

多产品间歇化工过程最优设计 ——混合模拟退火法*

王春峰 权红印 许锡恩
(天津大学化工系, 天津 300072)

摘 要 将模拟退火法(Simulated Annealing)与启发法(Heuristics)相结合, 得到一种混合优化算法, 应用于多产品间歇化工过程最优设计中, 效果很好. 该算法利用模拟退火的全局最优性保证了算法的全局最优, 利用启发法加快了局部寻优进程, 具有计算速度快、收敛性好等优点. 同时, 该算法自动确定了中间罐的最优数量和位置. 算法对初值要求低, 所需内存小, 与严格数学规划法相比, 相对误差小于0.5%.

关键词 间歇化工过程 模拟退火 启发法

引言

现代化工有两大发展趋势. 一是向大型连续化方向发展, 生产力求连续、平稳、装置生产能力大幅度增加. 另一种趋势是向精细化方向发展, 产品具有小批量、多品种、高附加值、技术密集等特点^[1]. 后一种趋势使得间歇化工过程显得日益重要. 间歇过程比连续过程有更高的弹性和操作灵活性, 同时也更具复杂性. 据统计, 目前化工生产中间歇过程所占比例为40%~50%.

间歇化工过程最优设计是在确定的生产任务下, 选取设备单元, 使总投资最小. 这一类问题均可归纳成一个混合整数非线性规划(MINLP)模型, 然后进行求解. 目前求解这一问题常用分支定界法(BAB)、数学规划法、启发法等. 分支定界法即使用于简单的问题已是非常繁琐, 不适于大型问题的求解. Grossmann 和 Sargent^[2]将这一问题当做混合整数非线性规划问题, 用变尺度法求解; Knopf 等^[3]用广义简约梯度法(GRG)处理; Takamatsu 等^[4]将动态规划与直接搜索相结合完成了有中间罐单产品厂优化设计. 但由于间歇化工过程最优设计问题属于一类组合优化问题, 而组合优化问题的一个重要特征是其 NP-完备(nondeterministic polynomial time complete)性, 即对问题进行求解的最坏时间复杂度与优化变量的个数呈指数关系. 这使得数学规划法计算速度慢、所需机时多, 随着优化变量的增多而最终变得无法求解. 且数学规划法具有对初值要求严格、所需内存多等缺点. 针对这些问题, Espuna 等^[5]推荐了一种计算速度快、所需内存小、初值要求不严格的启发法. Yeh 和 Reklaitis^[6]介绍了用启发法和单变量搜索相结合完成的有中间罐单产品厂最优设计. Modi 和 Karimi^[7]用启发法将 Yeh 等的工作推广到多产品厂. 许锡恩等^[8]修正了 Modi 等提出的数学模型, 并提出了一种启发法对模型进行求解. 但由于启发法只接受使费用函数值下降的方向, 因而可能会陷于局部

1995-08-16 收到初稿, 1995-10-19 收到修改稿.

联系人: 许锡恩. 第一作者: 王春峰, 男, 28岁, 博士.

* 天津市自然科学基金及中国博士后科学基金资助项目.

最优解。并且启发法的有效性取决于其所用启发规则的有效性,而一个好的启发规则的提出需要对所求问题有着非常深刻的理解。为进一步解决所存在的问题,Patel 等^[9]将另一种全新的优化算法——模拟退火法应用于多产品间歇化工过程设计中,它克服了数学规划法初值要求严格、内存要求高、启发法可能会陷于局部最优解的缺点,得到了良好的计算结果。但他们所采用的模拟退火法由于没有结合问题的特征进行相应的调整而表现出相对较慢的缺点,这也正是模拟退火法最为主要的缺点。

本文结合多产品间歇化工过程最优设计问题的实质,将模拟退火法与启发法相结合,得到了一种算法简明、参数控制简单、收敛性好、计算速度快的混合优化算法。

1 多产品间歇化工过程最优设计数学模型

多产品间歇化工过程最优设计均可归纳为一个 MINLP 模型。本文采用许锡恩等^[8]修正的 Modi 等^[7]所提出的多产品间歇化工过程最优设计的数学模型,利用这一模型进行优化设计的任务在于给定生产要求,对各设备尺寸及数量进行计算,使得满足生产要求的前提下总投资最低。

