

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 энергои 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 металлои 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, 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 n_i (число аппаратов в схеме), определяющие наличие или отсутствие аппарата или его части, а непрерывными переменными являются оптимизируемые режимные параметры x_j . 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 α , β и режимы работы аппаратов ХТС γ , δ , при которых будут выполняться предъявляемые к ХТС требования ϵ , ζ и ХТС будет работать эффективно в смысле заданного критерия η , несмотря на изменения в условиях функционирования. Здесь переменные характеризуют состояние аппаратов ХТС. На этапе проектирования нам неизвестны значения неопределенных параметров α , β , мы можем знать только диапазоны их изменения 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 γ , δ , при которых все предъявляемые к ней требования ϵ , ζ будут выполняться, несмотря на изменения в условиях функционирования ХТС. Такая ХТС называется гибкой или работоспособной. Необходимость выполнения ограничений ϵ , ζ , представляющих требования к ХТС, при любых значениях неопределенных параметров α , β , из заранее заданной области неопределенности Θ , вносит в формируемые задачи бесконечное количество ограничений вследствие бесконечного количества значений неопределенных параметров в заданном диапазоне Θ . Формализация задачи анализа работоспособности ХТС приводит к задаче многоэкстремальной недифференцируемой оптимизации $\min_{\gamma, \delta} \max_{\alpha, \beta \in \Theta} f(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$. Здесь f – 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: , где – критерий оптимальности, вещественная функция вектора поисковых переменных \mathbf{X}), Здесь уравнения равенства – уравнения материально-теплового 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 квазиньютоновские 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.