



Research  
Smart Process Manufacturing—Article

## 不确定条件下采用精确参数规划的非线性模型过程操作

Vassilis M. Charitopoulos, Lazaros G. Papageorgiou, Vivek Dua\*

Center for Process Systems Engineering, Department of Chemical Engineering, University College London, London WC1E 7JE, UK

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 30 November 2016

Revised 8 February 2017

Accepted 28 February 2017

Available online 24 March 2017

#### 关键词

参数规划

不确定性

过程综合

混合整数非线性规划

符号操作

### 摘要

本文提出了新的两(多)参数规划(mp-P)启发算法以求解混合整数非线性规划(MINLP)问题,并着重说明了算法在过程综合问题中的应用。对于因对数项导致的非线性,开发了针对确定性问题的参数算法(p-MINLP)。关键之处是通过将二进制变量和(或)不确定参数作为符号参数重新生成和求解一阶Karush Kuhn Tucker(KKT)系统的解析表达式。为此,采用了符号处理和求解技术。为了证明所提出的算法的适用性和有效性,对两个过程综合案例研究进行了验证,相应的结果经最新的数值MINLP求解器验证是有效的。对于p-MINLP,给出了不确定参数的显函数表示的最优解。

© 2017 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of the Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

## 1. 引言

流程企业生产过程的设计和操作受不确定参数的影响,如生产产量的波动、不断变化的市场价格和需求等。企业较弱的产品需求、催化剂失活或金融困境是导致过程优化的众多潜在原因中的几个。为了确保设计的是最佳工艺,有必要确认当物理或社会经济发生变化时,所提出的设计是经济的和安全的。过程综合[1]是工厂设计的一个关键方面,对企业财务有重大的影响。这随后激发了该领域的大量的研究工作,出现了大量方法以便能准确地设计不仅是最优路线,同时也是最鲁棒的路线。此外,由于该问题的计算复杂度,形成的算法必须是高效的,以尽量减少计算成本。总的来说,化工厂的流程综合问题可分为以下几个主要组成部分:①换热网

络综合(HEN);②反应器路径综合;③分离系统综合。通过反应器路径综合以确定产品的最佳反应器配置。在这个问题中,从系统的热力学边界到反应路径都必须考虑。反应器网络的优化主要有三种技术:超结构方法、几何方法和组合目标法[2]。超结构方法需要对整个过程进行同步分析,这种方法是行之有效的,因为所有部分均可由整个系统来确定。然而,得到的结果的有效性很大程度上取决于描述超结构的模型的细节。几何方法的提出基于可达区域(AR)的理论,提出该方法是为了考虑有多个相互作用的反应器和外部热交换器的情况[3]。组合目标的方法采用上述两种技术,因为它源于超结构方法和AR理论。因几何方法和组合目标法采用AR理论,因而限制了其效用。这是因为AR理论结合了技术指标,如转化率和选择性,而不是财务指标。因而,从

\* Corresponding author.

E-mail address: [v.dua@ucl.ac.uk](mailto:v.dua@ucl.ac.uk)

经济角度来看其结果可能不是最优解。Bedenik等[2]已经开发出一种解决反应器网络问题的新技术,该技术使用超结构方法,并将其重新模型化为考虑财务指标的模型,考虑了过去一段时间经济不确定性的影响,这也是本文将进一步讨论的一个方面的内容。因此,他们的技术更可能成功地找到最佳的配置,虽然其需要一个十分详细的数学模型。

绝大多数过程系统工程中的问题涉及连续和离散决策变量。通常情况下,离散决策考虑其过程的内在逻辑,如反应途径或计划问题中的扩容,而连续决策则考虑产品的流量、销售额等。为了建立这些决策变量的数学模型,采用了连续以及0-1整数变量,从而将问题变为混合整数规划(MIP)问题。对于一个通过非线性关系表达的问题,则变为混合整数非线性规划(MINLP)问题,其一般形式如下[1]:

$$\begin{aligned} z^* &= \min_{x,y} f(x,y) \\ \text{s.t. } & g(x,y) \leq 0 \\ & x \in X \subseteq \mathbb{R}^{n_x}, y \in Y = \{0, 1\}^{n_y} \end{aligned} \quad (1)$$

其中,  $f$  为一个标量函数;  $x$  为  $n_x$  维的连续变量, 其属于集合  $X$ ;  $y$  为  $n_y$  维二进制离散变量, 属于离散集合  $Y$ ;  $g$  为约束向量, 表示质量约束、需求约束等;  $z^*$  为优化问题的最优解。

由于其通用的数学性质, MINLP问题可应用于很多问题, 如反应器网络综合[4]、换热网络[5]、企业计划优化[6]等。过程综合是工程领域混合整数非线性规划问题的一类基本问题, 同时需要优化加工单元、互连和设计/操作变量[7]。尽管MINLPs对问题的描述比混合整数线性规划问题(MILP)更准确, 但由于可能出现的非凸性[8]使得问题难以求解。在公开文献中已经提出了解决某些类别MINLPs的数值方法, 如广义的Benders分解(GDB)[9]、外逼近法(OA)算法[10]、并割平面(ECP)方法[11]。上述算法可以使用在严格假设凸性的目标函数和相关非线性的形式, 而迭代过程通常会收敛到(局部)最优解。另一类问题的求解算法是采用全局优化[12,13]算法, 用数值技术和凸近似解决了在最优性条件下的相应问题。

通常, 即使是不考虑问题的不确定性, 对MINLPs问题也有可计算的要求。然而, 数学模型容易受到一些不确定性影响, 大致可分为内源和外源[14]不确定性。内源不确定性主要出现在约束的左侧, 如反应产率和化学计量系数, 而外源不确定性通常是位于右侧(RHS)的

约束和目标函数的系数( $C$ )。为了应对不确定性下的优化问题, 现有文献已提出了多种技术, 主要技术有随机规划、鲁棒优化和(多)参数规划(mp-P)[15]。第一、第二种技术需要某种形式的数据, 用来描述不确定性, 如概率分布或不确定性的集合类型, 而mp-P是以优化为基础的方法, 其数学模型可直接使用, 旨在明确表征不确定性对最优解的影响。通过对mp-P问题的求解, 可以得到以不确定性参数的显函数表示的优化变量, 以及相应的区域, 也就是说关键区域(CRs)的含参数的函数保持最优。图1提供了该问题的概念图。

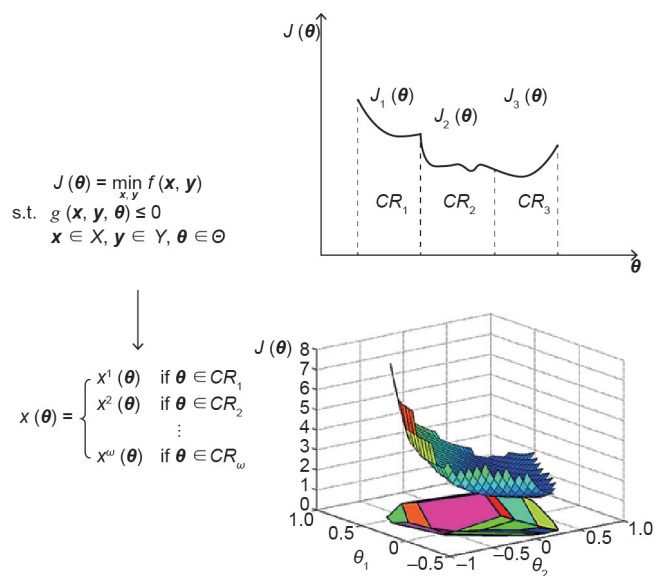


图1. mp-P的概念图。

经过30多年的研究[15,16], mp-P方法具有了坚实的理论基础, 对每一类优化问题有相应的算法。然而, 尽管mp-P领域不断发展, (多)参数(mp)-MINLPs仍然是研究最少的, 甚至对一个案例, 只有右边的不确定性。这种缺乏研究的原因是参数优化问题的解是非凸的。早期论文侧重于单参数MINLPs近似解(p-MINLPs)[17-21], 而Dua和Pistikopoulos[22]研究了mp-MINLP实例凸目标函数, 提出了一种分解方法, 原始问题和主问题之间的逐次迭代产生有效的上、下限。在他们的方法中, 原始的问题是一个通过修复相关的整数变量的mp-非线性规划(mp-NLP)问题, 而主子问题(master sub-problems)的目的是提供改进的整数解等。Dua[23]研究了mp-MINLPs的全局优化。文献[24]给出了利用代数几何方法的多项式参数优化技术, 在模型预测控制系统(MPC)采用柱形代数分解和基于Gröner的理论求解多项式方程的方案。近年来, Charitopoulos和Dua[25]提出了一

