高 等 学 校 教 材

化工中的优化方法

邓正龙 主编

化学工业出版社

高等学校教材

化工中的优化方法

邓正龙 主编

化学工业出版社
·北 京·

（京）新登字039号

图书在版编目（CIP）数据

化工中的优化方法/邓正龙主编.—北京：化学工业出版社，1992.5（2000.4重印）

高等学校教材

ISBN 7-5025-0991-7

Ⅰ.化… Ⅱ.邓… Ⅲ.最优化算法-化学工程-高等学校-教材 Ⅳ.TQ015.9

中国版本图书馆CIP数据核字（95）第15804号

高等学校教材

化工中的优化方法

邓正龙 主编

责任编辑：胡作强

•

化学工业出版社出版发行

（北京市朝阳区惠新里3号 邮政编码100029）

http://www.cip.com.cn

•

新华书店北京发行所经销

北京市燕山印刷厂印刷

北京市燕山印刷厂装订

开本787×1092毫米1/16 印张16¼ 字数407千字

1992年5月第1版 2000年4月北京第4次印刷

印 数：7401—9400

ISBN 7-5025-0991-7/G·271

定 价：22.00元

前　　言

最优化技术是一门新兴的应用性很强的技术，它是研究在一定条件下如何用最小的代价，以获得最佳的效果。第二次世界大战后，由于经济、军事、科技等领域的迫切需要，以及运筹学，控制论，系统工程、计算机技术等的发展，为最优化技术的迅速发展提供了理论上和手段上的基础条件，现在，它已逐步成为工业、农业、交通、能源、军事、管理等部门不可缺少的重要技术。化工领域中同样存在大量的最优化问题，国内外的应用实践表明，在同样条件下，经过优化技术的处理，对过程系统效率的提高，能耗的降低，资源的合理利用，经济效益的提高等，均有显著的效果。一般说来，处理对象的规模愈大，这种效果也愈显著。这对长期以来，主要依靠常规方法和经验进行设计、运行、管理和控制的化工领域来说，其应用前景无疑是巨大的。介绍最优化方法的书籍目前已较多，但大都是从数学领域的角度进行编写，数学理论上较为严谨，但对化工特点和需要的反映较为不足，这本教材是编者多年来为化工类各专业本科生、研究生、化工工程技术人员讲授最优化方法的教学实践基础上，按照全国化学工程专业教学指导委员会关于本门课程的基本要求进行编写的。主要介绍化工中常用的优化方法，以基本概念、基本原理、常用方法的计算步骤为重点，突出化工优化问题的分析、数学模型的建立、优化方法的具体应用。叙述上将起点适当放低，由浅入深地介绍，使读者在学习了有关前修课程后，可以较好地掌握本书的基本要求，进而提高优化意识和分析问题、解决问题的基本技能，为今后从事化工过程的优化设计、优化操作、优化管理和控制、最佳实验方案的确定、数据的处理、以及进一步深入学习等奠定较好的基础。

在教学过程中，各院校可根据学时的安排和教学要求进行内容的取舍，有条件的院校可以安排10至20机时，提供较大型的作业，让学生进行建模和编程计算，以巩固和加深课堂内容。

本书介绍的最优化方法，虽然大多是近几十年国外的学者所开发，但就最优化思想和意识而言，我国古代在军事、水利、建筑施工、决策管理等方面，都有很多成功的应用。我们应当继承和发扬学以致用的优良传统，让最优化技术在我国四化建设中，发挥积极的作用。

本书由成都科技大学邓正龙主编，清华大学陈丙珍教授主审。清华大学何小荣编写了第三章和第五章，成都科技大学蒋兆贵编写了第一章和第六章的部分内容，其余各章由邓正龙编写，并负责全书的统稿。十分感谢：清华大学陈丙珍教授对本书进行的精心审定和指导；大连理工大学袁一教授、清华大学汪家鼎教授和成都科技大学王建华教授的热情支持、帮助和指导。

限于编者的水平和经验，不足和错误之处敬请读者批评、指正。

邓正龙　何小荣　蒋兆贵

1990.7 成都

内容提要

本书由浅入深地介绍化工中常用最优化方法的基本概念，基本原理和常用方法的计算步骤。通过20多个化工实例介绍了化工中优化问题的分析，数学模型的建立及最优化方法的具体应用。全书共分六章：概论；单变量函数最优化；无约束多变量问题最优化；线性规划；带约束非线性问题最优化；化工复杂系统的优化基础。书后附有常用优化方法的计算框图。

