

化工过程模拟、控制与优化技术的现状与发展

钱锋 杜文莉

(过程系统工程教育部工程研究中心 华东理工大学 上海)

0、引言

化工系统工程作为系统工程、化学工程、自动控制、计算机技术、管理科学等交叉的综合性学科,其目的是在总体上达成技术与经济上的最优化,达到对化工系统的最优设计、规划、决策、控制和管理,并符合可持续发展的要求。其目标要求进一步创新和发展一种科学基础,包括对化学、物理内在现象的新表述,有效的计算理论和方法以及先进的工程专业知识和评判标准的组合和扩展。在几十年的发展过程中,随着过程工业研究对象的发展、变化以及化学工程、过程控制、计算机科学等相关支撑学科技术的发展,出现了以下几个重要的发展变化:

(1) 过程系统工程的研究对象正在由传统的介观向微观和宏观两个方向延伸,小到以分子模拟为手段的产品设计,大到供应链管理的优化和生态系统,均已成为研究的热点。

(2) 从全生命周期分析的化学供应链集成角度出发,提出了绿色过程系统工程的概念。即以建立环境友好的、可持续发展的化工过程或产品为目标,从传统的“三传一反”深入到分子层次,并延伸到生态层次,是现代过程工业由工程基础向科学基础、由经济效益为主向经济—资源—环境并重、由过程工程向产品工程转变的要求,代表 21 世纪系统工程发展的方向和趋势。

(3) 人工智能技术在化工过程系统中得到广泛应用。以神经网络、模糊数学、专家系统、进化计算等为代表的智能方法已普遍应用于化工过程建模、诊断、综合、控制与管理中,成为过程系统开发、设计的得力工具。

化工过程模拟、控制与优化技术作为化工系统工程不可或缺的学科分支与应用工具,正是由于吸取了相关学科基础理论的精华和应用研究中的重要成果,其内涵逐渐丰富,研究领域也不断拓宽。

1、化工过程模拟技术

1.1 过程模拟的研究现状

模拟技术是系统工程最为成熟和实用的技术,从其应用角度来说,主要包括稳态过程模拟和动态过程模拟。

稳态过程模拟技术经历了 20 世纪五六十年代的起始期、70 年代的发展期和 80 年代的成熟期,以美国 Aspen Tech 公司的 **ASPEN PLUS**, Simulation Sciences 公司的 **PRO/II**, Honeywell 公司的 **UNISIM** (原 Hypro Tech 公司的 **HYSIM**) 软件为代表的模拟工具在过程分析、设计以及参数优化中广泛应用。目前对于石油馏份和烃类物质的计算已经相当准确、可靠,除非某些反应自身具有新的反应机理或需要新的分离技术,稳态模拟技术已经在很大程度上达到了无需小试、中试,模拟结果可直接用于工业装置设计的程度。目前稳态模拟工具已在

过程工业中随处可见,在规模上可实现包含上百万个方程的工艺流程图模拟,其模拟精度和预测能力已被工程师广泛接受和应用。

动态过程模拟的发展滞后于稳态模拟,在 20 世纪 90 年代后获得了长足进展和应用,在涉及间歇过程、连续过程的开停车、连续过程本征参数依时变化、控制系统的合成、过程系统局部与全局特性分析以及利用人为非定常态操作(如变压吸附、变温吸附、化学反应器强制周期操作等情况)来强化过程系统性能和实现技术目标等问题时,动态模拟技术凸显出其重要意义。当前国外推出的各种动态模拟软件均是基于严格的机理模型,因而它可以较准确地模拟许多化工过程,进行先进系统控制设计、开发动态仿真软件、模拟开停车过程、进行事故状态分析研究等等。其模型形式是一组代数—(偏)微分方程组,这种面向方程的形式可采用通用的求解算法,但模型收敛性对初值要求较高。现在包含 100 多个微分代数方程的系统已经在线性动力学模拟和控制中得到实现。

在目前单元流程模拟技术比较成熟的情况下,根据实际应用的要求,还出现了一些新的发展方向,主要包括:

(1). 过程模拟与流体力学模拟的结合

随着人们对各种过程更深层次的理解和认识,以及实际工业设计的需要(如需掌握设备内的流体动力学形式以进行更精确的设备结构设计),多尺度建模已经成为重要的理论方法和研究热点。计算流体力学(CFD)、计算分子科学(CMS)、分子模拟(MS/MD)等与过程模拟的结合将有助于人们从微观角度更为深刻地理解和分析宏观过程本质,因此,把具有分布参数的单元操作模型与过程模拟相结合,开发、应用考虑传递过程的非平衡级模型,以深刻理解反应过程的微观层次,具有重要的意义。同样,多组分多相复杂体系及大分子体系的不同层次的模拟与优化则会在材料、生物及产品工程中发挥更大的作用。

目前有关 CFD 与过程模拟结合的研究较少,在现有的研究中,按照 CFD 与过程模拟结合的方法可分成两类:多分区模型与混合多分区/CFD 模型。多分区模型考虑了过程设备中混合的非理想性,将过程设备分成多个理想混合区域,并彼此相连成一网络,改善了计算的精确度,而且计算量的增加也相对较小^[1]。混合多分区/CFD 模型则通过数据在分界面上的分解与整合,实现 CFD 模型与多分区模型间的数据交流,改善了多分区模型难于表征相邻分区间质量和能量流率的问题^[2]。

(2). 过程模拟与绿色化学化工的结合

作为与科学技术和工业生产紧密结合的模拟技术,不仅在时空尺度上向多尺度的研究方向发展,其研究也向着环境影响和经济效益并重的方向发展。绿色模拟技术不仅仅是在传统模拟技术的基础上引入环境影响因素,更重要的是其学科基础也从宏观层次的“三传一反”深入到分子层次、介观层次以及生态层次。目前的方法是将过程模拟软件与环境评价体系集成起来,如废物消减算法^[3]是比较经典的方法,算法中考虑了包括臭氧层消耗、人体毒性到生态毒性的 9 个潜在的环境指数,目前也实现了与其它模拟软件工具的连接。此外,还有环境危害和风险评价工具^[4],实现了与 HYSYS 软件的集成,较好地用于从废气中回收挥发性有机化合物过程的分离技术的选择和过程操作条件的优化。

(3). 过程模拟与智能方法的结合

实际问题的模型化还需要许多模糊信息的支持,这些信息可能源于工程实践的经验、文献、专利等。如 Bugaeva 等^[5]将专家系统用于气体净化过程的选择、模拟和开发,将智能的模拟系统与传统的基于物理化学原理的模型以及实验研究相结合,使过程的计算更为容易,结果更为准确。Feng 等^[6]将模糊专家系统用于实时过程监控和事故预防中,将模糊信息嵌入到过程操作模型中,使得这种动态的过程更易于处理。Neumann 等^[7]将神经网络用于化工厂危险状态的早期诊断和鉴别。作为一种智能算法,神经网络能够很好地将源于物理化学性质的数学模型同智能技术相结合,从而得到更易于收敛的计算结果^[8,9]。因此,研究基于智能方法和机理模型相结合的过程模拟的基本理论和方法具有重要的意义^[10],这样的结合使得过程系统集成更容易实现模型化和易于求解。

1.2 未来过程模拟技术的发展目标与前景

多尺度过程的集成模拟是模拟技术的必然方向,建模与优化从过程单元和设备的水平层次上,向两个相反的方向——即分子和企业两种层次上深入、延伸,即从分子水平向原子和量子的尺度过渡,从企业装置的规划和调度向供应链管理的优化发展。在发展统一化学供应链所有环节的数学模型时,主要的困难在于各环节在空间尺度、时间尺度以及化学物种数目上的巨大差异;另外,在更长尺度上可能发生基本模型无法预测的新情况。未来 20 年发展的主要挑战将是如何更好地理解在巨大的空间和时间跨度下化学供应链的内在结构和信息流,以及如何为其模拟和优化发展新的数学模型和方法。

