

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА ЭНЕРГО- И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ

С.И. Дворецкий

*Кафедра «Технологическое оборудование и пищевые технологии»,
ГОУ ВПО «ТГТУ»*

Компьютерное моделирование химико-технологических систем (ХТС) к настоящему времени полностью доказало свою актуальность и перспективность. С его помощью удастся повысить эффективность и качество функционирования ХТС и управления технологическими процессами. Но особенно большое значение компьютерное моделирование и оптимизация имеют для синтеза работоспособных и экономичных ХТС, а также для сокращения сроков их проектирования. Можно выделить два этапа в развитии компьютерного моделирования ХТС.

Первый этап компьютерного моделирования был связан с переводом расчета материальных и тепловых балансов ХТС с ручного на компьютерный. Начало этого этапа датируется 1958 г. и знаменуется появлением первой моделирующей системы Flexible Flowsheet. Его становление и развитие шло на протяжении 1960–1970 гг. Была выработана общая концепция универсальной моделирующей программы, состоящей из организующей программы, библиотеки модулей для расчета химико-технологических процессов и аппаратов, банка физико-химических свойств и библиотеки математических модулей. Было создано несколько десятков универсальных моделирующих программ: CHEOPS, CHEVRON, SPEED-UP, MACSIM, NETWORK 67, CHESS, PACER 245, FLOWTRAN, FLOWPACK, PROCESS и др.

Настоящий расцвет компьютерного моделирования начался с появлением персональных компьютеров. К этому времени в результате длительного процесса из общего числа выделились четыре универсальные моделирующие программы, которые заняли лидирующее положение в мире: ASPEN PLUS, HYSIS, CHEMCAD и PRO/II. Указанные программы обладают обширными библиотеками технологических модулей, большими банками физико-химических свойств и удобным для пользователя интерфейсом. Их широко используют при перепрофилировании действующих и проектировании новых ХТС. При этом можно отметить, как общую тенденцию, стремление переходить на использование в расчетах все более сложных и, соответственно, более адекватных математических моделей технологических процессов и аппаратов.

В целом, в мировой практике, в 1960–1980 гг. был накоплен большой опыт использования универсальных моделирующих программ для расчета стационарных режимов (а также, в меньшей степени, и динамических режимов) ХТС. Но на определенном этапе совершенствования универсальных моделирующих программ было осознано, что наибольшие возможности компьютерного моделирования ХТС связаны не с передачей компьютеру традиционных для проектировщиков функций по расчету материальных и тепловых балансов, а с реализацией с помощью компьютера функций оптимизации и управления действующими ХТС, а также синтеза (оптимального проектирования) новых ХТС.

Начало второго этапа в развитии компьютерного моделирования можно условно отнести ко второй половине 1980-х гг., когда в течение короткого времени произошел переход к персональным компьютерам и появились первые прототипы

универсальных моделирующих программ ASPEN PLUS, HYSIS, CHEMCAD и PRO/II, в которые были введены оптимизационные процедуры, и их стали применять не только для расчета отдельных технологических схем, но и для оптимизации стационарных режимов ХТС. Однако, вплоть до настоящего времени универсальные моделирующие программы гораздо чаще применяют в своей первой функции – расчет материальных и тепловых балансов с использованием наиболее полных и совершенных модулей для расчета аппаратов и банка физико-химических свойств, снабженного новейшими данными. Причина здесь и в значительно большей математической трудности оптимизационного расчета по сравнению с балансовым, и в непривычности целевой функции оптимизации для проектировщиков. Но главное и принципиальное затруднение, на наш взгляд, связано с неопределенностью исходной информации, которой мы располагаем при решении задачи оптимизации. Неопределенность практически всегда имеет место на этапе проектирования и часто – на этапе эксплуатации ХТС. Учет неопределенности информации требует как разработки новых математических постановок задач, так и новых подходов и методов их решения.

Следовательно, третий этап в развитии компьютерного моделирования отличается от первых двух, в первую очередь тем, что при моделировании учитывается неполнота исходной информации, и в постановку задачи включается требование обеспечения работоспособности (гибкости) проектируемой ХТС.

