

Второй фронт ХТС

Анализ гибкости — новый этап в компьютерном моделировании химико-технологических систем



Юрий Волин, к.т.н., вед. науч. сотр. ГНЦ НИФХИ им. Л. Я. Карпова
Геннадий Островский, д.т.н., профессор ГНЦ НИФХИ им. Л. Я. Карпова

Компьютерное моделирование химико-технологических систем (ХТС) к настоящему времени полностью доказало свою актуальность и перспективность. С его помощью удается повысить качество управления ХТС и эффективность работы технологической системы. Но особенно большое значение компьютерное моделирование имеет для сокращения сроков проектирования. Можно выделить два этапа в прошлом компьютерного моделирования ХТС, а сейчас мы находимся в преддверии третьего.

Химико-технологическая система, как правило, имеет рециклы, ее структура является замкнутой. Поэтому расчет материальных и тепловых балансов, без которых не может обойтись ни одно проектирование новой ХТС, сводится к решению системы нелинейных уравнений и представляет из себя сложную, весьма трудоемкую итерационную процедуру.

Четыре финалиста

Первый этап компьютерного моделирования был связан с переводом расчета материальных и тепловых балансов ХТС с ручного на компьютерное. Этот этап начался в 1958 г. с появлением первой моделирующей системы Flexible Flowsheet, и бурное развитие его шло на протяжении 60-70-х гг. Тогда была выработана общая концепция универсальной моделирующей программы (УМП) для моделирования ХТС, состоящей из 4

частей:

- организующей программы,
- библиотеки модулей для расчета химико-технологических аппаратов,
- банка физико-химических свойств,
- библиотеки математических модулей и создано несколько десятков УМП: Flexible Flowsheet, Cheops, Chevron, Sreed-Up, Maccsim, Network67, Chess, Pacer 245, Flowtran, Flowpack, Process и др.

Ряд программ для моделирования ХТС был создан в странах-членах СЭВ, причем особенно значительные работы проводились в СССР. В Советском Союзе было разработано несколько моделирующих программ: РСС и РОСС (НИФХИ им. Л. Я. Карпова), АСТР и БАСТР (ГИАП), НЕФТЕХИМ (ВНИ ПИНЕФТЬ), САМХТС (НИУИФ), SYNSYS-78 (МХТИ им. Д. И. Менделеева) и др.

Настоящий расцвет компьютерного моделирования начался с появлением персональных компьютеров. К этому времени

в результате длительного процесса из общего числа выделились четыре УМП, которые заняли лидирующее положение в мире: **Aspen Plus, Hysys, ChemCad и Pro/II.**

Организующая программа

Организующая программа — общий диспетчер ХТС. Одной из важнейших функций организующей программы является структурный анализ, цель которого — получить оптимальный порядок аппаратов при расчете ХТС.

Указанные УМП обладают большими библиотеками технологических модулей, обширными банками физико-химических свойств и удобным для пользователя интерфейсом. Их широко используют при проектировании новых ХТС и при реконструкции действующих. При этом можно отметить как общую тенденцию стремление переходить на использование в расчетах все более и более сложных и, соответственно, более адекватных математических моделей технологических аппаратов, с чем упомянутые УМП успешно справляются.

В России к началу 90-х годов был создан крупный научный и программный задел в отношении УМП (включая успехи в структурном анализе, разработке алгоритмов расчета материальных и тепловых балансов, алгоритмов оптимизации и расчета чувствительности), но экономические трудности переходного периода стали непреодолимым препятствием на пути его использования и развития. Пожалуй, в настоящее время продолжает функционировать только система «Комфорт» (во ВНИИГАЗе), с

применением к расчету процессов нефтепереработки. Все другие организации и предприятия в России, а также учебные институты используют для расчетов в качестве УМП одну из программ Aspen Plus, Hysys, ChemCad или Pro/II.

В целом в мировой практике за 60–80 годы был накоплен громадный опыт использования УМП для расчета стационарных (а также, в меньшей степени, и динамических) режимов ХТС, который развеял все сомнения в эффективности такого использования. В инжиниринговых компаниях, занимающихся проектированием химических процессов, проектирование без использования УМП в настоящее время просто не применяется. Но на определенном этапе совершенствования УМП было осознано, что

наибольшие возможности компьютерного моделирования химико-технологических систем связаны не с передачей компьютеру традиционных для проектировщиков функций по расчету материальных и тепловых балансов, а с реализацией с помощью компьютера новых функций, прежде всего — функции оптимизации.

