

# 单纯形法在准理想级联优化中的应用

谢全新, 牟宏, 吴建军

(核工业理化工程研究院, 天津 300180)

**摘要:** 已知目标组分的精料和贫料丰度, 确定准理想级联的结构, 即确定级联流量分布、级联总级数以及供料级位置, 是约束条件下的多变量优化问题。通过罚函数法把约束条件下的多变量优化问题转化为无约束优化问题, 并用单纯形法对后者进行了求解。利用该优化方法对浓缩回收铀的级联进行了计算。

**关键词:** 准理想级联; 优化; 罚函数; 单纯形法; 回收铀

中图分类号: TL92

文献标志码: A

文章编号: 1000-6931(2012)05-0520-04

## Application of Simplex Method to Optimization of Quasi-ideal Cascade

XIE Quan-xin, MOU Hong, WU Jian-jun

(Institute of Physical and Chemical Engineering of Nuclear Industry, Tianjin 300180, China)

**Abstract:** It is a constraint multi-parameter optimization problem to determine cascade configuration parameters such as the distribution of the stage entering flows, the total number of stages and the position of feed flow on the condition that the concentrations of a target component in the product and waste flows are given. Using penalty function method, the constraint optimization problem was transformed into an unconstraint one, which was solved by the simplex method. The optimization method was applied to calculate the cascade in which the recycled uranium is enriched. The results show that the optimization method is convergent.

**Key words:** quasi-ideal cascade; optimization; penalty function; simplex method; recycled uranium

大分离系数情况下的多组分同位素分离级联的设计和优化可以准理想级联为模型<sup>[1-6]</sup>。一般先通过理论计算设计出符合要求的准理想级联, 然后使实际级联的结构尽可能逼近准理想级联。准理想级联的计算有一典型问题: 已知目标组分(或目标同位素)精料和贫料丰度, 确定级联的结构, 即级联的流量分布、级联总级

数和供料级位置, 使级联最佳。在多组分同位素分离领域, 通常把完成同样分离任务的诸多级联中总流量最小(装机量最小)的级联定为最佳级联。本文将准理想级联的总流量为目标函数, 以决定级联流量分布的参量、级联总级数及供料级位置 3 个参量为优化变量, 利用单纯形法对准理想级联进行优化。

### 1 数学模型及基本概念

本文所研究的准理想级联为图 1 所示的逆流型级联。

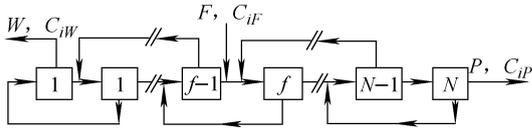


图 1 逆流型准理想级联示意图

Fig.1 Scheme of countercurrent quasi-ideal cascade

级联有供料流  $F$ 、精料流  $P$  和贫料流  $W$ , 相应的组分丰度分别为  $C_{iF}$ 、 $C_{iP}$  和  $C_{iW}$  ( $i=1,2,\dots, m$ ,  $m$  为待分离同位素混合物的组分数), 级联共有  $N$  级, 第  $f$  级为供料级。各级级联参量<sup>[7]</sup>有:

$$\frac{F}{P} = \left( \sum_{i=1}^m C_{iF} \frac{1 - g_i^{-f}}{1 - g_i^{-N-1}} \right)^{-1} \quad (1)$$

$$\frac{F}{W} = \left( \sum_{i=1}^m C_{iF} \frac{1 - g_i^{N+1-f}}{1 - g_i^{N+1}} \right)^{-1} \quad (2)$$

$$C_{iP} = C_{iF} \frac{1 - g_i^{-f}}{1 - g_i^{-N-1}} \cdot \frac{F}{P} \quad (3)$$

$$C_{iW} = C_{iF} \frac{1 - g_i^{N+1-f}}{1 - g_i^{N+1}} \cdot \frac{F}{W} \quad (4)$$

级联中相对总物质流量  $L_R$  (总物质流量  $L_T$  与精料流  $P$  之比) 为:

$$L_R = \frac{L_T}{P} = \sum_{i=1}^m \left\{ \frac{g_i + 1}{g_i - 1} \left[ \frac{W}{P} C_{iW}(-f) + C_{iP}(N+1-f) \right] \right\} \quad (5)$$

式(1)~(5)中的  $g_i$  为第  $i$  组分的精料流  $L'_i$  与贫料流  $L''_i$  之比, 即:

$$g_i = \frac{L'_i}{L''_i} \quad (6)$$

对于准理想级联,  $g_i$  为常量<sup>[4,6-7]</sup>, 有:

$$\begin{cases} g_i = \frac{\alpha_{ik}(\beta_{ik} - 1)}{\alpha_{ik} - 1} & i \neq k \\ g_k = \frac{\beta_{ik} - 1}{\beta_{ik}(\alpha_{ik} - 1)} & i = k \end{cases} \quad (7)$$

