

多组分用水网络的整体优化设计策略

徐冬梅¹ 胡仰栋² 刘清芝² 王英龙² 伍联营²

(1. 山东科技大学化学与环境工程学院, 山东青岛 266510;

2. 中国海洋大学化学化工学院, 山东青岛 266003)

摘要:针对较复杂的多组分用水过程,提出了基于序贯操作模型的整体优化设计策略:对于一个给定的操作序列,假定排在操作 i 之前的所有操作的出口水流都是操作 i 的水源,在此前提下建立了多组分用水过程的序贯操作模型。这样,多组分用水网络的设计问题可表达为一个双层优化的非线性规划,内层用来寻找给定操作序列情况下的最优解,外层则是在所有可能的操作序列中搜索最优序列。通过对一个例子进行求解,说明了所提出的新方法。

关键词:用水网络;序贯操作模型;多组分;非线性规划

中图分类号:TQ021.8;TQ085

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2004)S2-0121-03

Global optimum design strategy of multiple-contaminant water-using network

XU Dong-mei¹, HU Yang-dong², LIU Qing-zhi², WANG Ying-long², WU Lian-ying²

(1. College of Chemistry and Environmental Engineering, Shandong University of Science and Technology, Qingdao 266003, China; 2. College of Chemistry and Chemical Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266003, China)

Abstract: Aiming at the complex multiple-contaminant reuse process, the global optimization design strategy based on a sequential-operation-model is addressed: assuming that all the outlet water streams from the former operations are the water sources of the latter operation i for a given operation sequence. Based on this, the sequential operation model of water system of multiple contaminants is constituted. Accordingly, the design problem of multiple-contaminant reuse can be formulated as a double-layer optimization nonlinear programming: the inner layer is to seek the optimal solution of a given operation sequence and the outer layer is to seek the optimal sequence by considering all the possible operation sequences based on the results from inner layer. An examples is used to demonstrate the method proposed.

Key words: water-using network; sequential-operation-model; multiple contaminant; non-linear programming

改善用水网络以节约新鲜水和减少废水排放,是一个非常值得研究的课题。对于多杂质系统, Wang 和 Smith^[1]提出用“浓度转移”法来进行设计。这种方法仅能处理小规模问题,而且不能保证所得的解最优。Rossiter 和 Nath^[2]建立了多杂质用水网络的超结构模型,并在此基础上将多杂质用水网络设计问题归结为非线性规划来求解。Doyle 和 Smith^[3]提出用一种迭代的策略求解多组分问题。Alva-Argaez 等^[4]提出了基于几个基本假设的多组分转载模型。Bagajewicz 等^[5]对于多组分用水网络的基础设计和改进设计提出了树搜索法,这种方法以最小的投资费用和操作费用为目标,把数学规划法和最优性必要条件结合起来得出最优解。Bagajewicz^[6]对于近期各学者所提出的水网络设计方法进行了总的评述,其中也探讨了多组分问题。2003年, Wang 等^[7]提出了一种基于中水道的水网络结构,这种网络结构具有运行、控制简单易行的优点,但通常

节水量要小于常规水网络结构。胡仰栋等^[8-9]提出了逐步线性规划法的用水网络设计方法,后来又对含再生再利用的多组分用水网络提出了基于序贯操作模型的整体设计策略。

1 问题描述

多组分用水网络优化设计是指给定一组用水操作,每一个用水操作对水都有质和量上的要求,这种要求可以用对应于每一个组分(污染物)的水的限制浓度曲线^[1]来表示,也就是水的限制数据:对应于每一个组分的最大入口浓度和出口浓度,需要传递的每一种污染物的质量交换量,对应于每一个操作水的限制流率。目标是设计一个用水网络,在满足所有操作用水要求的情况下,使整个系统达到某种意义上的优化。本文中以最最小新鲜水用量为目标。

2 基于序贯操作模型的多组分用水网络的整体设计策略

2.1 基本假定

贫流(本文中为新鲜水和废水)之间允许混合;过程为纯物理过程,不存在化学反应;过程中没有流率损失。

2.2 在操作序列给定情况下的序贯操作模型

当操作序列给定时,可按以下步骤建立序贯操作模型:

(1) 给出一个基本假定。对于一个给定的操作序列,假定排在操作 i 之前的所有操作的出口水流都是操作 i 的水源,也就是说排在操作 i 之前的所有操作都有可能将出口的水流作为水源提供给操作 i ,这样排在操作 i 之前的所有操作的水流出口浓度也就是其进入操作 i 的入口浓度。

