第4章
化工过程系统优化基础

4.1 化工过程系统优化概述

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

4.1.1优化问题的性质

当存在以下情况时，优化特别具有吸引力：

（1）销售受到产量的限制

（2）销售受到市场限制

（3）大型装置

（4）高单耗或高能耗

（5）产品质量超过设计规定

（6）有较多的有用组分通过废水、废气排出

（7）人工费用高

（8）

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

4.1.2 常见的化工优化问题

典型的化工优化问题主要包括

(1)厂址选择

(2)管道尺寸的确定和管线布置

(3)设备设计和装置设计

(4)维修周期和设备更新周期的确定

(5)单元设备（如反应器、塔器等）操作的确定

(6)装置现场数据的评价，过程数学模型的建立

(7)最小库存量的确定

(8)原料和公用工程的合理利用等

(9)生产方案的确定

(10)换热网络的确定

(11)分离次序的确定

(12)催化剂更换周期的确定

如图4-2则是另一个生产过程的维修周期和产品成本关系。由图4-2可知，最佳的维修周期为2年

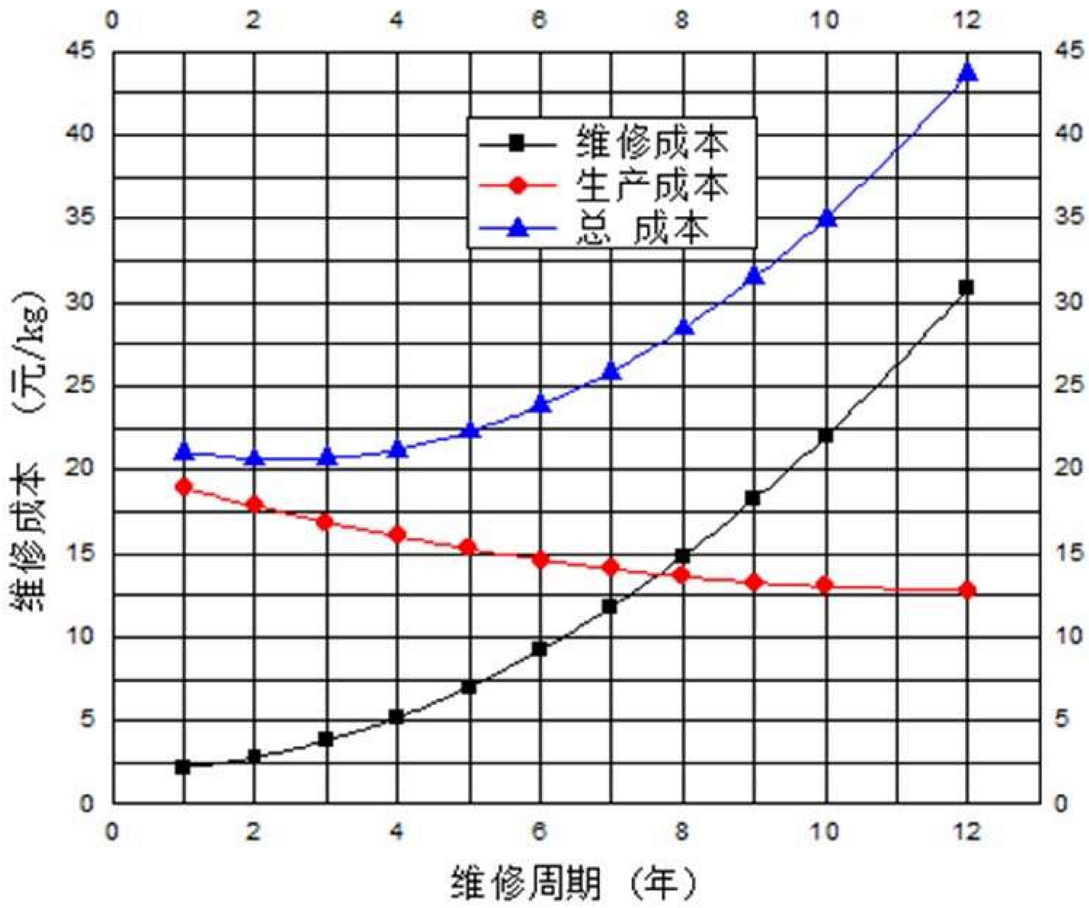


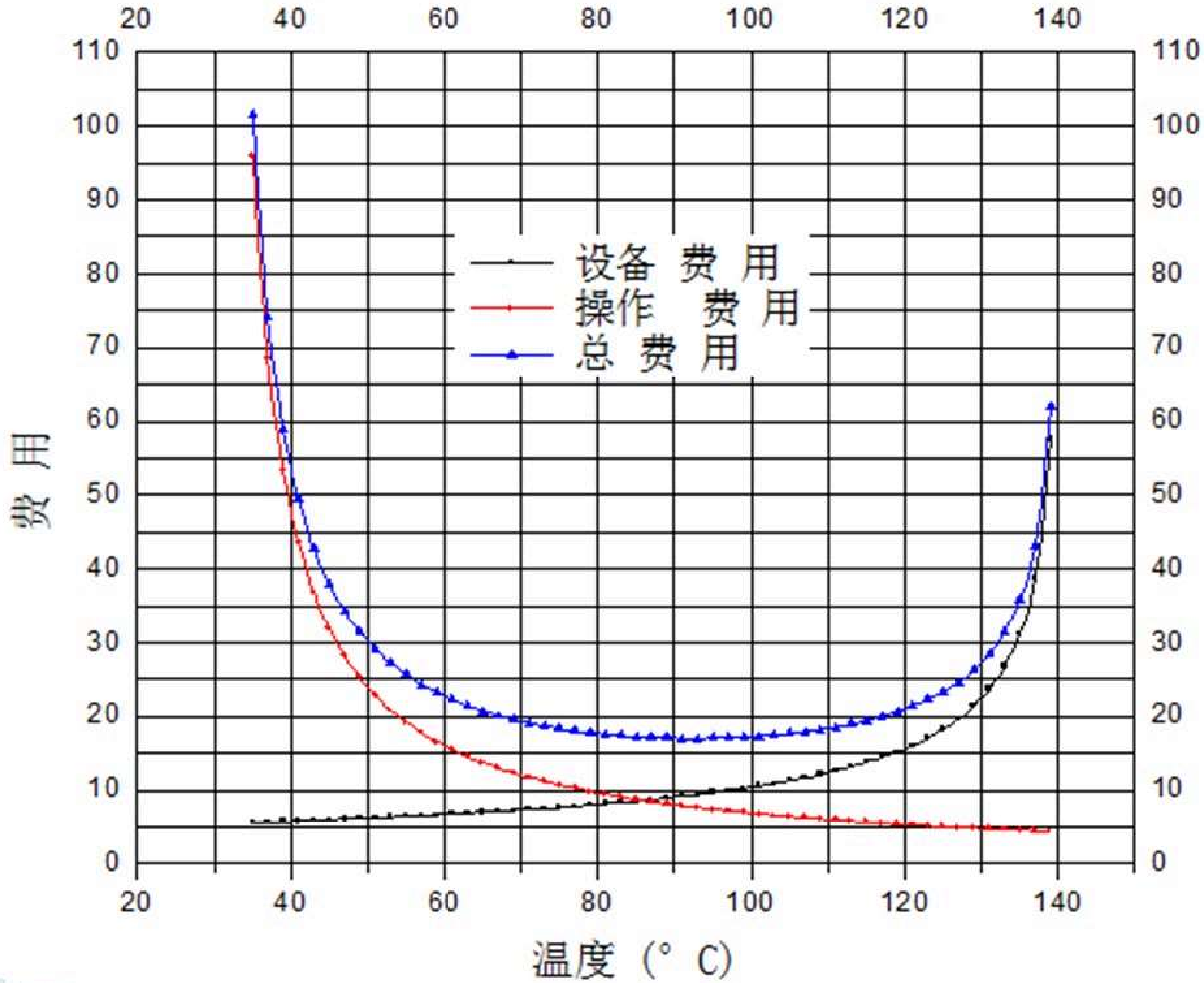
图4-2 产品成本随维修周期改变关系2

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

通过计算，某换热器的综合成本和冷却水的出口温度关系如下（已利用模型方程消去传热面积、冷却水流量）

$$J = 225\frac{\ln(14-0.1t_2)}{130-t_2} + \frac{480}{t_2-30} \qquad (4\text{-}1)$$