2 混合模拟退火算法

为了得到更好的收敛性及收敛速度,本文对模拟退火法进行了改进,并将其与启发法相结合而得到了一种混合算法。这一算法利用模拟退火法的全局最优性保证了算法的全局最优性,利用启发法加快了局部寻优进程,它同时克服了模拟退火法收敛速度慢、启发法不能保证全局最优的缺点。

首先,结合具体应用方法对模拟退火算法的实现进行介绍。

2.1 模拟退火法的实现

Kirkpatrick 等^[10]于 1983 年首先提出了模拟退火法。它是人们从自然界固体退火过程中得到启发并从中抽象出来的一种随机优化算法。该算法最为显著的特征是它以一定的概率接受使目标函数值增大的移动,所以能够从局部最优解的“陷阱”中爬出来而不会简单地终止于一局部最优解上,即具有全局收敛性,这也是本文所设计算法全局收敛性的保证。并且在理论上已证明了只要系统模拟过程满足一定的要求(系统温度无限趋于零度且在每一温度下模拟充分),则该算法将以概率 1 渐近收敛于全局最优解^[11]。但是,模拟退火法最大的缺点、也可以说其唯一缺点是因其要求模拟充分而造成的计算时间较长。图 1 为典型的模拟退火计算框图。可以看出,该算法包含以下要素。

(1) 相邻状态的产生 相邻状态是指从当前状态经一次移动(对任一优化变量进行一次扩大、缩小或对流程结构进行一次调整)所能达到的状态。这是模拟退火中一个非常重要的概念,因为相邻状态产生的有效性直接关系到算法的有效性。一般的相邻状态产生方法是借助于一个随机数发生器,随机地选取任一优化变量,然后对其进行放大或缩小。但是此法有如下不足^[12]:第一,由于搜索的随机性,某些能够使目标函数值下降的移动可能会被遗漏;第二,在较低温度下,大量时间可能会被浪费在搜索仅有的一两个能够使目标函数值下降的移动上。因此,本文采用这样一种改进了的相邻状态产生方法^[12]:首先,将当前状态的相邻结构集(相邻状态的集合)进行随机排列,然后按照这一随机排列顺序逐一执行各步移动。这样保证了当前状态的每一相邻状态均能被实现一次,也使得低温下每一状态仅被实现一次便可

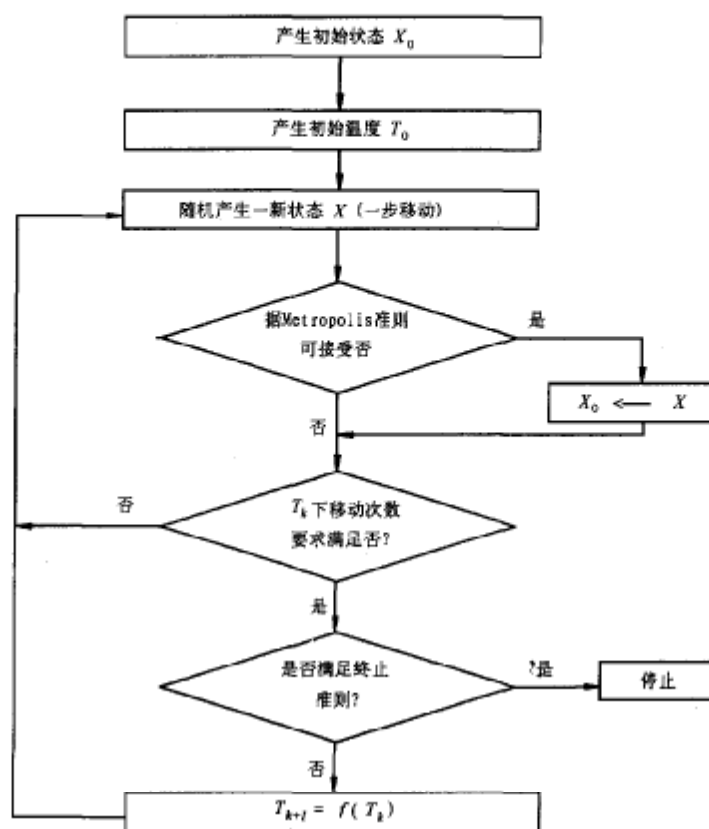


图 1 模拟退火法计算框图

Fig. 1 Calculation chart of simulated annealing

找到能够使目标函数值下降的移动, 节省了计算时间.

