

国外名校名著

Mc
Graw
Hill

Education

化工过程优化

Optimization of Chemical Processes

(原著第二版)

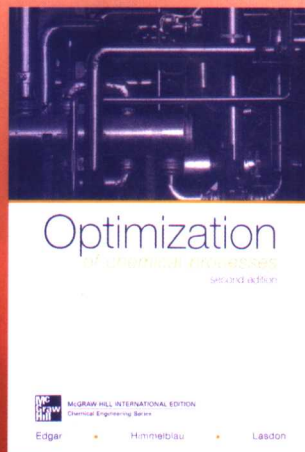
Second Edition

托马斯 F.埃德加 (Thomas F. Edgar)

[美] 戴维 M.希梅尔布劳 (David M. Himmelblau) 著

利昂 S.拉斯东 (Leon S. Lasdon)

张卫东 任钟旗 刘光虎 等译



化学工业出版社

Mc
Graw
Hill

(京) 新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

化工过程优化: 第2版. / [美] 埃德加 (Edgar T. F.), [美] 希梅尔布劳 (Himmelblau D. M.), [美] 拉斯东 (Lasdon L. S.) 著; 张卫东等译. - 北京: 化学工业出版社, 2005. 8

(国外名校名著)

书名原文: Optimization of Chemical Processes

ISBN 7-5025-7363-1

I. 化… II. ①埃…②希…③拉…④张… III. 化工过程优化 IV. TQ021.8

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 098085 号

Optimization of Chemical Processes, Second Edition/by Thomas F. Edgar, David M. Himmelblau, Leon S. Lasdon
ISBN 0-07-118977-7

Copyright ©2001, 1988 by The McGraw-Hill Companies, Inc.

Original language published by The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved. No part of this publication may be reproduced or distributed in any form or by any means, or stored in a database or retrieval system, without the prior written permission of the publisher.

Simplified Chinese translation edition jointly published by Chemical Industry Press and McGraw-Hill Education (Asia) Co.

本书中文简体字版由化学工业出版社和美国麦格劳-希尔教育(亚洲)出版公司合作出版。
未经出版者预先书面许可, 不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分。

本书封面贴有 McGraw-Hill 公司防伪标签, 无标签者不得销售。

北京市版权局著作权合同登记号: 01-2003-2057

国外名校名著

化工过程优化

(原著第二版)

托马斯 F. 埃德加 (Thomas F. Edgar)

[美] 戴维 M. 希梅尔布劳 (David M. Himmelblau) 著

利昂 S. 拉斯东 (Leon S. Lasdon)

张卫东 任钟旗 刘光虎 等译

责任编辑: 徐世锋 徐雅妮

责任校对: 陶燕华

封面设计: 郑小红

*

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)

购书咨询: (010) 64982530

(010) 64918013

购书传真: (010) 64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

北京永鑫印刷有限责任公司印刷

三河市东柳装订厂装订

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 28 1/4 字数 707 千字

2006 年 1 月第 1 版 2006 年 1 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-7363-1

定 价: 59.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

译者序

自 19 世纪末戴维斯提出 Chemical Engineering 的概念以来, 化学工程经历了一个世纪的发展, 化学工业的规模以几何级数增长, 化学工业在我国国民经济中所占的比重也与日俱增。但另一方面, 正如原著作者在绪言中所说的, 随着能源、环境、质量、竞争等因素的影响, 化学工业在快速发展的同时, 也正进行着深刻的变革, 对于优化操作的要求, 尤其是实时、在线优化的要求越来越高。计算机技术的迅速发展也为优化技术的发展提供了保障。作为化学工程与技术专业的学生, 必须掌握好化工过程的优化, 并在实际操作中加以运用。要达到这一目的, 一方面要掌握好最优化技术的基本原理, 另一方面要学会如何在化工过程中运用最优化技术。

