**Возможная схема этапов оптимизации ХТС**

**Введение**

Процессы химической технологии это сложные физико-химические процессы, протекающие как в пространстве, так и во времени. В них участвуют потоки энергии (тепло и холод) и многофазные и многокомпонентные потоки вещества.

При разработке схемы конкретного процесса химической технологии следует, путем оптимизации, найти наилучший (по принятому критерию) вариант решения из конечного множества альтернативных. Такой путь выбора варианта схемы часто называют синтезом схем. Синтезу схем предшествует физико-химическое исследование исходной смеси, проводимое с целью выявления ограничений на получение требуемых (конечных) продуктов. Такое исследование можно назвать предсинтезом схем. Предсинтез схем позволяет в большинстве случаев как существенно снизить размерность оптимизируемого множества альтернативных вариантов, так и на самом начальном уровне отбросить нереализующиеся варианты при синтезе оптимальных схем. Еще одним этапом разработки схемы химико-технологического процесса (ХТП) является выбор оптимальных вариантов конструкции и функционирования конкретных аппаратов и узлов схемы.

Разработку схемы химико-технологического процесса можно рассматривать как иерархическую задачу, разделив ее на несколько уровней иерархии. При этом результаты более низкого уровня определяют результаты на более высоком уровне, а при неоднозначности решения на более высоком уровне возможен возврат на более низкий. Каждый уровень иерархии может состоять из нескольких подуровней связанных или не связанных между собой обратными связями.

Целью настоящего курса по оптимизации построения ХТП является не столько научить набору стандартных решений, сколько научить думать, анализировать задачу, уметь искать решения и оценивать их результаты. Что это значит в наших конкретных обстоятельствах? Имея информацию о цели, исходных веществах, наборе ограничений, возможной совокупности воздействий на систему, сформулировать частные и общие критерии оптимизации и найти «лучший из возможных» вариантов.

1. **Общий анализ задачи оптимизации**

Этап 1 предполагает предварительный общий анализ задачи оптимизации: анализ возможных вариантов технологической топологии ХТС, выявления типа задачи оптимизации и т.п. В случае, если ставится задача оптимального выбора технологической схемы ХТС, последующие этапы должны рассматриваться применительно к каждому из альтернативных вариантов схемы.

1. **Определение критерия оптимизации**

Этап 2 исключительно важен, т.к. выбором глобального критерия оптимизации определяется возможность достижения поставленной цели оптимизации. При определении критерия оптимизации необходимо учитывать граничные условия по входным, выходным и управляющим параметрам системы. Существенными вопросами на этом этапе являются вопросы возможности введения локальных критериев оптимизации для отдельных элементов и подсистем.

1. **Выбор оптимизирующих или управляемых переменных и анализ их влияния на критерий оптимизации**

Этап 3. На этом этапе важно, с одной стороны, учесть все существенные для оптимизации переменные, а с другой стороны, исключить из рассмотрения несущественные переменные, мало влияющие на критерий оптимизации, так как сложность решения задачи в значительной степени определяется числом переменных, по которым производится оптимизация. При выборе оптимизирующих переменных необходимо учитывать, что во всех реальных вариантах на переменные накладываются различные ограничения. При помощи проведенного анализа нужно постараться исключить все ограничения, которые заведомо не будут достигаться в оптимальном режиме.

1. **Сопоставление математических моделей ХТС**

Этап 4 предназначен для установления в математической форме связи критерия оптимальности с управляемыми переменными, а также математической трактовки всех имеющихся ограничений. Иначе, получение математической формулировки задачи оптимизации.

1. **Выбор оптимальной стратегии исследования ХТС**
2. **Выбор метода оптимизации и оптимальный расчет.**

Этап 6 представляет собой математическую задачу нахождения экстремума глобального критерия Q в области изменений управляемых переменных, определяемой ограничениями системы. Сложность этого этапа обуславливается сложностью математических моделей отдельных элементов системы, сложностью ее технологической топологии и числом управляемых переменных.

Задача оптимального управления действующей ХТС, по сравнению с задачей оптимального проектирования, обладает рядом особенностей. При протекании в системе химико-технологических процессов, как правило, имеются изменяющиеся во времени неуправляемые переменные, которые можно учесть в математической модели только с помощью ее коэффициентов, находимых по результатам работы данной ХТС. Поэтому при оптимизации ХТС на стадии эксплуатации существенную роль приобретают вопросы корректировки математической модели ХТС. Корректировка должна проводиться всякий раз, когда изменяются значения неуправляемых переменных, если изменения происходят достаточно медленно (незначительные возмущения). Для частых и систематических возмущений вообще нет возможности подстраивать модель ХТС под каждое их мгновенное значение. В таком случае модель подстраивается под среднее значение этих возмущений, а сами возмущения принимают за шум, сильно затрудняющий задачу составления математической модели ХТС. Другим путем решения этой проблемы является моделирования системы для крайних значений возмущений и определение чувствительности системы (определение ее стабильности) при крайних значениях.