(2) 初始温度 T_0 . 温度 T 在模拟退火法中具有决定性作用(称为模拟退火法的控制参数), 它直接控制着退火的走向(即系统的优化方向). 由随机移动的接受准则可知 T 很大时新状态的接受概率很高, 模拟退火法成为普遍随机算法; T 很小时新状态的接受概率很低, 只有使费用函数值下降的移动才能被接受, 这时模拟退火法成为一般迭代改善算法. 因此, 初始温度 T_0 的选取不能过高也不能过低, 过高则以后的过程会有大量的时间浪费在因初始温度过高而接受的使目标函数值上升的移动上; T_0 过低又会使算法的“爬山”能力减弱而可能终止于局部最优解. 一般的 T_0 确定方法是使初始温度 T_0 下随机移动的接受比率落在某一给定的范围内(例如: $0.8 \leq \epsilon \leq 0.9$).

(3) 每一温度 T 下随机移动的次数 如前所述, 每一温度下随机移动的次数取为相邻结构集尺寸的大小.

(4) 降温进程 $T_{k+1} = f(T_k)$ 许多不同的模拟退火研究者给出了不同的降温进程^[12]. 作者选取 Aarts 和 Van Larrhoven^[13]提出的一种具有多项式收敛性的降温进程

$$T_{k+1} = T_k [1 + T_k \ln(1 + \delta) / 3\sigma(T_k)]^{-1}$$

其中 σ 为目标函数标准偏差, δ 为给定数值, δ 越小则降温越慢。

(5) 随机移动接受准则 采用 Metropolis 准则, 随机移动接受概率

$$P = \begin{cases} 1 & \text{若 } \Delta C \leq 0 \\ \exp(-\Delta C/T) & \text{若 } \Delta C \geq 0 \end{cases}$$

其中, ΔC 为目标函数值的变化

可以看出, 系统温度 T 决定着随机移动的接受概率, 温度越高则算法接受使目标函数值上升的移动的能力越强, 具有较强的“爬山”能力; 温度很低则使目标函数值上升的移动接受概率极低, 这时算法退化为普通迭代改善算法。

(6) 连续变量变化步长 因为我们假定各设备单元尺寸在其各自的范围内连续变化, 因此存在变化步长问题, 步长的选取要适当, 步长过大则相当于使系统偏离平衡状态过远而无法重新达到新的平衡态, 最终使算法终止于局部最优解; 步长过小又会使得退火时间延长, David Vanderbilt 等^[14]提出了一种自适应步长调整方法, 但应用较为繁琐, 在此, 作者参考文献[9]的计算经验, 采取这样一种经验方法: 步长的选取使得对该变量进行一个步长的变化后, 目标函数值的改变不超过 1%。

(7) 终止准则 采用一个简单的终止准则: 当 $T=T_f$ 时终止计算(取 $T_f=0.1$)。

2.2 混合模拟退火算法

文献[9]把模拟退火法应用于间歇化工过程最优设计中, 得到了较好的计算结果, 但模拟退火法本身具有局限性, 主要是其计算速度较慢, 且这一局限性在问题的规模增大时表现得尤为突出, 针对这一情况, 许多模拟退火研究者都致力于改进传统的模拟退火法以提高其计算速度, 如并行算法的提出等^[11], 在具体应用中若能结合具体问题的性质、结构对算法的具体应用方法及结构进行改进则更具实际意义, 将模拟退火法与启发法相结合正是本文针对多产品间歇化工过程最优设计问题的特征, 对算法进行的改进。

(1) 算法的基本思想与构成

随着优化变量的增多, 目标函数的复杂性增大, 优化计算的难度增大, 尤其对于组合优化问题更是如此, 由此, 本文由多产品间歇化工过程最优设计问题本身的结构性(往往间歇设备在生产及优化计算中起着关键的作用)得到启发, 而产生这样一种思想: 在利用模拟退火对目标函数进行优化时仅对有关间歇设备的优化变量进行随机调整, 然后应用启发法确定其他有关半连续设备的优化变量进行局部寻优, 这相当于将优化过程的每一步分成了两个阶段, 先用模拟退火法搜索至某一局部范围, 然后利用启发法进行局部寻优, 显然, 这一思想具有以下优点, 首先, 对于模拟退火来说, 优化变量的减少缩小了其搜索空间、降低了搜索难度、大大加快了搜索速度, 其次, 这一方法既利用了模拟退火的全局收敛性保证了算法的全局收敛性, 又利用启发法加快了局部寻优进程, 同时克服了模拟退火法计算速度慢、启发法不能保证全局最优的缺点。

