Современные технологии компьютерного моделирования нефтегазохимических производств

Карпов К.А.

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина)

E-mail: kakarpov@etu.ru

Аннотация. **В статье рассматриваются новые нестандартные методы и инновационные решения, которые могут применяться при моделировании сложных химико-технологических систем нефтегазохимических производств, характеризующихся неопределенностью и нечеткостью исходной информации.**

Ключевые слова: компьютерное моделирование; цифровые двойники; нефтегазохимические производства; химико-технологические системы; эвристическо-эволюционные процедуры

I. Введение

В настоящее время расширяется использование технологий компьютерного моделирования различных объектов при изучении, проектировании и автоматизации нефтегазохимических производств (НГХП).

Развитием методологии компьютерного моделирования и цифрового инжиниринга изделий является применение цифровых (виртуальных) двойников изделий в промышленности, которые представляют собой сложную единую систему из математических и компьютерных моделей (КМ). По аналогии с КМ цифровой двойник (ЦД) разрабатывается и применяется на всех стадиях жизненного цикла изделия, изменяясь на каждой стадии.

Важным этапом процесса создания КМ объектов НГХП является выбор вычислительных алгоритмов, включая поиск технологических решений без заранее заданного алгоритма. При создании ЦД можно применять нормальные алгоритмы А. А. Маркова или особые гибкие алгоритмы, например, вероятностные или эвристические [1–3]. Следует отметить, что, согласно анализу многочисленных данных, результаты прогнозирования изменений в сложных динамических средах без заранее заданного алгоритма могут иметь значительные отклонения от эмпирических наблюдений.

Далее будут приведены некоторые технологии, которые позволяют моделировать сложные химико-технологические системы, характеризующиеся неопределенностью и нечеткостью исходной информации. Подобные задачи можно решать с применением различных методов и логических приемов, которые сочетают элементы случайности и детерминированности.

II. Методики создания компьютерных моделей технологических объектов без заранее заданного алгоритма

В отличие от формализованных задач, решения которых выполняются по заранее заданному алгоритму, рациональные решения неформализованных задач получаются в результате творческой деятельности специалистов, которая требует переработки большого количества смысловой (семантической) информации и непосредственно не связана с какими-либо вычислениями. Для поиска семантических решений необходимо применять не вычислительные алгоритмы, а эвристическо-эволюционные процедуры [4].

Другими словами, если построение математической модели затруднено в связи со сложностью описания исследуемого объекта, тогда может быть применен подход «черного ящика», когда модель синтезируется на основании накопленной информации (теоретической, статистической, экспертной, нечеткой и др.) о поведении объекта. Для проектирования и автоматизации этого процесса предлагается использование эволюционного алгоритма как средства направленного поиска структуры и параметров модели, адекватно описывающей полученные ранее исходные эмпирические данные [5].

Химико-технологические системы (ХТС) на производстве являются многокритериальными и часто работают в условиях нечеткости исходной информации, а при построении математических моделей технологических процессов редко располагают необходимой полной априорной информацией о технологическом объекте и окружающей его среде. Поэтому поиск эффективного решения таких проблем в нечеткой среде является весьма важной и актуальной задачей для науки и производства.

Основываясь на примере действий опытного оператора, который управляет технологическими объектами в нечеткой среде, благодаря некой качественной модели, сформировавшейся в его сознании в процессе обучения и наблюдения, можно провести аналогичные действия при создании формализованной модели такого объекта. Так, авторы [2], [3] показывают, что на основе экспертной информации и теории нечетких множеств (ТНМ) можно получить формализованную модель технологического объекта, что сопоставимо со способностью человека выразить сущность этого объекта в нечетких терминах естественного языка, не прибегая к помощи сложных математических структур.

Авторами [2] предложен метод разработки математических моделей ХТС, исходя из доступной информации различного характера, в том числе нечеткой информации, на примере установки по производству бензола Атырауского нефтеперерабатывающего завода (ТОО «АНПЗ», Республика Казахстан). На основе методологии системного анализа был предложен метод построения моделей ХТС, в котором, например, с целью формализации и применения исходной нечеткой информации для построения математических моделей и управления ХТС были использованы методы экспертных оценок [6] и ТНМ.

Задачи многокритериальной оптимизации при управлении технологической системой сведены к многокритериальным задачам нечеткого математического программирования, и на основе модификации принципа максимина (используемого в теории игр и ИИ) и эмпирического закона Парето разработан эвристический алгоритм решения сформулированной задачи оптимального управления. Анализ и сравнение полученных результатов с реальными значениями параметров показал и высокую эффективность предложенного подхода к решению задач управления на основе моделей в условиях нечеткости исходной информации [2]. Таким образом, для рассматриваемой в исследовании ХТС по производству бензола были определены оптимальные значения технологических параметров, обеспечивающих эффективное управление режимами работы по вектору критериев при ограничениях, имеющих нечеткий характер.

Следует отметить, что ранее уже проводились расчеты аналогичных режимных параметров с целью их оптимизации. При этом был использован детерминированный подход, предложенный более 40 лет назад. В этом случае разработка модели основана на физических, химических и физико-химических законах и закономерностях, связанных с сохранением массы и энергии, кинетикой протекающих химических реакций, гидродинамикой потоков и др.

По результатам сравнения значений критериев управления, рассчитанных с использованием детерминированного метода, с соответствующими показателями, полученными по методу, основанному на эвристическом алгоритме, и реальными значениями технологических параметров одного из режимов установки производства бензола ТОО «АНПЗ», можно сделать заключение, что именно детерминированный подход показал значения более близкие к реальными показателям [2].