种新的算法精确求解(多)参数混合整数多项式优化(mp-MIPOPT)问题, 重点在得到混合多项式系统的显式控制表达式。

在目前的工作中, 我们提出了对数非线性情况下的MINLPs的两种解析解算法。关键是利用Gröbner基理论和符号的操作原则求解了一阶Karush Kuhn Tucker(KKT)条件下的二次系统方程。第一种算法是用来解决确定性MINLPs, 第二种是根据所提出的算法, 对问题RHS约束单参数扰动下的延伸。

本文的其余部分组织如下: 在第2节中, 本文建立了相关理论框架, 并对一个特定的类的确定性和参数提出了MINLPs解法。第3节给出了算法, 测试两个案例研究的过程综合问题。在引入概率问题及采用最新求解器求解其数值最优解的情况下, 4.1节验证了确定性情况下所提出的算法的性能, 并与第3节的结果进行了比较; 在4.2节中, 给出了主要的计算步骤以及算法在不确定性情况下应用的结果。最后, 第5节进行了总结。

## 2. 理论与算法

最近, Dua[26]提出了一种mp启发算法用于解决MIPOPT问题。该算法基于MIPOPT问题推导出一阶KKT条件的方程组的解析解。一般来说, 一个MIPOPT问题可以描述为公式(2)~(6)。

$$\min_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (2)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \quad (3)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0 \quad (4)$$

$$\mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^{n_x} \quad (5)$$

$$\mathbf{y} \in Y = \{0, 1\}^{n_y} \quad (6)$$

其中,  $\mathbf{x}$ 为连续变量, 属于有限集 $X$ 的向量;  $\mathbf{y}$ 表示整数变量, 为 $n_y$ 维向量;  $\mathbf{h}$ 为等式约束的向量, 为 $n_y$ 维向量;  $\mathbf{g}$ 为不等式约束的向量, 为 $n_g$ 维向量;  $f$ 为一个标量函数。MIPOPT问题的整数变量被松弛为连续变量, 将这些整数变量作为参数限制在各自的范围内。因此, 将原问题变成一个(多)参数多项式问题(mp-PP), 见公式(7)~(11)。

mp-PP:

$$\min_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (7)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \quad (8)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0 \quad (9)$$

$$\mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^{n_x} \quad (10)$$

$$\mathbf{y} \in Y = [0, 1]^{n_y} \quad (11)$$

如上所述, 通过松弛整数变量 $\mathbf{y}$ , mp-PP实现了参数化。公式(12)~(14)给出相应的一阶KKT条件。

KKT系统:

$$\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = 0 \quad (12)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \quad (13)$$

$$\lambda_j g_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0, j = 1, \dots, n_g \quad (14)$$

其中,  $L(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 为mp-PP的拉格朗日函数,  $n_g$ 表示mp-PP问题中不等式约束的数量。应该注意的是, 公式(12)~(14)形成一个多项式方程的二次系统, 可得到拉格朗日乘子和优化变量的解析解。Dua[26]提出, KKT系统可以用符号运算软件得到解析解, 进而计算所有可能满足公式(12)~(14)的以 $\mathbf{y}$ 为参数的显式解。显式解通过原始和对偶可行性条件及约束条件评估验证所有可能的 $\mathbf{y}$ 向量的组合。

原则上, 所提出的方法可扩展到更多的MINLP问题的同类问题, 无论是对于确定性的还是参数化的问题。这种可能性在下文进行检验。

### 2.1. 基于参数规划的MINLPs算法

如上一节所述, Dua[26]研究了MIPOPT问题的案例。然而, 由于上述算法的关键部分是通过Gröbner基理论使用二次系统方程的解析解, 因此该算法可以扩展到一类包含对数函数的混合整数非线性规划问题。通过密切关注Dua[26]所描述的情况, 对于对数非线性情况, 我们设计了算法1。

需要注意的是, 在目前的工作中, 步骤3~5在Mathematica 10[27]中执行。然后在获得最优解后, 对线性独立约束条件(LICQ)进行评估, 以确认其最优性。

### 2.2. 利用参数规划求解不确定性MINLPs

算法1可以解决确定性混合整数非线性规划。然而, 在必须考虑不确定性的情况下, 该算法可以被修改, 以处理约束的RHS参数变化。这个想法是增加不确定参数的参数向量, 即除了整数变量( $\mathbf{y}$ ), 加入一个新的扰动向量( $\boldsymbol{\theta}$ )。由此产生的p-MINLP如公式(15)~(20)所示:



p-MINLP:

$$\min_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (15)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \theta) = 0 \quad (16)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \theta) \leq 0 \quad (17)$$

$$\mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^{n_x} \quad (18)$$

$$\mathbf{y} \in Y = [0, 1]^{n_y} \quad (19)$$

$$\theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R} \quad (20)$$

注意,  $\theta$  为一个有界的标量参数, 允许出现在等式/不等式约束的右侧。对相应的一阶KKT条件的公式化后的结果如公式(21)~(23)所示, 其中包含 $\mathbf{y}$ 和 $\theta$ 两个参数。

p-KKT系统:

$$\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \theta, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = 0 \quad (21)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \theta) = 0 \quad (22)$$

$$\lambda_j g_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \theta) = 0, j = 1, \dots, n_g \quad (23)$$

由于参数摄动( $\theta$ )和整数变量( $\mathbf{y}$ )为符号表达式, 参数化的KKT(p-KKT)系统仍然是一个非线性方程组。该p-KKT系统解决方案返回的候选解, 即优化变量的参数的显式表达式 $[\mathbf{x}(\mathbf{y}, \theta)]$ 和拉格朗日乘子 $[\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y}, \theta), \boldsymbol{\mu}(\mathbf{y}, \theta)]$ 。需要注意的是, 即使候选解满足二次方程组, 它们也可能违反原始/对偶可行性条件。

得到候选解后, 二进制变量被固定到可能的值。现在优化变量的表达式和拉格朗日乘子系数只有显式的 $\theta$ 表示, 即 $\mathbf{x}(\theta)$ ,  $\boldsymbol{\lambda}(\theta)$ 和 $\boldsymbol{\mu}(\theta)$ 。值得注意的是, 在这一步中, 优化变量的显式表达式代入原约束, 即公式(16)、(17),

以评估候选解的原始可行性。考虑到对偶可行性, 我们接下来评估拉格朗日乘子和不等式约束的非负性条件。

满足原始/对偶可行性条件的候选解被称为可行的。每一个可行的解决方案在一个变化的参数范围内, 仍然是可行的, 即CR。p-MINLPs的主要计算步骤见算法2。

步骤1~3在Mathematica 10中实施; Vyas和Dua[28]提出, 步骤4~5在Excel中实现。利用Mathematica 10中得到的输出, 根据二进制变量和不确定性参数创建目标函数。然后, 通过清楚地显示这些变化的参数将影响目标函数, 可以用来帮助确定系统的最优值。

### 3. 案例研究

本节给出了两个与过程综合相关的案例来说明所提出的方法。首先, 给出了案例的简短说明以及相关的数学模型, 将其作为一个对数非线性的MINLP问题。接着, 给出了每个问题的数值解, 在求解中使用当前最先进的数值优化求解器。对于相应的MINLPs问题的求解, 采用SBB的求解器, 对于NLP子求解器采用CONOPT3。问题的求解采用了GAMS 24.4.1, 计算机配置为3.7 GHz处理器、16 GB RAM和Windows 7的64位操作系统。

