



化学工业的转型升级和过程系统工程 (PSE)

杨友麒

(中国化工信息中心, 北京 100029)

摘要: 针对我国化学工业的转型升级问题, 本文首先介绍了此次转型升级的时代背景, 即国际上第四次工业革命正在迅猛展开, 而国内正面临经济结构的第二次转型, 由传统的工业化社会向现代服务型社会转变。其次, 文中简要介绍了我国化学工业“大而不强”的问题, 在此基础上论证转型的主要方向, 即未来十年我国化学工业应具备的主要特征。最后从过程系统工程 (process systems engineering, PSE) 学科角度, 说明可以在以下一些方面为化学工业转型升级做出贡献: 以客户为中心的新产品开发; 新工艺过程的多尺度开发放大; 为化工制造的智能化转型升级提供理论指导; 为化工企业的节能、节水和生态文明建设提供理论指导等。

关键词: 化学工业; 转型升级; 过程系统工程; 产品结构优化

中图分类号: TH3 文献标志码: A 文章编号: 1000-6613(2018)03-0803-12

DOI: 10.16085/j.issn.1000-6613.2017-2266

Developments of process systems engineering(PSE) for transformation and upgrading of chemical industries in China

YANG Youqi

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

Abstract: The paper discusses the transformation and upgrading of chemical industries in China. The world economic development background is first introduced, namely the progress of fourth generation industrial revolution. Also the economic structure reform in China must be understood which is leading traditional Chinese industrial society transferring into modern service society. Next, “Big but not strong” is the character of Chinese chemical industries which is discussed briefly. Third, the future directions of transformation and upgrading of chemical industries in China are discussed. Finally, the discipline PSE can help this kind of transformation, such are as follows: design of consumer centered chemical products; multi-scale new process developments and scaleup; theoretical guidance for smart transformation and upgrading of chemical enterprises and energy and water conservation in green development of chemical enterprises.

Key words: chemical industries; transformation and upgrading; PSE; product structure optimization

1 第四次工业革命时代的制造业转型升级背景

当前世界总体正在进入第四次工业革命时代, 从二百多年前蒸汽机为代表的机器代替手工开始的工业革命以来, 已经经过 20 世纪前期以石油和电器化为标志的第二代工业革命、20 世纪后期以计算机和自动化为代表的第三代工业革命, 到 21 世纪开始

的十年左右就进入了第四代工业革命时期。这主要是由于信息技术的迅猛发展, 移动互联网-物联网技术、新一代人工智能、云计算技术、大数据技术、智能制造等新技术已经向国民经济各部门和社会生活各方面渗透, 深刻改变着人类社会生活, 成为经

收稿日期: 2017-10-06; 修改稿日期: 2017-12-06。

作者简介: 杨友麒 (1935—), 男, 教授高级工程师, 研究方向为过程系统工程。E-mail: yang@pku.edu.cn。

济发展的新引擎，正在形成新兴产业，甚至成为国际竞争的新焦点。

由于在前三次工业革命中中国落后于世界各先进工业国家，所以在第四次工业革命到来之际，举国上下都有一种紧迫感。从 2015 年起，国务院就发布一系列文件、规划、指示，将重要新技术发展和推广应用提升到国家发展战略层面来推进^[1]。

此外，我国正在面临第二次经济结构转型，从工业化社会逐步向现代服务化社会转化。国际上从工业化社会向服务化社会转变，通常是在人均年收入在 7200~10000 国际元时。而我国 2010 年已达到 8000 国际元，2015 年到达 12000 国际元^[2]，服务业占 GDP 比重已经达到 50.5%、工业占 40.5%、农业占 9%，已经进入二次转型的关键时期。如果说工业化社会主要提供物质解决温饱问题、走向小康，那么现代服务业则要提供服务。经济二次转型是一次供给侧的革命性转变，它将供给侧主要以提供“物质”解决温饱转变到为“人的质量提高”服务。这时发展的驱动力也由投资驱动、出口拉动转变为创新驱动、消费驱动。这里的消费定义不仅是“吃饱穿好”的消费，更主要的是不断“提高广义人力资本”的消费，即通过读书、娱乐、体育、休闲、健康、终身教育、信息、金融等各类知识消费，使得人力资本、健康水平得到提高，形成以人为中心的创新驱动能力^[1-2]。制造业转型的另一时代背景就是资源环境约束强化，目前已进入低碳绿色化的时代。19~20 世纪发达国家依靠化石能源工业化，造成资源环境的恶化，到 21 世纪发展中国家加快工业化更加剧了这一趋势，于是使资源环境约束到达极限。

美国世界资源研究所统计显示，1850—2005 年，全球共排放二氧化碳 11222 亿吨，发达国家排放占全球总量的 72%。美国人均历史累积排放达 1105.4 吨，欧盟 542 吨，世界人均 173 吨，中国 71 吨。巴黎会议各国取得的基本共识为：应保证到 2050 年全球大气温升不超过 2℃。应把大气层温室气体浓度稳定为 450 μ L/L 二氧化碳当量作为长期的排放额度。该额度要求 2050 年全世界的排放量要比 2005 年减少 50%，我国已向国际社会承诺：2020 年碳排放强度相对 2005 年下降 40%~45%；2030 年左右碳排放总量达峰值、碳排放强度相对 2005 年下降 60%~65%的目标。

除此以外，我国还在大力推进循环经济的发展理念，通过“三低一高”（即低开采、低消耗、低排放和高效利用）和 3R（Reduction, Reduce, Reuse）

使资源消耗下降，排放的废料、废水得到重复利用。从而将循环经济由末端治理走向清洁生产，并进一步实现废旧物品再资源化，从而走向生态文明社会。

2 中国的化学工业大而不强极需转型升级

首先，中国在 2010 年左右化学工业销售收入已经超过美国，成为世界上最大的化学品生产大国。到 2014 年中国化学工业的主营收入已经超过第二位的美国和第三位的日本加起来的总和（见表 1）。所以，就经济体量而言，中国已成为世界最大的化工生产国。

表 1 2014 年世界化学工业主要生产国主营收入统计表^[1]

国家	产业主营收入/万亿 RMB	名次
中国	8.76	第一
美国	4.94	第二
日本	2.30	第三
德国	1.60	第四

但是，“大而不强”表现在以下几个方面。

(1) 前一段发展中，着重追求产量、产值使得大宗低端化学品产能过剩，而高端化学品需要大量进口，使得我国炼油化学工业成为最大的贸易逆差行业。

有机化学工业中的合成树脂、合成橡胶和合成纤维“三大合成材料”进口量占总消费量的 20%~30%（表 2）。2014 年石油和化工行业消耗外汇达 2819.8 亿美元。

表 2 2014 年三大合成产品的进口数量^[3]

产品项目	表观消费量 /万吨·年 ⁻¹	进口量 /万吨·年 ⁻¹	依存度
合成树脂	9651.4	3215.3	28%
合成橡胶	665.9	153.2	20%
合成纤维	3274.7	1058.7	30.3%

现以聚烯烃行业为例。聚烯烃行业低端产品如聚氯乙烯、聚苯乙烯、聚乙烯醇等产能过剩，产品线已开始呈现亏损。高端产品缺乏基础，严重依赖进口，自给率只有 38%左右。进口聚丙烯管材专用料、电容膜专用料和聚乙烯汽车油箱专用料、燃气管专用料引进量大且进口均价高，这些品种或国内产量较少，或质量未能完全符合用户的要求。