20 40 60 80 100 120 140
110 100 90 80 70 60 50 40 30 20 10 0
设备 费 用
操作 费 用
总 费 用
费 用
温度 (° C)

4.1.3化工优化问题的一般数学模型

化工优化模型包括目标函数（经济指标）和系统模型（约束方程），一般的数学形式如下：

目标函数：

$$J=f(X,U) \qquad (4\text{-}2)$$

约束条件：

$$g_i(X,U)=0 \qquad (i=1,2,\ldots n) \qquad (4\text{-}3)$$

$$q_j(X,U)\geq 0 \qquad (j=n+1,n+2,\ldots p) \qquad (4\text{-}4)$$

目前尚没有一种优化方法能有效地适用所有的优化问题。针对某一特定问题选择优化方法的主要根据为：

(1)目标函数的特性

(2)约束条件的性质

(3)决策变量和状态变量的数目

优化问题求解的一般步骤为：

(1)对过程进行分析，列出全部变量

(2)确定优化指标，建立指标和过程变量之间的关系，即目标函数关系式（经济模型）

(3)建立过程的数学模型和外部约束（包括等式约束及不等式约束），确定自由度和决策变量。一个过程的模型可以有多种，应根据需要，选择简繁程度合适的模型

(4)如果优化问题过于复杂，则将系统分成若干子系统分别优化；或者对目标函数的模型进行简化

(5)选用合适的优化方法进行求解

(6)对得到的解检验，考察解对参数和简化假定的灵敏度

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

4.1.4化工优化问题的基本方法

优化问题的求解方法称为优化方法。优化问题的性质不同，求解的方法也将不同。根据优化问题有无约束条件，可分为无约束优化问题和有约束优化问题。无约束条件优化可分为单变量函数优化和多变量函数优化；而有约束优化问题也可分为两类：线性规划问题和非线性规划问题。当目标函数及约束条件均为线性时，称为线性规划问题；当目标函数或约束条件中至少有一个为非线性时，称为非线性规划问题。求解线性规划问题的优化方法已相当成熟，通常采用单纯形法

求解非线性规划问题的优化
方法可归纳为两大类

（1）间接优化方法 间接优化方法就是解析法，即按照目标函数极值点的必要条件用数学分析的方法求解。再按照充分条件或者问题的物理意义，间接地确定最优解是极大还是极小。例如，微分法即属于这一类

（2）直接优化方法 直接优化方法属于数值法。由于不少优化问题比较复杂，模型方程无法用解析法求解，目标函数不能表示成决策变量的显函数形式，得不到导函数。此时须采用数值法。这种方法是利用函数在某一局部区域的性质或在一些已知点的数值，确定下一步计算的点。这样一步步搜索，逼近，最后达到最优点，直接法是化工系统优化问题的主要求解方法

4.2 优化的数学基础

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

目录

4.2.1 凸集

如果对于一个集合中的任意一对点x_1和x_2，连接两点的直线段总是完全地被包含在集合内，那么这组点或区域被定义为n维空间的凸集。图4-4表示了二维情况下的凸集。凸集两点之间的任意一点可表示为：