2、化工过程控制技术

自连续工业形成大规模生产以来,自动控制就成为保证产品质量,提高产率不可或缺的一部分。随着竞争的全球化、经济的迅速发展以及越来越严格的环保和安全法规的实施,过程控制在流程工业中显得更加重要,其发展依赖于控制理论和计算机技术两个“软、硬”件工具学科的研究进展。

2.1 过程控制的研究现状

随着工业发展的技术和要求,先进控制(APC)系统不但要保证系统的稳定性和整个生产的安全,满足一定的约束条件,而且应该带来一定的经济效益和社会效益。因此,在过程工业的应用中,满足实际工业过程特点的控制系统得到了大量推广。这类控制系统对模型要求不高,在线计算方便,对过程和环境的不确定性有一定适应能力的控制策略和方法。例如,自适应控制系统、预测控制系统、鲁棒控制系统、智能控制系统(专家系统、模糊控制……)等先进控制系统,并已经成功应用在炼油生产过程的常减压装置、催化裂化装置、加氢催化重整装置、延迟焦化装置,乙烯生产过程的裂解炉、乙烯精馏单元、丙烯精馏单元,PTA 生产过程的氧化单元与精制单元,以及芳烃、聚丙烯、聚乙烯的生产过程中。

(1).生产装置实施先进控制成为发展主流

受到经典控制理论和常规控制的限制,难以处理工业过程中存在的耦合性、非线性和时变性问题。随着企业提出的高柔性、高效益的要求,上述控制方案已经不能适应,以多变量预测控制为代表的先进控制策略的提出和成功应用以后,先进控制受到了过程工业界的关注,生产装置实施先进控制成为发展主流。目前预测控制技术的研究主要集中在解决系统非线性、鲁棒性设计以及智能方法的融合。

目前,广义预测控制(GPC)都是以线性系统作为被控制对象,对于弱非线性系统,一般仍能取得较好的控制效果,但对一些强非线性系统难于奏效。对此,非线性的广义预测控制研究开始得到重视,主要有基于 Hammerstein 模型广义预测控制、基于 LMOPDP 模型广义预测控制、基于神经网络的非线性系统广义预测控制,还有基于双线性模型、多模型等多种广义预测控制方法。

针对非线性系统的特点,预测控制的鲁棒性设计也成为控制研究的热点之一。鲁棒预测控制的思想即使用鲁棒控制算法,在算法设计初期就将系统的不确定性考虑进去,使得整个预测控制系统在实际控制中面对对象不确定时仍能表现出应有的稳定性。相应软件有 Honeywell 公司推出的基于鲁棒预测控制的 RMPCT (Robust Multivariable Predictive Control Technology)等。

智能预测控制主要形式有:基于神经网络、模糊模型、遗传算法、专家控制等智能技术的预测控制算法,这些算法可以处理非线性、多目标、约束条件等生产边界条件在幅度变化的异常情况、智能预测控制思想主要是用智能方法来处理过程的描述问题,特别是非线性过程取得了一定成果。

(2). 软测量技术理论体系逐渐成熟

由于在线分析仪表(传感器)不仅价格昂贵,维护保养复杂,而且由于分析仪表滞后大,最终将导致控制质量的性能下降,难以满足生产要求,还有部分产品质量目前无法测量,这在工业生产中实例很多,例如精(分)馏塔产品成分,塔板效率,干点、闪点、反应器中反应物浓度、转化率、催化剂活性,高炉铁水中的含硅量,生物发酵罐中的生物量参数等。近年来,为了解决这类变量的测量问题,各方面在深入研究,目前应用较广泛的是软测量方法。

软测量的基本思想是对于难于测量或暂时不能测量的重要变量(或称之为主导变量),选择另外一些容易测量的变量(或称之为辅助变量),通过构成某种数学关系来推断和估计,以软件来代替硬件(传感器)功能。这类方法具有响应迅速,连续给出主导变量信息,且具有投资低、维护保养简单等优点。近年来,国内外对软测量技术进行了大量研究。著名国际过程控制专家 Mcavoy 教授将软测量技术列为未来控制领域需要研究的几大方向之一,具有广阔的应用前景。