2000 年底, 教育部启动了“新世纪高等教育教学改革工程”——“化工类专业创新人才培养模式、教学内容、教学方法和教学技术改革的研究与实施”项目, 在余国琮院士的引领下, 我们感到, 从化学工程与技术专业学生培养的整体知识结构考虑, 从国家经济建设对人才的需求着眼, 并作为《化工过程分析与合成》这一专业主干课的基础和必要补充, 急需一本优化方面的教材。在我们的设想中, 通过学习该教材, 学生能够了解各种优化技术的基本原理, 并能熟练地运用各种优化工具, 从技术和经济等方面实现对化工过程的优化设计和操作。因此, 该教材应当用比较浅显易懂的语言、图形的方法来解释各种优化技术原理, 而不是把着眼点放在过于深奥的数学知识上; 该教材应当尽可能多地介绍各种常用优化软件的使用, 而不是把着眼点放在软件的内核和源代码上; 该教材应当是以化工过程的实例为引导, 注重案例式教学, 而不是以优化方法为主线, 使学生难以抓住化工过程建模、求解和优化的思路。

恰好, 化学工业出版社组织引进了一批国外正在使用的优秀教材, 其中一本《化工过程优化》正是我们所需要的。于是, 自 2003 年起, 我们开始翻译此书。此间, 一些大学已经开始使用此教材进行授课。

《化工过程优化》由德克萨斯州大学的托马斯 F. 埃德加、戴维 M. 希梅尔布劳、利昂 S. 拉斯东编写, 他们在化工过程最优化及其相关领域中都有着长期的研究经验, 并取得了大量的研究成果, 具有很高的知名度。本书从最优化技术的原理和运用这两个方面入手, 很好地介绍了优化技术, 并通过案例教学展现了如何运用计算机技术实现对化工过程的优化。

本书的三个部分各自独立又交叉融合, 形成了一个有机的整体。第一部分介绍了如何对一个化工过程进行建模; 第二部分主要介绍了最优化技术的基本原理和相关软件的应用; 第三部分通过大量的化工过程实例, 介绍了对于实际的化工过程, 如何建立最优化的模型, 并如何利用最优化技术进行分析和综合。书中大量使用了图形化的方法来说明最优化技术的原理及其在化工过程中的应用, 避免了大量而枯燥的数学描述, 使得化工专业的学生和企业的技术人员都能非常容易地掌握化工过程优化的思想和方法。在本书所列举的案例中, 既有传

统的化工过程问题，也有蛋白质的折叠、CVD 过程等最新的化工前沿问题；在所介绍的优化算法中，既有最普通的单纯形、罚函数等方法，也有模拟退火、遗传等新的算法；在所用的优化工具中，更是用大量的篇幅介绍了 EXCEL 这种既方便又实用的优化器。本书既可作为化工类专业的本科生、研究生教材，也可以作为化工类专业技术人员的综合参考书。

本书在翻译过程中，得到了北京化工大学张泽廷教授、北京石油化工学院熊杰明老师等人的指导，并得到了北京化工大学教材立项的资助和郭广生教授、张进明教授等领导的大力支持，在此谨向他们表示衷心的感谢！

参加本书翻译、校对工作的还有李颖、高思红、刘永康、肖楠、胡国静、毛明华、李雪梅、林微、张冬冬、姜德强、李爱民、高坚、杜昌顺、刘君腾、游伟、刘一鸣、毕升、李皓淑、陈庚、崔春花、李江、林少伟、张晓方、杨龙等，在此一并表示感谢！

由于译者水平有限，译文难尽人意，敬请读者批评指正！

译者

2005 年 9 月

前 言

在过去的 25 年中,随着能源价格的持续增长、环境控制的日益严格以及产品的价格和质量竞争趋于全球化,化学工业也因而发生了巨大的变化。最优化技术是用来表述这些问题的一个重要工程手段。现在已经能够通过对工厂设计和操作步骤的改进,来降低成本并使其满足各种限制条件,其重点在于提高效率和增加利润。通过提高过程、工厂和公司的自动化程度,可以使最优操作条件得以执行,这一过程通常被称为计算机集成制造或 CIM。按照摩尔法则,计算机的速度每 18 个月就会增加一倍。而随着计算机计算能力的不断提高,可以通过最优化技术求解的问题的大小和复杂性也得到了相应的扩展。甚至个人电脑里的软件也包含了有效的优化技术——而这在 10 年前是根本不可能的。

为了能在化工厂中有效地应用最优化技术,就必须了解最优化的理论和实际操作。本书对这两点都做了详细的介绍。本书把主要精力放在了最有可能成功、并能提供可信结果的技术和软件上。