#### 3.1. 案例 1

案例1来自Floudas[1], 此过程综合问题涉及从原料A和B通过工艺1、2和3生产C组分。产品C只能通过三条路线之一生产: 只通过工艺1, 或通过工艺1和2, 或通过工艺1和3, 工艺2和3不能同时发生。图2给出了相关的工艺流程图。

问题目标是成本减去收入的最小值, 相应的优化问题转化为一个混合整数非线性规划, 见公式(24)~(38)。

#### 算法1 求解MINLPs问题的算法

- 
- 第1步 松弛二进制变量, 如 $\mathbf{y} \in \{0, 1\}^n \rightarrow [0, 1]^n$ , 连续性参数限定范围。
  - 第2步 得到一阶KKT方程, 如公式(12)~(14)。
  - 第3步 求解二次KKT系统, 得到用参数化显式表示的优化变量和拉格朗日算子, 如 $\mathbf{x}(\mathbf{y})$ ,  $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y})$ 和 $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{y})$ 。
  - 第4步 固定二进制变量的所有可能的组合, 确认主要和对偶可行性情况。
  - 第5步 映射计算的参考解来确定最优解, 包括确认主要和对偶可行性, 以及约束的确认。
- 

#### 算法2 求解p-MINLPs问题的算法

- 
- 第1步 在增加的参数集中选择需要考虑的不确定参数。松弛二进制变量, 如 $\mathbf{y} \in \{0, 1\}^n \rightarrow [0, 1]^n$ , 连续性参数限定范围。
  - 第2步 得到一阶p-KKT方程, 如公式(21)~(23)。
  - 第3步 求解得到的p-KKT系统, 得到用参数化显式表示的优化变量和拉格朗日算子, 如 $\mathbf{x}(\mathbf{y}, \theta)$ ,  $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y}, \theta)$ 和 $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{y}, \theta)$ 。
  - 第4步 固定二进制变量的所有可能的组合, 确认主要和对偶可行性情况。
  - 第5步 映射计算的参考解来确定二进制变量, 包括确认一阶KKT条件, 使得目标变量最大化或最小化。
  - 第6步 选择整数解, 考虑不确定参数对目标函数的影响。
-

$$\min f = -11C + 7B_1 + B_2 + 1.2B_3 + 1.8A_2 + 1.8A_3 + 3.5y_1 + y_2 + 1.5y_3 \quad (24)$$

$$\text{s.t. } B_2 - \ln(1 + A_2) = 0 \quad (25)$$

$$B_3 - 1.2\ln(1 + A_3) = 0 \quad (26)$$

$$C - 0.9(B_1 + B_2 + B_3) = 0 \quad (27)$$

$$C - y_1 \leq 0 \quad (28)$$

$$B_2 - \frac{1}{0.9}y_2 \leq 0 \quad (29)$$

$$B_3 - \frac{1}{0.9}y_3 \leq 0 \quad (30)$$

$$C, B_1, B_2, B_3, A_2, A_3 \geq 0 \quad (31-36)$$

$$y_2 + y_3 \leq 1 \quad (37)$$

$$y_1, y_2, y_3 = \{0, 1\}^3 \quad (38)$$

表1给出了最优解, 见文献[1]。

### 3.2. 案例 2

第二个案例来自参考文献[29], 是案例1的一个修改版本。问题的表述如下:

$$\min f = 5y_1 + 6y_2 + 8y_3 + 10x_1 - 7x_6 - 18\ln(x_2 + 1) - 19.2\ln(x_1 - x_2 + 1) + 10 \quad (39)$$

$$\text{s.t. } 0.8\ln(x_2 + 1) + 0.96\ln(x_1 - x_2 + 1) - 0.8 \geq 0.8x_6 \quad (40)$$

$$x_2 - x_1 \leq 0 \quad (41)$$

$$x_2 - Uy_1 \leq 0 \quad (42)$$

$$x_1 - x_2 - Uy_2 \leq 0 \quad (43)$$

$$\ln(x_2 + 1) + 1.2\ln(x_1 - x_2 + 1) - x_6 - Uy_3 \geq -2 \quad (44)$$

$$x_1, x_2, x_6 \geq 0 \quad (45-47)$$

$$x_1 \leq 2, x_2 \leq 2, x_6 \leq 1 \quad (48-50)$$

$$y_1 + y_2 \leq 1 \quad (51)$$

其中,  $U = 2$  是一个“大M”型参数。表2给出了最佳的解决方案, 见文献[29]。

通过松弛变量上限, 忽略了公式(48)~(50); 采用GAMS 24.4.1求解最优解。本案例的最优解使用SBB求解器获得, 结果如表3所示。

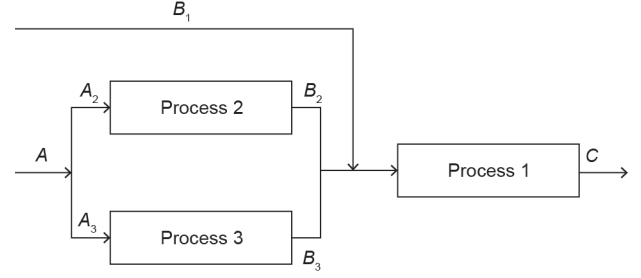


图2. 待优化的过程流程图。

表1 文献[1]中例子的优化结果

$y_1$	$y_2$	$y_3$	$C$	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$A_2$	$A_3$	$f$
1	0	1	1	0	0	1.1111	0	1.5242	-1.92

表2 案例2的优化结果

$y_1$	$y_2$	$y_3$	$x_1$	$x_2$	$x_6$	$f$
0	1	0	1.30097	0	1	6

表3 改进后的案例2的优化结果

$y_1$	$y_2$	$y_3$	$x_1$	$x_2$	$x_6$	$f$
0	1	0	1.76	0	1.218	5.58

## 4. 结果

前一节描述了过程综合问题, 给出了问题的最优数值解。本节说明了所提出算法的主要计算步骤。首先, 在第4.1节中, 给出了每个问题的确定最优解, 并进行了验证, 如前一节计算结果所示。接下来, 在第4.2节, 采用文中提出的p-MINLPs算法解决了参数优化问题。

### 4.1. 基于参数规划的 MINLPs 算法

#### 4.1.1. 案例 1

将模型中的二进制变量作为符号参数, 该算法的第一步是得到拉格朗日函数和一阶KKT方程。拉格朗日函数见公式(52), 相应的一阶KKT条件见公式(53)~(70)。

$$\begin{aligned} L = & -11C + 7B_1 + B_2 + 1.2B_3 + 1.8A_2 + 1.8A_3 + 3.5y_1 + y_2 + 1.5y_3 \\ & + \mu_1(B_2 - \ln(1 + A_2)) + \mu_2(B_3 - 1.2\ln(1 + A_3)) \\ & + \mu_3(C - 0.9(B_1 + B_2 + B_3)) + \lambda_1(C - y_1) + \lambda_2\left(B_2 - \frac{1}{0.9}y_2\right) \\ & + \lambda_3\left(B_3 - \frac{1}{0.9}y_3\right) - \lambda_4C - \lambda_5B_1 - \lambda_6B_2 - \lambda_7B_3 - \lambda_8A_2 - \lambda_9A_3 \end{aligned} \quad (52)$$

$$\frac{dL}{dA_2} = 1.8 - \frac{\mu_1}{1 + A_2} - \lambda_8 = 0 \quad (53)$$

$$\frac{dL}{dA_3} = 1.8 - \frac{1.2\mu_2}{1+A_3} - \lambda_9 = 0 \tag{54}$$

$$\frac{dL}{dB_1} = 7 - 0.9\mu_3 - \lambda_5 = 0 \tag{55}$$

$$\frac{dL}{dB_2} = 1 + \mu_1 - 0.9\mu_3 + \lambda_2 - \lambda_6 = 0 \tag{56}$$

$$\frac{dL}{dB_3} = 1.2 + \mu_2 - 0.9\mu_3 + \lambda_3 - \lambda_7 = 0 \tag{57}$$

$$\frac{dL}{dC} = -11 + \mu_3 + \lambda_1 - \lambda_4 = 0 \tag{58}$$

$$\lambda_1(C - y_1) = 0 \tag{59}$$

$$\lambda_2\left(B_2 - \frac{1}{0.9}y_2\right) = 0 \tag{60}$$

$$\lambda_3\left(B_3 - \frac{1}{0.9}y_3\right) = 0 \tag{61}$$

$$\lambda_4 C = 0, \lambda_5 B_1 = 0, \lambda_6 B_2 = 0, \lambda_7 B_3 = 0, \lambda_8 A_2 = 0, \lambda_9 A_3 = 0 \tag{62-67}$$

$$B_2 - \ln(1 + A_2) = 0 \tag{68}$$

$$B_3 - 1.2\ln(1 + A_3) = 0 \tag{69}$$

$$C - 0.9(B_1 + B_2 + B_3) = 0 \tag{70}$$

方程(53)~(70)使用Mathematica 10求解，二进制变量被处理为参数。此步骤的输出是一个候选的解决方案，其中的优化变量和相应的拉格朗日乘子作为二进制变量的显式函数给出，总共得到98个候选解。然而，40个解被忽略，因为它们涉及矛盾的原始/对偶可行性的要求，另外58个解被进一步调查。表4给出了Mathematica10得到的输出的例子。