Разберем этот вопрос более подробно. Ограничившись далее задачей оптимизации стационарных режимов ХТС на этапе проектирования, запишем систему уравнений ХТС в общем виде

$$f_i(a, d, z, x) = 0, \quad i = 1, \dots, p, \quad (1)$$

где функции $f_i(a, d, z, x)$ получены из уравнений для отдельных аппаратов ХТС и соотношений связи между аппаратами; a – тип аппаратного оформления технологического процесса; d – вектор конструктивных переменных; z – вектор режимных (управляющих) переменных; x – вектор состояний (вектор концентраций, расходов потоков, их энтальпий и т.п.). Обычно из уравнений (1) x определяется как однозначная функция $a, d, z: x = x(a, d, z)$.

Далее при проектировании должен быть соблюден ряд требований-ограничений в форме равенств и неравенств:

$$\bar{g}_j(a, d, z, x) = 0 \quad \text{и/или} \quad \bar{g}_j(a, d, z, x) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2)$$

Ограничения могут быть технологическими, экономическими, экологическими и регламентными.

Наконец при постановке задачи оптимизации должна быть задана целевая функция, зависящая от переменных ХТС: $I(a, d, z, x)$ и подлежащая минимизации или максимизации. Целевая функция может быть технологическим или чаще экономическим критерием (приведенные затраты, прибыль и т.д.).

Если вектор состояний x выразить из системы (1) в виде $x(a, d, z)$ и подставить в зависимости $\bar{f}(a, d, z, x)$ и $\bar{g}_j(a, d, z, x)$, то математически задачу оптимизации ХТС (для случая минимизации критерия) можно записать в виде:

$$\min_{a \in A, d \in D, z \in Z} I(a, d, z), \quad (3)$$

$$g_j(a, d, z) = 0 \quad \text{и/или} \quad g_j(a, d, z) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad (4)$$

где $I(a, d, z) = \bar{I}(\bar{a}, d, z, x(a, d, z))$, $g_j(a, d, z) = \bar{g}_j(a, d, z, x(a, d, z))$.

В научной литературе задачу (3), (4) принято называть задачей нелинейного программирования (НЛП), решив которую, получим оптимальные значения a, d, z , обеспечивающие минимум критерия I при соблюдении ограничений (4).

Так, однако, дело обстоит в идеальном случае. В реальности на этапе проектирования в математическом описании ХТС всегда присутствуют неопределенности двух родов. Одни из них, такие как параметры сырья и температура окружающей среды, могут изменяться во время работы ХТС, оставаясь в пределах некоторого диапазона изменений. Для них принципиально невозможно указать единственное значение. Другие могут быть в реальности постоянными для данной ХТС, но их значения известны с точностью до определенного интервала, например некоторые коэффициенты в кинетических уравнениях и уравнениях тепло- и массопереноса. Чтобы учесть неопределенности в математическом описании ХТС, достаточно их выделить в зависимости для I и g_j , считая, что $I = I(a, d, z, \xi)$, $g_j = g_j(a, d, z, \xi)$, $j = 1, \dots, m$, где ξ – вектор неопределенных параметров, принимающих любые значения из заданной области Ξ , которую обычно считают прямоугольной

$$\Xi = \{ \xi : \xi^L \leq \xi \leq \xi^U \}. \quad (5)$$

Таким образом, решение задачи (3), (4) на самом деле зависит от значения, которое принял вектор ξ , и само оказывается неопределенным.

Традиционный путь преодоления данного затруднения состоит в следующем. Вектору неопределенных параметров приписывают некое «номинальное» значение: $\xi = \xi^N$ и решают задачу (3), (4) при номинальном ξ^N с получением номинального значения вектора конструктивных переменных d^N при заданном типе аппаратного оформления a . После этого волевым образом (на основе имеющихся знаний о проектируемом объекте и интуиции) вводят так называемые «запасы» $k_i (k_i > 1)$ и принимают при проектировании $d_i = k_i d_i^N$, где d_i – i -я компонента вектора d , $i = 1, \dots, n$ (длина и диаметр реактора, поверхность теплообмена в теплообменнике, число тарелок в ректификационной колонне и т.п.).

Недостатки данного подхода очевидны, так как он не гарантирует ни оптимальности полученного решения, ни того, что все ограничения будут выполнены во время эксплуатации ХТС. Если запасы окажутся недостаточными, то ограничения будут нарушены; если слишком большими, то будет перерасход затрат.

