

过程系统工程理论与实践丛书

PSE

过程系统优化技术

魏寿彭 著

中国石化出版社

过程系统工程理论与实践丛书

过程系统优化技术

魏寿彭 著

中国石化出版社

(京)新登字048号

内 容 提 要

本书是《过程系统工程理论与实践丛书》之一。该丛书是普及型高科技系列读物，主要介绍过程系统工程这门新型学科，其应用领域包括化工、石油化工、冶金、轻工、建材等物流型工业。

本书介绍了系统优化方法，包括线性规划及非线性规划问题、无约束最优化问题的求解方法以及系统优化设计。重点阐述了过程系统优化综合技术，即模式识别、统计调优、操作模拟分析调优和装置模拟优化的方法。

本丛书各分册都具有普及性、实用性和可操作的特点，适用于过程工业的技术人员、管理人员以及大、中专学校师生阅读。

过程系统工程理论与实践丛书

过程系统优化技术

魏寿彭 著

中国石化出版社出版发行

(北京朝阳区太阳宫路甲1号 邮政编码, 100029)

海丰印刷厂排版印刷

新华书店北京发行所经销

787×1092毫米 32开本 7¹/₈印张 138千字 印1—2000

1995年5月北京第1版 1995年5月北京第1次印刷

ISBN 7-80043-643-1/TK·006 定价: 7.00元

序

过程系统工程是在系统工程、化学工程、过程控制、计算数学、信息技术、计算机技术等学科的边缘上产生的一门综合性学科。它以处理物料—能量—信息流的过程系统为研究对象，其核心功能是过程系统的组织、计划、协调、控制和管理。它广泛地用于化学、冶金、建材、食品等过程工业中，目的是在总体上达到技术上及经济上的最优化。

过程系统工程大约是在60年代开始形成一门独立学科的，此后得到了迅速的发展。在各种期刊杂志上及三年一度的过程系统工程国际会议上发表了大量的文章，其中一些关键技术，如过程模拟、过程分析、过程综合、过程预测、过程评价、过程可靠性分析等日益成熟，应用领域也不断扩展，已经成为过程工业发展中不可缺少的一门高技术。

二十多年来，我国学者及工程技术人员在努力学习国外先进技术的基础上，在实践中积累了不少经验，在技术上也有一些进展。但由于彼此之间缺乏联系及交流，在过程系统工程方面尚未能形成一支强大的人才队伍，有不少好的成果得不到应有的推广。有鉴于此，我国著名的系统工程专家钱学森教授在1988年12月23日给我的来信中，倡议成立一个全国性的学术团体。他在信中指出：“我想中国系统工程学会似尚缺少一个专门搞生产流程的委员会，而生产流程的系统工程对化学工业特别重要。您如同意，您可作为发起人向学会的秘书长或副秘书长建议成立这个委员会”。

在钱老的大力推动下，中国系统工程学会过程系统工程专业委员会于1991年宣告成立。在成立大会上，不少代表建

议要大力普及过程系统工程的基本知识。因此在第一次理事会上便决定要编辑出版一套《过程系统工程理论与实践丛书》，并为此组成了编辑委员会，确定了丛书的选题及作者。在中国石化出版社的大力支持下，这套丛书得以顺利地出版。在此我仅代表中国系统工程学会过程系统工程专业委员会向各位编委、各位作者、以及中国石化出版社的有关人员表示深切的感谢。

这套丛书共分10册，基本上覆盖了过程系统工程的主要领域。出版这套丛书的目的是宣传并普及过程系统工程的基本知识，以引起读者进一步学习的兴趣。其读者对象是过程工业领域内大专以上文化程度的中青年工程技术人员。我们希望这套丛书能达到以下三点基本要求：

1. **系统性**：框架完整，逻辑清晰，每本书相对独立，深度相近，彼此之间有联系而不重复。

2. **科普性**：深入浅出，定性叙述与定量分析相结合，尽量避免复杂的数学推导。

3. **实用性**：理论与实践相结合，有一定数量的实例及应用软件介绍。

由于这套丛书是我们在过程系统工程领域内编写高级科普读物的第一次尝试，是否真正达到了上述要求，还有待读者的检验。我们热诚地希望读者能将对本书的宝贵意见通过中国石化出版社告诉我们，以便再版时加以改进。