如表4所示，优化变量和拉格朗日乘子一般是二进制变量的显式表达式。还要注意的，通过初步筛选测试的候选解的双重可行性，Solution 1、3和4可以进一步考虑删除，因为它们违反了非负拉格朗日乘子的要求。接下来，按照算法1，所有的二进制变量根据可能的组合固定。有3个二进制变量，在过程中产生了7种可能的组合，如表5所示。

表4 案例1基于算法1的第3步得到备选解的例子

Solution	$A_2$	$A_3$	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$C$	$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\lambda_4$	$\lambda_5$	$\lambda_7$	$\lambda_8$	$\lambda_9$
1	0	0	$1.11y_1$	0	0	$y_1$	6	5.8	7.77	3.22	0	0	0	0	0	-4.2	-5.16
2	2.33	2.86	$-2.82 + 1.11y_1$	1.20	1.62	$y_1$	6	5.8	7.77	3.22	0	0	0	0	0	0	0
3	0	2.86	$-1.62 + 1.11y_1$	0	1.62	$y_1$	6	5.8	7.77	3.22	0	0	0	0	0	-4.2	0
4	2.33	0	$-1.20 + 1.11y_1$	1.20	0	$y_1$	6	5.8	7.77	3.22	0	0	0	0	0	0	-5.16

每个解是通过将二进制变量固定到表5中所示的组合来计算的。这一步可以编码并在Mathematica 10中通过使用内置命令“Reduce”实现。

通过对表6的检查，利用Mathematica 10计算得到的候选解绝大多数是不可行的，只有整数组合的4个候选解是可行的，其目标函数值在范围内。重要的是，即使一个解是可行的，它可能也不是一个可行的配置。这是由于为了使过程是有效的，它必须能够产生所需的产品。通过解12可以看出，整数解 $y_1 = 0$ 、 $y_2 = 1$ 和 $y_3 = 1$ ，过程没有流量，虽然 $y_1$ 是用来生成最终产品的装置，但它没有在这个例子中操作。

表6显示，全局最优为-1.92，此值时发生在 $[y_1, y_2, y_3] = [1, 0, 1]$ ，结果来自两个不同的对称解。正如预期的那样，根据所提出的算法计算的解与Floudas[1]的报道一致，从而验证了解决方案。最后，为了用规范LICQ评价，确认来自原始模型的约束在最优点可行是十分重要的。在最优点， $B_2$ 和 $A_2$ 的流量为零，即不考虑公式(25)、(29)。因此，LICQ考虑的约束条件是方程(26)~(28)、(30)。非线性公式(26)必须在最优点线性化。在最优点使用泰勒逼近可得

$$B_3 - \frac{1.2A_3}{A_3^* + 1} + \frac{1.2A_3^*}{A_3^* + 1} - 1.2\ln(1 + A_3^*) = 0 \tag{71}$$

其中，\*指变量在线性化点处的值。然后，得到系统的矩阵方程组：

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & -0.476 \\ 1 & 0.9 & -0.9 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ B_1 \\ B_3 \\ A_3 \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} 1.833 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{72}$$

系统是否坚持规范LICQ现在可以通过计算矩阵的特征值确定。当矩阵的特征值为零时，系统中的方程相互依赖，表明可能存在多个解。但是，如果特征值非零，则这些行是独立的，只在一个解上相交一次。在这个例子中，特征值是0.429。这意味着该系统是线性无关的，并且最优解已被确定。

表5 案例1二进制变量的可能组合

Combination	$y_1$	$y_2$	$y_3$
1	1	0	0
2	1	1	0
3	1	1	1
4	0	1	1
5	0	0	1
6	0	1	0
7	1	0	1

表6 案例1最终的整数可行解

Solution	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$C$	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$A_2$	$A_3$	$f$
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	0	0	1	1.11	0	0	0	0	0.28
3	1	0	1	1	0	0	1.11	0	1.52	-1.92
4	1	1	0	1	0	1.11	0	2.04	0	-1.72
5	1	0	1	1	0	0	1.11	0	1.52	-1.92
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1
8	1	1	0	1	0	1.11	0	2.04	0	-1.72
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1.5
11	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1
12	0	1	1	0	0	0	0	0	0	2.5

## 4.1.2. 案例2

案例2的拉格朗日函数和一阶KKT条件由以下公式给出:

$$\begin{aligned}
 L = & 5y_1 + 6y_2 + 8y_3 + 10x_1 - 7x_6 - 18\ln(x_2 + 1) \\
 & - 19.2\ln(x_1 - x_2 + 1) + 10 - \lambda_1(0.8\ln(x_2 + 1) \\
 & + 0.96\ln(x_1 - x_2 + 1) - 0.8x_6) + \lambda_2(x_2 - x_1) \\
 & + \lambda_3(x_2 - Uy_1) - \lambda_4(x_1 - x_2 - Uy_2) - \lambda_5(\ln(x_2 + 1) \\
 & + 1.2\ln(x_1 - x_2 + 1) - x_6 - Uy_3 + 2) \\
 & - \lambda_6x_1 - \lambda_7x_2 - \lambda_8x_6
 \end{aligned} \quad (73)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{dL}{dx_1} = & 10 - \lambda_2 + \lambda_4 - \lambda_6 - \frac{19.2}{1+x_1-x_2} - \frac{0.96\lambda_1}{1+x_1-x_2} \\
 & - \frac{1.2\lambda_5}{1+x_1-x_2} = 0
 \end{aligned} \quad (74)$$

表7 案例2基于算法1的第3步得到备选解的例子

Solution	$x_1$	$x_2$	$x_6$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\lambda_4$	$\lambda_5$	$\lambda_6$	$\lambda_7$	$\lambda_8$
1	0	0	0	0	0	0	0	0	-9.2	1.2	-7
2	0	-0.0326	0	0	0	0	0	0	-8.6	0	-7
3	0	0	0	0	-1.2	0	0	0	-8	0	-7
4	$2y_1$	$2y_1$	0	0	-9.2	$(4-10y_1)/(0.5+y_1)$	0	0	0	0	-7
5	$0.92+2y_1$	$2y_1$	0	0	0	$(4-10y_1)/(0.5+y_1)$	0	0	0	0	-7

$$\frac{dL}{dx_2} = \lambda_2 + \lambda_3 - \lambda_4 - \lambda_7 + \frac{19.2}{1+x_1-x_2} - \frac{18}{1+x_2} \quad (75)$$

$$+ \lambda_1 \left( \frac{0.96}{1+x_1-x_2} - \frac{18}{1+x_2} \right) + \lambda_5 \left( \frac{1.2}{1+x_1-x_2} - \frac{1}{1+x_2} \right) = 0$$

$$\frac{dL}{dx_6} = 7 + 0.8\lambda_1 + \lambda_5 - \lambda_8 = 0 \quad (76)$$

$$\lambda_1(0.8\ln(x_2+1) + 0.96\ln(x_1-x_2+1) - 0.8x_6) = 0 \quad (77)$$

$$\lambda_2(x_2 - x_1) = 0 \quad (78)$$

$$\lambda_3(x_2 - Uy_1) = 0 \quad (79)$$

$$\lambda_4(x_1 - x_2 - Uy_2) = 0 \quad (80)$$

$$\lambda_5(\ln(x_2+1) + 1.2\ln(x_1-x_2+1) - x_6 - Uy_3 + 2) = 0 \quad (81)$$

$$\lambda_6x_1 = 0, \lambda_7x_2 = 0, \lambda_8x_6 = 0 \quad (82-84)$$

采用Mathematica 10求解公式(74)~(84), 其中, 二进制变量被作为参数处理。输出总共产生59个候选解, 但是, 与案例1类似, 经进一步考虑后, 其中的17个解因为违反双重可行性条件被删除, 从而剩下42个可能解。表7给出了Mathematica 10生成的解的例子。

