

化学产品全生命周期集成研究的机会和挑战^{*}

钱 宇 闫志国 章莉娟

华南理工大学 化工学院, 广州 510640

摘要 对化学工业的现状和化学工程研究的发展趋势进行了分析, 探讨拓宽化工系统工程的研究范畴, 从以往以过程研究为中心向微观和宏观两个方向扩展, 即微观方面到以分子模拟为手段的产品设计, 宏观方面是把影响生态环境的因素集成到工业和工程研究中, 并对整个化学供应链的集成研究进行产品全生命周期分析和评价, 提出了深化过程系统工程研究的机会和挑战。

关键词 化学供应链 过程系统工程 化学产品 全生命周期 系统集成

化学工业是利用自然资源通过化学反应和物理操作生产人类所需产品的工业。化学工程是研究物质的物理、化学以及生物的转化过程, 发现产品处于不同阶段的相互关系, 从而深入地认识产品的结构和更好地控制生产操作。随着人类利用自然资源逐步深入, 过程工业开始由初级加工向深度加工发展, 由基础化工向精细化工发展, 由大规模连续化生产通用化工产品向小批量多品种个性化的专用化学品发展^[1]。因此, 如何顺应社会的进步、人类生活水准的提高和物质需求的多样化, 已成为目前化学工程研究拓展和深化的重要问题。

具有复杂分子结构的产品和制造技术主要是通过实验开发的, 开发过程耗费大量人力物力和时间。然而, 产品配方和生产工艺都被各个公司专利保护或严格保密。专利技术的实施迫于有效期的压力, 没有系统化的理论和方法可以借鉴, 往往使得工程研究和工业设计粗糙。这对化学工程研究者提出了新的挑战: 如何根据市场的需求, 通过系统的、科学的方法加快产品开发过程^[2,3]。同时, 随着人们生活素质的提高, 环境意识的增强, 要求从产品的研究开发阶段就开始考虑环境影响问题。因此, 以开发对人类和环境友好、节约资源的化工产品及其过程为目标, 研究解决产品创新、反应合

成、优化设计及生产控制等多元复杂问题, 成为现代化学工程研究由工程基础向科学基础、由过程工程导向发展为以产品为导向的化学工程的一种发展趋势^[4]。本文结合作者的研究工作^[5,9], 介绍和评述国内外在此热点领域的研究进展和方向, 以期对同行的研究工作有所启示和帮助。

1 全生命周期集成研究的提出

化学产品的形成涉及从分子设计、产品结构, 到工业生产以及使用和废弃等多个不同阶段和多个层次。表征这些不同层次的, 有空间尺度的变化, 还有时间尺度的演变。时空尺度又是相互关联的。了解不同尺度时间和空间之间物质变化的关系, 以及根据微观尺度预测宏观尺度行为, 将对化工产品的开发和过程工程的放大问题有所帮助^[7]。这就需要拓宽目前的过程系统工程研究范围, 由先前主要集中在过程模拟, 过程合成的研究向微观和宏观两个方向延伸。2000年美国工程院院士 Grossmann 和 Westerberg^[8]在研究物质转化和利用的全过程中的科学规律和技术进展时, 提出了按“化学供应链”(chemical supply chain)系统来开展化学化工系统研究的思路。“化学供应链”如图1所示, 是从分子层次-分子群集-颗粒-单相和多相系统-单元操作-装