Существенно более правильным и научно-обоснованным является подход, когда неопределенность в параметрах процесса учитывается в самой постановке оптимизационной задачи. Суть данного подхода заключается в следующем. Вместо ограничений (4) вводят единое ограничение

$$\chi(a, d) = \max_{\xi \in \Xi} \min_{z \in Z} \max_{j \in J} g_j(a, d, z, \xi) \leq 0, \quad (6)$$

где $J = \{1, \dots, m\}$ – множество индексов для функций-ограничений.

Это ограничение называют ограничением гибкости, а функцию $\chi(a, d)$ – функцией гибкости. Если ХТС с вектором d , получившим определенное значение удовлетворяет ограничению (6), то ХТС называют работоспособной (гибкой). Гибкая ХТС сохраняет работоспособность при любых значениях ξ из области неопределенности Ξ . В этом случае в качестве критерия оптимизации применяют

некоторую усредняющую величину. В точной формулировке это будет математическое ожидание I по переменной ξ в Ξ , что приводит к необходимости чрезвычайно сложных вычислений многомерного интеграла. Используя прием дискретизации задачи и аппроксимации многомерного интеграла взвешенной суммой с небольшим числом членов (высокой точности вычисления интеграла здесь не требуется), критерий оптимизации I можно записать в виде:

$$\sum_{i=1}^s w_i I(a, d, z^i, \xi^i), \quad (7)$$

где ξ^i – «аппроксимационные» точки (представительные точки области Ξ , участвующие в операции усреднения критерия); s – число аппроксимационных точек; w_i – весовые коэффициенты, значения которых определяют теоретически (если известны вероятностные распределения неопределенных параметров ξ), либо принимают субъективно с учетом знаний о процессе $w_i > 0, \sum_{i=1}^s w_i = 1$.

В результате получаем следующую задачу:

$$\min_{a \in A, d \in D, z^i \in Z} \sum_{i=1}^s w_i I(a, d, z^i, \xi^i), \quad (8)$$

$$g_j(a, d, z^i, \xi^i) \leq 0, \quad i = 1, \dots, s, \quad j = 1, \dots, m, \quad (9)$$

$$\chi(a, d) \leq 0. \quad (10)$$

Постановка задачи (8)–(10) наиболее часто принимается при аппаратурно-технологическом оформлении ХТП. С некоторых позиций эту постановку можно трактовать как оптимальный выбор запасов технологического оборудования, обеспечивающих работоспособность (гибкость) ХТС независимо от изменения неопределенных параметров ξ в заданной области Ξ .

Задачами анализа гибкости ХТС принято называть задачи, которые так или иначе связаны с учетом требования выполнения условия гибкости (6). К настоящему времени анализ гибкости оформился как целое научное направление. Задачи анализа гибкости ХТС математически значительно сложнее, чем обычные оптимизационные задачи (3), (4), и данное научное направление пока что не достигло уровня, при котором возможна массовая передача его результатов в производство. Ведущие универсальные программы – ASPEN PLUS, CHEMCAD и др. – не содержат программных средств для анализа гибкости ХТС.

Задача оптимизации с интервальной неопределенностью – основная задача анализа гибкости. Постановка (8)–(10) является для нее сейчас наиболее распространенной. Ее формулировка в свое время означала «прорыв», но теперь уже ясно, что эта постановка не лишена недостатков, она нуждается в совершенствовании и уточнении.

Наши исследования показали, что для правильной постановки задачи надо учитывать целый ряд моментов, важнейшими из которых являются: вид неопределенности (модельная или параметрическая), тип неопределенности (неопределенность только на первом этапе (проектирования) или на обоих этапах (проектирование и управление действующим процессом) и тип ограничений (жесткие или мягкие)). Модельная неопределенность означает, что отсутствует полная уверенность в том, какой математической моделью следует воспользоваться для некоторых аппаратов ХТС (сложности могут возникнуть, например, при выборе для ре-

актора с псевдооживленным слоем), а параметрическая – что общая структура уравнений для каждого аппарата известна, но есть неопределенность в параметрах (коэффициентах) модели. Параметрическая неопределенность на этапе проектирования практически всегда имеет место, а на втором этапе (управление ХТС) тоже не всегда удается избежать неопределенности. В первом приближении параметры модели ХТС можно разбить на две группы: *первая* – параметры можно непосредственно измерить на действующем процессе, *вторая* – параметры измерить нельзя, но их значения могут быть уточнены по данным измерения параметров первой группы. При этом, чтобы уточнить средние значения параметров второй группы и интервалы неопределенности для них, в свою очередь, приходится решать оптимизационную задачу идентификации.