本书作为化工类工程和工艺专业高年级学生"化工中的优化方法"课程的教材，也可供化工类研究生，化工工程技术人员和管理干部学习参考。

目 录

第一章 概 论

随着经济和科学技术的发展，最优化技术已逐渐成为现代科技中比较独立而又成熟的一门技术，在设计、生产、规划、管理与控制等领域，得到了广泛应用。从学科上讲，它既是应用数学的一个分支，又是系统工程学的重要内容。所谓最优化就是如何以最小的代价获得最大的效果。当然，效果的大小和处理的对象系统有关，一般来说，对象系统范围愈大，优化后的效果也愈大，例如化工企业中，某个单元过程的优化效果比不上全过程的优化效果。然而，后者的优化比前者的优化更为困难和复杂。本章主要介绍优化方法的基础概念和知识，为以后各章的学习奠定基础。

第一节 最优化方法和问题概述

一、化工领域中的最优化问题

由于化工系统自身的特点和复杂性，最优化的研究与应用起步较晚，所面临的最优化问题较多，研究应用的潜力巨大，下面仅从我国化工实际情况，在开发、设计、生产、管理、控制、规划等方面提出最优化面临的主要问题，以利读者研究。

1．研究、开发、设计方面

（1）化工单元、流程结构、工艺条件的最优设计和计算机模拟与辅助设计。

（2）化工过程最佳参数的确定。

（3）化工系统的可行性分析，技术经济分析和决策的最优化。

（4）最佳实验方案、研究方案的确定。

（5）化工装备和系统可靠性的最优设计。

（6）化工能量系统的最优综合。

（7）化工企业的最优总体设计。

（8）厂址选择的最优化分析和决策。

2．过程运行、管理和控制方面

（1）系统节能、降耗、挖潜、改造中的最优化分析和决策。

（2）过程最佳操作参数的分析和确定。

（3）系统的最优排产、资源的最佳利用、人力最佳调配、施工计划的最佳安排。

（4）过程的计算机最优控制。

（5）系统经济效益和能耗的预测、分析及最优决策。

（6）污染物的最佳治理与排放。

（7）催化剂和设备的最佳更换。

（8）系统可靠性与分析决策的最优化。

（9）能量回收与综合的最优化。

（10）挖潜、技改的投资分析和最优决策。

3．化工发展战略方面

（1）区域化工资源综合利用的最优规划。

（2）区域化工"投入—产出"模型的建立、分析和最优决策。

（3）区域性化工与环境治理的最优规划。

（4）区域化工产品综合发展战略的优化分析和决策。

以下我们举几个具体的例子。

二、化工最优化问题实例

最优化技术在化工单元过程及系统的最优设计；现有生产操作分析；数据处理；过程系统的最优控制；企业管理等方面都得到了重要应用，如：

1．化工过程数学模型的参数估值

在化工过程数学模型的参数确定中，常需要通过一组实测数据去确定半经验模型中的待定参数，使模型值与实测值有最好的拟合，这类问题常可用平方和函数的最优化方法予以解决。

例如，在化工分离工程中进行平衡级计算时，往往需要二元平衡数据去拟合活度系数方程中的参数，进而推算出多元系的相平衡数据。其中威尔桑（Wilson）参数的确定就是一例。

已知二元系汽液平衡数据（x_{1i}，x_{2i}；y_{1i}，y_{2i}）$(i=1,2,\cdots m)$，拟合Wilson活度系数方程

$$\begin{cases} \ln\gamma_1 = -\ln(x_1+G_{12}x_2) + x_2\left[\dfrac{G_{12}}{x_1+G_{12}x_2} - \dfrac{G_{21}}{G_{21}x_1+x_2}\right] \\ \ln\gamma_2 = -\ln(G_{21}x_1+x_2) - x_1\left[\dfrac{G_{12}}{x_1+G_{12}x_2} - \dfrac{G_{21}}{G_{21}x_1+x_2}\right] \end{cases}$$