软测量技术主要内容有:机理分析与辅助变量选择、数据采集和预处理、软测量模型建立、在线校正、实施及评价。核心问题是其模型的建立,也即建立待估计变量与其他直接测量变量间的关联模型。目前,软测量建模方法一般可分为:机理建模、回归分析、状态估计、模式识别、人工神经网络、模糊数学、基于支持向量机(SVM)和核函数的方法、过程层析成像、相关分析和现代非线性系统信息处理方法等。这些方法都不同程度地应用于软测量实践中,均具有各自的优特点及适用范围^[11]。

(3). 故障检测、预警与诊断技术日益重视

故障检测与诊断技术是发展于 20 世纪中叶的一门科学技术,是指对系统的异常状态的检测、异常状态原因的识别以及包括异常状态预测在内的各种技术的总称。随着现代工业及科学技术的迅速发展,生产设备日趋大型化、高速化、自动化和智能化,系统的安全性、可靠性和有效性日益变得重要化和复杂化,故障检测与诊断技术也愈来愈受到人们的重视。

故障诊断技术是一门综合性技术,它的开发涉及多门学科,如现代控制理论、可靠性理论、数理统计、模糊集理论、信号处理、模式识别、人工智能等学科理论。基础方法有三种:基于解析模型的方法,基于信号处理的方法和基于知识的方法^[12]。实际应用的过程监控方案通常是把多种统计量和方法结合起来,共同应用到故障检测、识别和诊断中。

故障诊断技术经过十几年的迅速发展,到目前为止已经出现了基于各种不同原理的众多的方法,如基于灰色理论的故障预报方法、基于神经网络的时间序列预测、基于粗糙集的方法、基于 Petri 网的方法、以及组合预测、基于滤波器的方法、基于模糊理论的预测和基于混沌的时间序列预测等。同以前相比,这些方法不论是检测性能、诊断性能,还是鲁棒性都有很大提高,而且对于线性时不变系统已经形成了相对较为完整的体系结构。

(4). 传统的 DCS 在走向国际统一标准的开放式系统

自 1975 年第一套分布式工业控制计算机系统诞生以来,发展迅速,到目前已经是第四代 DCS,新一代 DCS 系统已经超越了控制工程的范围,而是一套集成化的综合控制和信息管理系统^[13]。其主要特征是:集成和信息化,能够实现全厂实时控制和 PCS、MES、ERP 层的信息集成;不再限于过程控制,而是全面提供连续调节、顺序控制和批处理控制,实现混合控制功能。支持各种现场总线规约,包容 FCS 的多种产品,并且现场信号处理组件也采用集成方式,实现小型化、智能化、分散化和低成本。从几个不同的系统层面实现了开放,体现在 DCS 可以从三个不同层面与第三方产品相互连接:在企业管理层支持各种管理软件平台连接;在工厂车间层支持第三方先进控制产品、SCADA 平台、MES 产品、BATCH 处理软件,同时支持多种网络协议(以以太网为主);在装置控制层可以支持多种 DCS 单元(系统)、PLC、RTU、各种智能控制单元等,以及各种标准的现场总线仪表与执行机构。

(5). 综合自动化系统(CIPS)是发展方向

过程工业自动化在 90 年代以前仍是自动化孤岛模式。进入 90 年代,企业把提高综合自动化水平作为挖潜增效、提高竞争能力的重要途径。集常规控制、先进控制、过程优化、生产调度、企业管理、经营决策等功能于一体的综合自动化成了当前自动化发展的趋势。

在一些综合自动化系统中,底层控制系统的功能非常先进,高层 ERP 系统的功能也相当完整,但应用效果并不理想。尽管综合自动化系统应用不成功的因素是多方面的,但缺乏面向制造过程的 MES 来连接底层的控制系统和高层的经营/计划/决策系统是关键性的因素之一。

