

研究简报

# 基于子网络强制进化的大规模换热网络优化

蔡 康<sup>1</sup>, 关 欣<sup>1</sup>, 罗 行<sup>1</sup>, Georg Fieg<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 上海理工大学热工程研究所, 上海 200093; <sup>2</sup> 汉堡工业大学过程工程研究所, 汉堡 21071, 德国)

关键词: 换热网络优化; 子网络; MINLP; 大规模

中图分类号: TK 124

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2009) 09-2265-06

## Optimization of large-scale heat exchanger networks by evolution of sub-networks

CAI Kang<sup>1</sup>, GUAN Xin<sup>1</sup>, LUO Xing<sup>1</sup>, Georg Fieg<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> Institute of Thermal Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China; <sup>2</sup> Institute of Process and Plant Engineering, Hamburg University of Technology, D-21071 Hamburg, Germany)

**Abstract:** The optimization of heat exchanger networks (HEN) is a typical MINLP problem. For large-scale HEN, when the number of process streams increases, its feasible configurations could increase exponentially. Till now, no effective methods are available to solve such problems. A new strategy based on the optimization of the sub-networks of HEN was proposed. According to the first optimization, the sub-networks underwent recombination, decomposition and transplantation operations were further optimized with the hybrid genetic algorithm. Evolution of the sub-networks instead of the optimization of the whole HEN was simple and fast. A large-scale HEN with 22 hot and 17 cold streams from literature was calculated with this new method and a better result was obtained. Although the exchanger area increased a little, the number of heat exchanger units was less, also utility and total annual cost decreased.

**Key words:** heat exchanger network optimization; sub-network; MINLP; large-scale

### 引 言

换热网络综合优化研究是化工过程系统优化的重要组成部分, 从 1969 年 Kesler 等<sup>[1]</sup>首次用数学模型来表示换热网络综合问题开始, 人们提出了各种换热网络综合优化的方法。夹点法<sup>[2-5]</sup>是一种分步优化方法, 首先依据夹点温差确定最小的公用工程用量, 将网络划分为夹点上方和下方两个子网

络, 然后对两个子网络分别优化, 确定最小换热单元数, 最后确定换热网络的最小年投资费用。夹点法的分步分析过程, 很难有效地考虑各层次之间的相互作用; 对夹点温差的依赖, 使其很难得到换热网络的全局最优解。数学规划法<sup>[6-8]</sup>是在超结构的基础上建立换热网络的数学模型, 然后借助数学优化方法对问题进行求解, 但是由于问题是典型的混合整数非线性规划 (MINLP) 问题, 当网络规模

2008-11-28 收到初稿, 2009-06-05 收到修改稿。

联系人: 关欣。第一作者: 蔡康 (1986-), 男, 硕士研究生。

基金项目: 上海市教育委员会基金项目 (07ZZ89)。

Received date: 2009-11-28.

Corresponding author: GUAN Xin, cindy\_guan@hotmail.com

Foundation item: supported by the Innovation Program of Shanghai Municipal Education Commission (07ZZ89).

增大时,会产生组合爆炸,这种方法极易陷入与全局最优解相差较远的局部最优解。启发式优化方法具有很好的全局搜索能力,不会由于问题的非凸、非线性而陷于局部极值。Athier 等<sup>[9]</sup>通过模拟退火算法结合非线性规划(NLP)来优化换热网络;Lewin<sup>[10]</sup>通过遗传算法结合 NLP 来优化换热网络;Björk 等<sup>[11]</sup>首先使用遗传算法将换热网络综合问题划分为子问题,然后使用同步 MINLP 方法来优化子问题。在这些方法中,当网络规模很大时,由于算法中涉及非线性规划,仍然需要大量的优化时间。本文应用混合遗传算法结合陈德珍等<sup>[12]</sup>提出的换热网络分析解来优化换热网络,并建立了针对大规模换热网络优化的基于子网络强制进化的优化策略。