中国系统工程学会过程系统工程
专业委员会主任委员

成思危

1994年4月6日

目 录

第一章 绪论	1
第二章 一般优化问题应用实例	4
第一节 简单设备优化计算实例	4
一、圆柱形贮槽的优化设计.....	4
二、气柜的优化设计.....	6
三、罐头的最小焊缝问题.....	7
四、罐头的优化设计.....	7
五、装料盘的优化设计.....	9
六、装料槽的优化设计.....	10
第二节 过程系统的子系统的优化	12
一、冷却器的优化设计.....	12
1. 非线性代数方程求根的中点法	18
2. 非线性代数方程求根的切线法	21
3. 非线性代数方程求根的割线法	23
二、乙烯生产最佳工艺参数的确定.....	26
第三章 一般优化问题的求解方法	31
第一节 无约束最优化问题的求解方法	31
一、单变量函数的极值问题.....	31
二、多变量函数的极值问题.....	35
1. 坐标轮换法	38
2. 梯度法	40
3. 牛顿法	42

4. 共轭梯度法	44
5. 拟牛顿法	48
三、求解无约束优化问题的单纯形法	49
第二节 线性规划问题的求解方法	61
第三节 非线性规划问题的求解方法	73
一、拉格朗日乘子法和罚函数法	75
1. 拉格朗日乘子法	77
2. 惩罚函数法与障碍函数法	79
二、二次规划法与序列二次规划法	87
1. 二次规划法	87
2. 序列二次规划法	90
三、复合形法与可变容差法	93
1. 复合形法	93
2. 可变容差法	96
第四节 几何规划问题的求解方法	99
第四章 过程系统优化的一般方法	106
第一节 过程系统优化实例	106
一、换热序列的优化设计	106
1. 求解非线性代数方程组的牛顿-拉夫森 方法	112
2. 求解非线性代数方程组的下降法	116
二、分离塔序列的优化设计	121
第二节 过程系统优化的动态规划法	124
一、应用动态规划法求解最优换热序列	130
二、应用动态规划法求解最优分离塔序列	134
第三节 过程系统优化的极大值原理法	137
一、应用极大值原理法求取最优温度轨线	144

二、应用极大值原理法求解最优换热序列·····	149
第五章 过程系统优化的综合技术 ·····	154
第一节 模式识别调优法 ·····	156
一、贝叶斯判别法·····	157
二、多重判别向量法·····	159
三、非线性影射法·····	160
四、主成分分析法·····	162
第二节 统计调优法 ·····	164
第三节 操作模拟分析调优法 ·····	167
第四节 装置模拟与优化调优法 ·····	170
第五节 回归分析与建模 ·····	178
一、一元线性回归·····	178
二、一元非线性问题的线性化处理·····	181
三、一元非线性回归·····	192
四、多元线性回归·····	195
五、多元非线性问题的线性化处理·····	202
第六节 装置模拟与优化法调优实例 ·····	206
一、对二甲苯、对甲基苯甲酸甲酯合并氧化 装置的生产调优·····	206
二、环己醇、环己酮硝酸氧化装置的生产 调优·····	215
主要参考文献 ·····	219

第一章 绪 论

人类自有生产活动以来，无时无刻不在同大自然打交道。人类在认识世界、改造世界的过程中，逐步形成了“系统”这一概念。随着人们对系统认识的深入，“系统优化”的概念也应运而生。但在科学技术尚不发达的古代，人们的认识水平还不高，对优化的认识仅仅停留在定性的水平上。

我国战国时代，李冰父子修建的都江堰工程就是一个典型的定性的系统优化的例子。为了变水患为水利，造福子孙后代，李冰父子率领人民大众修建了包括“鱼嘴”岷江分水工程、“飞沙堰”分洪排沙工程、“宝瓶口”引水工程为主体的都江堰水利工程。由于工程之间的相互关系处理得恰到好处，从而形成了一个优化的协调运转的工程总体。