Под оптимизацией понимается достижение наилучших показателей (например, прибыли или приведенных затрат) при выполнении всех требуемых ограничений. Последние могут быть технологическими, экономическими, экологическими и регламентными. Например, ограничения по производительности ХТС, по качеству продукта, по выбросам в атмосферу и др. Оптимизация возможна как на этапе эксплуатации ХТС, так и на этапе проектирования. Особенно большой эффект дает оптимизация, рассчитанная на этапе проектирования.

Начало второго этапа в развитии компьютерного моделирования можно условно отнести ко второй половине 80-х годов, когда в течение короткого времени произошел переход к персональным

компьютерам и появились первые прототипы четырех вышеперечисленных УМП. В эти УМП были введены оптимизационные процедуры, и они стали применяться не только для расчета отдельных вариантов, но и для оптимизации ХТС в статике. Но все же, вплоть до настоящего времени, УМП гораздо чаще применяются в своей первой функции — для расчета материальных и тепловых балансов с использованием наиболее полных и совершенных модулей для расчета аппаратов и банка физико-химических свойств, снабженного данными, отвечающими последним достижениям. Причина здесь — и в значительно большей математической трудности оптимизационного расчета по сравнению с балансовым, и в непривычности функции оптимизации для проектировщиков. Но главное и принципиальное затруднение связано с частичной неопределенностью информации, которой мы располагаем, когда должны решать задачу оптимизации. Разработка именно этой проблемы обещает ученым и производителям очередной прорыв в моделировании и повышении эффективности химического производства.

Неопределенность — главное препятствие и точка роста

Неопределенность практически всегда имеет место на этапе проектирования и часто — на этапе эксплуатации ХТС. Наличие неопределенности информации требует как новых математических постановок задач, так и новых методов их решения.

Неопределенности бывают 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 нам известны лишь с точностью до некоторого интервала, как, например, некоторые коэффициенты в кинетических уравнениях или уравнениях тепло- и массопереноса.

Нельзя сказать, что до сих пор при решении задачи оптимизации ХТС неопределенности просто игнорировались. Они учитывались, но приближенным и волевым способом, который состоит в следующем. Неопределенным переменным на основе опыта и интуиции присваиваются некоторые «номинальные» (обычно — средние) значения. Решается задача оптимизации с этими

Словарь сокращений

ХТС — химико-технологическая система, главный двигатель современного химического производства.

УМП — универсальная моделирующая программа, используется во всех химико-технологических системах.

НЛП — нелинейное программирование, раздел математики, связанный с методами решения оптимизационных задач (алгоритмы НЛП используются в моделирующих программах для оптимизации ХТС).

УОП — универсальные оптимизационные программы, с помощью которых принято решать задачи нелинейного программирования.

значениями в традиционной постановке, в результате чего определяются номинальные оптимальные величины параметров оборудования (длины и диаметра реактора, поверхностей теплообмена в теплообменниках, числа тарелок в ректификационных колоннах и т. п.). После этого с учетом знаний о процессе, опять же волевым способом, вводят так называемые «запасы» и принимают для проектирования величины параметров оборудования, полученные как произведение номинальных оптимальных величин и запасов. Недостатки данного подхода очевидны. Подход не гарантирует ни оптимальности полученного решения, ни того, что ограничения будут выполнены во время эксплуатации процесса. Если запасы окажутся слишком малы, то ограничения будут нарушены, если слишком большими, то будет иметь место перерасход затрат.

Большим достижением современной науки явилась разработка в начале 80-х годов подхода, при котором неопределенность в параметрах процесса учитывается в самой постановке оптимизационной задачи. В дальнейшем постановка задачи была уточнена и расширена, и поиски наиболее адекватной постановки ведутся до сих пор. Учет неопределенности вводится как в критерий оптимизации, так и в ограничения. Появилось новое научное направление, получившее название «анализ гибкости». Основная цель такого анализа — получение «гибкой» химико-технологической системы, оптимальной по сравнению с другими возможными вариантами. Гибкая ХТС сохраняет работоспособность при любых значениях параметров с неопределенностью из области возможных значений.

