

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Ключевые слова: оптимизация, математическая модель, планирование эксперимента.

Рассмотрены методы оптимизации технологических процессов, основные задачи, критерии и алгоритм оптимизации технологических процессов.

Keywords: optimization, mathematical model, experiment planning.

Methods of optimization of technological processes, the main objectives, criteria and algorithm of optimization of technological processes are considered.

Формирование методов оптимального решения практических задач в современной постановке основывается на двух фундаментальных положениях:

- задача оптимизации должна быть выражена в виде некоторого критерия, значения которого для сравниваемых вариантов указывают на предпочтительность того или иного из них;
- достижимые значения критерия эффективности существенно зависят от ресурсов, (которые ограничены), что снижает возможность повышения эффективности.

При этом прагматическая направленность, связанная с решением оптимизационных задач, раскрывается следующей последовательностью действий: ценность (прагматическая) → цель оптимального решения → модель цели (целевая функция) → методы оптимизации (математические) → внедрение полученных результатов в практику.

Построение математических моделей (моделирование) является самостоятельной и достаточно сложной задачей, решение которой опирается на свои специфические методы. В зависимости от поставленной цели требуется найти такие значения параметров, которые максимизируют или минимизируют целевую функцию [1].

Для решения практических задач, которые не могут быть решены аналитически, применяются численные методы.

Применение численных методов связано с необходимостью определения возможной области изменения управлений. Численные методы формально могут быть применены в любых случаях, однако их возможности ограничены трудоемкостью расчетов. При применении этих методов принципиальным является вопрос об отыскании глобального, а не локального экстремума [1,2].

Оптимизационные модели, предназначенные для управления объектом, явлением или процессом, строятся с целью получения наилучших результатов при изменении управляющих факторов (параметров). При построении математической модели необходимо обеспечить достаточную точность вычислений (точность решения) и необходимую подробность модели.

Любая математическая модель включает в себя описание основных свойств и законов

функционирования исследуемого объекта, процесса или явления, учет второстепенных свойств приводит к неоправданному увеличению сложности математической модели и, как правило, полученные решения (результаты) трудно объяснимы. Как правило, стремятся к построению более простых математических моделей, адекватно (при заданных условиях исследования) отображающих объект, процесс или явление. При составлении математической модели следует избегать двух крайностей: чрезмерной детализации и чрезмерного округления модели.

В зависимости от исследуемого (моделируемого) объекта, явления или процесса целевая функция может быть представлена одной функциональной зависимостью, системой уравнений (линейных, нелинейных, дифференциальных и т.д.), набором статистических данных и т. д. При работе с целевой функцией исследователь воздействует на нее через набор входных параметров [3]. Исследователь может подавать на математическую модель множество наборов входных параметров, следовательно, в его распоряжении будет находиться множество решений. При работе с математическими моделями строится кратчайший алгоритм по поиску оптимального решения, т. е. набор входных параметров задается по определенному плану (алгоритму).

В большинстве исследуемых математических моделей не удастся указать единственное оптимальное решение по многим причинам:

- единственное глобальное оптимальное решение может быть найдено при отсутствии ограничений на значения входных параметров, чего на практике не бывает;
- для поиска глобального оптимального решения необходимо выполнить большой объем вычислений и, следовательно, затратить много времени, что тоже невозможно;
- глобальное оптимальное решение отсутствует и можно говорить о нескольких одинаковых локальных оптимальных решениях;
- локальных оптимальных решений множество, в этом случае говорят об области допустимых решений.

Оптимальное решение может быть представлено как одним значением, так и набором значений (вектором) [4].

Кроме набора входных параметров и одного (или нескольких) значения оптимального решения накладываются ограничения на значения входных параметров (или просто ограничениями). Ограничения задаются в виде равенств или неравенств и описываются как линейными зависимостями, так и нелинейными.