与案例1相同, 在这种情况下, 本案例研究有3个二进制变量, Mathematica 10给出了相同的二进制变量的组合, 如表5所示。表8给出了最终的整数可行解。

通过对表8的检查, 全局最小值是5.58, 整数变量为 $[y_1, y_2, y_3] = [0, 1, 0]$ 。采用SBB/CONOPT3求解器计算的结果与表3相同。这一结果进一步证实了算法对MINLP问题的适用性。最后, 表9给出了所提出的算法与商业求解器DICOPT、SBB、BARON 16.3和ANTIGONE 1.1计算结果的比较。从表9可以看出, 本文提出的算法是对确定性实例的求解性能优于其他求解器, 其中, DICOPT的求解收敛速度最快。下面求解不确定情况下的MINLP问题, 以获得相应的p-MINLP解。相比而言, 本文所提出的方法求解不确定性问题的计算时间与求解确定性问题的计算时间相同。

表8 案例2最终的整数可行解

Solution	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$x_1$	$x_2$	$x_6$	$f$
1	0	1	0	1.76	0	1.22	5.58
2	0	1	1	1.76	0	1.22	13.58
3	1	0	1	1.5	1.5	0.92	15.09
4	0	0	0	0	0	0	10
5	0	0	1	0	0	0	18
6	0	0	1	0	0	0	18

表9 所提出算法对案例2的确定性实例的求解计算性能比较

	Proposed algorithm	DICOPT	SBB	BARON 16.3	ANTIGONE 1.1
CPU (s)	6	0.172	0.234	1.21	2
Number of iterations	0	33	47	5	7

## 4.2. 利用参数规划求解不确定性 MINLPs

### 4.2.1. 案例 1

在案例1中, 将 $B_1$ 和 $C$ 作为不确定变量, 这是因为 $B_1$ 是进入系统的新鲜原料的流量, 随后将被转换成所需的产品,  $C$ 是系统的产品, 具有不确定性的原因是因为消费者需求的不确定。

(1)  $B_1$ 作为不确定变量

探讨 $B_1$ 对工艺的影响, 通过Mathematica 10解决如下—阶KKT条件, 其中二进制变量和 $B_1$ 作为参数。

$$\begin{aligned}
 L = & -11C + 7B_1 + B_2 + 1.2B_3 + 1.8A_2 + 1.8A_3 + 3.5y_1 \\
 & + y_2 + 1.5y_3 + \mu_1(B_2 - \ln(1 + A_2)) \\
 & + \mu_2(B_3 - 1.2\ln(1 + A_3)) \\
 & + \mu_3(C - 0.9(B_1 + B_2 + B_3)) + \lambda_1(C - y_1) \\
 & + \lambda_2\left(B_2 - \frac{1}{0.9}y_2\right) + \lambda_3\left(B_3 - \frac{1}{0.9}y_3\right) - \lambda_4C \\
 & - \lambda_6B_2 - \lambda_7B_3 - \lambda_8A_2 - \lambda_9A_3
 \end{aligned} \quad (85)$$

$$\frac{dL}{dA_2} = 1.8 - \frac{\mu_1}{1 + A_2} - \lambda_8 = 0 \quad (86)$$

$$\frac{dL}{dA_3} = 1.8 - \frac{1.2\mu_2}{1 + A_3} - \lambda_9 = 0 \quad (87)$$

$$\frac{dL}{dB_2} = 1 + \mu_1 - 0.9\mu_3 + \lambda_2 - \lambda_6 = 0 \quad (88)$$

$$\frac{dL}{dB_3} = 1.2 + \mu_2 - 0.9\mu_3 + \lambda_3 - \lambda_7 = 0 \quad (89)$$

$$\frac{dL}{dC} = -11 + \mu_3 + \lambda_1 - \lambda_4 = 0 \quad (90)$$

$$\lambda_1(C - y_1) = 0 \quad (91)$$

$$\lambda_2\left(B_2 - \frac{1}{0.9}y_2\right) = 0 \quad (92)$$

$$\lambda_3\left(B_3 - \frac{1}{0.9}y_3\right) = 0 \quad (93)$$

$$\lambda_4C = 0, \lambda_6B_2 = 0, \lambda_7B_3 = 0, \lambda_8A_2 = 0, \lambda_9A_3 = 0 \quad (94-98)$$

$$B_2 - \ln(1 + A_2) = 0 \quad (99)$$

$$B_3 - 1.2\ln(1 + A_3) = 0 \quad (100)$$

$$C - 0.9(B_1 + B_2 + B_3) = 0 \quad (101)$$

以上—阶KKT条件与前一节的优化问题的KKT条件[公式(53)~(70)]不同, 未包括原模型的非负约束和 $B_1$ 的拉格朗日乘子, 虽然 $B_1$ 是一个参数。这将导致输出中包含二进制变量和 $B_1$ 的显式解。求解公式(86)~(101), 可得到39个候选解, 但是, 其中13个违反双重可行性条件, 因此, 应进一步考虑删除。

如公式(28)和表1所示, 过程中 $C$ 的最大和最优的出口流量为1。假设从 $B$ 到 $C$ 的反应是1:1, 为检查其对过程的影响,  $B_1$ 的流量从0变化到1。分析的第一步是评估每个解决方案的可行性。这是使用Excel通过改变 $B_1$ 的流量从0到1, 并通过改变表5中所示的二进制变量的配置来实现的。这样做是为了确保流量和不等式约束拉格朗日乘子是有效的。

当 $B_1$ 变化时, 对表9中的解的目标函数进行检查。表10给出了每个解的目标函数值, 该值从Mathematica 10导出。

对表10所示的解在其可行域内进行确认, 结果如表11所示。通过相应的整数组合, 同时操纵 $B_1$ 检



查其对最优解的影响, 结果如表12所示。

表12中清楚地显示, 目标函数的最小值是-1.92时,  $B_1$ 等于0, 此时 $y_1 = 1, y_2 = 0, y_3 = 1$ 。这个结果与文献得到的最优解相同, 见表1。然而, 更重要的是, 随着 $B_1$ 的流量增加, 目标函数的最小值所对应的二进制变量的组合发生变化。这一结果有力地证明, 不断变化的变量可以对一个工厂内的最优工艺路线产生重大影响。同样的结果在图3中可以更清晰地看出, 随着 $B_1$ 的流量增加, 配置如何更加优化。

为了验证工厂的最优配置取决于不确定的参数, 将 $B_1$ 作为一个可变参数再次求解确定性问题, 所得结果见表13。

表12强调了一个事实, 一个过程的最优配置可能随着不确定参数而改变。无论是采用Mathematica 10、Excel的结果, 还是MINLP问题的数值解, 都产生了相同的结果。这一结果重申了本文所提出的算法用于过程综合的有效性。确认了结论 $B_1$ 的最优值是0, 同时 $y_1 = 1, y_2 = 0, y_3 = 1$ 。这也表明,  $B_1$ 的流量增加使过程变得不那么有利可图。反过来, 这一结果意味着, 如果需要从市场购买 $B_1$ , 那么这个过程最终将亏损经营, 在财务上不可行。

