

商务决策和供应链优化

过程系统工程和我国化学工业信息化

杨友麒

(中国化工信息中心, 北京 100029)

摘要:过程系统工程是过程工业信息化的指导理论。结合我国 2020 年化学工业信息化发展规划,并参照美国 2020 年化学工业技术发展设想和第八届国际过程系统工程会议(PSE '2003)提出的观点,对如何用过程系统工程理论指导我国今后化学工业信息化做一些探讨。

关键词:过程系统工程;信息技术;科研开发;设计;生产运行;供应链;集成

中图分类号:TQ02;TP11

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2004)S2-0001-11

Process systems engineering and the informaziation of chemical industries in China

YANG You-qi

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

Abstract: Process systems engineering (PSE) is the theoretical guidance of informaziation of process industries. Based on the 2020 long-term informaziation development plan of Chinese Chemical industry and the materials of the 8th International Symposium on Process Systems Engineering (PSE '2003), author tries to indicate how to apply the recent progresses of PSE to meet the requirements of informaziation of chemical industry in China.

Key words: process systems engineering; information technology; development; design; production operation; supply chain; integration

“十六大”报告中指出:“信息化是我国加快实现工业化和现代化的必然选择”,“要坚持以信息化带动工业化,以工业化促进信息化,走出一条科技含量高、经济效益好、资源消耗低、环境污染少、人力资源优势充分发挥的新型工业化路子”。这也是我国 21 世纪化学工业发展的必然道路。而要实现我国化学工业信息化就应当有一种理论指导,这种指导理论就是过程系统工程。

进入 21 世纪我国化学工业面临以下几个方面的挑战^[1]:

(1)大幅度削减成本,才能参与国际市场的剧烈竞争。根据中国石油天然气股份有限公司的统计,1998 年我国炼油厂加工每吨原油的成本不仅与国际先进水平有很大差距,而且高出亚洲地区炼油厂平均水平的 81%。现在由于原料油越来越多靠进口,而为了满足国家对成品油环保指标的要求,新建重整、加氢等处理装置,使成本进一步上升。

(2)必须大力开发新产品,使化工产品多样化、差异化,才能提高我国化工产品在我国化学品市场的占有份额,进而提高在国际市场上的竞争力。我国石油化工产品总量不足,而各地区产品结构趋同,

使得有些产品供过于求,而一些重要化工产品又大量进口。以 2003 年计,苯乙烯进口量占国内表观消耗量的 74%,乙二醇占 75%,合成树脂占 56%,合成橡胶占 46%。

(3)必须全面开展节能降耗工作,走可持续发展的道路。我国化学工业经济增长很大程度建立在能源及原材料的大量消耗基础上,有时以牺牲环境为代价。我国化学工业的产值为美国、加拿大及墨西哥 3 国之和的 23.8%,但能耗量却相当于 3 国之和,也就是我国化学工业单位产值能耗为以上 3 国平均值的 4.1 倍,而万元产值的污染物排放强度是美国的近百倍。2002 年化工废水排放量占全国工业部门的 17.5%,名列第 1 位;化工废气排放量占第 4 位,固体废物排放量占第 5 位,但危险废物占 60%,为第 1 位。

(4)对市场原料供应及产品需求反应速度必须大大提高。21 世纪的国际市场竞争已发展到供应链之间的竞争,要求企业的商务决策与生产操作决策同步,这就要求从业务管理直到生产控制都要信息化、实时化。我国计划经济时期那种“重生产,轻商务”、“重制造,轻后勤”的传统习惯必须彻底改变。

面向新时代的挑战,过程系统工程扩大了自己的研究领域,向微观和宏观 2 个方向延伸,从分子模拟直到包括供应链和生产执行系统(MES)在内的企业整体优化。下面就结合我国 2020 年化学工业信息化发展规划^[2],并参照美国 2020 年化学工业技术发展设想^[2],就以下 5 个方面来审视过程系统工程正如何指导化工企业的信息化来迎接以上挑战:①科研开发中的信息技术;②设计建设中的信息技术;③生产操作中的信息技术;④企业经营管理中的信息技术;⑤整体集成的智能化。

1 科研开发中的信息技术

如上所述,在当前“快鱼吃慢鱼”的时代,加快科研开发是当务之急,有以下信息技术可以帮助加快科研开发步伐。

1.1 分子模拟为化学新产品开发带来新机会^[2-3]

严格地讲,分子模拟应称为计算分子科学,这个领域从信息化角度又称“计算机辅助分子设计”^[3]。这里研究的重点是获得宏观物化性质与分子结构的关系,进而开发模型结构与活性定量关系(quantitative structure-activity relationship, QSAR),为分子设计提供依据。但宏观性质与微观结构之间又有几个尺度层次,可以分为量子尺度、原子和分子尺度、介观尺度的计算以及用于衔接这些尺度的桥接技术方法。

量子力学是计算化学及多尺度计算的起点,量子力学的计算结果经常用来设计下一尺度——原子尺度模拟的分子力场。一些量子化学软件包(如 GAMESS、GAUSSIAN、MOPAC、UniChem、TURBOMOL、NWChem)通过软件公司的商业化推广,得到学术界和工业界的广泛应用。总体目标是了解和预测大尺度的现象,例如对固体变形及多孔介质中传递的研究始于对电子能级及相关的计算,计算结果将作为下一级更大粒度近似计算的输入。应用量子化学可以比较精确地计算催化剂表面的反应分子活化能和相变,这有助于反应速率的计算,开辟了合理设计催化剂的新天地,通过计算可以对新催化剂进行设计和优化。

与量子尺度下的计算相比,原子或分子尺度下的模拟的使用范围更加广泛。从热力学的相平衡到传递性质(如黏度、热传导性),甚至流变学都可以用分子模拟进行计算。模型系统可以是反应的、相变的、包含同类和不同类组分的,甚至是生物系统。广泛的应用范围造成广泛的学科交叉,如物理学、化

学、化工、生物学、生物化学、地球化学等。研究者和用户的多样性造成的结果是:许多研究计算是为一个特殊目的而编码和执行的,而不是商业化代码,商业化代码采用这些新技术的过程是相当慢的。某些企业集团和软件公司已经发展了更容易使用的分子模拟软件(如 GROMOS、AMBER、CHARMM、DISCOVER),但大多数都集中于生物系统,其周围的环境条件通常是水溶液,而且往往需要非常费力的数据输入。

当前,已能实现在纳秒级分辨率下对原子或分子系统的模拟。对生物化学系统,分子动力学模拟的目标是 1 ms。对相变、动力学和大分子长时动力学计算,则需要更大的时间尺度。一个重要的目标是能够模拟超过 100 万个原子,空间尺度达 100 ~ 1 000 nm 的系统(当前是 1 000 个原子的系统)。发展微秒级的原子或分子模拟方法是化学家所期望的,目前的时间尺度是 50 ~ 100 ns,虽然使用了大规模并行计算机,但时间仍是未能解决的问题。

