

文章编号: 1002-0411(2000)06-0570-05

混沌优化方法在甲醛生产过程中在线优化的应用

张春慨 邵惠鹤

(上海交通大学自动化系 上海 200030)

摘要: 本文研究了一种新型优化方法: 混沌优化, 提出在局部搜索空间利用线性搜索加快解的收敛速度和精度, 并与精确不可微罚函数结合起来求解非线性约束优化问题的新方法, 且对不能用数学解析式精确表达的优化问题利用软测量技术进行描述, 在此基础上进行混沌搜索寻优. 该方法结构简单, 实现容易, 对优化问题要求低, 通用性强, 可靠性较高, 是解决化工优化问题的有效方法.

关键词: 混沌优化, 软测量, 甲醛生产过程

中图分类号: TP13

文献标识码: B

1 引言

一般地, 化工生产过程的优化问题表现为有约束非线性, 其优化算法的研究具有重要意义. 目前提出了许多算法, 如广义既约梯度法(GRG), 逐次二次规划法(SQP)等来解决这类问题. 其中, SQP 方法在石油化工领域的大规模优化问题求解中获得了广泛的应用^[1].

但是, 上述方法都是基于梯度寻优的思想, 只能得到与初始点有关的局部最优解, 不能保证搜索到全局极小, 并且对目标函数和约束条件有连续、可微的要求, 但在实际生产中构造出来的优化问题模型, 这些条件不一定能得到很好的满足. 而且, 上述方法往往和化工模拟计算相联系, 优化模型和模拟模型分别独立迭代, 再相互联系, 计算方法比较复杂, 计算量大.

混沌优化是近年来提出了一种新型优化方法, 它利用了混沌系统的一些独特动力学性质: 初值敏感性、内在随机性和遍历性^[2], 直接采用混沌变量进行解空间的遍历搜索, 搜索过程按混沌运动自身规律进行, 与一般启发式搜索算法相比, 它不需要启发信息, 例如模拟退火算法(SAs)是按某种概率接受“劣解”来跳出局部最优解, 因此它更易于跳出局部最优解, 适合于全局优化搜索, 并且它不要求优化问题模型具有连续性和可微性. 文献[3]提出采用混沌搜索的优化方法, 它利用分叉理论通过神经网络来进行寻优; 文献[4]用混沌载波搜索的优化方法求解无约束的优化问题.

针对混沌优化的特点和实际化工生产过程中难以用数学表达式来精确描述优化模型问题, 我们提出了软测量模型和混沌优化相结合的方法. 由于软测量模型具有自学习、自组织、自适应能力, 因此系统稳态模型建立容易并具有良好的通用性和灵活性. 所以该方法克服了传统优化方法的缺点, 并具有通用性强, 算法简单, 实现方便的特点. 该方法成功应用于甲醛生产过程的在线优化, 获得了较好的经济效益.

收稿日期: 1999-09-22

基金项目: 国家 973 重点基础研究发展项目“工业控制与优化中高性能计算机算法及其应用理论的研究”

2 算法描述

非线性约束优化问题可以描述为:

$$\min f(x) \quad (1)$$

$$\text{s. t. } C_i(x) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, m_e) \quad (2)$$

$$C_i(x) \geq 0 \quad (i = m_e + 1, \dots, m) \quad (3)$$

$x \in R^n$, 表示优化问题的系统输入 U 和输出 Y , $f(x)$ 是目标函数, 等式约束表示系统的稳态模型, 如物料平衡, 能量平衡等方程, 不等式约束表示系统操作变量的上下界及其他限制条件, m_e 为等式约束个数, m 为全部约束的个数.

混沌优化方法和其他直接搜索方法(如随机搜索方法, 遗传算法等)一样, 用于约束优化问题主要是要处理好不可行解的问题. 罚函数法是解决此类问题的有效方法.

2.1 罚函数法

罚函数法是较早用于处理约束优化问题的方法, 其基本思想是给目标函数增加一个惩罚项构成如(4)式的罚函数, 把原问题转化为以罚函数为目标函数的新的无约束优化问题. 通过对不满足约束条件的解施以惩罚, 达到淘汰不可行解, 得到最优可行解的目的.

$$P(x, \sigma) = f(x) + \sigma \cdot Q(c(x)) \quad (4)$$

式中, $f(x)$ 是原问题目标函数, $\sigma \cdot Q(c(x))$ 是惩罚项, σ 为罚因子, $P(x, \sigma)$ 是罚函数.