## (2) C作为不确定变量

接下来, 我们考察C对过程的影响。再次使用算法2, 得到相应的p-KKT条件, 采用Mathematica

表10 案例1中 $B_1$ 不确定时的最优结果的显性表示

Solution	$f(y_1, y_2, y_3, B_1)$	CR
1	$5.8B_1 - 3.6 + 1.8\exp(-0.833B_1 + 0.926y_1 - 0.926y_2) + 1.8\exp(1.11y_2) - 6.167y_1 + 0.77y_2 + 1.5y_3$	$0 \leq B_1 \leq 0.15376$
2	$3.5y_1 - 3.6 - 2.9B_1 + 1.8\exp(1.11y_2) + 1.8\exp(0.926y_3) + 3.5y_1 - 8.889y_2 - 8.167y_3$	$0.15376 \leq B_1 \leq 0.9675$
3	$6B_1 - 3.6 + 1.8\exp(-B_1 + 1.11y_1 - 1.11y_3) + 1.8\exp(0.926y_3) - 6.389y_1 + y_2 + 1.722y_3$	$0.9675 \leq B_1 \leq 1$

表11 案例1中 $B_1$ 不确定时的二进制变量的组合

Solution	$y_1$	$y_2$	$y_3$
1	1	0	1
2	1	0	0
3	1	1	0

表12 案例1中 $B_1$ 变化时的每一个整数可行解的目标值

Flow rate of $B_1$	Value of objective function at solution configuration		
	Solution 1 [1, 0, 1]	Solution 2 [1, 0, 0]	Solution 3 [1, 1, 0]
0	-1.92	3.500	-1.721
0.1	-1.706	3.210	-1.641
0.2	-1.461	2.920	-1.512
0.3	-1.188	2.630	-1.338
0.4	-0.891	2.340	-1.124
0.5	-0.571	2.050	-0.872
0.6	-0.231	1.760	-0.588
0.7	0.129	1.470	-0.274
0.8	0.506	1.180	0.068
0.9	0.900	0.890	0.434
1.0	1.308	0.600	0.823

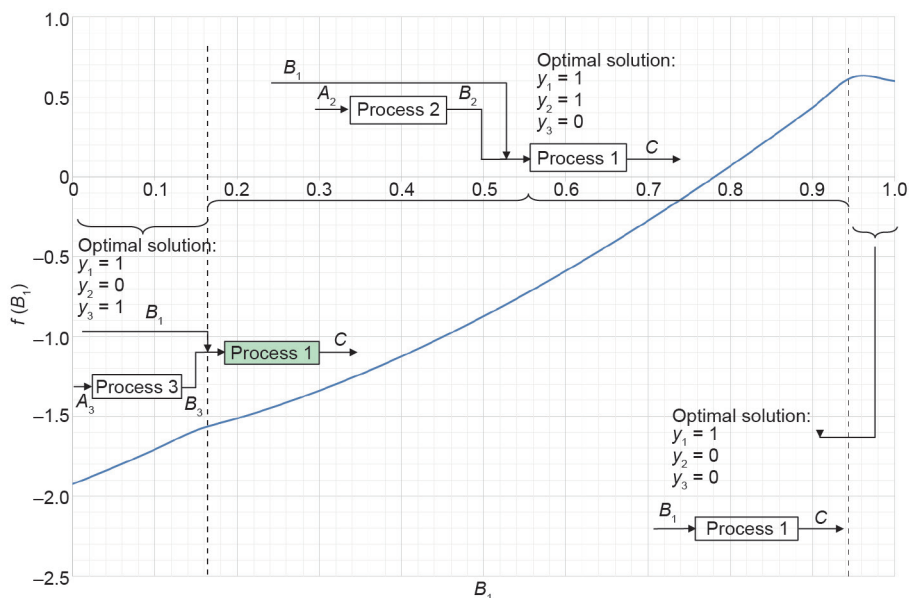


图3. 案例1中不确定参数 $B_1$ 与最优目标函数的显性变化关系。

10求解。通过求解p-KKT共得到32个候选解，通过预处理去掉其中的11个。因此，后续考虑21个候选解。由于式(28)中的约束，C的最大可能流量为1。因此，为了检查C如何影响过程，这个变量将从0变化到1。

在表13中，必须检查C变化时每个解的目标函数的变化。这可以通过检查Mathematica 10得到的每个解的目标函数来实现，目标函数考虑了二进制变量和不确定变量，如表14所示。

当C变化时，表14中的函数可通过表15中的二进制变量的组合来计算，得到的目标函数值见表16。

表16清楚地表明，目标函数的最小值是-1.92，此时C等于1，整数变量 $y_1 = 1$ ， $y_2 = 0$ 和 $y_3 = 1$ 。文献中报道的这种二进制组合产生的相同的最优解如表1所示。当过程进行优化和参数不确定且 $B_1$ 是不确定参数时，这个结果进一步得到确认。它还重申了一个事实，不确定变量可以影响最佳的工艺路线。图4显示了C的流量增加时，优化配置如何改变。

为了验证不确定参数影响了工厂最优配置的变化，从原来的公式(24)~(38)中移除公式(31)，以确保C作为一个参数进入GAMS24.4.1参加运算。

4.2.2. 案例 2

在这个例子中要研究的不确定变量是 $x_1$ 。Mathematica 10用来求解以下p-KKT条件，其中，二进制

变量和 $x_1$ 被视为参数。

$$L = 5y_1 + 6y_2 + 8y_3 + 10x_1 - 7x_6 - 18\ln(x_2 + 1) - 19.2\ln(x_1 - x_2 + 1) + 10 - \lambda_1(0.8\ln(x_2 + 1) + 0.96\ln(x_1 - x_2 + 1) - 0.8x_6) + \lambda_2(x_2 - x_1) + \lambda_3(x_2 - Uy_1) - \lambda_4(x_1 - x_2 - Uy_2) - \lambda_5(\ln(x_2 + 1) + 1.2\ln(x_1 - x_2 + 1) - x_6 - Uy_3 + 2) - \lambda_7x_2 - \lambda_8x_6 \tag{102}$$

$$\frac{dL}{dx_2} = \lambda_2 + \lambda_3 - \lambda_4 - \lambda_7 + \frac{19.2}{1 + x_1 - x_2} - \frac{18}{1 + x_2} + \lambda_1 \left( \frac{0.96}{1 + x_1 - x_2} - \frac{18}{1 + x_2} \right) + \lambda_5 \left( \frac{1.2}{1 + x_1 - x_2} - \frac{1}{1 + x_2} \right) = 0 \tag{103}$$

$$\frac{dL}{dx_6} = 7 + 0.8\lambda_1 + \lambda_5 - \lambda_8 = 0 \tag{104}$$

$$\lambda_1(0.8\ln(x_2 + 1) + 0.96\ln(x_1 - x_2 + 1) - 0.8x_6) = 0 \tag{105}$$

$$\lambda_2(x_2 - x_1) = 0 \tag{106}$$

$$\lambda_3(x_2 - Uy_1) = 0 \tag{107}$$

$$\lambda_4(x_1 - x_2 - Uy_2) = 0 \tag{108}$$

$$\lambda_5(\ln(x_2 + 1) + 1.2\ln(x_1 - x_2 + 1) - x_6 - Uy_3 + 2) = 0 \tag{109}$$

$$\lambda_7x_2 = 0, \lambda_8x_6 = 0 \tag{110-111}$$

使用Mathematica 10得到了23个候选解，在预处

表13 案例1中 $B_1$ 的变化对最优解的影响

$B_1$	$y_1$	$y_2$	$y_3$	C	$B_2$	$B_3$	$A_2$	$A_3$	f
0	1	0	1	1.000	0.000	1.111	0.000	1.524	-1.923
0.1	1	0	1	1.000	0.000	1.011	0.000	1.322	-1.706
0.2	1	1	0	1.000	0.911	0.000	1.487	0.000	-1.512
0.3	1	1	0	1.000	0.811	0.000	1.250	0.000	-1.338
0.4	1	1	0	1.000	0.711	0.000	1.036	0.000	-1.124
0.5	1	1	0	1.000	0.611	0.000	0.842	0.000	-0.872
0.6	1	1	0	1.000	0.511	0.000	0.667	0.000	-0.588
0.7	1	1	0	1.000	0.411	0.000	0.508	0.000	-0.274
0.8	1	1	0	1.000	0.311	0.000	0.365	0.000	0.068
0.9	1	1	0	1.000	0.211	0.000	0.235	0.000	0.434
1.0	1	0	0	0.900	0.000	0.000	0.000	0.000	0.600