$$x = \beta x_1 + (1 - \beta) x_2 \qquad 0 \le \beta \le 1 \qquad (4\text{-}5)$$

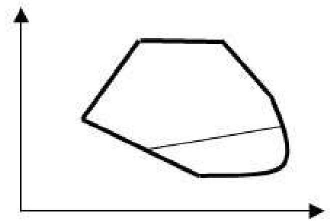


图4-4 封闭凸集

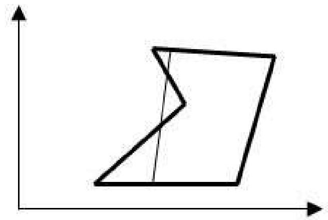


图4-5 非凸集

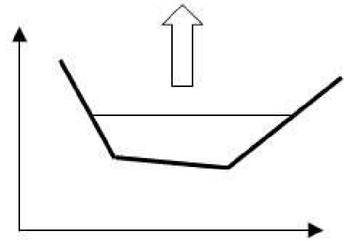


图4-6 开放凸集

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

4.2.2 凸函数

和表达凸集的定义相仿，如果函数f(x)满足下面式（4-6）的条件，则f(x)在凸集F下是凸函数，见图4-7

$$f(\beta x_1+(1-\beta)x_2)\le \beta f(x_1)+(1-\beta)f(x_2)\qquad 0\le\beta\le 1\qquad (4\text{-}6)$$

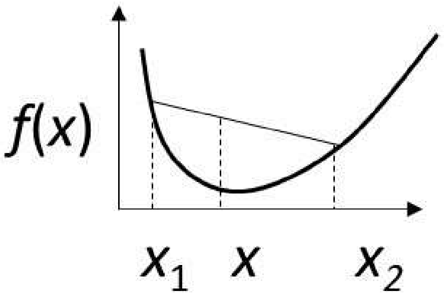


图4-7 凸函数

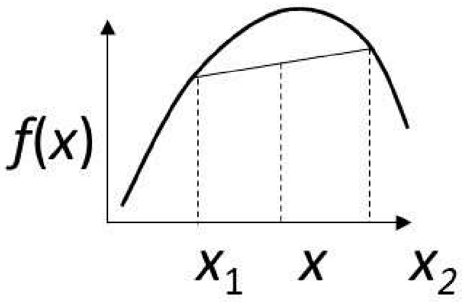


图4-8 凹函数

目录
4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

4.2.3 单变量函数的极值情况

对于单变量函数的极值，如果函数连续可导，在数学可以方便地通过求解一阶导数y'=0的方法来得到

如对$y = 2x^3 + 3.5x^2 - 16x + 5$，其图形见图4-10

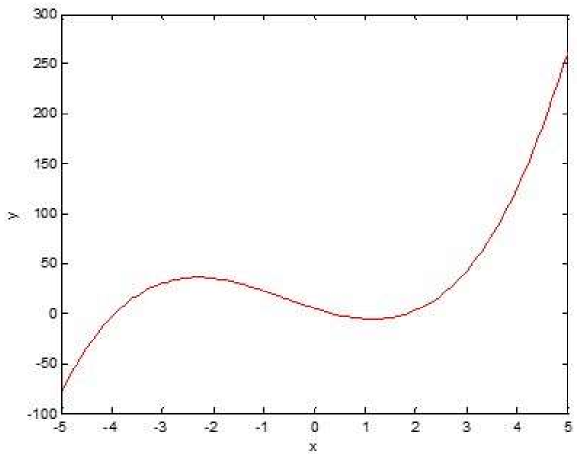


图4-9 具有2个极值点的单变量函数

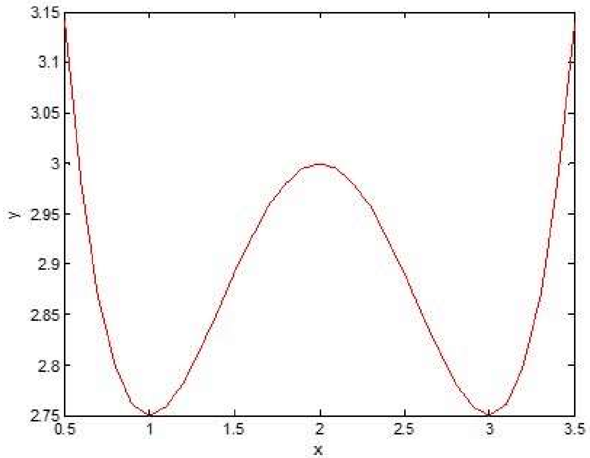


图4-10 具有3个极值点的单变量函数

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

$$J = 225\frac{\ln(14-0.1t_2)}{130-t_2} + \frac{480}{t_2-30} \qquad (4\text{-}1)$$