罚函数法有外点罚函数法、内点罚函数法、乘子罚函数法和精确罚函数法^[5]. 其中精确罚函数方法避免了计算上的序贯性质, 直接使约束优化的解与罚函数的某个极小点“精确”地一致, 因此用途广泛. 精确罚函数方法可以分为: 可微精确罚函数和不可微精确罚函数法. 可微精确罚函数提供了光滑函数等价地描述约束优化问题, 可以借用各种成熟的无约束优化方法求解, 一直受到重视, 但大多数可微精确罚函数需要用到函数的二阶导数, 有的形式过于复杂, 这大大增加了计算量, 给实际应用带来了不便; 不可微精确罚函数是不可微函数, 不能采用常用的基于梯度计算的方法, 但构造相对比较简单, 对于不需要梯度信息的优化方法具有吸引力.

常用的精确不可微罚函数有:

$$P_{l1}(\sigma, x) = f(x) + \sigma \cdot \left(\sum_{i=1}^{m_e} |c_i(x)| + \sum_{i=m_e+1}^m (-\min(0, c_i(x))) \right) \quad (5)$$

$$P_{l2}(\sigma, x) = f(x) + \sigma \cdot \left(\sum_{i=1}^{m_e} |c_i(x)| + \sum_{i=m_e+1}^m (-\min(0, c_i(x)))^2 \right)^{1/2} \quad (6)$$

$$P_{l\infty}(\sigma, x) = f(x) + \sigma \cdot \max \left\{ \max_{i=1, \dots, m_e} |c_i(x)|, \max_{i=m_e+1, \dots, m} [-\min(0, c_i(x))] \right\} \quad (7)$$

2.2 软测量技术

目前, 软测量技术已应用于化工过程的很多方面^[6], 它的兴起是出于对某些难以测量而又对过程特性比较重要的变量实时测量的需要. 如果从描述系统稳态模型考虑, 软测量技术也可以用于优化问题建模.

在复杂的化工生产过程中, 优化问题的目标函数和不等式约束通常是可以数学解析式表达的, 但对于等式约束, 即系统的稳态模型, 由于工艺和技术的限制, 通过机理分析建模比较困难, 得到的简易模型精度较差, 这样对于基于梯度寻优的传统优化方法, 如逐次二次规划法(SQP)等, 效果不理想, 而且许多过程中重要的过程变量如产品组分等, 难以实时在线检测到, 因此即使得到优化问题的最优解, 检测也不能及时反映优化结果, 为此我们采用软测量技

术解决上述问题. 通过从实际过程收集操作数据和化验分析数据等作为样本离线训练软测量模型(如 RBF 神经网络), 描述系统稳态模型中变量间映射关系, 在此基础上运用混沌优化算法寻优, 由于软测量模型具有自学习、自组织、自适应能力, 因此具有较好的通用性和灵活性. 为了实现在线优化, 我们用离线分析得到的数据对软测量模型进行在线校正, 然后在更新后的优化模型上实施在线混沌优化, 求出系统的最优点.

2.3 混沌优化方法

在混沌优化方法中, 一般采用 Logistic 方程来构造混沌序列, 经过尺度变换和平移, 将其转化成在优化问题解空间中作混沌遍历的变量, 通过混沌搜索寻找问题的最优解. 这里为了加快解的搜索速度和精度, 我们在局部搜索空间利用了线性搜索. 具体算法的实现如下:

(1) 初始化: 由 Logistic 方程(8)生成 n 个 $(0, 1)$ 分布的混沌变量. 对于有约束优化问题, 需要先对变量取值范围有一个合理估计 $[a_j, b_j]$ ($j = 1, 2, \dots, n$), 对于实际问题来说, 通常是可以做到的. 取 N_1 和 N_2 为较大的整数.

$$\lambda_{k+1} = \eta \cdot \lambda_k \cdot (1 - \lambda_k) \quad \lambda_k \in (0, 1) \quad (8)$$

其中, η 取值 4.0, 任意取 $(0, 1)$ 间的初始点, 可以得到 $(0, 1)$ 间遍历的混沌序列.

(2) 用混沌变量进行迭代搜索.

A. 按照式(9)将混沌变量变换到优化问题的允许解空间.

$$x_j^k = a_j + \lambda_j(b_j - a_j) \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (9)$$

B. 如果当前点的函数值小于已有的最优值, 即 $f(X^k) < f^*$, 则保留已有最优点、当前点及其相应的最优函数值, $X_{old}^* = X^*$, $X^* = X^k$, $f^* = f(X^k)$.

C. 如果 f^* 经 N 步搜索后保持不变, 且 $\|X^* - X^*\| > 0$, 则转 3, 否则继续迭代搜索.

(3) 求 $P = X^* - X_{old}^*$, 记解的容许集合为 R , 作线性搜索:

$$f(X') = \min_a \{f(X^* + aP) \mid X^* + aP \in R\}$$

$$X_{old}^* = X', X^* = X', f^* = f(X')$$

(4) $m = m + 1$, 如果 $m > N_2$, 则终止搜索, 此时即 X^* 为全局最优点, f^* 为得到的最优解. 否则转步骤 2.

