

**МЕТОДЫ ЦИФРОВИЗИРОВАННОГО ИНЖИНИРИНГА
РЕСУРСОЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ
БЕЗОПАСНЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

В. П. Мешалкин¹, В. В. Челноков¹, Д. А. Макаренков^{2,3}

Кафедра логистики и экономической информатики, vpmeshalkin@gmail.com;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический

университет имени Д. И. Менделеева» (1), г. Москва, Россия;

НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА (2), г. Москва, Россия;

кафедра «Процессы и аппараты химических технологий»,

ФГАОУ ВО «Московский политехнический университет» (3), г. Москва, Россия

Ключевые слова: инжиниринг; интенсификация; искусственный интеллект; логистика; надежность; оптимизация; ресурсоэнергосбережение; ресурсоэнергoeffektivность; химико-технологическая система; цепь поставок; цифровизация; экологическая безопасность.

Аннотация: Изложены типы инжиниринга химико-технологических систем. Даны краткие характеристики принципов и методов интенсификации ресурсоэнергосберегающих химико-технологических систем, а также принципов цифровизированного синтеза оптимальных ресурсоэнергосберегающих экологически безопасных химико-технологических систем, методов эколого-экономической оптимизации данных систем, цепей поставок и газотранспортных систем газоснабжения и нефтегазохимического комплекса.

Представлено описание научно-обоснованных способов ресурсоэнергосбережения в химико-технологических системах. Показана сущность основных концепций логистики ресурсоэнергосбережения в инжиниринге рассматриваемых систем и цепей поставок. Дано описание методов оптимизации показателей надежности, цифровизированного управления рисками и безопасностью при инжиниринге ресурсоэнергосберегающих химико-технологических систем.

**Типы инжиниринга ресурсоэнергосберегающих
химико-технологических систем**

Инжиниринг – это комплексная совокупность следующих видов организационно-управленческой и технико-экономической работы на всех этапах жизненного цикла (ЖЦ) химико-технологических систем (ХТС): предпроектные исследования, технико-экономическое обоснование; бизнес-планирование; управление проектированием; разработка проектов; строительство и пуск в эксплуатацию; управление эксплуатацией и техническим обслуживанием [1 – 5].

Для получения научно обоснованных результатов инжиниринга оптимальных ресурсоэнергосберегающих высоконадежных ХТС и цепей поставок нефтегазохимического комплекса (НГХК) необходимо широко использовать методы и алгоритмы теории анализа, оптимизации и синтеза ХТС; методы логистики ресурсоэнергосбережения и проектирования оптимальной организационно-функциональной структуры энергоресурсоэффективных цепей поставок (ЦП); математического моделирования и теории искусственного интеллекта; современные инструменты цифровизации «Индустрия 4.0» [5, 6].

В условиях цифровизированной экономики важнейшую роль играет компьютеризированный (автоматизированный), или цифровизированный, инжиниринг (Computer-Aided or Digital Engineering).

Развитие CALS-технологий позволяет создавать так называемые распределенные виртуальные производства изделий или цифровизированные (цифровые) производства (Digitalization or Digital Production (manufacture)), в которых процесс разработки спецификаций и различных проектно-конструкторских документов с полной информацией, необходимой для изготовления изделия на программно-управляемом технологическом оборудовании, может быть распределен во времени и пространстве между многими организационно автономными инжиниринговыми коллективами [5, 6].

Разработка крупного общего проекта, выполняемого различными коллективами с использованием CALS-технологий на основе принципа сквозного (или параллельного) проектирования, обеспечивает надежную передачу результатов одного этапа проектирования на следующий этап в едином информационном пространстве. При этом изменения, вносимые на любом этапе проектирования, одновременно отображаются во всех частях крупного проекта [5].

Принцип сквозного проектирования позволяет контролировать целостность проекта, отслеживать внесение различных изменений в проектную документацию и синхронизировать их в реальном режиме времени. CALS-технологии и принцип сквозного проектирования в настоящее время активно используются в инженерно-технологическом проектировании энергоресурсоэффективных производств и предприятий ХК и НГХК с широким применением методов и алгоритмов теории автоматизированного анализа, оптимизации и синтеза сложных ХТС, а также при организационно-функциональном проектировании и многопериодном планировании оптимальных энергоресурсоэффективных ЦП химического и нефтегазохимического комплекса, включая системы газоснабжения.