工业的方向是能够模拟美国材料试验学会(ASTM)对材料的测试,目标是通过大范围的计算找到与专利产品性质相似的替代物。这通常要经过复杂的测试(通常与几个潜在的性质有关,而与任何独立的基本物化性质无关),如可燃性、阻燃性、聚合物的熔融指数、韧性、黏性等。在某些情况下,将这些测试融入目前的实验方法是非常困难的(如确定润滑剂的倾点),而用计算预测技术则可以非常容易地实现。模拟将对现象的解释和知识的理解提供很大帮助。

在介观尺度应用分子尺度的计算结果对研究真实材料是必不可少的,许多真实系统的结构要比原子尺度的结构大得多,而这些结构对介观尺度的性质影响较大。介观模拟方法正在得到日益广泛的关注,大量应用到各种与聚合物有关的研究领域。目前比较流行的 2 个理论是耗散粒子动力学(dissipative particle dynamics,简称 DPD)和动力学密度泛函理论(dynamics density functional theory)。这 2 个理论已经发展成为 2 个工业级的标准软件 DPD 和 MesoDyn,包含在如 Cerius2 的商业软件中。众多研究显示这 2 种方法对介观体系的研究有很好的适应性。目前的计算机硬件和软件的条件限制了介观模拟的广泛应用,如 MesoDyn 在大型并行机上才能得到相对较好的计算结果,而高性能的并行计算机目前尚不太多。

桥接技术是用来连接空间和时间尺度的计算方

法,从量子尺度到原子尺度和介观尺度,从飞秒到分钟或小时。桥接技术的目标是将一个尺度下的计算结果作为下一个尺度计算的输入。

在有些情况下,桥接是没必要的,例如对分子质量很小的分子系统来说,电子结构级别或分子模拟级别的计算结果可直接用作过程级别模型的输入。然而,对复杂分子来说,过程模型并不是分子模型的简单倍增。这类复杂分子及其变化是现代化学、制药工业的核心,因此发展有效的多尺度模型方法来解决这类问题是非常必要的。目前,这是分子模拟中一个最活跃的领域,因为在微系统中微观模型与宏观需求之间的桥接需要也是非常迫切的,它也是微技术模型的一个重要组成部分。

1.2 发展产品工程和建立计算机辅助产品设计平台

1.2.1 产品工程^[4-6]

知识经济时代的特点之一就是创新速度加快,产品的生命周期缩短。每年世界上有100万个新化合物创造出来,仅英国每年约有10万个化合物被评估其制造及应用价值。有的石化企业利润的70%来自4年内开发的新产品,只有10%来自传统的老产品。因此,如何按市场要求设计出合适的化学产品并找到最佳的制造过程,就成为十分迫切的课题,这就是产品工程的任务。这种形势意味着,未来的化学工程师不能只懂得制造过程(process engineering),而且应懂得如何开发有市场前景的新产品(即产品工程,product engineering);而且面向新产品的公司所采用的制造模式往往是柔性制造系统(通常是间歇生产或半连续生产),这种制造系统应当以最快的速度、最高的效率随时组织现有的系统资源来生产出合格的新产品。

所谓产品工程,从内容到方法论均和传统的过程工程有所不同,它研究的核心问题有2个方面:一是如何根据所需要的产品性能来找出产品结构。这里要区分两大类结构产品,即分子结构产品和介观结构产品。前者指产品性能主要取决于其化学分子成分(单一物质或混合物),如药物、燃料等;后者则指一些组成相近或相同,但由于在介观结构上的差异而导致功能上有很大不同的产品。二是知道了微观或介观结构后,如何找到合适的制造过程来生产出质量均匀的产品。除此之外产品工程还要考虑市场销售方面的问题。产品工程研究核心问题示意图如图1所示。

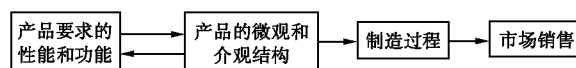


图1 产品工程的主要内容示意图

产品设计与过程设计的比较见表1。

表1 产品设计与过程设计比较

过程设计(Process Design)	产品设计(Product Design)
①判别用连续过程还是间歇过程	①识别客户需求
②初步流程:输入和输出	②产生满足需求的多种替代方案
③确定反应器及再循环流	③选择各种方案中的最优方案
④分离过程及热集成设计	④制造过程设计

首先来决定满足特定物性要求的候选分子或分子混合物。当前正从2个方向进行此项工作:一是建立反映分子结构/混合物结构、不同成分之间交互作用与最终产品性能/质量之间的计算机辅助分子设计模型(computer-aid molecular design, CAMD);二是利用数据库的分析来挖掘有用信息。20世纪80年代以来已陆续发表过以下基于数据库分析的新产品设计方法:PCA(principal components analysis), PLS(partial least square), PCR(principal components regression), LAD(logical analysis of data), 神经元网络法等。最近还用上了遗传规划算法来生成设计与产品质量之间的非线性模型^[7]。

这里还应提到组合化学的方法。它利用微反应器和自动化、信息技术在短时间内合成数目庞大的化合物,再经过高效生物活性或化学物理性能筛选,从中发现一批具有预定性能目标的化合物。这种技术现已用于药物、新型材料及催化剂中,取得了突破性进展中。例如美国UOP公司与组合化学专业公司Symex合作,3~4名科学家每天可进行100~200个聚合反应并及时得到试验结果,而过去做100个聚合反应需要20名科学家做1周试验才可得到结果^[8]。

1.2.2 计算机辅助产品设计平台

开发计算机辅助产品设计平台,以便更多的化学工程师能够运用这种新技术。它应是开放式结构、用户界面友好的工具软件包,是能快速“接入”不同来源的数据和工具的集成平台,可以用于:

①对能满足指定性能的产品快速筛选;

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;

③对指定的分子结构产品快速选择化学反应合成路线;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。

1.3 物性数据库建设

目前,化学化工数据十分庞杂,基本上按学科进行分类,仅适于专业研发人员使用;另一方面,大量新的有关能源、材料和环境问题的数据并不适合传统的学科分类方法,但数据本身仍然带有典型的化学化工数据的特征,对这类数据的不恰当分类,很容

易造成用户的盲目查找,降低了数据库系统的服务质量。“数据链”是一种描述和分类化学化工数据的方法,主要思想是:按照化工产品从初期的研究设计到最终的消费回收所涉及整个生命周期的各个环节来收集、整理、分类和发布数据。应按照“数据链”概念建立一批化学化工数据库,为公众服务。数据链模式如图 2 所示。