2004-03-03 收稿, 2004-05-19 收修改稿

^{*} 国家杰出青年科学基金(批准号: 20225620)、国家自然科学基金(批准号: 20376025)资助项目

置(车间)-全厂-企业这样一个在时间、空间等诸方面呈现多尺度跨越的不同阶段、不同尺度、不同规模的化学化工过程。

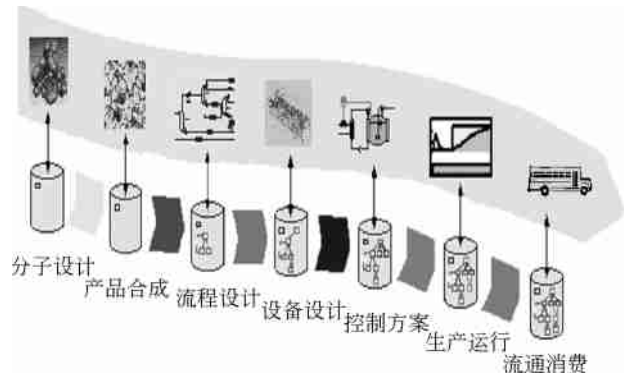


图1 化学供应链

在化学供应链上各个不同环节进行集成研究, 面临一系列的挑战及创新的机遇^[9, 10]. 从分子动力学直到工业生产的大跨度集成涉及多尺度建模问题. 在空间的尺度上, 涉及分子尺度, 然后是气泡、聚团、反应器、单元操作、整个工厂. 此外, 生命周期建模的概念将化学产品通过的各个生命阶段, 从发现、开发直到设计和制造等. 各阶段中的行为模型对应的时间尺度是不同的, 产品的形成首先从飞秒和皮秒在分子层次进行反应到以分钟和小时为单位的单元操作过程, 甚至到年为单位的化工生产对环境的影响, 这在时间上是一个很大的跨度. 同时产品的形成还涉及一个时序的问题. 这在时间跨度和阶段上, 是另一层意义上的多尺度现象和问题. 认识和描述不同时间、空间尺度的问题是一个复杂的过程系统工程, 需要对整个生命周期在不同尺度上深入研究, 以及针对复杂现象在不同时间和空间尺度的多尺度分解和集成建模方法. 由此而提出的化工系统工程研究领域的发展趋向和挑战在于: (1) 将分子或微观水平上的基础科学发现和工业制造及生产规划的策略相结合; (2) 研究在多目标制约下的化学产品的发现、设计和制造; (3) 研究改进化学供应链的产生和操作的决策过程.

2 产品全生命周期集成研究的挑战

传统的过程系统研究通常仅涉及对设备以及流程的优化等一些制造阶段的问题. 但是产品设计的

发展要求模拟对象向下延伸, 另外环境因素也要纳入整个过程中, 也就是向上延伸. 这就对应出现了3个不同的层次. 以往化学家侧重于分子设计、产品结构和功能等微观上的研究, 而化学工程师则主要研究工业过程的实现和优化. 把两者有机地结合起来, 探索不同尺度间的相互关联, 需要在复杂的结构中进行多尺度模型化和模拟. Charpentier等^[11]提出对从“分子设计-产品性能-过程优化”联立的整个生命周期集成建模; Favre等^[12]运用模型协同理论和模型集成技术, 探索将分子水平和介观水平的模型、过程单元设备的模型、现象模型和产品模型、过程设备参数与操作状态模型的综合集成. 产品的形成经历分子、颗粒、过程装备内物料的反应和传递、车间和工厂的物流以及最终形成产品的不同阶段, 所以即使在同一阶段也有许多不同类型的过程系统. Peter^[13]认为过程系统工程应深入研究这些层次的集成和链接, 建立动态模拟来描述生命周期过程的行为特征; 研究从分子设计、产品开发、工业放大、到生产制造的全生命周期分析的理论和方法, 实现以产品为中心的过程设计, 从实验室到工厂放大.

2.1 分子模拟和过程模拟的集成研究

化学研究从微观出发预测和指导过程研究, 而化学工程研究和设计的对象通常是生产系统. 研究全局的结构优化要求对两者进行集成建模. 在微观尺度上, 运用分子模拟辅助设计技术可以控制催化剂和活化剂的表面状态, 获得更好的选择性, 从而更好地理解分子尺度上的结构和活性的关系, 以此来控制反应、结晶、团聚等动力学行为^[14]. 在介观尺度上, 运用统计模型和大规模并行计算技术, 研究复杂介质的状态, 如: 非牛顿性流体、超临界流体、多相扩散等, 进而研究被流变力学和界面现象决定的系统, 比如乳液, 溶胶, 凝胶、泡沫、水溶性高分子材料. 可以更好地解释在特殊的生化反应器中多孔介质的影响下的质量和热量传递. 同时研究设备的不同操作模式可以采用计算机流体力学(CFD)技术模拟旋转流, 循环过程, 不稳定操作, 以及反应、分离、热传递耦合强化高效过程. 在生产工厂尺度上, 主要侧重于分析不同类型设备中操作条件的动态模拟以及物料在过程中的加工状态,

