

专论与评述

化学工业“两化融合”发展与 过程系统工程:挑战 and 前景(二)

——“两化融合”发展对过程系统工程的挑战及前景

杨友麒

(中国化工信息中心,北京 100029)

摘要:论述了化学工业“两化融合”发展,趋向精细化、服务化和可持续化,对过程系统工程(PSE)提出挑战。研究了过程系统工程应从产品工程/纳米过程系统工程、间歇过程系统工程、供应链的优化与协同、多尺度过程集成及绿色过程系统工程 5 个方面提供技术支撑的前景。

关键词:系统工程;多尺度集成;产品工程;纳米过程;间歇过程;供应链

中图分类号:TQ-9

文献标识码:C

文章编号:0253-4320(2009)12-0001-07

PSE and development of Merge of Industrialization and Informationization in Chinese chemical industries: Part II . Challenges and prospects

YANG You-qi

(China National Chemical Information Center, Beijing 100029, China)

Abstract: The industrialization and informationization of chemical industry in China will go towards the direction of fine chemicals, services, and sustainable development, this puts a challenge in front of PSE. The prospects of PSE's technological support are discussed from 5 facets including: ① the product engineering/the nanoprocess systems engineering, ② the batch process systems engineering, ③ the optimization and cooperation of supply chains, ④ multi-scale process integration, and ⑤ the green process systems engineering.

Key words: systems engineering; multi-scale integration; product engineering; nanoprocess; batch process; supply chain

正如第 1 部分所述,化学工业的“两化融合”发展趋势:精细化、服务化和可持续化,对过程系统工程提出了新的挑战。过程系统工程应该为这种发展提供多方面的支撑技术。

1 产品工程和纳米过程系统工程为产品创新和精细化工发展提供支持^[1-5]

过去过程设计讲的是制造工艺过程的设计,而到 21 世纪则强调产品设计,把过程设计看成是产品设计中的一个子课题。而且,从产品设计观点,化学产品可以分成三大类:基础化学品、工业化学品和组型消费品,如图 1 所示。

基础化学品通常涉及完全确定的分子和分子混合物,这种化学品的制造过程设计和产品设计均在

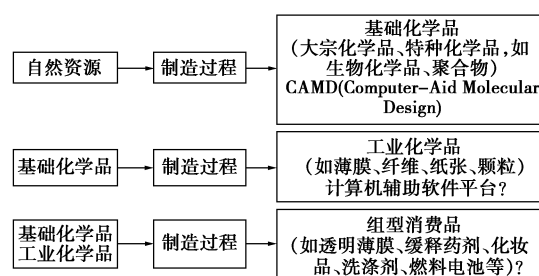


图 1 三类不同的化工产品开发的不同要求

20 世纪研究得比较成熟,有一系列流程模拟和计算机辅助分子设计软件工具可以使用。工业化学品的性质一部分可以用热物理和传递性质表示,但另一些性质则是要满足客户要求的,如微观结构、粉体颗粒度分布、流变学性质等。这类产品如同基础化学

收稿日期:2009-10-24

作者简介:杨友麒(1935-),男,大学,教授级高工,中国系统工程学会过程系统工程专业委员会副主任,从事化学工程、过程系统工程、计算机应用等方面的研究, yang@pku.edu.cn。

品一样也很少由最终消费客户购买。最后一类组型消费品 (Configured-customer products) 是由基础化学品或工业化学品制造的, 如透析设备、太阳能脱盐设备、洗涤剂、缓释药剂、化妆品、燃料电池等。这类产品会直接销售给消费客户, 而且往往其三维形态也至关重要。

从上面介绍可以看到, 不同类型的化学品开发过程是不完全相同的, 有人提出了一套“级—门产品开发过程 SGPDP”, 将整个过程分为 5 级: 概念—可行性研究—开发—制造—产品推介^[4]。很显然, 只有第 1 类产品有比较成熟的计算机辅助工具, 而第 2、第 3 类产品设计还缺乏模型化的工具, 而这正是当前研究的热点。但是以下 2 类产品的设计与开发手段均已投入很大力量, 正在完善之中^[4]: 一是能量相关产品, 如燃料电池、太阳能电池、生物燃料电池及氢存储; 另一类是环境相关产品, 如新吸收剂、去色剂、絮凝剂、反渗透膜等。这种新开发的计算机辅助产品设计平台, 应是开放式结构、用户界面友好的工具软件包, 它能快速“接入”不同来源的数据和工具的集成平台, 可以用于: ①对指定的分子结构产品, 快速选择化学反应合成路线; ②物性数据库 (热力学、动力学和传递过程) 以及对重要工业化系统进行数值计算方法; ③对能满足指定性能的产品快速筛选, 并对其工艺制造过程的经济性能、环境问题及安全问题进行快速评估和优选; ④固态物加工计算。