15世纪下半叶，近代科学开始兴起，力学、天文学、物理学、化学、生物学从混为一体的哲学中独立出来，获得了迅速发展。到了19世纪上半叶，由于能量转化，细胞和进化论的发现，为唯物主义自然观的出现奠定了基础。后者认为，物质世界是由无数相互联系、相互依赖、相互制约、相互作用的事物和过程所形成的统一整体。这种认为物质世界普遍联系及其整体性的思想就是系统思想，也就是系统整体优化的思想。

现代科学技术的最大贡献就是使系统思想方法不仅能定性，而且逐步走向定量。为了使定性的系统思想转化成定量的系统思想，就必须解决系统的定量化方法与定量化工具问

题。而定量地研究系统整体优化的一类技术则是“系统工程”中的优化方法与技术。

我国著名科学家钱学森教授明确指出，系统工程是组织管理的科学，是组织管理系统在规划、研究、设计、制造、试验和使用中的科学方法，是一种对所有系统都具有普遍意义的科学方法。

“过程系统”通常是指通过物理变化和化学变化的方法，将原料转化成产品的生产过程。将系统工程的理论与方法用于求解过程系统的优化问题，特别是定量地研究过程系统的整体优化问题，这类技术就是“过程系统工程”。

研究过程系统的优化是一项复杂的、多种学科相互交叉、相互渗透的工程技术。必须综合运用好数学（如基础数学、工程数学、运筹学、计算数学、模糊数学）、物理学、化学（如物理化学、化学热力学、化学动力学、催化化学）、过程工艺（如化学工艺、冶金工艺、造纸工艺）、过程工程（如动量传递过程、能量传递过程、质量传递过程、化学反应过程）、过程设备（如反应器、加热炉、精馏塔、吸收塔、萃取塔、换热设备、压缩机、离心泵）、过程控制（如分布式计算机控制系统、可编程控制器）和计算机（如硬件、网络、数据库、软件平台、流程模拟软件、管理信息系统）等多种学科知识。

为了实现某一真实的过程系统的优化，还必须采用理论与实践相结合的方法（一方面注意过程系统运行过程中所积累的信息和经验，另一方面，更加重视过程系统当前的运行状况），定量分析与定性分析相结合的方法（如人工智能中的专家系统与人工神经网络方法），并通过各方面专家、学者、工程技术人员、管理人员的通力合作，方能奏效。因此，

过程系统的优化绝非是一个简单的、数学的或计算机求解方法问题。只有从真实过程系统的实际出发，采用理论与实验相结合的方法，方能建立一组能够反映真实过程系统实际的、能够经得起实践检验的过程系统优化模型，实现过程系统的优化。

人们不难发现，过程系统的优化是一门新兴的、正在发展中的、极其吸引人的科学技术。它不仅开拓了人们的视野，而且可以帮助人们从不自觉到自觉地关心、分析、研究身边的各类优化问题，从而获得明显的经济效益与社会效益。

显而易见，人们对客观世界的认识规律总是沿着从低级到高级、从简单到复杂、从知之不多到知之甚多的方向发展。因此，研究过程系统的优化问题，也应该是从简单的、局部的、取得点滴优化成果入手，不断总结经验，向复杂的、全局的，取得重大成果的方向发展，坚定信心，扩大战果。

总之，过程系统优化技术是一种人人可以入门，人人应该入门，人人可以应用，人人可以获益的现代化科学技术。本拙作的目的在于‘抛砖引玉’。鉴于研究过程系统的优化必须借助各种优化原理和方法，因此，本书深入浅出地介绍一些常用的、简单的、易于接受且实用的优化技术与应用实例，使读者能够尽快进入该领域，并结合自己的工作实际，对具体的过程系统优化问题作进一步深入地研究。

第二章 一般优化问题应用实例

第一节 简单设备优化计算实例

在实际应用中，一般的优化问题往往可以描述成为求取函数的极大值或极小值问题。此时，根据函数存在极值的必要条件：函数的一阶导数或一阶偏导数等于零，即可求出函数的极值点。至于该极值点究竟是极大点，还是极小点，往往凭经验即可判断。当然，一阶导数或一阶偏导数等于零的点也可能是驻点，而不是极值点。我们可根据函数存在极值的充要条件，即根据函数二阶导数的符号或是二阶偏导数矩阵的性质，判断其是否为极大点或极小点。不过，本书不拟作理论方面的探讨，只是从应用的角度加以介绍，以便使稍有一些高等数学知识的读者即可读懂本书，掌握分析问题与解决问题的方法。基于这种考虑，下面给出一些简单设备的优化计算实例。