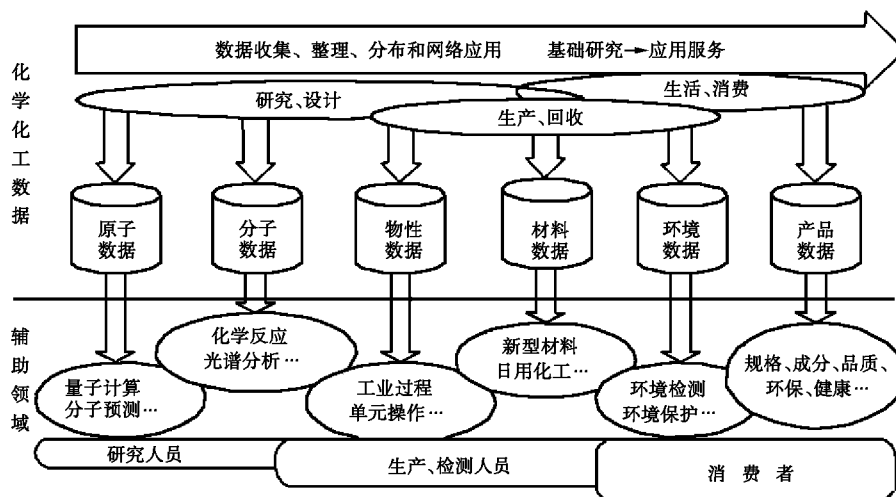


图 2 数据链模式示意图

1.4 计算流体动力学的应用

在复杂的流场中同时发生传质、传热和化学反应一直是数学模拟的一个难题,现在由于计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)的长足进步,该难题正在得到解决。

CFD 模拟可以对各种反应器在各种操作条件下的反应状况进行模拟,包括连续搅拌釜、活塞型反应器、流化床、移动床、膜式、鼓泡塔等反应器,这就使本来需要在冷模及热模中进行逐级放大试验研究的费时费力的工作可以转移到计算机上来进行。例如,乙烯裂解炉的设计,根据传热、传质及动量传递的基本公式,CFD 模型可以计算炉膛内压力、温度和速度三维分布场。该模型还可将燃烧气体的复杂动力学形象化。CFD 模型部分用来评价炉膛的几何形状和烧嘴设计、位置和操作对裂解炉整体性能的影响。美国 KTI 公司在双炉膛燃烧室设计中用 CFD 制成温度和速度的剖面图。德国 Linde 公司用 CFD 评价了不同形式烧嘴布局(纯粹底烧式和混合式)的烟道气循环方式。美国 Lummus 公司开发了将 CFD 与裂解动力学模拟整合的模型,用来预测烧嘴设计对炉管温度分布及裂解反应收率的影响。

CFD 模拟通常将对象反应器用有限元正交分析法分为许多二维或三维的网格,对每一个小格进行

物料、热量和化学反应平衡计算,从而描述出整个反应器的内部情况。如一个低密度聚乙烯高压反应器,用三维模型来计算可分成 166 000 个网格单元才能很好地模拟整个过程。可以想象计算量是非常大的,但由于计算速度提高很快,现已不成问题。

1.5 纳米过程系统工程^[9-11]

纳米系统指的是单元过程在 5 ~ 100 nm 微小通道中进行的微工程技术系统。自 20 世纪 90 年代以来,微加工技术的发展使得这类微工程技术系统应用越来越多。可以列出以下几个主要方面:

(1) 芯片上的化学实验室(lab-on-a-chip): 组合化学的实验手段。

(2) 微全分析系统(micro total analysis system, μ TAS): 大大提高了色谱分析效率。

(3) 化工过程开发放大的新有力手段: 微反应器具有常规设备没有的许多特性,而且可用加和方法进行简单放大,消除了放大效应。

(4) 微化学工厂: 生产那些用常规设备难以制造的材料; 分布式或移动式制造的场合(如剧毒化学品); 用微系统可大大提高产品的收率(如德国的一项研究表明,某化学产品用常规中试设备收率只有 65%, 而用微化学工厂生产收率可达 89%)^[9]。

一方面因为在纳米系统中的许多规律已和常规

尺度下的不同;另一方面化学工程科学(微观)与过程系统工程(宏观)之间存在一个鸿沟,也需要有一个桥梁,所以纳米过程系统工程应运而生。

2 设计建设中的信息技术

2.1 大力发展过程综合的方法

(1)过程模拟仍然是过程合成与设计的基础。采用分布参数的单元操作模型及非平衡级模拟型是模拟技术的发展方向。新型高效分离单元和反应器的模拟。进一步扩展物性数据库,如多相多组分体系、聚合物体系、生物大分子体系、电解质体系等。含固体物质体系的过程模拟研究成为模拟技术中的一个挑战性的课题。

(2)过程综合的建模方法常采用的基本上都是数学模型化方法,即基于能够用数学方程式表达的信息来实现模拟优化与合成。目前已有两大类方法:①依赖系统结构的技术,如超结构方法、状态空间表征法(state-space representations)和工艺图示法(process graphs)等;②与系统结构无关的技术,如质量交换网络(mass-exchange network, MEN),这是20世纪末最重大的进展,似乎比前者更值得注意,现已用于水网络的优化配置。而真实化工过程需要许多模糊信息的支持,将模糊系统同传统的基于物理化学定律的模型方法以及实验结果相结合,可使模型更接近于实际过程,且使计算简化。

(3)过程系统合成的数学模型常常可以归结为一个高维的混合整数非线性规划问题,对于该问题的求解一直是研究的难点。其求解的基本方法有分解法、直观推断法、调优法和结构参数法,随机算法的兴起也为求解该类问题提供了较好的途径,结合多种算法的复合式方法将为解决考虑环境-健康-安全(EHS)的过程合成问题提供了更有利的途径。多目标优化技术则为模型的求解提供了有效的方法。

2.2 在概念设计及可行性研究中加入环境-健康-安全(EHS)评估,特别是环境影响评估

2.2.1 绿色过程系统工程方法^[12-14]

21世纪设计方法的革新是从新厂设计开始就考虑可持续发展的要求,把环境治理从“末端治理”引向“源头防止”。

(1)绿色反应路径合成应以原子经济性反应为基础,考虑EHS的影响,优化出的反应路径将满足绿色化学的物质绿色化和过程绿色的原则。

(2)绿色分离过程系统集成,不仅仅是要停留在

常规的精馏序列的合成上,更重要的是将不同的分离方法,如精馏、结晶、膜分离、萃取等集成起来,在满足费用最小的前提下,同时满足物质和过程的绿色化。

(3)绿色度的定量评价标准的建立和EHS评价准则物性数据库的建立。只有绿色度的科学估算方法建立后,环境目标函数才具有真正的意义。需要适合中国国情的用于概念设计的快速模拟-评估方法及工具。这在筛选新工艺流程中十分有用,与正规流程模拟不同在于其粗略性,即不要求十分准确(例如 $\pm 20\%$ 误差)。但如何将EHS的评价体系嵌入到过程系统的合成中是绿色过程集成的一个难点。

(4)利用热力学分析方法来进行宏观绿色过程系统(例如生态工业园)的分析评价。20世纪90年代提出能值分析(emergy analysis)理论可能是一种有希望的方法,最近Bakshi提出了一种把工业生产系统与生态系统关联起来进行热力学分析的框架方法^[15]。