(2) 自主开发能力弱，竞争力差。我国化工行业平均研发投入占主营收入 1%不到，国家

表 3 2014 年几个特大型公司的主要表现对比

公司名	年销售额 /亿 CNY	世界 500 强 排名	净利润/亿 CNY	利润率	科研开发投入/亿美元	员工总数 /人	人均产值 /万 CNY·人 ⁻¹ ·年 ⁻¹
中国石油化工集团公司	28899	第 3 名	318	1.10%	未公布（石化业平均约 1%）	961703	300.5
中国石油天然气集团公司	22829	第 4 名	1071 (2015 年 324 亿)	4.69% (2015 年 1.6%)	未公布	1602898	142.4
Dow Chemical	3548	第 174 名	226	6.38%	16.5 亿, 占总销售额 2.8%	53000	669.5
BASF	6142	第 75 名	426	6.94%	25.4 亿, 占总销售额 2.53%	112435	546.3
Du Pont	2225	第 320 名	296	13.30%	约 20 亿, 占总销售额 5.5%	52000	427.9

注：数据来源于各大公司 2014 年年报（Annual Report）发表的数据整理编辑，2014 年汇率取 1USD=6.14CNY。

十三五规划在 2020 年争取达到 1.2%^[3]。而 BASF 公司科研开发投入占主营收入 2.5%，Du Pont 公司占 5.5%，Bayer 公司占到 9.1%。2014 年几个特大型公司的主要表现对比见表 3。

(3) 劳动生产率低，人均产值不高，盈利能力差。就利润率而言：中国石油化工集团公司、中国石油天然气集团公司大约只有 1.1%~1.6%；而中国化工集团公司近几年一直在亏损。BASF、DOW 化学都在 6% 以上，DuPont 高达 13%。就国内各行业比较，我国化学工业 100 元主营收入，成本达 87.6 元，而全国规模工业平均成本 85.6 元^[1]。

(4) 品牌国际影响力低。我国自行生产的化工产品名牌罕见，即使是比较擅长的大宗化学品，所用的品牌专利也多为引进，自主研发的牌号只占少数。以上述的聚烯烃为例，自主开发也以跟进为主，真正原创不多。以两个大型石化企业现有的聚烯烃生产为例，某石化公司有 6 套聚乙烯装置、1 套聚丙烯装置，现能生产 176 个牌号的聚烯烃产品，但其中自主开发的牌号只有 32 个，占 18.2%。另一大型石化企业，有 2 套聚乙烯、3 套聚丙烯装置，能生产 367 种品牌的聚烯烃产品，只有 10 种是自主研发的，占 2.7%^[3-5]。

3 化学工业转型升级的方向

大而不强的化学工业一方面满足不了国内现代化建设和国防建设的需求，要花费大量外汇去从国外进口化学品；另一方面，低端化学品产能过剩，一些行业装置开工率不到 70%，大型化工企业盈利能力差，有的还在亏损。这种情形与我国的大国地位极不相称，亟待转型升级。

3.1 产业结构的转型升级

在工业化的过程中一直存在规模经济和范围经济（又称“长尾经济”）两种模式的基本矛盾。长尾经济指的是生产规模小但品种多的经济，其优势前提是“在同一范围内共享资源、分摊成本。”长期

以来规模经济都处于矛盾的主导地位，而长尾经济处于次要地位。这是因为在马克思和凯恩斯的时代，主导的生产力是以分工和专业化为取向的蒸汽机革命，尚不存在以协调为取向的信息技术革命，那时过分依赖协调效应的多品种个性化生产是不符合成本原则的。但现今已处于网络化、智能化时代，小规模、个性化、定制化生产就必然到了优势发挥的时代。从利润上看，规模经济数量大但利润低，而长尾经济则每种产品数量小但利润高（如图 1 所示）。这是转型升级的大方向。

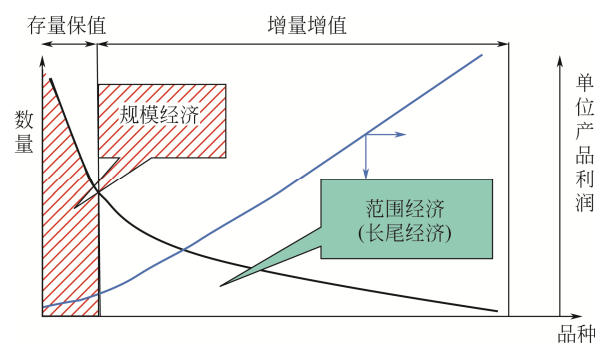


图 1 规模经济和长尾经济的趋势图

具体到炼油和化工行业，产业结构的转型升级应该与此大方向是一致的。按照我国石油和化工联合会的分类，整个行业产业链大致可以分成五大模块^[1]，如图 2 所示。从总体上看，我国石油和化学工业的产品技术结构还是低端的、落后的和同质化的，与世界上的石油和化工强国还有较大差距^[1-2]。

近几年来，世界各国特别是石油化工大国产业结构调整的步伐明显加快，产业在上述第四、第五个结构层次上的投入越来越大，抢占未来行业技术制高点的竞争也越演越烈。以美国的 Dow 化学公司为例，早在 2009 年其首席执行官 LIVERIS 就规划要将公司转向精细化工方向，以 188 亿美元现金并购 Rohm & Haas 公司，然后将费城的 Rohm & Haas

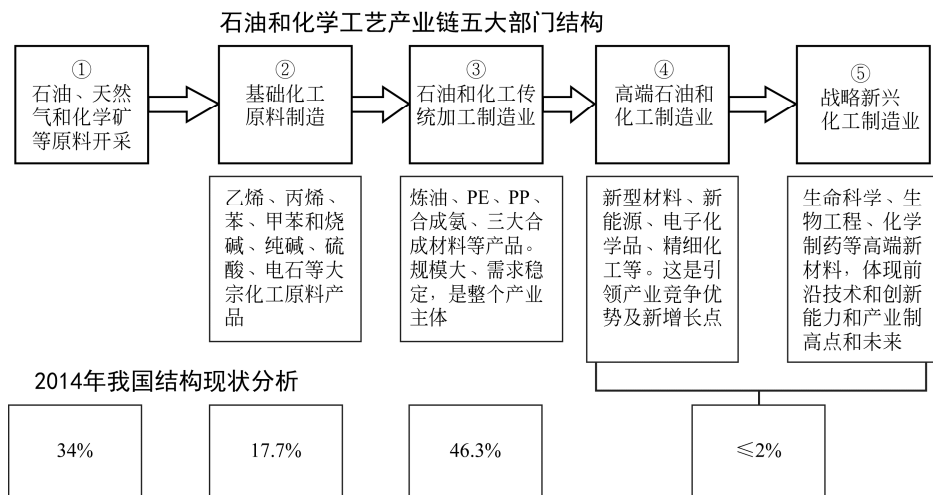


图 2 石油和化工产业链产业结构略图

总部改造为高新材料业务版块，估计产值达 130 亿美元。同时大力整顿 R/D 部门，要求每年要多出新产品，公司员工年轻化。2014 年员工年龄从十年前平均 51 岁下降到 41 岁，他在任的十年内拿出 5000 个新产品；2016 年又将著名硅材料公司 Dow Corning Corp. (11000 人) 全资兼并。此公司是年利润率达 10% 的新型材料公司，并入后使 2017 年 Dow 化学公司第一季度销售额提升 14%。2016 年 LIVERIS 又开始与具有 200 年历史的 Du Pont 公司谈判，按 50/50 合并，真正实现强强联合，成立陶杜邦公司，资产市值达到 1300 亿美元。合并后整合成 3 个独立上市的公司，从而实现股东投资人-客户-公司三赢的方案。这 3 个公司主营业务分别是：农业和食品——农作物保护、种子及农产品加工；材料科学——功能塑料、油漆、基础建设解决方案；特种化学品——电子化学和信息技术品、工业生物学、营养和保健。这样两大化工公司已经将业务全盘转型升级到第四和第五产业^[6-7]。