В условиях цифровизации экономики, глобализации и перехода к устойчивому развитию можно выделить пять основных теоретико-экспериментальных направлений инжиниринга ресурсоэнергосбережения экологически безопасных ХТС:

1) повышение производительности и селективности химических процессов за счет интенсификации технологических операций и системного многоуровневого подхода к управлению ХТС (например, нано- или микроструктура катализаторных материалов);

2) инжиниринг новых миниатюрных комбинированных единиц оборудования (ЕО), основанный на научных принципах и новых методах интенсификаций ХТС на основе использования многофункциональных комбинированных реакторов и высокоэффективных катализаторов, комбинированных процессов хеморектификации, хемокстракции и т.п.;

3) применение методов многомасштабного компьютерного моделирования любых ХТП и явлений в реальных ситуациях от молекулярного, микро-, макроуровня до производственного мегамасштаба;

4) применение методов цифровизации ХТС и ЦП. В настоящее время получены крупные научные результаты в области многомасштабного моделирования ХТП, концептуального инжиниринга энергоресурсоэффективных ХТС, логистического управления ХТП и ЦП, оптимизации ХТС [2 – 4];

5) инжиниринг ХТС с использованием методологии тройного инжиниринга (кратко – методология 3P-3E) «Processus Engineering (Инжиниринг молекул) – Process Engineering (инжиниринг ХТС) – Plant Engineering (Инжиниринг завода)» для получения необходимого конечного высококачественного продукта.

Краткая характеристика принципов и методов интенсификации ХТС

Применение принципов и методов интенсификации отдельных химико-технологических процессов и ХТС в целом вносят существенный интеллектуальный вклад в обеспечение устойчивого развития химической промышленности и представляют важное научное направление в инжиниринге ХТС [6 – 10].

Основные результаты применения способов интенсификации ХТП и ХТС для обеспечения инновационного устойчивого развития химической промышленности [7, 8]: повышение качества и эффективности использования сырья, снижение капитальных затрат, миниатюризация ЕО, снижение экологических и производственных рисков.

Интенсификация ХТС (*англ.* Process Intensification (PI)) позволяет успешно решать актуальные проблемы повышения экономической эффективности и экологической безопасности химической промышленности, что приводит к быстрому росту интереса к этой области научных исследований. Существуют различные подходы к синтезу высоко интенсивных энергоресурсоэффективных ХТС, большинство из которых основаны на использовании методов теории синтеза и оптимизации ХТС [9].

С позиций методологии системного подхода в химической технологии и теории инжиниринга энергоресурсоэффективных ХТС предложены четыре основных принципа микроуровневой интенсификации ХТП [7, 8]:

– максимизации эффективности внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий (пример: динамически изменяющиеся условия для достижения кинетических режимов с более высокой конверсией и селективностью).

– обеспечения всем молекулам, участвующим в химической реакции, одинаковых условий по времени и маршрутам взаимодействия (реакция в потоке идеального вытеснения с равномерным безградиентным нагревом).

– оптимизации движущей силы (ДС) процесса и максимизации удельной площади межфазной поверхности на каждом уровне взаимодействия в одном аппарате (увеличение площади поверхности массопередачи через микроканальные конструкции).

– максимизации синергетического эффекта от взаимодействия отдельных элементарных явлений или процессов, создание комбинированных (или интегрированных), ХТП (хемодистилляция, мембранная абсорбция), осуществляемых в многофункциональных реакторах.

На молекулярном уровне для интенсификации ХТП можно использовать следующие способы изменения режимов проведения каталитических реакций: модификация маршрута синтеза, химической кинетики, топологической структуры носителей катализатора (формо-селективные структуры, функционализация поверхности, оптимальное распределения радиусов пор и связности пор). Все эти способы интенсификации на микроуровне ХТС тесно связаны с катализом.

При химических реакциях одинаковые условия по взаимодействию молекул могут быть достигнуты, например, с применением статических смесителей, которые обеспечивают для массообмена почти идеальный поршневой поток с очень интенсивным перемешиванием и повышением специфической межфазной поверхности. Структурированные упаковки в реакторах, такие как монолиты, сетки, пены и различные конструкции микросмесителей, могут улучшить процессы местного перемешивания.

Научно обоснованные способы ресурсоэнергосбережения в ХТС

Разработка научно обоснованных решений по инжинирингу ресурсоэнергосберегающих экологически безопасных ХТС методологически базируется на применении следующих основных физико-химических и технологических способов энергоресурсосбережения в химическом комплексе [3 – 5]: наилучшего использования ДС химико-технологических процессов; наиболее полной переработки сырья; рационального использования топливно-энергетических ресурсов (ТЭР); наилучшего функционально-структурного использования аппаратов и машин; замкнутого водоснабжения; обеспечения и повышения надежности производства; рациональной пространственной компоновки производства; оптимизации технологических режимов ХТП и ХТС; оптимального иерархического цифровизованного управления ХТС, предприятиями и ЦП химического комплекса и НГХК.