стр. 52 ►

Эффект применения

Подчеркнем важность решения оптимизационных задач для химической технологии. Для крупнотоннажной ХТС экономия затрат даже на 2–3 % может означать реально значительную величину. Кроме того (и, возможно, это самое главное), сокращение затрат — энергетических расходов и металлоемкости оборудования — означает увеличение конкурентоспособности, что в условиях рыночной экономики может иметь решающее значение.

◀ стр. 51

В настоящее время проблеме анализа гибкости ХТС уделяется большое внимание, потому что без учета неопределенности в большинстве случаев невозможна реальная, практически полезная оптимизация. За рубежом анализом гибкости (flexibility analysis) занимается ряд научных школ, а в России эти работы ведутся, как минимум, в двух местах — в НИФХИ им. Л. Я. Карпова и в Тамбовском техническом университете.

Намечены перспективные направления дальнейших исследований и разработок: оптимизация ХТС в условиях неопределенности исходной информации с учетом устойчивости стационарного режима; оптимальный синтез, когда выбору подлежат не только размеры аппаратов, но и сама структура ХТС; и оптимизация ХТС с одновременным (оптимальным) выбором системы управления.

Задачи обычной оптимизации на порядок сложнее задач расчета материальных и тепловых балансов, а задача оптимизации с неопределенностью — на порядок сложнее обычной оптимизационной задачи. На данном этапе требуется еще большая теоретическая работа и разработка на ее основе новых оп-

тимизационных алгоритмов. Поэтому работы по анализу гибкости носят пока научно-исследовательский характер. Однако некоторые практические задачи могли бы решаться уже сейчас, до того, как появятся полноценные компьютерные программы оптимизации с учетом неопределенности (создание которых может потребовать много времени), помогая теоретическим разработкам и способствуя накоплению практического опыта. Остановимся на этом вопросе более подробно.

Приближенные версии алгоритмов оптимизации с неопределенностью (легко просматривающиеся) требуют сравнительно простых программных доработок — надстроек над программами для обычной оптимизации. Не гарантируя стопроцентно ни гибкости ХТС, ни ее оптимальности, они все же во многих случаях могли бы давать неплохие решения, во всяком случае, существенно лучшие, чем те, которые принимаются без них. Но с помощью каких программных средств возможно сейчас реализовать эти алгоритмы? Исследователи, занимающиеся анализом гибкости, создают свои собственные программы, но пользователю они пока недоступны.

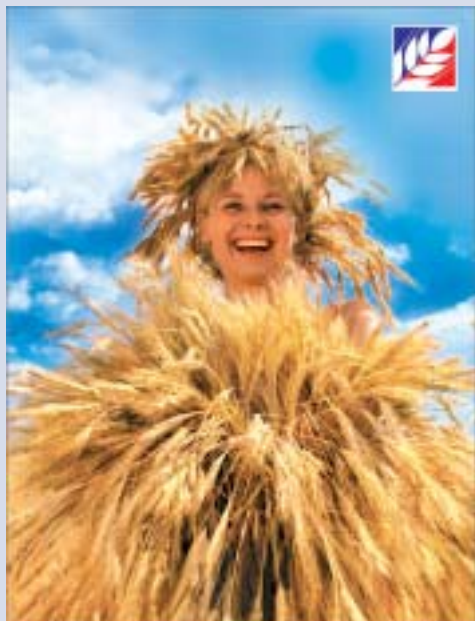
Незаполненная ниша

Основными программными средствами, используемыми в настоящее время для решения задач моделирования ХТС, являются упомянутые ранее УМП: Aspen Plus, Hysys, ChemCad и Pro/II. Это мощные программные комплексы, оснащенные богатыми библиотеками для расчета технологического оборудования и физико-химических свойств. Но, как известно, «наши недостатки есть продолжение наших достоинств». Эти УМП дороги и громоздки, трудны в освоении и жестки. Часто пользователю просто не нужны многие из тех средств, которыми они обладают, но зато нужны те, которыми они не обладают. При этом узким местом в библиотеке модулей для расчета аппаратов являются реакторы, а ведь реактор — «сердце» ХТС. Многие пользователи имеют свои программы расчета реакторов (иногда и других аппаратов), которые дают лучшие результаты, чем стандартные модули. Это же относится и к банкам физико-химических свойств. Но, хотя упомянутые УМП считаются открытыми, любое добавление собственных процедур в них не просто. И, конечно, речь может идти лишь о сравнительно небольших и

РОССИЙСКАЯ АГРОПРОМЫШЛЕННАЯ ВЫСТАВКА

2002

Выставка проводится в соответствии с Распоряжением Правительства Российской Федерации № 536-р от 11 апреля 2000 г.