2.2.2 要开发面向环境的化工计算机辅助设计

(1)需要发展新方法,这可以从工业生态学的面向环境的设计(Design for Environment, DfE)方法中借用一些技术。现在DfE方法包括3个层次:①原材料选择;②过程工厂综合与优化;③行业性工业/地区范围工业的综合。其中所使用的生命周期分析(life cycle analysis, LCA)方法、Petri网络理论方法等,均值得借鉴。

(2)需要改进现有的商用流程模拟软件,以适应环境影响计算及安全分析的需求。为了降低设计阶段带来的不确定性影响,应当在安全、环保评估中把确定性模型与概率信息结合起来。

2.3 化工设计建设中的IT集成管理

2.3.1 当前IT在化工设计建设中应用的范畴

现在IT应用已不是过去那种计算机辅助设计(CAD)的概念,而是涵盖时间上的3个阶段、对象上的3种流、服务方面的5个对象的广泛IT系统:

时间上3个阶段:设计—采购—施工,甚至有外延到整个工厂的生命周期趋势。

处理对象:工作流—资金流—物资流。

服务对象5个方面是:

①工程公司自身,这是主体;②业主:电子报告,审核,查询;③分包商:电子协同工作;④工艺专利商:与工艺设计密切配合;⑤供货商:电子采购,审核交付等。

一个工程项目的实施过程就是在一个个工作包层次上,按规定的作业时间表(进度)将分配到的“资金”有序地转化为“资产”的过程,要使这个过程高效运行,每一步均要借助 IT 技术支撑。

2.3.2 IT 集成管理方法

典型的工程设计集成管理信息系统如图 3 所示。

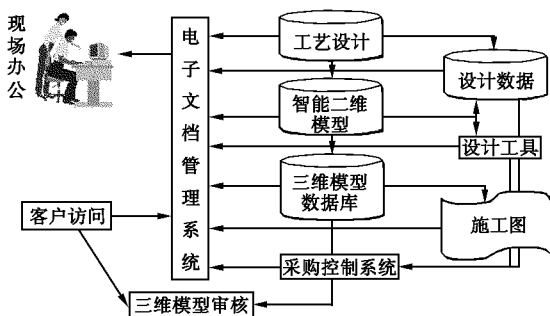


图 3 典型的工程设计集成管理信息系统

项目管理系统的最大特点是开放的、集成的、全过程的综合管理系统,实现定量、动态、系统化的管理与控制,它的核心是数据库。

一个好的项目管理系统应服务于上述服务方面的 5 个对象。项目控制中要首先考虑进度计划的按时完成,同时所有费用必须不超过批准的预算,并按批准的进度使用。费用控制的重点是设计阶段和施工阶段的人工时,以及采购阶段材料及设备的资金需求。质量控制按照公司的质量体系要求实施的同时,还要把质量控制点的确认和质量评定纳入控制流程。材料控制和采购管理的重点应对采购进度和费用的执行状况进行跟踪,并对预算中的材料量实行全过程的跟踪检测。合同管理对合同执行状态进行动态跟踪检测。项目财务对资金安排与支付进行合理的控制。所有这些控制的量在计算机中体现在数据库上,故数据库对于项目的有效实施十分重要,数据的共享程度也就是反映项目控制管理水平的一个重要方面,这也是目前各大工程公司都在尽力实现综合项目管理系统的重要原因之一。可以说数据库是管理项目资源的有效工具,而项目数据库是项目管理与控制的基本资源和运行核心。

在项目的活动周期内,最基本的信息流是反映资源变化和转移的信息,这种转移和变化基本上都发生在工作结构的较低层次(工作包)。作为一种经济活动,从抽象意义上来观察项目的实施过程,就是在一个个工作包层次上按确定的时间表(进度)将分配到的“资金”有序地转化为“资产”的过程。因此,

建立项目数据库需要理清 3 种流:物资流、资金流和工作流。物资流为资金流和工作流提供了基础,它们构成了项目信息流的主体。大量信息的有效组织需要通过代码和编码,它们是用计算机进行项目管理的关键之一,是在数据库中组织数据的核心。

项目管理所涉及的数据库有 3 类:设计(工程)数据库(engineering database);文档和文件数据库(file & document database)、项目数据库(project database)。数据库有动态和静态之分,静态库一般指定额、样板等;而动态库一般指项目执行信息,如主体、状态、属性信息等。项目管理控制与项目数据库的关系如图 4 所示。

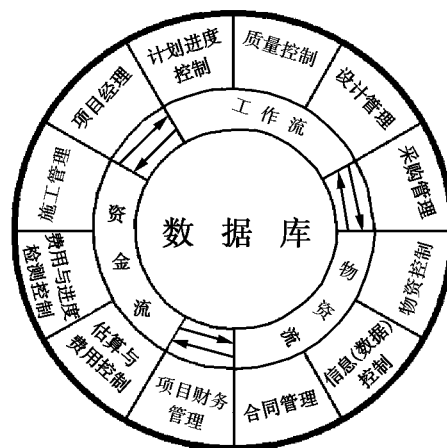


图 4 项目管理控制与项目数据库的关系

2004 年在昆明召开的 PSE '2003 国际过程系统工程会议重点介绍了设计过程的全面管理技术,例如,香港科技大学的 K.M.Ng 提出了 MOPSD(multi-scale objective-oriented process development)的概念来支持产品设计、过程设计和过程综合的整体模型框架^[16]。德国亚琛工业大学(RWTH Aachen)介绍的 IMPROVE 系列软件,通过对工艺过程设计的所有数据和信息提供集中和全程的管理,实现并维护由各种不同设计工具、不同工具商提供的设计工具所产生的设计数据的一致性^[17]。今后,要从项目生命周期管理和工厂生命周期管理发展,这样才会使业主更加满意。

3 化工生产制造中的信息技术

3.1 生产装置先进控制技术

先进控制是基于现代控制理论并借助于计算机实现的一种技术,它主要针对多变量强耦合系统提出的各种控制策略,以达到更高的控制精度。其控制将是以节能、降耗、提高收率为目标,达到“卡边”

控制。目前,对流程行业来说,存在数学模型建立、控制策略的选择、系统的适应性等方面的难点。

3.1.1 动态模型是实施先进控制的有力手段^[18]

由于工业控制对象十分复杂,建模极为困难,目前的办法是在被控的生产装置上做扰动试验,以取得经验性的动态响应关系。面对工业现场随机干扰多、现场生产操作人员不愿意做扰动试验等问题,利用动态模拟方法来建模是实施控制的有力手段。

3.1.2 控制策略是先进控制的核心

生产实际中存在的复杂性、不确定性、信息的不完善等因素,给控制系统的实现带来很大困难。因而,增强控制策略的适应性是实施先进控制的关键问题。为了克服先进控制的难点,可采用以下技术路线:

(1)单变量与多变量建模相结合。考虑到流程行业生产过程的复杂性,难以建立动态机理模型,故首先采用成熟易行的单变量模型辨识技术,对现场实验进行精心设计和安排,尽可能减少输入信号间的相关性,以提高多变量模型的精度,使之满足控制的要求。与此同时,进行多变量建模技术的研究,以减少实验对现场的影响,并能提高模型的精度。