(2) 标记整个过程的所有水源,规定操作 j 的出口水流为第 j 股水源,当 $j=0$ 时为新鲜水。

(3) 将整个过程的每一个操作与它可得到的水源进行匹配。

按以上 3 步即可建立多组分用水过程的序贯操作模型。

2.3 设计问题的数学表达:双层优化的非线性规划

基于以上给出的序贯操作模型,对于含有 n 个操作 m 个污染物的多组分用水网络的用水最小化问题可表达为一个双层优化的非线性规划模型:

目标函数:

$$\min(\min_{f_{us}, S_l} S_l \in S_{\text{gross}}) \quad (\text{NLP}) \quad (1)$$

约束条件:

$$\sum_{i=1}^n m_{i,k} = (w_{\text{drain},k} - w_{us,k}) f_{us,S_l} \quad (2)$$

$$(k = 1, 2, \dots, n)$$

$$\sum_{i=1}^n L_{0,i} = f_{us,S_l} \quad (3)$$

$$\sum_{j \in W} w_{j,k} L_{j,i} / \sum_{j \in W} L_{j,i} \leq w_{\text{in},(\text{max}),i,k} \quad (4-i)$$

$$(i = 0, 1, 2, \dots, i-1; k = 1, 2, \dots, m)$$

$$\sum_{j \in W} L_{j,i} (w_{i,k} - w_{j,k}) = m_{i,k} \quad (5-i)$$

$$(i = 0, 1, 2, \dots, i-1; k = 1, 2, \dots, m)$$

$$w_{i,k} \leq w_{\text{out},(\text{max}),i,k} \quad (k = 1, 2, \dots, m) \quad (6-i)$$

$$L_j - \sum_i L_{j,i} \geq 0 (j \in W; i = j+1, 2, \dots, n) \quad (7)$$

对于式(4-i)、(5-i)、(6-i),令 $i = 1, 2, \dots, n$,则可列出整个过程的由 n 个操作顺次相连的所有等式约束和不等式约束。

式(1)是求满足整个过程要求的最小新鲜水用

量,它是一个由内、外层组成的嵌套目标函数,内层用来寻找当操作序列给定情况下的最小新鲜水用量,外层是考虑所有可能的操作序列并通过比较内层的优化结果寻找整个用水过程的最小新鲜水用量。式(2)表示在整个过程中每个组分的传质衡算式,即整个过程的所有操作对每个组分的传质总和等于新鲜水对该组分的总质量交换量。式(3)表示用于各操作的新鲜水量之和等于过程的总新鲜水用量 f_{us,S_l} 。式(4-i)含义是用于操作的所有水源混合后所含的每一个组分污染物的浓度都必须满足操作要求,其值必须小于或等于操作所限定的该组分污染物的入口浓度。式(5-i)是操作 i 的每一组分的传质衡算关系式。式(6-i)含义为用于操作的所有水源的出口浓度必须小于或等于操作所限定的该组分污染物的出口浓度。式(7)含义为用于各操作的第 j 股水源流量之和应该小于或等于可得到的第 j 股水源总量。

以上非线性规划的内层优化可直接利用 LINGO 软件编程进行求解,外层则可采用 Visual C++ 语言编程来自动生成不同的操作序列,多次调用内层的 LINGO 程序并比较内层的优化结果来寻找整个过程的最优解。这里简要介绍外层采用 Visual C++ 语言编程搜索操作序列的思想,主要采用 2 种思想来编程:(1)枚举法,即对整个过程所有可能的操作序列进行搜索来寻找最优解。(2)排除法,首先对整个过程的各个操作进行分析,根据各操作的特点和操作之间的关系,尽可能固定一些操作在操作序列中的位置和一些操作之间的相对顺序,然后在此基础上搜索所有可能的操作序列来寻找最优解,当操作序列总数较少时,这种方法可不借助于外层来优化操作序列,只需对每个操作序列的内层非线性规划利用 LINGO 软件求解,并将所得结果进行对比即可找到最优解。在求解的过程中,水源和操作之间的不可行的匹配由于不满足约束可被自动剔除掉。

3 实例

表 1 给出了水的限制浓度数据,取自文献[5]。它有 8 个操作,含 4 种污染物。在不考虑水再利用情况下用水量为 191.17 t/h。对于此例采用笔者提出的方法最后求得整个过程的最小用水量为 160.6732 t/h,与不考虑水再利用情况的最小用水量 191.17 t/h 相比,节水 16%,也比文献[5]中以最小年费用为目标求得的用水量(162.59 t/h)要小,图 1 给出了相应的过程设计方案。