Способ наилучшего использования ДС химико-технологических процессов – это основополагающий способ энергоресурсосбережения, принципиально позволяющий значительно повышать степень переработки материальных ресурсов, резко снижать потери сырья, ТЭР, а также существенно сокращать удельные затраты конструкционных материалов при производстве химической продукции. Все другие способы энергоресурсосбережения в химической индустрии, в частности, способы наиболее полной переработки сырья и рационального использования ТЭР, направлены на всестороннее обеспечение и реализацию данного способа [3 – 5].

При разработке научно обоснованных способов и приемов ресурсоэнергосбережения в ХТС и методов интенсификации ХТС необходимо широко использовать принципы «зеленой» химии и современные методы адаптивного цифровизованного управления робото-киберфизическими системами [3 – 5].

Принципы цифровизованного синтеза оптимальных ресурсоэнергоэффективных экологически безопасных ХТС

В настоящее время применяются следующие принципы автоматизированного синтеза оптимальных энергоресурсоэффективных экологически безопасных ХТС, разработанные в начале 1980-х годов: декомпозиционно-поисковый, эвристическо-декомпозиционный, интегрально-гипотетический, эволюционный [1, 3].

Указанные принципы синтеза оптимальных ресурсоэнергоэффективных ХТС комплексно отражают эвристические, технологические и математические положения теории упорядоченного поиска оптимальных решений разнообразных исходных задач синтеза ресурсоэнергоэффективных ХТС [3 – 5].

Сущность основных концепций логистики ресурсоэнергосбережения

Важнейшими направлениями научных исследований в области логистики ресурсоэнергосбережения являются создание и применение методов [3, 6]:

- организации и управления проектированием инновационной продукции с оптимальной удельной ресурсоэнергоемкостью;

- организации и управления разработкой энергоресурсосберегающих производственных технологий и ХТС для выпуска инновационной высококачественной продукции;

- разработки экономически эффективной организационно-функциональной структуры (ОФС) энергоресурсосберегающих экологически безопасных («зеленых»), ЦП предприятий ХК и НГХК на основе глубокого изучения физико-химической сущности всех ХТП и использования стратегий логистики и методов теории оптимизации;

- организационно-управленческих методов, способов и средств снижения материало-, ресурсо- и энергоемкости продукции в промышленности и сфере услуг во всех звеньях ЦП «добыча сырья – транспортировка – складирование – материально-техническое обеспечение – производство – распределение продукции»;
- оптимального планирования и управления потребностями в материалах, сырье и ТЭР при производстве продукции;
- минимизации товарно-материальных запасов и разработки «бережливых» промышленных производств и ЦП;
- проектирования и управления оптимальными системами водопотребления на производстве; минимизации сточных вод и организации замкнутого водооборота на предприятиях;
- оптимального управления технологическими, экологическими и предпринимательскими рисками при проектировании и эксплуатации ЦП высококачественной продукции;
- разработки методологии организации переработки и управления движением обратных потоков отходов (отходопотоков), образующихся во всех звеньях «прямой» ЦП, и разработка оптимальной ОФС «обратной» ЦП;
- всеобщего управления качеством всех ХТП и бизнес-процессов, а также всех материалопотоков и отходопотоков во всех звеньях ЦП и всех видов продукции (изделий и услуг);
- интегрированного экономико-экологического управления предприятиями ЦП; компьютерной оценки воздействия на окружающую среду, как отдельных предприятий, так и цепей поставок в целом;
- стратегического и оперативно-тактического управления корпоративным сотрудничеством между всеми предприятиями, входящими в ЦП, на основе концепции «долевого разделения прибыли» (концепции «WIN – WIN» – «Моя прибыль – Твоя прибыль») для обеспечения устойчивого развития и конкурентоспособности ЦП в целом.

При решении научно-практических задач логистики ресурсоэнергосбережения необходимо широко использовать современные информационные CALS-технологии и применять следующие стандарты планирования: потребности в материалах (MRP), производственных ресурсов (MRP-II), ресурсов предприятий (ERP) и потребностей распределения (DRP); для проектирования оптимальных технологических схем ХТС – инструментальные программные комплексы CALS-, CASE- и CAPE-технологий [3, 6, 11, 12].

Методы эколого-экономической оптимизации ХТС, цепей поставок и газотранспортных систем НГХК

Проблема эколого-экономической и организационно-структурной оптимизации цепей поставок НГХК математически сформулирована в работе [10] как задача смешанного целочисленного линейного программирования (СЦЛП) с учетом режима многопериодного функционирования ЦП. Для решения задачи СЦЛП использован комплекс программ Oracle SNO. В результате решения задачи обоснована экономическая целесообразность строительства в ЦП газового сырья нового завода по переработке широкой фракции легких углеводородов.