据此模拟整个产品的时间周期和费用, 诊断化学供应链中的瓶颈所在, 进一步对多种不同方案进行快速对比, 找出最佳的设备设计和生产运行的结构参数。

复杂化工过程系统的多尺度特性的集成建模一般涉及以下几个科学技术问题。(1) 并行集成: 根据微观尺度模型化和模拟的结果, 进行叠加或平均化来获得介观尺度的特性和规律;(2) 序贯集成: 把微观尺度的模型序贯传递到上一级模型中, 或采用近似或简化的微观尺度模型纳入或嵌入描述生产系统的模拟计算中;(3) 多区域模型的集成: 有时采用一个尺度的模型不足以很好描述一个过程系统, 那么需要在局部或相关区域的微观尺度模型以同时协助共同来描述形成集成模型。以上几类科学技术问题已经引起了研究人员的重视, 近年来已有一些研究成果。而在研究从“分子结构-产品性能-过程运行”整个生命周期的多尺度模型化和模拟优化中, 所涉及的多尺度问题更为复杂, 目前还没有突破性进展。

化工过程系统通常是多阶段的, 在产品过程生命周期中, 不同阶段具有不同的特征。时间尺度表现在两方面: 一是时间的长短, 如分子间的化学反应时间尺度约为 $10^{-9} \sim 10^{-2}$ s, 而工业生产中反应物在反应器和分离纯化设备中的停留时间可达 $10^{-1} \sim 10^4$ s; 二是时间序列的问题, 如化工产品的研究开发和工业生产处于不同的时间阶段。另一方面, 化工过程系统常常又是多任务集成的, 需要研究不同任务所需的不同类型时间空间多尺度过程的机制和集成问题。如在化工过程运行生产中, 一个正常的运行模型包括了稳态模拟和优化、动态控制、安全监控、调度排产、经营计划等多重任务, 这些不同任务的模型结构在时间空间尺度上均有很大差别^[15~17]。同时化工过程系统还是动态的, 不同的化工系统动态过程, 在时间尺度上也是各不相同的。如原材料和产品的市场波动, 其时间尺度在 $10^5 \sim 10^7$ s; 而生产装置的操作性能波动, 时间尺度在 $10^{-2} \sim 10^3$ s 间。系统的复杂性还表现在动态过程的非线性特征, 以及不同动态行为间相互影响和互为关联。因此, 提高设计和评价生产功能型产品的复杂系统需要在系统方法论及相关的技术和工具投入大量的研究工作, 以已有的数据、热力学、动

力学、流变学、传递学为基础, 在研究过程生命周期集成系统进行多尺度建模中开发一系列的相关工具。将涉及不同的工具软件, 建立系统集成和开放模拟平台是非常必要的。

2.2 产品全生命周期的集成研究

2.2.1 产品设计的模型化和多目标非线性规划研究

产品设计必然涉及研究分子结构与产品宏观性质之间的基础模型和定量关系, 如反应活性、溶解度等。可以采用分子模拟技术(CAMD), 基团贡献法、连接性指数等基础模型, 以及定性趋势分析等理论和方法来建立构效关系。在研究配方产品中多组成、微结构等多种因素的相互作用的非线性关系模型, 以及配方产品多功能目标的协同关系和制约因素时, 多目标非线性规划将有助于配方设计的模型化和优化。作者近期在这方面工作有了一定的进展: 以硝苯地平为模型药物, 对乳化溶剂蒸发法制备难溶性药物微球载体的过程进行了研究。结合微球的体外释放实验和药物扩散、溶解的模拟分析, 研究了药物微球载体的释放动力学, 揭示了微球释放过程中所发生的质量传递, 从而预测不同的微观结构对释放行为的影响。在实验研究的基础上, 提出了载药微球的扩散溶解模型。模型参数包括微球内有效成分的有效扩散系数和溶解速率常数。通过关联模型参数与载药微球的结构、工艺制备条件, 可对释放性能进行关联和预测, 得到了期望的控制释放曲线。结合释放模型计算和优化理论提出的模型化方法, 用于设计满足期望的药物释放性能的载药微球。这一研究结果对解决药品释放过程的“突释”和“首过效应”有着重要的意义^[18]。

2.2.2 产品设计和化工过程集成建模研究

从分子设计、产品开发、工业放大、到生产制造的全生命周期分析的理论和方法是本领域研究工作的另一个重要挑战^[19]。从实验室到工厂放大, 将采用模型协同理论和模型集成技术, 研究产品工程与过程工程集成系统的规律, 探索将分子尺度和介观尺度的模型、过程设备参数与操作状态模型的综合集成。作者通过采用产品研究开发典型案例进行产品整个生命周期的集成研究: 针对医药化学品的可生物降解聚合物载体的微观结构的开发, 研究载药聚合物