式中:  $k$  为关键同位素的组分序数;  $\alpha_{ik}$ 、 $\beta_{ik}$  为第  $i$ 、 $k$  两种组分的精料相对分离系数与贫料相对分离系数, 准理想级联的各级  $\alpha_{ik}$ 、 $\beta_{ik}$  相等。

由式(7)可得到:

$$\frac{g_i}{g_k} = \alpha_{ik}\beta_{ik} = q_{ik} \quad (8)$$

式中,  $q_{ik}$  为第  $i$ 、 $k$  两种组分的相对全分离系数。

对于大多数基于分子动力学的分离方法, 相对全分离系数  $q_{ik}$ <sup>[3-7]</sup> 可表示为:

$$q_{ik} = q_0^{M_k - M_i} \quad (9)$$

式中:  $q_0$  为基本全分离系数;  $M_k$ 、 $M_i$  为第  $k$ 、 $i$  两种组分的相对分子质量。

对于丰度比匹配级联(M级联或 MARC),  $g_i$  可用  $q_0$  及关键组分  $n$ 、 $k$  相对分子质量表达<sup>[2-7]</sup>:

$$g_i = q_0^{(M^* - M_i)} \quad (10)$$

$$M^* = \frac{M_n + M_k}{2} \quad (11)$$

式(11)中的  $M^*$  是一重要参量, 其值的选取决定  $g_i$  的大小, 进而决定级联各级的物质流量分布。由于  $M_n$  和  $M_k$  为整数, 因此, 由式(11)所确定的  $M^*$  不连续, 但可象征性地引入一系列假想组分, 其相对分子质量在  $M_1 \sim M_m$  范围内连续变化, 而其浓度趋于无穷小, 这样就能保证  $M^*$  在  $M_1 \sim M_m$  范围内连续变化, 从而可将它作为一连续变量对级联进行优化<sup>[4]</sup>。

### 2 级联优化问题的数学表述及求解方法

优化的目标函数取级联的相对总物质流量  $L_R$ , 优化变量为  $N$ 、 $f$  和  $M^*$ , 且  $1 \leq f \leq N$ 。在优化过程中假设这 3 个变量为实型变量, 在实际应用中对  $N$ 、 $f$  取整, 同时令向量  $\mathbf{X}$  满足:

$$\mathbf{X} = [x_1, x_2, x_3]^T = [N, f, M^*]^T \quad (12)$$

优化问题可表示为如下形式:

$$\begin{cases} \min L_R(C_{iP}(\mathbf{X}), C_{iW}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) \\ \text{s. t. } h_1(\mathbf{X}) = C_{nP}(\mathbf{X}) - C_{nP}^* = 0 \\ h_2(\mathbf{X}) = C_{nW}(\mathbf{X}) - C_{nW}^* = 0 \\ \lambda_1(\mathbf{X}) = x_2 - x_1 \leq 0 \\ \lambda_2(\mathbf{X}) = 1 - x_2 \leq 0 \\ \mathbf{X} \in \mathbf{R}^3 \end{cases} \quad (13)$$

其中:  $h$ 、 $\lambda$  分别为等式与不等式约束条件;  $C_{nP}^*$ 、 $C_{nW}^*$  分别为所给定的目标组分的精料丰度和贫料丰度;  $\mathbf{R}$  为实数域。式(13)是一约束条件下的多变量优化问题。包括两个等式约束和两个不等式约束条件。求解约束条件下的最优化问题, 有两类方法: 一类是利用约束问题本身的性质直接求解; 另一类是将约束问题转化为一系列无约束最优化问题, 来得到约束问题的最优解, 通常称之为序列无约束优化方法。本文将采用后一种方法来求解。约束最优化问题向无

约束最优化问题的转化可通过罚函数法或乘子法等来实现。在罚函数法中,将约束函数以一定的方式加到目标函数中去形成罚函数,然后再求这个无约束目标函数的极小值。如采用这种方法,约束项在无约束优化问题的求解中,会使那些企图违反约束的迭代点受到很大的惩罚,即给其很大的目标函数值,从而迫使一系列无约束问题的极小点收敛到原有约束优化问题的解。利用罚函数法可将约束优化问题(式(13))转化为无约束优化问题<sup>[8-9]</sup>,有:

$$Q(\mathbf{X}, a_t, b_t) = L_R(\mathbf{X}) + a_t \sum_{j=1}^2 h_j^2(\mathbf{X}) + b_t \sum_{j=1}^2 \{\max[0, \lambda_j(\mathbf{X})]\}^2 \quad (14)$$