这种开发过程能从类似的产品预测未来产品性能、化工产品数据库及技术, 它应能支持对指定产品性能时搜索可能满足要求性能的化合物群。例如, 通过以现有材料性能为基础的数据库来预测新材料的性能^[5]。

微化工系统已得到长足发展, 不论在快速分析、化学筛选实验乃至特种化学品商业化生产方面均已发挥显著作用^[6-8]。

纳米技术是 20 世纪末发展起来的最重要、影响最广泛和深远的高新技术。所谓纳米技术就是在单个原子、分子乃至分子团的层次上了解、控制和调节物质结构的能力, 其目的是创造由其微观结构决定的本质上新的性质和功能性的材料、设备或系统。2005 年美国麻省理工学院 MIT 的 Stephanopoulos 提出“分子工厂”作为下一代加工尺度前沿^[9], 他们提出纳米过程系统工程, 要对于这种“纳米尺度加工工厂”的设计、模拟、操作和控制研究一整套理论和工具, 当然现在仅仅是开始。

纳米过程系统具有与常规尺度不同的特点, 因

此带来了新的挑战。例如, 可以把生物细胞看成为一个典型的纳米过程系统——“分子团工厂”: 在一个真核细胞中, 原生质细胞膜定义了工厂的边界, 它选择性地允许分子流流进和流出, 而细胞器 (也就是细胞核、原生质网膜、核内体、线粒体和溶酶体等) 代表“分子团单元操作”。以这种“分子工厂”为对象的纳米过程系统工程受到以下几个方面挑战:

(1) 描述分子工厂的尺度精确度与常规工厂差别巨大, 其位置精度要达到几埃至几纳米。

(2) 物料的性质特征描述不再能用平均值, 因而是基于“物料连续性”假定。而对于纳米过程, 当液体厚度尺寸为 10 个分子以上时“物料连续性”假定还可以适用, 而当用分子团单元操作构造分子工厂时, 就不再能用连续性假定, 而只能用单个原子或分子来描述了。

(3) 设计和制造的方法论原理不同。常规加工过程设计与制造均是“自上而下”(Top-Down) 的多层递阶模式, 而纳米加工过程则是“由底而上”(Bottom-Up) 的自装配 (Self-assembly)、自组织 (Self-organization) 过程。显然, 自上而下无法达到这么精细的精确度。

(4) 操作控制原理不同。常规加工过程的时间特征常数通常以分钟计, 而操作循环周期为几个小时或更长; 到微化工厂时间特征常数为几秒, 操作循环周期只有几分钟, 其控制方法多为多变量中央集中控制/分布控制回路—中央协调控制。但对于纳米过程时间特征常数可加快到毫秒, 而操作循环周期只有几秒, 只能用自调节控制 (Self-regulation Control)。

(5) 制约纳米过程的规律不同。传统过程系统工程规律不能适用于纳米尺度的过程, 从本质上来说, 那些自装配、自组织、自调节的纳米过程属于复杂系统的研究范畴^[8]。

2 间歇过程系统工程为多产品、多目标间歇过程的设计和操作提供理论基础^[10-12]

长期传统观念认为只有连续过程才是先进的, 与此相反, 间歇生产过程并非是落后的生产方式, 它是随着精细化工发展越来越多用的方式。根据统计, 按产值计算, 化工行业生产方式的 45% 为间歇过程, 55% 为连续过程; 食品与饮料生产中间歇过程占 65%, 而制药行业间歇过程竟高达 80%。因此, 对这类生产过程的研究具有本质的重要性。