表14 案例1中C不确定时的最优结果的显性表示

Solution	$f(y_1, y_2, y_3, C)$	CR
1	$5.8B_1 - 3.6 + 1.8\exp(-0.833B_1 + 0.926y_1 - 0.926y_2) + 1.8\exp(1.11y_2) - 6.167y_1 + 0.77y_2 + 1.5y_3$	$0 \leq C \leq 0.227$
2	$-3.6 - 2.9B_1 + 1.8\exp(1.11y_2) + 1.8\exp(0.926y_3) + 3.5y_1 - 8.889y_2 - 8.167y_3$	$0.227 \leq C \leq 0.8616$
3	$6B_1 - 3.6 + 1.8\exp(-B_1 + 1.11y_1 - 1.11y_3) + 1.8\exp(0.926y_3) - 6.389y_1 + y_2 + 1.722y_3$	$0.8616 \leq C \leq 1$

理过程中删除8个候选解, 对其余15个解进行了进一步分析。基于原来方程组中的公式(48),  $x_1$ 的最大值为2。因此, 研究 $x_1$ 如何影响过程, 这个变量将从0变化到2, 同时用Excel来确定在每个配置的二进制变量处每个解是否是可行的。

重要的是要强调, 该解决方案的可行性可以改变, 这取决于每个变量的函数。在解中的每个变量

表15 案例1中C不确定时的二进制变量的组合

Solution	$y_1$	$y_2$	$y_3$
1	1	0	1
2	1	0	0
3	1	1	0

表16 案例1中C变化时的每一个整数可行解的目标值

Flow rate of C	Value of objective function at solution configuration		
	Solution 1 [1, 0, 0]	Solution 2 [1, 0, 1]	Solution 3 [1, 1, 0]
0	3.500	5.000	4.500
0.1	3.178	4.208	3.723
0.2	2.856	3.433	2.970
0.3	2.533	2.676	2.245
0.4	2.211	1.940	1.552
0.5	1.889	1.226	0.893
0.6	1.567	0.537	0.273
0.7	1.244	-0.125	-0.304
0.8	0.922	-0.758	-0.833
0.9	0.600	-1.358	-1.307
1.0	0.278	-1.92	-1.721

可能会受到不同的不确定参数的影响, 这会导致 $\lambda$ 在给定的范围内波动, 有可能导致不可行。 $x_1$ 变化时, 必须检查表17中所示的每个整数解的目标函数, 该函数通过Mathematica 10计算得到, 如表18所示。

表18中所示的函数可以在表17中所示的可行的配置值处进行评估, 改变 $x_1$ 并检查其对最优解的影响。表19给出了 $x_1$ 的变化对最优显式解的影响的例子。

从表19可见, 目标函数的最小值为5.583时, Solution 2中 $x_1$ 等于1.8, 同时 $y_1=0$ ,  $y_2=1$ ,  $y_3=0$ 。这一结果给出了一个与表3非常相似的最优解。在 $x_1$ 增加到两个小数点的精度后, 能够达到表3中所列的最优解。这一结果重申了一个事实, 算法可以求解

表17 案例2中 $x_1$ 变化时整数可行解和参数范围

Solution	$y_1$	$y_2$	$y_3$	Range
1	0	1	1	$x_1 \geq 0.1$
2	0	1	0	$x_1 \geq 0.1$
3	1	0	0	$x_1 \geq 0$
4	0	0	1	$x_1 \geq 0$
5	1	0	1	$x_1 \geq 0$
6	0	0	1	$x_1 \geq 0$
7	1	0	1	$x_1 \geq 0$

表18 案例2中 $x_1$ 不确定时的最优结果的显性表示

Solution	$f(y_1, y_2, y_3, x_1)$
1	$10(1+x_1+0.5y_1+0.6y_2+0.8y_3-2.76\ln[1+x_1-2y_1]-2.5\ln[1+2y_1])$
2	$10+10x_1+5y_1+6y_2+8y_3-25\ln[1+x_1-2y_2]-27.6\ln[1+2y_2]$
3	$-4+10x_1+5y_1+6y_2+22y_3-25\ln[1+x_1-2y_2]-27.6\ln[1+2y_2]$

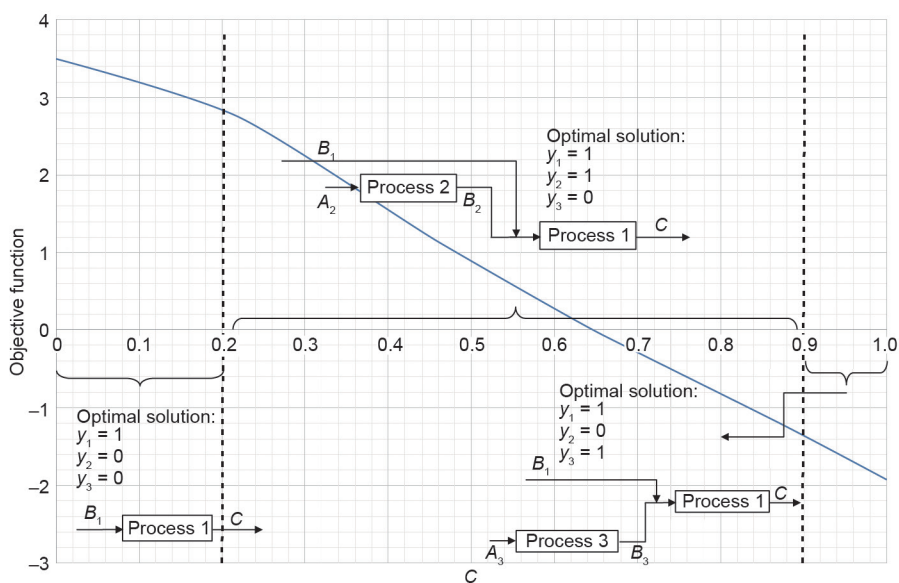


图4. 案例1中不确定参数C与最优目标函数的显性变化关系。

p-MINLP问题以获得最优解。它也强化了不确定变量可以影响最佳的工艺路线的事实。这一事实在图5中更清楚地显示出来,这表明当 $x_1$ 的值增加时,最优配置会发生怎样的变化。

表19 案例2中 $x_1$ 变化时两个整数可行解的不同解的实例

$x_1$	Value of objective function at solution configuration	
	Solution 2 [0, 1, 0]	Solution 3 [1, 0, 0]
0	N/A	15.000
0.1	14.369	13.617
0.2	12.968	12.442
0.3	11.759	11.441
0.4	10.713	10.588
0.5	9.809	9.863
0.6	9.028	9.250
0.7	8.355	8.734
0.8	7.777	8.305
0.9	7.285	7.954
1.0	6.869	7.671
1.1	6.523	7.452
1.2	6.239	7.289
1.3	6.012	7.177
1.4	5.837	7.113
1.5	5.710	7.093
1.6	5.628	7.112
1.7	5.586	7.169
1.8	5.583	7.260
1.9	5.614	7.382
2.0	5.678	7.535

为验证图5的精度,用GAMS 24.4.1解原方程(39)~(51),以确保 $x_1$ 在求解过程中被作为参数考虑。

## 5. 结论

在不确定性的影响下,高效可靠的决策在流程工业中变得越来越重要。在这个过程中行业决策的问题无疑是一个多层次的问题,并且在早期阶段做出的决策,如那些与过程综合相关的问题,能够决定过程的可持续性。新一代生物炼油厂[30,31]倡导的设计的发展现状可以看出不确定性决策的重要性,特别是在过程综合阶段。

受这种情况的驱动,本文分别引入了两个算法求解确定性的和带参数的MINLPs问题,特别是非线性表示为对数函数的情况。所提出的算法具有双重意义:首先,二进制变量被视为不确定参数并限制在各自的范围;其次,用符号运算求解从一阶KKT条件导出的方程组的解析解。这个过程的结果是一组候选解,通过进一步检查以便只保持最优解。对于单参数不确定性的情况下,提出了上述修改后的算法,其中的变参数和二进制变量一起被视为不确定参数。根据所提出的参数化算法,在相应的参数范围内以含有不确定参数的精确的显式函数的形式得到优化解以及相应的目标函数的表达式,并且在这些参数范围内,每个显式解保持最优。尽管本文提出的算法具有这样的优点,但仍存在算法求解精确显式解和求解问题大小之间的权衡。未来的研究将集中在所提出的算法的高效求解上。