按照我国工业和信息化部发布的《石化和化学工业发展规划（2016—2020 年）》，国家十三五规划目标是：到 2020 年第四和第五产业在整个产业链中的比重将由 2% 左右提升到 6.5%。按这样的转型升级速度，到十三五规划结束我国与真正化工强国的差距会更大。目前在世界大公司排名前五的中国石油化工集团公司、中国石油天然气集团公司仍然规划自身为“能源化工”公司，还没有看到产品结构全面转型升级的计划。中国化工集团公司进行了大规模的转型升级兼并，和欧洲最大农药种子 Syngenta 于 2016 年 2 月份达成收购协议。这一价值 430 亿美元的交易在 2017 年 7 月已经得到欧盟委员

会和美国联邦贸易委员会等 19 家监管机构批准。

在当前第四次工业革命的热潮中，国际化工界正以空前力度，大刀阔斧地兼并重组，优化产业结构，向高附加值高端化工和战略新兴化工产业冲击。相较而言，我国石油化工产业改革力度较小，依然以存量保值为主，以满足国内大宗化工产品的需求为主。未来国际化工市场可能会出现这样的结果：最大的化工生产大国中国提供大宗化工原料及薄利多销的初级大宗化学品；而高端特种化学品、精细化学品、按客户需求定制化学品和战略新兴化学品（生命科学、生化制药等）等这些高附加值的化工产品则主要由美国、德国等国家来提供。

3.2 化工制造的深度两化融合

“两化融合”早在党的“十七大”就已定位为发展国策，“十八大”又进一步提出“两化深度融合”。2016 年 5 月，国务院以国发[2016]28 号印发《关于深化制造业与互联网融合发展的指导意见》，工信部已形成两化融合工作的标准和规范：“两化融合评估规范（GB/T 23020—2013）”“两化融合管理体系（GB/T 23000—23999）”。制造系统与信息化融合可以从 3 个维度来理解，即企业信息系统的纵向集成、企业信息物理系统和企业之间端到端的数字化横向集成，如图 3 所示^[8]。

信息物理系统（Cyber-Physical Systems, CPS）是石化智能工厂的技术基础设施，将传感器、智能硬件、控制系统、计算机软件、信息终端连接成一个智能网络，实现企业、员工、设备、服务之间的互联互通，构建了物理空间与信息空间中人、机、物、环境、信息等要素相互映射、适时交互、高效协同的复杂系统，实现系统内资源配置和运行的按需响

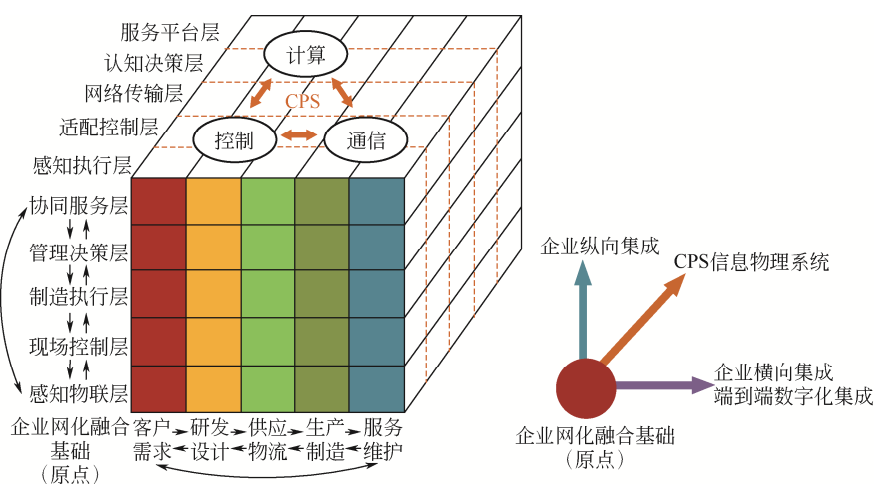


图3 两化融合技术体系的示意图

应、快速迭代、动态优化。通过核心的智能感知、分析、挖掘、评估、测评、优化、协同等技术手段，使制造过程在虚拟世界实现快速迭代和持续优化，并不断优化现实世界的运行，促进工业全面智能化。其构成要素主要是硬件-软件-网络-平台。

企业信息纵向集成：关注生产网络化和信息孤岛消除，通过CPS信息物理系统将企业管理决策与生产活动相关的设备系统相集成，实现管理信息系统和生产现场的结合，通过企业内部灵活且可重构的网络化制造体系提高生产的效率和柔性。企业纵向集成分为5层，包括：第一层，感知物联层；第二层，现场控制层；第三层，制造执行层；第四层，管理决策层；第五层，协同服务层。

企业间横向端到端数字化集成：实现企业间的协同，将企业内部的业务信息向企业以外的整个供应链延伸，包括供应商、经销商、用户进行延伸，实现人与人、人与物、物与物之间的集成，从而形成一个智能的虚拟企业网络。包括：第一层，客户需求层；第二层，研发设计层；第三层，供应物流层；第四层，生产制造层；第五层，服务维护层。这里主要关注的是：如何从采集用户需求，通过自主研究开发新产品，到设计制造生产工厂，到尽快地通过供应链上市的效率，也就是企业的竞争力。

两化融合在石油化工企业的具体体现首先表现在智能化制造上，中国石油化工集团公司2014年选择燕山石化、镇海炼化、茂名石化、九江石化4家企业开展智能化试点，2016年4家企业整体上线，打造了中国石化智能工厂1.0版，2017年启动了升级版（2.0）和推广建设工作。这几个试点企业通过智能化制造有效促进了转型升级、提质增效。例如九

江石化经济效益大幅提升，从一个比较落后的企业一举跃居中国石化沿长江企业首位；茂名石化公司近6年盈利超过前55年利润总和，相当于赚回了4个茂名石化；2015年、2016年，镇海炼化连续两年创利润超百亿^[9-10]。

3.3 原料结构的多元化、轻质化和炼化一体化

21世纪以来美国页岩气革命成功使世界化工原料格局有了明显变化，美国天然气副产乙烷大幅度增加，2016年乙烷产量达2521万吨，超过中东产出，本土消化不了，使得乙烷价格下跌，促进一方面乙烷裂解制乙烯装置大批上马；一方面向出口到加拿大、欧洲。由于乙烯裂解原料轻质化，一方面原料价格下降；一方面使裂解烯烃收率大幅提高，所以吨乙烯成本下降很多。所以，一时间乙烯裂解原料轻质化成为世界潮流。中国目前并没有这么多轻质原料，但有人计算过，即使从美国进口乙烷在中国生产，仍然是划算的。中国使用石脑油为原料总现金成本为1086美元/吨乙烯；而进口乙烷总现金成本只有521~690美元/吨乙烯，后者仅为前者的60%左右^[11]。

