

综述与专论

DOI: 10.11949/j.issn.0438-1157.20161603

工业系统超结构模型应用研究进展

曹健, 牟鹏, 耿志强, 朱群雄

(北京化工大学信息科学与技术学院, 北京 100029; 智能过程系统工程教育部工程研究中心, 北京 100029)

摘要: 超结构模型的研究和应用可以有效解决化工、水处理、钢铁、冶金等领域中逐渐凸显的能源效率问题, 常见于工业系统中的热交换网络和质量交换网络、水网以及其他网络。详细论述了换热网络中的基于状态空间超结构、基于分级超结构模型, 以及两种经典超结构模型思想在质量交换网络、水网中的应用。完成超结构构建后, 根据工业的实际生产状况, 一般以年度总费用为目标函数, 选取合理算法优化超结构网络, 最终得到所需的新建或者改建方案。总结归纳了常见的优化算法, 主要分为两大类: 确定性算法和随机算法。最后阐述了超结构模型在科学研究和实际工程应用中还存在的问题以及下一步的研究方向。

关键词: 超结构; 混合整数非线性规划; 状态空间; 分级; 模型; 优化; 遗传算法

中图分类号: TQ 021.8

文献标志码: A

文章编号: 0438—1157 (2017) 03—0801—10

Research progress and application of superstructure model for industrial systems

CAO Jian, MU Peng, GENG Zhiqiang, ZHU Qunxiong

(College of Information Science and Technology, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China;
Engineering Research Center of Intelligent PSE, Ministry of Education, Beijing 100029, China)

Abstract: Research and application of superstructure can effectively solve the problem of energy efficiency in the fields of chemical industry, water treatment, steel, metallurgy and so on, and were commonly found in heat exchanger network, mass exchanger networks, water networks and other networks. This article reviews the heat exchanger network based on the state-space superstructure model, stage-wise superstructure model and mass exchanger network, water network based on two classical ideological superstructure model. After the construction of the superstructure, according to the actual situation of industrial production, the total annual cost is chosen as the general objective function, appropriate algorithm is selected to optimize network superstructure, finally the required new or renovation program are obtained. This paper also summarizes common optimization algorithm, it divided into two categories: deterministic algorithm and random algorithm. Finally, the article describes the problems of superstructure modeling in scientific research and practical application, and its future research directions.

Key words: superstructure; MINLP; state-space; stage-wise; model; optimization; genetic algorithm

引 言

随着信息化与工业化的结合, 现代工业都具有大型化、复杂化、高能耗和高污染等特点, 尤其是

石油、化工、钢铁、冶金等行业, 这些领域的能源消费量增长已高于能源总消费量增长。2012 年, 我国一次能源总消耗约 36.2 亿吨标准煤, 占全世界总能耗的 21.3%, 但如此大比重的消耗却只创造了全

2016-11-14 收到初稿, 2016-11-17 收到修改稿。

联系人: 朱群雄。第一作者: 曹健 (1987—), 男, 博士研究生。

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (61533003)。

Received date: 2016-11-14.

Corresponding author: Prof. ZHU Qunxiong, zhuqx@mail.buct.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (61533003).

世界 11.6% 的 GDP, 单位 GDP 能耗是国际水平的 2 倍, 是美国的 4 倍^[1]。由此可见, 我国的国民经济发展过度依赖化石燃料等不可再生资源, 能源效率低下也成为其发展的阻碍, 若仍以这样的消耗速度继续下去, 预计 2030 年资源环境将无法支撑^[2]。为了应对目前日益严峻的能源效率低下的形势, 美国、欧盟及许多发展中国家都依据自身的能源储备、经济形势、能源需求和预测分析等因素制定了相应的能源发展政策, 从战略制定、技术革新、人为操作等角度提升能源效率。工业系统庞大, 常选择优化子系统来实现能源效率的提升, 超结构作为子系统常用设计方法目前被广泛应用于石油、化工等工业流程领域的换热网络、质量交换网络和水网络中, 通过模型优化后的结果指导生产。

超结构的广义定义是指在基础结构层次之上建立高于该结构层次且符合特定系统运行流程的复合结构或者变异结构。超结构模型方法也可以称为结构参数方法, 利用该方法建成的网络结构包含了建模对象的所有可能结构模块, 所有可能的流程结构模块都是构成超结构的一个子集, 每个模块有对应的结构参数, 参数取值为 0 或 1 表示该结构单元不采用或保留, 也包含连续变量表示其他连接方式。超结构模型的构造通常是在基础的流程网络基础上, 融合其他多种平行的可选方案, 最终形成一个冗余的超级流程网络结构, 简称为超结构模型, 然后根据目标函数和约束, 运用混合整数非线性规划 (MINLP) 等方法优化超结构网络, 得到特定目标下的最优网络结构, 常见目标函数为年度总费用 (total annualized cost, TAC)。同时此模型可以通过更改分配网络和操作网络实现不同工业系统的优化设计, 即应用超结构模型, 可以指导企业和政府实现工业流程系统的新建、改建或扩建。本文综述了国内外超结构模型建模的发展现状, 并列举了在工业应用中的实例, 且根据进一步的研究设想超结构模型的研究趋势, 可为更深层次的工业应用提供指导。

1 超结构网络构建

1.1 超结构网络构建步骤

构建超结构网络模型的基本步骤为:

(1) 根据研究或工业需求, 建立优化目标系统的基本网络图;

(2) 针对系统可优化部分, 选取所有可能的替代方案添加到基本网络图中, 此处指的所有替代方

案可以经过适当的筛选, 减少后续优化的工作量;

(3) 将步骤 (2) 中的可优化部分变量化, 物理模块包含结构参数, 取值为 0 或 1, 也包含连续参数;