表1 过程限制数据

操作	污染物	$w_{in,(max)}/10^{-6}$	$w_{out,(max)}/10^{-6}$	负荷/ ($kg \cdot h^{-1}$)	操作	污染物	$w_{in,(max)}/10^{-6}$	$w_{out,(max)}/10^{-6}$	负荷/ ($kg \cdot h^{-1}$)
防腐处理	盐	300	500	0.18	脱硫 II	盐	100	350	3.00
	有机物	50	500	1.20		有机物	200	6000	75.0
	硫化氢	5000	11000	0.75		硫化氢	50	1800	1.90
精馏	氨	15000	3000	0.10	加氢处理	氨	1000	3500	2.10
	盐	10	200	3.61		盐	85	350	3.80
	有机物	1	4000	100		有机物	200	1800	45.0
	硫化氢	0	500	0.25		硫化氢	300	6500	1.10
脱氨脱硫过程	氨	0	1000	0.80	脱盐 I	氨	200	1000	2.00
	盐	10	1000	0.60		盐	1000	9500	120
	有机物	1	3500	30.0		有机物	1000	6500	480
	硫化氢	0	2000	1.50		硫化氢	150	450	1.50
脱硫 I	氨	0	3500	1.00	脱盐 II	氨	200	400	0.00
	盐	100	400	2.00		盐	800	9500	140
	有机物	200	6000	60.0		有机物	1200	6500	220
	硫化氢	50	2000	0.80		硫化氢	150	450	1.20
	氨	1000	3500	1.00		氨	200	400	0.00

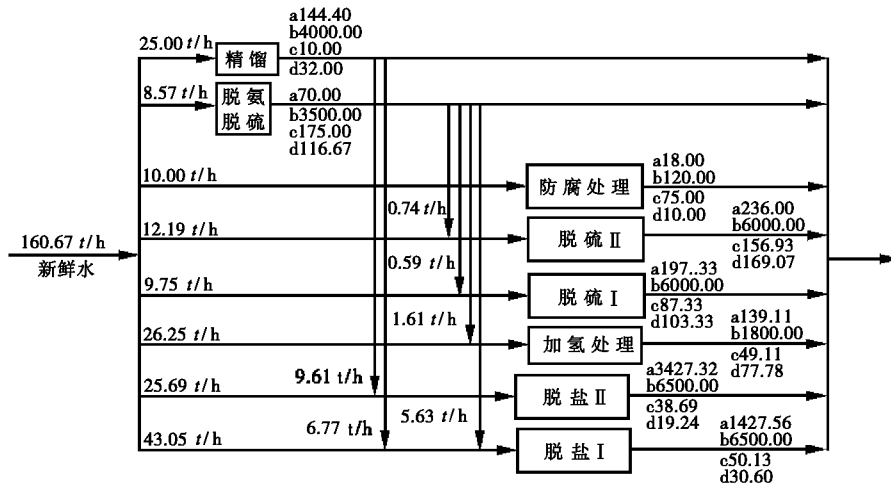


图1 过程设计

4 结论

对较复杂的多组分用水过程,以用水量最小为目标,提出了基于序贯操作模型的整体优化设计策略,将多组分用水网络的设计问题表达为一个双层优化的非线性规划:内层用来寻找给定操作序列情况下的最优解,外层则是在所有可能的操作序列中搜索最优序列。用一个例子说明了此新方法 with 已提出的超结构方法相比,求解更容易。

符号说明

$w_{j,k}$ —第 j 股水源中所含第 k 个组分污染物的质量分数;
 $w_{i,k}$ —操作 i 的第 k 个组分污染物的出口质量分数;

$w_{drain,k}$ —整个过程排出的混合废水中所含第 k 个组分污染物的质量分数;
 $w_{us,k}$ —新鲜水所含的第 k 个组分污染物的质量分数,此处为 0;
 $w_{in,(max),i,k}$ —第 i 个操作所限定的贫流中所含第 k 个组分污染物的入口质量分数;
 $w_{out,(max),i,k}$ —第 i 个操作所限定的贫流中所含第 k 个组分污染物的出口质量分数;
 f_{us,S_j} —对应于操作序列 S_j 的整个过程的新鲜水用量,kg/h;
 $L_{j,i}$ —用于操作 i 的第 j 股水源质量流量,t/h,($j < i$),当 $j = 0$ 时,为新鲜水;
 L_j —第 j 股水源总质量流量,t/h;
 $m_{i,k}$ —第 i 个操作中第 k 个组分的传质总量,kg/h;

(下转第 127 页)

$$\begin{aligned} \sum (F_{i,j} C_{i,\text{out}}^{\text{max}}) &= (\sum F_{i,j} + FR_j) C_{j,\text{in}} \quad \forall i, j \in N \\ F_{i,j} - UY_{i,j} &\leq 0 \quad \forall i, j \in N \\ Y_{i,j} &= \{0, 1\} \quad \forall i, j \in N \\ C_{j,\text{in}}, FR_j, F_{i,j}, F_{j,k} &\geq 0 \quad \forall i, j \in N \end{aligned}$$