中的参数G_{12}，G_{21}，

照最小二乘原理，问题转化为寻求目标函数

$$S(G_{12}, G_{21}) = \sum_{i=1}^{m} r_i^2$$

的极小点（G_{12}^*, G_{21}^*），即最优的Wilson参数。式中：

$$r_i = (Q_{实测} - Q_{计算}) = Q_{实测} + x\ln[x + G_{12}(1-x)] + (1-x)\ln(G_{21}x + 1 - x)$$

其中：$Q_{实测} = x_1\ln\gamma_{1实} + x_2\ln\gamma_{2实}$

$$x_1 = x, \quad x_2 = 1 - x$$

2．过程设计的最优化

设过程中某化工原料在一定的温度和压力下经化学反应，生成产品。现求得每年的生产费用J与操作压力x_1和操作温度x_2之间的函数关系为

$$J = f(x_1, x_2) = 60 - 10x_1 - 4x_2 + x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2$$

从生产上考虑x_1，x_2的取值不能随意，必须按实际给予约束，最简单的约束是：

$$a_i \leqslant x_i \leqslant b_i \qquad (i=1,2)$$

$$D = \{\bar{x} \mid a_i \leqslant x_i \leqslant b_i, \ i=1,2\}$$

现求在上述约束条件下，使年生产费用最小的操作压力x_1与操作温度x_2。即

$$\begin{cases} \min J = (60 - 10x_1 - 4x_2 + x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2) \\ \text{s.t.} \quad a_i \leqslant x_i \leqslant b_i \qquad (i=1,2) \end{cases}$$

3．生产计划的最优化问题

例如，某化工厂生产A、B两种产品，它们需要经过三种设备的加工，其工时如下所

示。设备Ⅰ、Ⅱ和Ⅲ每天可使用的时间分别不超过12，10和8小时。产品A和B的利润随市场的需要有所波动，如果预测未来某个时间内A和B的利润分别为4千元/吨和3千元/吨，问在那个时期内，每天应生产产品A、B各多少吨，才能使工厂获得最大利润？有关数据如下：

设　　备	Ⅰ	Ⅱ	Ⅲ
产品A(小时/吨)	3	3	4
产品B(小时/吨)	4	3	2
设备每天工作时数限额	12	10	8

设每日应生产产品A和B分别为x_1和x_2吨，则总利润为

$$f(\bar{x})=4x_1+3x_2$$

并x_1与x_2必须满足如下约束条件

$$\begin{cases}3x_1+4x_2\leqslant 12\\ 3x_1+3x_2\leqslant 10\\ 4x_1+2x_2\leqslant 8\\ x_1\geqslant 0,\ x_2\geqslant 0\end{cases}$$

该优化问题归结为在上述约束条件下，求目标函数$f(\bar{x})$的最大值。

4．化工连续系统的最优化问题

例如，管式反应器的最优温度分布

假设在一个长度为L的理想置换的管式反应器内进行如下一级串联反应

$$A\xrightarrow{K_A}B\xrightarrow{K_B}C$$

其中

$$K_A=k_{A0}\exp[-E_A/RT_{(L)}]$$
$$K_B=k_{B0}\exp[-E_B/RT_{(L)}]$$

反应速度方程为

$$\begin{cases}\dfrac{dx_A(L)}{dL}=-K_Ax_A(L)\\[2ex] \dfrac{dx_B(L)}{dL}=K_Ax_A(L)-K_Bx_B(L)\end{cases}$$

$$x_A(0)=x_A^{(0)},\ x_B(0)=x_B^{(0)}$$

求使反应器出口处目的产物浓度$x_B(L)$最大的轴向温度分布$T(L)$。即

$$\max J(T(L))=\max\int_0^L\frac{dx_B(L)}{dL}dL$$

$$\begin{cases}\dfrac{dx_A(L)}{dL}=-K_Ax_A(L)\\[2ex] \dfrac{dx_B(L)}{dL}=K_Ax_A(L)-K_Bx_B(L)\\[2ex] x_A(0)=x_A^{(0)},\ x_B(0)=x_B^{(0)}\end{cases}$$