(4) 确定超结构网络模型的基本约束条件, 将网络结构模型转化为数学模型, 至此超结构网络模型构建完成。

现代工业系统种类多, 规模大, 差异区分明显, 所以构建统一的大规模系统超结构难度大且无实际应用的价值, 目前为止一般是针对具体的子系统, 建立细化的超结构模型, 研究较多且成熟的模型是由 Grossmann 等^[3]提出的分级超结构 (stage-wise superstructure) 和 Bagajewicz 等^[4]提出的状态空间超结构 (state-space superstructure)。两种模型思想都实现了包含所有可能结构, 并配以可视化的拓扑结构, 避免了可行解的丢失, 将重点转化为数学模型的构建, 以上两种模型多用于换热网, 换热网络是从能量流的角度研究系统流程的优化设计, 同时, 质量交换网络和换热网络密不可分, 是过程综合研究的新领域, 由 El-Halwagi 等^[5]参照换热网络的概念提出, 近年国内水网的超结构研究也日渐成熟, 且有较多的应用示例。以上领域的具体内容会在后续应用部分做详细总结。除了上述方向外, 也有许多其他的工业领域应用, 如氢化系统优化, 反应器优化等。下面以换热网络为背景总结两种常见的超结构模型思想。

1.1.1 分级超结构 分级超结构的基本思想是根据冷热流股数实现分级, 在每一级内部考虑流股的所有换热可能, 因此优化过程就成为离散的。Debora 等^[6]将非线性或非二次问题统一转化, 当然会增加更多的变量和等式约束, 他们在每个节点上利用松弛变量的单调性结合分支界限法和约束收缩, 实现了分级超结构的优化。其基本形式如图 1 所示。

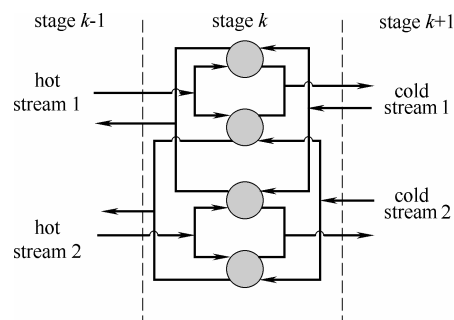


图 1 分级超结构

Fig.1 Stage-wise superstructure

分级超结构模型的构建基本步骤为:

(1) 确定超结构的级数, NH 代表热流股数目, NC 代表冷流股数目, NK 代表最终超结构模型的级数, 典型的 $NK = \max(NH, NC)$;

(2) 对于超结构的每一级, 冷热流股都被直接分配到对应的潜在换热器中, 在进入下一级前, 换热器的输出流混合;

(3) 每个分级的输出温度都赋为变量。

Yee 等^[7]实现了将分级超结构模型转换为对应的 MINLP 数学模型, 目的是实现年总费用的同步优化。其优点是考虑了模型每一级内各冷热流股所有可能的匹配换热网络, 且前提假设流股为等温混合、分支中只能出现一次换热过程、无旁路等, 大大降低了 MINLP 数学模型的求解难度。

后续很多研究人员利用分级超结构的思想改进换热网络, 即使考虑了非等温混合、旁路流股等现实约束, 还是存在非凸 MINLP 的问题。Jonggeol 等^[8]提出在分级超结构中加入公用工程子级, 即在传统分级超结构两级之间考虑公用工程因素, 最终证实该细化的分级超结构可以得到更优的网络结构; Adeniyi 等^[9]利用分级超结构模型解决了之前仅有单一操作周期的换热网络综合问题, 提出的多周期操作 MINLP 模型, 经过实例验证, 该方法得到了最优结果; Viviani^[10]设计了一个四级的超结构模型, 其中的过程流股压力可调整, 实现了能源效率的提升; Lei 等^[11]将分级超结构模型应用于焦化系统中的泵循环模块, 实现了最低的年总费用; Chen 等^[12]构建了有机朗肯循环结合热循环的分级超结构模型, 充分利用了系统中废热能量; Lira-Barragan 等^[13-14]提出了一个短暂存储热量能源的混合可再生能源系统, 构建了整个系统不包含热存储部分的分级超结构模型, 热存储单独构建, 最后通过实例验证可获取最优解结构。

1.1.2 状态空间超结构 状态空间超结构模型提出之前, 基于夹点技术和分级超结构模型的换热器研究都无法实现换热器数目、换热器面积等约束的同步优化, 因此 Bagajewicz 等^[4]提出了状态空间超结构模型及其改进策略。状态空间超结构基本表示如图 2 所示。

状态空间结构主要分为两个模块: 分配网络 (distribution network, DN) 和过程操作算子 (process operator, PO)。其中分配网络由分配器和混合器组成, 该模块功能是将输入流股分配或混合处理, 以得到最终的目标产品温度; 操作算子的作用是分配

器、混合器操作的集合, 实现流程系统中流股的匹配或操作顺序安排。其思想可以将工业流程系统中的换热装置单元、分配混合等操作以变量的形式展现, 从而将结构问题转换为数学模型, 这样就可以应用综合优化软件求解。

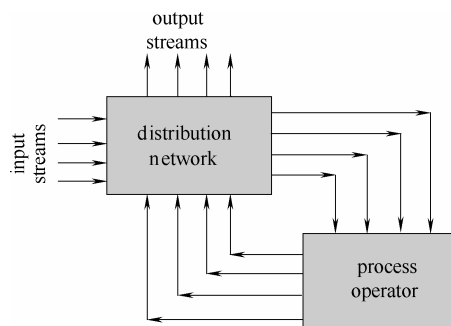


图2 状态空间超结构

Fig.2 State-space superstructure

基于状态空间超结构的换热网络综合问题近些年得到了广泛发展, 李永强等^[15]实现了多流股换热网络的设计, 将相邻流股换热匹配、传递温位效应考虑到优化计算中, 在优化部分, 考虑散热因素改进目标函数, 最终验证了改进的有效性。Harry 等^[16]在多流股换热的优化过程中提出一种新的解决策略, 在换热面积的非平滑约束中用显示依赖扩展夹点技术解决了多达 3 个未知变量的优化问题。Dong 等^[17]利用改进的状态空间超结构模型, 建立 MINLP 的数学模型, 利用两阶段搜索策略实现了多流股混合换热网络的一步优化。Bhargava 等^[18]分别从夹点技术和数学模型优化的角度综述了换热网络的改造方法及其应用。