(2)选择合适的自适应技术。自适应控制理论近年来研究较多,但因计算复杂、假定条件太苛刻而难于应用。多年实践证明,研究一些针对石化过程的控制技巧,例如采用区域、可变边界控制等技术,可以提高系统的自适应性。

当今,国内外研究开发的多变量预测控制 MPC 技术已日趋成熟,在世界上已有 2 500 余套装置采用了这种技术,而我国作为一个化工大国只有不到 100 套装置实施该技术。今后几年应首先考虑推广应用这种成熟的技术,获得切实的经济效益。

3.2 基于动态模拟的虚拟工厂模型^[19-20]

20 世纪出现的“桌面工厂”是建立在稳态模拟基础上的,而且通常没有与现场实时数据采集的接口。而 21 世纪的虚拟工厂则具有以下一些新特点:

(1)建立在动态模拟模型的基础上。有的公司(例如美国 ABB, AspenTech 等)一直致力于设计和生产运行都适用的“统一模型”,即统一都用严格机理模型。

(2)既有与现场实时数据采集的接口,也有与动态仿真模拟器衔接的接口。所以既可以用来虚拟工厂操作,调试各种应用层模型,又可以由虚拟切换到现场实际,用来直接指导生产操作。

(3)有多层次的集成:包括信息集成、任务集成

和各种商业应用软件包的集成。

图 5 显示了一个华南理工大学研究的集成平台,这可以看成是虚拟工厂的雏形^[19]。

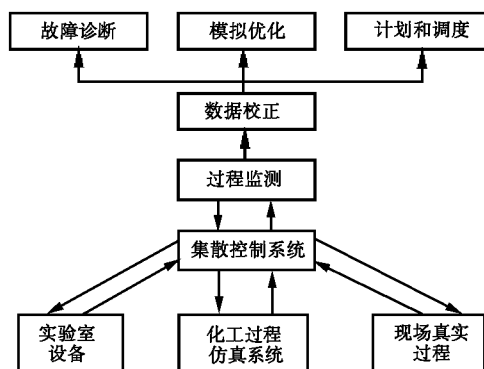


图 5 用于过程系统教育研究和培训的集成实验平台

3.3 生产制造执行系统信息集成平台

生产执行系统(MES)是 20 世纪 90 年代兴起的集成技术, MES 以过程数据模型为核心,连接实时数据库和关系数据库,对生产过程进行实时监视、控制和诊断,进而完成环境监测、单元整合、过程模拟和参数优化,并在生产过程管理层进行物料平衡、生产计划、调度、排产、离线与在线模拟及优化等。可以说它是以成本核算为中心的生产制造厂的信息化核心技术。它应当具备以下一些特点:

(1)开放式现场测量和系统集成应用技术,软测量技术、标准化接口和控制组件的“即插即用”;

(2)过程建模和流程模拟技术(运行模型、资源模型、集成模型、系统模型和经营模型);

(3)基于模型的产品质量先进控制;

(4)设备故障检测与诊断、关键绩效指标(KPI)的监测、设备维修管理;

(5)过程运行系统集成数据标准和软件标准(STEP, CAPE - OPEN, XML, UML 统一建模语言);

(6)以数据信息的采集、存储、关联组织与实时供给等为主旨的“数据引擎增值平台”,以实时数据库和历史数据库为核心构建的企业两级数据库平台、企业数据仓库等;

(7)以生产组织计划管理为代表的“生产组织增值平台”,支持生产计划与调度的优化、库存优化管理与油品调和、原料采购及销售管理、物料与能量平衡计算等;

(8)数据向信息、知识的转化,以数据仓库为基础,应用数据挖掘技术,实现知识管理及智能咨询决策系统;

(9)采用先进的软件工程技术,如中间件、软件、智能体(agent)技术等。

4 化工企业经营管理中的信息技术应用

经营管理中的信息技术应用可以通称为电子商务(e-business),即以信息技术的基础设施和解决方案装备起来的关键业务系统,通过因特网、外联网及万维网与它们的组成部门(例如客户、雇员、供应商、业务伙伴、各种联络渠道及影响者)直接联接起来的各种业务活动。

在这个定义中,“各种业务活动”既有企业内部的,如企业资源计划(ERP),也有企业外部的,如供应链管理(SCM)、电子商务(e-commerce)、客户关系管理(CRM)等。所以,电子商务是把一个企业的物质流、信息流及业务过程管理用信息技术全面装备起来实现网络化。电子商务优化就是要把从一个产品(或工艺过程)设计直到放大生产、投放市场到最后交到最终用户手中所涉及到的每个过程,甚至包括售后服务都加以优化,目的是创造性地、智能化地快速响应市场需求,从而在竞争中取得更大的市场份额。

这是一个过去过程系统工程关注较少,但确是 21 世纪过程系统工程研究的重点。下面就几个热点课题分述之。

4.1 供应链管理的优化

4.1.1 化学工业供应链管理的特点

表 2 化学工业供应链与一般制造业差异比较表

项目	普通制造业	化学工业
供应链模式	多种原材料(零件)制成少量产品品种;离散型模式	少量原材料,制成多种的产品;连续-离散复合型模式
产品定义	货品编码	规格成分
制造产能约束打破加工顺序	比较灵活 可以(虽不太方便)	通常在 100% 负荷操作 不可能或成本极高
仓储条件	可以用一般通用仓库	必须化学品专用仓库(或油库)
库存不足的惩罚	空运为权宜之计	无法补救,失去客户
EHS 方面要求	相对简单,不构成严重问题	要求严格,各地各国政府规定又不同,往往为复杂问题
电子商务	改进“速度”,减少交易成本	通过交换、私用网站来改善协作

化学工业供应链比一般离散加工制造业更为复杂,这是由于其高资本投入、连续性生产、产品批

量大及市场覆盖面广泛等特点造成的。具体的特点有:①原料成本在整个成本经营中比重大;②加工设备投资高,启动和运转费用高,需长周期运行;③两头为离散型,中间为连续型,库存较大,无法避免;④中间产品的运输费用高,区域集成优势大;⑤储存、运输工具多样、专用:管道、船、火车、汽车;⑥价格和需求变化大,呈现周期性;⑦在环境、健康、安全(EHS)方面的要求严格,对化学工业的供应链管理来说是一大难题。化学工业供应链与一般制造业差异见表 2。

4.1.2 供应链管理的组成部分

国际上供应链理事会(Supply Chain Council)开发了一个供应链运行模型(supply chain operation reference, SOCR),认为供应链主要包括四大组件:计划、原料、制作及配送。后来又有人提出应包括六大组件:产品设计、原料采购、制造、输送、存储及销售。这里根据化学工业的特点,我们采用五大组件:原料采购、计划/调度、制造、产品配送及销售,如图 6 所示。