而石脑油作为原料虽然成本较高，但裂解副产丁二烯、C5和芳烃多，对产品差异化有利；而且公用工程消耗相对较低。另一方面，煤作为传统化工原料在我国一直占有将近一半（47%），特别是21世纪我国新型煤化工各项示范大型工业装置相继投产成功，使得煤成为可以和石油竞争的有机化工原料，这当然与石油价格密切相关，原油价格在35~55美元/桶的低油价下，石油烯烃成本优势明显，盈利空间大。而煤制烯烃已能实现盈亏平衡；在65~75美元/桶油价下，石脑油和煤二者制烯烃成本

相当, 都有较好盈利空间, 煤制烯烃利润更高一些; 在 90 美元/桶油价以上时, 煤制烯烃有较好效益, 而石脑油制烯烃面临高成本、低利润的状况^[11-13]。

如果以石油为原料, 即大型炼油厂配套乙烯裂解炉为头的石油化工厂, 存在炼油化工一体化集成问题^[14-17]。如果集成得好, 可以体现五大优势: ①减少投资, 降低固定成本; ②降低原料成本, 提高石油资源的利用效率; ③拓宽石化原料来源, 满足市场不断增长的需求; ④提高生产灵活性, 应对油品和石化产品市场变化的需求; ⑤实现产品多样化, 延伸价值链, 提高经济效益。集成追求的目标是尽可能将石油转化为化工原料, 从而使每一吨原油产生最大的价值。老式的炼油化工企业只能将 5%~10% 的原油转化为化工原料, 而优化集成的炼化一体化企业可以达到 50%。美国 Fluor 公司结合实际在基础方案的基础上提出了 6 种炼化一体化方案并进行了技术经济分析。发现如果将基础方案的相对总毛利作为 100, 方案 5 达到 310, 方案 6 达到 380^[14]。

从长远看炼油需求有可能逐步缩减, 因为汽车的燃油正在逐步被电池替代。随着电池技术的飞速发展, 2020—2025 年将有可能电动车数量超越燃油车数量。以色列宣布由于新研制出的电池只需要 5 分钟充电可以支持汽车续航 460 公里, 所以以色列政府宣布 2020 年将停止使用汽、柴油车, 全部改用电动车。德国宣布在 2030 年停止销售燃油汽车, 英国、法国为 2040 年。可以预期炼油厂今后除了生产少量燃料油品外, 主要会成为为化工生产原料的工厂, 除了炼化一体化的企业外, 独立的炼油厂因缺乏竞争力将难以存活。

3.4 绿色化发展

炼油化工行业即是耗能耗水大户, 又是排废排污大户, 在转型升级中必须减少资源消费, 降低 CO₂ 和各种污染物排放。2016 年全行业能源消耗总量达 5.6 亿吨标煤, 占工业能耗总量的 18%; CO₂ 排放占工业排放总量的 15%。生产排放的废水、废气、固废总量分别位居全国工业行业第 2 位、第 4 位和第 5 位, 化学需氧量、氨氮、氮氧化物、二氧化硫等污染物排放量和能源消耗量也位居全国工业行业前列。部分老石化产业园区沿江部署, 而且与居住区交叉布局, 逐渐被城镇包围, 安全防护和生态绿化距离不足, 生产和生活安全存在较大隐患。

《石化和化学工业发展规划(2016—2020 年)》提出万元 GDP 能耗下降 15%、二氧化碳排放降低 18%、用水量下降 23% 的目标。在减排方面, 提出

化学需氧量(COD)和氨氮排放总量降低 10%、二氧化硫和氮氧化物排放总量降低 15% 的污染物总量减排目标。

绿色发展的重要措施之一就是发展生态工业园区(Eco-Industrial Park, EIP)。21 世纪以来我国 EIP 发展迅猛, 2008 年之后均以 GDP 增速的 2~3 倍速度增长, 如 2014 年 EIP 的年增长率达 29%, 是 GDP 增长率的 4 倍(2014 年 GDP 增长率 7.4%)。当前, 我国化工园区发展十分迅速, 截至 2016 年底, 全国重点化工园区和以石化化工为主导的园区达到 502 家, 其中国家级 47 家, 省级 262 家, 地市级 193 家; 全国化工园区规模以上的企业大约有 1.5 万家, 占全国石油和化工企业的 51% 左右。随着进驻园区的企业越来越多, 化工园区日益成为行业发展的主战场, 对行业调结构转方式正在发挥越来越重要的作用^[17]。

3.5 化工产业的服务化发展

最早领悟到要从传统制造业转向服务业的是引领该潮流的 IT 制造商 IBM 公司, IBM 前总裁 GERSTNER 早在 20 个世纪 90 年代就提出: 面向 21 世纪的企业核心竞争力正在从技术、产品转向应用和服务。IBM 公司领先转型使其成为 21 世纪 IT 行业的翘楚。

21 世纪向服务化发展是产业链向下游转型的需要, 也是互联网时代跨界竞争的需要。随着产品高端化、精细化、定制化, 不断推出的新产品如何推广应用成为体现竞争力的焦点。需要大量的客户服务工作, 正是通过专业化服务, 产品的高价值才能得以体现。而跨界竞争时代谁能接近大量客户, 谁就有了竞争优势。例如炼油行业的成千上万个加油站就是跨界竞争的节点, 容易转换成多方面服务的起点。

4 PSE 为化学工业转型升级提供方法和工具

4.1 产品工程为客户为中心的新产品开发提供理论基础

20 世纪, 寻找满足市场需求的化学产品是化学家的事, 化工工程师负责解决如何大规模制造它们。但到 21 世纪进入“长尾经济”时代, 情况发生了变化, 产品创新成了化工企业的“新常态”, 化工工程师的任务与时俱进, 需要承担起找寻满足特定功能的化学产品任务。因此, 化学工程作为一个学科, 从成立时以“单元操作”为核心, 到 20 世纪 60 年代发展

到以“三传一反”（传热传质动量传递和反应工程）为核心，到 21 世纪初提出“化学产品工程”^[18-20]。这里的“化学产品”特指具有特殊性能的高附加值化学品，而不是已知分子结构的大宗化学产品。产品工程可分为两大分支，即分子产品工程和配方产品工程。前者是研究分子的结构和性能的关系，而后者则因产品成分复杂而研究其形态学特征和配方的关系。

分子产品工程将分子模拟技术、热力学和数字优化技术结合起来，寻求一种最佳的分子结构，以满足特定的性能要求。从研究方法上可以分为两大类^[21]：第一类称性质构关系（Quantitative Structure-Property Relationship, QSPR）法，例如集团贡献法、拓扑指数法、特征识别法等；第二类称计算机辅助分子设计（Computer-Aided Molecular Design, CAMD）法，包含两类问题，即正向问题（已知结构求性质）与逆向问题（已知性质求结构）。CAMD 就是用计算机来解算数学规划优化，选择符合性能要求的最佳分子结构^[22]。

配方产品工程针对有些新产品的性质难以简单定量描述（例如葡萄酒），要寻求的产品也不是某种分子，而是几种物质组成的复合配方。如各种表面活性剂、化妆品、洗涤剂、包覆材料、药物、农用化学品等。这类产品性质往往取决于如颗粒形状、内部结构、组成分布、尺寸分布、孔率、吸湿能力等形态学性质。