1.1.3 其他构建方法 process graph (P-graph)^[19]是一种解决过程网络综合问题的图形化方法, P-graph 的组成主要包含过程或操作单元集、原料或流股集合。该方法主要分 3 步: ① 确定问题域所有可行结构, 类似于超结构网络的构建; ② 生成结构解, 即基于问题生成结构解; ③ 加速分支定界, 从第②步中的结构解集合中选择最优解。P-graph 更有效地删除了不合理物理网络解结构, 在大规模问题中会有更好的效率。可以考虑将其理论思想结合传统的模型方法, 实现优化过程的加速或寻求更好解结构^[20]。

schedule graph(S-graph)^[21-25]是一种用于解决设备调度问题的超结构方法, 其目标为最大化目标产量, 同时最小化生产时间。

1.2 超结构模型应用流程

超结构网络模型方法的应用过程中难度集中

于网络构建部分和优化部分,还派生一些处理技巧和简化方法,超结构模型的基本应用流程包括:构建优化对象的超结构模型、确定目标函数及约束、优化超结构网络最终得到最优结构,如图3所示。

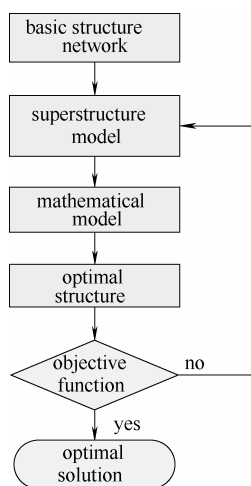


图3 超结构应用流程

Fig.3 Flowchart of superstructure application

2 超结构网络优化

超结构网络模型中不仅包含各结构单元冗余结构,单元间的连接方式,如串联、并联和串并联等,在构建之初还应同时考虑所有可能应用的优化策略,即超结构模型中应包含最优的流程系统网络,在优化过程结束后,可以同时得到目标函数的最优值、系统的最佳网络结构和操作条件,这也是超结构模型的最大优点。但超结构的初态可能不包含最优解,就需要扩展超结构模型的规模,因此,超结构模型构建对后续寻求最优解有很大影响。

2.1 优化目标

工业系统网络综合,即超结构的优化过程是一个多层次、多目标的优化问题,优化策略需要考虑优化结果的经济性、稳定性、实用性和安全性等方面。目前,超结构模型常见应用于热量交换网络、质量交换网络和水网中,本质上这3个领域有共通之处,本质区别在能量的表现形式不同,所以综合考虑这些问题,可以将年度总费用(TAC)作为目标函数,年度总费用包含投资费用和运行费用两部分,投资费用由系统中物理结构单元的数目和相关参数决定,运行费用则由公用工程工作量决定。

鉴于不同的应用领域,除了确定的目标函数作为约束条件外,还需考虑具体的应用背景,例如换热网络中的热速率方程、传热温差约束和流股温度

约束等;质量交换网络中的杂质质量衡算、进出口浓度限制和流率限制等;水网中的进出口水量衡算、各杂质质量衡算等。具体的优化目标函数和约束条件将在下面具体的实际工业应用中展示。

2.2 优化方法

在工业系统综合问题中,超结构模型会产生大量的组合优化,且具有以下特点:变量多、维度高、同时存在离散和连续变量、约束条件非线性、求解空间大和难求最优解等。总结换热网络、质量交换网络和水网的共通性,即依据总费用目标优化策略,可以将超结构模型优化方法分为分步综合方法和同步综合方法。除此以外,还有一些其他的预处理的简化策略。

2.2.1 分步综合方法 分步综合的思想是将优化目标分层或者分等级,逐步优化,最后将每个子优化结果综合,这样会简化超结构的优化过程,问题在于结果只满足子问题的目标函数最优,由于子系统之间既相互独立又相互关联,如果割裂了系统的整体性就无法确定结果是否满足全系统的目标函数,即所求的最优网络结果无法保证是全局最优解。综上,目前分步综合方法还需要进一步的研究。

2.2.2 同步综合方法 超结构模型的同步综合方法常用混合整数非线性规划表示,求解以TAC最低为目标的全球优化问题常用的同步综合算法分为两大类:确定性算法和随机算法。

确定性算法综合求解规模较小的超结构网络有优势,如分支定界法等,限于工业系统中超结构模型网络的变量至少数以千计,所以一般该类方法仅限于约束条件苛刻的小规模系统。

随机算法有更好的性能,因其在全球优化计算过程中不易陷入局部最优解。常用算法如模拟退火算法(SA)、遗传算法(GA)或禁忌搜索法,或将这些算法有机结合形成的混合优化算法等。这些算法都有稳定、不易陷入局部最优等特点。因此随机算法在科学研究和工程应用中的发展会成为将来的趋势。

2.3 优化工具 GAMS

通用代数建模系统(general algebraic modeling system, GAMS)是一款高级建模系统,其功能主要为解决模型的数学规划和优化问题,尤其是线性规划、非线性规划和混合整数规划问题。GAMS界面简洁易用,先在操作页面编写程序,然后用对应的解析器求解超结构模型形成的约束目标函数,基本模型类型为混合整数规划(MIP)、非线性规划(NLP)

和混合整数非线性规划 (MINLP)。而与之对应的常用求解器如表 1 所示。

表 1 GAMS 常用求解器

Table 1 GAMS solver

Model type	Solver
GAMS MIP	GAMS/CPLEX, GAMS/XA or GAMS/XPRESS
GAMS NLP	GAMS/CONOPT, GAMS/MINOS or GAMS/SNOPT
GAMS MINLP	GAMS/DICOPT