В рассматриваемых задачах оптимизации управляемые переменные непрерывно изменяются на некотором множестве, поэтому такие задачи называются непрерывными. Однако, из практики известно, что многие задачи оптимизации, в конечном счете, приводят к математическим моделям, в которых все переменные или, хотя бы, некоторые из них принимают дискретный ряд значений.

В современной трактовке нашли развитие методы оптимального управления, основанные на программном управлении. Основное принципиальное отличие этих методов состоит в том, что после разбиения всего процесса управления на этапы, на каждом из этапов выбирается свой критерий управления и формулируется задача оптимизации со своими ограничениями и допущениями для каждого этапа. При этом выбор локальных критериев на каждом этапе управления не должен приводить к ухудшению интегрального критерия оптимальности [4].

Таким образом, критерий оптимальности – это главный признак, по которому судят о том, насколько хорошо функционирует технологическая система, работает данный процесс, а также, насколько хорошо решена задача оптимизации.

Поскольку критерий оптимальности является одним из выходов системы, к нему предъявляются следующие требования:

- критерий оптимальности должен выражаться количественно;
- критерий оптимальности должен быть единственным;
- величина критерия оптимальности должна изменяться монотонно (без разрывов и скачков);
- критерий оптимальности должен отражать наиболее существенные стороны процесса;
- желательно чтобы критерий оптимальности имел ясный физический смысл и легко рассчитывался.

На основании выбранного критерия оптимальности составляется целевая функция, представляющая собой зависимость критерия оптимальности от параметров, влияющих на ее значение. Вид критерия оптимальности или целевой функции определяется конкретной задачей оптимизации. Таким образом, задача оптимизации сводится к нахождению экстремума целевой функции.

Наиболее общей постановкой оптимальной задачи является выражение критерия оптимальности в виде экономической оценки (производительность, себестоимость продукции, прибыль, рентабельность). Однако, в частных задачах оптимизации, когда объект является частью технологического процесса, не всегда удается или не всегда целесообразно выделять прямой

экономический показатель, который полностью позволяет характеризовать эффективность работы рассматриваемого объекта. В таких случаях критерием оптимальности может служить технологическая характеристика, косвенно оценивающая экономичность работы агрегата (время контакта, выход продукта, степень превращения, температура). Например, устанавливается оптимальный температурный профиль, длительность цикла - "реакция - регенерация" и т.п.

Различают простые и сложные критерии оптимизации. Критерий оптимальности называется простым, если требуется определить экстремум целевой функции без задания условий на какие-либо другие величины. Такие критерии обычно используются при решении частных задач оптимизации (например, определение максимальной концентрации целевого продукта, оптимального времени пребывания реакционной смеси в аппарате и др.) [3,4].

Критерий оптимальности называется сложным, если необходимо установить экстремум целевой функции при некоторых условиях, которые накладываются на ряд других величин и ограничений. Таким образом, процедура решения задачи оптимизации обязательно включает, помимо выбора управляющих параметров, еще и установление ограничений на эти параметры. Ограничения могут накладываться как по технологическим, так и по экономическим соображениям. Различают следующие основные ограничения:

- по количеству и качеству сырья и продукции (состав сырья, качество продукции, производительность и др.);
- по условиям технологии (размеры аппарата, время пребывания, температура зажигания и деактивирования катализатора и др.);
- по экономическим соображениям;
- по охране труда и окружающей среды.

Основной задачей оптимизации является нахождение экстремума (минимума или максимума) функции критерия оптимальности. Нахождение экстремума функции возможно различными методами. Выбор того или иного метода нахождения оптимума является одним из важнейших этапов оптимизации.

Методы поиска оптимума можно разделить на следующие группы:

- аналитические методы;
- методы математического программирования.

Группа аналитических методов оптимизации объединяет аналитический поиск экстремума функции, метод множителей Лагранжа, вариационные методы и принцип максимума. Аналитический поиск экстремума функции, заданных без ограничений на независимые переменные является наиболее простым, но применяется к задачам, у которых оптимизируемая функция имеет аналитическое выражение, дифференцируемое во всем диапазоне исследования, а число переменных невелико.

