

研究论文

水夹点分析与数学规划法相结合的 用水网络优化设计

李 英 姚平经

(大连理工大学化工系统工程研究所, 辽宁 大连 116012)

摘 要 提出了水夹点分析和数学规划法相结合的用水网络最优设计法。水夹点分析基于对过程用水的理解, 获得新鲜水用量目标并给出用水网络设计的基本规则。在此基础上建立过程使用新鲜水、排放废水和回用的各种可能匹配方案的用水网络超结构及其 MINLP 模型。既避免了用水夹点综合设计用水网络得不到真正意义上的最优解, 又在一定程度上防止超结构规模过大, MINLP 维数太高, 求解困难。采用通用代数建模系统 GAMS 得到用水网络最优设计方案。文献中的应用实例表明, 本文所提方法可充分发挥水夹点分析确定新鲜水用量或回用结构的简洁实用性和超结构 MINLP 寻求最佳方案的优点。

关键词 用水网络 水夹点分析 数学规划法 回用 优化

中图分类号 TQ 021.8

文献标识码 A

文章编号 0438 - 1157 (2004) 02 - 0220 - 06

OPTIMAL DESIGN OF WATER UTILIZATION NETWORKS BY COMBINATION OF WATER PINCH ANALYSIS AND MATHEMATICAL PROGRAMMING

LI Ying and YAO Pingjing

(Institute of Process Systems Engineering , Dalian University of Technology , Dalian 116012 , Liaoning , China)

Abstract This paper presents an approach of water utilization networks design by the combination of water pinch analysis and mathematical programming. Water pinch analysis can discover the operational bottlenecks so as to identify the minimum freshwater consumption and determine the elementary rules for water utilization networks design based on the understanding for water using process. Based on the water pinch analysis, a superstructure of water utilization networks can be built which involves only feasible and better retrofit options. Then an improved mixed integer nonlinear programming (MINLP) model for the network superstructure is proposed which considers the freshwater usage, wastewater discharge and reuse of process. The approach overcomes the defect that water pinch synthesis designs the water utilization networks with loop and prevents the case that the superstructure is so large that it is difficult to solve. At last, the problem can be solved with the general algebraic modeling system (GAMS) to acquire the optimal design scheme of water utilization networks. Case study illustrates that the combined method could identify the minimum freshwater consumption and determine the reuse structure concisely and practically by water pinch analysis and reach global optimum of water utilization networks by mathematical programming.

Keywords water utilization networks, water pinch analysis, mathematical programming, reuse, optimization

2002 - 10 - 08 收到初稿, 2003 - 08 - 10 收到修改稿.

联系人及第一作者: 李英, 女, 28 岁, 博士研究生.

Received date: 2002 - 10 - 08.

Corresponding author: LI Ying, PhD candidate. E - mail:

liying630@sina.com.cn

引 言

水广泛用于化工、石油化工、石油炼制和其他过程工业中，但近些年来，为了满足环境要求而不断提升的废水治理费用和廉价工业用水的缺乏极大地刺激了过程工业去最小化新鲜水的消耗量和废水的排放量^[1]。