的分子结构和微观性质, 以此分析制备过程中影响颗粒性质的各种因素, 评价制备的药物颗粒的性质如尺寸、多孔性、药物包载率和释放特征曲线等. 由此控制颗粒的尺寸分布, 制备具有不同粒径的单分散性的药物颗粒. 最后分析药物释放过程机理, 包括药物的溶解、聚合物的降解和药物通过聚合物基质的扩散. 以此研究产品工程与过程工程集成系统的规律, 以及从分子设计、产品开发、工业放大、到生产制造的全生命周期分析的理论和方法, 实现以产品为中心的过程设计.

2.2.3 多产品柔性制造系统的混合整数规划研究

多产品、多用途生产装置的排产的问题表现在数学上是一个复杂的混合整数非线性规划^[20]. 间歇化工过程的排产优化也是当前此领域研究热点的关键问题之一. 其中主要研究内容包括: 研究适应专用化学品特点的多品种综合生产流程和多用途、多功能柔性制造系统的设计和操作控制; 研究同一原料系列通过不同的工艺和操作条件产生不同的系列产品的产品制导技术; 研究多产品集成生产的排队理论和排产优化问题, 实现化工产品的敏捷制造和对市场需求的快速响应. 作者最近针对原油系统生产排产模型属于非多项式可求解问题(NP), 提出了递阶排产方法, 简化了模型并大幅度降低了模型的求解时间. 采用集成库存管理的方法改进了模型求解方案, 通过平衡物料的库存来保证生产的柔性和稳定性. 案例研究表明, 递阶排产法大大降低了模型的离散变量和方程的数量, 显著改进了生产方案的柔性和稳定性^[21].

3 生命周期分析方法在环境友好可持续化工过程的研究

化工生产不断发展, 然而它对环境造成的影响将对化学工业的可持续发展造成日益严重的障碍, 先前对自然环境采取的先污染、再治理的生产方式显然是不能适应社会的可持续发展的需求^[22]. 可持续发展的要求对过程系统工程提出了全面的挑战, 要求从设计、操作、优化控制乃至使用废弃等各个方面都要考虑环境友好性. 可以预料, 21 世纪初期必然是具有环境意识的过程系统工程发展的年代^[23].

在化学产品和过程生命周期中, 对环境的考虑愈来愈提前. 20 世纪 60 年代往往在工厂建成后才考虑如何治理污染; 80 年代则在工厂设计时必须考虑三废处理设施, 但这种考虑并没有放到工艺设计之内; 到 21 世纪在科研开发阶段就要考虑环境影响, 而绿色化学则要求从产品到原料均应力争“绿色化”. 系统分析边界在不断扩大. 最初步的层次是将废物的回收、再循环和再利用纳入到过程综合范围之中; 其次, 把不同工艺过程之间的能量及物质集成统一考虑, 也就是全厂集成; 最高层次是要考虑产品生命周期中的经济与环境效应. Harish 等^[24, 25] 在 1999 年设计了环境友好溶剂, Nebel 等^[26] 在 1999 年做了溶剂设计和分离体系的综合等方面工作. 然而, 更为重要的是需要采用更加广泛的方法来对产品和过程的生命周期进行评估, 从而更加精确地预测他们的长期可持续性.

产品生命周期分析(LCA)法在 20 世纪 80 年代还是学术研究, 国际环境毒物学和化学学会(SETAC)的权威定义为: 生命周期分析方法是一种对产品, 生产工艺以及活动对环境压力进行辨识和量化来进行的. 其目的在于评估能量和物质利用, 以及废物排放对环境的影响, 寻求改善环境影响的机会以及如何利用这种机会. 这种评价贯穿于产品、工艺和活动的整个生命周期. 该方法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, 并为改善环境的各种方案做出评估. 经历多年不断的发展, 到 1997 年, ISO 14040 标准又把 LCA 是实施步骤分为四步: 目标和范围的界定、数据清单分析、影响分析和改进分析. 这一方法目前仍然不够完善, 但是如果结合产品开发用于产品全生命周期设计中将有很大的实际意义. 例如杜邦开发的超低辐射的涂料减少了 25% 的挥发性有机气体(VOC)^[27].