具体应用方法如下, 以问题所给设备尺寸上界为初值, 首先固定有关半连续设备的各优化变量, 利用模拟退火对间歇设备尺寸、数量及中间罐数量、位置进行调整, 然后在得到的间歇设备数量、尺寸下利用启发法对半连续设备数量、尺寸进行计算, 中间罐的加入及去除借助于一个随机数发生器实现, 对于半连续设备的计算, 本文根据这样一个启发规则^[6]: 在保证生产要求的前提下, 贵重设备的尺寸越小则设备总投资将越小, 首先将各半连续设备数量、尺寸均置为最大, 若仍不能满足要求则说明当前解为不可行解, 若满足要求则逐次按照半连

续设备造价由大到小的顺序来降低各半连续设备的数量及尺寸,直至无法再降低(否则就不能满足生产要求)为止。这样保证了造价最高的半连续设备数量、尺寸在满足生产要求的前提下达到了最小,从而使得设备总投资最小。图 2 为本算法主程序计算框图。

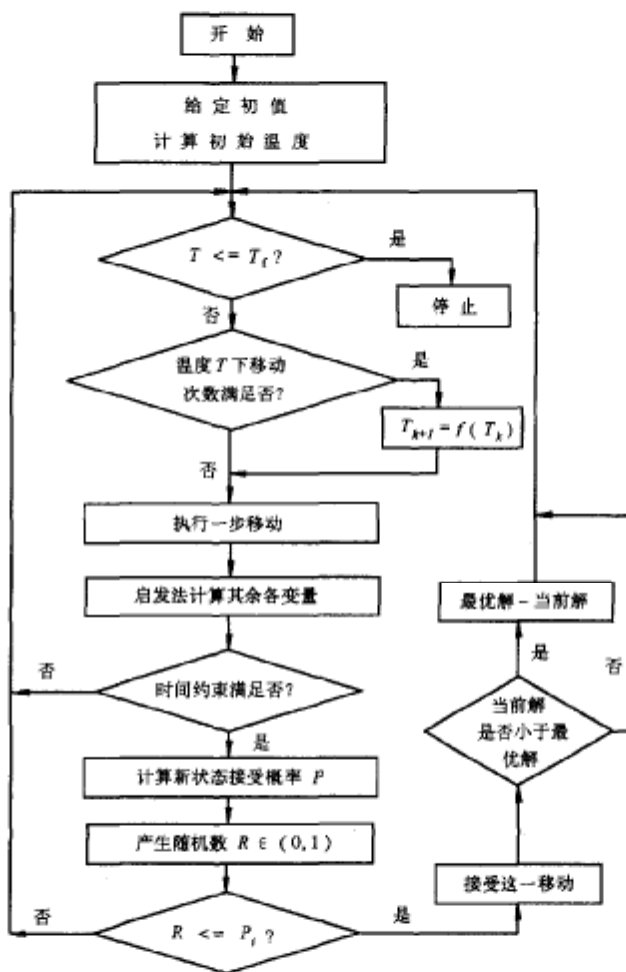


图 2 算法主程序计算框图

Fig. 2 Calculation chart of the main program

(2) 算法性能分析

基于上述算法的基本思想及构成,对该算法性能分析如下。

解的全局最优性分析 由于算法利用模拟退火来控制其搜索的走向,而模拟退火的全局最优性具有严格的数学证明,因而模拟退火法的全局最优性必然保证了本算法的全局最优性,后面的计算实例很好地证明了这一点。

时间有效性分析 模拟退火法计算速度较慢的根本原因在于它所进行的是点到点之间的搜索。在问题规模增大时,可行解集尺寸急剧增大,它必须进行搜索的空间增大,因而计算

时间加长,而本文所设计混合模拟退火法进行的则是从一个区域到另一个区域的搜索,在各个小区域内则根据问题的性质而采用简便、有效的启发法,因而算法的搜索时间必然由于启发法的引入而下降。