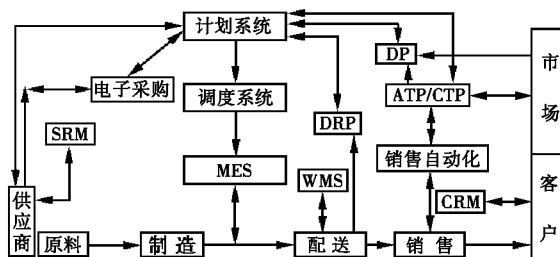


图 6 供应链管理构成示意图

(1)计划/调度:包括生产计划优化、需求计划(demand planning, DP)及供应链资源优化(SCP);

(2)原料采购:包括供应商关系管理(SRM)、电子网上采购;

(3)制作:它应有与生产执行系统(MES)进行接口的能力;

(4)配送:配送需要计划(DRP)系统,库存管理系统运输优化等;

(5)销售:是市场/客户与企业联系的通道,包括承诺保证/承诺能力(able to/capable to promise, ATP/CTP),电子商务、销售管理、CRM 等。

4.1.3 供应链管理优化的进展

这个领域正在吸引越来越多的研究,正从简单应用线性规划做生产计划进入到以模型为基础的整个供应链管理优化。这就出现多现场、多周期的非线性规划(NLP)优化问题。这里既要满足全球市场

要求,协调全球市场的供货和销售战略计划问题,又要和满足客户定单和仓储要求的战术及调度计划相联接,这就要求大规模多目标数学规划求解^[21-22]。

美国 Perdue 大学的 Reklaitis 等以一个以制药厂为背景的间歇操作供应链为例,来试验以模型为基础的供应链优化的数学算法^[23],要求考虑加工时间及机器故障的不确定性。结果证明,这种计算是极为费时的:对于 100 个时间表调度方案要用 120 ~ 150 h 的计算机时。以模型为基础的整个供应链管理优化目前还是科研追求的理想,要做到工业上实用尚需时日。

目前在流程行业,比较成熟的供应链管理技术还要算生产计划优化了。在世界前 100 强的石油和化工企业中,除了中国石油天然气股份有限公司外几乎已全部实施了计算机化的全国乃至全球计划网络优化排产系统。中石化公司利用从美国 Aspen-Tech 公司引进的计划优化软件包 PIMS,2002 年完成了 33 个炼油企业单厂单周期 PIMS 模型的开发,并集成了包括 26 种国内原油、66 种进口原油、56 种代表性产品、30 个市场区域的总部多周期 MPIMS 模型。建立了覆盖 40 家企业的网上排产会议系统和原油资源优化信息支持平台;并利用该系统、信息支持平台和各企业单厂周期型成功地完成了年度计划和季度计划的优化排产工作。改变了延续多年的传统排产方式,实现了新型的网络多媒体互动排产,为提高经营管理决策水平和工作效率提供了有力的技术支撑,经济效益显著。由于中石化进口原油达 6 000 万 t 以上,采购费用高达 900 亿元,如果优化效果 0.5%,每年有几亿元的收益^[24]。

在原料和产品输送优化方面,中石化公司利用 SD-PIMS 软件,按照 676 个中心油库、33 个炼厂供应点、对应 8 300 个运输通道建立的成品油流向优化模型,用于 2002 年三、四季度和 2003 年一、二季度的排产工作,减少了加油站的过量库存,提高了车辆运行趟次,节约了运输成本和财务费用,取得了较满意的效果。

4.2 化学工业中的企业资源计划

4.2.1 企业资源计划(ERP)的概念

企业管理中的最本质问题曾经是物料流动管理问题,也就是:生产计划、产品结构决定、库存记录、采购定单。为了解决这些问题,20 世纪 60 ~ 70 年代出现和推广了物料需求计划(material requirement planning, MRP),解决了控制库存问题。到 20 世纪 80 年代出现了制造资源计划(MRP II)系统,解决了

资金信息与物流信息的集成问题,实现“财务账”与“实物账”同步生成。

20 世纪 90 年代初,随着全球市场的形成,一些实施的 MRP II 系统已经不能满足及时了解瞬息万变的全球市场,也不能迅速响应并组织供应来满足全球市场竞争的要求,提出必须扩大软件的功能,把“前端办公室”(市场与客户)和“后端办公室”(供应商)的信息都纳入到管理信息系统中来。这种扩大功能的系统就应运而生,称为企业资源计划(enterprise resources planning, ERP)。

随着多年来的实践和发展,尤其是互联网的广泛应用,ERP 已有了更多的内涵,而且还在不断地扩展。也就是说,ERP 是被实践检验、凝聚了全球产业管理经验和智慧、可被广泛应用的成功企业的管理哲学,它的宗旨是:通过对人力、资金、材料、设备、方法、信息和时间等诸多资源实行综合优化管理,使企业在激烈的竞争中全方位地发挥其能力,从而取得最好的经济效益。

4.2.2 业务流程重组(business process reengineering, BPR)

BPR 是实现 ERP 的重要环节。如前所述,ERP 是凝聚了全球产业管理经验和智慧的业务管理技术,它适合先进的业务管理模式。如果一个企业的业务流程并不先进,甚至相当低效,那么即使应用 ERP 也十有八九会失败。这就是我国 20 世纪末以来 ERP 应用成功案例不多的原因。

BPR 是美国哈佛大学教授 Michael Hammer 和 James Champy 在 1991 年提出的,他们赋予 BPR 的定义是:“从根本上再思考并彻底的再设计业务流程,以实现在关键的业绩上,如成本、质量、服务和响应速度,取得突破性的进展”。一个“根本”,一个“彻底”很能说明业务流程重组的实质。

4.2.3 ERP 在国内应用现状

要不要立即采用 ERP 技术是在国内引起争议最大的课题。原因是在像化工这类流程行业,20 世纪虽有实验试点工厂企业试用,可惜大部分不成功。虽然,2002 以来 ERP 的中国市场空前繁荣,国内从事 ERP 软件(服务)的厂商已达 200 多家,但化工、石化行业中,大中型企业认真投资实施 ERP 的厂家却并不多。比较重要的有中国石化股份有限公司、浙江巨化集团、大连化工集团、沧州化工集团等,如表 3 所示。

国内大型石化企业采用 ERP 的推动力有 2 个方面:一是为了对股民负责,做到财务透明;二是为

了将主要经营业务信息集成或信息共享,提高决策的科学性及效率,从而提高竞争力。例如中国石化股份有限公司 2001 年决定试点先行、逐步推广的稳重方针,与德国 SAP 软件公司签订合同。中国石化股份有限公司下属的 4 个企业(镇海炼化、仪征化纤、江苏石油、天津石油)的 ERP 试点已于 2001 年下半年启动,实现了物流、资金流、信息流的“三流合一”,这是对传统经营管理模式的一个质的提升。2003 年又进一步推广 7 家企业。