GAMS 为常见工具,除此以外, MATLAB 也常用于解决线性规划问题, MATLAB 软件功能强大之处在于可以调用较多的外用接口,如 LindoAPI 等,实现优化系统的线性规划问题。

3 超结构应用

3.1 换热网

工业系统中,换热网络是整体流程系统中可以实现能量回收利用的一个重要子系统,在生产过程中,常需要加热或冷却某些物流,因此研究人员就考虑是否可以实现冷热物流间的能量传导交换,在系统内部实现加热或冷却,充分利用了全系统的能量,提高能源的利用效率,使企业实现最大获益^[26]。换热过程需要满足一些符合热血原理的基本方程,如

$$Q_{\text{冷}} = Q_{\text{热}} \quad (1)$$

式中, $Q_{\text{冷}}$ 和 $Q_{\text{热}}$ 分别为冷、热流股的换热量。

换热网络综合问题第 1 次由 Hwa^[27]于 1965 年提出,但限于当时的硬件差、求解计算难等条件,未能应用于复杂的工业流程系统中,换热网络问题于 1969 年被正式提出^[28]。Linnhoff 等^[29]于 1978 年提出夹点技术来解决换热网络的综合问题,该方法为典型的物理模型,依据充分且综合优化效果良好。随着技术的发展,更多研究人员投入其中, Grossmann 等在 1978 年首次提出分级的模型思想^[3],并于 1990 年提出分级超结构模型^[30-31],该类型的超结构得到了广泛的发展。随后, Manousiouthakis 等^[4]在 1992 年提出了换热网络的状态空间超结构模型,近几十年换热网络的研究和发展主要都是基于以上两种超结构。除此以外,还有一些研究人员基于具体细节问题而研究的换热网络问题,例如,考虑压降 (pressure drop) 的优化问题,即流股流动会产生压力损失问题, Polley 等^[32]第 1 次在换热网络中提出考虑压降因素影响的综合问题。

根据换热网络中冷、热流股是否分流可以将换

热网络分为无分流结构、有分流结构^[33-35],其中无分流结构的换热网络结构中流股与所有对应流股发生热量交换,即流股以串联的方式发生热量交换;而有分流热交换中会存在分流合流的情况。根据流股的状态,换热系统还可分为无相变简单换热系统和有相变简单换热系统。

根据换热网络的设计理念^[36-37],其优化过程一般以最小年度总综合费用 (TAC) 为目标函数,常将其分为 3 个子优化问题:公用工程费用优化问题,换热装置数量优化问题和换热面积优化问题。

3.2 质量交换网

质量交换网络综合问题相对换热网络综合问题研究较少,但随着工业化的飞速发展,由于技术工艺等问题,使工业的生产流程系统中产生大量的未充分利用物料,如果只是简单地当作生产杂质来处理,不仅会造成严重的环境污染,同时会大幅提升生产成本。随着换热网络的逐渐发展成熟,为质量交换网络的研究与发展提供了很好的参考,而且质量交换综合问题必然会受热量平衡等的约束,因此质量交换与热交换问题有密切的联系,通常会将两类综合问题同时考虑,实现统一优化。随着政府和企业逐渐意识到能源效率和环境保护的重要性,质量交换网络的研究和发展必然成为热门课题。

质量交换网络的基本思想是确定了部分过程富流股和对应过程参数、已知若干备选贫流股的组成要求和流量上线,构建超结构网络,然后确定目标函数,在满足质量平衡等约束的前提下优化超结构网络选取最优解。质量交换网络基本示意图如图 4 所示。换热网络中的状态空间模型、分级超结构模型的思想方法都可以引入质量交换网络的综合问题中,这里就不再赘述。

质量交换网络的研究主要分为连续过程和间歇过程两个方向,连续过程质量交换网络又有单组

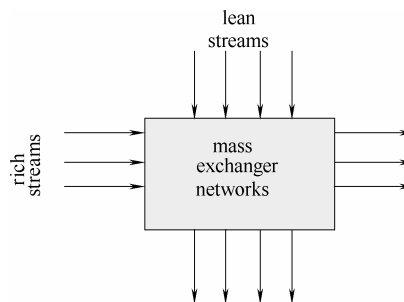


图 4 质量交换网络

Fig.4 Mass exchanger network

分和多组分的区别。质量交换网络的优化设计初始阶段大都基于夹点分析方法实现, El-Halwasi 等^[38-39]利用夹点技术分步实现了质量交换网络的综合优化, Wilson 等^[40]利用图解法计算塔板数, 求得最优年度总费用。夹点技术在换热网络发展中积累了丰富的技术经验, 且结合了直观表达的曲线图和问题表格, 实用性强, 但并不能实现公用工程费用及设备投资的一次性优化^[41]。

Grossmann 等^[3]提出的分级超结构模型及 Manousiouthakis 等^[4]提出的状态空间模型在换热网络领域应用成熟, 随后推广到了质量交换网络的研究中, Chen 等^[42-45]利用分级超结构模型实现了质量交换网络的优化, 都健等^[46]利用基于分级超结构思想分步综合热集成的质量交换网络, 指出贫流股传质温度与过程贫流股的流量是两个网络间的关键参数, 离散关键参数而形成多个备选方案, 最后再建立非线性规划的数学模型, 从而简化了优化难度, 经证明其方法可行。Liu 等^[47]构建了包含质量、热量的交换网络分级超结构模型, 称之为“模糊的热交换网络超结构”, 优化过程中要同时权衡热交换网络、质量交换网络, 文中选用了混合遗传退火算法优化该模型, 经实例验证可以实现资源的高效利用。减少了流程系统的分配可能, 降低了物料的回收效率, 并未实现最大程度的提高能源效率。Li 等^[48]提出一种改进的状态空间超结构, 将质量、能量两部分模块整合为单一的综合流程, 考虑多流混合的状况, 将超结构模型转化为 MINLP 的数学模型求解。