## 1 换热网络优化的数学模型

以有分流的分级超结构的分析解为基础,热流股数为  $N_h$ ,冷流股数为  $N_c$ ,分级数为  $N_s$ ,选择换热面积和热容流率为优化变量,当这些变量的数值给定时,换热网络各流股的温度可以通过其分析解来求解,然后根据换热器类型以及求得的流体进出口温度计算出对数平均温差修正系数,从而确定换热器的面积,并根据换热网络出口的流股温度计算公用工程用量,从而求出整个换热网络的年费用。换热器的固定投资费用可以通过式(1)求解

$$C_{E,ijk} = \begin{cases} a + bA_{ijk}^c & (FUA)_{ijk} > 0 \\ 0 & (FUA)_{ijk} \leq 0 \end{cases} \quad (1)$$

为了使流股达到目标温度,需要一定的公用工程。对于流股  $n$  来说,不论是热流股还是冷流股,如果其出口温度  $t_n''$  高于目标值的上限  $t_{OUT,n}^+$ ,需要冷公用工程来冷却;如果出口温度低于目标值的下限  $t_{OUT,n}^-$ ,则需要热公用工程来加热。所以流股  $n$  (热流股:  $n = 1, 2, \dots, N_h$ ; 冷流股:  $n = N_h + 1, N_h + 2, \dots, N_h + N_c$ ) 的公用工程费用和相关的加热器或者冷却器的费用可表示为

$$C_{U,n} = \begin{cases} C_{HU} \dot{W}_n (t_{OUT,n}^- - t_n'') + (a + bA_{CU,n}^c), & t_n'' < t_{OUT,n}^- \\ 0, & t_{OUT,n}^- < t_n'' < t_{OUT,n}^+ \\ C_{CU} \dot{W}_n (t_n'' - t_{OUT,n}^+) + (a + bA_{CU,n}^c), & t_n'' > t_{OUT,n}^+ \end{cases} \quad (n = 1, 2, \dots, N_h + N_c) \quad (2)$$

最终得到换热网络优化的数学模型为

$$\min C(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N_h+N_c} C_{U,n} + \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j=1}^{N_h} \sum_{k=1}^{N_c} C_{E,ijk}$$

$$x \in \{(FUA)_{ijk}, \dot{W}_{h,ijk}, \dot{W}_{c,ijk} \mid i = 1, 2, \dots, N_s; j = 1, 2, \dots, N_h; k = 1, 2, \dots, N_c\} \quad (3)$$

遗传算法中个体的适应度为年费用的倒数,并对其进行线性化处理

$$f = \frac{C^{-1} + C_{\min}^{-1} - 2(C^{-1})_{\text{avg}}}{C_{\min}^{-1} - (C^{-1})_{\text{avg}}} \quad (4)$$

式中  $C$  为个体的年费用 [见式(3)],  $C_{\min}$  为种群中年费用的最小值,  $(C^{-1})_{\text{avg}}$  是种群中所有个体年费用倒数的平均数。

## 2 基于子网络强制进化的混合遗传优化策略

### 2.1 基于子网络强制进化的优化策略

混合遗传算法是一种基于整体网络的优化方案,对整个网络进行优化,达到一定的程度,优化便会停滞不前,即目标函数不再下降,这是由换热网络优化问题的复杂性所决定的。如果换热网络中的一部分流股与换热网络的其他部分没有任何换热关系,则称这一部分为一个子网络。对于大规模换热网络而言,最终的优化结果通常都可以分解成若干子网络,单独地对其中任一子网络进行优化,不会影响其余的子网络,从而可以利用子网络进化代替整体换热网络的优化过程。

### 2.2 混合遗传算法

2.2.1 局部调优 混合遗传算法中通过概率因子  $P_L \in [0, 1]$  来决定是否对个体进行局部调优,如果  $\text{random}(0, 1) < P_L$ , 而且  $(FUA)_{ijk} > 0$ , 则进行基于式(5)的寻优操作。

$$x_{ijk} = x_{ijk}^* - \left[ \frac{\partial C(\mathbf{x})}{\partial x_{ijk}} / \frac{\partial^2 C(\mathbf{x})}{\partial x_{ijk}^2} \right]_{x_{ijk} = x_{ijk}^*}$$

$$x_{ijk} \in \{(FUA)_{ijk}, \dot{W}_{h,ijk}, \dot{W}_{c,ijk} \mid i = 1, 2, \dots, N_s; j = 1, 2, \dots, N_h; k = 1, 2, \dots, N_c; (FUA)_{ijk} > 0\} \quad (5)$$