Группа методов математического программирования включает: динамическое программирование, линейное программирование и нелинейное программирование.

Динамическое программирование – эффективный метод решения задач оптимизации многостадийных процессов. Метод предполагает разбивку анализируемого процесса на стадии (во времени или в пространстве). Рассмотрение задачи начинается с последней стадии процесса, и оптимальный режим определяется постадийно.

Линейное программирование – метод для решения задач оптимизации с линейными выражениями для критерия оптимальности и линейными ограничениями на область изменения переменных. Подобные задачи решаются итерационными способами. Эти методы используются при оптимальном планировании производства при ограниченном количестве ресурсов, для транспортных задач и др.

Методы нелинейного программирования объединяют различные способы решения оптимальных задач: градиентные, безградиентные и случайного поиска. Общим для методов нелинейного программирования является то, что их используют при решении задач с нелинейными критериями оптимальности. Все методы нелинейного программирования – это численные методы поискового типа. Суть их заключается в определении набора независимых переменных, дающих наибольшее приращение оптимизируемой функции. Данная группа методов применяется как для детерминированных, так и стохастических процессов.

Характер влияния параметров процесса на его результат зависит от особенностей каждой реакции. При этом варьирование параметров процесса нередко приводит к изменению удельной производительности и селективности в противоположных направлениях, а также может приводить к дополнительным затратам на этой или других стадиях технологического процесса [4].

Подбор оптимальных параметров осуществляют с использованием математической модели процесса, в которой исследуемая величина выражается в виде функции оптимизируемых параметров. Эта функция может быть построена эмпирически на основании анализа результатов работы промышленной или опытной установки в различных режимах с варьированием параметров. Модель должна достаточно хорошо описывать реальный процесс и в то же время быть достаточно простой, обеспечивая точность расчетов, не превышающую точность исходных данных [5].

Таким образом, при постановке задачи оптимизации необходимо учесть:

- наличие цели оптимизации, при этом формулировка каждой задачи оптимизации должна требовать экстремального значения лишь одной величины, т.к. обычно экстремум (минимум или максимум) одного критерия не соответствует экстремуму другого.

- наличие ресурсов оптимизации, под которыми понимают возможность выбора значений некоторых параметров оптимизируемого объекта; объект должен обладать определенными степенями свободы - управляющими воздействиями.

- возможность количественной оценки оптимизируемой величины, поскольку только в этом случае можно сравнивать эффекты от выбора тех или иных управляющих воздействий.

- обычно оптимизируемая величина связана с экономичностью работы рассматриваемого объекта (аппарат, цех, завод), следовательно, оптимизируемый вариант работы объекта должен оцениваться какой-то количественной мерой – критерием оптимальности.

Таким образом, различают задачи статической оптимизации для процессов, протекающих в установившихся режимах, и задачи динамической оптимизации. В первом случае решаются вопросы создания и реализации оптимальной модели процесса, а во втором – задачи создания и реализации системы оптимального управления процессом при неустойчивых режимах эксплуатации [2].

Математическое описание служит исходным материалом для создания алгоритма, моделирующего исследуемый объект. В зависимости от постановки задачи может использоваться тот или иной алгоритм, дающий возможность получить искомые результаты моделирования. Задачей моделирующего алгоритма чаще всего является решение системы уравнений математического описания, что позволяет находить внутренние параметры математической модели при заданной совокупности внешних [4,5].

Существующие в настоящее время методы численного анализа позволяют решать широкий круг задач математического моделирования. Тем не менее, в некоторых случаях встречаются серьезные затруднения в применении общих методов численного анализа. К числу таких случаев, прежде всего, относятся следующие задачи математического моделирования:

- решение систем конечных нелинейных уравнений с большим числом переменных;

- интегрирование систем обыкновенных дифференциальных уравнений с краевыми условиями;

- интегрирование систем дифференциальных уравнений в частных производных.

Для указанных проблем в численном анализе пока отсутствуют эффективные общие методы решения, поэтому в каждом конкретном случае при построении моделирующего алгоритма следует использовать особенности решаемой задачи.