目标函数中的第一项为运输新鲜水及回用水的设备费用,第二项为运输新鲜水及回水的操作费,第三项为存在的回用连接费,第四项为新鲜水的费用。 A 、 α 、 B 、 C 、 D 为常数,在本例中分别取值 0.3、0.6、0.6、0.2、0.36。不难看出这是一个非凸的 MINLP 问题,包括 4 个线性的不等式约束 ($N = 4$), 16 个逻辑限制, 8 个非线性等式约束, 24 个上界, 24 个连续变量和 16 个离散变量。使用 PSO 算法得到的最优解如表 3 和表 4 所示,年总费用 $\text{COST} = 105.40$ 万元/a。

表 3 新鲜水 FR_j 及各过程进口质量分数 $C_{j,\text{in}}$ 最优值

过程	1	2	3	4
$FR/\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$	20.0	50.0	0.0	0.0
$C_{\text{in}}/\%$	0.0	0.0	0.1	0.1

表 4 各过程回用连接 $Y_{i,j}(F_{i,j})$ 最优值

$Y_{i,j}(F_{i,j})$	1	2	3	4
1	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)
2	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)
3	0(0.0)	1(42.857)	0(0.0)	0(0.0)
4	1(5.714)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)

注:括号外的数字代表过程 i (行)到过程 j (列)的回用连接是否存在,1 代表存在,0 代表不存在;括号内的数字为这一连接的回用水量, kg/h 。

对于算例 5,笔者使用 GAMS (general algebraic

modeling system) 计算软件中解决 MINLP 的解法器求解此问题,由于此问题的非凸性, GAMS 不能给出可行解。

3 结论

针对带有等式约束及不等式约束的混合整数非线性规划问题,提出了求解过程综合中 MINLP 问题的改进的 PSO 算法——简约空间法。在基本 PSO 算法的基础上,利用等式约束将问题的维数降低,使带有等式约束的优化问题转化为仅含不等式约束的优化问题。利用 5 个算例对该算法进行了测试并与其他算法所得的结果进行了比较。结果表明, PSO 算法在使用的普遍性、求解的高效性等方面都优于一般的算法,尤其对于非凸的 MINLP 问题,该算法是一种更有效的求解方法。

参考文献

- [1] Kennedy J, Eberhart R C. Particle swarm optimization [A]. In: Proc IEEE International Conference on Neural Networks, vol 4 [C]. Piscataway: IEEE, 1995. 1942 - 1948.
- [2] Kocis G R, Grossmann I E. [J]. Computers & Chemical Engineering, 1989, 13(7): 797 - 819.
- [3] Kocis G R, Grossmann I E. [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 1987, 26(9): 1869 - 1880.
- [4] Kennedy J, Eberhart R C. A discrete binary version of the particle swarm algorithm [A]. Proc IEEE Int Conf on Systems, Man, and Cybernetics [C]. Piscataway: IEEE, 1997.
- [5] Costa L, Olivera P. Evolutionary algorithms approach to the solution of mixed integer no-linear programming problems [J]. Computers & Chemical Engineering, 2001, 25(2-3): 257 - 266. ■
- [4] Alva-Argóez A, Vallianatos A, Kokossis A. [J]. Comp Chem Eng, 1999, 23(10): 1439 - 1453.
- [5] Bagajewicz M J, Rivas M, Savelski M J. [J]. Comp Chem Eng, 2000, 24(7): 1461 - 1466.
- [6] Bagajewicz M. [J]. Comp Chem Eng, 2000, 24(10): 2093 - 2113.
- [7] Wang Bin, Feng Xiao, Zhang Zaoxiao. [J]. Comp Chem Eng, 2003, 27(7): 903 - 911.
- [8] 胡仰栋, 徐冬梅, 韩方煜, 等. [J]. 化工学报, 2002, 53(1): 66 - 71.
- [9] Xu Dongmei, Hu Yangdong, Hua Ben, et al. Optimum design of water-utilize systems featuring regeneration re-use for multiple contaminants. [A]. In: Westerberg A W, Chen Bingzhen, Westerberg A. Process Systems Engineering 2003: 8th International Symposium on Praess Systems Engineering [M]. Amsterdam: Elsevier, 2003. ■

(上接第 123 页)

S_{gross} —所有可能的操作序列的集合,对于含有 n 个操作的水过程,可能的操作序列总数为全排列数 P_n^n 个;

S_l —第 l 个操作序列;

W_1 —除新鲜水以外的水源集合。

参考文献

- [1] Wang Y P, Smith R. [J]. Chem Eng Sci, 1994, 49(7): 981 - 1006.
- [2] Rossiter A P, Nath R. Wastewater Minimization Using Nonlinear Programming [M]. New York: McGraw-Hill, 1995. 225 - 244.
- [3] Doyle S J, Smith R. [J]. Transactions of International Chemical Engineering Part B, 1997, 75(3): 181 - 189.