

清洁过程综合的简化模型和求解

贾小平¹ 宋立敏² 张天柱¹ 韩方煜²

(1. 清华大学环境科学与工程系, 北京 100084; 2. 青岛科技大学计算机与化工研究所, 山东 青岛 266042)

摘要:建立了过程经济和环境的简捷多目标混合整数非线性规划(MOMINLP)模型,以组合多目标加权法和外逼近等式松弛法为求解策略,应用 GAMS 编程实现 MOMINLP 问题的求解,以甲苯加氢脱烷基化(HDA)过程为案例进行分析。

关键词:清洁生产;过程综合;多目标混合整数非线性规划;GAMS

中图分类号:TQ02

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2004)S2-0103-02

Simplified modeling and problem solving for cleaner process synthesis

JIA Xiao-ping¹, SONG Li-min², ZHANG Tian-zhu¹, HAN Fang-yu²

(1. Department of Environmental Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 2. Research Center of Computers and Chemical Engineering, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266042, China)

Abstract: Multi-objective mixed integer nonlinear programming (MOMINLP) model is proposed with the consideration of process economic and environmental performance simultaneously. Weighted sum approach integrates with OA/ER to solve the proposed model in the GAMS environment. HDA process as a case study is given to illustrate finally.

Key words: cleaner production; process synthesis; multi-objective mixed integer nonlinear programming; GAMS

清洁生产强调污染预防与资源和能源节约,使得过程在经济效益最大化的同时具有环境友好的性能,这促使研究以经济和环境为优化目标的过程优化综合新问题。数学规划法把新问题描述为多目标混合非线性规划模型(MOMINLP)。郑世清、石磊等国内学者获得了优秀的研究成果^[1-2],目前该类问题已成为过程系统工程(PSE)领域的研究热点之一。从近年该类问题的研究进展来看,环境目标的描述、求解算法等有待于深入研究。本文首先用环境影响潜值描述环境目标,结合经济效益为经济目标,建立多目标模型,然后组合加权法和外逼近等式松弛法(OA/ER),在通用代数建模系统 GAMS 软件上实现多目标问题求解。

1 多目标模型的建立

环境目标计算模型应用 Cabezas 等人提出的环境污染平衡方程,即废弃物削减(WAR)算法^[3]。由于公用工程在消耗了大量能量的同时,也是废气排放的“重大贡献者”。本文拓展了 WAR 算法,将与能耗有关的危险物排放对环境的影响纳入环境目标,通过燃料类型的排放因子进行折算确定其排放量^[4]。

$$I_{\text{out}} = \sum_j^{\text{out}} M_j \sum_k x_j, k\varphi_k \quad (1)$$

式中, I 表示潜在环境影响指数(PEI),下标 out 表示排放, M 表示质量流率, k 表示流股 j 中的化合物, x 表示化合物的质量分率, φ 表示化合物的影响潜值, φ 值是一个组合 9 个环境影响类的综合指标,它的计算是基于层次分析法(AHP)的^[5]。

以经济效益为经济目标,其简化经济模型如下。

$$f_{\text{ECO}} = w_p m_{\text{PO}} - w_m m_{\text{TI}} - w_e e_{\text{TI}} - \sum_{i=1}^n C_i \quad (2)$$

假设上式计算年度经济效益,则 w_p 是单位产品的价值; m_{PO} 为年产产品量; w_m 是单位原料的费用; m_{TI} 为年消耗的原料的总和; w_e 是单位能量的费用; e_{TI} 为年消耗的能量的总和; C_i 为第 i 种设备的费用, n 为过程全部的设备类型数。

建立过程超结构流程的数学规划模型,即 MOMINLP 模型如下:

$$\begin{cases} \min I_{\text{out}} = I(x, y) \\ \max E_{\text{eco}} = E(x, y) \\ g(x, y) = 0 \quad h(x, y) \leq 0 \\ x \in X \subseteq R^n \\ y \in Y \subseteq Z^q \end{cases}$$

其中 x 是 n 维向量, y 是 q 维向量。 R 、 Z 是决策空间,相应的 F 是 p 维的目标空间。函数 $g(x, y)$, $h(x, y)$ 分别为等式约束、不等式约束方程; x, y 分别为连续变量、整数变量的向量。

2 解算方法

本文先采用线性加权法简化处理多目标问题,然后采用外逼近等式松弛法处理 MINLP 问题,经 GAMS 编程获得最优设计方案。

2.1 多目标线性加权法

多目标线性加权法就是根据事先选择的随机权重矢量,将多个目标函数合成单目标函数 F ,然后运用优化技术 F ,得到一个最优解。

2.2 OA/ER 算法

OA/ER 算法是一种能够处理带等式约束的外近似法,有效地应用外近似、等式松弛和增大惩罚 3 种策略来处理 MINLP 问题^[6]。

3 实例

HDA 过程中甲苯和氢气生成产品苯,苯在同样条件下可逆生成副产物联苯和氢气。建立的超结构流程如图 1 所示,可看出,该超结构包括 4 种结构类型:反应器可以选择管状的绝热反应器 (y_1),也可以选择等温反应器 (y_2);甲烷和剩余氢可由稳定塔移走 (y_3),也可用一个闪蒸罐分离后进行循环使用 (y_4)。