本书介绍了在问题求解时常用的一些工具,并重点讨论了如何建立最优化问题,因为许多工程师和科学家都发现,决策制定过程是最麻烦和最困难的。模型的本质决定了所要使用的最优化算法。随着最优化算法和软件的不断发展,使得建模阶段比选择最优化技术更重要。如何将最优化技术和模型恰当地结合起来,是最优化技术能否成功的关键。本书省略了严格的证明,而是利用几何证明或合理的证据来阐明最优化的原理,同时也为那些希望更深入研究理论概念的学者提供了相关的实例。

本书包含三个主要部分。第一部分描述了如何指定一个最优化问题的三个关键组成,即①目标函数、②过程模型、③限制条件。第一部分包含三章,通过给出在化学工程中碰到的各种不同问题的实例,说明了对最优化技术进行研究的意义。在讨论了前面列出的三个组成因素后,本书又描述了在求解最优化问题时必须用到的六个步骤。一位想利用最优化技术的用户必须能把问题的语言描述转化为合适的数学表达式,同时也必须了解不同的问题形式将会对可求解难度产生很大影响。本书还说明了在建模过程中,简化问题、进行灵敏度分析和估算模型中的未知量都是很重要的步骤。第 3 章介绍了如何建立目标函数,并把重点集中在经济因素上,提出了几种可选的利润评价方法。

第二部分包含了在最优化问题中的理论和计算基础,这些都被实践所证实。所选定的技术必须与前面所列的三个组成因素相结合。第二部分从第 4 章开始,提供了最优化技术的基本概念和背景知识,也就是关于局部最优值和全局最优值、凸函数、最优值的必要和充分条件等概念。第 5 章简要介绍了最常用的一维搜索方法。第 6 章介绍了可信赖的无约束最优化及其方法。第 7 章用矩阵的方法介绍了线性规划的理论、应用和软件。第 8 章包括非线性规划及其软件的最新发展。第 9 章涉及离散过程中的最优化,突出了混合整型规划问题和方法。本书第二版用一章新的关于全局优化的方法对第二部分进行了总结,这些全局优化方

法包括禁忌搜索、模拟退火和遗传算法。因为篇幅的限制，本书没有对随机变量、限制条件和系数进行展开讨论，而仅仅处理了确定性最优化问题。

虽然在第一部分和第二部分介绍了很多简单的应用，来阐述最优化技术和算法，在本书的第三部分，还专门对最优化方法进行了说明和举例。按照其应用可分成以下几类：传热和能量守恒（第11章）、分离（第12章）、流体流动（第13章）、反应器设计（第14章）和工厂设计（第15章），以及在第二版中新增的使用最优化技术进行计划、进度安排和控制（第16章）。学生和教师可以通过案例和类推进行学习，并可以通过对类似问题的研究来求解其他问题。通过这种方式组织最优化的应用，读者可以集中于一类简单的、特定的应用，而不必通读全书。第三部分介绍了每章所用到的建模和求解方法的基本知识。在第三部分的引言中，根据所采用的技术，对应用进行了分类。有时，最优化方法可能是一个解析解，因此设计规则较为简单；但更多的例子则详细介绍了数值方法的应用。在一些应用中，如工厂设计，对于问题的陈述可能过于复杂而无法清楚地描述出来，这时就需要使用过程模拟器。第三部分没有习题，但是教师可以通过①修改例题中的变量、参数、条件或约束和②提出一个不同的求解技术，由学生求解，以作为练习。

理解最优化技术不需要很复杂的数学知识，本书仅需要多变量微积分和线性代数中的一些基本知识，用来解释原理和计算技术的背景，并且可以使读者了解最优化技术是怎样起作用的。

在介绍了每个最优化技术之后，都用一个实例来详细说明其应用。本书还包含了很多针对应用的习题。本书适用于高年级本科生或研究生一年级学生，也可以作为最优化或过程设计课程的教材。本书包含的最优化内容可以满足15周课时的教学。同时，因为本书把重点放在了应用和第11章至第16章的小型案例研究上，因而它还可以作为初级单元操作或设计课程的补充教材。除了作为教科书，本书还适用于个人研究、工业实践、工业小型课程和其他继续教育课程。