对于像式（4-1）的函数，可以通过求导的方法获得极值点，进而根据实际情况判断是否最值点来获取总费用最小时的冷却物流出口温度t_2。式（4-1）对t_2求导得：

$$J' = 225\frac{\ln(14-0.1t_2) - \dfrac{130-t_2}{140-t_2}}{(130-t_2)^2} - \frac{480}{(t_2-30)^2} \qquad (4\text{-}5)$$

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

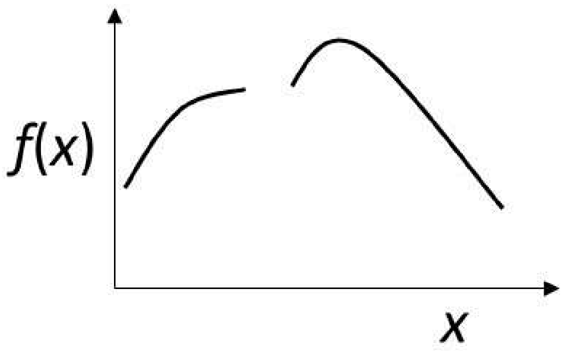


图4-11-a 不连续函数

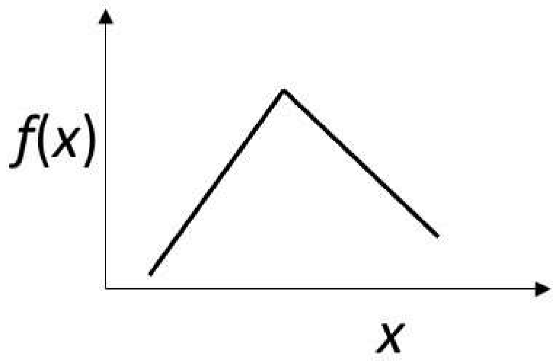


图4-11-b 不可导函数

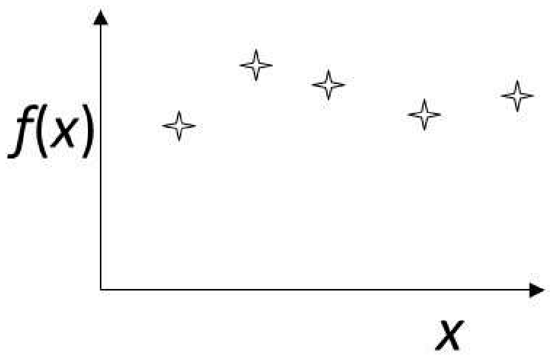


图4-11-c 离散函数

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

4.2.4 多变量函数的极值情况

对于多变量数，其极值情况和最大（小）值的关系更为复杂。一般情况下，只有两个变量的函数还可以用图形来表示，此时包括函数本身，需要用3维空间。超过3维空间就很那用图形来表示。如果目标函数是含有两个变量的二次函数或可以用二次函数式（4–6）来近似表示

$$f(\mathrm{x}) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2 \qquad (4\text{-}6)$$

对于求式（4–6）的最大(小）值，如果该函数连续可导，那么也可仿照单变量函数优化的思路，通过分别对两个不同的变量求导，令下式（4–7）成立

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} = a_1 + 2a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = 0 \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} = a_2 + 2a_{22}x_2 + a_{12}x_1 = 0 \end{cases} \qquad (4\text{-}7)$$

通过求解式（4–7）的方程组，求得式（4–6）函数的驻点即一阶偏导数为零的点

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

如已知函数：

$$f(\mathrm{x})=8+x_1+x_1^2+x_1x_2+x_2^2 \qquad (4\text{-}8)$$

求一阶偏导数：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}=1+2x_1+x_2=0\\[2ex]\dfrac{\partial f}{\partial x_2}=2x_2+x_1=0\end{cases} \qquad (4\text{-}9)$$