本题归结为求微分等式约束条件下的目标泛函数的极大问题。

三、化工最优化的评价准则

系统的评价根据研究的需要不同，对象不同，目的不同，可以有不同的评价准则，例如系统可靠性的评价，生产效率的评价，环境污染的评价等。作为化工最优化来说，主要讨论的是化工过程系统或生产系统，因而最优化的评价准则主要是效益和费用之间关系的评价。因此，一般采用系统的费用(C)和效益(E)作为评价基准，此种基准通常又以下面三种形式表述：

（1）以各种方案的效益相同为基准，选择费用最小的方案为最优方案。即当E_i相同时，如果$C_i \to C_{min}$，则方案 i 为最优方案，其中 $i=1,2\cdots\cdots n$。所谓效益，一般是指效率、转化率，产量，功能，原材料等。例如，在保证某一个高的转化率前提下，如何设计某一个特定的化学反应器使其总费用最小。

（2）以各种方案的费用相同为基准，选择效益最大的方案为最优方案：即C_i相同条件下若$E_i \to E_{max}$则方案 i 为最优方案。例如，在总费用一定的情况下，如何设计某一个化学反应器使其转化率达到最大。

（3）以效益费用比为基准，选择效益费用比最大的方案为最优方案。在一般情况下，为了取得最大效益，其费用也要相应的增大，但如果效益的增加比费用的增加来得快，则比率就大，如果$(E_i/C_i) \longrightarrow \max$则方案 i 为最优方案。

上述的评价准则，往往就是研究最优化问题的目标。

四、最优化方法的分类

最优化方法可从以下几个方面进行分类：

1．按照要求优化的目标是一个或多个，可分为单目标优化方法和多目标优化方法。多目标的优化目前尚不很成熟，不加说明时，都是指单目标优化方法，本书第六章将对多目标优化作简单介绍。

2．按照处理过程中，是否含有随机变量和对象系统是否具有模糊性，可分为确定型优化方法、随机型优化方法和模糊最优化方法，本书只介绍部份确定型优化方法。

3．按照对变量是否有取值上的限制，可分为无约束优化方法和有约束优化方法。有约束优化方法又可分为线性规划法、非线性规划法、几何规划法和动态规划法。此外，对变量和系统状态随时间而变化的动态系统，尚有最小值原理法。由于教学基本要求和篇幅所限，几何规划和最小值原理本书不予介绍。