2.2.2 模拟退火策略 每代种群内的个体在进行遗传操作之前,可以首先应用模拟退火算法对其进行初步优化:先将种群中的所有个体都复制下来,然后对这些“复制品”进行离散

$$x_{ijk}^{**} = \begin{cases} x_{ijk} + (x_{\max} - x_{ijk})s, & s \geq 0 \\ x_{ijk} - (x_{\min} - x_{ijk})s, & s < 0 \end{cases}$$

$$x_{ijk} \in \{(FUA)_{ijk}, \dot{W}_{h,ijk}, \dot{W}_{c,ijk} \mid i = 1, 2, \dots, N_s; j = 1, 2, \dots, N_h; k = 1, 2, \dots, N_c; (FUA)_{ijk} > 0\} \quad (6)$$

其中

$$s = \text{random}(-1, 1) [1 - e^{-C_1/(M+1)}] \quad (7)$$

式中  $M$  为个体的进化代数,将复制品与初始个体进行比较,如果优,则替代初始个体;反之,则

以概率来决定是否对初始个体进行替换

$$P = e^{-(f_{\text{original}} - f_{\text{copy}})^{(M+1)/C_2}} \quad (8)$$

式中  $C_1$ 、 $C_2$  为常数。

对连续性变量实行局部调优策略可以增强网络个体的适应度，使具有优秀网络结构的个体更容易生存下来，因此其所包含的优秀结构更容易遗传给后代。模拟退火算法以概率接受恶化解，可以跳出局部最优解。引入局部调优及模拟退火策略可以增强遗传算法的结构搜索能力，形成的混合遗传算法具有很好的全局搜索能力。

### 2.3 子网络强制进化

子网络强制进化即根据换热网络中的子网络划分，以其为单位，实行重组、变异与交叉操作，以子网络的进化代替整体换热网络的优化过程。本文采用单性遗传进化方式，单性遗传是基于单个体的遗传方式，只进行单个体内部的子网络重组、变异及交叉操作。优化步骤：

① 首先经过混合遗传算法得到初步优化结果，为了兼顾优化的效率，此时的种群内个体数与进化代数都比较小，然后进行子网络识别，个体中的子网络为  $S_n (n=1, 2, \dots, N_{\text{SN}})$ 。 $N_{\text{SN}}$  表示个体所包含的子网络数目。

② 对每个子网络应用混合遗传算法进一步优化，某些子网络可能分解成多个子网络，重新进行子网络识别，此时种群内个体数与进化代数较大，使得子网络得到深度进化。

③ 以式 (9) 来实现子网络的选择操作

$$\frac{n-1}{N_{\text{SN}}} < \text{random}(0,1) \leq \frac{n}{N_{\text{SN}}} \quad (9)$$

满足式 (9) 的子网络  $S_n$  被选中。从式 (9) 可以看出，无论子网络的规模大小还是费用多少，对每个子网络都是以平均的概率来选取，这样就使得每个子网络都会具有进化的机会。

④ 随机决定子网络进行重组、交叉或变异操作，如果要进行重组，被选择的子网络中的流通股重组成一个大的子网络，使用混合遗传算法进行优化，如果费用降低则新产生的子网络取代原来的子网络进入下一轮的优化过程，反之则保持原来的子网络不变；交叉是在两个子网络之间，通过交换部分流通股来完成；变异是对一个子网络的分解操作，可以产生新的子网络。