CAMD 已经有一些商品化软件可用，如 Materials Studio 发展超过 16 年，整合多种模拟方法，有 24 个功能模块，实现从电子结构解析到宏观性能模拟的全尺度科学研究；Mede A 是全功能的材料设计与性质预测平台，其应用领域非常之广，如电力发电、汽车、储能、合金设计、微电子及石化化工等行业对材料及相关领域问题提供快速且可靠的解答；ADF 擅长重元体系、有机体系，在气相、溶液、蛋白质、点电荷与强电场背景下的 DFT 计算。使用精确的相对论方法考虑自旋-轨道耦合。ADF 的泛函库非常庞大，最新发表的重要泛函会很快地被纳入 ADF 的泛函库。

配方产品工程则更不成熟一些，尚没有成熟的商品化工具可以提供。2015 年在 PSE'2015 过程系统工程国际会议上，香港科技大学 K. M. Ng 教授提出“以客户为中心的化学产品设计多学科层次框架模型”比较系统地阐明了产品设计所涉及到的各种学科研究之间的关系^[20]。

4.2 PSE 为新工艺过程开发提供系统化工具

在新产品开发放大的各个尺度上，过程系统工程学科都进行了研究，并在不同的成熟程度上提供了方法和工具，如图 4。

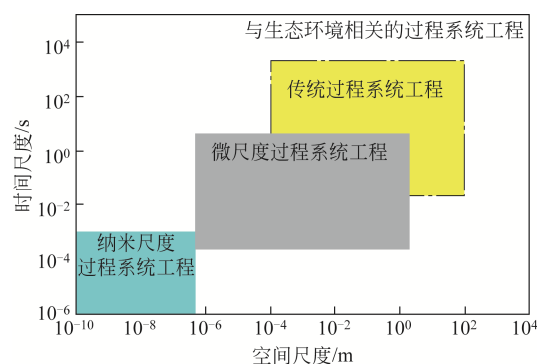


图 4 各种尺度上的过程系统工程示意图

最小尺度的所谓纳米技术，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性质和功能材料、设备或系统^[23]。纳米技术的发展填补了人类对于单个分子至 100 个分子尺度下（即 1~100nm）的许多新现象和新过程的知识。麻省理工学院的 STEPHANOPOULOS 等^[24]提出“分子工厂”作为下一代加工尺度前沿，他们提出纳米过程系统工程，要对于这种“纳米尺度加工厂”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。

微化工技术是 20 世纪 90 年代兴起的高效化工系统，指的是空间尺度大约为 1~100 μm ；时间尺度为 1~100ms 的超小型系统。这种微型系统具备以下特殊优越性：①相对尺度微型化对传递性质及作用力有明显影响，可以使传质、传热系数较常规系统提高二、三个数量级。②微型化使得反应物所需用量成数量级减少，时间大大加快，精度大为提高。微组合化学合成与分析系统使检测时间由原来的 2~3h 下降到 50s，而精度可提高到 zmol（10~21mol），现代 DNA 检测器，如“芯片上的药房”（Pharmacy-on-a-Chip）等就是微化工系统应用。③本质安全及可控性好，由于特征尺寸小于火焰传播临界直径及微通道极强的传热能力，可以有效地抑制自由基爆炸反应，所以可以在很宽的操作范围内安全操作，过程易于调控。即使发生爆炸，由于系统内滞留量很小，也不会造成严重后果。④便于把实验研究用的反应器得到的成果直接放大到商业

化生产。用并行放大 (Numbering-up) 替代传统的 Scale-up, 可以跳过耗时费力的中间试验放大阶段, 可大大缩短实验室到市场的时间, 这对于提高精细化工及制药行业厂商的竞争力十分重要。⑤实现分布式生产的可能性, 由于微化工系统是模块结构的平行分布式系统, 可以便于在产品使用地分散加工并就地供应, 这不仅消除危险品运输的潜在危险, 而且可以使分散的资源得到合理利用。⑥可以探索新的化学反应路径。利用微通道壁面和流体的相互作用, 可以使反应器中的“热点”受到压抑, 又可以消除传质限制因素, 从而使一些高放热反应可以在较温和条件下实现, 这也为探索新的、环境友好工艺路线开辟新途径^[24]。

而在常规尺度上对新产品和新工艺的开发放大, 则PSE提供了成熟的一套数学模拟放大的方法, 如图5所示。从新产品开发就有前面提到的分子模拟平台, 可以协助开发者找寻适合的分子结构; 在涉及具体设备的形状结构时, 则有计算机辅助流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 软件平台来协助开发者优化设备结构设计, 比较常用的

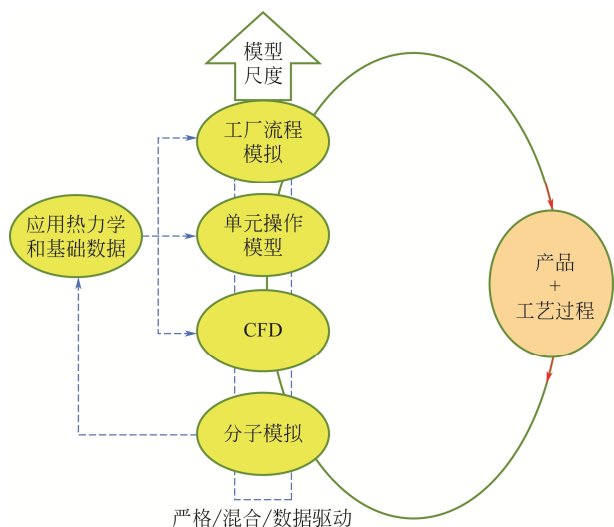


图5 不同尺度的化学工程模拟平台的应用

CFD 软件平台见表4。在确定设备的大小尺寸时, 各种设备 (从反应器到各种分离、传热设备) 的单元操作模型库已经比较成熟, 一般足以应付常规概念设计和流程设计的需要。

图5中最常用的环节是工厂流程模拟, 这已经成为石油化工企业信息化的必不可少的工具平台。它不仅是研究和开发中的重要工具, 而且也是企业运营中信息化的主要支撑工具平台, 因为流程模拟不仅是装置运行实时优化 (RTO) 的基础, 而且也作为计划与调度优化提供支撑。常用的一些流程模拟商业化软件见表5所示。

4.3 PSE 是化工智能化转型升级的理论指导

谈到化学工业制造的智能化, 首先要区分两类不同类型生产化工制造: 一类是现有传统大宗炼油化学品生产的智能化; 另一类是高附加值化学品生产的智能化。因为这两种生产采取的生产模式不同, 其智能化的目标也不同, 所以其指导理论方法也就不同。前者采用的生产模式是产品固定的大规模连续化生产, 其智能化目标是将现有的生产卓越化, 即原料能源利用率最高、污染排放最小、管理最有效率、成本最低, 利润最高; 而后者往往是产品多样化的间歇式生产, 每批产品的产量不很大, 但是要求从研发到投放市场的时间最短, 智能化的目标是尽快生产出满足定制化性能的产品, 而节约原料能源和减排相对是次要的。

对于大宗化学品制造的智能化, 中国石油化工集团公司信息部李德芳等^[25]结合实践经验提出一个未来智能化的框架模型, 这个框架模型分成3个层次: 最底层是“工厂计算”是基于微观尺度-中规模尺度-大尺度的多尺度耦合模拟计算, 实现从分子、材料、设备到装置、工厂, 乃至供应链的全面集成模型化, 由此形成与实际工厂并行操作的“虚拟工厂”, 这样可以使很多控制和管理方案提前在虚拟工厂中预测到效果; 中层为人-机联合智能层, 其中包含了知识自动化功能层, 这里认为近期计算