初值要求分析 鉴于模拟退火搜索的随机性,在任何情况下均可以设备尺寸上限作为其搜索起点,因而对计算初值无特别要求。

分解合并能力分析 模拟退火法本身的结构使得增减中间罐可以在算法中方便地实现,从而使得算法具有流程分解合并能力。

3 计算实例与分析

给出文献中常见的两个实例及其应用本文算法的计算结果,并将其与数学规划法计算结果进行对比,以说明本文所设计算法的有效性。

例 1^[8]、例 2^[9]、所需数据分别如表 1、表 2 所示,计算结果见表 3。

表 1 例 1 所需数据

Table 1 Data for Example 1

$H=8000h$		a 或 b	α 或 β	S 或 D			p'/h			g		
				$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=1$	$i=2$	$i=3$
$J=3$ $I=3$	SC_1	370	0.22	1.2	1.5	1.1						
$Q=100000$,	B_1	592	0.65	1.2	1.4	1.0	35	40	30	0.0	0.0	0.0
100000,	SC_2	250	0.40	1.2	1.5	1.1						
50000	SC_3	210	0.62	1.2	1.5	1.1						
$800 \leq V_j \leq 2400$	B_2	582	0.39	1.5	1.2	1.0	1	1	2	0.0	0.0	0.0
$300 \leq R_k \leq 1800$	SC_4	250	0.40	1.4	1.5	1.2						
	SC_5	200	0.83	1.4	1.5	1.2						
	B_3	1200	0.52	1.1	1.2	1.0	4	8	4	0.0	0.0	0.0

中间罐: $c=278$, $\gamma=0.49$
相应半连续设备: $b=250$, $\beta=0.40$, $D=[1.2 \ 1.5 \ 1.1]$

表 2 例 2 所需数据

Table 2 Data for Example 2

$H=6000h$		a 或 b	α 或 β	S 或 D			p'/h			g			d		
				$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=1$	$i=2$	$i=3$
$J=4$	SC_1	370	0.22	1.0	1.0	1.0									
$I=3$	B_1	250	0.60	8.28	5.58	2.34	1.15	5.95	3.96	0.20	0.15	0.34	0.40	0.40	0.40
$Q=437000$,	SC_2	370	0.22	1.0	1.0	1.0									
324000,	B_2	250	0.60	9.70	8.09	10.3	9.86	7.01	6.01	0.24	0.35	0.50	0.33	0.33	0.33
258000	SC_3	370	0.22	1.0	1.0	1.0									
$250 \leq V_j \leq 10000$	B_3	250	0.60	2.95	3.27	5.70	5.28	7.00	5.13	0.40	0.70	0.85	0.30	0.30	0.30
	SC_4	370	0.22	1.0	1.0	1.0									
$300 \leq R_k \leq 10000$	B_4	250	0.60	6.57	6.17	5.98	1.20	1.08	0.66	0.50	0.42	0.30	0.20	0.20	0.20
	SC_5	370	0.22	1.0	1.0	1.0									

中间罐: $c=278$, $\gamma=0.49$
相应半连续设备: $b=370$, $\beta=0.22$, $D=[1.0 \ 1.0 \ 1.0]$

从表 3 可以看出, 本文算法得到了与数学规划法极其相近的结果, 相对偏差在 0.5% 以内, 这证实了算法的全局最优性. 实际上, 在例 1 中得到了比数学规划法更好的结果, 这可能出自计算误差, 也可能是因为目标函数非凸, 而数学规划法得到的是局部最优解^[9]. 还可看出, 算法自动确定了中间罐的最优数量及位置, 这也是本文算法优越于其他算法的一个特征. 因为其他算法都必须在人为给定中间罐数量及位置的前提下对各个方案分别进行计算, 然后进行对比才能确定最佳的中间罐数量及位置, 这在间歇设备数量较多时是十分繁琐的.

表 3 例 1 和例 2 的计算结果

Table 3 Calculation results of Examples 1 and 2

	数学规划法 目标函数值	本文算法 目标函数值	相对偏差 /%	V/L				m_o			
				$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$	$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$
例 1	170357.0	170316.3	-0.22	1635.7	800.0	800.0		1	1	1	
例 2	369728.0	370245.0	0.14	4335.7	9950.0	5603.2	7640.6	2	2	2	1

	m_p				$R_k/L \cdot h^{-1}$						n_k					
	$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$	$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5$	$k=6$
例 1	/	/	/		1800.0	356.9	356.9	300.0	300.0	300.0	/	/	/	/	/	/
例 2	/	/	/	/	9000.0	10000	10000	10000	10000	360.0	/	/	/	/	/	/

	V^*		最 佳 生 产 路 线									
例 1	1736.8	SC_1	B_1	SC_2	SC_3	T	SC_4	B_2	SC_5	SC_6	B_3	
例 2	1986.3	SC_1	B_1	SC_2	T	SC_3	B_2	SC_4	B_3	SC_5	B_4	SC_6

作者还将本算法与单纯的模拟退火法进行了对比, 发现在 DOS6.1、IBM PS/Value Point 环境下解决例 1、例 2 规模的设计问题、单纯的模拟退火法计算时间均在 2 min 以上, 而本算法计算时间则在 0.5~1.5 min 之间. 可以看出, 启发法的引入加快了模拟退火法的计算速度, 这在问题规模较大时将更表现出其实际意义.