Согласно современной классификации нечеткие системы, эволюционные алгоритмы, а также роевой интеллект и системы на основе нейронных сетей являются примерами методов мягких вычислений, представляющих собой методологию, которая сочетает в себе различные методы, толерантные к неточностям, неопределенности и частичной истинности при решении сложных задач.

В случаях, если построение содержательной аналитической модели сложного объекта производственной ХТС вызывает серьезные проблемы, и порой даже невозможно, так как неизвестен порядок динамической системы и наличие различных нелинейностей, можно использовать построение моделей других классов. Например, для усовершенствования и автоматизации компьютерных моделей можно применять искусственные нейронные сети, являющиеся одним из методов проведения мягких вычислений, которые служат для решения широкого спектра задач. К этим задачам можно отнести автоматическую обработку больших массивов данных, аппроксимацию зависимостей, прогнозирование временных рядов и др.

Так, авторы [7] приводят рекомендации, которые позволяют облегчить построение нейронных сетей (НС) и тем самым успешно применять их в решении задач моделирования технологических процессов. В частности, рассмотрены вопросы относительно необходимой топологии НС, позволяющие использовать их для решения задач моделирования. В работе [7] показано, что объединяя теорему А. Н. Колмогорова и В. И. Арнольда с теоремой Р. Хехт-Нильсена (R. Hecht-Nielsen) следует, что для любого алгоритма существует НС, которая его реализует. Таким образом, нейронная сеть может являться универсальным вычислительным средством для аппроксимирования функций.

В рамках грантов Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) были выполнены работы по построению приближенного параметрического нейросетевого решения краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения, описывающего процессы в неизотермическом химическом реакторе.

В частности, в результате двух численных экспериментов, результатами которых являлись нейросетевое решение краевой задачи с сетью из 30 нейроэлементов и аналитическое решение, а также решение, найденное в пакете Mathematica, показавшее, что методы построения моделей сложных систем существенно улучшают нейросетевое решение, если используется дополнительная информация, а в сложных задачах, где неизвестен интервал существования решения, НС позволяют уточнить приближенное решение [8].

Кроме опыта использования нейронных сетей для оценки результатов приближенного решения задач, связанных с уравнениями, описывающими сложные процессы в химических аппаратах, также имеются исследования, показывающие возможности применения НС для моделирования реальных технологических процессов.

Анализируя эту информацию, можно сделать заключение, что у нейронных сетей, одним из основных преимуществ которых при моделировании объектов НГХП является способность обучаться и адаптироваться к новым данным, имеются и недостатки, например, они могут быть сложными в настройке и требовать большого количества данных для обучения.

III. Заключение

Таким образом, применяемые в условиях нечеткости исходной информации эвристическо-эволюционные процедуры, включая методы экспертных оценок, эволюционные алгоритмы и системы на основе нейронных сетей, являются разновидностями мягких

вычислений, входящих в общий класс неточных, приближенных методов решения задач.

В отличие от традиционных вычислительных методов, которые отличаются сложностью и применяются для поиска точных и строгих решений задач, часто сопровождающихся большими затратами (труда, энергии, средств), мягкие вычисления могут выступать, например, в качестве альтернативы чрезвычайно сложным вычислениям, а также в тех случаях, когда повышенная точность просто не требуется.

Искусственные нейронные сети могут стать более точными и эффективными с течением времени, так как они предлагают мощный и гибкий подход к моделированию сложных технических устройств НГХП. С увеличением мощности вычислительной техники и доступности данных для обучения, возможно, их использование в этой области будет продолжать расти.

Список литературы

[1] Меркулова О.О., Никитина А.Б., Фёдоров О.А. Избранные вопросы теории алгоритмов: учеб.-метод. пособие. Южно-Сахалинск: Изд-во СахГУ, 2018. 112 с.

[2] Многокритериальная оптимизация при управлении химико-технологической системой производства бензола при нечеткой информации / Б.Б. Оразбаев, Е.А. Оспанов, К.Н. Оразбаева, Б.А. Серимбетов // Известия ТПУ. Инжиниринг георесурсов. 2019. Т. 330. № 7. С. 182-194.

[3] Оразбаев Б.Б., Курмангазиева Л.Т. Разработка математических моделей и оптимизация химико-технологических систем при нечеткости исходной информации. М.: Акад. естествознания, 2014. 161 с.

[4] Матыс В.Г., Черник А.А. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли: тексты лекций. Минск: БГТУ, 2019. 156 с.

[5] Петросов Д.А., Игнатенко В.А. Поэтапное моделирование технологических процессов с использованием интеллектуального структурно-параметрического синтеза // Фундаментальные исследования. 2017. № 12. Ч. 1. С. 97-102.

[6] Карпов К.А. Технологическое прогнозирование развития производств нефтегазохимического комплекса: учебник / под ред. И.А. Садчикова. СПб.: Лань, 2017. 492 с.

[7] Бахметова Н.А., Токарев С.В. Моделирование технологических процессов с помощью нейронных сетей // Современные наукоемкие технологии. 2008. № 2. С. 87.

[8] Васильев А.Н., Тархов Д.А., Шемякина Т.А. Модель неизотермического химического реактора на основе параметрических нейронных сетей. Гибридный метод // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2015. Т. 11. № 2. С. 271-278.