由于间歇生产过程有以下特点, 所以常规连续

过程的设计和操作规律往往不能适用: ①不确定性。由于生产的三要素是产品市场、制造工艺、完成这一工艺的设备, 这在连续生产中设计时就固定好的, 但在间歇生产中3个要素都是经常变化的。②不连续性。由于操作按处方规定的顺序进行, 使过程的工艺条件总在改变。③非稳态性。这将给动态过程的控制带来挑战。④多种生产共享资源, 优化利用问题突出。一个设备在不同时间段要生产不同的产品, 在不同的时间段要形成不同的设备组合。因此, 优化调度问题显得非常突出。

间歇过程系统最优化问题主要分为2类, 一类是设计 (design) 问题, 另一类是生产进度安排, 或称排序 (schedule) 问题。间歇过程设计是指给定总生产时间以及要生产的产品种类、产量、价格, 求出满足要求且在经济上最优的设备配置, 常见的目标函数是使设备投资最小, 要确定的变量有设备的类型、尺寸、数量等, 甚至还包括一个可行的生产进度表。间歇过程的生产进度安排问题是在给定设备配置 (如设备尺寸、数量、类型) 和各产品的需求量的情况下, 确定一个最佳的生产策略, 使某个目标最大或最小, 常见的目标函数有: 使生产所有产品的总时间 (makespan) 最短; 总的平均拖期 (产品生产时间与交货时间之差) 最短等。要确定的主要是各产品的加工顺序, 各加工步骤的起始时间和完成时间等。

间歇过程最大优势是它能够在同一套装置上通过设备、时间、原料和能量等的共享而灵活方便地生产多个产品。因此特别适合于多品种、小批量、工艺复杂和附加价值高的化学品。与此同时, 由于间歇过程以分批的方式生产多个产品, 其设备和时间等的利用率比较低, 同时在生产中不同产品或者同一产品的不同批次可能会同时对某些设备提出加工要求, 因此如何有效地安排生产过程, 妥善地根据市场需求或生产任务分配设备及时间, 以提高设备利用率, 缩短设备闲置时间, 从而缩短总生产时间, 提高间歇过程的生产效率和经济效益成为间歇过程最优化中的重要问题, 亦即间歇过程的生产排序问题 (亦称生产计划和调度问题)。这一问题的定义为: 在一定的设备 (反应器、分离装置、中间储罐等) 和其他限制条件下, 确定各产品在不同设备上的加工次序和时间以使某个经济-技术指标达到最优, 如总生产时间最短或产品交货的脱期最短。

间歇过程生产调度问题是一种复杂的优化问题, 因为其影响因素很多 (自由度大), 涉及多产品、多目标优化问题, 而且不确定性因素也比较多, 其复

杂性可以由表1看到。

为了进一步理解其复杂性, 下面通过一个案例加以说明。

表1 间歇过程调度问题分类^[11]

	分类
①过程流程	续贯式(单级;多级) 网络式(任意的)
②设备配置	固定的 可变的
③设备联接	部分连接(受约束的) 全部联接
④仓储策略	无限中间储槽(UIS, Unlimited Intermediate Storage) 无中间储槽(NIS) 有限中间储槽(FIS, Finite Intermediate Storage) 零等待(ZW)
⑤物料传输	即刻的(可忽略) 费时的[管道;储罐(无管道)]
⑥间歇尺度	固定的 可变的(有混合与分割)
⑦间歇处理时间	固定的 可变的(依单元设备尺寸)
⑧需求模式	订单日期(单产品;多产品) 调度水平(固定要求;最小/最大)
⑨制度改变	没有 依单元而异 依顺序而异
⑩资源限制	没有(仅取决于设备能力) 分散式 连续式
⑪成本	设备 公用工程 仓储 制度变化
⑫不确定性	确定的 随机的

美国 Purdue 大学开发了一个 SimOpt 的软件平台, 提供间歇过程供应链的通用计算软件^[13]。这是以三大模块为基础的集成平台: 以 Monte Carlo 模拟处理各种不同不确定性的模拟模块; 以数学规划及直观推断法等优化资源配置的确定性优化模块 (DOM, Deterministic Optimization Module); 以在实体和加工能力之间协调进行高层决策的随机性优化模块