采用系统的方法设计可持续工业, 要求在设计开发时期就一直考虑产品和过程的整个生命周期的其他各个阶段. 具体到化学工程中, 主要采取绿色反应路线、过程强化和过程的再综合^[28]. 化学合成途径的选择, 除理论产率外, 应考虑和比较不同途径的原子利用率(原料分子中原子转化为产品的比率), 理想的原子经济性反应是指其原子转化率达

100%，不产生副产物或废物，实现废物的零排放。原子经济性反应有利于资源利用和环境保护。现在国外已有不少化工产品的生产符合这一标准。这是生产过程对环境产生潜在影响的又一评价标准。

作者最近报道了在化学产品开发中综合考虑对环境的影响因素，从而实现工艺过程的创新^[29]。推进环境友好的氧化剂的原位技术与反应之间的耦合，实现氧化过程的定向和强化方面，均相催化材料的异相化是一个符合环境友好原则的重要方向。采用的母板包括蒙脱土类、水滑石类、尖晶石类、钙钛矿类等层状物以及其他固体酸或固体碱等，开发原子经济性好、不产生环境污染、反应条件温和的各类新型绿色氧化、还原、碳链加成、烷基化等化学产品反应和合成技术和产品。作者也做了一些相关的探索性研究^[30~32]。该研究是针对有关化学产品合成反应过程，选择合适的固相催化材料，从原子构型和分子结构模型理论出发，对固相催化材料进行原子级结构设计。采用各种无机晶状化合物作为催化材料的母板，依据原子级结构设计和分子设计的理论，制备出期望的各种纳米级催化材料。

世界可持续发展商务协会(WBCSD)普及了一种有效的生态生产方式^[33]，主要涉及物料的输入、资源的开发、能量的需求等。有效的生态过程需要更少的操作费用，废物的排放更少，产品达到最多。BASF公司的在染布时采用的电化学方法就优越于传统的粉末技术。

Benyus等^[34]认为最为理想的生产模式当属于生态工业，它是根据自然生态系统模式由原来的线性模型发展到闭环模型的一种工业方式。采用这种方法，所有的废物料又可以作为其他环节的原料，其主要目的在于彻底消除废料，变废为宝。针对工业生态网络的有效的设计工具还处于研究初期。我国已有一些研究者关注和开展这方面的工作^[35]，取得了一些初步成果并结合具体工业实际进行推广，但是，在进行生态工业经济循环设计中，对系统柔性的考虑和研究，作者认为是一个尚未得到足够重视的课题。

4 结论与展望

系统集成是化工学科研究的焦点之一。在产品全生命周期不同阶段的时间空间不同尺度之间进行

关联和集成研究在化学工程学术界已经成为研究的前沿。改进化学供应链和操作的途径涉及多尺度、多态、多目标、非连续的系统模型的集成。主要解决与化学供应链的过程工程和产品工程相关的创造、合成、优化、分析、设计及控制等多元复杂问题。这是化学工程研究由工程基础向科学基础、由过程工程向产品工程和以产品为中心的过程工程转变的必然要求。探索化学供应链从分子尺度、介观尺度模型、现象模型之间的集成，建立从产品工程到过程工程的联系和跨越，将分子水平或微观层次上的基础科学创造性发现与工业需要或工程研究开发联系起来，代表了21世纪化学工程研究发展的一个重要方向和趋势。

参 考 文 献

- 1 Westerbreg A, et al. Product design. *Computers & Chemical Engineering*, 2000, 24(7): 959
- 2 Siddhaye K, et al. Design of novel pharmaceutical products via combinatorial optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 2000, 24(2): 701
- 3 Marcoulaki E C. On the development of novel chemicals using a systematic synthesis approach. (1) Optimisation framework. *Chem Eng Sci*, 2000, 55(1): 2529
- 4 Cussler E L, et al. *Chemical Product Design*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001. 1
- 5 钱宇, 等. 化学产品工程的理论和技术. *化工进展*, 2003, 22(3): 217
- 6 纪红兵, 等. 清洁氧化反应关键技术基础研究的进展. *自然科学进展*, 2004, 14(2): 132
- 7 Li J H, et al. Exploring complex systems in chemical engineering—the multi-scale methodology. *Chem Eng Sci*, 2003, 58(3): 521
- 8 Grossmann I E, et al. Research challenges in process systems engineering. *AIChE Journal*, 2000, 46(9): 1700
- 9 Grossmann I E. Process system engineering: Challenges for the chemical sciences in the 21st century. NRC Report, 2001
- 10 Grossmann I E. Challenges in the new millennium: Product discovery and design, enterprise and supply chain optimization, global life cycle assessment. The Proceedings of the 8th International Symposium on PSE. Kunming, China, 2003, Elsevier, 28
- 11 Charpentier J C. The triplet “molecular processes-product-process” engineering. The future of chemical engineering. *Chem Eng Sci*, 2002, 57(22): 4667
- 12 Favre E, et al. Chemical product engineering. Research and educational challenges. *Trans I Chem E, Part A*, 2002, (1): 65
- 13 Peter M, et al. A multi-step and multi-level approach for computer