Если ограничение задачи должно быть выполнено всегда, при любых значениях ξ из заданной области Ξ , то такие ограничения называют *жесткими*. Жесткими должны быть ограничения по взрывобезопасности процесса и (часто) регламентные ограничения. Но в целом ряде случаев достаточно, чтобы ограничение выполнялось не всегда, а «почти всегда», то есть с некоторой заданной большой вероятностью (например, с вероятностью 0,95). Такие ограничения принято называть *мягкими*. Ослабление требований к ограничениям позволяет в ряде случаев получить лучшее значение критерия оптимизации.

При проектировании новых, реконструкции и перепрофилировании действующих химических производств химики-технологи практически всегда сталкиваются с необходимостью решения сложнейшей задачи аппаратурно-технологического оформления физико-химических процессов, осуществляемых на различных стадиях производства органического синтеза. Сложность такой задачи обусловливается неполнотой и неточностью исходной физико-химической, технологической и экономической информации, а также необходимостью удовлетворения целого ряда требований технологического регламента производства, а именно: 1) производство должно работать без аварийных ситуаций и быть экологически безопасным, то есть выбросы вредных веществ не должны превышать допустимых норм; 2) в ходе эксплуатации производства должны обеспечиваться заданные требования по качеству химической продукции и производительности; 3) химико-технологические процессы, осуществляемые на различных стадиях производства, должны быть экономически эффективными, то есть некоторая мера, характеризующая их экономическую эффективность, должна принимать наибольшее или наименьшее значения (например, показатели энерго- и ресурсосбережения, прибыль, приведенные затраты и т.п.).

Сформулированная выше задача аппаратурно-технологического оформления химического производства в условиях частичной неопределенности (8)–(10) существенно отличается от традиционной задачи НЛП. Во-первых, она позволяет научно обоснованно рассчитывать оптимальные (по критерию I) конструктивные и режимные (управляющие) переменные ХТП при наличии неопределенностей и коэффициенты запаса технического ресурса оборудования производства, гарантирующие сохранение его работоспособности при любых значениях ξ из области неопределенности Ξ . Во-вторых, задача аппаратурно-технологического оформления в постановке (8)–(10) дает возможность подстройки режимных (управляющих) переменных на этапе функционирования производства, и тем самым обеспечивает более экономичное осуществление физико-химических процессов на различных стадиях производства. Наконец, в постановке задачи (8)–(10) заложены предпосылки эффективного управления и автоматизации, что позволяет разрабатывать новые энерго- и ресурсосберегающие процессы и аппараты, реакторные установки и обеспечивать высокую конкурентоспособность проектируемого производства на мировом рынке.

С учетом вышеизложенного в наших работах, работах известных зарубежных и российских ученых [1–16] формализована стратегия интегрированного проектирования энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических процессов и систем автоматического управления их режимами при наличии неопределенности физико-химических и технологических исходных данных. Разработана многоэтапная итерационная процедура решения задач интегрированного проектирования: генерирование альтернативных вариантов химико-технологических процессов, удовлетворяющих условиям гибкости в «жесткой» и(или) «мягкой» формах и выбор режимных (управляющих) воздействий; синтез альтернативных вариантов систем автоматического управления режимами химико-технологических процессов и выбор наилучшего варианта системы управления; попарное сравнение допустимых автоматизированных комплексов «химико-технологический процесс – система автоматического управления» и выбор наилучшего варианта по критерию, учитывающему как энерго- и ресурсосбережение, так и качество управления (решаются одно- и(или) двухэтапные задачи стохастической оптимизации с «жесткими» и(или) «мягкими» ограничениями). Приведены примеры интегрированного проектирования непрерывного производства азопигментов и систем автоматического управления процессами тонкого органического синтеза – диазотирования и азосочетания.