2.2 过程控制技术的发展目标与前景

(1). 智能化控制方法研究

复杂工业过程一直以来都在渴望着一种新的理论和方法能够实实在在地解决工业现场中实际问题,要求工业过程控制对被控对象模型要有“学习”和“识别”能力,对环境 and 扰动的变化要有“适应”和“鲁棒”能力等等。智能化的控制方法研究则适应了上述要求,包括两个层次的内容:①控制器的性能监控与自动维护;②仿人智能方法与控制理论的结合。

Ø 模型预测控制(MPC)是目前公认处理复杂流程工业过程多变量约束控制问题的最有效算法之一,是处理多约束、多变量、多目标、多控制模式和基于模型预测的最优控制器。但在预测控制的国内外应用中均表现出实施周期长、维护成本高、持续投运率低等问题,使得预测控制技术与传统 PID 控制技术相比,其易用性与适应性较差,限制了 MPC 的推广。美国的 AspenTech 提出了智能化的先进控制阶跃测试技术,可在模型工作性能下降到极限下时,基于自动约束的阶跃测试,在线调整控制器的模型性能^[14]。多变量模型测试与辨识过程中影响产品质量与安全操作的问题也是 MPC 的应用难点,研究以伪随机信号序列为测试信号的闭环辨识也是目前突破 MPC 应用拓展的关键和难点。此外,发展预测控制、模型辨识、性能监视一体化技术,将极大提高预测控制技术的易用性,实现自动辨识、自动投运与自动维护,这将是 MPC 技术未来几年的发展趋势。

Ø 人工智能技术以其自治性、自适应性及自学习能力的优势,吸引了包括工业过程控制在内的众多领域,控制界的工程师也期望藉此突破原有控制理论的模式,借用人类智能来解决复杂系统的控制问题,出现了以模糊控制、神经网络控制、专家控制为主的控制策略以及各种智能控制与传统控制方法相结合的形式,包括:模糊变结构控制(FVSC)、自适应模糊控制(AFC)、自适应神经网络控制(ANNC)、神经网络变结构控制(NNVAC)、神经网络预测控制(ANNPC)、模糊预测控制(FPC)、专家模糊控制(EFC)、模糊神经网络控制(FNNC)、专家神经网络控制(ENNC)等。尽管智能控制在近十年来得到了广泛的应用和发展,但在其分析、设计以及实际应用中还存在许多重要问题亟待解决:智能控制理论上仍需要建立一套系统的分析工具,对其进行验证和评价,以保证系统的可靠性和安全性;如对智能控制系统的鲁棒性问题,还缺乏严格的数学推导,对于复杂控制系统或复杂工作环境,其不确定问题更加严重,强鲁棒性控制系统研制更为必要;智能方法分支繁杂,企图应用一种技术解决复杂工业过程所有控制问题不现实,也不可能,需要针对各种智能方法的特点进行结合,取长补短,以形成有效的综合集成方法。

(2). 控制与优化一体化技术的集成

目前过程控制技术已经从单一、分散、局部的技术,开始向一体化、开放性、网络化发展,从单一生产单元,单一生产装置,发展到整个流程的综合控制,甚至多个流程的协调控制,其控制目标也从原来单一的控制精度和误差指标,发展到面向质量指标、环保指标、经济效益的综合指标,全面体现可持续发展、绿色制造的新型自动化理念;而技术手段也从单一的控制算法、控制策略,发展成为集成控制、优化、调度、计划、故障诊断等为一体的,协同互动的统一的技术整体,提供企业全方位的解决方案。目前国际上两大主要工业控制软件厂商 AspenTech 和 Honeywell 都已不再局限于过程自动化系统与软件领域,而是分别在其原有自动化软硬件优势的基础上分别提出了面向企业整体的解决方案,如 AspenTech 公司推出的 Aspen Engineering Suite、Aspen Manufacturing Suite 和 Aspen eSupply Chain Sui