早在 20 年前工业过程本身就已经提出了寻找优化的废水回用的要求。Wang 和 Smith^[2]提出了一种方法能有效地找到回用优化解，这种方法被称为“水夹点”。但其设计的网络结构往往存在回路。针对上述缺陷 Olesen 和 Polley^[3]提出了用水单元不多于 4~5 个的单一杂质用水系统设计方法，Xiao 和 Seider^[4]通过设置一个或多个内部水管建立了水网络新的设计方法。Polley^[5]对 Wang 和 Smith 采用的夹点设计法进行改进，提出了以水的最大重复利用率为目标的新型水夹点技术。但夹点设计法在解决多杂质问题上有一定局限性，虽然 Wang 和 Smith 提出了“浓度转移”的方法，这种方法仅能处理小规模问题，而且不能给出具体的回用匹配方案。Yang^[6]、Huang^[7]、Zhou^[8]、Ming-Jeng^[9]提出了超结构非线性规划的优化策略，但超结构中的组合方案太多而难于求解。因此胡仰栋^[10]采用逐步线性规划的方法求解废水最小化问题。为了加深对用水过程的理解和减小超结构规模，Savelski 和 Bagajewicz^[11~13]提出了单杂质系统和多杂质用水系统最优设计的必要条件，并提出了最优设计算法，Bagajewicz^[14]还提出了目前惟一能确保找到多杂质用水网络最优解的树搜索法。但总的来说，树搜索法是一种“枚举法”，工作量大。近来的工作表明夹点技术和数学规划法的结合将是一种很有效的方法，Alva-Argaez^[15]把水夹点分析提供的工程见解和数学规划工具结合在一起研究废水最小化。但它只是应用夹点分析的结论进行一些近似求解。本文将水夹点分析与数学规划法相结合进行用水网络设计，既克服了水夹点综合所得用水网络存在回路问题，又加深了对过程的理解，在一定程度上解决了超结构规模过大、求解困难的问题。

1 水夹点分析用于数学规划法建模规则

作者在前人工作的基础上^[2,11~13]，将夹点规则用于指导数学规划法建模，既保证不丢失最优

解，又使计算过程简单。对单杂质系统，只需建立一个水夹点分析图。而对多杂质系统，需建立每种杂质的水夹点分析图。水夹点分析图的建立过程，可参考文献 [2] 和文献 [16]，这里不作详细介绍。用水网络设计中新鲜水使用、废水排放、回用的判断规则对单杂质和多杂质系统各有不同。

规则 1：对单杂质系统，如果过程 i 位于夹点下方(不包括夹点)，此用水过程不排放废水；对多杂质系统，如果对每种杂质 j 来说，过程 i 都位于夹点下方，此过程不排放废水。且其他类型过程到此过程的回用不存在。

规则 2：对单杂质系统，如果过程 i 位于夹点上方(不包括夹点)，此过程不使用新鲜水；对多杂质系统，如果对每种杂质 j 来说，过程 i 都位于夹点上方，此过程不使用新鲜水。

规则 3：如果对每种杂质来说，过程 i 始终位于夹点下方，过程 k 始终位于夹点上方(包括夹点)，过程 k 到 i 的回用不存在。

规则 4：除去以上的用水过程 i 的类型，对单杂质系统，如果过程 i 的最大出口浓度大于过程 k 的最大出口浓度，过程 i 到过程 k 的回用不存在；对多杂质系统，如果过程 i 对杂质 j 来说最大出口浓度最大，且杂质 j 为过程 i 的关键杂质，则过程 i 到其他过程 k 的回用不存在，然后将过程 i 暂时删去，继续判断下一个用水过程，直到所有这样的用水过程都被考虑到。

2 用水网络超结构 MINLP 模型

2.1 用水网络超结构

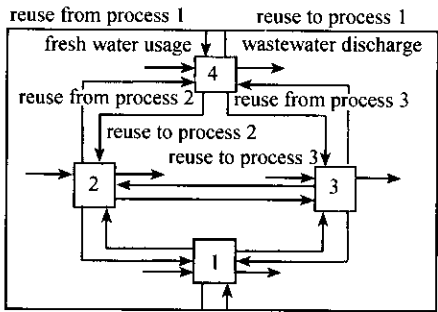


Fig.1 Superstructure of general water utilization networks^[16]
1, 2, 3, 4—water using process

数学规划法是实现同步设计策略的主要工具。其应用首先要建立包含各种可能方案的超结构，并

将超结构表述为混合整数非线性规划(MINLP)问题来优化。用水网络设计超结构如图 1 所示, 1、2、3、4 表示用水过程, 每一用水过程都有新鲜水使用、废水排放、其他过程到此过程的回用以及此过程到其他过程的回用等连接。形成的 MINLP 问题如下。