3.3 水网

水资源缺乏所面临的状况甚至要比资源问题严重, 也是全球大部分地区都存在的问题。因此如何节约水资源, 合理应用水资源和重复利用水资源的问题显得尤为重要, 即如何实现优化水网。水网络综合的研究主要为用水处理、废水处理和水的循环利用等。水网的超结构模型综合问题较早由 Takama 等^[49]于 1980 年提出, 1994 年 Wang 等^[50]将夹点技术应用到水网问题中, 使水网问题成为一个热门的研究课题。

水网超结构的构建、优化等的过程与换热网络、质量交换网络基本类似, 区别在于具体目标函数、基本约束和一些细节上。按照不同标准分类不同, 如单杂质水网和多杂质水网等。Yan 等^[51]在 Ahmetović 等^[52-53]、Grossmann 等^[54]所提出的超结构模型基础上修改了加热器和冷却器的位

置, 基于改进的超结构, 采用非线性规划模型优化, 最终实现了最小化 TAC。Zhou 等利用改进的状态空间超结构优化了水网的批处理时序问题^[55-56]; 并分别在固定流率、固定流率和杂质流入过程的情况下构建了改进的水网状态空间超结构模型^[57-58]。

除了以上的单独处理水网以外, 目前的研究热点通常是水网与换热网络的集成综合, Zhou 等^[59]建立了一个综合水网和换热网的超结构, 然后通过平衡约束策略优化该模型, 充分挖掘了直接、间接热交换问题, 经验证有更好的结论。Liu 等^[60]构建了集成热交换的水网超结构, 利用改进的分离模型一步实现了水网和能源的优化, 虽然最终的网络结构需要通过两步实现优化, 但水网和公用工程的优化是一步实现的, 很适用于大规模的集成热水网。Dong 等^[61]构建了多杂质水网和换热网相结合, 基于改进的状态空间超结构, 不仅考虑了所有的水复用和水处理, 还包含直接、间接的热交换, 在优化部分, 为提高结果的质量和精确度, 利用随机扰动产生初始假设, 结合交互迭代方法寻求最优解。Raymond 等^[62]将水网与分区储热相结合, 构建了其超结构模型。

本质上热量交换网络、质量交换网络和水网, 在构建超结构模型的方法理论上是相通的, 而且在实际的工业系统生产中, 三者也有很多交叉, Jacek^[63]综述了三者之间的联系。

3.4 其他工业系统

3.4.1 氢气分配系统 超结构模型方法应用于氢化系统的优化最早由 Hallale 等^[64]提出。张毅等^[65]应用超结构方法分析并优化了镇海炼化的现有氢气系统, 目标函数选取为氢气费用和氢气压缩机电费之和, 优化得到最优氢气网络结构, 每年可节省百亿元人民币。刘永忠等^[66]采用二步优化模型, 以最小公用工程氢气用量和匹配简化为目标函数, 讨论了氢网络的匹配数与公用工程氢气用量松弛率的关系, 结果表明, 网络的匹配数与松弛率近似呈反曲函数关系, 适当地放大系统节氢量的要求, 可获得较简单的网络匹配结构。宣吉等^[67]提出考虑设计和调度问题的集成优化模型, 将决策变量分为一阶和二阶决策变量, 以第 1 阶段决策成本与第 2 阶段决策的期望成本之和最小为目标函数求解氢网络结构。张亮等^[68]提出适配氢阱需求的中间等级优化方法。陈诚等^[69]总结了氢化系统超结构优化方法的研究进展, 包含了常用的优化软件, 如 H2-int、

Hydrogen management、Hydrogen management Services 等,都是针对工程氢气用量,优化计算相应模型的软件。

3.4.2 反应器网络综合 郑建光等^[70]用多个等体积的全混流反应器(CSTR)来逼近平推流反应器(PFR),构建了一个反应器网络的超结构,通过非线性规划优化,将模型问题转换为数学模型问题,并给出了模型问题求解的二次优化法,最终得到了最优的反应器类型,并最终得到证明。周丽等^[71]根据煤化工生态工业系统的基本运行原理,构建相应的超结构模型,实现煤资源应用效率的提升。

除以上总结的领域外,超结构模型方法还有很多工业系统的实际应用,这里不再逐一陈述。

4 超结构研究趋势

随着超结构模型近三十多年的发展,在许多工业领域的能源效率研究和实践中取得了丰硕的成果。当前,全球经济发展的大环境下,工业是能源的主要消耗者,因此工业领域的能源效率问题备受企业和政府重视,它关乎人类与环境的可持续发展。超结构模型的应用在一些领域问题上解决了能源效率低下的问题,体现了该方法的有效性,而且,超结构模型理论在能源效率方面一定有更深层次的应用潜力。

(1) 构建整体流程的工业流程网络的超结构。目前的超结构模型主要应用于工业的某一支或几个分支,还没有研究人员和企业将该方法理论应用在某一整体工业系统中,将超结构模型的概念应用于整体系统,可以从全局的角度实现能源效率的最优。但这必将存在问题规模大、目标函数多样化难以确定、优化算法计算复杂等问题,因此构建工业系统整体超结构的问题还需要进一步研究。

(2) 本文提到已有一些研究人员将超结构模型方法应用到除质量换热网络、水网以外的氢化分配系统、反应器系统,因此可以考虑将超结构模型方法应用到更多的工业系统中,如乙烯生产中,裂解炉群中不同规模大小裂解炉的组合结构等。

(3) 在建立初始的超结构模型之后,选择更好的表现形式及简化策略可减少优化部分工作量,前期的简化会带来后续计算量的大幅度降低。因此,优化前的预处理也有很多内容待进一步研究。