**Оптимизация элементов схемы и схемы ректификационного разделения в целом**

Этапы оптимизации мы будем рассматривать на примере схемы ректификационного разделения.

Разработку схемы ректификационного разделения, как и любого химико-технологического процесса, можно рассматривать как сложную иерархическую задачу, разделив ее на несколько уровней иерархии. При этом результаты, полученные на более низком уровне, определяют результаты на более высоком уровне, а при неоднозначности решения на более высоком уровне предусматривается возможность возврата на более низкий. Каждый уровень иерархии может состоять из нескольких подуровней связанных или не связанных между собой обратными связями.

Целью оптимизации схемы ректификационного разделения в целом является получение заданного вещества или группы веществ с заданными качественными параметрами (например, составом). На каждом уровне иерархии может быть сформулирован свой критерий оптимизации, будут действовать свои ограничения и своя система корректирующих воздействий, функционировать своя цель оптимизации.

На первом уровне иерархии, который условно можно назвать молекулярно-атомарным, определяются базисные физико-химические свойства подвергаемой разделению смеси. Для эффективного проведения предсинтеза и синтеза схем многокомпонентной ректификации сложных полиазеотропных смесей необходимо располагать качественной информацией об индивидуальных и групповых свойствах компонентов составляющих исходную смесь. На первом уровне иерархии можно условно выделить ряд подуровней. В начале определяются свойства чистых веществ: плотности, теплоты испарения, температуры кипения и плавления, дипольные моменты и некоторые другие необходимые величины. На следующем подуровне - параметры бинарных и многокомпонентных азеотропов, фазовое равновесие жидкость-пар. На третьем – фазовое равновесие жидкость-жидкость, теплоты смешения в бинарных и многокомпонентных системах. Данные для первого уровня иерархии могут быть получены экспериментально, путем поиска в первоисточниках, справочниках и банках данных, а также расчетным путем. Отметим, что задача данного уровня может решаться только при развитом взаимодействии экспериментальных и расчетных методов.

Цель функционирования на первом уровне иерархии получение качественной полной модели фазового равновесия в рассматриваемой поступившей на разделение многокомпонентной смеси, расширенной при необходимости данными для привлеченных разделяющих агентов.

На втором уровне иерархии - качественного анализа структуры - выявляются особенности структуры концентрационного пространства исходной разделяемой смеси, обуславливающие выбор схемы ректификации. На первом подуровне, по данным, полученным на предыдущем иерархическом уровне, определяются типы особых точек в N-компонентной системе и в подсистемах меньшей размерности, проверяется соблюдение в них правила азеотропии. На втором подуровне определяются внутренние связи и граничные особые точки областей непрерывной ректификации и разделяющих многообразий. Далее анализируется внутренняя структура фазовых диаграмм. Определяется наличие и ход соединяющих линий поля нод-ренод (с-линий); многообразий на которых соблюдается: 1) равенство единице коэффициентов относительной летучести (единичные α-многообразия), 2) равенство единице констант фазового равновесия (единичные К-многообразия); 3) разделяющие областей одинаковых направлений нод-ренод (ρ-многообразия) и некоторые другие. На этом же уровне, при необходимости, определяется принадлежность точки исходного состава той или иной области непрерывной ректификации. В результате на втором уровне иерархии устанавливаются структурные ограничения на получение возможных конечных продуктов в процессе непрерывной ректификации.

На третьем уровне иерархии - элементарного процесса разделения - устанавливается соответствие различных способов разделения возможным конечным продуктам. На первом подуровне третьего уровня определяется список продуктов получаемых посредством процесса непрерывной ректификации и рекомендуемые режимные параметры для каждого аппарата. На втором подуровне анализируется возможность использования специальных методов ректификации для расширения гаммы конечных продуктов либо выделения заданных.

На четвертом уровне иерархии - альтернативных схем - составляется список схем и продуктов, получаемых с помощью заданного набора процессов разделения. Выявление возможных вариантов последовательностей выделения конечных продуктов с учетом ограничений, налагаемых структурой концентрационного пространства, является последним этапом предсинтеза или первым этапом синтеза схем разделения многокомпонентных полиазеотропных смесей.