12-16 октября 2002

МОСКВА Всероссийский Выставочный Центр
ПАВИЛЬОНЫ: 20, 26, 32, 55, 57 и открытая площадка

ОРГАНИЗАТОРЫ:

- Министерство сельского хозяйства Российской Федерации
- Российская академия сельскохозяйственных наук
- Всероссийский Выставочный Центр
- ЗАО «ПИК «Максима»

ОФИЦИАЛЬНАЯ ПОДДЕРЖКА:

- Министерство экономического развития и торговли Российской Федерации
- Государственный комитет Российской Федерации по стандартизации и метрологии
- Правительство Москвы
- Администрация Московской области
- Агропромышленный союз России
- Ассоциация крестьянских (фермерских) хозяйств и сельскохозяйственных кооперативов России
- Ассоциация отраслевых Союзов АПК

ТЕМАТИКА ВЫСТАВКИ:

продукты питания, оборудование для переработки и производства продовольствия, растениеводство, цветы, животноводство, птицеводство, ветеринария, корма и кормовые добавки, химизация, садоводство и огородничество, ландшафтное озеленение, сельскохозяйственная техника и оборудование, мелиорация, экология, строительство, социальное развитие села, транспортировка, хранение, тара и упаковка, холодильное оборудование и др.

МЕРОПРИЯТИЯ В РАМКАХ ВЫСТАВКИ:

международный форум, семинары, конференции, конкурсы более чем по 20 номинациям, презентации, Дни регионов, сельскохозяйственная ярмарка, аукцион-продажа семян, удобрений, мини-техники.

Более подробную информацию Вы можете получить в ЗАО «ПИК «МАКСИМА»: Тел.: (095) 748 3775, 748 3776, 748 3772, 748 3770, 124 7760
Факс: (095) 124 7060 E-mail: appmax@dol.ru; maxima@maxima-expo.ru Internet: www.maxima-expo.ru

MAXIMA
МЕЖДУНАРОДНЫЕ ВЫСТАВКИ

структурно простых добавлениях (о пополнении библиотеки технологических модулей, например, но не о вмешательстве в организующую программу).

Упомянутые УМП содержат математические модули для решения задачи нелинейного программирования, НЛП (обычной оптимизационной задачи). По крайней мере, Aspen Plus и Pro/II имеют математические программы, основанные на методе последовательного квадратичного программирования, который занимает сейчас лидирующее положение среди других методов. В последнее время начинает завоевывать популярность и успешно конкурировать с методом последовательного квадратичного программирования метод внутренней точки. Вероятно, этот метод в скором времени тоже будет введен в УМП. Оба метода относятся к методам решения задачи оптимизации в традиционной постановке, и какой бы метод мы ни выбрали, надстройка над оптимизационным модулем в этих программах (даже самая простая) для пользователя крайне затруднительна. Кроме того, в существующих УМП имеются и другие недостатки, о чем речь пойдет ниже.

Задачу нелинейного программирования на практике принято решать с помощью универсальных оптимизационных программ (УОП). Таковыми являются программные пакеты GAMS, NAG, MINOS, NLPQL и др. Некоторые из этих программ (GAMS и NAG, например) получили широкое распространение. Программы УОП, являясь более компактными и простыми в обращении по сравнению с пакетами Aspen Plus и др., позволяют реализовать (после некоторой доработки) упрощенные приближенные алгоритмы для оптимизации с учетом неопределенностей, но препятствием для их эффективного применения может стать их слишком большая универсальность, не учитывающая особенности задач химической технологии. Механическое использование УОП для решения оптимизационных задач часто оказывается далеко не лучшим, а учет особенностей конкретной задачи при решении ее с помощью УОП либо затруднителен и трудоемок, либо вообще невозможен.