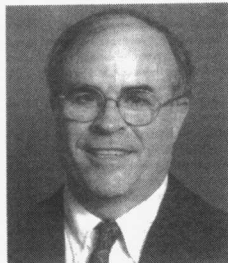
在编写此书的过程中，作者收到了很多有益的建议，对此表示衷心的感谢！特别是乔治亚州技术学院的 Yaman Arkum、卡内基-梅隆大学的 Lorenz T. Biegler、阿肯色州大学的 James R. Couper、德克萨斯州-奥斯汀大学的 James R. Fair、普林斯顿大学的 Christodoulos Floudas、科罗拉多州大学的 Fred Glover、卡内基-梅隆大学的 Ignacio Grossmann、密歇根州立大学的 K. Jayaraman、西部储备大学的 I. Lefkowitz、马里兰大学的 Tom McAvoy、Pintér 咨询服务公司的 János Pintér、华盛顿大学的 Larry Ricker 和圣母大学的 Mark Stadtherr。第11章至第16章的一些例子，是由工业界和大学的朋友所提供的，在此表示感谢！我们还要感谢很多研究生在完善例题求解中所给予的帮助，在第二版中特别感谢 Juergen Hahn 和 Tyler Soderstrom！

T. F. Edgar

D. M. Himmelblau

L. S. Lasdon

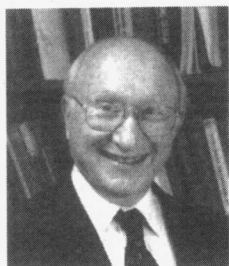
作者简介



THOMAS F. EDGAR (托马斯 F. 埃德加) 是德克萨斯州大学化学工程学院的 Abell 主席, 该校位于奥斯汀。在堪萨斯州大学获得化学工程学士学位, 在普林斯顿大学获得博士学位。在获得博士学位之前, 受聘于大陆石油公司。他的专业荣誉包括: 1980 年美国化学工程师协会哥伦布奖、ASEE Meriam-Wiley 及化工分会奖、美国仪器学会教育奖和美国化学工程师协会的计算化学工程奖。曾被载入美国名人录。在过程控制、最优化、过程(如分离、燃烧和微电子过程)的数学建模等领域发表过 200 多篇论文。他是《过程动力学和控制》一书的作者之一, 该书于 1989 年由 Wiley 公司出版。Edgar 博士 1986 年任美国化学工程师协会科学技术应用中心部的主席, 1981 年至 1984 年担任 CACHE 公司的总经理, 1997 年任美国化学工程师协会主席。



DAVID M. HIMMELBLAU (戴维 M. 希梅尔布劳) 是德克萨斯州大学化学工程学院的 Paul D.、Betty Robertson Meek 和美国 Petrofina 基金会世纪荣誉退休教授。在麻省理工大学获得学士学位, 在华盛顿大学获得硕士和博士学位。在德克萨斯州大学从教 40 多年, 此前他在 International Harvester 公司、Simpson Logging 公司和 Excel Battery 公司工作过。在他的 200 多种出版物中, 有 11 本书分别涉及到过程分析与模拟、统计学、分解、化工过程的故障检验以及非线性规划等领域。他是美国化学工程研究所的特别成员, 致力于为美国化学工程师协会服务, 并担任美国化学工程师协会的主管。他多年担任 CACHE 的理事, 先后担任总经理和执行官。获得过美国化学工程师协会创始人奖和科学技术应用中心部的计算化学工程奖。目前的研究领域是故障检验、传感器有效性检测和以计算机为基础的交互学习。



LEON S. LASDON (利昂 S. 拉斯东) 是德克萨斯州大学工商管理学院管理科学和信息系统学院业务决策支持系统的 David Bruton Jr. 世纪主席。他从 1977 年开始在该学院任教。在锡拉库扎大学获得电气工程学士学位, 在 Case 理工大学获得电气工程硕士学位和系统工程博士学位。Lasdon 博士编写过关于大型系统优化的获奖教材, 在管理科学、操作研究、数学规划和计算信息等一些重要期刊上发表过 100 多篇论文。他的研究包括最优化算法和软件、最优化的应用和其他 OR/MS 方法论。同时还是微软 Excel 求解器的合作者之一, 其最优化软件在全世界工业领域和大学中得到了广泛应用。作为咨询专家, 他可以解答包括 OR/MS 应用在内多个领域的问题。