(SOM, Stochastic Optimization Module), 如图 2 所示。用该方法来解决一个间歇生产的三级供应链的例子: 考虑 3 个产品, 1 个在生产, 2 个在包装和仓储; 生产与仓储均有不确定性(市场需求不确定), 如图 3 所示。该优化目标是设定仓储水平使产品滞留成本最少。生产条件: 有 7 种生产方案, 有些任务同时需要多种设备, 有 10 个多目的设备, 生产准备和清洗要花费较多时间, 有些任务需要持续数月时间, 加工时间不确定。对于这样一个不太大的课题, 一般应用的 SimOpt 计算成本是很高的: 用 SOM 寻找 $10^3 \sim 10^4$ 个决策点, 每一个决策需要 $10^3 \sim 10^4$ 迭代, 每一个迭代需要几秒钟到几分钟时间完成。这样, 计算时间 = $10^4 \times 10^3 \times 1 \text{ min} = 1\,000 \text{ 万 min}$, 显然用普通微机无法完成。

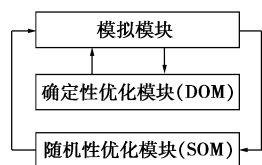


图 2 以模拟为基础的供应链优化软件包 SimOpt 框架

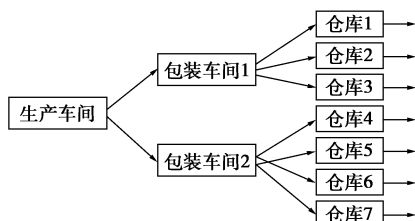


图 3 三级间歇生产案例

总体来说, 间歇过程系统工程的发展比连续过程差距较大, 还不能满足精细化工发展的需要, 究其原因是 2 个方面造成的: 一方面, 由于间歇过程系统本质上比连续过程系统复杂; 另一方面, 由于传统的规模经济以连续过程为主导, 科研投入自然向研究连续过程倾斜, 间歇生产过程的研究长期比较薄弱。这种状况是到了应改变的时候了。

3 供应链的优化与协同研究为企业做强提供竞争力^[14-19]

供应链优化意义重大, 供应链成本约占化学工业公司销售总额的 10% (国内销售) ~ 40% (出口外销), 占净增加值的 37% (比其他行业高, 例如汽车行业为 28%; 建材工业为 26%)。但从另一方面看, 炼油化工行业的供应链优化程度相当低下; 从供应

链效率看, 效率不高, 仓储量高, 供应链上的各环节存货量占年需要量的 30% ~ 90%; 经常有 4 ~ 24 周的最终产品压在链途上; 循环周期长, 通常在 1 000 ~ 8 000 h, 其中只有 0.3% ~ 5.0% 涉及增值操作; 供应链中原料利用效率很低, 进入产品的原料是少数, 精细化工和制药业只有 1% ~ 10%, 所以优化空间很大。更重要的是 21 世纪是全球化时代, 企业的竞争已不是一对一的竞争, 而是供应链与供应链之间的竞争^[15]。

美国后勤管理协会给出的 SCM (Supply Chain Management) 定义为: “SCM 包括后勤管理的全部活动, 特别重要的是, 它也包涵与渠道合伙人(可能是供应商、中间商、第三方服务商或用户)的合作与协调。归根结底, SCM 就是把供应和需求管理在公司内部及跨公司之间集成在一起”。这种宽泛的 SCM 包括 11 大功能^[16]: ①商务优化; ②需求计划; ③供应及材料计划; ④供需平衡; ⑤生产调度; ⑥仓储目标设定及运用; ⑦后勤网络战略及运用; ⑧流动资产管理; ⑨运输管理; ⑩货运车船及货款支付; ⑪定单管理。

2005 年 Accenture 公司在全球 250 个化学公司做了供应链最佳实践的调查, 其结果表明: ①现在可行的信息支撑技术只有一部分被使用, 认为用得好的不到 10%; ②虽然有 70% 的公司说已应用订单管理和商务优化集成, 但涉及 11 个功能均有应用的公司不到 30%; ③化学工业中协同 (Collaboration) 应用是比较差的, 本来可以在供应商—运输商—制造商—销售商—客户之间进行信息协同的, 但化学工业中却很少这么做, 供应链两端开展协同还处于“摇篮阶段”; ④在需求预测方面, 通常最佳实践已做到误差 $\leq 10\%$, 而化学工业中误差尚有 20% ~ 40%; ⑤虽然有 70% 公司已与 ERP 系统集成, 但 80% 均需要手工操作, 没有实现自动化。