4 结 论

本文算法具有以下特点:

- (1) 与严格数学规划法相对偏差在 0.5% 以内.
- (2) 以各优化变量上限作为初值即可, 无需另给初值.
- (3) 计算速度快、收敛性好, 具有全局收敛性.
- (4) 算法结构简单, 易于程序实现, 不需进行求导等复杂数学运算.

符 号 说 明

a ——间歇级设备费用项系数	H ——净有效生产总时间, h
B ——间歇设备	I ——产品种类数
b ——半连续级设备费用项系数	J ——间歇级总数
c ——中间罐费用项系数	m_o, m_p ——分别为间歇级异步单元组数及其中同步平行单元数
D ——产品在半连续级上的负荷因子	n ——半连续级中同步平行单元数
d ——产品加工时间计算式中指数	p^o ——产品在间歇级上加工时间计算式中常
g ——产品在间歇级上加工时间计算式中系数	

数, h	V^* ——中间罐尺寸, L
Q ——产品需求量, kg	α ——间歇级设备费用指数
R ——半连续级的操作速率, $L \cdot h^{-1}$	β ——半连续级设备费用指数
S ——产品在间歇级上的尺寸因子	γ ——中间罐费用指数
SC ——半连续设备	下角标
T ——中间罐	i ——产品序号
T_f ——系数退火最终温度, K	j ——间歇级序号
T_0 ——系统退火初始温度, K	k ——半连续级序号
V ——间歇级尺寸, L	s ——中间罐序号

参 考 文 献

- 1 陈伟, 蒋慰孙. 化工自动化及仪表, 1991, 18(6): 23
- 2 Grossmann I E, Sargent R W H. Ind Eng Chem Pro Des Dev, 1979, 18(2): 343
- 3 Knopf F C, Okos M R, Reklaitis G V. Ind Eng Chem Pro Des Dev, 1982, 21(1): 79
- 4 Takamatsu T, Hashimoto I, Hasebe S. Ind Eng Chem Pro Des Dev, 1982, 21(3): 431
- 5 Espuna A, Lazaro M, Martinez J M, et al. Comput Chem Eng, 1989, 13(1-2): 79
- 6 Yeh N C, Reklaitis G V. Comput Chem Eng, 1987, 11(6): 639
- 7 Modi A K, Reklaitis G V. Comput Chem Eng, 1989, 13(1-2): 127
- 8 许锡恩, 郑国文, 成思危. 化工学报, 1993, 44(4): 442
- 9 Patel A N, Mah R S, Karimi I A. Comput Chem Eng, 1991, 15(7): 451
- 10 Kirkpatrick S, Gelatt C D, Vecchi M P. Science, 1983, 220(4598): 671
- 11 Van Laarhoven P J M, Arts E H L. Simulated Annealing: Theory and Application. Netherland: Kluwer Academic Publisher, Dordrecht. 1987
- 12 Connolly D T. European Journal of Operational Research, 1990, 46: 93
- 13 Aarts E H L, Van Laarhoven. Philips J Res, 1985, 40(4): 193
- 14 Vanderbilt D, Luie S G. Journal of Computational Physics, 1984, 56(2): 259

OPTIMAL DESIGN OF MULTIPRODUCT BATCH CHEMICAL PROCESSES —— MIXED SIMULATED ANNEALING

Wang Chunfeng, Quan Hongyin and Xu Xi'en

(Department of Chemical Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072)

Abstract Simulated annealing, combined with heuristics, is applied to the optimized design of multiproduct batch chemical processes. Global optimum is guaranteed by the use of simulated annealing, local search is speeded up by heuristics. The optimal number, size and locations of intermediate storages are determined automatically. The algorithm has the advantages of lower demand for initial values of decision variables; lower storage; less CPU time for computations and relative deviation of less than 0.5% in comparison with the results of mathematical programming.

Keywords batch chemical process, simulated annealing, heuristics