教师反馈表

McGraw-Hill Education, 麦格劳-希尔教育出版公司是美国著名图书出版与教育服务机构, 出版了很多著名的计算机、工程类、经管类以及人文社科类图书。作为麦格劳-希尔教育出版公司在中国的重要合作伙伴之一, 化学工业出版社与其合作出版了一些工程类专业教材, 近年来双方更加注意加强了彼此的交流与合作。

我们十分重视对广大教师的服务, 开发了教师手册、习题解答等教学课件以及网上资源。如果您确认将本书作为指定教材, 请您务必填好以下表格并经系主任签字盖章后寄回我们的联系地址。我公司将免费向您提供英文原版的教师手册或其他的教学课件。

书号/书名:			
所需要的教学资料:			
您的姓名:			
系:			
院/校:			
您所讲授的课程名称:			
每学期学生人数:	_____人 _____ 年级	学时:	
您目前采用的教材:	作者: _____ 出版社: _____ 书名: _____		
您准备何时用此书授课:			
您的联系地址:			
邮政编码:		联系电话 (必填)	
E-mail: (必填)			
您对本书的建议:			系主任签字
			盖章

我们的联系地址:



化学工业出版社
教材出版中心

北京市朝阳区惠新里3号, 100029
Tel: 010-64982624
Fax: 010-64982583
网址: <http://www.cip.com.cn>



Education

麦格劳-希尔教育出版公司教师服务中心
北京市海淀区-清华科技园 创业大厦 907 室
北京 100084
传真: 010 62790292
教师服务热线: 800-810-1936
教师服务信箱: instructor_cn@mcgraw-hill.com
网址: <http://www.mcgraw-hill.com.cn>

目 录

第一部分 问题的建立

第 1 章 优化问题的本质和组成	2
1.1 概述	2
1.2 优化的作用	2
1.3 优化的范围和层次	3
1.4 优化应用的例子	5
1.5 优化问题的基本特性	8
1.6 求解优化问题的一般过程	11
1.7 优化的障碍	16
习题	17
参考文献	23
补充文献	24
第 2 章 优化模型的开发	25
2.1 模型的分类	27
2.2 建立模型的步骤	30
2.3 选择函数回归经验数据	31
2.3.1 如何确定模型的形式	32
2.3.2 用最小二乘法拟合模型	37
2.4 正交实验设计	41
2.5 自由度	44
2.6 模型中不等式和等式约束的例子	46
习题	48
参考文献	54
补充文献	55
第 3 章 目标函数的建立	56
3.1 经济性目标函数	56
3.2 目标函数中货币的时间价值	61
3.3 收益率的度量标准	67
习题	69
参考文献	74
补充文献	74

第二部分 最优化理论和方法

第 4 章 最优化的基本概念	76
----------------------	----

4.1 函数的连续性	76
4.2 非线性规划 (NLP) 的问题描述	78
4.3 凸性及其应用	81
4.4 目标函数二次逼近形式的详解	86
4.5 无约束函数极值的必要和充分条件	88
习题	91
参考文献	98
补充文献	98
第 5 章 无约束函数的最优化：一维搜索	99
5.1 优化单变量函数的数值方法	100
5.2 扫描和锁定范围的过程	101
5.3 一维搜索的牛顿法和拟牛顿法	101
5.3.1 牛顿法	102
5.3.2 导数的有限差分近似值	103
5.3.3 拟牛顿法	103
5.4 多项式近似法	107
5.4.1 二次插值法	107
5.4.2 三次插值法	109
5.5 如何将一维搜索应用于多维问题	111
5.6 一维搜索方法的评价	113
习题	113
参考文献	116
补充文献	116
第 6 章 无约束多参数的最优化	118
6.1 只使用函数值的方法	119
6.1.1 随机搜索	119
6.1.2 格点搜索	119
6.1.3 单变量搜索	119
6.1.4 单纯形搜索法	120
6.1.5 共轭搜索方向	121
6.1.6 小结	122
6.2 使用一阶导数的方法	122
6.2.1 最速下降法	123
6.2.2 共轭梯度法	125
6.3 牛顿法	127
6.3.1 迫使 Hessian 矩阵正定	131
6.3.2 沿搜索方向的运动	132
6.3.3 终止	134
6.3.4 安全牛顿法	134
6.3.5 导数值的计算	134
6.4 拟牛顿法	134