В последние годы появилось большое число научно-технических разработок по оптимизации и сложных газотранспортных систем газоснабжения (ССГ) в НГХК, топливно-энергетическом комплексе, пищевой и фармацевтической промышленности с использованием различных математических моделей, учитывающих специфику и перспективы развития различных отраслей реального сектора экономики.

Необходимость решений проблемы охраны окружающей среды и обеспечения экологической безопасности ХТС в последнее время вызвали бурный рост публикаций по «зеленым» цепям поставок НГХК, включающим добычу природного газа (ПГ), его транспортировку, распределение и переработку в продукты с высокой добавленной стоимостью [11, 12].

Одна из первых статей по математическому моделированию и оптимальной организации цепей поставок ПГ с использованием методов СЦЛП относится к началу 1960-х годов [13], затем авторы предложили алгоритмы для решения все более сложных задач оптимизации ЦП и газотранспортных систем.

Один из первых алгоритмов последовательного квадратичного программирования для оптимизации ССГ предложен в работе [14]. В более поздних статьях авторы рассматривают оптимальное проектирование систем трубопроводов с использованием метода декомпозиции [15] и кусочно-линейной линеаризации в сочетании с методом линейного программирования [16]. Алгоритм Лагранжа для решения задачи оптимизации использован в [17], а применение методов целочисленного линейного программирования представлено в [19]. В работе [20] авторы предложили алгоритм для одновременной оптимизации процессов добычи и транспортировки нефти и газа, то есть рассмотрели всю ЦП природного углеводородного сырья. Для оптимального управления в реальном времени подводными трубопроводами разработана оригинальная упрощенная компьютерная модель нестационарного газового потока в протяженном многослойно-изолированном подводном газопроводе высокого давления [21].

Методы оптимизации показателей надежности, цифровизированного управления рисками и безопасностью

В решении задач инжиниринга ресурсоэнергосберегающих экологически безопасных ХТС принципиальное значение имеет применение научно обоснованных комплексных методов как обеспечения оптимальных показателей надежности и технологической безопасности ХТС и газотранспортных систем [22], так и цифровизированного управления и минимизации различного вида рисков производств и цепей поставок НГХК [23].

Развиты теоретические основы анализа риска и цифровизированного управления безопасностью ХТС. Предложены логико-информационные, логические и вероятностные модели анализа и оценки риска возникновения аварий для различных классов объектов НГХК. Сформулирована формализованная постановка задач управления безопасностью ХТС и разработаны производственные правила принятия решений по оперативному управлению безопасностью ХТС на основе предотвращения возникновения отказов и аварийных ситуаций на ХТС [22]. Развита методика цифровизированного управления безопасностью ХТС с использованием современных программно-информационных инструментов, методов системного анализа ХТС, методов и принципов создания интеллектуальных интегрированных АСУ безопасностью производств НГХК [24].

Предложено использовать системный подход к решению проблемы управления безопасным обращением с химической продукцией на всех стадиях ее жизненного цикла и по всей ЦП предприятий НГХК. Разработана функциональная структура информационно-аналитической системы управления безопасным обращением с химической продукцией, показан алгоритм классификации видов опасностей химической продукции в условиях неопределенности [25].

Заключение

В настоящее время актуальными приоритетными направлениями научных исследований по цифровизированному инжинирингу ресурсоэнергоэффективных химико-технологических систем, в соответствии с решениями XXI Менделеевского съезда (2019 г., г. Санкт-Петербург, Россия) в условиях промышленной революции «Индустрия 4.0» и с учетом концепции конвергенции «нано-био-информационно-когнитивно-социальных» технологий, являются, прежде всего, следующие приоритетные фундаментальные и прикладные НИР в области инжиниринга ресурсоэнергоэффективных экологически безопасных ХТС и разработки методов:

- интенсификации, комбинирования и минитоаризации ХТП;
- цифровизированного инжиниринга и логистического управления эксплуатацией ресурсоэнергоэффективных экологически безопасных наукоемких химико-технологических систем и ЦП предприятий химического, нефтегазохимического, биохимического, фармацевтического и химико-металлургического комплексов;
- методов и способов рационального природопользования с широким применением возобновляемых природных ресурсов;
- комбинированной ресурсоэнергоэффективной экологически безопасной переработки промышленных и коммунальных бытовых отходов и стоков;
- многомасштабного компьютерного моделирования ХТП, структуры веществ и композиционных материалов;
- компьютерной оптимизации и автоматизированного синтеза ресурсоэнергоэффективных ХТС и ЦП;
- инжиниринга цифровизированных робото-кибернетических интеллектуальных производств и предприятий химического, нефтегазохимического, биохимического, фармацевтического и химико-металлургического комплексов;
- компьютерной оценки воздействия на ОС техногенных систем;
- оценки энергоресурсоэффективности этапов жизненного цикла продукции нефтегазохимического комплекса;
- минимизации экологических, производственных, предпринимательских и финансовых рисков для предприятий химического, нефтегазохимического, биохимического, фармацевтического и химико-металлургического комплексов.