其中: $Q(\mathbf{X}, a_t, b_t)$ 为罚函数; $a_t$ 和 $b_t$ 为正实数,称为罚系数,它取序列值。对于等式约束 $h_j(\mathbf{X})$ ,当 $h_j(\mathbf{X})=0$ 时,不受罚;而当 $h_j(\mathbf{X}) \neq 0$ 时,函数受罚于 $a_t h_j^2(\mathbf{X})$ 。对于不等式约束 $\lambda_j(\mathbf{X})$ ,当满足约束条件 $\lambda_j(\mathbf{X}) \leq 0$ 时, $\max[0, \lambda_j(\mathbf{X})]$ 为零;而当违反约束,即 $\lambda_j(\mathbf{X}) > 0$ 时,函数受罚于 $b_t [g_i(\mathbf{X})]^2$ 。

求解罚函数(式(14))的计算步骤<sup>[9]</sup>为:

- 1) 选初始点 $\mathbf{X}_0$ 和适当的 $a_1 > 0, b_1 > 0$ ,给定正小数 $\varepsilon_1$ 与 $\varepsilon_2$ ;
- 2) 对 $t=1, 2, \dots$ ,以 $\mathbf{X}_{t-1}$ 为起点用无约束算法求 $Q(\mathbf{X}, a_t, b_t)$ 的极小值 $\mathbf{X}_t$ ;
- 3) 检查收敛准则 $|\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_{t-1}| \leq \varepsilon_1$ 与 $|\mathbf{QX}_t - \mathbf{QX}_{t-1}| \leq \varepsilon_2$ 是否成立,若成立,则 $\mathbf{X}^* = \mathbf{X}_t$ 为约束问题的最优解,停止迭代,否则转4);
- 4) 计算 $a_{t+1} = c_1 a_t, b_{t+1} = c_2 b_t$ ( $c_1, c_2$ 均为大于1的常数),转2)。

约束优化问题转化为无约束优化问题后,须寻找到合适的优化方法来求解。本文构建的优化问题含3个优化参量,属于多变量优化问题。对于多变量无约束优化问题,常用的工程优化方法有最速下降法、共轭梯度法、牛顿法以及单纯形法。前3种方法须求目标函数的导数,不适用于求解上述优化问题。因该优化问题的目标函数是各优化变量的隐性函数,且非线性程度高,无法求得其导数。而单纯形法对目标函数的可微性不做显性或隐性假设,特别适用于非光滑或不可微目标函数的优化。本文基于单纯形法编写计算程

序,并成功求解上述优化问题。单纯形法的基本思想是:对 $n$ 个变量,在 $n$ 维空间中形成 $n+1$ 个顶点的多面体,然后比较各个顶点的函数值,去掉其中的最坏点代之以新点,形成一新的单纯形,逐步移动至最优点<sup>[9]</sup>。

### 3 优化算法的实例分析

作为应用实例,对浓缩回收铀的级联进行优化计算。回收铀的组分丰度为轻水反应堆VVER-440的堆后料经10 a储存期后的典型丰度<sup>[10-11]</sup>,其值列于表1。

表1 回收铀中各组分的相对分子质量及其丰度  
Table 1 Component relative molecular masses and abundances of recycled uranium

组分	$M_i$	$C_{iF}$
<sup>232</sup> UF <sub>6</sub>	346	$1 \times 10^{-9}$
<sup>234</sup> UF <sub>6</sub>	348	$2 \times 10^{-4}$
<sup>235</sup> UF <sub>6</sub>	349	$8.3 \times 10^{-3}$
<sup>236</sup> UF <sub>6</sub>	350	$4.1 \times 10^{-3}$
<sup>238</sup> UF <sub>6</sub>	352	$987.4 \times 10^{-3}$

计算时 $q_0 = 1.1$ 。目标组分为<sup>235</sup>UF<sub>6</sub>。假设<sup>235</sup>UF<sub>6</sub>的精料丰度 $C_{3P}^* = 3.5\%$ ,贫料丰度 $C_{3W}^* = 0.2\%$ 。由于有3个优化变量,因此初始单纯形为四面体的4个顶点。计算中选取的初始单纯形为(50, 20, 235)、(25, 15, 236)、(18, 9, 236.5)、(30, 18, 236)。优化结果为最佳的级联总级数 $N_{opt}$ 、供料级位置 $f_{opt}$ 以及 $M_{opt}^*$ 分别为19.343、10.152和236.510,此时级联中相对总物质流量的最小值为450.048。