- aided product design. *Computers & Chemical Engineering*, 2000, 24(5): 677
- 14 Femeglia M, et al. Molecular modeling and process simulation: Real possibilities and challenges. *Chem Biochem Eng* 2003, 17(1): 19
- 15 钱宇, 等. 化工过程运行系统的集成. *化工学报*, 2003, 54(4): 486
- 16 Qian Y, et al. An expert system for real-time fault diagnosis of chemical processes. *Expert System with Appl*, 2003, 24(4): 425
- 17 Cheng H N, et al. Integration of decision tasks in chemical operation process. *The Proceedings of the 8th International Symposium on Process Systems Engineering*, Chen BZ et al. A eds., Amsterdam: Elsevier, ISBN: 0-444-51404-X, 2003, 172
- 18 Qian Y, et al. Modelling and design of biodegradable polymeric microspheres for controlled drugs delivery. From molecular to product and process engineering. *The Processing of the 18th International Symposium on Chemical Reaction Engineering*, Chicago, 2004
- 19 Wintemantel K. Process and product engineering achievements, present and future challenges. *Chem Eng Sci*, 1999, 54(3): 1601
- 20 Harish D G, et al. Integrated optimal reliable design, production, and maintenance planning for multipurpose process plants. *Computers & Chemical Engineering*, 2003, 27(11): 1543
- 21 李雷, 等. 递阶排产法和原油系统排产优化模型的研究. *石油学报*, 2004, 25(16): 62
- 22 梁文平, 等. 绿色化学——解决21世纪环境、资源问题的根本出路之一. *自然科学进展*, 2000, 10(12): 1143
- 23 Bakshi B R. The quest for sustainability: Challenges for process systems engineering. *AIChE Journal*, 2003, 49(6): 1350
- 24 Heijungs R, et al. *Life Cycle Assessment*. Paris France: UNEP, 1996
- 25 Korevaar G. Sustainable criteria for conceptual process design. 21st Annual European AIChE Colloquium, the Hague, 2000, 4
- 26 Nebel B J, et al. *Environmental Science: Toward a Sustainable Future*. Boston: Prentice-Hall, 2002
- 27 Rittenhouse D. Piecing together a sustainable development strategy. *Chem Eng Prog*, 2003, 99(3): 32
- 28 杨友麒, 等. 知识经济时代的过程系统工程——面临的挑战与发展的趋势. *系统工程理论与实践*, 2002, 22(8): 1
- 29 Qian Y, et al. The process development and design of chlorine dioxide production based on hydrogen peroxide. *Chinese J Chem Eng*, 2004, 12(1): 37
- 30 Ji H B, et al. Highly efficient green oxidation of alcohols using novel heterogeneous ruthenium catalyst. *Chinese Chemical Letters*, 2003, 14(6): 615
- 31 Ji H B, et al. Kinetic evidence for reaction mechanism of liquid-solid phase oxidation of alcohols. *Reaction Kinetics and Catalysis Letters*, 2004, 82(1): 97
- 32 Ji H B, et al. Clean aerobic liquid oxidation of aldehydes by solid catalyst. *Chinese Chemical Letters*, 2004, 15(4): 305
- 33 Saling P, et al. Eco-Efficiency analysis by BASF: The method. *Int J of Life Cycle Assessment*, 2002, 7(4): 191
- 34 Benyus J. *Biomimicry*. New York: William and Morrow, 1997
- 35 陈定江, 等. 生态工业园区的MINLP模型. *过程工程学报*, 2002, 2(1): 75