2.2 MINLP 模型

2.2.1 目标函数 最小新鲜水用量

$$\min \sum_i f_i \quad i \in P \quad (1)$$

指所有用水过程使用新鲜水总量最小。

最小回用连接数

$$\min \sum_i \sum_{k \neq i} Y_{i,k} \quad i, k \in P \quad (2)$$

用水过程之间需要回用的连接最少。

最小总连接数

$$\min \left(\sum_i \sum_{k \neq i} Y_{i,k} + \sum_i Y_{i,s} + \sum_i Y_{b,i} \right) \quad i, k \in P; s \in S; b \in B \quad (3)$$

用水过程之间回用连接、新鲜水供水连接以及废水排放连接总和最少。

最小化费用

$$\min \left(\sum_i \sum_{k \neq i} CC_{i,k} Y_{i,k} + \sum_i CC_{i,s} Y_{i,s} + \sum_i CC_{b,i} Y_{b,i} \right) \quad i, k \in P; s \in S; b \in B \quad (4)$$

因各种连接产生的固定费用最小。

2.2.2 约束方程 总质量平衡

$$f_i + \sum_{k \neq i} X_{i,k} - W_i - \sum_{k \neq i} X_{k,i} = 0 \quad i, k \in P \quad (5)$$

污染物质量平衡

$$\sum_{k \neq i} [(C_{i,j,out} - C_{k,j,out})X_{i,k}] + f_i C_{i,j,out} = \Delta m_{i,j,out} \quad i, k \in P; j \in J \quad (6)$$

最大进口浓度限制

$$\sum_{k \neq i} [(C_{i,j,in}^{\max} - C_{k,j,out})X_{i,k}] + f_i C_{i,j,in}^{\max} \geq 0 \quad i, k \in P; j \in J \quad (7)$$

每一个用水过程因腐蚀、停留时间等限制都有它针对某种污染物能够接受的浓度限制, 即最大进口浓度限制是由平衡约束转化来的。

最大出口浓度限制

$$C_{i,j,out} \leq C_{i,j,out}^{\max} \quad i \in P; j \in J \quad (8)$$

内部连接是否存在

$$X_{i,k} - UY_{i,k} \leq 0 \quad i, k \in P \quad (9)$$

$$X_{k,i} - UY_{k,i} \leq 0 \quad i, k \in P \quad (10)$$

用水过程是否需要新鲜水

$$f_i - UY_{i,s} \leq 0 \quad i \in P; s \in S \quad (11)$$

用水过程是否排放废水

$$W_i - UY_{b,i} \leq 0 \quad i \in P; b \in B \quad (12)$$

整数变量

$$Y_{i,k}, Y_{k,i}, Y_{i,s}, Y_{b,i} \in \{0, 1\} \quad i, k \in P; s \in S; b \in B \quad (13)$$

无循环存在

$$Y_{i,k} + Y_{k,i} \leq 1 \quad k \neq i; i, k \in P \quad (14)$$

3 水夹点分析与数学规划法结合

首先通过水夹点分析图确定夹点, 判断用水过程位于夹点上方、下方还是穿越夹点, 判断各用水过程的新鲜水使用和废水排放情况; 然后根据各用水过程对污染物要求的最大出口浓度进行排序, 决定各用水过程之间的回用情况。对多杂质系统, 需对每种杂质进行夹点分析, 然后运用如下 4 条规则:

如果用水过程 i 满足规则 1, 则 $Y_{b,i} = 0$ 且 $Y_{i,k} = 0$;

如果用水过程 i 满足规则 2, 则 $Y_{i,s} = 0$;

如果用水过程 i 和 k 满足规则 3, 则 $Y_{i,k} = 0$;