习题	136
参考文献	142
补充文献	143
第 7 章 线性规划 (LP) 及其应用	144
7.1 线性问题的几何学	144
7.2 线性规划的基本定义及解	146
7.3 单纯形算法	151
7.4 阻挡层方法	157
7.5 灵敏度分析	157
7.6 混合整型线性规划	158
7.7 LP 软件	158
7.8 用 EXCEL 处理器电子表格公式求解运输问题	159
7.9 网络流及其分配问题	164
习题	165
参考文献	172
补充文献	173
第 8 章 有约束非线性规划	174
8.1 直接代入法	174
8.2 局部极值的一阶必要条件	175
8.2.1 只含等式约束的问题	178
8.2.2 只含不等式约束的问题	179
8.2.3 包含等式和不等式约束的问题	182
8.3 二次规划	186
8.4 罚函数、障碍和增广拉格朗日方法	188
8.5 序贯线性规划	193
8.6 序贯二次规划	199
8.7 广义简约梯度法	202
8.8 NLP 方法相关的优缺点	209
8.9 商业化 NLP 软件	210
8.9.1 独立操作或嵌入式的优化器	211
8.9.2 电子表格优化器	212
8.9.3 代数模型化系统	213
8.10 NLP 软件的应用	213
8.10.1 导数的估算：关键和问题	213
8.10.2 当 NLP 算法不“工作”时，需要做什么	215
习题	216
参考文献	230
补充文献	231
第 9 章 混合整型规划	232
9.1 问题的建立	232
9.2 使用 LP 松弛的分支界限法	234

9.3 用分支界限法求解混合整型线性规划 (MINLP) 问题	239
9.4 用外推近似法求解混合整型非线性规划 (MINLP) 问题	245
9.5 最小整型规划问题的其他分解方法	246
9.6 分离规划	246
习题	247
参考文献	253
补充文献	253
第 10 章 带有连续和离散变量的全局最优化问题	255
10.1 全局最优化方法	255
10.2 平滑最优化问题	256
10.3 分支界限法	257
10.4 多起点方法	259
10.5 启发式搜索方法	260
10.5.1 启发式搜索	261
10.5.2 禁止搜索	262
10.5.3 模拟退火法	266
10.5.4 遗传及进化算法	268
10.5.5 在高级 Excel 规划求解程序中使用进化算法	270
10.5.6 分散搜索	272
10.6 用于全局最优化的其他软件	275
参考文献	275
补充文献	276

第三部分 优化的应用

第 11 章 传热和能量守恒	281
例 11.1 废热回收的优化	282
例 11.2 管壳式换热器的设计优化	284
例 11.3 多效蒸发器的优化	290
例 11.4 锅炉/涡轮发电系统的优化	294
参考文献	297
补充文献	298
第 12 章 分离过程	299
例 12.1 传统板式精馏塔的最优设计和操作	300
例 12.2 液液萃取柱中的最优化流速	304
例 12.3 通过非线性回归拟合汽液平衡数据	306
例 12.4 确定板式塔的最优回流比	307
参考文献	310
补充文献	311
第 13 章 流体流动系统	312
例 13.1 最优管径	312
例 13.2 最小压缩功	314

例 13.3 固定床过滤器的经济性操作	316
例 13.4 气体输送网络的最优设计	318
参考文献	325
补充文献	325
第 14 章 化学反应器的设计和操作	326
例 14.1 利用线性规划优化热裂解反应器	328
例 14.2 氨反应器的优化设计	331
例 14.3 采用序贯二次规划法 (SQP) 求解烷基化过程	333
例 14.4 预测蛋白质的折叠	336
例 14.5 用于薄膜制备的低压化学气相沉淀反应器的优化	339
例 14.6 通过混合整型非线性规划 (MINLP) 进行反应的合成	344
参考文献	348
补充文献	349
第 15 章 大型工厂设计和操作中的最优化	350
15.1 过程模拟器和最优化编码	351
15.2 使用面向方程过程模拟器的最优化	356
15.3 使用基于模块模拟器的最优化	364
15.3.1 序贯模块法	366
15.3.2 联立模块法	368
15.3.3 导数的计算	369
15.4 总结	370
参考文献	370
补充文献	372
第 16 章 过程工业中的综合计划、进度安排和控制	373
16.1 工厂优化的层次	373
16.2 计划和进度安排	375
16.2.1 计划	376
16.2.2 进度安排	379
16.3 工厂范围内的管理与优化	384
16.4 单元管理与控制	386
16.5 过程的检验与分析	391
参考文献	394
补充文献	395
附录	397
附录 A 相关数学问题汇总	397
A.1 定义	397
A.2 矩阵的基本运算	398
A.3 线性无关与行运算	404
A.4 解线性方程组	406
A.5 特征值和特征向量	408

