

Лекция 3. Общая характеристика оптимизационных задач для химико-технологических процессов

В данном конспекте заключительный этап моделирования в виде оптимизации объектов нетрадиционно рассматривается вначале. Такой подход связан с тем, что процедура оптимизации является универсальным блоком моделирования и практически не зависит от специфики предваряющих ее расчетов по созданным моделям, которые могут быть физико-химическими или статистическими.

В самом общем смысле можно сказать, что оптимизация – это процедура нахождения оптимальных условий, то есть условий, обеспечивающих оптимальный результат функционирования данного объекта. С математической точки зрения оптимизация представляет собой поиск экстремума соответствующей функции, то есть поиск значений независимых входных переменных, при которых выходная переменная принимает наименьшее (минимум) или наибольшее (максимум) значение. В точках экстремумов изменяется характер функциональной зависимости, например, в максимуме характер функции изменяется с возрастающего на убывающий (рис. 2.1). Такие точки в математике для немонотонной (экстремальной) зависимости зачастую определяют, приравнивая производную соответствующей функции к 0. Однако при поиске экстремумов в заданном поле значений входных переменных следует различать глобальные (абсолютные) и локальные (относительные) экстремумы.

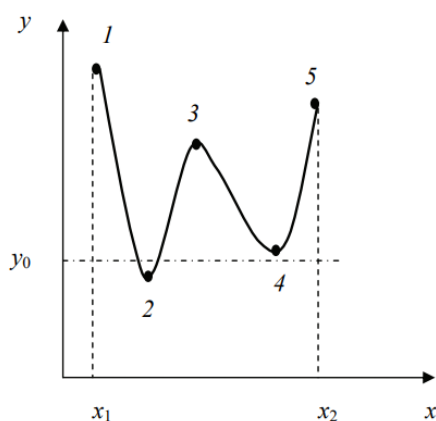


Рис. 2.1. Локальные и глобальные экстремумы функции

Например, на кривой рис. 2.1 в пределах поля аргумента от x_1 до x_2 можно выделить 5 экстремумов:

1 – глобальный максимум;

2 – глобальный минимум;

3 – локальный максимум;

4 – локальный минимум;

5 – локальный максимум. Если в данном случае требуется найти минимум, удовлетворяющий условию $y \geq y_0$, то решением задачи будет точка 4, а не точка 2.

Важно понимать, что математически этап исследования объекта с помощью расчетов, который сейчас часто называют англоязычным термином «симуляция» (от слова simulation – моделирование) и этап последующей оптимизации объекта разделены, поскольку они используют различные математические процедуры. И здесь нужно не запутаться в терминах (табл. 2.1).

Для химико-технологических процессов задача оптимизации состоит в нахождении таких значений управляющих входных переменных x_1, x_2, \dots, x_n , которые:

– удовлетворяют заданным математическим моделям, используемым на этапе расчетов, то есть системе уравнений или одному уравнению вида

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n);$$

Таблица 2.1

Терминологические особенности этапов симуляции и оптимизации

Симуляция	Оптимизация
Независимая переменная x	
Управляющая переменная	Оптимизирующий фактор
Зависимая переменная y	
Выходная переменная	Критерий оптимальности
Зависимость $y = f(x)$	
Уравнение модели	Целевая функция

– обеспечивают достижение заданного результата по величине выходной функции, например: $y_1 < y_{\text{опт}} < y_2$;

– соответствуют экстремуму целевой функции S , то есть модели, использованной на этапе оптимизации, в заданной области факторного пространства, например от значения A_i до B_i

$$S = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$$

при $A_1 < x_1^* < B_1, \dots, A_n < x_n^* < B_n$.

Независимые и зависимые переменные на этапе расчета и оптимизации могут не совпадать. Обратите внимание на то, что в рамках данной учебной дисциплины изучаются 3 алгоритма (последовательность действий) расчетных процедур:

1. Алгоритм оптимизации.
2. Алгоритм моделирования с использованием статистических (или эмпирических, или вероятностных) моделей.
3. Алгоритм моделирования с использованием физико-химических (или теоретических, или детерминированных) моделей.

Самый короткий из них алгоритм оптимизации включает 3 основных этапа:

- 1) постановка задачи оптимизации (экспертный);
- 2) нахождение оптимальных условий (расчетный);
- 3) реализация оптимальных условий или внедрение оптимизированных процессов (практический).

Необходимыми условиями постановки задачи оптимизации являются: наличие цели и объекта оптимизации, наличие ресурсов оптимизации в виде варьируемых независимых переменных, возможность количественной оценки эффекта оптимизации и возможность учета ограничений для данного объекта. Кроме того, реальное значение имеет оптимизация экстремальной функции, то есть выбранный критерий оптимальности должен немонотонно зависеть от соответствующих оптимизирующих факторов.