Список литературы

1. Meshalkin, V. P. Energy-Saving Technology Performance and Efficiency Indexes / V. P. Meshalkin // Chemical Engineering Transactions. – 2009. – Vol. 18. – P. 953 – 958. doi: 10.3303/CET0918156
2. Grossmann, I. E. Process Systems Engineering: Academic and Industrial Perspectives / I. E. Grossmann, I. Harjunkoski // Computers & Chemical Engineering. – 2019. – Vol. 126. – P. 474 – 484. doi: 10.1016/j.compchemeng.2019.04.028
3. Мешалкин, В. П. Ресурсоэнергоэффективные методы энергообеспечения и минимизации отходов нефтеперерабатывающих производств: основы теории и наилучшие практические результаты / В. П. Мешалкин. – М. ; Генуя : Химия, 2010. – 393 с.
4. Мешалкин, В. П. Основы энергоресурсоэффективных экологически безопасных технологий нефтепереработки / В. П. Мешалкин, Л. Л. ТОВАЖНЯНСКИЙ, П. А. Капустенко. – Харьков : НТУ «Харьковский политехнический институт», 2011. – 616 с.
5. Мешалкин, В. П. Введение в инжиниринг энергоресурсосберегающих химико-технологических систем / В. П. Мешалкин. – М. : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. – 212 с.

6. Мешалкин, В. П. Логистика и управление конкурентоспособностью предприятий нефтехимического комплекса / В. П. Мешалкин, М. И. Дли. – М. : Химия, 2010. – 452 с.
7. Harmsen, J. Process Intensification in the Petrochemicals Industry: Drivers and Hurdles for Commercial Implementation / J. Harmsen // *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. – 2010. – Vol. 49, Issue 1. – P. 70 – 73. doi:10.1016/j.cep.2009.11.009
8. An Industrial View of Process Intensification / S. Becht, R. Franke, A. Geißelmann, H. A. Hahn // *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. – 2009. – Vol. 48, Issue 1. – P. 329 – 332. doi: 10.1016/j.cep.2008.04.012
9. Sitter, S. An Overview of Process Intensification Methods / S. Sitter, Q. Chen, I. E. Grossmann // *Current Opinion in Chemical Engineering*. – 2019. – Vol. 25. – P. 87 – 94. doi:10.1016/j.coche.2018.12.006
10. Dovi, M.-S. Mathematical Methods for the Multi-Criteria Optimization of Structure and Management of Energy Efficient Gas Supply Chains / M.-S. Dovi, V. P. Meshalkin // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. – 2017. – Vol. 51. – P. 1080 – 1091. doi: 10.1134/S0040579517060033
11. Мешалкин, В. П. Принципы промышленной логистики / В. П. Мешалкин, В. Дови, А. Марсанич. – М. : ПХТУ им. Д. И. Менделеева, 2002. – 722 с.
12. Мешалкин, В. П. Стратегия управления логистическими цепями химической продукции и устойчивое развитие / В. П. Мешалкин, В. Дови, А. Марсанич. – М. : ПХТУ им. Д. И. Менделеева, 2003. – 542 с.
13. Van Dam, J. Planning of Optimum Production from a Natural Gas Field / J. Van Dam // *Journal of the Institute of Petroleum*. – 1968. – Vol. 54. – P. 55 – 67.
14. Furey, B. P. A Sequential Quadratic Programming-Based Algorithm for Optimization of Gas Networks / B. P. Furey // *Automatica*. – 1993. – Vol. 29, No. 6. – P. 1439 – 1450. doi: 10.1016/0005-1098(93)90008-H
15. Heuristic Topological Decomposition Algorithm for Optimal Energy-Resource-Efficient Routing of Complex Process Pipeline Systems/ V. P. Meshalkin, T. N. Gartman, T. A. Kokhov, L. B. Korelstein // *Doklady Chemistry*. – 2018. – Vol. 482, No. 2. – P. 246 – 250. doi:10.1134/S0012500818100087
16. De Wolf, D. The Gas Transmission Problem Solved by an Extension of the Simplex Algorithm / D. De Wolf, Y. Smeers // *Management Science*. – 2000. – Vol. 46, No. 11. – P. 1454 – 1465. doi: 10.1287/mnsc.46.11.1454.12087
17. A Lagrangean Decomposition Heuristic for the Design and Planning of Offshore Hydrocarbon Field Infrastructures with Complex Economic Objectives / S. A. Van den Heever, I. E. Grossmann, S. Vasantharajan, K. A. Edwards // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. – 2001. – Vol. 40, No. 13. – P. 2857 – 2875. doi: 10.1021/ie000755e
18. Martin, A. Mixed Integer Models for the Stationary Case of Gas Network Optimization / A. Martin, M. Möller, S. Moritz // *Mathematical Programming*. – 2006. – Vol. 105. – P. 563 – 582. doi: 10.1007/s10107-005-0665-5
19. Computer-Aided Simulation Model for Natural Gas Pipeline Network System Operations / P. Nimmanonda, V. Uraikul, C. W. Chan, P. Tontiwachwuthikul // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. – 2004. – Vol. 43, No. 4. – P. 990 – 1002. doi: 10.1021/ie030268+
20. A Strategy for Simulation and Optimization of Gas and Oil Production / V. Barragán-Hernández, R. Vázquez-Román, L. Rosales-Marines, F. A. García-Sánchez // *Computers & Chemical Engineering*. – 2005. – Vol. 30, No. 2. – P. 215 – 227.
21. A Computer Model of the Nonstationary Gas Flow in a Long Multilayer-Insulated High-Pressure Subsea Gas Pipeline / V. P. Meshalkin, A. M. Chionov, A. S. Kazak, V. M. Aristov // *Doklady Chemistry*. – 2016. – Vol. 469, No. 2. – P. 241 – 244. doi: 10.1134/S0012500816080048