当前需求拉动时代的 SCM 要求建立自适应需求驱动网络 (Adaptive Demand Driven Networks), 也就是要把过去线性供应链变成一个需求驱动的适应性的后勤网络。这种由“链”到“网络”至少包括三维向的协同, 并且要压缩网络内部的联接时间。这种三维协同空间包括: 垂直供应链维——公司的供应、生产、配送、客户; 水平协同维——同类公司之间的协同, 包括交换交易 (Swap arrangements)、后勤资源合伙联营、运输工具的回程载荷; 第三方服务供应商维, 如图 4 所示^[14]。

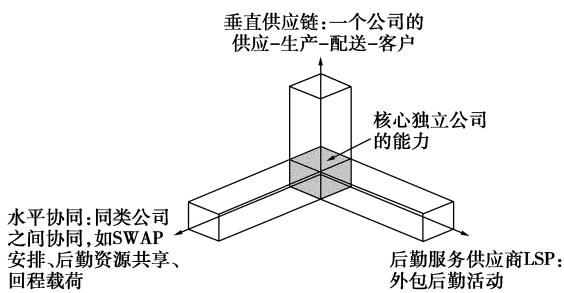


图4 自适应需求驱动网络三维协同

4 多尺度过程集成为全企业优化运营提供支撑^[20-32]

现代过程集成已经由传统的常规尺度、以单元操作设备为基础的集成扩大成多学科、多尺度的、从小到生物基因直到整个供应链的集成。这就要求过程模型化跨越多学科,即从量子化学、计算化学、物理化学、反应动力学、传递理论直到化学反应工程、大系统理论,还要涉及复杂性理论。按时间尺度看,可以由飞秒(10^{-15} s),对应一个分子在化学反应时的原子行为,到描述分子振动的纳秒,到工业操作的几小时,直到环境中污染物的降解过程要几年时间(10^8 s)或更长。从长度来看,从纳米(10^{-9} m)尺度为研究对象的纳米过程系统工程到以大气、海洋及土壤与过程工业关系为研究对象的绿色过程系统工程,这种多尺度过程集成的关系如图5所示^[28-29]。

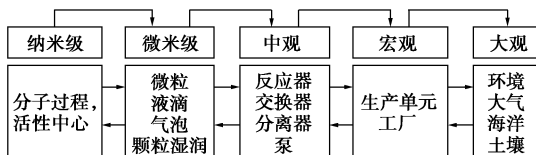


图5 多尺度过程系统集成的框架示意图

基于这种多尺度过程集成技术使得新世纪新的分子管理运营优化技术得以实现,其目的要使每个进入企业的原料分子,在流经整个供应链中达到最大的增值。Exxon-Mobility公司开发了一套“原油指纹系统”,从原油开始就建立分子水平的“指纹信息”,目的是“把正确的分子,在正确的时间放到供应链的正确位置上”,从而使每桶不同的原料油产生最大的价值^[26]。原油指纹信息的生成是用原油采样放进光谱分析仪中,通过光照射产生一个特定的光谱图,然后将此光谱图输入计算机中,与已有的图谱模型进行比对,从而得出其分子组成。这种分子管理的一个关键特点是:一方面要改进下游加工效率;

另一方面还要提高所有炼化装置的利用率(开车率)。这就要求按照每个炼油和化工厂的现场实际来建模,以便把装置数学模型、操作人员的装置最佳性能知识和销售部门的市场经济模型结合起来,从而得到一个现场提高运行效率,使高产值产品收率最大化的特定运行计划。这种分子管理在全球及区域实施还要使配送网络优化,包括原油采购分送、仓储管理及水运船只/运输车辆的调度优化。

这套分子管理系统投入运行后,已使该公司2007年全球下游炼油化工业务部获得7.5亿美元的税前效益^[31]。

5 绿色过程系统工程为企业的可持续发展 and 生态工业园区建设提供支持^[33-41]

日益严格的环保和节能要求,促进了绿色过程系统工程的发展,要求过程系统工程不仅在技术和经济上实现优化,还要在环保和节能节水减排方面实现优化。笔者在2003年就提出发展绿色过程系统工程^[33],这几年已有了不少进展。下面仅就几个热点简要介绍如下:

(1)热交换网络 HEN 和质交换网络 MEN 的方法在节能节水减排中获得广泛应用^[35-37]。以夹点技术为基础的能量集成已从设备装置发展到全局系统能量集成,在节能减排中取得显著效益^[36]。而在质交换网络 MEN 方面,首先是围绕节水减排的水网络优化也取得很大实效^[37]。根据我们对10多个企业节水项目的经验,国内炼油化工企业的节水减排的水网络优化空间相当大,对炼油企业而言,可以节水15%~20%;对化工企业可达20%~30%;对于精细化工、食品/饮料企业甚至可达40%~50%。

(2)热力学分析方法——■分析和场分析。Bakshi提出了一个把工业生产系统与生态系统流一起来进行热力学分析的框架方法。生态学家 Odum 于20世纪80年代首创把热力学分析方法运用于自然生态系统及国民经济系统,提出场(Energy)分析理论。场为任何资源、商品或劳务在形成过程中直接或间接使用的太阳能。Odum等利用场定义出一系列新的反应系统效益的指标,如场投资率、场产出率、环境的负荷率、系统可持续发展指数等^[38]。

热力学第二定律分析方法首创于1970年,到20世纪80年代达到高潮,开辟了热经济学方法。但到90年代似乎就开始走下坡路,在将热力学方法用于环境影响分析方面缺乏新突破,意大利的 Sciubba

虽然提出了扩展 ■ 计量 EEA (Extended Exergy Accounting) 的概念,也就是要将环境修复的费用打进成本,但距离实际应用计算还有一段距离^[38-39]。我们期望 21 世纪在这方面能有所突破。

(3) 生命周期分析方法 (Life Cycle Analysis, 简称 LCA)。LCA 通过识别和量化所用的能量、原材料以及废物排放来评价与产品及其行动有关的环境责任,从而得到这些能量和材料应用以及排放物对环境的影响,并对改善环境的各种方案做出评估。评价包括产品的整个生命周期,即从获取原材料、生产、使用直至最终处置的全过程。LCA 已被纳入即将全面推行的 ISO 14000 环境管理体系,将成为 21 世纪最有效的环境管理工具之一^[35]。

工业生态系统分析方法与 LCA 相似,有研究者甚至认为 LCA 是工业生态系统的一种简单形式,因此 LCA 的许多研究方法和模型可以为工业共生系统集成借鉴和应用。当然,应该强调的是,LCA 与工业生态系统研究还是有不同的地方,前者是面向产品、资源和服务,而后者是研究工业系统间物料和能量流。

近年来清华大学还将现有的 LCA 方法加以扩展,从产品的环境评价扩展到包括经济、环境和社会的多层面可持续发展评价模型。他们将产品生命周期分成 5 个阶段:原料获取→生产过程→运销过程→使用过程和循环过程,然后在每个阶段内部为每个因素都建立多个评价指标。然后利用多指标综合得到经济总指标、环境总指标、社会总指标及综合指标^[41]。

为了推动 LCA 的广泛应用,各国(主要是欧洲各国)研究机构商业咨询公司已开发了不少通用和专用的计算机软件包,文献^[40]中列举了 20 种,其中著名的有英国的 LIMS、荷兰的 SimaPro、美国的 Matrix Approach 等。

(4) 生态工业园 (Eco-Industrial Parks, EIPs) 集成设计及管理^[40-42]。一个生态工业园集成设计及管理包括以下几个方面的集成:

① 物质集成。这是生态工业系统的核心,通过产品体系规划、元素集成分析、生态工业物质链的构建等,以实现物质的最优循环和利用;

② 能量集成。特别是跨装置、跨企业的能量集成,这是全局系统能量集成的研究领域;

③ 水系统集成。包括企业层次的水网络优化和整个园区的水网络优化,而后者更是当今研究的重点。例如,美国德州大学利用地理信息系统 GIS 研

究了 20 个不同工业设施的水网络,优化配置后总新鲜水用量可以下降 90%,水成本下降 20%;

④ 信息系统集成。

为了便于实现这种生态工业园集成设计,美国环境保护总署 EPA 已开发了一些工具软件包。例如:

① 设备协调工具 FaST (Facility Synergy Tool)。规划者通过输入和输出,用以识别非产品输出的潜在匹配;

② 设计工业生态系统工具 DIET (Designing Industrial Ecosystems Tool)。按照 FAST 输出结果,根据环境影响、成本因素、产生工作职位给出权重,计算出设备配置、尺寸大小、联接、生成的职位数等;