现在在来计算该函数的H(x)。对于一般的二个变量的二次函数，H(x)的通式定义如下

$$H=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_2}\\[2ex] \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}\end{pmatrix} \qquad (4\text{-}10)$$

则式（4-8）函数的H(x)为：

$$H=\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix} \qquad (4\text{-}11)$$

目录

4.1 4.2 4.3 4.4 4.5 4.6 4.7

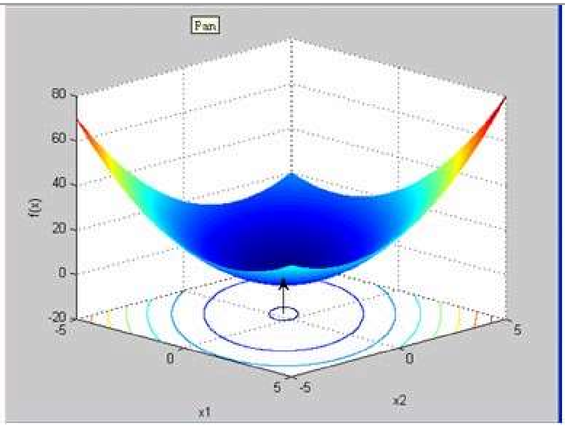


图4-12 椭圆形等高线-具有最小值

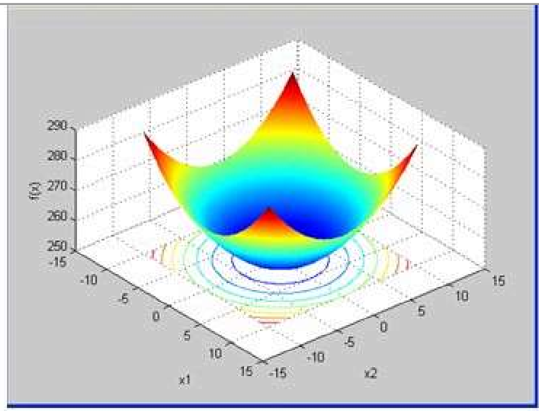


图4-13圆形等高线-具有最小值

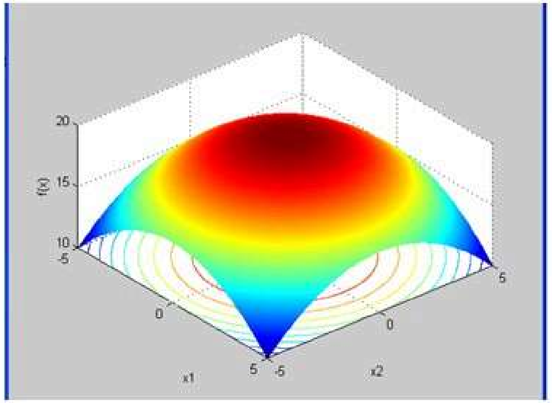


图4-14 圆形等高线-具有最大值

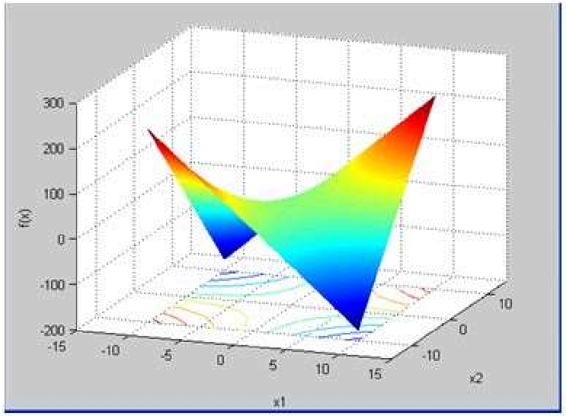


图4-15马鞍状图形-无极值

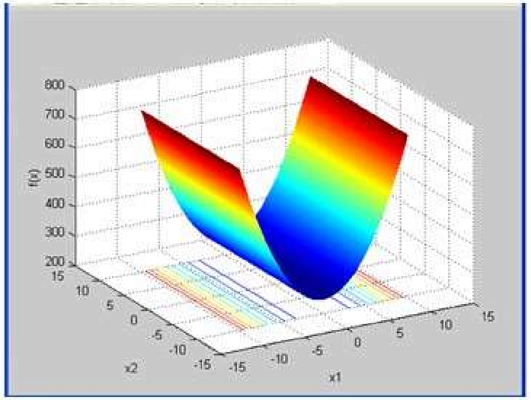


图4-16 稳谷图形–具有最小值

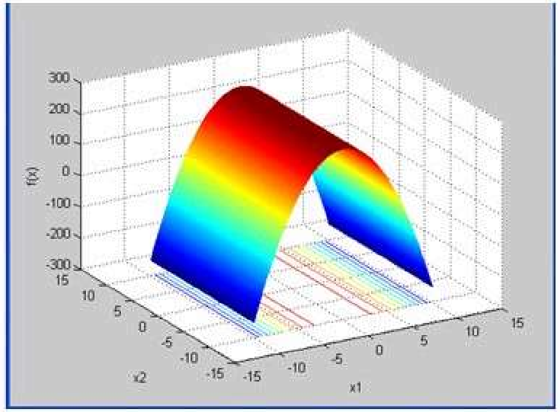