te 套件, Honeywell HiSpec 的面向石油与天然气、制浆造纸、化工、炼油工业的 **Unified Manufacturing Solutions for Business Optimization** 套件。尤其是 AspenTech 公司的一体化解决方案 **Aspen one™**, 力求以一个以经济目标为主的综合目标来优化协调原先包括管理、生产在内等不同功能的系统, 如多变量预测控制、实时操作优化、集成调度与计划等, 使其构成单一的, 内部互相相关的系统, 达到企业整体流程的最优运行和最大效益。与传统的单一模式不同, 过程控制的一体化注重于过程控制相关技术的有效集成和整体优化。在纵向层次, 将优化策略贯穿于包括计划调度、生产管理、装置操作等各个层次, 通过分解协调策略将各个层次集成一个体系。在横向上, 其控制范围涵盖整个流程, 在各装置单元先进控制的基础上, 通过分解协调策略解决各个装置单元之间的耦合, 形成全流程的优化控制。由于涵盖了多种时间尺度、多种空间尺度、多种信息来源, 既存在本质的分布式特征, 又具有不同功能单元之间的关联耦合, 一体化控制体现了过程控制研究的整体性, 其深度和广度还需长时间的深入研究。

3、化工过程优化技术

近几年由于能源消耗的猛增、更加严格的环境限制和立法、产品价格和质量竞争日趋激烈, 我国的化学工业在技术上有了明显的进步。其中一个精确反映此中变化的重要工程工具便是优化。优化已经成为过程系统工程领域的主要研究对象, 并开始由学术研究方法论转向影响工业进程的科技手段, 而过程系统工程则是将系统工程学的理论和方法用于过程工业特别是化学工业领域的一门边缘学科。**20 世纪 90 年代**, 随着计算机技术的迅速发展, 复杂大系统的分析和综合成为可能, 过程系统工程和优化技术得到更为深入广泛的应用。

优化问题可以有多种分类。由图 1 可见, 优化问题可由问题中变量的类型分为连续变量优化、离散变量优化以及混杂变量优化。

优化	离散变量 优化	约束逻辑规划(CLP)	
		混合整数规划(MIP)	
		混合整数非线性规划 (MINLP)	分支定界法(BB)
			广义 Benders 分解(GBD)
			外围逼近法(OA)
	连续变量 优化	线性规划(LP), 二次规划(QP), 线性互补问题(LCP)	
		非线性规划(NLP)	
		自由导数优化(DFO)	替代法(Surrogate)
			模拟退火(SA)
			基因算法(GA)