如果用水过程 i 和 k 满足规则 4, 则 $Y_{k,i} = 0$ 。

4 条规则的使用可简化超结构, 如图 2 所示,

这里 1、2、3、4 代表的是一类过程, 所以可推广到多过程问题。满足 4 条规则的整数变量及相应连续变量等于零使其维数降低, 这样不仅能满足水夹点分析所确定的新鲜水用量目标和用水网络设计规则, 而且超结构中所包含的都是较好的可行方案, 降低了问题的维数, 避免了组合方案爆炸的困难。使得问题求解更加容易, 以更大的概率找到全局优化解。

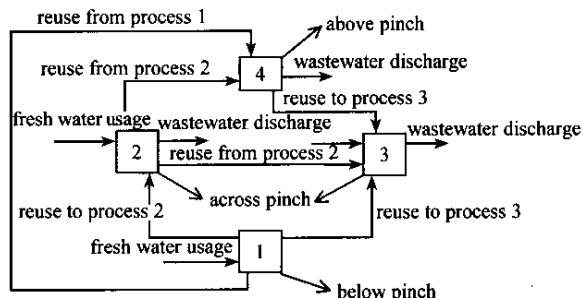


Fig.2 Simplified superstructure of water utilization networks

1—water using process below pinch;

2, 3—water using process across pinch;

4—water using process above pinch

对单杂质系统，最小新鲜水用量可以通过水夹点分析图求得，在满足最小新鲜水用量约束条件下根据需以式 (2) 式 (3) 或式 (4) 为目标进行用水网络设计；对多杂质系统，通过夹点分析求得最小新鲜水用量的方法比较烦琐，本文以新鲜水用量最小为目标函数。

4 实 例

实例 1 取自 Olesen 和 Polley^[3]，系统包含 6 个过程，本文采用水夹点分析所得最小新鲜水用量为 $157.15 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ ，夹点为 $100 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ；利用水夹点综合得到用水网络结构如图 3 所示，Savelski 和 Bagajewicz^[11]利用数学规划法所得用水网络结构如图 4 所示。利用夹点规则 1 可知过程 1 位于夹点下方 ($25 \sim 80 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$) (不包含夹点)，不排放废水，过程 2、3、4、5、6 到过程 1 的回用不存在；利用规则 2 可知过程 6 不使用新鲜水 ($400 \sim 800 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$) (不包含夹点)；利用规则 3 判断过程 3 位于夹点下方 ($25 \sim 100 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$) 和过程 4 ($50 \sim 100 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$) 位于夹点下方，过程 5 ($400 \sim 800 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$) 位于夹点下方 (包含夹点)，过程 6 到过程 2、4 的回用不存在；利用规则 4 判断过程 6 到过程 3 的回用不存在，过程 5 到过程 2、3、4 的回用不存在，过程 3 到过程 2、4 的回用不存在。回用结构由 30 个降为 17 个。本文以最小回用连接数和最小总连接数为目标函数所得用水网络结构相同，如图 5 所示，比上述两种方法所得回用连接要减少一个，且不需要二次回用。最小新鲜水用量的用水网络有多种，用水夹点分析求得最小新鲜水用量和作出网络设计结构判断后，可以得到满足各种需要、更加简单实用的用水网络结构设计。

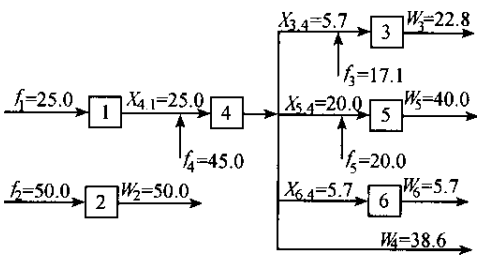


Fig.4 Optimal scheme of water utilization network for case study by Savelski and Bagajewicz