习题	409
参考文献	411
补充文献	411
附录 B 成本估算	412
B.1 投资成本	412
B.2 操作成本	416
B.3 考虑通货膨胀的影响	417
B.4 在经济性目标函数中预测总收入	419
B.5 项目评估	420
参考文献	429
符号说明	430
索引	433

第一部分 问题的建立

问题的建立是优化过程中最严格的一步。在建立问题的过程中需要确定问题的定义及其陈述中的要素，再把它们组织成一个数学形式，这些要素包括：①目标函数（经济标准）；②过程模型（约束条件）。

目标函数代表了一些如利润、成本、能量和以被分析过程中的关键变量所表示的产率等因素。过程模型和约束条件则描述了关键变量间的相互关系。系统地收集包含在最优化问题中的数据以及物理和经验关系式是很重要的，第1章、第2章、第3章都包含了一些推荐的方法。第1章介绍了最优化问题的六个步骤，对解决设计和过程分析中出现的问题能起到指导作用。同时还介绍了在化工过程中建立问题的实例，以详细说明这些步骤。

第2章总结了过程模型的特征，并解释了如何建立一个过程模型。本章特别关注于通过最小二乘法拟合实验数据，以开发一个数学模型，尤其是经验模型。而最小二乘法本身就是一个优化的过程。

第3章涉及到一类最普通的目标函数，即成本和收入函数。在历史上，大多数的最优化应用都需要在投资成本和操作成本之间进行折中。折中的本质依赖于一定数量的假设，例如希望的投资回报率、使用寿命、折旧方法等。基于净现值的目标函数是一种更为可取的最优化目标；在电子数据表的分析中，也可以使用折旧的货币流。

根据所做的假设和模型的期望精度，在工程分析中可能出现多种数学模型的形式。为了求解最优化问题，模型的数学形式必须与所选用的算法能很好地结合。因此，在最优化的整个问题建立阶段，需要一定的艺术才能、判断力和经验。

第 1 章 优化问题的本质和组成

优化是使用专门的方法来确定最优的成本，并对某一问题或某一过程的设计进行有效求解的方法。在进行工业决策时，这一技术是主要的定量分析工具之一。在化工厂以及许多其他工业工程的设计、建设、操作和分析中所涉及的大部分问题均可使用优化方法进行求解。本章将考察优化问题的基本特点和求解方法，并描述其典型的优点以及在化工和石化中的应用。

1.1 概述

关于优化的基本原理，人们所熟知的最早的粗略描述是几个世纪前，在一个罗马王位争夺者的浴室墙上，罗马人写下——“De duobus malis, minus est semper eligendum”，意为“两害相权取其轻”。

现在，优化技术已经渗透到科学、工程和商业的各个领域。在物理学上，科学家们阐述了多种不同的优化原理，用来描述诸如光学、经典力学方面的自然现象。在统计学上，人们采用各种基本原理，如“最大可能性”、“最小损失”、“最小面积”等；在商业上采用“最大利润”、“最小成本”、“最大资源利用率”、“最少劳动”等，以提高利润率。对于一个典型的工程问题，某一过程既可以用一些具体的方程来描述，也可以仅通过实验数据来表述。这时就需要一个确定的标准，如最小成本。优化的目的就在于找到使过程达到最佳性能的变量值。在投资和操作成本之间通常会存在一个折中。需要进行描述的因素——过程或模型以及性能标准——构成了最优化“问题”。

在化工过程设计和工厂操作中的典型问题有很多（也许是无限多）求解方法。优化是在各种高效定量分析方法中找到一个最优的方法。计算机及其相关软件的发展使计算变得可行而且更加高效。但是，要通过计算机获取有用的信息，需要①对过程和设计进行临界分析，②建立适宜的性能目标（如需要完成的工作是什么），③注意利用以往的经验，这有时也被称作工程评价。