(4) 快速找出全局最优网络的方法。超结构模型优化部分近几年研究人员十分重视,常面临数以万计的约束变量,快速寻优尤为重要。同时,算法的复杂度、稳定性、实用性也需要考虑,人工智能方法是目前研究的热点,其本身的一些优点,收敛快,不易陷入局部最优解等,因此,人工智能优化方法也会成为研究超结构模型的一个重要方向。

5 总结

本文详细综述了超结构模型方法在工业系统中的研究进展。其中,主要以化工领域的换热网络系统、质量交换网络系统和水网等方面为背景,详细介绍了状态空间超结构模型、分级超结构模型等超结构的构建。以TAC为目标函数的优化部分,介绍了确定性优化方法和随机优化算法,近些年来,以人工智能方法为主的随机优化算法逐渐被重视,且在速度、收敛速度、稳定度等方面表现出了很好的性能,所以人工智能方法的优化将是一个很重要的研究方向。最后,本文还指出了超结构模型方法中存在的问题、挑战及将来的研究方向。

超结构模型是提高工业系统中能源效率的一种综合方法,在科学研究和工业生产中都有举足轻重的地位,除了文中提到的几个具体应用领域外,在其他工业系统中应用超结构模型解决能源效率问题应是一个很好的研究思路,超结构模型将会有更多领域的实践应用。

References

- [1] 赵松龄. 国内外低碳物流发展的比较与借鉴[J]. 对外经贸实务, 2014, 1(24): 90-92.
ZHAO S L. Comparison and reference of the development of low-carbon logistics [J]. Practice in Foreign Economic Relations and Trade, 2014, 1(24): 90-92.
- [2] 钱伯章. 节能减排——可持续发展的必由之路[M]. 北京: 科学出版社, 2008.
QIAN B Z. Energy Conservation and Emissions Reduction—The Only Way for Sustainable Development[M]. Beijing: Science Press, 2008.
- [3] GROSSMANN I E, SARGENT R W H. Optimum design of heat exchanger networks[J]. Computers and Chemical Engineering, 1978, 2: 1-7.
- [4] BAGAJEWICZ M J, MANOUSIOUTHAKIS V. Mass/heat-exchange network representation of distillation networks [J]. AIChE J., 1992, 38(11): 1769-1800.
- [5] EL-HALWAGI M M, MANOUSIOUTHAKIS V. Synthesis of mass