表4 常用商业化的 CFD 软件平台

软件名称	所属公司	解算器	专用解算器	前置处理器	后置处理器
FLUENT	原英国开发的, 2006 年被美国 ANSYS 公司 ^① 并购。	Fidap 英国有限体积法 FVM 求解器, 支持 C++	Polyflow 黏弹性流, MixSim 搅拌混合, QFin 翅片散热等	GAMBIT 网格自动处理	图形输出
PHOENICS ^②	英国 CHAM 公司 1980 年开发	21 个涡流模型, 8 个多相流模型		有	VR 彩色图形系统
CFX	原英国开发的, 2006 年被美国 ANSYS 公司并购	英国 FVM 求解器, 支持 C/C++		ICEMCFD 智能化网格处理器	输出格式丰富
STAR-CD	英国 Computational Dynamics 公司, 早期由英国帝国理工大学出来的公司	英国 FVM 非结构化网络计算器, 支持 FORTRAN		非结构化网格处理器	

①ANSYS 是 1970 年代美国成立的有限元分析和 CFD 领域的软件公司; ②PHOENICS 自带有 1000 多个实际算例及练习题。

表5 常用商业化流程模拟软件平台的比较

比较项目	Aspen Plus、Hysys	PRO/II	Petro-SIM	VMGSim	UniSim	ChemCAD	gPROMs
软件技术状况							
开发时间	1980年	1970年	1970年	1996年	1992年	1968年	1988年
纯组分数	24000+	7444	1931	20500	5773	2000+	3000+
二元交互作用参数	30000+	3000	5000	100000	5000	8000	不详
热力学方法数	90	53	61	120	39	39种K值, 13种焓值	自己的MultiFlash及DIPPR库
是否支持二次开发	支持	支持	支持	支持	支持	支持	支持
模型开发适用性	炼油、化工, 在化工领域表现更好	炼油、化工, 在炼油工业应用更为准确些	炼油	炼油、化工, 在CLAUS 硫磺回收表现更好	炼油、化工	化工、炼油、化学和石油工业工艺开发	化工、石油化工、制药工艺设备及过程的设计与优化
集成性							
与Excel集成	支持, 而且集成性很好	支持	支持, 相对方便	支持, 而且集成性很好	支持, 相对方便	支持	可以与多种软件连接
DECHEMA数据库接口	有	无	无	无	无	不详	
与其他系统接口技术	OLE	ODBC	XML, OLE	OPC, OLE	XML	OLE/COM/DCO M/XML	可与MATLAB, Simulink, CFD, CAPE-OPEN等接口
操作友好性							
使用方便性	方便	有难度	较方便	方便	方便	方便	较方便
操作界面支持中文	部分版本支持	无	无	支持	支持	支持	无
供应商公司名称	Aspen Tech	施耐德-Invensys	横河-KBC	VMG	Honeywell	Chemstations	Process Systems Enterprise

机尚不能完全取代人的觉察能力, 必须由人-机完美结合以达到自适应、自组态、自恢复、自优化的水平。这里还有知识自动化功能模块, 将以往的知识 and Know-how 转换成不同的工艺过程、管理业务模型及法则, 以应对复杂的生产状态变化做出相应反应, 并不断学习最优策略, 能够自适应、自学习、对动态环境做出在线反应; 最上层为创新制造和管理模型层, 这里包含工厂运营生态系统(考虑下游产业链和工业园区的集成); 工业制造生态系统(考虑通过互联网对内对外的服务协作、跨行业“大生产”和竞争等); 产品+增值服务生态系统。

实现化工制造的智能化需要解决一系列的技术课题, 这些课题有一些已经在研究解决, 有的还没有。化工生产智能化中的 PSE 理论课题概述如下^[25, 26-29]: ①无处不在的模型化技术——模拟与仿真, 包括基于第一定律、多尺度机理模型, 基于大数据的经验建模, 考虑不确定性因素、多尺度全流程综合优化, 炼油化工一体化全流程模拟优化——原料优化、副产品综合利用一体化、公用工程储运系统一体化, 煤化工与 IGCC 全流程联合优化等; ②全供应链的生产资源优化技术, 包括在不确定环境下、多时空尺度的优化, 多目标、多层次协作条件下的供应链优化, 有生物能源参与、可持续发展

的供应链优化; ③本质安全的化工运行和管理技术, 包括非正常工况的侦破与管理, HAZOP 为基础的安全分析, 在不确定环境下的安全管理与资产管理的优化等; ④复杂化工生产的智能控制系统, 包括模型为基础的控制——模型预测控制、迭代学习控制、基于数据的控制、基于学习的控制, 多尺度智能运行系统集成——大规模微传感器网络、无线传感器网络、基于低成本无线技术的定位和跟踪系统、无线检测网络集成, 控制与实时优化 RTO 的集成; ⑤基于云计算的海量信息实时处理技术及基于知识的技术, 包括海量实时数据处理及挖掘技术、感知信息与模型化融合技术、工业知识自动化技术(包括企业级知识库及知识管理系统、员工在共享知识库基础上的智能仿真培训系统); ⑥人-机协同决策及交互作用系统, 包括海量、高维度、非均质制造信息的可视化技术, 虚拟化工厂——基于 3D 仿真的虚拟现实技术, 人-机协同决策的虚拟助手技术, 具有跨学科知识分析能力协同的、支持生产制造环境可视化的人-机交互作用技术。

4.4 PSE 为化工企业节能、节水和生态文明建设提供理论方法和分析工具

20 世纪 80~90 年代过程集成理论和应用开始发展, 成为 PSE 的重要分支, 对于化学工业节能、

节水和生态文明建设起了很大推动作用，本文作者在“可持续发展时代的过程集成”一文中已经全面综述了 PSE 在节能、节水及生态工业园区建设中的作用^[30]。

过程集成理论方法从 20 世纪 80 年代初就沿着两大路径发展：以 LINNHOFF 为代表的夹点技术（Pinch Analysis）和以卡内基梅隆大学 GROSSMANN 为代表的数学规划法（Mathematical Programming）。前者以物理概念清晰、表达简易便于理解著称；而后者以数学严谨，能处理复杂情况见长。这里仅简要总结一下最有代表性的 PSE 技术之一——夹点技术的发展。

1982 年当时在英国的 LINNHOFF Bodo 和日本的梅田富雄同时独立的提出“夹点分析”的概念，当时只针对热量回收的换热器网络，如何使回收的热量最大，而必须提供的热、冷公用工程消耗最小，即所谓“热集成”^[31-32]。到 1989 年发展到全局能量集成（Total Site Integration），即不仅包括换热器网络，而且包括整个公用工程系统（包括蒸汽管网和发电动力机组）^[33]。在这里纵坐标代表质量是温度；横坐标代表数量是热量（通常用焓表示）。

与此同时，1989 年 EL-HALWAGE 等^[34-35]针对如何优化质量交换网络如何最优配置质量流股使污染最少，提出“质量夹点（Mass Pinch）”。在质量集成方面，应用最广的是 1994 年 WANG 和 SMITH^[36]提出的“水夹点技术”，他们针对水网络系统，提出存在水夹点，对应着废水的利用率最大、新鲜用水量最小从而使排出的废水也最少，这方面发展详情可参照本文作者的综述^[37]。在这里纵坐标代表质量是水中的污染物浓度；横坐标代表数量是水流量。到 2001 年 KIM 和 SMITH^[38]又将其推广到“循环水夹点技术”，用以找到循环水补充的新鲜水量达到最小。在这里纵坐标代表质量是水温度；横坐标代表数量是水流量。到 21 世纪初环境保护要求提高，由于汽车用的燃油要求也相应提高，炼油厂加氢处理越来越多，造成氢资源紧张。2002 年 ALVES 和 TOWLER、2003 年 EL-HALWAGE 提出“氢夹点”，通过夹点分析来找寻最小新鲜氢资源的使用^[39]。