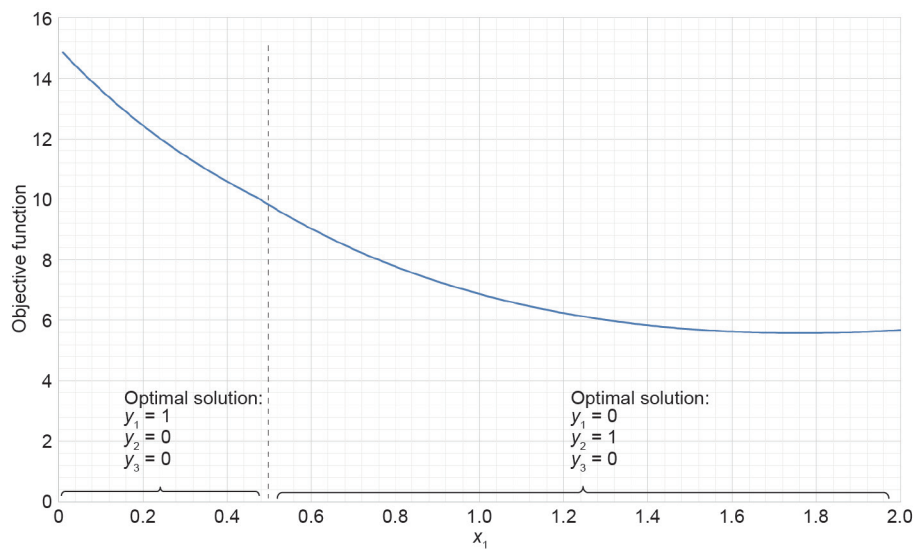


图5. 案例2中不确定参数 $x_1$ 的变化范围与最优目标函数的显性关系。



## Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge financial support from EPSRC grants (EP/M027856/1, EP/M028240/1).

## Compliance with ethics guidelines

Vassilis M. Charitopoulos, Lazaros G. Papageorgiou, and Vivek Dua declare that they have no conflict of interest or financial conflicts to disclose.

## References

- [1] Floudas CA. *Nonlinear and mixed-integer optimization: Fundamentals and applications*. Oxford: Oxford University Press; 1995.
- [2] Bedenik NI, Ropotar M, Kravanja Z. MINLP synthesis of reactor networks in overall process schemes based on a concept of time-dependent economic regions. *Comput Chem Eng* 2007;31(5–6):657–76.
- [3] Nicol W, Hernier M, Hildebrandt D, Glasser D. The attainable region and process synthesis: Reaction systems with external cooling and heating: The effect of relative cost of reactor volume to heat exchange area on the optimal process layout. *Chem Eng Sci* 2001;56(1):173–91.
- [4] Kokossis AC, Floudas CA. Optimization of complex reactor networks—II. Nonisothermal operation. *Chem Eng Sci* 1994;49(7):1037–51.
- [5] Huang K, Karimi IA. Efficient algorithm for simultaneous synthesis of heat exchanger networks. *Chem Eng Sci* 2014;105:53–68.
- [6] Grossmann IE, Guillén-Gosálbez G. Scope for the application of mathematical programming techniques in the synthesis and planning of sustainable processes. *Comput Chem Eng* 2010;34(9):1365–76.
- [7] Westerberg AW. A retrospective on design and process synthesis. *Comput Chem Eng* 2004;28(4):447–58.
- [8] Adjiman CS, Schweiger CA, Floudas CA. Mixed-integer nonlinear optimization in process synthesis. In: Du DZ, Pardalos PM, editors *Handbook of combinatorial optimization*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers; 1998. p. 1–76.
- [9] Geoffrion AM. Generalized benders decomposition. *J Optimiz Theory App* 1972;10(4):237–60.
- [10] Viswanathan J, Grossmann IE. A combined penalty function and outer-approximation method for MINLP optimization. *Comput Chem Eng* 1990;14(7):769–82.
- [11] Westerlund T, Pettersson F. An extended cutting plane method for solving convex MINLP problems. *Comput Chem Eng* 1995;19(Suppl 1):131–6.
- [12] Sahinidis NV. BARON: A general purpose global optimization software package. *J Global Optim* 1996;8(2):201–5.
- [13] Misener R, Floudas CA. ANTIGONE: Algorithms for continuous/integer global optimization of nonlinear equations. *J Global Optim* 2014;59(2–3):503–26.
- [14] Grossmann IE, Apap RM, Calfa BA, Garcia-Herreros P, Zhang Q. Recent advances in mathematical programming techniques for the optimization of process systems under uncertainty. *Comput Chem Eng* 2016;91:3–14.
- [15] Dua V, Pistikopoulos EN. Parametric mixed integer nonlinear optimization. In: Floudas CA, Pardalos PM, editors *Encyclopedia of optimization*. 2nd ed. New York: Springer Science + Business Media, LLC.; 2008. p. 2920–4.
- [16] Pistikopoulos EN, Dua V, Bozinis NA, Bemporad A, Morari M. On-line optimization via off-line parametric optimization tools. *Comput Chem Eng* 2002;26(2):175–85.
- [17] Pertsinidis A. On the parametric optimization of mathematical programs with binary variables and its application in the chemical engineering process synthesis [dissertation]. Pittsburgh: Carnegie Mellon University; 1992.
- [18] McBride RD, Yorlmark JS. Finding all solutions for a class of parametric quadratic integer programming problems. *Manage Sci* 1980;26(8):784–95.
- [19] Cooper MW. Postoptimality analysis in nonlinear integer programming: The right-hand side case. *Nav Res Log* 1981;28(2):301–7.
- [20] Skorin-Kapov J, Granot F. Non-linear integer programming: Sensitivity analysis for branch and bound. *Oper Res Lett* 1987;6(6):269–74.
- [21] Acevedo J, Pistikopoulos EN. A parametric MINLP algorithm for process synthesis problems under uncertainty. *Ind Eng Chem Res* 1996;35(1):147–58.
- [22] Dua V, Pistikopoulos EN. Algorithms for the solution of multiparametric mixed-integer nonlinear optimization problems. *Ind Eng Chem Res* 1999;38(10):3976–87.
- [23] Dua V, Papalexandri KP, Pistikopoulos EN. Global optimization issues in multiparametric continuous and mixed-integer optimization problems. *J Global Optim* 2004;30(1):59–89.
- [24] Fotiou IA, Rostalski P, Parrilo PA, Morari M. Parametric optimization and optimal control using algebraic geometry methods. *Int J Control* 2006;79(11):1340–58.
- [25] Charitopoulos VM, Dua V. Explicit model predictive control of hybrid systems and multiparametric mixed integer polynomial programming. *AIChE J* 2016;62(9):3441–60.
- [26] Dua V. Mixed integer polynomial programming. *Comput Chem Eng* 2015;72:387–94.
- [27] Wolfram S. *The Mathematica® book*. 4th ed. Cambridge: Cambridge University Press; 1999.
- [28] Vyas, J, Dua, V. Process Synthesis and Design under Uncertainty: A Specific Class of MINLP Problems. 17th British-French-German Conference on Optimization 2015, London, UK
- [29] Duran MA, Grossmann IE. An outer-approximation algorithm for a class of mixed-integer nonlinear programs. *Math Program* 1986;36(3):307–39.
- [30] Kokossis AC, Yang A. On the use of systems technologies and a systematic approach for the synthesis and the design of future biorefineries. *Comput Chem Eng* 2010;34(9):1397–405.
- [31] Stefanakis ME, Pyrgakis KA, Mountraki AD, Kokossis AC. The total site approach as a synthesis tool for the selection of valorization paths in lignocellulosic biorefineries. *Comput Aided Chem Eng* 2014;33:1567–72.