③ 法规经济和后勤工具 REaLiTy (Regulatory Economic and Logistics Tool)。将 FaST 和 DIET 的结果与内装的数据库核查,看在“三废”处理方面是否违反环保法规,经济上是否合理,季节或市场波动的承受力如何等。

但是这些软件工具尚不具备系统优化和智能化的功能,从过程系统工程角度看,还有很大的改进空间。

6 结语

在建国 60 年的今天我们迎来了“加快转变经济发展方式,大力推进信息化与工业化融合,促进工业由大变强”的新时期,这个新时期给化学工业的发展提供了新的机遇,要求我们的企业向着精细化、服务化、可持续化的方向转变,这就给我们企业提出一系列挑战。过程系统工程是过程工业信息化的理论基础,作为一门学科对化学工业的两化融合发展处于十分关键的地位,我们应当为迎接这些挑战做出自己的贡献。同时时代的战略任务也为我们学科发展提供了广阔的舞台。我们应当抓住这个难得的机遇,为我国的 PSE 发展做出更大的贡献,也为国际 PSE 界做出自己的贡献。

参考文献

- [1] 钱宇,潘吉铮,江燕斌,等.化学产品工程的理论和技术[J].化工进展,2003,22(3):217-224.
- [2] Zhao C, Venkatasubramanian V, Reklaitis G V. Pharmaceutical Informatics: A Novel Paradigm for Pharmaceutical Product Development and Manufacture[C]//European Symposium on Computer Aided Process Engineering. Puigjaner L, Espuña A. Amsterdam: Elsevier Science B V, 2005.
- [3] Hill M. Chemical product engineering: The third paradigm[J]. Computers and Chemical Engineering, 2009, 33: 947-953.