表 3 国内部分化工企业 ERP 应用一览

企业名称	ERP 软件及厂商名称
大连化工集团	用友 ERP-U8(用友)
沧州化工实业集团	新世纪、ERP 系统(华夏新达)
中国石化股份有限公司	SAP
武汉塑料企业集团	金蝶
宿迁彩塑包装有限公司	JSERP(金思维 ERP)
巨化集团	NYSAPcom 系统(上海国通公司)
四川眉山金象化工股份公司	用友 ERP-U8(用友)
北京统一石油有限公司	SAP ERP(高维信诚)
广州橡胶企业集团有限公司	新中大互动管理 i6 系统
天津塑料集团	新中大公司
金湖石油机械有限公司	用友 ERP-U8(用友)
北方氯碱集团有限公司	JSERP(金思维 ERP)

4.2.4 过程系统工程应指导 ERP 在中国进一步发展

(1)要解决 ERP 软件在中国“水土不服”问题,应当出现一批适合中国社会主义市场经济国情的 ERP 软件产品供企业选择。适合中国国情的 ERP 软件可以有 2 种途径产生:一种是本土国产软件公司开发出中国自己的 ERP 软件,如用友、金蝶、浪潮、方正等软件公司正在做的;另一种是国际上著名 ERP 软件公司与中国公司合作,将他们成熟的技术按中国用户需求加以改造,使之本土化,如 SAP 公司和东软集团合作所做的。

应发展成熟的、专门适合石化行业的 ERP 软件。因为不同行业的需求差别很大,而市场细分也是当前软件行业的大趋势。

(2)需要解决 ERP 系统的灵活重组问题。现在的 ERP 软件实施是经过用户的业务流程重组后,形成一套比较合理的业务流程下 ERP 系统。但面向全球性竞争加剧、公司组织机构调整愈来愈多变的形式下,运营过程面对各种变化重组频率的加快,而当前的 ERP 系统实施一次耗资巨大,难以适应未来多变性及实施低成本的要求。

(3)进一步面向供应链管理、电子商务等外部业

务管理的需要,向着业务流程管理(business process management, BPM)发展。BPM 是业务行为的流程化、信息化,其首要目标是协调应用和人的工作,达到业务流程管理、业务流程无缝集成与业务流程自动化的统一。

5 整体集成的智能化

集成技术从 20 世纪 90 年代就成为过程系统工程和 IT 业的热门焦点,但新世纪的特点和以前不同之处在于:①以前是以成本为核心,现在则以利润空间为核心;②过去是由融合与兼并来驱动,现在则由操作运行的复杂化和市场反复无常来驱动;③以前是靠 ERP 为手段来核算成本;现在则靠商务过程电子集成来使企业运营优化。这就要求制造操作和供应链运行的实时动态协调,将可视化贯穿整个价值链。从以上观点看,化学工业的信息化可以分为 3 个时代:集散控制系统 DCS 时代(20 世纪 70~80 年代)、企业资源计划(ERP)时代(20 世纪 90 年代)、企业运营管理(EOM)时代(2000 年以后)^[25]。

5.1 艾斯苯的企业集成平台(Aspen enterprise platform, AEP)

AspenTech 认为当企业注意焦点从“以成本为核心”转变到“以利润空间为核心”时,其信息集成平台也应由 ERP 向新的 AEP 集成平台转变^[26]。

AEP 力图把制造过程与供应链运行集成在一起,包括供应链计划、生产执行系统和供应链执行 3 大组成部分。这样就可以做到使整个企业的供应链系统和生产系统同步协同联动进行。其预计实施效益为企业总销售额的 0.5%~1.5%,对炼油企业则每桶油增加利润 2~4 美分/桶。

5.2 自适应企业^[27]

在 PSE '2003 会议上美国 Carnegie Mellon 大学提出以“自适应企业”来迎接新世纪挑战。所谓“自适应企业”要具备以下几个特点:

①充分利用分布式计算和宽带网络技术;
②决策过程是分布式的,基于多现场分布式数据库;

③决策过程应组织成这样一种状态,使得系统足够灵活机动,能适应变化多端的需求并快速反应;

④把业务、信息技术与过程系统工程集成起来。把前瞻性战略管理和实时性的战术管理结合起来。

这时的企业就像是一个分布式的网络,将许多分布数据库联接起来。数据库的层次结构可以用来以不同的方法组织一组模块,使用户可以从不同的

导航路径到一个特定的工厂、服务或工艺过程,来存取财务或工艺信息。新型的信息系统框架结构和传统的不同之处在于:它吸取了 Internet 成功经验,不仅各装置的控制系统可以通过企业网/互联网相联接,而且每个装置的多层控制系统的各层之间也能相互联接。而在传统的信息系统架构中各装置的控制系统是相互独立的,其数据被采集到集中的实时数据库中来,提供应用系统使用。

自适应企业的信息系统框架如图 7 所示。

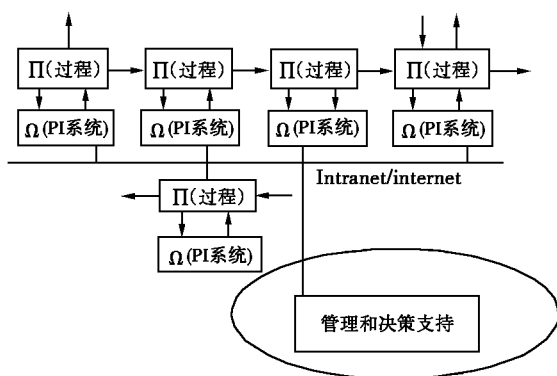


图 7 自适应企业的信息系统框架图

6 结语

(1) 过程系统工程向微观方面扩展,与分子模拟及产品设计(产品工程)相结合,为化工新产品开发带来不可限量的新机会,对提高化学工业企业竞争力具有重要意义。应从现在起就加大这方面的投入,形成计算机辅助产品设计平台,早日为工业应用服务。

(2) 按“数据链模式”组织化学化工数据资源的建设,围绕国家经济及社会发展需要建设一批专题数据库是刻不容缓的任务。

(3) 计算流体力学 CFD 方法的长足进展和应用软件的开发,使推广该方法在化工过程开发放大中的应用的时机已成熟。这对我国开发具有自主知识产权的新化工过程和设备会有很大作用。

(4) 应在概念设计和初步设计中积极采用过程综合方法,特别要在可行性研究中加环境-安全-健康评估。为此,开发化学工业用的“面向环境的化工过程计算机辅助设计”CADfE 平台十分必要。

