

Введение. Математическое моделирование технологических процессов – это процесс разработки модели реального технологического процесса, основанной на математических вычислениях, выявленных закономерностях или статистическом анализе, с целью изучения влияния параметров на процесс и его оптимизации. Технологическое моделирование химико-технологических процессов включает два основных метода расчета:

1. Sequential Modular (SM). Данный метод заключается в разделении технологической схемы на блоки, организации связи между ними и последовательном расчёте каждого блока.

2. Equation Oriented (EO) - это альтернативный метод расчёта моделей технологических процессов. Вместо того, чтобы решать последовательно каждый блок, в методе EO собираются вместе все уравнения модели и решаются одновременно.

Основная часть. Метод EO является подходом к моделированию и анализу динамических систем, в котором система представляется набором уравнений, описывающих взаимодействие между компонентами системы [2]. В отличие от других численных методов, позволяющих указывать поведение системы с помощью процедурной или последовательной логики, метод ориентированная на уравнения формулирует динамику системы как набор математических взаимосвязей.

В последние годы, множество исследований [1-2] подтверждали эффективность данного подхода в решении материальных балансов на ранних стадиях проектирования. Это позволяет моделировать и анализировать поведение системы во времени [2], что актуально для систем, сопряженных с распределённой системой контроля (Real-time optimization).

Метод ориентированный на уравнения имеет несколько преимуществ [2-4]:

1. Повышение эффективности численных методов: Уравнения могут быть структурированы с учетом специфики проблемы и ее разреженности.

2. Методы оптимизационной декомпозиции: EO-моделирование позволяет использовать мощные методы декомпозиции [3] (Лагранжа, дополнение Шура и т.д.), которые разбивают исходную задачу на более управляемые подзадачи.

3. Анализ чувствительности к снижению затрат: при использовании методов EO информация о чувствительности оптимального решения доступна как побочный продукт процедуры решения [3]; множители Куна-Таккера сообщают о линеаризованной чувствительности целевой функции по отношению к возмущениям в каждой границе и ограничении. Эта информация особенно ценна в исследованиях по оптимизации процессов, где пользователь вынужден полагаться на допущения или слабо проверенные модели, которые ограничивают оптимальное значение. Напротив, выполнение анализа чувствительности решения с помощью методов SM требует моделирования технологической схемы в нескольких точках проектирования вокруг оптимального решения.

Схема Equation-Oriented Approach включает несколько этапов расчета, адаптируемых под конкретные задачи [2, 4]:

1. Определение переменных и параметров системы. На первом этапе необходимо идентифицировать переменные и параметры, которые описывают систему, и определить соответствующую информацию о них. При этом, нельзя оставлять переменные без заданных значений – требуются либо точные параметры, либо границы их варьирования, а также приближенные значения выходных параметров.

2. Формирование уравнений. Определение математических уравнений, описывающие взаимосвязи и свойства системы, может включать физические законы, условия или

эмпирические соотношения, основанные на экспериментальных данных. Технологические процессы в химической или другой отрасли обычно характеризуются нелинейными зависимостями между различными величинами, такими как концентрации, температуры, давления и др. Поэтому для описания этих процессов используются нелинейные математические уравнения. Нелинейные подходы включают в себя методы [4], такие как метод конечных элементов (МКЭ), метод конечных разностей (МКР) и метод конечных объемов (МКО). Эти методы позволяют численно решать системы дифференциальных уравнений, описывающих технологические процессы, учитывая нелинейные свойства системы. Важно отметить, что использование нелинейных моделей более точно отражает реальность и позволяет более точно предсказывать поведение и параметры технологической системы. Однако такие модели требуют более сложных вычислительных методов и больше вычислительных ресурсов для их реализации.

3. Преобразование уравнений. Этап включает процессы упрощения или преобразования уравнений с целью повышения точности и скорости расчетов, а также формирования итоговой оптимальной системы уравнений.

4. Решение системы уравнений. Процесс поиска значений переменных, при которых все уравнения системы удовлетворяются, достигается с использованием различных методов решения, таких как аналитические методы, численные методы или итерационные алгоритмы.

5. Проверка и оценка полученных решений. Конечные расчеты проводятся с целью проверить, удовлетворяют ли найденные значения переменных и параметров системы изначальным условиям и требованиям. Оценка также включает анализ качества и точности решения.

6. Интерполяция результата. Анализ результатов проводится на основании поставленных задач и целей.

Выводы. Проведен обзор методов решения моделей технологических процессов, анализ эффективности использования при постановке разных задач.

Список использованных источников:

1. Mendoza, D. F., Palacio, L. M., Graciano, J. E. A., Riascos, C. A. M., Vianna, A. S., & Le Roux, G. A. C. (2013). Real-Time Optimization of an Industrial-Scale Vapor Recompression Distillation Process. Model Validation and Analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(16), 5735–5746.
2. Dowling, A. W., & Biegler, L. T. (2015). A framework for efficient large scale equation-oriented flowsheet optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 72, 3–20.
3. Ma, Y., Luo, Y., Ma, X., Yang, T., Chen, D., & Yuan, X. (2018). Fast Algorithms for Equation-Oriented Flowsheet Simulation and Optimization Using Pseudo-Transient Models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*.
4. Bongartz, D., & Mitsos, A. (2019). Deterministic global flowsheet optimization: Between equation-oriented and sequential-modular methods. *AIChE Journal*, 65(3), 1022–1034.