В ряде случаев моделирующий алгоритм бывает настолько сложным для реализации с помощью имеющихся в наличии вычислительных средств, что следует изменить формулировку исходной задачи моделирования для упрощения математического описания. Это упрощение часто

достигается лишь ценой снижения точности математической модели путем замены некоторых аналитических выражений более простыми, и возможно, менее точными или за счет сокращения полноты математического описания при исключении из модели части параметров моделируемого объекта.

Таким образом, все три аспекта математической модели — смысловой, аналитический и вычислительный — должны рассматриваться в тесной взаимосвязи. Возможность решения задачи моделирования и последующего использования математической модели для решения задач оптимизации часто обусловлена тем, насколько удачно соответствуют эти стороны одна другой. Пренебрежение или не слишком строгое отношение к любому из указанных аспектов математической модели может проявиться на определенном этапе в виде непредвиденных затруднений, сводящих на нет всю предыдущую работу по подготовке моделирования. Так, если вначале включить в математическую модель слишком большое количество параметров объекта моделирования, то при составлении математического описания может потребоваться столь же большое число взаимосвязей между ними, не все из которых известны в достаточно грубом приближении. Наконец, если даже математическое описание и будет получено, то вследствие его сложности могут возникнуть вычислительные трудности [6,7].

Построение физико-химических моделей сопряжено с проведением обширных и длительных исследований, поскольку необходимо рассматривать микроструктуру процессов и описывать их математически. Модели в этом случае представляются системами алгебраических и различных дифференциальных уравнений. Не всегда удается рассчитать численные значения коэффициентов, входящих в эти системы, и тогда опять прибегают к эксперименту.

Одним из новых направлений экспериментально-статистических исследований является математическое планирование эксперимента. Математическое планирование эксперимента — это процедура выбора числа и условий постановки опытов, необходимых и достаточных для решения данной задачи с требуемой точностью, методов математической обработки, их результатов и принятия решений.

В планировании эксперимента сам эксперимент рассматривается как объект исследования и оптимизации. Здесь осуществляется оптимальное управление ведением эксперимента — в зависимости от информации об изучаемой системе осуществляется изменение стратегии исследования с выбором оптимальной стратегии для каждого данного этапа. Таким образом, планирование эксперимента есть новый кибернетический подход к организации и проведению экспериментальных исследований сложных систем.

Планирование эксперимента — мощный инструмент экспериментально-статистического

исследования и оптимизации сложных систем. Исключая слепой поиск, оно значительно сокращает число опытов, следовательно, затраты и сроки проведения эксперимента, дает возможность получить количественные оценки влияния факторов, математические модели. Как показывает опыт отечественных и зарубежных работ, применение методов планирования эксперимента по сравнению с традиционными методами позволяет повысить эффективность научных исследований в 2—10 раз.

Важным достоинством методов планирования эксперимента является их универсальность, пригодность в большинстве областей исследования — в химии и химической технологии, металловедении и металлургии, промышленности строительных материалов, медицине, биологии, сельском хозяйстве, в радиотехнике, электронике, автоматике, вычислительной технике и других областях [8].

При использовании статистического подхода к планированию экспериментов и анализу данных предусматривается следующая схема:

- признание факта существования задачи и ее формулировка, то есть необходимо уточнить все представления о целях эксперимента, ясную и общепринятую формулировку этой проблемы.

- выбор факторов и уровней, то есть необходимо отобрать независимые переменные, или факторы, которые будут исследоваться в эксперименте.

- выбор переменной отклика, при выборе отклика или зависимой переменной необходимо определить измеряемый отклик, далее находят способ измерения отклика и устанавливают точность этих измерений.

- выбор плана эксперимента, при этом определяют порядок получения данных и метод рандомизации и находят математическую модель эксперимента.

- проведение эксперимента, при этом особое внимание обращают на рандомизацию, точность измерений и поддержание, как можно, большей однородности внешних условий эксперимента.