(5) 建立和推广设计工程公司用的项目管理 IT 集成系统,尽快形成成套的商品化软件包。

(6) 建立和推广虚拟化工厂模型和仿真平台,特别要加强批处理/半连续过程的机理模型和动态仿真平台的开发。

(7) 在逐步推广先进过程控制 APC 的同时,开发化工生产执行系统 MES 信息集成平台。为此特别要注意标准化接口技术,包括硬件/软件接口和后续预留接口。

(8) 进一步发挥数据挖掘技术的作用,并逐步将数据库技术及数据挖掘技术规范化和标准化。

(9) 在加强后勤工作的前提下,在大中型化工企业中普遍推行供应链管理,实现计划优化和过程模拟的集成普及电子商务,实现化工/炼油产品的库存及运输优化。

(10) 解决 ERP 在中国“水土不服”问题,在 2010 年之前发展成熟的中国化工、石化专业 ERP 软件包,并解决 ERP 系统的灵活重组问题。

(11) 重视解决化工信息基础设施和应用系统的行业标准问题:一方面要考虑国际兼容性;另一方面要适合中国国情。

(12) 信息保护和安全保密问题随着信息化的深入和普及将越来越重要,这方面的投入应逐步加大。

(13) 信息工作的领导必须从组织上加强,在企业领导班子中设立专门从事信息主管的副职,类似国外首席信息官(CIO),十分必要。

(14) 信息工作的重要性还必须体现在投资额度比例上。在 20 世纪末,工业发达国家先进化工企业每年用于信息化的资金投入已占到年销售额的 1.5%~2.5%,我国化工企业这方面差距太大,只有 0.1%~0.5%,这意味我国化工行业的信息化水平与国外差距在拉大,这种差距必须尽快缩小。

参考文献

- [1] 谭竹洲.[J].中国化工信息,2004,(10):A2-A3.
- [2] 化工部经济技术委员会.美国化学工业 2020 年技术发展设想[M].1997.
- [3] Achenie L E K, Gani R, Venkatasubramanian V. Computer-Aided Molecular Design: Theory and Practice[M]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2002.
- [4] Wei James. Product Engineering: The Third Paradigm? [R]. Lecture Notes, Princeton University, 2000.
- [5] 袁渭康.[J].化工进展,2004,23(1):9-11.
- [6] Rahse W, Hoffmann S.[J]. Chem Eng Technol, 2003, 26(9): 931-940.
- [7] Zhou X, He X, Chen B, et al. Computer-aided molecular design with BP-ANN and global optimization algorithm[A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering[C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 690-695.
- [8] 朱曾惠.[J].中国化工信息,2004,(7):A2-A3.
- [9] Harper T, Vas C R, Holister P.[J]. Chem Eng Prog, 2003, 99(11): 34-37.

(下转第 19 页)

3 周期所有油品的期末库存均为零,对第 4 周期以后的生产安排可能会有不利影响,所以实际增加的实际利润应该稍低于 19.8%。

表 4 优化产量 万 t

周期	汽油	柴油	液化气	原料油	燃料油
1	4.534	7.421	2.360	1.744	2.790
2	5.078	7.117	1.773	1.305	3.841
3	4.183	6.625	1.965	1.446	2.346

表 5 优化库存量 t

周期	汽油	柴油	液化气	原料油	燃料油
0	3800	3600	600	1200	2800
1	2348	11190	2937	1929	1769
2	5231	8787	0	3827	3756
3	0	0	0	0	0

4 结论

原油采购、生产计划优化和库存管理是炼油企业供应链的重要组成部分,本文建立的多周期优化模型包括了以上 3 个要素,并且求解简单、优化效果明显,可以满足供应链管理要求。

(上接第 11 页)

- [10] Hasebe S. Design and operation of micro-chemical plant-bridging the gap between nano-, micro-and macro technologies [A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering [C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 89 - 100.
- [11] Hessel V, Lowe H. [J]. Chem Eng Technol, 2003, 26(5): 531 - 544.
- [12] Allen D T, Shonnard D R. [J]. AIChE Journal, 2001, 47(9): 1906 - 1910.
- [13] 杨友麒, 石磊. [J]. 化工进展, 2004, 23(1): 17 - 23.
- [14] Bendixen L. [J]. Chem Processing, 2002, (6): 42 - 45.
- [15] Bakshi B R. [J]. Computers and Chemical Engineering, 2000, 24(7): 1767 - 1773.
- [16] Ng Ka M. MOPSD: a framework linking business decision making to product and process design [A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering [C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 63 - 73.
- [17] Nagl M, Westfechtel B, Schneider R. [J]. Computers and Chemical Engineering, 2003, 27(2): 175 - 197.
- [18] Mathur U, Conroy R J. [J]. Hydrocarbon Processing, 2003, (6): 55 - 65.
- [19] Cheng H, Qian Y, Li X. Integration of decision tasks in chemical operation process design [A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering [C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 172 - 177.

符号说明

- B —原油库存量
 c —油品库存费用
 c' —原油库存费用
 D —油品需求量
 I —油品库存量
 K —优化周期数
 M —原油种类
 N —油品种类
 O —油品产量
 Q —原油采购量
 R —原油加工量
 s —油品销售价格
- v —原油买入价
 y —油品收率
 α — M 种油品的总收率
 δ —原油选择系数
- 上标:
 L —下限
 U —上限
 k —第 k 个周期
- 下标:
 i —第 i 种油品
 j —第 j 种原油

参考文献

- [1] Min Hokey, Zhou Gengui. [J]. Computers & Industrial Engineering, 2002, 43(1-2): 231 - 249.
- [2] 陈宏, 何小荣, 陈丙珍, 等. [J]. 化工学报, 2003, 54(8): 1118 - 1121.
- [3] Dejonckheere J, Disney S M, Lambrecht M R, et al. [J]. European Journal of Operational Research, 2004, 153(3): 727 - 750.
- [4] Fisher M L. [J]. Harvard Business Review, 1997, 75(2): 105 - 117.
- [5] 刘晓, 成恩, 诚斌. [J]. 中国管理科学, 2003, 11(3): 30 - 35.
- [6] 隋明刚, 魏巍. [J]. 管理现代化, 2000, 104(5): 28 - 30.
- [7] 何险峰, 周家驹. [J]. 化学进展, 1998, 10(3): 312 - 318. ■
- [20] Mansy M M, McMillan G K, Sowell III M S. [J]. Chem Eng Prog, 2002, 98(2): 56 - 61.
- [21] Grossmann I E. Challenges in the new millennium: product discovery and design, enterprise and supply chain optimization, global life cycle assessment [A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering [C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 28 - 47.
- [22] Kelly J D. [J]. Chem Eng Prog, 2004, 100(1): 43 - 50.
- [23] Wan X, Pekny J F, Reklaitis G V. A simulation based optimization framework to analyze and investigate complex supply chain [A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering [C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 630 - 635.
- [24] Wang J M. SINOPEC's reform and IT development [A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering [C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 1 - 6.
- [25] McQuillan D. Enterprise operation management [A]. In: Aspen Technology Inc. Proceedings of AspenWorld 2002 [C]. Washington D C, 2002.
- [26] Pringle S, Williams S. The future of integrated solutions in the process industries [A]. In: Aspen Technology Inc. Proceedings of AspenWorld 2002 [C]. Washington D C, 2002.
- [27] Ydstie B E, Jiao Y. The distributed enterprise integrates, IT and process systems engineering [A]. In: Chen B, Westerberg A W. PSE '2003 Proceedings, Computer-Aided Chem Engineering [C]. Amsterdam: Elsevier Publisher, 2003. 12 - 27. ■