3 工业过程优化方法应用

针对某厂的甲醛生产过程, 用本文提出的混沌优化方法进行应用研究. 根据实际生产情况, 为了提高装置的经济效益, 其关键是在保证产品质量的前提下, 降低原料单耗, 提高收率, 并延长催化剂的使用寿命. 以原料单耗 S 作为过程稳态优化的目标函数:

$$\min_{E, T} S \quad (10)$$

约束条件包括:

1) 等式约束, 即反应单耗 S 与氧醇分子比 E 和反应温度 T 的函数关系:

$$S = s(E, T) \quad (11)$$

2) 反应温度范围, 由催化剂的适用温度确定, 即:

$$635^\circ\text{C} \leq T \leq 672^\circ\text{C} \quad (12)$$

3) 产品中酸度规定, 可转化为相应的 T 和 E 的约束

$$15473.15 - 45.05908T + 3.36324 \times 10^{-2}T^2 \leq E \times 10^3$$

$$\leq 313.4556 + 0.1671598T \quad (13)$$

4) 根据实际生产经验, 估计氧醇分子比 E 变化范围为

$$0.37 \leq E \leq 0.43$$

针对该反应过程的等式约束(11), 由于在实验方法、实验条件、及催化剂制备方法的不同, 动力学研究所得到的方程也不同. 事实上, 在甲醛氧化、脱氢制甲醛的气固相催化反应过程中, 反应速率不仅与反应动力学有关, 而且还与热质传递过程有关. 对于这样一个复杂过程, 采用根据机理建立数学模型然后进行稳态优化是相当困难的, 而且对于不同的实际生产过程需建立不同的数学模型, 效率较低, 这里通过利用软测量技术可以较好地解决这个问题. 这里我们根据某厂历年来收集的过程操作、化验分析、原料消耗等数据纪录作为学习样本, 离线地训练软测量模型(采用 RBF 神经网络), 得到系统稳态模型中反应单耗 S 与反应温度 T 和氧醇分子比 E 的映射关系, 再经过目标函数运算, 可以获得操作变量与目标函数的关系.

为了处理约束条件, 我们采用(5)式 I_1 精确罚函数方法将上述优化问题转化成无约束问题, 惩罚因子取 $1.0 \cdot 10^4$, 运用前面给出的混沌优化算法对该问题进行搜索寻优. 为验证方法的可靠性, 独立运行 10 次, 表 1 给出求解结果.

表 1 混沌优化结果

运行次数	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
最优反应温度 T	636.14	636.07	636.22	636.63	636.18	636.47	636.04	636.32	636.07	636.27
最优氧醇比 E	0.4194	0.4195	0.4192	0.4183	0.4193	0.4186	0.4196	0.4190	0.4195	0.4196
最小单耗 S	445.55	445.53	445.54	445.54	445.53	445.54	445.54	445.55	445.53	445.55
是否满足约束(16)	是	是	是	是	是	是	是	是	是	是

由给出结果可以看出, 10 次运行结果基本相同, 所得最优操作条件也十分一致, 约束满足效果好, 说明混沌优化方法简单易行, 同时具有较高的可靠性. 而且由于操作变量数较少, 且变化范围不大, 适合于混沌算法的快速寻优. 根据上述分析, 综合 10 次运行结果, 平均得到最优操作点为(0.4192, 636.24), 从而得到最小单耗 $S = 445.54$, 而根据厂方几年的生产记录显示年平均单耗 $S = 461.0$, 说明采用混沌优化算法结合软测量技术得到的最优工艺参数指导生产具有明显的经济效益. 为了实现在线优化, 我们用离线得到的分析数据对软测量模型进行在线校正, 然后在更新后的优化模型上实施在线混沌优化, 求出系统的最优点. 经过一段时间的实施操作, 最后得到的平均单耗为 451, 与过去操作结果比较, 年增经济效益达 42 万元.

4 结论

本文研究了一种新型优化算法: 混沌优化, 提出利用线性搜索加快解的收敛速度和精度, 并结合精确不可微罚函数求解非线性约束优化问题的方法, 对于不能用数学解析表达的优化问题利用软测量技术进行描述, 在此基础上进行混沌搜索寻优. 该方法结构简单, 通用性强, 应用于某厂甲醛生产过程在线优化, 结果表明, 在求解精度、满足约束、可靠性及实现等方面, 此算法均令人满意, 获得了明显的经济效益, 是解决化工优化问题的有效方法, 值得在理论和实践中加以进一步研究和探讨.