- exchange networks[J]. *AIChE J.*, 1989, **35**(18): 1233-1244.
- [6] DEBORA C F, KIM S Y, BAGAJEWICZ M J. Global optimization of the stage-wise superstructure model for heat exchanger networks[J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2015, **54**: 1595-1604.
- [7] YEE T F, GROSSMANN I E. Simultaneous optimization models for heat integration(I): Area and energy targeting and modeling of multi-stream exchangers[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1990, **14**: 1151-1164.
- [8] JONGGEOL N, JAEHEUM J, CHANSAEM P, *et al.* Simultaneous synthesis of a heat exchanger network with multiple utilities using utility substages[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2015, **79**: 70-79.
- [9] ADENIYI I, MILOS B, DUNCAN F, *et al.* Optimal synthesis of heat exchanger networks for multi-period operations involving single and multiple utilities[J]. *Chemical Engineering Science*, 2015, **127**: 175-188.
- [10] VIVIANI C O. Simultaneous synthesis of heat exchanger networks with pressure recovery: optimal integration between heat and work[J]. *AIChE J.*, 2014, **60**: 893-908.
- [11] LEI Y, QI X, ZHANG B J, *et al.* Simultaneous optimization of the complex fractionator and heat exchanger network considering the constraints of variable heat removals in delayed coking units[J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2014, **53**: 13073-13086.
- [12] CHEN C L, CHANG F Y, CHAO T H, *et al.* Heat-exchanger network synthesis involving organic Rankine cycle for waste heat recovery[J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2014, **53**: 16924-16936.
- [13] LIRA-BARRAGAN L F, PONCE-ORTEGA J M, SERNA-GONZALEZ M, *et al.* Optimum heat storage design for solar-driven absorption refrigerators integrated with heat exchanger networks[J]. *AIChE J.*, 2014, **60**(3): 909-930.
- [14] LIRA-BARRAGAN L F, PONCE-ORTEGA J M, SERNA-GONZALEZ M, *et al.* Sustainable integration of trigeneration systems with heat exchanger networks[J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2014, **53**: 2732-2750.
- [15] 李永强, 王兵, 邹雄, 等. 基于状态空间超级结构的多流股换热网络最优设计[J]. *化工学报*, 2014, **65**(6): 2156-2164.
- LI Y Q, WANG B, ZOU X, *et al.* Optimal design of multistream heat exchanger network based on state space superstructure[J]. *CIESC Journal*, 2014, **65**(6): 2156-2164.
- [16] HARRY A J W, KAMIL A K, PAULIB, *et al.* Multistream heat exchanger modeling and design[J]. *AIChE J.*, 2015, **61**(10): 3390-3403.
- [17] DONG H G, LIN C Y, CHANG C T. Simultaneous optimization strategy for synthesizing heat exchanger networks with multi-stream mixers[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2008, **86**: 299-309.
- [18] BHARGAVA K S, RANGAIAH G P. Review of heat exchanger network retrofitting methodologies and their applications[J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2014, **53**: 11205-11220.
- [19] RAYMOND R T, CHRISTINA D C, KATHLEEN B A. P-graph approach to optimal operational adjustment in polygeneration plants under conditions of process inoperability[J]. *Applied Energy*, 2014, **135**: 402-406.
- [20] WU W Z, CARLOS A, CHRISTOS T M. A superstructure representation, generation, and modeling framework for chemical process synthesis[J]. *AIChE J.*, 2016, **62**(9): 3199-3214.
- [21] HEGYHÁTI M, MAJOZI T, HOLCZINGER T, *et al.* Practical infeasibility of cross-transfer in batch plants with complex recipes: S-graph vs MILP methods[J]. *Chemical Engineering Science*, 2009, **64**: 605-610.
- [22] JAVIER R, LUIS P, TIBOR H, *et al.* Scheduling intermediate storage multipurpose batch plants using the S-graph[J]. *AIChE J.*, 2004, **50**(2): 403-417.
- [23] ISTVÁN H, HERIBERTO C, FERENC F. Designing sustainable supply chains in the energy-waterfood nexus by the P-graph methodology[J]. *Chemical Engineering Transactions*, 2015, **45**: 1351-1356.
- [24] SANMARTI E, PUIGJANER L, HOLCZINGER T, *et al.* Combinatorial framework for effective scheduling of multipurpose batch plants[J]. *AIChE J.*, 2002, **48**(11): 2557-2570.
- [25] THOKOZANI M, FERENC F. Maximization of throughput in a multipurpose batch plant under a fixed time horizon: S-graph approach[J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2006, **45**: 6713-6720.
- [26] 高维平, 杨莹, 韩方煌. 换热网络优化节能技术[M]. 北京: 中国石化出版社, 2004.
- GAO W P, YANG Y, HAN F H. Technology of Optimization and Energy Saving of Heat Exchanger Networks[M]. Beijing: China Petrochemical Press Co.Ltd., 2004.
- [27] HWA C S. Mathematical formulation and optimization of heat exchange network using separable programming[J]. *AIChE-Intern. Chem. Eng. Symp. Series*, 1965, **4**: 101-106.
- [28] KEVIN C F, NIKOLAOS V S. A critical review and annotated bibliography for heat exchanger network synthesis in the 20th century[J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2002, **41**: 2335-2370.
- [29] LINNHOFF B, FLOWER J R. Synthesis of heat exchanger networks(I): Systematic generation of energy optimal networks[J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1978: 1-3.
- [30] YEE T F, GROSSMANN I E. Simultaneous optimization models for heat integration(I): Area and energy targeting and modeling of multi-stream exchangers[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1990, **4**: 1151.
- [31] YEE T F, GROSSMANN I E. Simultaneous optimization models for heat integration(II): Heat exchanger network synthesis[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1990, **14**: 1165.
- [32] POLLEY G T, PANJEH S M H, JEGEDE F. Pressure drop considerations in the retrofit of heat exchanger networks[J]. *Chemical Engineering Research & Design*, 1990, **68**(3): 211-220.
- [33] 袁希钢. 混合整数非线性规划与化学工程系统最优化设计(II): 换热器网络的最优合成[J]. *化工学报*, 1991, **42**(1): 40-46.
- YUAN X G. Mixed-integer non-linear programming and optimal design of chemical engineering system(II): Synthesis of heat exchanger networks[J]. *Journal of Chemical Industry and Engineering(China)*, 1991, **42**(1): 40-46.
- [34] 霍兆义, 尹洪超, 赵亮, 等. 国内换热网络综合方法研究进展与展望[J]. *化工进展*, 2012, **31**(4): 726-731.
- HUO Z Y, YIN H C, ZHAO L, *et al.* Process and prospect for the methodology of heat exchanger network synthesis in China[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2012, **31**(4): 726-731.
- [35] KIM S Y, MIGUEL B. Global optimization of heat exchanger networks using a new generalized superstructure[J]. *Chemical Engineering Science*, 2016, **147**: 30-46.