图4-16 稳脊图形–具有最大值

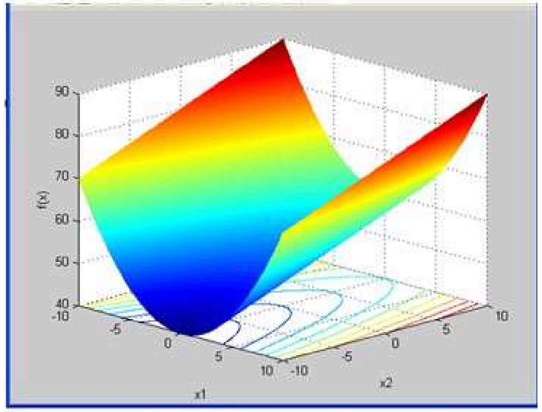


图4-18 上升山脊–无极值

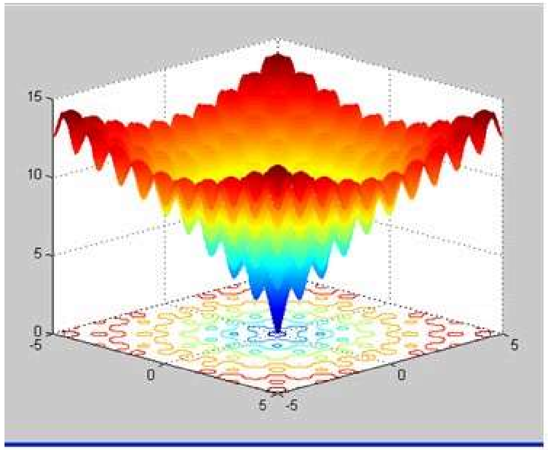


图4-19 多极值图

4.2.5 函数最优解的最后确定

对于具有多个极值的函数，在优化求解时，有时利用优化问题的实际意义确定最大值或最小值，比利用纯粹的数学分析方法更方便，更符合实际情况。因此，对于具有丰富实际经验的人来说，利用化工专业知识，来判断最优解的存在及最优解的性质，比采用各种数学工具的分析更直接更可靠

表5-1 对数平均温差与算术平均温差比较

dt1	10.00	14.00	18.00	20.01	22.00	26.00	30.00	35.00	40.00
dt2	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00
dt1/dt2	0.50	0.70	0.90	1.00	1.10	1.30	1.50	1.75	2.00
dt	15.00	17.00	19.00	20.01	21.00	23.00	25.00	27.50	30.00
lndt	14.43	16.82	18.98	20.00	20.98	22.87	24.66	26.80	28.85
dt%	3.82	1.05	0.09	0.00	0.08	0.57	1.35	2.53	3.82

dt1:进口温差；dt2:出口温差；dt1/dt2:温差之比；dt:算术平均温差；lndt:对数平均温差；dt%：两种温差相差百分比