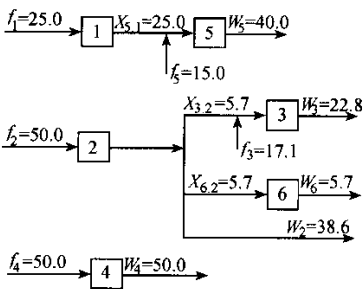


Fig.5 Optimal scheme of water utilization network for case study 1 in this paper

实例 2 取自 Bagajewicz^[13]，包括 10 个用水过程、3 种杂质。

对于比较大规模的多杂质用水网络设计问题，单纯的水夹点技术或数学规划法所形成的超结构 MINLP 模型求解起来都非常困难。本文应用夹点规则的过程如下：杂质 A、B、C 的夹点分别为 $70 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 、 $600 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 、 $120 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。(1)根据规则 1，判断过程 3 和过程 5 对每种杂质来说都位于夹点下方 (不包含夹点)，为只使用新鲜水的过程且不排放废水，且其他过程到过程 3 和过程 5 的回用不存在；(2)根据规则 3 判断过程 6 对每种杂质来说都位于夹点上方，过程 1、2、4、7、8、9 都位于夹点上方 (包含夹点)，过程 1、2、4、7、8、9 到过程 6 的回用不存在；(3)各用水过程的关键杂质出口浓度如表 1 所示，根据规则 4 判断过程 1 的关键杂质为 B 且过程 1 的出口杂质浓度最大，则过程 1 到过程 2、4、7、8、9、10 的回用不存在；删去过程 1，可知过程 2 的关键杂质为 C 且出口杂质浓度最大，则过程 2 到过程 4、7、8、9、10 的回用不存在；删去过程 2，可知过程 7 的关键杂质为 A 且出口浓度达到最大，则过程 7 到过程 4、8、9、10

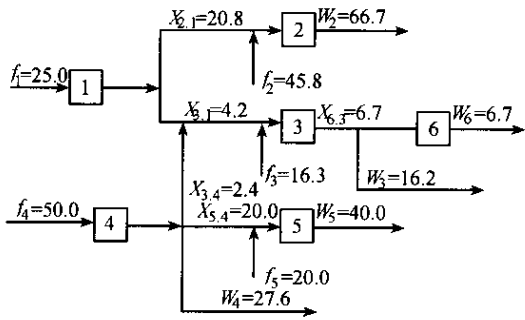


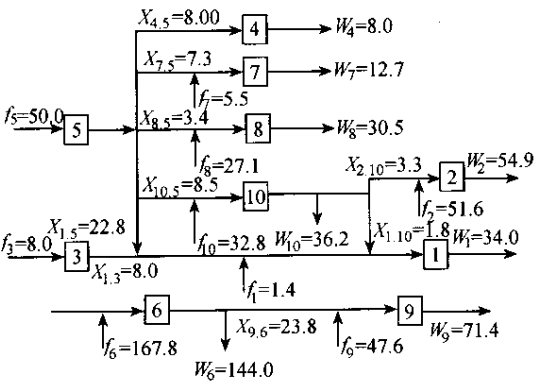
Fig.3 Optimal scheme of water utilization network for case study by water pinch synthesis
万方数据

的回用不存在；删去过程 7，可知过程 4 的关键杂质为 B 且出口浓度达到最大，可知过程 4 到过程 8、9、10 的回用不存在，至此符合规则 4 的用水过程判断完毕。其他回用是否存在将由整数变量的优化获得。回用结构由 90 个降为 48 个，利用通用代数建模系统 GAMS 很容易求解。

Table 1 Outlet concentration of key contaminant of water-using process

Process	Key contaminant	Outlet concentration/mg·L ⁻¹
1	B	12500
2	C	9500
4	B	8000
6	B	600
7	A	150
8	A	100
9	B	3000
10	A	100

对降维的超结构 MINLP 模型求解所得用水网络设计如图 6 所示，最小新鲜水用量为 391.80 t·h⁻¹，比文献 13 利用树搜索法所得最小新鲜水用量 392.85 t·h⁻¹略小。因树搜索法基本上采用“枚举法”，而且通过不断更新上界来决定最优回用结构，有误差存在的可能性。另外，各自所采用优化方法不同，所得解的精度也有差异，可以认为本文所得优化解和树搜索法所得解是一致的。且本文所建模型本身满足最优必要性条件，所得解是合理的。树搜索法是目前惟一能确保找到多杂质用水网络最优解的方法，本文所提方法对实例的计算结果与树搜索法比较表明，该方法对多杂质用水网络设计所形成的 MINLP 问题是可以找到全局优化解或近似优化解的，且本文所提方法计算量比树搜索法有明显减少。



