, p, \psi_j(u) \leq 0, j=1, \dots, q\}$$

Здесь уравнения равенства – уравнения материально-теплого баланса математической модели ХТС, уравнения неравенства – технологические ограничения.

Это двух уровневая процедура [4]. На верхнем уровне решается задача нелинейного программирования (NLP). В настоящее время для ее решения используются эффективные методы NLP, в частности: модифицированного Лагранжиана, последовательного квадратичного программирования. На нижнем уровне решается система нелинейных алгебраических уравнений, которая сводит материально-тепловой баланс ХТС на основе строгих математических моделей. Рассматриваемые задачи обладают большой размерностью и требуют значительных вычислительных затрат. Поэтому для их решения необходимо использовать современные

эффективные методы NLP. К числу которых следует отнести методы модифицированной функции Лагранжа и последовательного квадратичного программирования, а также квазинытоновские методы для решения задач безусловной оптимизации и решения систем нелинейных уравнений [1,2].

Следует отметить, что перечисленные методы включены в универсальные моделирующие программы: ChemCad, Unisim, Hysys, Aspen Plus, Pro-2 и др. Однако, незнание отечественными пользователями этих методов, неумение настраивать их под конкретные задачи, использование их наобум, приводит к низкой эффективности применения оптимизационных процедур с использованием моделирующих программ.

Д. Задача оптимального управления действующей ХТС налагает требование использования динамических моделей действующего производства, а также использования быстрых математических методов решения указанных задач. Здесь следует отметить важное значение в подготовке системных инженеров в области химической технологии умения оптимально настраивать параметры контуров регулирования, а также иметь навыки по оптимальному ведению технологических процессов. Эффективными инструментариями решения этих задач являются компьютерные тренажеры [13].

К сожалению следует отметить, что задачи связанные с проектированием химико-технологических систем в условиях неопределенностей, задачи на исследование гибкости ХТС, задачи смешанного дискретно-непрерывного нелинейного программирования и способы их решения в настоящее время не получили должного освещения в учебных программах общепрофессиональных и специальных дисциплин.

Заключение

В целях повышения качества инженерного образования и развития инновационной инженерной деятельности, содержательная часть общепрофессиональных и специальных дисциплин, направленных на формирование компетенций «владение современными методами и

инструментами разработки систем, включая архитектурный подход» и «владение методами и инструментами анализа, включая моделирование, анализ технико-экономических показателей и т.п.» [14] должны быть усилены современными методами оптимизации.

Литература

1. L.T. Biegler, *Nonlinear Programming: Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes* SIAM, Philadelphia, 2010, 399 p.
2. Г.М. Островский, Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева. *Оптимизация технических систем*. КНОРУС, Москва, 2012. 432 с.
3. P.A. Sanger, J.N. Ziyatdinova, V.G. Ivanov, "An experiment in project based learning: a comparison of attitudes between Russia and America", 2012 ASEE Annual Conference and Exposition, Conference Proceedings.
4. Г.М. Островский, Ю.М. Волин, Н.Н. Зиятдинов. *Оптимизация в химической технологии*. ФЭН, Казань, 2005. 394 с.
5. Raman R., I. Grossmann, *Comp. Chem. Eng.*, **15**, 2, 73 (1991)
6. Зиятдинова, Ю.Н., Н.Н. Зиятдинов, Вестник Казан. технол. ун-та, **13**, 9, 735-739, (2010).
7. И.Н. Дорохов, В.В. Меньшиков. *Системный анализ процессов химической технологии. Интеллектуальные системы и инженерное творчество в задачах интенсификации химико-технологических процессов и производств*. Наука, Москва, 2005. 582 с.
8. Г.М. Островский, Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, Н.Ю. Богула. Доклады Академии Наук, **431**, 6, 768-771, (2010)
9. L.T. Biegler, I.E. Grossmann, A.W. Westerberg. *Systematic methods of chemical process design*, Prentice-Hall, Inc, 1999, 796 p.
10. K.P. Halemane, I.E. Grossmann. *AIChE Journal*, **29**, 425–433, (1983)
11. И.В. Зайцев, Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Вестник Казан. технол. ун-та, **16**, 1, 251-256, (2013).
12. G.M. Ostrovsky, N.N. Ziyatdinov, T.V. Lapteva, I.V. Zaytsev, *Chem. Eng. Science*, **66**, 3815-3828, (2011).
13. Ю.Л. Павлов, Н.Н. Зиятдинов, Д.А. Рыжов. *Системный анализ химико-технологических процессов как объектов управления и методы настройки регуляторов*: учебное пособие. Издательство Казанского национального исследовательского технологического университета, Казань, 2013. 87 с.
14. Г.С. Аркадов, В.К. Батоврин, А.С. Сигов. Инженерное образование, 9, 12-25 (2012)