Одной из важнейших особенностей задач оптимизации ХТС (и многих задач из других прикладных областей) является их многоуровневый характер. В модели ХТС естественным образом выделяются два уровня: *уровень системы* (верхний уровень) и *уровень отдельных аппаратов* (нижний уровень). В моделях отдельных аппаратов тоже могут быть свои подуровни. Соответственно, алгоритм расчета ХТС можно сформулиро-

вать в виде двухуровневой процедуры: на верхнем уровне производится расчет материального и теплового баланса для ХТС в целом, а на нижнем — рассчитываются отдельные аппараты. В алгоритме оптимизации тогда будет 3 уровня: верхний уровень — уровень работы алгоритма НЛП и два других — расчетные уровни. Такой подход используется в УМП ChemCad, Aspen Plus и др. (и он отсутствует в УОП). Но реализация многоуровневого подхода в существующих УМП основана на простом объединении алгоритмов уровней и не учитывает всех достижений теории, что может привести к существенному увеличению вычислительных затрат и снижению на-

дежности расчета. Многие особенности и возможности многоуровневого подхода в УМП не реализованы.

Другими важными особенностями задач оптимизации ХТС являются наличие так называемых скрытых ограничений и возможная множественность стационарных режимов. Не вдаваясь в детали, отметим, что первые обусловлены тем, что математическая модель химико-технологического процесса обычно справедлива в ограниченных пределах, вне которых она теряет физический смысл и вызывает хорошо известные сбои в счете.

С учетом вышесказанного можно сформулировать следующую важную для практики проблему. В настоящее время существует незаполненная ниша, связанная с потребностью в простых, гибких и недорогих УМП для химической промышленности, с облегченным кругом обычных возможностей и с широким спектром возможностей для оптимизации, которые давали бы возможность квалифицированному пользователю, имеющему определенный программно-технологический задел, решать сложные оптимизационные задачи, используя эффективные алгоритмы, учитывающие особенности конкретной ХТС. УМП, заполнившие эту нишу, явились бы дополнением к существующим большим системам (типа ChemCad и Aspen Plus), наподобие того, как мелкий и средний бизнес дополняют крупный. И в эти УМП было бы сравнительно несложно затем ввести простые приближенные алгоритмы для оптимизации с неопределенностью.

Будущее определено

Химико-технологические системы, без которых не существует современного химического производства, стоят в начале третьего этапа. Реализация этого этапа развития (на котором широкое распространение получит решение оптимизационных задач) выведет компьютерное моделирование ХТС на тот уровень, когда с его помощью можно будет проектировать значительно более экономичные и надежные химико-технологические системы и более эффективно управлять работой действующих.

Одновременно с этим изменятся наше понимание ХТС — как системы, в которой множество компонент находится во взаимной связи и влияют на работу друг друга, а также общая культура труда проектировщика. Но для перехода на этот этап, сулящий очередной скачок производительности труда, необходимо проведение большой исследовательской работы и совместные усилия теории и практики. ■

Ropud

Программа Ropud, разработанная в последние годы в российском НИФХИ им. Л. Я. Карпова, обладает расширенными возможностями для оптимизации, позволяющими учесть некоторые особенности задач химической технологии. В частности, она позволяет реализовывать различные декомпозиционные стратегии, разбивающие общую задачу на ряд более простых. С помощью Ropud была успешно решена задача оптимизации процесса получения перекиси водорода. Попытка решения данной задачи с использованием стандартных оптимизационных процедур, как и предполагалось, натолкнулась на трудности, связанные с большой нелинейностью математической модели, наличием скрытых ограничений и множественностью стационарных состояний при некоторых значениях параметров задачи. Применение многоуровневого подхода и двухэтапного расчета (первый этап — расчет по уравнениям динамики, второй — по уравнениям статики) позволило преодолеть трудности: программно задача свелась к добавлению в программу Ropud одного сравнительно небольшого надстроечного модуля. Однако программа Ropud, являясь универсальной оптимизационной программой (УОП), не дает полного решения проблемы. В данном случае пользователь должен целиком взять на себя составление технологических программных модулей и модулей расчета физико-химических свойств (либо заимствовать их из другого источника), а также выполнить необходимый структурный анализ, что под силу совсем немногим специалистам в отдельно взятой стране.