- [36] 崔月会. 基于状态空间的换热网络优化研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2012.
CUI Y H. Optimal design of heat-exchanger networks based on state space[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2012.
- [37] 苏文杰. 换热网络优化规则及求解策略研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2005.
SU W J. Study on the optimization rules and solution tactics of HEN[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2012.
- [38] EI-HAJWAGI M M, MANOUSIOUTHAKIS V. Automatic synthesis of mass exchange networks with single component targets[J]. Chemical Engineering Science, 1990, **45**: 2813-2831.
- [39] EI-HALWAGI M M, MANOUSIOUTHAKIS V. Simultaneous synthesis of mass exchange and regeneration networks[J]. AIChE J., 1990, **36**: 1209-1219.
- [40] WILSON S, MANOUSIOUTHAKIS V. Minimum utility cost for a multicomponent mass exchange operation[J]. Chemical Engineering Science, 1998, **53**(22): 3887-3896.
- [41] 大连理工大学. 化工原理(下册)[M]. 北京: 高等教育出版社, 2002.
Dalian University of Technology. The Principles of Chemical Engineering(II)[M]. Beijing: Higher Education Press, 2002.
- [42] CHEN C L, HUNG P S. Retrofit of mass-exchange networks with superstructure-based MINLP formulation[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2005, **44**: 7189-7199.
- [43] CHEN C L, CIOU Y J. Synthesis of a continuously operated mass-exchanger network for a semiconsecutive process[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2007, **46**: 7136-7151.
- [44] CHEN C L, CIOU Y Y. Superstructure-based MINLP formulation for synthesis of semicontinuous mass exchanger networks[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2006, **45**: 6728-6739.
- [45] CHEN C L, HUNG P S. Simultaneous synthesis of mass exchange networks for waste minimization[J]. Computers and Chemical Engineering, 2005, **29**: 1561-1576.
- [46] 都健, 李秀峰, 陈理, 等. 超结构法分步综合热集成的质量交换网络[J]. 化工学报, 2010, **61**(10): 2636-2642.
DU J, LI X F, CHEN L, *et al.* Synthesis of heat integrated mass exchanger networks using step-wise approach based on superstructure[J]. CIESC Journal, 2010, **61**(10): 2636-2642.
- [47] LIU L L, DU J, YANG F L. Combined mass and heat exchange network synthesis based on stage-wise superstructure model[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2015, **23**: 1502-1508.
- [48] LI L J, ZHOU R J, DONG H G, *et al.* Separation network design with mass and energy separating agents[J]. Computers and Chemical Engineering, 2011, **35**: 2005-2016.
- [49] TAKAMA N, KURIYAMA T, SHIROKO K, UMEDA T. Optimal water allocation in a petroleum refinery [J]. Computers and Chemical Engineering, 1980, **4**: 251-258.
- [50] WANG Y P, SMITH R. Wastewater minimization [J]. Chem. Eng. Sci., 1994, **49** (7): 981-1006.
- [51] YAN F Y, WU H, LI W, *et al.* Simultaneous optimization of heat-integrated water networks by a nonlinear program[J]. Chemical Engineering Science, 2016, **140**: 76-89.
- [52] AHMETOVIĆ E, KRAVANJA Z. Simultaneous synthesis of process water and heat exchanger networks[J]. Energy, 2013, **57**: 236-250.
- [53] AHMETOVIĆ E, KRAVANJA Z. Simultaneous optimization of heat-integrated water networks involving process-to-process streams for heat integration[J]. Appl. Therm. Eng., 2013, **62**: 302-317.
- [54] KARUPPIAH R, GROSSMANN I E. Global optimization of multi-scenario mixed integer nonlinear programming models arising in the synthesis of integrated water networks under uncertainty [J]. Comput. Chem. Eng., 2008, **32**: 145-160.
- [55] ZHOU R J, LI L J, WU X, *et al.* Simultaneous optimization of batch process schedules and water-allocation network[J]. Computers and Chemical Engineering, 2009, **33**: 1153-1168.
- [56] LI L J, ZHOU R J, DONG H G. State-time-space superstructure-based MINLP formulation for batch water-allocation network design [J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2010, **49**: 236-251.
- [57] ZHOU R J, LI L J, WU X, *et al.* Synthesis of interplant water-allocation and heat-exchange networks(I): Fixed flow rate processes[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2012, **51**: 4299-4312.
- [58] ZHOU R J, LI L J, WU X, *et al.* Synthesis of interplant water-allocation and heat-exchange networks(II): Integrations between fixed flow rate and fixed contaminant-load processes[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2012, **51**: 14793-14805.
- [59] ZHOU L, LIAO Z W, WANG J D, *et al.* Simultaneous optimization of heat-integrated water allocation networks using the mathematical model with equilibrium constraints strategy[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2015, **54**: 3355-3366.
- [60] LIU Z M, LUO Y Q, YUAN X G. Simultaneous integration of water and energy in heat-integrated water allocation networks[J]. AIChE J., 2015, **61**(7): 2202-2214.
- [61] DONG H G, LIN C Y, CHANG C T. Simultaneous optimization approach for integrated water-allocation and heat-exchange networks[J]. Chemical Engineering Science, 2008, **63**: 3664-3678.
- [62] RAYMOND R, TAN A, DENNY K S N, *et al.* A superstructure model for the synthesis of single-contaminant water networks with partitioning regenerators[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2009, **87**: 197-205.
- [63] JACEK J. Review of water network design methods with literature annotations[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2010, **49**: 4475-4516.
- [64] HALLALE N, LIU F. Refinery hydrogen management for clean fuels production[J]. Advances in Environmental Research, 2001, **6**: 81-98.
- [65] 张毅, 阳永荣. 炼油厂氢气网络集成管理[J]. 石油学报, 2004, **20**(1): 58-62.
ZHANG Y, YANG Y R. Hydrogen network integrative management in refinery [J]. Acta Petrolei Sinica(Petroleum Processing Section), 2004, **20**(1): 58-62.
- [66] 刘永忠, 冯霄. 氢网络公用工程消耗量与流股匹配数的优化[J]. 石油学报, 2007, **23**(5): 78-83.
LIU Y Z, FENG X. The optimization of usage of hydrogen utility and match number in a hydrogen distribution network [J]. Acta Petrolei Sinica (Petroleum Processing Section), 2007, **23**(5): 78-83.
- [67] 宣吉, 阳永荣. 基于随机规划的炼厂氢网络改造设计[J]. 化工学报, 2010, **61**(2): 398-404.
XUAN J, YANG Y R. Hydrogen network retrofit design in refinery based on stochastic programming[J]. CIESC Journal, 2010, **61**(2): 398-404.
- [68] 张亮, 刘永忠. 炼化企业中氢气管网的中间等级设置与优化分析[J]. 计算机与应用化学, 2010, **27**(10): 1361-1364.
ZHANG L, LIU Y Z. Analysis and optimization on installation of intermediate levels for a hydrogen distribution network in a refinery[J]. Computers and Applied Chemistry, 2010, **27**(10):

- 1361-1364.
- [69] 陈诚, 薛焘, 游晓艳. 炼油厂氢气分配系统超结构优化方法研究进展[J]. 广东化工, 2011, **38**(9): 279.
- CHEN C, XUE T, YOU X Y. Superstructure optimization approach for refinery hydrogen distribution systems[J]. Guangdong Chemical Industry, 2011, **38**(9): 279.
- [70] 郑建光, 周红敏. 基于超结构的反应器网络综合[J]. 青岛科技大学学报, 2007, **28**(1): 30-33.
- ZHENG J G, ZHOU H M. Integration strategy of reactor network based on superstructure[J]. Journal of Qingdao University of Science and Technology, 2007, **28**(1): 30-33.
- [71] 周丽, 胡山鹰, 李有润, 等. 中国煤化工生态工业系统超结构的构建与分析[J]. 现代化工, 2010, **30**(9): 1-4.
- ZHOU L, HU S Y, LI Y R, *et al.* Establishment and analysis of superstructure for coal chemical industrial system in China[J]. Modern Chemical Industry, 2010, **30**(9): 1-4.