图1 优化问题分类

图2 给出了从过程系统工程学科的角度出发的优化覆盖的领域。

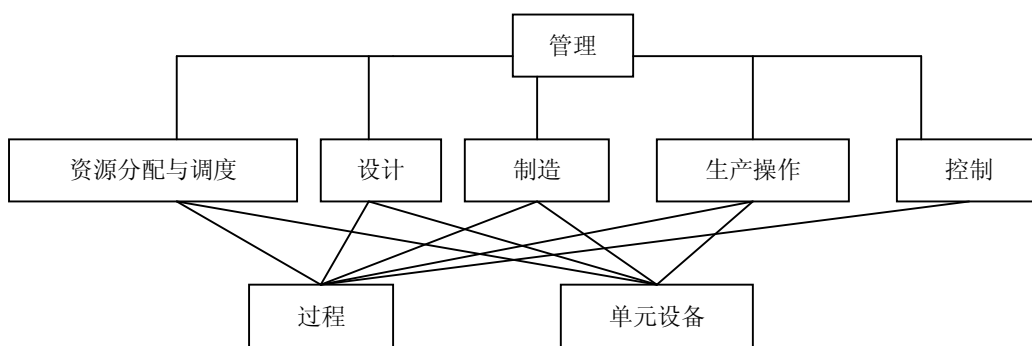


图2 优化在过程系统工程中的应用领域

(1). 过程设计与综合领域的优化

过程设计，是过程系统综合与过程系统分析交替过程的整体，包括三个主要步骤，即过程系统综合、分析与优化。

过程设计与综合领域的优化主要集中在化工过程分析与综合，这方面研究新成果越来越体现其实用性，主要优化对象为换热网络，质量交换网络，精馏分离序列等。

针对换热网络(HEN)，高维平等^[15]通过对换热网络的定性分析提出了换热网络优化改进的4条规则，并结合换热网络的灵敏度分析建立了换热网络优化改进及控制的数学模型和求解方法，给出了换热网络优化改进的步骤。为了改进同步优化模型中等温混合的不合理假设，魏关锋等^[16]用遗传算法对多流股换热器网络综合进行了研究。科研与工业实际结合得更加紧密，将夹点技术用于换热网络改造以节能^[17-20]。冯霄等人利用余热的温焓和压焓减少换热器个数的设计^[21,22]。王松平等通过传递现象的数学推导及热力学原理，得出换热器强化的优化设计温差^[23]。

质量交换网络优化方面，进展主要是传统的水分配网络的集成。都健等^[24]综述了水分配网络综合的研究内容、方法和研究进展，杨友麒^[25]综述了分别用水夹点分析法及混合整数规划MINLP法来优化水网络系统的配置。李英等^[26]提出了水夹点分析和混合整数非线性规划法相结合的用水网络最优设计法。王洪卫等^[27]提出了不确定性条件下水网络优化设计柔性综合，而刘永健等^[28]则用基于模糊规划的主目标设定法策略解决此类问题。曹殿良等^[29]用具有中间水道的水集成技术设计的用水网络。值得一提的是，华贲等在水网络集成方面有很大贡献^[30-33]，冯霄等将瓶颈问题引入化工过程设计中，对水分配网络和换热网络均进行了研究^[34,35]。

精馏分离序列方面，尹清华^[36]提出了精馏过程多工况优化设计的能量流结构理论，苏明等^[37]利用基于模糊综合评判的数据包络分析优化分离序列。董宏光等分别用组合数学理论^[38]、遗传算法^[39]研究了精馏分离序列综合问题。安维中等^[40,41]基于随机优化策略，用改进的模拟退火算法^[42]求解多组分热耦合复杂精馏系统优化的混合整数非线性规划(MINLP)模型，同时，他还综述了最优化技术在精馏过程综合中的应用及研究进展^[43]。另外，朱平等^[44]建立了以年总费用最小为目标函数的优化设计数学模型和以年操作费用最小为目标函数的优化运行数学模型对分割式热泵精馏流程的优化设计及运行调优。

另外，环境保护方面，郑东晖等^[45]提出了一种考虑动力学影响和环境约束的反应路径综合方法，研究实质是求解带有模糊参数的多目标机会约束规划模型。韩方煜等^[46]采用搜索寻优和多目标决策相结合的求解以环境影响最小和经济效益最大为目标的多目标优化模型。陈启石等^[47]报道了反应过程中的污染削减方法。化学方面，邵楠等^[48]将并行快速退火演化算

法结合Brenner势能函数用于小碳原子簇 $C_n(n=2-20)$ 的结构优化,得到了最稳定构型。塔设计方面,刘宝庆等^[49]基于传质传热模型对废轮胎裂解塔设计进行优化。

最后有必要提及的是,华贲等^[50]综述了间歇化工过程的设计和能量综合优化研究的内容、方法和研究进展。为了求解过程设计中存在的连续变量组合优化全局最优问题,施文俊等^[51]将TS法进行改进并应用于求解化工过程设计优化问题。