一、圆柱形贮槽的优化设计

假设我们欲设计一个圆柱形的贮槽，其容积为 V ，问如何选取该贮槽的高径比，才能最节省材料？

现假定该圆柱形贮槽的高为 H ，半径为 R ，则制造该贮槽的材料应包括贮槽的上底、下底和圆筒体，若假定制造该圆柱形贮槽所需的钢板面积为 S ，则有：

$$S = 2\pi R^2 + 2\pi RH \rightarrow \min \quad (2-1)$$

式(2-1)即为圆柱形贮槽优化设计的目标函数，它应该满足的约束条件为：

$$V = \pi R^2 H \quad (2-2)$$

式(2-1)和式(2-2)构成了一个最简单的条件极值问题。

求解该条件极值问题的最简单的方法是：将约束条件代入目标函数中，使条件极值问题转化为无约束条件的极值问题，然后求解无约束条件的极值问题。这一方法通常叫做“消元法”，也可称为代入法。

由式(2-2)可得到：

$$H = \frac{V}{\pi R^2} \quad (2-3)$$

将式(2-3)代入式(2-1)可得到：

$$S = 2\pi R^2 + \frac{2V}{R} \rightarrow \min \quad (2-4)$$

式(2-4)即为无约束条件的极值问题，由于 V 为已知，因此，式(2-4)的含义是：寻找一个 R ，使 S 取极小值。

式(2-4)可根据函数存在极值的必要条件： $\frac{dS}{dR} = 0$ 进行求解。这种应用数学分析方法求取函数极值的方法称为解析法。

对式(2-4)求导可得到：

$$\frac{dS}{dR} = 4\pi R - \frac{2V}{R^2} = 0 \quad (2-5)$$

根据式(2-5)与式(2-2)可得到：

$$H = 2R$$

即圆柱形贮槽的优化设计方案为：令其高等于其直径。

二、气柜的优化设计

气柜与圆柱形贮槽的不同之处在于：一方面，气柜只有上底，而无下底；另一方面，气柜的圆筒体有一部分需没入水中。在考虑气柜的优化设计方案时，我们只能假设气柜圆筒体的下底刚好与水面相切。此时，若假设气柜的容积为 V ，高度为 H ，半径为 R ，制造气柜所需的钢板面积为 S ，则有：

此优化问题之目标函数为：

$$S = \pi R^2 + 2\pi R H \rightarrow \min \quad (2-6)$$

约束条件为：

$$V = \pi R^2 H \quad (2-7)$$

如同上例，式(2-6)与式(2-7)构成了一个条件极值问题，将式(2-7)代入式(2-6)可得到：

$$S = \pi R^2 + \frac{2V}{R} \quad (2-8)$$

式(2-8)为一无约束条件的极值，根据函数存在极值的必要条件，有：

$$\frac{dS}{dR} = 2\pi R - \frac{2V}{R^2} = 0 \quad (2-9)$$

由式(2-9)与式(2-7)可得到：

$$H = R$$

即气柜的优化设计方案是：令其高等于其半径。由于我们的最优解是在假设气柜的下底与水面相切的情况下得到的，并未考虑圆筒体浸没在水中的部分，因此，并不符合真实应用情况。事实上，气柜的高度总是大于其半径的。

三、罐头的最小焊缝问题

罐头和圆柱形贮槽一样，也是一个圆柱体，因此，若从节省铁皮材料的观点出发，其优化设计方案也应是高等于直径的圆柱体。现在假设焊缝的焊接成本高，问如何制造罐头方能使焊缝总长度最小？