4．按照是否要用到目标函数和约束函数的导数性质，可分为一阶方法、二阶方法和直接比较法。

5．按照变量的多少和约束条件的情况，可分为单变量优化方法和多变量优化方法，后者又可分为无约束优化方法、线性规划法、非线性规划法。

6．根据求解过程是否使用迭代算法和数值逼近的方法，可分为解析法和数值搜索法，后者能解决前者不能解决的问题，但前者能将优化方法的概念和原理进行深入的刻画。

上述分类只是一个粗略的分类，读者通过以后各章的学习，对这个划分会逐渐清晰，进而有利于优化方法的总体了解以及正确的选择和使用。

五、化工最优化问题的求解步骤

1．由最优化的概念和意识，深入分析对象的特点，相互影响的因素和内在的关系，确定优化的目标。

2．根据对象的内在规律和化工技术知识，确定和选择相应的变量，建立目标函数和约束条件的数学模型。

3. 根据工程实际的需要，计算工具的性能，数学模型的状况，确定计算要求的精度和终止计算的准则，选择合适的最优化方法。

4. 根据数学模型和采用的最优化方法，求出满足约束条件下的最优目标函数值和相应的最优解。

5. 根据最优目标值和最优解，再用工程技术知识分析最优值和最优解的合理性和可行性，对解和目标值进行相应的圆整。

6. 对某些大型和复杂问题，在可能条件下，还应进行一定的灵敏度分析，实施过程中进行必要的监控，实施之后进行验证和分析，以保证最优化效果的实现。

第二节 基本概念和数学模型

一、基本概念和术语

例 1-1 欲设计一封闭的圆柱型贮罐，其容积给定为V（已知量），问：此贮罐的直径D和高H应设计为多少，才能使制作该贮罐需要的钢材量为最少？

解： 此例在高等数学教材中已曾介绍。根据题意，钢材用量最少实际可处理为表面积S最小，其最优化数学模型如下

$$\min\ S=2\cdot\frac{\pi}{4}D^2+\pi DH \tag{1-1}$$

$$\text{s. t. }V=\frac{\pi}{4}D^2H \tag{1-2}$$

由式(1-2)有$H=\frac{4V}{\pi D^2}$代入式(1-1)，则有

$$S=\frac{\pi}{2}D^2+\frac{4V}{D}\longrightarrow\min \tag{1-3}$$

即 $S=f(D)$，由微分法$\frac{dS}{dD}=0$

得 $$D^*=\sqrt[3]{\frac{4V}{\pi}}=H^* \tag{1-4}$$

$$S^*=3\sqrt[3]{2\pi V^2} \tag{1-5}$$

式中D^*，H^*，S^*即为所求

由此可引出如下术语和概念。

1. 目标函数：凡是最优化问题，都有要达到的“最优”目标，把目标写成为数学形式的表达式称为目标函数，如式(1-1)。由于问题和场合的不同，目标函数有时称为性能指标或评价函数。把目标变成目标函数后就可以用若干数学方法和最优化方法进行定量化处理，这是最优化方法与古典型、经验型的最优化思想和技术在性质上的区别所在。本例的目标函数中，变量数只有D和H两个，而在一般问题中可以多达n个变量x_i($i=1,2\cdots\cdots n$)，如前面所举的几个例子。这样，目标函数的一般表达式为：

$$J=f(\bar{x}) \tag{1-6}$$

$$\text{其中}\ \bar{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=(x_1,\ x_2\cdots\cdots x_n)^T \tag{1-7}$$

即$\bar{x}$为n维列向量，上标T表示向量或矩阵的转置。

2．约束条件与状态方程

当$\bar{x}$的各分量x_i($i=1,2\cdots\cdots n$)为一组特定的数值时，称为一个决策或一个解，因场合的不同有时也称为一个设计或一个控制。实际上有些决策在技术上、工程上或实践中是不现实的或明显地不合理，甚至是违反某些原则的。因此，变量$\bar{x}$的取值范围通常都有一个限制，这种对变量取值的限制称为约束条件，这种约束条件同样是以数学关系予以表达的，凡约束条件是以不等式进行表达的称为不等式约束，用等式来表达的称为等式约束，如本例中的式(1-2)即是一个等式约束，它准确地表达了变量D和H取值时所应当遵循的限制条件。化工过程中通常由热力学、动力学所得到的物料衡算式、热量衡算式、动量衡算式等都属于等式约束，而一般的安全条件，例如过程操作时的压力上限、温度上限等则属于不等式约束。

等式约束把上述过程或其它过程，系统的状态刻画得十分清楚而准确，因此，等式约束式又被称为过程或系统的状态方程。

3．决策变量和状态变量、系统自由度

在最优化问题的n个变量中，可根据在最优化决策中的特性和所引起的作用划分为决策变量和状态变量。状态变量是最能够描述过程或系统的特征或行为的（即状态的）最少一组变量，其值是不能任意选取的。决策变量根据最优化任务的不同又可称为设计变量、控制变量、操作变量，它是由决策者（设计者、控制者、操作者等）根据目标和约束条件的要求而确定的。所谓决策，就是选择一组决策变量以满足任务的要求。决策变量一经确定，状态变量也就随之确定，从而过程或系统的状态也就被确定。在面临某个具体问题时，究竟哪些变量选为决策变量应根据具体情况而定，但一般应选择那些能观察，能检验，能控制的变量作为决策变量，例如化工过程中压力、温度、流量等易于观察和控制，宜于作决策变量。工程上决策变量和状态变量有较明显的特征上的差别，但在数学处理上却并不严格区别，它是以数学上如何处理更方便作为一般准则。

在确定状态变量和决策变量时必须遵循以下原则：

状态变量数目＝状态方程数目

且有

变量的总数－状态方程数＝决策变量数

过程或系统中最优化问题上的决策变量数又称为系统的自由度。系统自由度标志着系统在最优化设计中可供选择或设计的难易程度。对于系统的最优设计来说显然有：

（1）当自由度等于零时，系统没有最优化问题，也即是没有决策变量，解是唯一的。

（2）当自由度较大时，系统的最优设计较困难。

（3）当自由度较小时，系统最优设计较容易，显然，系统的自由度必须大于或等于零，当自由度为1时，实际为单变量的最优化问题。

例如例1-1中变量总数为2，状态方程数为1，则决策变量数即系统的自由度为2－1＝1，因此该问题实际上是单变量函数的最优化问题，而变量D和H中谁作决策变量或状态变量对数学处理来说并无多大区别，所得的最终结果都一样，但在工程上为了设计和制作的方便，把直径D作为决策变量显然更为方便和合适。