- [4] Seider W, Seader J D, Lewin D R. Perspectives on chemical product and process design[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2009, 33: 930 – 935.
- [5] Song J, Song H. Computer-aided molecular design of environmentally friendly solvents for separation processes[J]. *Chem Eng Technol*, 2008, 31(2): 177 – 187.
- [6] 陈文光, 袁权. 微化工系统[M]//展望 21 世纪的化学工程. 北京: 化学工业出版社, 2004: 57 – 71.
- [7] Roberge D M, Ducry L, Zimmermann B. Microreactor technology: A revolution for finechemical and pharmaceutical industries? [J]. *Chem and Engineering Tech*, 2005, 28(3): 318 – 323.
- [8] Yang Youqi. Microscale and nanoscale process systems engineering: Challenge and progress[J]. *The Chinese Jour of Process Engineering*, 2008, 8(3): 616 – 624.
- [9] Stephanopoulos N, Solis E O P, Stephanopoulos G. Nanoscale process systems engineering: Toward molecular factories, synthetic cells, and adaptive devices[J]. *AIChE Jour*, 2005, 51(7): 1858 – 1869.
- [10] 姚平经, 等. 过程系统工程[M]//间歇过程系统的优化. 上海: 华东理工大学出版社, 2009.
- [11] M'endez C A, Cerd' J, Grossmann I E, *et al*. State-of-the-art review of optimization methods for short-term scheduling of batch processes[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2006, 30: 913 – 946.
- [12] Samsatli N J, Sharif M, Shah N, *et al*. Operational envelopes for batch Processes[J]. *AIChE Journal*, 2001, 47: 10.
- [13] Wan X, Orcun S, Pekny J F, *et al*. A Simulation Based Optimization Framework to Analyze and Investigate Complex Supply Chains[C]//Proceedings of Process Systems Engineering 2003. Amsterdam: Elsevier, 2003: 630 – 635.
- [14] EPCA, Cefic. Supply chain excellence in the European chemical industry[R]. Brussels: European Chemical Industry Council, 2004.
- [15] Shah N. Process industry supply chains: Advances and challenges[J]. *Comp & Chem Eng*, 2005, 29: 1225 – 1235.
- [16] Kassmann D, Allgor R. Supply chain design, management and optimization[C]//16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th International Symposium on Process Systems Engineering, Elsevier BV, 2006.
- [17] Lange C F. Best Practices in the global Chemical Industries[J]. *Supply Chain Europe*, 2006, 15(3): 22 – 25.
- [18] Puigjaner L, Guillen-Gosalbez G. Towards an integrated framework for supply chain management in the batch chemical process industry[J]. *Comp & Chem Eng*, 2008, 32: 650 – 670.
- [19] Lasschuit W, Thijssen N. Supporting supply chain planning and scheduling decisions in the oil and chemical industries [C]//Proceedings of FOCAPO 2003 CACHE, CAST Division of AIChE, Austin: CACHE Corp. 37 – 44.
- [20] 孙宏伟. 化学工程的发展趋势: 认识时空多尺度结构及其效应[J]. *化工进展*, 2003, 22(3): 224 – 227.
- [21] Pablo J J. Molecular and multiscale modeling in chemical engineering: Current view and future perspective[J]. *AIChE Jour*, 2005, 51(9): 2372 – 2376.
- [22] Gani R. Integrated chemical product-process design: CAPE perspectives [C]//European Symp On Computer Aided Process Engineering. Proceedings of ESCAPE. Amsterdam: Elsevier Science, 2005.
- [23] Ng K M, Wibowo C. Beyond process design: The emergence of a process development focus[J]. *Korean J Chem Eng*, 2003, 20(5): 791 – 798.
- [24] Christofides P D, Armaoub A. Control and optimization of multiscale process systems[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2006, 30: 1670 – 1686.
- [25] Vlachos D G, Mhadeshwar A B, Kaisare N S. Hierarchical multiscale model-based design of experiments, catalysts, and reactors for fuel processing[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2006, 30: 1712 – 1724.
- [26] Exxon-Mobile Corporation. Molecular management starts with a fingerprint[J]. *The Lamp*, 2006, 189: 11 – 12.
- [27] Gani R. Integrated chemical product-process design: CAPE Perspectives [C]//European Symposium on Computer Aided Process Engineering. Puigjaner L, Espuñia A. Amsterdam: Elsevier Science B V, 2005.
- [28] Charpentier J C, McKennab T F. Managing complex systems: Some trends for the future of chemical and process engineering[J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59: 1617 – 1640.
- [29] Charpentier J C. Perspective on multiscale methodology for product design and engineering[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2009, 33: 936 – 946.
- [30] Grossmann I. Enterprise-wide optimization: A new frontier in process systems engineering[J]. *AIChE Jour*, 2005, 51(7): 1846 – 1857.
- [31] Exxon-Mobile Corporation. Summary Annual Report, 2007[R]. [2009 – 09 – 10] <http://www.exxonmobil.com/Corporate/about.aspx>
- [32] Reklaitis R. Enterprise-wide decision support systems: PSE Contributions & Promise[C]//European Symposium on Computer Aided Process Engineering. Puigjaner L, Espuñia A. Amsterdam: Elsevier Science B V, 2005.
- [33] 杨友麒, 成思危. 现代过程系统工程[M]//绿色过程系统工程, 北京: 化学工业出版社, 2003.
- [34] Shi L, Yang Y. Green Process Systems Engineering: Challenges and Perspectives[C]//Proceedings of PSE'2003. Amsterdam: Elsevier Science, 2003: 600 – 611.
- [35] 龚俊波, 杨友麒, 王静康. 可持续发展时代的过程集成[J]. *化工进展*, 2006, 25(7): 721 – 728.
- [36] 杨友麒. 节能减排的全局过程集成技术的研究和应用进展[J]. *化工进展*, 2009, 28(4): 540 – 548.
- [37] 冯霄, 刘永忠, 沈人杰, 等. 水系统集成优化[M]. 北京: 化学工业出版社, 2008.
- [38] Jo Dewulf H, Bakshi B R, Sciubba E. Exergy: Its potential and limitations in environmental science and technology[J]. *Environ Sci Technol*, 2008, 42(7): 2221 – 2232.
- [39] Hau J L, Bakshi B R. Promise and problems of emergy analysis[EO/OL]. [2009 – 08 – 10]. <http://www.chem.eng.ohio-state.edu/%7Ebakshi>.
- [40] 张锁江, 张香平. 绿色过程系统集成[M]. 北京: 中国石化出版社, 2006.
- [41] 金涌, de Swaan Arons J. 资源、能源、环境、社会: 循环经济科学工程原理[M]. 北京: 化学工业出版社, 2009.
- [42] 潘强, 方佳, 马晓虎. 克拉玛依石化生态工业园的信息化应用实践[C]//第十二届中国化工学会信息技术应用专业委员会年会论文集, 北京: 中国化工学会, 2009. ■