显然，焊缝的总长度应等于上底和上底的圆周长加上圆柱的高。因此，优化设计的目标函数为：

$$L = 4\pi R + H \rightarrow \min \quad (2-10)$$

约束条件为：

$$V = \pi R^2 H \quad (2-11)$$

将(2-11)代入(2-10)可得到：

$$L = 4\pi R + \frac{V}{\pi R^2} \quad (2-12)$$

根据式(2-12)可得到：

$$\frac{dL}{dR} = 4\pi - \frac{2V}{\pi R^3} = 0 \quad (2-13)$$

由式(2-13)与式(2-11)可得到：

$$H = 2\pi R$$

即当罐头的高度等于其上底或下底的圆周长时，焊缝的总长度最小。

四、罐头的优化设计

上述的例子表明：若以所消耗的铁皮总面积最小为优化目标，则罐头的高度应等于其直径；若以焊缝的总长度最小为优化目标，则罐头的高度应等于其底的圆周长。由于优化目标不同，二个最优解求出的高度相差了三倍多。现在，将

二个优化目标一并考虑，即同时考虑铁皮面积和焊缝长度，这样，就构成了一个多目标函数的极值问题。

求解多目标函数极值问题的一个最简单的方法就是将多目标化成一个单目标求解，例如采用线性加权和法求解。

现假设铁皮面积的权重为 W_1 ，焊缝长度的权重为 W_2 ，则罐头优化设计的目标函数 J 应等于：

$$J = W_1(2\pi R^2 + 2\pi RH) + W_2(4\pi R + H) \quad (2-14)$$

其约束条件为：

$$V = \pi R^2 H \quad (2-15)$$

将式(2-15)代入式(2-14)可得到：

$$J = W_1 \left(2\pi R^2 + \frac{2V}{R} \right) + W_2 \left(4\pi R + \frac{V}{\pi R^2} \right) \quad (2-16)$$

由式(2-16)可得到：

$$\frac{dJ}{dR} = W_1 \left(4\pi R - \frac{2V}{R^2} \right) + W_2 \left(4\pi - \frac{2V}{\pi R^3} \right) = 0 \quad (2-17)$$

由式(2-17)与式(2-15)可得到：

$$H = \frac{2\pi R(W_1 R + W_2)}{W_1 \cdot \pi R + W_2} \quad (2-18)$$

分析式(2-18)可知：

若令 $W_2=0$ ，此时有 $W_1=1$ ，即优化目标为铁皮面积最小，代入式(2-18)可得到：

$$H = 2R$$

若令 $W_1=0$ ，此时有 $W_2=1$ ，即优化目标为焊缝长度最小，代入式(2-18)可得到：

$$H = 2\pi R$$

这是优化设计的两种极端情况。

实际应用时，只要给定铁皮面积的权重 W_1 和焊缝长度的权重 W_2 ，即可按照式(2-18)求出罐头优化设计的长径比，亦即多目标函数的最优解。

五、装料盘的优化设计

假设有一如图(2-1)所示之钢板，现欲将其制成一长方体装料盘，问如何选取其高度 x ，方可使装料盘体积最大？

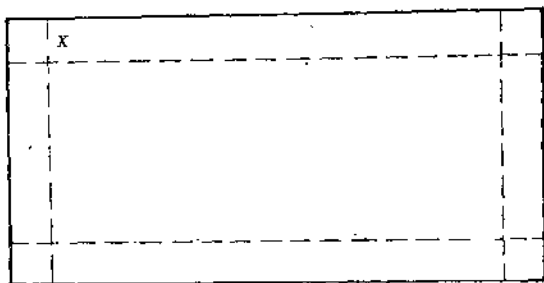


图 2-1 装料盘的优化设计

现假设此块钢板的长为 a ，宽为 b ，且已知其高为 x ，因此，装料盘的体积 V 应等于：

$$V = (a - 2x)(b - 2x)x \rightarrow \max \quad (2-19)$$

式(2-19)即是装料盘优化设计的目标函数，这是一个没有约束条件的极值问题。

根据函数存在极值的必要条件，由式(2-19)可得到：

$$\frac{dV}{dx} = ab - 4(a+b)x + 12x^2 = 0 \quad (2-20)$$

式(2-20)为一元二次方程，其解为：

$$x_1 = \frac{1}{6}(a+b + \sqrt{a^2 - ab + b^2}) \quad (2-21)$$