22. Zuverlässigkeit von Chemieanlagen / G. Gruhn, V. V. Kafarov, V. P. Meshalkin, W. Neumann. – Leipzig : VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1979. – 256 p.

23. Roy, A. Risk and Reliability Assessment in Chemical Process Industries Using Bayesian Methods / A. Roy, P. Srivastava, S. Sinha // *Reviews in Chemical Engineering*. – 2014. – Vol. 30, No. 5. – P. 479 – 499. doi: 10.1515/revce-2013-0043

24. Intelligent Decision Support System for Controlling the Atmospheric Air Quality / A. F. Egorov, T. V. Savitskaya, S. A. Levushkina, A. S. Levushkin // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. – 2010. – Vol. 44, No. 5. – P. 822 – 828. doi: 10.1134/S0040579510050313

25. Системный анализ химического реактора как объекта управления / В. Ю. Невиницын, А. Н. Лабутин, Г. В. Волкова, А. Н. Девятьяров // *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. – 2017. – Т. 60, Вып. 9. – С. 92 – 99. doi: 10.6060/tcct.2017609.5587

Methods of Digital Engineering of Resource Energy-Saving Environmentally Safe Chemical Process Systems

V. P. Meshalkin¹, V. V. Chelnokov¹, D. A. Makarenkov^{2,3}

Department of Logistics and Economic Informatics, vpmeshalkin@gmail.com;

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (1), Moscow;

Kurchatov Institute - IREA (2), Moscow;

Department of Processes and Apparatus of Chemical Technologies,

Moscow Polytechnic University (3), Moscow, Russia

Keywords: engineering; intensification; Artificial Intelligence; logistics; reliability; optimization; resource and energy saving; resource and energy efficiency; chemical technological system; supply chain; digitalization; environmental safety.

Abstract: The types of engineering of chemical-technological systems are outlined. Brief characteristics of the principles and methods of intensification of resource-energy-saving chemical-technological systems are given, as well as the principles of digital synthesis of optimal resource-energy-saving environmentally friendly chemical-technological systems, methods of ecological and economic optimization of these systems, supply chains and gas transmission systems of gas supply and petrochemical complex.

The description of scientifically grounded methods of resource and energy saving in chemical-technological systems is presented. The essence of the basic concepts of logistics of resource, energy and energy saving in the engineering of the considered systems and supply chains is shown. The description of methods for optimizing reliability indicators, digitalized risk and safety management in the engineering of resource-energy-saving chemical-technological systems is given.