$Y_{i,s}$ ——过程 i 是否使用新鲜水
 $Y_{k,i}$ ——过程 i 到过程 k 的回用是否存在
上角标
max——最大
下角标
 b ——废水排放地
 i ——用水过程
in——进口
 j ——污染物
 k ——用水过程
out——出口
 s ——新鲜水源

References

1 Takama N , Kuriyama T , Shiroko K. Optimal Water Allocation in a Petroleum Refinery. *Computers Chem. Engng.* , 1980 , **4**(4) : 251—258
2 Wang Y P , Smith R. Wastewater Minimization. *Chem. Eng. Sci.* , 1994 , **49**(7) : 981—1006
3 Olesen S G , Polley G T. A Simple Methodology for the Design of Water Networks Handling Single Contaminant. *Transactions IchemE , Part A* , 1997 , **75** : 420—426
4 Feng Xiao , Warren D Seider. New Structure and Design Methodology for Water Network. *Ind. Eng. Chem. Res.* , 2001 , **40**(26) : 6140—6146
5 Polley G T , Polley S G. Design Better Water Network. *Chemical Engineering Progress* , 2000 , **96**(2) : 47—52
6 Yang Y H , Lou H H , Huang Y L. Synthesis of an Optimal Wastewater Reuse Networks. *Water Management* , 2000 , **20** : 311—319

7 Huang C H , Chang C T , Ling H C , Chang C C. A Mathematical Programming Modes for Water Usage and Treatment Network Design. *Ind. Eng. Chem. Res.* , 1999 , **38** : 2666—2679
8 Zhou Q , Lou H H , Huang Y L. Design of a Switchable Water Allocation Network Based on Process Dynamics. *Ind. Eng. Chem. Res.* , 2001 , **40**(22) : 4866—4873
9 Ming-Jeng Tasi , Chuei-Tin Chang. Water Usage and Treatment Network Design Using Genetic Algorithm. *Ind. Eng. Chem. Res.* , 2001 , **40**(22) : 4874—4888
10 Hu Yangdong(胡仰栋) , Xu Dongmei(徐冬梅) , Hua Bei(华贵) , Han Fangyu(韩方煜). Step by Step Linear Programming Method for Wastewater Minimization. *Journal of Chemical Industry and Engineering(China)(化工学报)* , 2002 , **53**(1) : 66—71
11 Savelski M J , Bagajewicz M J. On the Optimality Conditions of Water Utilization Systems in Process Plants with Single Contaminant. *Chem. Eng. Sci.* , 2000 , **55** : 5035—5048
12 Bagajewicz M J. A Review of Recent Design Procedures for Water Networks in Refineries and Process Plants. *Computers Chem. Engng.* , 2000 , **24** : 2093—2113
13 Bagajewicz M J , Rivas M , Savelski M J. A New Approach to the Design of Utilization Systems with Multiple Contaminants in Process Plants. In : *Annual AIChE Meeting* , Dallas , TX , 1999
14 Bagajewicz M J , Rivas M , Savelski M J. A Robust Method to Obtain Optimal and Sub-optimal Design and Retrofit Solutions of Water Utilization Systems with Multiple Contaminants in Process Plants. *Computers Chem. Engng.* , 2000 , **24** : 1461—1466
15 Alva-Argaez A , Kokossis A C , Smith R. Wastewater Minimization of Industrial Systems Using an Integrated Approach. *Computers Chem. Engng.* , 1998 , **22**(Suppl) : s741—744
16 Mann J G , Liu Y A. Industrial Water Reuse and Wastewater Minimization. New York , McGraw-Hill , 1999