夹点分析的概念也应用到供应链管理。一个供应链有生产制造厂、仓储、配送中心、供应商、零售商和众多客户参与，需要识别哪一个环节是“瓶颈”（Pinch）限制了整个系统的通过能力。2004 年 SINGHAI 和 SHENOY 就将夹点技术用于能源供应

链的综合生产计划的生成，求取不同时段的生产变化最小而能满足每个时段的需求，同时还保证仓储约束不被突破。在这里纵坐标代表质量是时间；横坐标代表数量是物料流^[40]。

2007 年 TAM 和 FOO^[41]提出“碳排放夹点”。如果由多个区域组成的一个区域系统，每个区域使用着几种不同的化石能源，造成各自的 CO₂ 排放。为了降低 CO₂ 排放达标，就需要使用一定数量的“零排放”能源（可再生能源或核能）来替代高排放的化石能源。但零排放能源成本较高，要尽可能少用，所以要求取既能满足各区域能源需求，又用最少的“零排放”能源满足 CO₂ 排放限制。在这里纵坐标代表质量是 CO₂ 排放限制；横坐标代表数量是能耗需求。

到 2010 年，由于间歇生产的盛行，夹点技术又推广到间歇过程。在间歇过程的热量回收中，既要受到温度限制，又要考虑到时间的限制，所以比较复杂。2012 年 MORRISON 等^[42]开发了间歇过程换热器网络集成设计法；CHATURVEDI 等^[43]开发出间歇过程最小中间储槽要求的夹点设计法；2013 年 FOO 等^[44]提出间歇过程最大废水回用的水网络设计法。

总体来看，夹点技术是一种描述网络结构系统流通股质量与其数量关系法则的方法，在不同的对象场合作为“质量”和“数量”的内容是不相同的，如表 6 所示。

这里最为成熟、已经发展为商品化工具软件的只有热集成。目前世界范围已经在使用的是 3 家公司提供的软件：①Aspen Energy Analyser，这个软件可以和流程模拟软件 Aspen Plus 或 HYSYS 联用，它可以自动从模拟计算结果中获取有关流股的温度-焓值数据，自动进行热夹点计算，所以它已经成为设计常规使用工具；②SuperTarget，这是 KBC 公司开发的热夹点计算软件，但是 2016 年 KBC 公司

表 6 不同类型的夹点技术发展总结

夹点技术类型	质量坐标	数量坐标	代表作者
热集成	温度	热量（热焓）	LINNHOFF B ^[31-32]
质量集成	性质	质量负荷	EL-HALWAGE ^[34-35]
水网络集成	污染物浓度	水流量	WANG & SMITH ^[36]
循环水网络集成	温度	水流量	KIM & SMITH ^[38]
氢气网络	氢浓度	氢流量	ALVES & TOWLER ^[39]
供应链管理集成	时间	物料流	SINGHAI & SHENOY ^[40]
碳排放系统	CO ₂ 排放限制	能耗需求	TAM & FOO ^[41]

已经被日本横河公司兼并；③i-Heat，这是英国 PIL（Process Integration Limited）公司基于曼彻斯特大学开发的 SPRINT 热集成软件的升级版，包括了热夹点（Heat-int）、全局热集成（SITE-int）、常减压系统（CDU-int）、精馏塔热集成（DIST-int）、深冷分离（CRYO-int）以及氢夹点（H₂-int）6 个软件。在生态工业园区的优化方法的发展方面，法国图卢斯大学 2015 年已做了很好的文献综述^[45]。这里就不再赘述。

5 结语

（1）世界正进入第四次工业革命时代，我国也正在进入第二次经济结构转型期，我国化学工业的发展必须认清当前的时代特点；

（2）我国的化学工业大而不强，低端产品产能过剩，高端产品依赖进口，自主创新能力弱，劳动生产率不高，盈利能力差，与我国的国际地位很不相称，迫切需要转型升级；

（3）转型升级应朝着结构调整，深度两化融合，原料结构的多元化、轻质化，产业绿色化和服务化的方向发展；

（4）PSE 为化工转型升级需要的新产品、新工艺开发提供理论方法和软件工具，为化工制造智能化转型升级提供理论指导，并为化工企业节能、节水和生态文明建设提供理论方法和分析工具。

参考文献

- [1] 李寿生. “十三五”时期中国石油和化学工业发展战略与创新[J]. 国际石油经济, 2015, 23 (5): 1-6.
LI S S. Development strategy and innovation in China's petroleum and chemical industry during the 13th 5-Year Plan[J]. International Petroleum Economics, 2015, 23 (5): 1-6.
- [2] 闵如柱, 金辉. 供给侧改革的关键在于转型[J]. 化工管理, 2016 (2): 29-32.
YAN R Z, JIN H. The key point of supply side reform is transformation[J]. Management of Chemical Industry, 2016 (2): 29-32.
- [3] 刘国林. 2014 年我国石油和化工行业进出口贸易分析[J]. 中国石油和化工经济分析, 2015 (3): 19-22.
LIU Guolin. Analyst on import and export trade of China's petroleum and chemical industry in 2014[J]. Economic Analysis of China Petroleum and Chemical Industry, 2015 (3): 19-22.
- [4] 工业和信息化部. 关于印发石化和化学工业发展规划（2016—2020 年）的通知[Z]. 工信部规[2016]318 号, 2016.
Ministry of Industries and Informatization. Notice about development plan of petrochemical and chemical industries(2016—2020)(Interior document) [Z]. 2016.
- [5] 吴杨. 瓶颈挑战, 聚烯烃行业如何迈入高端化? [J]. 中国化工信息, 2016 (23): 48-51.
WU Y. Break through, how the polyolefin industry get into high-end?[J]. China Chemical Information, 2016 (23): 48-51.
- [6] LEENA Rao. Dow chief: we're not a chemical company, we're a science company[EB/OL]. <http://fortune.com/2015/07/15/dow-chief-chemical-science>.
- [7] GILBERT K. Former chemical giant dupont attempts to reinvent itself once more, institutional investor, 2014[EB/OL]. <http://www.institutionalinvestor.com/article/3322456/banking-and-capital-markets-corporations/former-chemical-giant-dupont-attempts-to-reinvent-itself-once-more.html?ArticleId=3322456&p=3>.
- [8] 中国工业和信息化部信息化和软件服务业司, 中国电子学会. 两化融合技术指导体系总体架构及其说明（1.0 版）（内部资料）[Z]. 2016.
Department of Informatization and software in the Ministry of Industries and Informatization, Society of Electronics. The general framework guide on technical system of the connotation of the integration of information and industrialization (Interior document) [Z]. 2016.
- [9] 李德芳, 索寒生. 加快智能工厂进程, 促进生态文明建设[J]. 化工学报, 2014, 65 (2): 374-380.
LI Defang, SUO Hansheng. Accelerate the process of smart plant, promote ecological civilization construction[J]. CIESC Journal, 2014, 65 (2): 374-380.
- [10] 王基铭. 石化信息物理系统（CPS）的理论研究与应用实践[R]. 2017 过程系统工程专业委员会年会, 昆明, 2017
WANG J M. Theoretical research and practical applications of Cyber Physical System in petrochemical industry[R]. 2017 Annual Meeting of Process Systems Engineering Society of China, Kunming, 2017.
- [11] 瞿国华. 进口美国页岩气乙烷实现裂解原料轻质化之经济性分析[J]. 乙烯工业, 2015, 27 (3): 1-4.
QU G H. Economic analysis of obtaining light ethylene cracking feedstock by importing shale gas derived ethane from the United States[J]. Ethylene Industry, 2015, 27 (3): 1-4.
- [12] 李振宇, 王红秋, 黄格省, 等. 我国乙烯生产工艺现状与发展趋势分析[J]. 化工进展, 2017, 36 (3): 767-773.
LI Z Y, WANG H Q, HUANG G S, et al. Analysis on status and development trend of ethylene production[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2017, 36 (3): 767-773.
- [13] 姚国欣. 世界炼化一体化的新进展及其对我国的启示[J]. 国际石油经济, 2009 (5): 11-19.
YAO G X. The global refining industry: development and trends[J]. International Petroleum Economics, 2009 (5): 11-19.
- [14] KAPUR S. Why integrate refineries and petrochemical plants[J]. Hydrocarbon Processing, 2009, 88 (2): 29-40.
- [15] 李志强. 炼化一体化: 未来石油化工发展的方向[J]. 当代石油石化, 2005, 13 (5): 8-12.
LI Z Q. Integrate refineries and petrochemical plants: the future development trend[J]. Modern Petroleum and Petrochemical Industries, 2005, 13 (5): 8-12.
- [16] 卢光珉, 李鹏, 初青柏, 等. 一种高度炼化一体化的乙烯发展方案[J]. 化工技术经济, 2016, 24 (12): 9-12.
LU G M, LI P, CHU Q B, et al. A highly integrate refineries and petrochemical plants development scheme of ethylene production[J]. Technical Economics of Chemical Industry, 2016, 24 (12): 9-12.
- [17] 魏坤. 创新驱动智慧升级争做绿色发展先锋[J]. 中国化工信息(周刊), 2017 (11): 17.