References

1. Meshalkin V.P. Energy-Saving Technology Performance and Efficiency Indexes, *Chemical Engineering Transactions*, 2009, vol. 18, pp. 953-958, doi: 10.3303/CET0918156

2. Grossmann I.E., Harjunkski I. Process Systems Engineering: Academic and Industrial Perspectives, *Computers & Chemical Engineering*, 2019, vol. 126, pp. 474-484, doi: 10.1016/j.compchemeng.2019.04.028

3. Meshalkin V.P. *Resursoenergoeffektivnyye metody energoobespecheniya i minimizatsii otkhodov neftepererabatyvayushchikh proizvodstv: osnovy teorii i nailuchshiy prakticheskiye rezul'taty* [Resource-energy efficient methods of energy supply and minimization of waste of oil refining industries: theoretical foundations and the best practical results], Moscow; Genuya: Khimiya, 2010, 393 p. (In Russ.)
4. Meshalkin V.P., Tovazhnyanskiy L.L., Kapustenko P.A. *Osnovy energoresursoeffektivnykh ekologicheskikh bezopasnykh tekhnologiy neftepererabotki* [Fundamentals of energy-resource efficient environmentally safe oil refining technologies], Kharkov: NTU "Khar'kovskiy politekhnicheskii institut", 2011, 616 p. (In Russ.)
5. Meshalkin V.P. *Vvedeniye v inzhiniring energoresursosberegayushchikh khimiko-tekhnologicheskikh sistem* [Introduction to engineering of energy-resource-saving chemical-technological systems], Moscow: RKHTU im. D. I. Mendeleeva, 2020, 212 p. (In Russ.)
6. Meshalkin V.P., Dli M.I. *Logistika i upravleniye konkurentosposobnost'yu predpriyatiy neftekhimicheskogo kompleksa* [Logistics and management of competitiveness of enterprises of the petrochemical complex], Moscow: Khimiya, 2010, 452 p. (In Russ.)
7. Harmsen J. Process Intensification in the Petrochemicals Industry: Drivers and Hurdles for Commercial Implementation, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2010, vol. 49, issue 1, pp. 70-73, doi:10.1016/j.cep.2009.11.009
8. Becht S., Franke R., Geißelmann A., Hahn H.A. An Industrial View of Process Intensification, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2009, vol. 48, issue 1, pp. 329-332, doi: 10.1016/j.cep.2008.04.012
9. Sitter S., Chen Q., Grossmann I.E. An Overview of Process Intensification Methods, *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2019, vol. 25, pp. 87-94, doi:10.1016/j.coche.2018.12.006
10. Dovi M.-S., Meshalkin V.P. Mathematical Methods for the Multi-Criteria Optimization of Structure and Management of Energy Efficient Gas Supply Chains, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2017, vol. 51, pp. 1080-1091, doi: 10.1134/S0040579517060033
11. Meshalkin V.P., Dovi V., Marsanich A. *Printsipy promyshlennoy logistiki* [Principles of industrial logistics], Moscow: RKHTU im. D. I. Mendeleeva, 2002, 722 p.
12. Meshalkin V.P., Dovi V., Marsanich A. *Strategiya upravleniya logisticheskimi tsepyami khimicheskoy produktsii i ustoychivoye razvitiye* [Strategy of management of logistic chains of chemical products and sustainable development], Moscow: RKHTU im. D. I. Mendeleeva, 2003, 542 p. (In Russ.)
13. Van Dam J. Planning of Optimum Production from a Natural Gas Field, *Journal of the Institute of Petroleum*, 1968, vol. 54, pp. 55-67.
14. Furey B.P. A Sequential Quadratic Programming-Based Algorithm for Optimization of Gas Networks, *Automatica*, 1993, vol. 29, no. 6, pp. 1439-1450, doi: 10.1016/0005-1098(93)90008-H
15. Meshalkin V.P., Gartman T.N., Kokhov T.A., Korelstein L.B. Heuristic Topological Decomposition Algorithm for Optimal Energy-Resource-Efficient Routing of Complex Process Pipeline Systems, *Doklady Chemistry*, 2018, vol. 482, no. 2, pp. 246-250, doi:10.1134/S0012500818100087
16. De Wolf D., Smeers Y. The Gas Transmission Problem Solved by an Extension of the Simplex Algorithm, *Management Science*, 2000, vol. 46, no. 11, pp. 1454-1465, doi: 10.1287/mnsc.46.11.1454.12087