4．可行域和可行解，最优值和最优点

约束条件的实质是对变量和决策构成了一个区域，以后的决策只能在这个区域中进行取舍，这个区域称为可行域。即可行域是满足所有约束条件的决策的全体集合。可行域愈大，则变量的取值范围也愈大。反之，可行域愈小则变量的取值范围就愈小，可行域一般用D表示。当D的范围为整个n维欧氏空间时，实际上则是无约束。如果D包括其边界上的所有点，则称D为闭域，否则称为开域。

显然，任何满足约束条件的解，即$\bar{x}\in D$，才是有实际意义的，这种解称为可行解，即在可行域中所得到的最优化问题的解称为可行解，否则，称为不可行解，尽管它们可能存在。

例 1-2　由某化工厂的技术经济分析简化而得的目标函数为：

$$f(\bar{x})=1000x_1+4\times10^9x_1^{-1}x_2^{-1}+2.5\times10^5x_2$$

按技术要求，变量x_1和x_2应满足的条件为

$$0\leqslant x_1\leqslant 2200$$

$$0\leqslant x_2\leqslant 8$$

这两个不等式在坐标平面上围划的一块长方形区域就是该问题的可行域。如图 1-1所示。现考虑D中的一个特殊点$\bar{x}^*$，该点的目标函数值比可行域中任何其它点的函数值小，即对D中的一切$\bar{x}\neq\bar{x}^*$有

$$f(\bar{x}^*)<f(\bar{x}) \qquad (1\text{-}8)$$

则$J^*=f(\bar{x}^*)$是目标函数的最小值，而$\bar{x}^*$叫做最小点，它是唯一的。如果对D中一切$\bar{x}\neq\bar{x}^*$，若有下式成立

$$f(\bar{x}^*)\leqslant f(\bar{x}) \qquad (1\text{-}9)$$

此时存在的不只一个最小点，但目标函数的最小值仍是唯一的。上式可以写为：

$$J^*=\min_{\bar{x}\in D}[f(\bar{x})] \qquad (1\text{-}10)$$

如果最小点$\bar{x}^*$在D的边界上，则J^*为边界最小值，否则便是内部最小值。

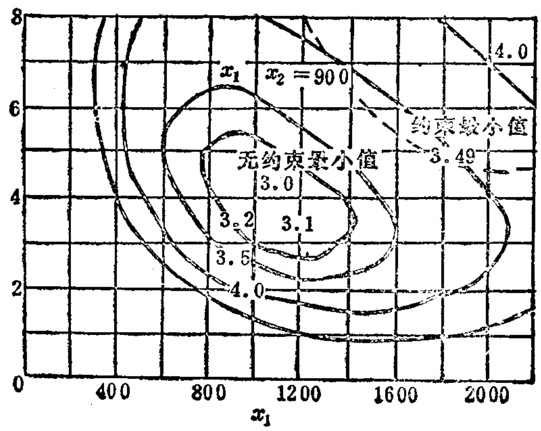

图 1-1

J的最大值和对应的最大点是以同样的方式来定义和标记的，只要把不等式中的不等号反向即可。

$$J^*=f(\bar{x}^*)=\max_{\bar{x}}[f(\bar{x})] \qquad (1\text{-}11)$$

为了一般地统一成最优的概念，我们称$f(\bar{x}^*)$为最优值，而$\bar{x}^*$为最优点，记为

$$J^*=f(\bar{x}^*)=\operatorname{opt}_{\bar{x}}[f(\bar{x})] \qquad (1\text{-}12)$$

最大和最小之间存在着一定的基本关系。若b为正数，a为任意实数，如果$\bar{x}^*$是$f(\bar{x})$的最小点，它便是$a+bf(\bar{x})$的最小点。