Этап постановки задачи оптимизации на практике охватывает процедуру создания соответствующей математической модели и подразумевает решение четырех задач для определения:

- критерия оптимальности (зависимой переменной), то есть параметра (или нескольких параметров), наиболее полно отражающего качество функционирования объекта в заданных условиях;
- условий ограничения по критерию оптимальности, то есть количественных условий, выполнение которых необходимо обеспечить независимо от их влияния на величину критерия оптимальности;
- оптимизирующих факторов (независимых переменных), то есть управляющих переменных, которые описывают объект и определяют величину критерия оптимальности;

– вида целевой функции, то есть вида зависимости критерия оптимальности от оптимизирующих факторов.

Для наиболее эффективного выбора критерия оптимальности необходимо в рамках решения данной задачи выбрать единственную характеристику, которая наиболее сильно влияет на практический результат процесса и количественно отражает этот результат. В качестве критериев оптимальности для ХТП, связанных с производством электронных устройств, могут выступать технические выходные параметры приборов, технологические или экономические показатели процессов. Например, при оптимизации процессов производства полупроводниковых интегральных схем в качестве технических критериев оптимальности могут выступать токи утечки в микросхеме, напряжение пробоя подзатворного диэлектрика, пороговое напряжение структуры металл-оксидполупроводник (МОП-структуры), крутизна переходной вольт-амперной характеристики (ВАХ) и другие параметры. Примерами технологических критериев оптимизации, которые, как правило, связаны и с экономическими показателями, являются процент брака или выход годных изделий, нормы расхода исходных компонентов, температура обработки подложек в процессах нанесения пленок или травления и другие характеристики.

Задачи оптимизации классифицируются по ряду факторов (табл. 2.2), что систематизирует выбор подходов и методов оптимизации.

Таблица 2.2

Классификация задач оптимизации

1. По объекту оптимизации	
Статическая (оптимизация процесса в установившемся режиме)	Динамическая (оптимизация управления процессом в неуставившемся режиме)
2. По параметрам оптимизации	
Структурная (оптимизация структуры процесса)	Параметрическая (оптимизация параметров процесса)
3. По условиям оптимизации	
Условная (с ограничениями)	Безусловная
4. По числу оптимизирующих факторов	
Одномерная	Многомерная
5. По числу критериев оптимальности	
Однокритериальная	Многокритериальная

Технологам действующих производств чаще приходится сталкиваться с динамической, параметрической, условной, многомерной и однокритериальной оптимизацией.

Причинами возникновения ограничений при оптимизации ХТП являются сложность достоверного количественного учета всех факторов, влияющих на критерий оптимальности, необходимость оптимизации объекта в поле реальных значений оптимизирующих факторов. Ограничения при оптимизации подразделяются на группы по следующим критериям:

- 1) содержание ограничений, включая количество и качество сырья и продукта, технологические условия, экономические и экологические требования;
- 2) математический вид, включая ограничения в виде:
 - равенств $y = A$;
 - односторонних неравенств $y \geq A$;
 - двухсторонних неравенств $B \geq y \geq A$.

Выбор природы и количества оптимизирующих факторов (управляющих входных переменных) определяется возможностью их варьирования и значительностью влияния на соответствующий критерий оптимальности, который должен известным образом и немонотонно зависеть от этих факторов. В соответствии с обоснованным количеством оптимизирующих факторов различают 2 процедуры:

– оптимальное проектирование, когда моделируют несуществующий объект с учетом максимального числа факторов;

– оптимальное управление, когда моделируют существующий объект с учетом достаточного числа факторов.

И наконец, на этапе определения целевой функции устанавливается количественная зависимость между критериями оптимальности и оптимизирующими факторами. Здесь возможна реализация двух подходов: аналитического и эмпирического. При аналитическом подходе для описания зависимости между критерием оптимальности и оптимизирующими факторами фактически используются детерминированные модели в виде математических уравнений, отражающих соответствующие физико-химические, организационно-экономические и другие процессы. При эмпирическом подходе используются статистические модели, создаваемые в результате математической обработки набора дискретных данных, полученных для объекта оптимизации. На практике для оптимизации существующих производств чаще используется эмпирический подход, который приносит достоверный, но ограниченный в применении результат.

Заключительный этап оптимизации в виде внедрения найденных оптимальных условий может быть реализован в лабораторном или производственном варианте. Предварительным этапом производственной реализации найденных оптимальных технических условий является анализ их выполнимости с учетом:

- 1) технических возможностей данного технологического процесса, включая характеристики оборудования;
- 2) экономической целесообразности (затраты, прибыль);
- 3) возможности сохранения показателей качества, если они не были приняты в качестве критериев оптимальности;
- 4) экологичности и обеспечения безопасности труда.