设定子网络强制进化的代数，完成这些次数的进化后跳出循环。

## 3 算例

算例来自文献[13]，包括 22 股热 (H) 流体和 17 股冷 (C) 流体 (表 1)。换热器费用计算公式为  $8000 + 800A^{0.8} \$ \cdot a^{-1}$ 。热、冷公用工程费用分别为  $70 \$ \cdot \text{kW}^{-1} \cdot a^{-1}$  和  $10 \$ \cdot \text{kW}^{-1} \cdot a^{-1}$ 。

表 1 算例原始数据

Table 1 Problem data of example

Stream	$t'/\text{C}$	$t_{\text{OUT}}/\text{C}$	$\dot{W}$ / $\text{kW} \cdot \text{K}^{-1}$	$h$ / $\text{kW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
H1	180	75	30	2.0
H2	280	120	15	2.5
H3	180	75	30	2.0
H4	140	45	30	2.0
H5	220	120	25	1.5
H6	180	55	10	2.0
H7	170	45	30	2.0
H8	180	50	30	2.0
H9	280	90	15	2.0
H10	180	60	30	2.0
H11	120	45	30	2.0
H12	220	120	25	2.0
H13	180	55	10	2.0
H14	140	45	20	2.0
H15	140	60	70	2.0
H16	220	50	15	2.5
H17	220	60	10	2.5
H18	150	70	20	2.0
H19	140	80	70	2.0
H20	220	50	35	2.0
H21	180	60	10	2.0
H22	150	45	20	2.5
C1	40	230	20	1.5
C2	120	260	35	1.0
C3	40	190	35	1.5
C4	50	190	30	2.0
C5	50	250	60	2.0
C6	40	150	20	2.0
C7	40	150	20	2.0
C8	120	210	35	2.5
C9	40	130	35	2.5
C10	60	120	30	2.5
C11	50	150	10	3.0
C12	40	130	20	1.0
C13	120	160	35	1.0
C14	40	90	35	1.75
C15	50	90	30	1.5
C16	50	150	30	2.0
C17	30	150	50	2.0
HU	325	325	—	1.0
CU	25	40	—	2.0

表 2 基于子网络进化的混合遗传算法优化过程

Table 2 Procedure of sub-networks evolution genetic algorithm

Sub-network		Cost of Sub-network / \$ · a <sup>-1</sup>	Total cost / \$ · a <sup>-1</sup>
1. sub-networks from the first hybrid genetic algorithm			2061893
1.1	H2C5 <sub>a</sub> , H5C5 <sub>b</sub> , H12C5 <sub>c</sub> , H9C5 <sub>a</sub> , H19C5 <sub>b</sub> , H9C2, H19C10, HUC5, HUC2, H5CU, H19CU	647609	
1.2	H3 <sub>a</sub> C7, H3 <sub>b</sub> C9, H4C9, H3CU, H4CU	131284	
1.3	H6C8, H16C8, H13C8, H16C6, HUC6, HUC8, H6CU, H13CU	276830	