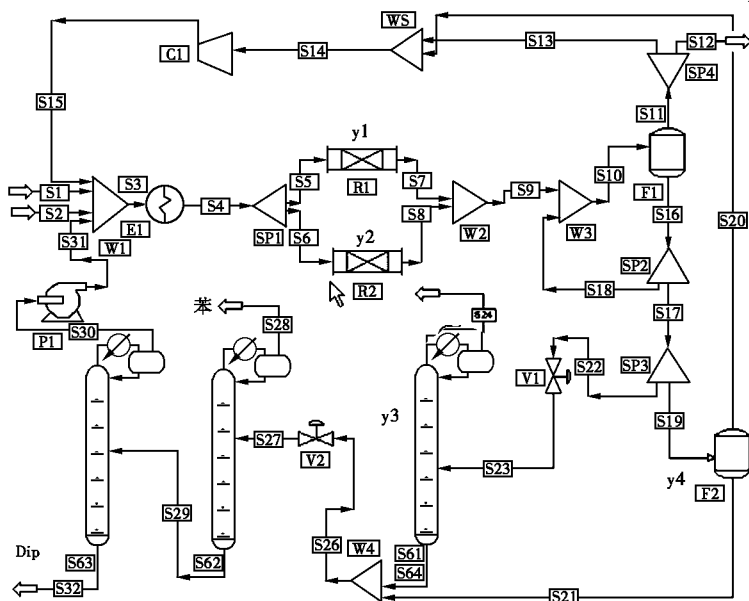


图 1 HDA 过程超结构

该过程排放的物流如图 1 所示。选定石油正常燃烧排放危害物质 SO_2 、 SO_3 、 NO_x 、 CO 、 CO_2 的释放因

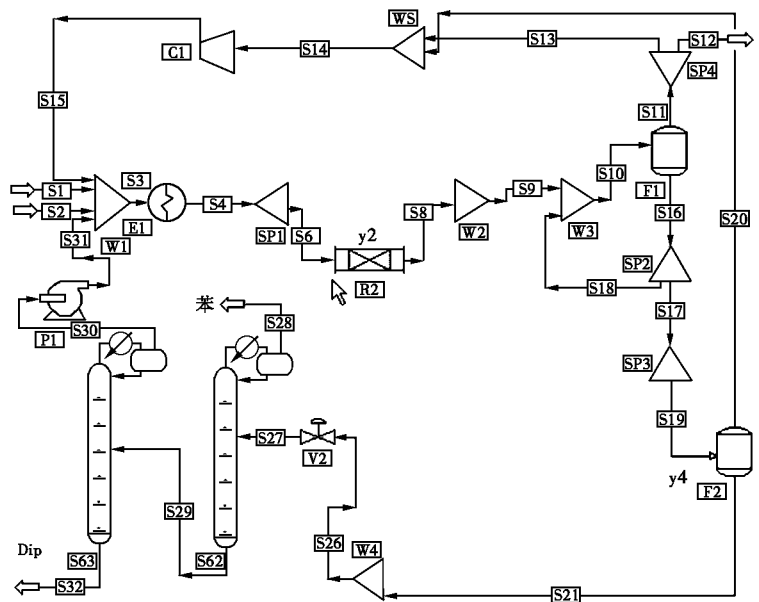


图 2 HDA 优化结构

子分别为 18、0.69、8、0.6、2159.05,单位为 kg/m^3 。煤炭燃烧排放危险化合物 CO_2 、 SO_2 、 NO_x 的排放因子分别为 8.63×10^4 、 8.13×10^6 、 3.96×10^6 ,单位为 kg/kWh ^[4]。假设一年生产时间为 8 500 h。

采用 AHP 法确定化合物对环境影响潜在类型的相对权重为:

$$[W_1, W_2, W_3, W_4, W_5, W_6, W_7, W_8] = [0.15, 0.15, 0.05, 0.05, 0.15, 0.15, 0.15, 0.15]$$

其中序号 1~8 分别表示温室效应、光氧化烟雾、酸雨、富营养化、人体摄入毒性、人体暴露毒性、陆生态毒性和水生生态毒性。

经济目标是计算每年的效益。使用线性固定投资费用建立经济模型。模型有个价格费用数据见文献[7]。经济模型如下:

$$\text{profit}(10^3 \text{ \$} / \text{a}) = \sum_{i=1}^6 CF_i - \sum_{i=1}^4 C_{ui}U - \sum_{i=1}^{10} (C_{eqi} + \text{固定投资})$$

假设环境和经济同样重要,即我们采用线性加权法实现多目标优化的权重选择为 (0.5, 0.5),则多目标函数转化为: $\text{obj} = 0.5 \times \text{profit} - 0.5 \div 1000 \times I$ 。在 GAMS 中建立模型且编程求解,得到 HDA 过程的最优结构为 $(y_1, y_2, y_3, y_4) = (0, 1, 0, 1)$,如图 2 所示,结构变量的优化结果与文献[2]相同。