- WEI K. Driving toward to be the pioneers of green development[J]. China Chemical Information, 2017 (11): 17.
- [18] 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): 217-222.
- QIAN Y, PAN J Z, JIANG Y B, et al. Chemical product engineering theories and technologies[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2003, 22 (3): 217-222.
- [19] MICHAEL Hill. Chemical product engineering—The third paradigm[J]. Computers and Chemical Engineering, 2009, 33 : 947-953.
- [20] NG K M. A multidisciplinary hierarchical framework for the design of consumer centered chemical products[R]. 12th International Symposium on PSE, 2015: 15-20.
- [21] AUSTIN N D, SAHONIDIS N Y, TRAHAN D W. Computer-aided molecular design: an introduction and review of tools, applications, and solution techniques[J]. Chem. Eng. Research and Design, 2016 (116): 2-26.
- [22] ABBIATI, ROBERTO A, DAVIDE M. A modeling tool for the personalization of pharmacokinetic predictions[J]. Computers & Chemical Engineering, 2016, 91: 28-37.
- [23] YANG Youqi. Microscale and nanoscale process systems engineering: challenge and progress[J]. Chinese Journal of Process Engineering, 2008, 8 (3): 616-624.
- [24] STEPHANOPOULOS N, SOLIS E O P, STEPHANOPOULOS G. Nanoscale process systems engineering: Toward molecular factories, synthetic cells, and adaptive devices[J]. AIChE J., 2005, 51 (7): 1858-1869.
- [25] LI Defang. Perspective for smart factory in petrochemical industry[J]. Comp. & Chem. Eng., 2016, 91: 136-148.
- [26] IBM公司. IBM Smart Manufacturing Solutions, Technical Exchange Meeting (Interior document) [Z]. Beijing, 2013.
- [27] Smart Manufacturing Leadership Coalition (SMLC) . Implementing 21st century smart manufacturing (Interior document) [Z]. 2011.
- [28] Smart Process Manufacturing Engineering Virtual Organization Steering Committee. Smart process manufacturing: an operations and technology roadmap (Interior document) [Z]. 2009.
- [29] 杨友麒. 我国化工智能制造的发展现状和问题[J]. 中国化工信息, 2016 (6): 28-31.
- YANG Y Q. Status and problems of smart manufacture in chemical industry of China[J]. China Chemical Information, 2016 (6): 28-31.
- [30] 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.
- GONG J B, YANG Y Q, WANG J K. Meeting the challenges to sustainability through process integration-process systems engineering review[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2009, 25 (7): 721-728.
- [31] LINNHOFF B, FLOWER J R. Synthesis of heat exchanger networks: I. Systematic generation of energy optimal networks[J]. AIChE J. , 1978, 24 (4): 633-642.
- [32] LINNHOFF B, HINDMARSH E. The pinch design method for heat exchanger networks[J]. Chem. Eng. Sci., 1983, 38: 745-763.
- [33] JIRÍ J K, PETAR S V, ZDRAVKO K. Recent developments in process integration[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2013, 91: 2037-2053.
- [34] EL-HALWAGI M M, MANOUSIOUTHAKIS V. Synthesis of mass-exchange networks[J]. Am. Inst. Chem. Eng. J. , 1989, 35: 1233-1244.
- [35] 杨友麒. 质量交换网络[J]. 化工进展, 2007, 26 (2): 284-289.
- YANG Y Q. Mass exchange networks[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2007, 26 (2): 284-289.
- [36] WANG Y P, SMITH R. Wastewater minimization[J]. Chem. Eng. Sci., 1994, 49 (7): 981-1006.
- [37] 杨友麒, 贾小平, 石磊. 水网络与虚拟水的过程系统工程研究进展[J]. 化工学报, 2015, 66 (1): 32-47.
- YANG Y Q, JIA X P, SHI L. Progress of process systems engineering for water network and virtual water studies[J]. CIESC Journal, 2015, 66 (1): 32-47.
- [38] KIM J K, SMITH R. Cooling water system design[J]. Chem. Eng. Sci., 2001, 56: 3641-3658.
- [39] ALVES J J, TOWLER G P. Analysis of refinery hydrogen distribution systems[J]. Ind. Eng. Chem. Res. , 2002, 41: 5759-5769.
- [40] SINGHVI A, MADHAVAN K P, SHENOY U V. Pinch analysis for aggregate production planning in supply chains[J]. Comput. Chem. Eng., 2004, 28 (6-7): 993-999.
- [41] TAN R R, FOO D C Y. Pinch analysis approach to carbon-constrained energy sector planning[J]. Energy, 2007, 32: 1422-1429.
- [42] MORRISON A S, ATKINS M J, WALMSLEY M R W. Ensuring cost-effective heat exchanger network design for non-continuous processes[J]. Chem. Eng. Trans., 2012, 29: 295-300.
- [43] CHATURVEDI N D, BANDYOPADHYAY S. Minimization of storage requirement in a batch process using pinch analysis[J]. Comput. Aided Chem. Eng., 2012, 31: 670-674.
- [44] FOO D C Y, MANAN Z A, TAN Y L. Synthesis of maximum water recovery network for batch process systems[J]. J. Clean Production, 2005, 13 (15): 1381-1394.
- [45] MARIANNE Boix , LUDOVIC Montastruc , CATHERINE Azzaro-Pantel, et al. Optimization methods applied to the design of eco-industrial parks: a literature review[J]. Journal of Cleaner Production, 2015, 87: 303-317.