1.4	H8C1, H8C15, HUC1, H8CU	204451	
1.5	H10C13, H10CU	91109	
1.6	H11CU	49371	
1.7	H14C12, H14CU, HUC12	86192	
1.8	H15C17, H21C17, HUC17, H15CU	175826	
1.9	H17C4, H20C4, H1C4, H17C11, H20C3, H22C4, H17CU, H20CU, H22CU	277366	
1.10	H18C14, HUC14	42015	
1.11	H7C16, H7CU	79840	
2. sub-network optimization in hybrid genetic algorithm			2012177
2.1	H2C5 <sub>a</sub> , H5C5 <sub>b</sub> , H19C5, H2CU, H5CU, HUC5	413650	
2.2	H9C2 <sub>a</sub> , H12C2 <sub>b</sub> , H12C10, H9C10, HUC2	225332	
2.3	H17C4 <sub>a</sub> , H20C4 <sub>b</sub> , H1C4, H17C11, H20C3, H22C4, H17CU, H20CU, H22CU	276311	
2.4	H6C6 <sub>a</sub> , H13C6 <sub>b</sub> , H6CU	62277	
2.5	H16C8, H16CU, HUC8	191734	
2.6	H3 <sub>a</sub> C7, H3 <sub>b</sub> C9 <sub>a</sub> , H4C9 <sub>b</sub> , H4CU	114435	
2.7	H8 <sub>a</sub> C1, H8 <sub>b</sub> C15, H8CU, HUC1	204104	
2.8	H15C17 <sub>a</sub> , H21C17 <sub>b</sub> , H15CU, HUC17	175807	
2.9	H10C13, H10CU	91109	
2.10	H14C12, H14CU, HUC12	86192	
2.11	H7C16, H7CU	79840	
2.12	H18C14, HUC14	42015	
2.13	H11CU	49371	
3. sub-networks after evolution of functional groups			1965476
3.1	H2C5 <sub>a</sub> , H5C5 <sub>b</sub> , H19C5, H2CU, H5CU, HUC5	413650	
3.2	H9C2 <sub>a</sub> , H12C2 <sub>b</sub> , H9C10, H12C10, HUC2	225332	
3.3	H17C4 <sub>a</sub> , H20C4 <sub>b</sub> , H1C4, H17C11, H20C3, H22C4, H17CU, H20CU, H22CU	276311	
3.4	H6C6 <sub>a</sub> , H13C6 <sub>b</sub> , H6CU	62277	
3.5	H15C17 <sub>a</sub> , H21C17 <sub>b</sub> , H15CU, HUC17	175807	
3.6	H7C16, H7CU	79840	
3.7	H10C13, H10CU	91109	
3.8	H11C14, H11CU	55992	
3.9	H14C12, H18C12, H14CU	94027	
3.10	H3C8 <sub>a</sub> , H8C8 <sub>b</sub> , H3C7, H8C9, H3CU, HUC8	285657	
3.11	H4C15, H4CU	60911	
3.12	H16C1, HUC1	144563	