4 结论

扩展 WAR 算法,将与能耗有关的废气排放纳 (下转第 110 页)

智能;③生产运行的状况对于生产管理和计划调度来说是极为重要的信息,远程监控系统有利于对整个企业的设备运行状况信息进行集中管理,作为企业生产计划调度的依据,进而支持企业信息综合集成。

4 结语

结合过去几年的研究工作,全面分析了化工过程安全生产技术中的过程监测、故障诊断等技术的研究进展。介绍了化工安全运行智能辅助支持系统的功能、结构以及关键技术。虽然,安全生产得到了政府、企业、研究机构的高度重视,有了许多的研究成果和工业应用,但这一领域还有以下问题没有得到解决:①过程运行故障传播模型化问题。化工过程的故障往往是相互关联的,一旦发生某种故障,往往会引起系统的相关设备或上下游工艺状态发生变化,即过程的故障具有传播性。如何通过事故在过程系统中的扩散方式建立故障传播模型是一项非常有意义的工作。②运行状态的转移问题。化工过程的故障或事故有一个从正常、过渡、异常、故障到事故的变迁过程,研究这些状态的转移征兆对正确识别过程的运行状态非常重要。③提高故障诊断系统的准确率,尽量降低系统的误报、漏报,提高诊断系统的准确率是工业应用的关键问题。

参考文献

- [1] Frank P M. [J]. *European Journal of Control*, 1999, 5(2): 6 - 28.
- [2] Venkatasubramanian V, Rengaswamy R, Yin K. [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2003, 27(3): 293 - 311.
- [3] Venkatasubramanian V, Rengaswamy R, Yin K. [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2003, 27(3): 313 - 326.
- [4] Venkatasubramanian V, Rengaswamy R, Yin K. [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2003, 27(3): 327 - 346.
- [5] Wang X Z, Chen B H, Yang S H, *et al.* [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1999, 23(7): 945 - 954.
- [6] Bakshi B R. [J]. *AIChE J*, 1998, 44(7): 1596 - 1610.
- [7] Russell E L, Chang L H, Braatz R D. [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, 51(1): 81 - 93.
- [8] Li R F, Wang X Z. [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2002, 26(3): 467 - 473.
- [9] Bakshi B R, Stephanopoulos G. [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1994, 18(4): 267 - 302.
- [10] Li X X, Qian Y, Wang J F. Process monitoring based on wavelet packet principal component analysis [A]. In: Kraslawski A, Turunen I. *European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 13* [C]. Amsterdam: Elsevier, 2003. 455 - 460.
- [11] 姚志湘, 钱宇, 李秀喜. [J]. *高校化学工程学报*, 2004, 18(1): 73 - 78.
- [12] Li X X, Qian Y, Huang Q M, *et al.* Multi-scale ART2 for state identification of process operation systems [A]. In: Chen Bingzhen, Westerberg A W. *Computer-Aided Chemical Engineering-15* [C]. Amsterdam: Elsevier, 2004. 523 - 529.
- [13] 李秀喜, 钱宇, 温艳芹. [J]. *计算机与应用化学*, 2004, 21(1): 115 - 118.
- [14] Qian Yu, Li X X, Jiang Y R. [J]. *Expert Systems with Applications*, 2003, 24(4): 425 - 432.
- [15] 李秀喜, 钱宇, 江燕斌. [J]. *计算机工程*, 2003, 29(19): 60 - 62.
- [16] 钱宇, 李秀喜, 程华农, 等. [J]. *化工学报*, 2003, 54(4): 557 - 563.
- [1] Frank P M. [J]. *European Journal of Control*, 1999, 5(2): 6 - 28.
- (上接第 104 页)
- 入环境目标考虑,建立了过程经济和环境简捷多目标混合整数非线性规划模型。组合应用组合加权法和外逼近等式松弛法实现模型求解。应用 GAMS 能够有效地处理 MO-MINLP 问题。
- 参考文献
- [1] 郑世清. 基于模块化环境的多目标过程系统综合的研究 [D]. 广州: 华南理工大学, 2001.
- [2] Shi Lei, Shi Hanchang, Qian Yi. Cleaner Production Framework Based on Multi-objective Evolutionary Algorithm [A]. in: *International Conference on Cleaner Production* [C]. Beijing, 2001. 281 - 289.
- [3] Cabezas H, Bare C J, Mallick S K. [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1997, (21): S305 - 310.
- [4] US EPA Green Engineering Workshop. *Pollution Prevention and Risk Reduction for Chemical Processes* [Z]. 1999.
- [5] Jia Xiaoping, Han Fangyu. Integrated Environmental Performance Assessment of Chemical Process by Means of Analytic Hierarchy Process [A]. in: *Proceedings of PSE ASIA 2002, International Symposium on Design, Operation and Control of Chemical Plants* [C]. Taipei, Taiwan, 2002. 177 - 182.
- [6] Kocis G R, Grossmann I E. [J]. *Ind Eng Chem Res*, 1987, 26: 1869 - 1880.
- [7] Yan Fu, Diwekar U M, Young D, *et al.* [J]. *Clean Products and Processes*, 2002, (2): 92 - 107. ■