Существует несколько основных стратегий синтеза таких схем. Первая стратегия это направленный синтез по некоторым эвристическим правилам схемы, заранее считаемой оптимальной. Эвристический подход к синтезу схем наиболее прост и разработан ранее других. Вариантом такого подхода является, например, информационно-энтропийный, в соответствии с которым оптимальной схеме разделения отвечает максимум суммы информационных критериев разделительной способности всех ректификационных колонн. Эвристический подход в ряде случаев дает удовлетворительный результат, однако эвристики часто противоречат друг другу и в общем случае не обеспечивают оптимального решения.

Вторая стратегия это полный перебор всех возможных схем с последующим выбором оптимальной по принятому критерию. В качестве критерия предлагается использовать, например, суммарные энергетические затраты для всей схемы или комплексный критерий, сравнивающий: общее число ректификационных колонн, число получаемых чистых компонентов, число азеотропов. Использование стратегии полного перебора задача фактически неосуществимая на практике и к тому же не гарантирует нахождения нетривиальных вариантов схем.

Третья стратегия синтеза схем разделения является сочетанием первых двух. Из всех полученных на этапе предсинтеза схем выбираются, для дальнейшей оптимизации, только те, которые могут быть реализованы в технологически приемлемых условиях. Третья стратегия предполагает проводить, на промежуточном этапе, дискриминацию альтернативных схем на основе технологических ограничений.

Существует еще одна стратегия синтеза схем. В начале рассматриваются варианты разделения исходной смеси в режиме бесконечной разделительной способности (вариант граничных условий), затем при ректификации с конечной флегмой. Для промежуточных фракций, содержащих невыделенные продуктовые компоненты, рассматриваются возможности их получения в рамках имеющейся структуры фазовой диаграммы или с использованием разделяющих агентов и варьирования давления. Такую стратегию можно назвать сложной многокритериальной.

Весьма продуктивным является декомпозиционный подход к синтезу схем. При этом исходная задача сводится к некоторому числу задач меньшей размерности, для которых решение может быть найдено относительно легко. Здесь следует помнить, что при таком подходе глобальный оптимум может быть и не найден.

В реальной практике, как правило, для синтеза схемы разделения используется некая комбинированная стратегия, включающая в себя элементы всех приведенных выше. Выбор ее, каждый раз, определяется исходной смесью и поставленной целью разделения.

Кроме перечисленных выше уровней иерархии ХТ системы, в качестве отдельных уровней иерархии, можно выделить уровень составления материальных и тепловых балансов. Однако, в настоящем курсе его мы рассматривать не будем.

**Оптимизация на первом уровне иерархии**

Напомним, что на первом уровне иерархии, который условно можно назвать молекулярно-атомарным, определяются базисные физико-химические свойства подвергаемой разделению смеси. Цель функционирования на первом уровне иерархии получение качественной полной модели фазового равновесия в рассматриваемой поступившей на разделение многокомпонентной смеси. На этом уровне иерархии возникает множество задач локальной оптимизации

Как уже указывалось процессы, для которых влияние случайных возмущений велико называют стохастическими. Отметим, что, в этом случае, действие возмущающих параметров проявляется в том, что параметры состояния процесса при известной совокупности входных и управляющих параметров определяются неоднозначно. Исследование фазового равновесия и расчет параметров модели фазового равновесия являются ярким примером стохастических процессов. Для изучения стохастических процессов обычно используют математический аппарат теории вероятностей. С его помощью параметры состояния оцениваются в терминах математического ожидания, а возмущающие параметры характеризуются вероятностными законами распределения.

Оптимизация процесса определения параметров уравнений фазового равновесия и расчет самого фазового равновесия можно назвать параметрической оптимизацией. В качестве возмущающих параметров в данном случае можно рассматривать: разный исходный экспериментальный материал; разные уравнения, используемые для расчета фазового уравнения; разные целевые функции; разный вид параметров моделирующих уравнений;

Представим пример. Предположим, что для моделирования фазового равновесия жидкость-пар в бинарной системе А-В при 760 мм Hg представлены 1) несколько наборов экспериментальных данных; 2) несколько уравнений для расчета фазового равновесия; 3) два вида параметров моделирующих уравнений. Цель моделирования получение параметров модели фазового равновесия жидкость-пар. Имеется несколько основных целевых функций.