3个优化变量以及目标函数的寻优过程如图2所示,图2a、b、c、d分别为优化变量 $N$ 、 $f$ 、 $M^*$ 以及目标函数 $Q$ 的寻优过程。横坐标的CNT为迭代次数。从图2可看出,在寻优的初始阶段,3个优化变量都有短暂的震荡,当迭代达50次后,开始稳定地逼近最佳值。通过200次左右的迭代,完成整个优化过程。寻优的收敛过程及迭代次数与给定的初始单纯形有关。但计算表明,在不同的初始单纯形下,本优化方法都能稳定收敛,且不影响最终的优化结果。

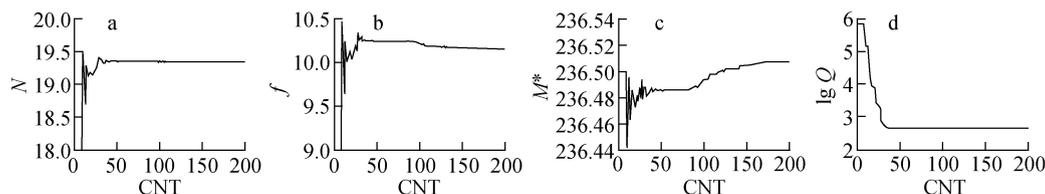


图2 优化参量及目标函数的寻优过程

Fig. 2 Optimization process of optimization parameters and objective function

## 4 结论

本文建立了准理想级联优化计算的数学模型,该模型以级联中相对总物质流量作为优化问题的目标函数,以决定级联流量分布的参量  $M^*$ 、级联总级数及供料级位置 3 个变量为优化参量,并把后两个整型变量延拓到实型,用单纯形法对后者进行了求解。

利用所建立的数学模型,以浓缩回收轴为例,对级联进行优化计算,并分析各优化参量的收敛过程。各参量在寻优的初始阶段有一短暂的震荡过程,然后稳定逼近最佳值。数值计算表明,收敛过程及迭代次数与给定的初始单纯形有关,但无论选择何种初始单纯形,本优化方法都能收敛,且不影响最终优化结果。

## 参考文献:

- [1] BARANOV V Y. Isotopes: Properties, production, application[M]. 1st ed. Moscow: IzDAT, 2000: 72-107.
- [2] XIE Q X, SULABERIDZE G A, BORISEVICH V D. Some properties of quasi-ideal cascades with losses at stages [C]// Proceedings of the XX International Symposium on Physical-Chemical Methods of the Mixtures Separation. Szklarska Poreba, Poland: [s. n.], 2005: 205-207.
- [3] XIE Q X, SULABERIDZE G A, BORISEVICH V D. Optimization of model cascades for multi-component isotope mixtures[C]// Proceedings of XI All-Russia (International) Scientific Conference. [S. l.]: [s. n.], 2006: 15-20.
- [4] 谢全新,李大勇,李文泊,等. 多组分同位素分离级联的优化[J]. 核科学与工程, 2008, 28(1): 86-91.  
XIE Quanzin, LI Dayong, LI Wenbo, et al. Cascade optimization for multicomponent isotope

separation [J]. Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering, 2008, 28(1): 86-91.

- [5] 谢全新, SULABERIDZE G A, 吴建军, 等. 存在损耗的多组分级联的改进模型[J]. 原子能科学技术, 2009, 43(8): 750-755.  
XIE Quanzin, SULABERIDZE G A, WU Jianjun, et al. An improved model of multi-component cascade with losses [J]. At Energy Sci Technol, 2009, 43(8): 750-755(in Chinese).
- [6] SULABERIDZE G A, XIE Q X, BORISEVICH V D. On some properties of quasi-ideal cascades with losses at stages[J]. Ars Separatoria Acta, 2006(4): 67-77.
- [7] SULABERIDZE G A, BORISEVICH V D, XIE Q X. Quasi-ideal cascades with an additional flow for separation of multicomponent isotope mixtures [J]. Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 2006, 40(1): 7-16.
- [8] 薛毅. 最优化原理与方法[M]. 北京: 北京工业大学出版社, 2001.
- [9] 陈卫东, 蔡明林, 于诗源. 工程优化方法[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学出版社, 2006.
- [10] 谢全新, 李大勇, 吴建军. 回收轴分离级联计算[J]. 核技术, 2009, 32(1): 61-65.  
XIE Quanzin, LI Dayong, WU Jianjun. Cascade calculations for separation of recycled uranium [J]. Nucl Tech, 2009, 32(1): 61-65(in Chinese).
- [11] 谢全新, 丛艺坤, 吴建军. 带附加供料的准理想级联模型及其在回收轴浓缩中的应用[J]. 核技术, 2010, 33(9): 709-713.  
XIE Quanzin, CONG Yikun, WU Jianjun. Model of quasi-ideal cascade with an additional feed flow and its applications to the enrichment of recycled uranium [J]. Nucl Tech, 2010, 33(9): 709-713(in Chinese).