17. Van den Heever S.A., Grossmann I.E., Vasantharajan S., Edwards K.A. A Lagrangean Decomposition Heuristic for the Design and Planning of Offshore Hydrocarbon Field Infrastructures with Complex Economic Objectives, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2001, vol. 40, no. 13, pp. 2857-2875, doi: 10.1021/ie000755e
18. Martin A., Möller M., Moritz S. Mixed Integer Models for the Stationary Case of Gas Network Optimization, *Mathematical Programming*, 2006, vol. 105, pp. 563-582, doi: 10.1007/s10107-005-0665-5
19. Nimmanonda P., Uraikul V., Chan C.W., Tontiwachwuthikul P. Computer-Aided Simulation Model for Natural Gas Pipeline Network System Operations, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2004, vol. 43, no. 4, pp. 990-1002, doi: 10.1021/ie030268+
20. Barragán-Hernández V., Vázquez-Román R., Rosales-Marines L., García-Sánchez F.A. A Strategy for Simulation and Optimization of Gas and Oil Production, *Computers & Chemical Engineering*, 2005, vol. 30, no. 2, pp. 215-227.
21. Meshalkin V.P., Chionov A.M., Kazak A.S., Aristov V.M. A Computer Model of the Nonstationary Gas Flow in a Long Multilayer-Insulated High-Pressure Subsea Gas Pipeline, *Doklady Chemistry*, 2016, vol. 469, no. 2, pp. 241-244, doi: 10.1134/S0012500816080048
22. Gruhn G., Kafarov V.V., Meshalkin V.P., Neumann W. *Zuverlässigkeit von Chemieanlagen*, Leipzig: VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1979, 256 p.
23. Roy A., Srivastava P., Sinha S. Risk and Reliability Assessment in Chemical Process Industries Using Bayesian Methods, *Reviews in Chemical Engineering*, 2014, vol. 30, no. 5, pp. 479-499, doi: 10.1515/revce-2013-0043
24. Egorov A.F., Savitskaya T.V., Levushkina S.A., Levushkin A.S. Intelligent Decision Support System for Controlling the Atmospheric Air Quality, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2010, vol. 44, no. 5, pp. 822-828, doi: 10.1134/S0040579510050313
25. Nevinityn V.Yu., Labutin A.N., Volkova G.V., Devet'yarov A.N. [System analysis of a chemical reactor as a control object], *Izvestiya vuzov. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya* [Izvestiya vuzov. Chemistry and chemical technology], 2017, vol. 60, issue 9, pp. 92-99, doi: 10.6060/tcct.2017609.5587 (In Russ., abstract in Eng.)

Methoden des digitalisierten Engineering der ressourcensparenden umweltfreundlichen chemisch-technologischen Systeme

Zusammenfassung: Es sind die Arten von Engineering chemisch-technischer Systeme dargelegt. Gegeben sind Kurzcharakteristik der Prinzipien und Methoden der Intensivierung ressourcenenergiesparender chemisch-technischer Systeme, sowie der Prinzipien der digitalen Synthese optimaler ressourcen-energiesparender umweltschonender chemisch-technischer Systeme, Methoden zu der ökologischen und ökonomischen Optimierung der Angaben der Systeme, Lieferketten und Gastransportsysteme der Gasversorgung und des petrochemischen Komplexes.

Präsentiert ist die Beschreibung der wissenschaftlich fundierten Methoden der Ressourcen- und Energieeinsparung in chemisch-technischen Systemen. Es ist die Essenz der Grundkonzepte der Logistik der Ressourcen-, Energie- und Energieeinsparung im Engineering der betrachteten Systeme und Lieferketten aufgezeigt. Es sind Methoden zur Optimierung von Zuverlässigkeitskennzahlen, digitalisiertem Risiko- und Sicherheitsmanagement beim Engineering der ressourcenenergiesparenden chemisch-technischen Systeme beschrieben.

Méthodes de l'ingénierie numérique pour des systèmes chimiques et technologiques respectueux de l'environnement qui économisent de l'énergie

Résumé: Sont décrits les types d'ingénierie des systèmes chimiques et technologiques. Est donnée une brève description des principes et des méthodes de l'intensification des systèmes chimiques et technologiques conservant de l'énergie, ainsi que les principes de de la synthèse informatique des systèmes chimiques et technologiques optimaux conservant de l'énergie, respectueux de l'environnement, des méthodes de l'optimisation des systèmes de données, des circuits d'approvisionnement et de transport de gaz et du complexe chimique de gaz et de pétrole.

Est présentée une description des moyens scientifiquement fondés pour économiser de l'énergie dans les systèmes chimiques et technologiques. Est illustrée l'essence des concepts de base de la logistique de la conservation des ressources de l'énergie dans l'ingénierie des systèmes et des chaînes d'approvisionnement examinés. Sont décrites les méthodes de l'optimisation de la fiabilité, de la gestion numérique des risques et de la sécurité pour l'ingénierie de systèmes chimiques et technologiques économisant de l'énergie.

Авторы: *Мешалкин Валерий Павлович* – доктор технических наук, академик РАН, профессор кафедры логистики и экономической информатики; *Челноков Виталий Вячеславович* – доктор технических наук, профессор кафедры логистики и экономической информатики, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», г. Москва; *Макаренков Дмитрий Анатольевич* – доктор технических наук, доцент, заместитель директора по науке, НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА; доцент кафедры «Процессы и аппараты химических технологий», ФГАОУ ВО «Московский политехнический университет», г. Москва, Россия.

Рецензент: *Гатапова Наталья Цибиковна* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Технологические процессы, аппараты и технологическая безопасность», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.