Note: C5<sub>a</sub>, C5<sub>b</sub> and C5<sub>c</sub> means a split in C5.

首先,使用混合遗传算法对网络进行优化,种群内个体数目设为 100,进化代数为 1000,经过运算找出其中的最好结果,年费用为 2061893 \$ · a<sup>-1</sup>.优化结果中包含 11 个子网络,其中子网络 1.1、1.3、1.9 规模较大,包含换热器个数较多,分别使用混合遗传算法进行单独优化.对于网络的优化过程为:首先应用混合遗传算法,种群内个体

数为 500,进化代数为 10000,如果 200 代不进化则跳出循环.经过对子网络的单独优化之后,子网络 1.1 分解成两个新的子网络 2.1、2.2,费用从 647609 \$ · a<sup>-1</sup>,降为 638982 \$ · a<sup>-1</sup>;子网络 1.3 分解成 2.4、2.5,费用从 276830 \$ · a<sup>-1</sup>降为 254011 \$ · a<sup>-1</sup>;子网络 1.9 没有被分解,但是 C4 被分流,费用从 277366 \$ · a<sup>-1</sup>降为 276311 \$ · a<sup>-1</sup>,

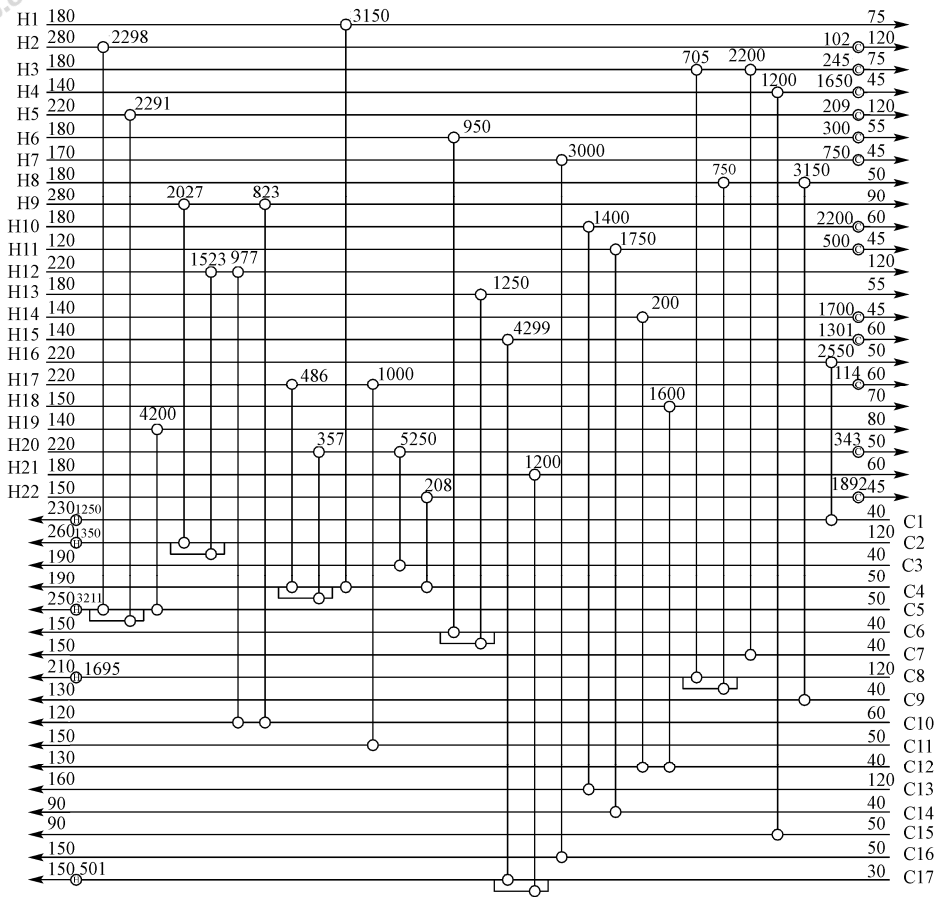


图 1 22 股热流、17 股冷流的大规模网络的优化结构

Fig. 1 Optimal structure of 22H17C

表 3 优化结果比较

Table 3 Some solutions of 22H17C

Ref.	Splits	Exchanger area/m <sup>2</sup>	Units	Q <sub>H</sub> /MW	Q <sub>C</sub> /MW	Cost/ \$ · a <sup>-1</sup>
[11]				10.55	13.85	2.073 × 10 <sup>6</sup>
[13]	8	2700	48	8.46	11.74	1.998 × 10 <sup>6</sup>
this work(Fig. 1)	6	2856	46	8.01	11.31	1.965 × 10 <sup>6</sup>

可知适当的分流可以提高换热器的效率，从而降低费用。对其余子网络的优化也使其其中的一些网络费用降低。经过第二步优化，换热网络的年费用降为 2012177 \$ · a<sup>-1</sup>，此时的网络包含 13 个子网络。经过基于子网络进化的优化策略，部分子网络进行重组、交叉或变异操作，优化出更好的结构，费用降为 1965476 \$ · a<sup>-1</sup>。具体的优化过程如表 2 所示。

图 1 为最终的优化结构，可以看出，该结构包括 28 个换热器、13 个冷却器、5 个加热器，热流股没有分流，部分冷流股分流。换热器、加热器与冷却器的换热量标示于图中（单位为 kW）。

本文的优化结果与文献中结果进行比较如表 3 所示，可以看出，相对于 Pettersson 的结果，换热器面积增加了 5.8%，但是换热单元数减少了 2 个，公用工程量减少，年费用减少了约 33000 \$ · a<sup>-1</sup>，最终的结果优于文献结果。