Список литературы

1. Волин, Ю.М. Три этапа компьютерного моделирования химико-технологических систем / Ю.М. Волин, Г.М. Островский // Теорет. основы хим. технологии. – 2006. – Т. 40, № 3. – С. 302–312.
2. Grossmann I.E., Sargent R.W.H. Optimum design of chemical plants with uncertain parameters // AIChEJ. – 1978. – V. 24, № 6. – P. 1022.
3. Halemane K.R., Grossmann I.E. Optimal process design under uncertainty // AIChEJ. – 1983. – V. 29, № 3. – P. 425.
4. Grossman I.E., Floudas C.A. Active constraint strategy for flexibility analyses in chemical processes // Computers and Chemical Engineering. – 1987. – V. 11. – P. 675–693.
5. Pistikopoulos E.N., Grossman I.E. Optimal retrofit design for improving process flexibility in non-linear systems // Computers and Chemical Engineering. – 1989. – V. 12. – P. 1003–1016.
6. Бодров, В.И. Оптимальное проектирование энерго- и ресурсосберегающих процессов и аппаратов химической технологии / В.И. Бодров, С.И. Дворецкий, Д.С. Дворецкий // Теорет. основы хим. технологии. – 1997. – Т. 31, № 5. – С. 542–548.
7. Ostrovsky G.M., Volin Yu. M., Senyavin M.M. An approach to solving a two-stage optimization problem under uncertainty // Computers and Chemical Engineering. – 1997. – V. 21, № 3. – P. 317–325.
8. Островский, Г.М. О новых проблемах в теории гибкости и оптимизации химико-технологических процессов при наличии неопределенности / Г.М. Островский, Ю.М. Волин // Теорет. основы хим. технологии. – 1999. – Т. 33, № 5. – С. 578–590.
9. Островский, Г.М. Оптимизация химико-технологических процессов в условиях неопределенности при наличии жестких и мягких ограничений / Г.М. Островский, Ю.М. Волин // Докл. РАН. – 2001. – Т. 376, № 2. – С. 215–218.
10. Dvoretzky D.S., Dvoretzky D.S., Dvoretzky S.I. New problem statements, algorithms and problems of integrated design of flexible chemical processes and automatic control systems// European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE'14): Proceedings. – Lisbon, Portugal, 2004. – P. 397–402.

11. Бодров, В.И. Постановка задач и проблемы интегрированного проектирования гибких автоматизированных ХТП / В.И. Бодров, С.И. Дворецкий, Д.С. Дворецкий // VI Международная научная конференция (к 90-летию со дня рождения академика В.В. Кафарова) : сб. докл. / Рос. хим.-технол. ун-т им. Д.И. Менделеева. – М., 2004. – С. 149–162.

12. Дворецкий, С.И. Интегрированное проектирование гибких автоматизированных химико-технологических процессов при наличии неопределенности / С.И. Дворецкий, Д.С. Дворецкий // Вестн. Тамб. гос. техн. ун-та. – 2004. – Т. 10–Юбилейный, № 2. – С. 379–396.

13. Дворецкий, Д.С. Интегрированный синтез энерго- и ресурсосберегающих многоассортиментных химико-технологических систем / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Г.М. Островский // Вопросы современной науки и практики. Университет им. В.И. Вернадского. – 2006. – № 4(6). – С. 175–185.

14. Дворецкий, Д.С. Математическое моделирование и оптимизация процессов тонкого органического синтеза в условиях неопределенности / Д.С. Дворецкий, Е.В. Пешкова // Вестн. Тамб. гос. техн. ун-та. – 2007. – Т. 13, № 1А. – С. 119–129.

15. Дворецкий, Д.С. Интегрированное проектирование энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических процессов и систем управления: стратегия, методы и применение / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Г.М. Островский // Теорет. основы хим. технологии. – 2008. – Т. 42, № 1. – С. 29–39.

16. Решение двухэтапной задачи стохастической оптимизации при проектировании комбинированной реакторной установки тонкого органического синтеза / Д.С. Дворецкий [и др.] // Хим. технология. – 2008. – № 2. – С. 67–73.

Modern Methods of Synthesis of Energy- and Resource-Saving Processes and Apparatuses

S.I. Dvoretzky

Department "Technological Equipment and Food Technologies", TSTU

Moderne Methoden der Synthese der energie- und recoursesparenden Prozesse und Apparaten

Méthodes modernes de la synthèse des processus conservant de l'énergie et des ressources des processus et des appareils