- анализ данных осуществляется с помощью статистических методов

- выводы и рекомендации, по завершению анализа данных делают выводы относительно полученных результатов, при этом дается физическая интерпретация статистических выводов, оценивается их практическое значение, выносятся рекомендации о практическом использовании результатов. Использование рисунков и графиков — очень эффективный способ представления важных результатов эксперимента [9-11].

Поскольку любая математическая модель объекта является лишь его аналогом в рамках принятых допущений и ограничений, таким образом, обращается внимание на ее адекватность. В случае, если адекватность модели не доказана, то результаты расчета не могут быть использованы для принятия решений и рекомендаций.

В этом случае переходят к уравнению более

высокого порядка [12].

Поскольку в начале эксперимента, неизвестно направление поверхности отклика, наиболее разумным является использование центральных композиционных планов, отвечающих требованию ротатабельности, позволяющих получать модель, способную предсказывать значение параметра оптимизации с одинаковой точностью независимо от направления на равных расстояниях от центра плана [13-15].

Таким образом, на основании приведенного анализа методов оптимизации технологических процессов, в частности для исследования влияния плазменной обработки на физические и механические свойства волокнистых материалов, актуально использование метода центрального композиционного ротатабельного планирования (ЦКРП) [16,17]. В этом случае план проведения эксперимента является симметричным относительно некоторой точки – центра плана, и получается добавлением определенных точек к плану полного или дробного эксперимента. Получающееся в результате планирования эксперимента уравнение регрессии имеет свойство ротатабельности, т.е. точность предсказания целевой функции, (направленное движение к оптимуму) одинаково на равном расстоянии от основного уровня.

Литература

1. Мочалов, С.П. Методы оптимизации металлургических процессов: учеб. пособ. / Сиб. мет. ин-т. – Новокузнецк, 1989. – 81 с.
2. Хартман К. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. - М.: Мир. - 1977. - 552 с.
3. Саулин Д.В. Математическое моделирование химико-технологических систем: Конспект лекций/ Перм. гос. техн. ун-т. Пермь. – 2003. - 91 с.
4. Харитонов Е.А., Павлий В.Г. Методы планирования эксперимента в работах по полимерной химии ч. 3, 4, КХТИ, 1978. – 45 с.
5. Неймарк Ю.И. Простые математические модели и их роль в постижении мира // Соросовский Образовательный Журнал. - 1997. - № 3. - С. 139-143.
6. Бояринов А. И., Кафаров В. В. Методы оптимизации в химической технологии. М.: Химия. – 1969. - 564 с.
7. Бондарь А. Г., Статюха Г. А. планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии: учеб. пособие. – Киев. 1980. - 264 с.
8. Зедгинидзе И. Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. М., «Наука». – 1976. - 390 с.
9. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных: Пер. с англ.—Л.: Судостроение, 1980.—384 с.
10. Адлер Ю. П. Введение в планирование эксперимента М., «Металлургия», 1969. – 158 с.
11. Адлер Ю.П. Маркова Е.В. Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий // Наука. – 1976. - 280 с.
12. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. – М.: Химия. – 1973. – 224 с.
13. Спиридонов А. А. Планирование эксперимента при исследовании технологических процессов. М.: Машиностроение, 1981.— 184 с.
14. Н. Джонсон, Ф.Лион Статистика и планирование эксперимента в технике и науке // пер. с англ. – изд-во Мир. – Москва. – 1980. – 620 с.
15. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов // Наука. - 1965. - 340 с.
16. Сергеева, Е.А. Оптимизация режимов низкотемпературной плазменной обработки высокомолекулярных полиэтиленовых волокон / Е.А. Сергеева, И.А. Гришанова, С.В. Илюшина // Вестник Казанского технологического университета. – 2010. - №7. - С. 94-98.
17. Илюшина, С.В. Оптимизация параметров плазменной обработки полиэфирных тканей / С.В. Илюшина, Е.А. Сергеева // Вестник Казанского технологического университета. – 2011. - № 5. – С.278-279