### 4 结 论

(1) 本文以换热网络分析解为基础，针对大规模换热网络优化问题的难点，提出了一种基于子网络强制进化的混合遗传优化策略。

(2) 对大规模网络整体的优化中取较小的个体数和进化代数，兼顾效率的同时，实现对网络结构

的初步优化。采用较大个体数目和进化代数，可以实现子网络的深度进化，且不需要耗费大量的计算时间。

(3) 应用实例表明，基于子网络进化的优化策略可以很好地处理大规模换热网络优化问题，并能够找到更优的结果。

### 符 号 说 明

- A——换热器面积,  $m^2$
- $a, b$ ——换热器的费用系数,  $\$ \cdot a^{-1}$
- C——年总费用,  $\$ \cdot a^{-1}$
- $C_{CU}$ ——冷公用工程的费用,  $\$ \cdot kW^{-1} \cdot a^{-1}$
- $C_{HU}$ ——热公用工程的费用,  $\$ \cdot kW^{-1} \cdot a^{-1}$
- $c$ ——换热器的费用系数
- $F$ ——对数平均温差修正系数
- $f$ ——个体适应度
- $M$ ——进化代数
- $N_c$ ——冷流股数目
- $N_h$ ——热流股数目
- $N_s$ ——分级超结构级数
- $N_{SN}$ ——个体中子网络的数目
- $P_L$ ——局部调优概率
- $t'$ ——流股的入口温度,  $^{\circ}C$
- $t''$ ——公用工程前流股温度,  $^{\circ}C$
- $t_{OUT}^+, t_{OUT}^-$ ——分别为流股出口温度的上、下限,  $^{\circ}C$
- $U$ ——总传热系数,  $kW \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$
- $\dot{W}$ ——热容流率,  $kW \cdot K^{-1}$
- $x$ ——换热器参数及流股热容流率向量

### 下角标

- CU——冷公用工程
- $c$ ——冷流股
- HU——热公用工程
- $h$ ——热流股
- $i$ ——级数
- $j$ ——热流股
- $k$ ——冷流股
- $n$ ——子网络

### References

[1] Kesler M G, Parker R O. Optimal networks of heat

exchange. *Chemical Engineering Process Symposium Series*, 1969, **65**: 111-120

- [2] Linnhoff B, Flower J R. Synthesis of heat exchanger networks. *AIChE J.*, 1978, **24** (4): 633-654
- [3] Linnhoff B, Mason D R, Wardle I. Understanding heat exchanger networks. *Comput. Chem. Eng.*, 1979, **3**: 295-302
- [4] Linnhoff B, Turner J A. Heat-recovery networks: insights yield big savings. *Chem. Eng.*, 1981 (11): 56-70
- [5] Linnhoff B, Townsend D W, Boland D, Hewitt G F, Thomas B E A, Guy A R, Marsland R H. User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy. Oxford: Institution of Chemical Engineers, Pergamon Press, 1982
- [6] Grossmann I E, Sargent R W H. Optimum design of heat exchanger networks. *Comput. Chem. Eng.*, 1978, **2**: 1-7
- [7] Papoulias S A, Grossmann I E. A structural optimization approach in process synthesis, I, II & III. *Comput. Chem. Eng.*, 1983, **7**: 707-734
- [8] Floudas C A, Ciric A R, Grossmann I E. Automatic synthesis of optimum heat exchanger network configurations. *AIChE J.*, 1986, **32** (2): 276-290
- [9] Athier G, Floquet P, Pibouleau K, Domenech S. Synthesis of heat-exchanger networks by simulated annealing and NLP procedures. *AIChE Journal*, 1997, **43** (11): 3007-3020
- [10] Lewin D R. A generalized method for HEN synthesis using stochastic optimization-II. The synthesis of cost optimal networks. *Computers and Chemical Engineering*, 1998, **22**: 1387-1405
- [11] Björk K M, Pettersson F. Optimization of large-scale heat exchanger network synthesis problems//Hamza M H. Proceedings of the IASTED International Conference on Modelling and Simulation. Palm Springs, California, USA, 2003: 313-318
- [12] Chen Dezhen (陈德珍), Yang Shanshan (杨杉杉), Luo Xing (罗行), Wen Qingyun (温卿云), Ma Hugen (马虎根). An explicit solution for thermal calculation and synthesis of superstructure heat exchanger networks. *Chin. J. Chem. Eng.*, 2007, **15** (2): 296-301
- [13] Pettersson F. Synthesis of large-scale heat exchanger networks using a sequential match reduction approach. *Comput. Chem. Eng.*, 2005, **29**: 993-1007