1.2 优化的作用

为什么工程师们对优化感兴趣呢？用优化方法做出的决策比直接决策可以多得到多少效益呢？工程师们的工作是改进设备的初始设计，并且对已经安装使用的设备尽可能地强化其操作性能，以达到产量最大、成本最小、能耗最小等目的。对于不同甚至相互矛盾的目标，货币价值是一个简便的衡量标准，但是并非所有的问题都可以纳入货币（成本与收入）的框架内。

在工厂操作中，一部分效益来自于工厂操作性能的提高，例如增加高价值产品的产量（或减少污染物的产量）、降低能耗、提高过程的效率、延长开工时间。优化还能降低维护费用，减少设备损耗，并提高人员的利用率。此外，还有无形的效益来自于工厂操作者、工程师和管理人员之间的相互配合。系统地识别一个过程或生产线的目标、约束和自由度是非常有益的，它可以产生如下效益，如改进设计的质量、更快更确切地发现并解决问题以及更快地做出决策。

对效益的预测必须非常谨慎。在许多工厂中，设计变量和操作变量总是相关的。对于一个每天消耗燃料费用 3000 美元的蒸馏柱，节省 5% 能量的方案可能是可行的。不过，对于一个像蒸馏这样的单元操作，不能通过把热交换器负荷简单地进行加和，而宣称降低了所需的总热量。降低再沸器的热负荷可能会影响产品的纯度，进而影响收益，同时还可能影响冷凝器的冷却剂用量。因此，这里可能存在一个误区，即忽略了对过程成本变量产生的间接和复合的影响因素。

由于在过程模型中所用的数据和数学表达式存在一些不确定性，因此对于优化的应用是否有风险，仍存在着争论。当然，这样的争论是有益的。工程师们在把优化技术用于一些问题时必须做出某种判断，这些问题中含有与其相关的、不确定的、但是值得考虑的问题。即必须从精确和实用两个观点来考虑问题，这是因为工厂的操作参数和周围的环境并非一成不变。在某些情况下会在确定优化的同时加入某些统计的特征去分析产量预测的不确定程度，这可能是一种可行的分析方法。当过程模型是理想的，且对输入和使用的参数仅仅知道一个大概时，必须慎重对待优化的结果，它可以提供预测的上限。另一种对优化设计中不确定性参数影响的评价方法是使用敏感性分析。通常，过程变量的优化值是不随给定的参数而变化的（敏感性较差）。因此，具有确切值的参数并不是寻找优化条件的关键。本章将讨论如何进行敏感性分析。

1.3 优化的范围和层次

优化可以应用在一个公司的任意层次上，其应用范围包括复杂的组合车间、某个车间内分布的设备、单个装置及某个装置中的子系统、甚至更小的个体（Beveridge and Schechter, 1970）。优化问题存在于任何层次上，因而，优化问题可以包括整个公司、某一个车间、一个过程、单个的单元操作、单元操作中的某个装置或者其中的某个中间系统。而其分析的复杂性则包括只能了解大致的特征或者只能检查到瞬间的详情，这依赖于所设定的结果、可供利用的精确数据和进行优化所需的时间。在一个典型的工厂中，优化可用于以下三方面：①管理；②过程设计和装置规范；③车间操作（见图 1.1）。

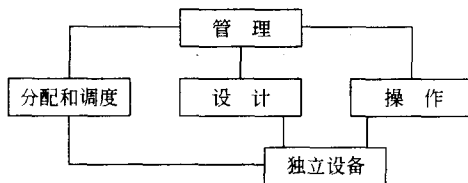


图 1.1 不同的优化层次

在一个典型的工厂中，优化可用于以下三方面：①管理；②过程设计和装置规范；③车间操作（见图 1.1）。

管理人员在做出决策时要考虑项目评价、产品的选择、总体预算、销售和研发成本、新车间的建设（即新车间建设的时间和地点）等。在这个层次上，许多信息只能是定性的或者是极不确定的。因此，如果对一个大型公司的某些特征进行优化，很多管理决策在投入实际应用时，尤其是时机不正确时，可能会出现明显的错误。总之，以美元计的目标函数，在管理上要远比在其他两个层面更重要。