(2). 过程操作领域的优化

过程操作领域的优化可以算作国内这几年来优化研究中的重中之重。

经过几十年的发展应用,序贯模块法与联立方程法成为当前过程工业建模的主要方法。随着工业发展,模型对象日益庞大,方程模型的变量和方程数量呈几何增长。在研究过程中,联立方程法更广泛应用主要有如下困难:实现通用化比较困难,合理有效的组织、维护大量的变量与方程(稀疏)十分困难;难以继承已有的单元操作模块,而没有继承性的开发,很难被广泛接受并扩展。邵之江等在混合自动微分算法^[52],rsQP算法^[53],基于自动微分的灵敏度分析^[54],基于rsQP和自动微分的化工过程操作优化^[55,56]等方面进行了大量研究工作,研究了联立方程法及其拓展技术基础上的结构化和面向对象的开放方程建模^[57,58],应对复杂过程系统建模优化软件的需求的面向服务的开放架构的应用模式^[59],以及大规模非线性优化软件包UniOptima^[60]。

岳金彩等^[61]在模块环境下,将filter概念应用于化工过程优化,提出了相应的算法,并针对filter-SQP提出了一个逐步规格化策略。函数优化方面,为了克服传统PSO算法容易早熟收敛和陷入局部极小的缺点,刘丽娟等^[62]通过对PSO算法特点和行为的分析,提出一类有机结合SA算法和PSO算法的混合算法。

对于化工动态操作优化问题,现有数值解法不能有效求得最优解。而对于组合优化问题,蚁群算法有其独特的优势,因而化工界研究人员进行了大量研究。陈德钊等在这方面的研究成果有:序贯执行蚁群算法^[63],进化规划-蚁群优化算法^[64],连续约束蚁群优化算法^[65]。另外,秦建华等^[66]提出了智能蚁群算法。

反应工程方面,黄琦等^[67]对环氧乙烷合成反应器的管外沸腾水温度时间策略进行优化,得到最优沸腾水升温曲线,从而提高了环氧乙烷反应的经济效益。基于神经网络-遗传算法优化工艺操作条件也层出不穷^[68,69]。

软件应用方面,杨善升等^[70]将DMOS工业优化软件成功地应用于柴油加氢精制装置及丙烯腈反应装置的生产优化。

反应条件优化方面,主要是通过正交实验得到优化的工艺条件^[71-73],亦有将正交设计方法应用于分离技术的^[74],另外也有针对正交设计的局限性,采用人工神经网络对正交实验数据建模得出最佳反应工艺参数^[75],有大量研究运用均匀设计和回归分析方法优化实验工艺^[76-78]。也有在以往经验范围内,在其他条件固定的情况下,对影响反应的各个变量分别进行取优,最后得到反应的最佳工艺条件。这种方法广泛存在于化工实验研究中^[79-81],然而所有元素的局部最优解的总和并不可以保证一定是全局最优解,这方面在未来还期待更多研究。

石油工业方面,以对炼油厂全厂利润为优化的目标函数进行全流程优化^[82]。

动态优化方面,祝雪妹等^[83]提出基于机理模型,以最小能耗为目标的热集成精馏系统的动态优化策略,采用SQP和正交配置的离散化方法实现动态优化的计算。耿志强等^[84]提出利用动态核聚类方法来识别乙烯裂解炉生产过程最优操作模式,动态调整乙烯裂解炉的操作条

件以及选择油品和预测收率。薛美盛等^[85]通过确定优化操作变量,改进了装置的控制方案实现了装置的在线节能优化。

基于传统启发式算法难以得到良好的可行解时,有研究^[86-90]将人工神经网络用于建立黑箱数学模型,再用基因算法应用于化工过程操作优化,以此迅速得到优化变量和全局最优解。在工程应用领域利润的驱动下以及项目的紧迫性要求,此类方法有立竿见影之效。但是,此类方法缺乏深层次的数学理论基础,是否值得投入如此之力研究值得商榷。

石化领域,应用 HYSYS 软件进行稳态、动态模拟,得出相应的最佳操作条件^[91],其优化结果既可用于离线指导实际生产操作,保证装置的产品质量,也可在线优化控制打下基础。

俞欢军等^[92]提出在粒子群算法中引入遗传算法改善全局搜索性能。当旧有算法已无法解决或满意解决在过程操作中遇到的新问题时,对常规遗传算法的改进也有报道^[93]。

(3). 供应链管理领域的优化

所谓供应链(或后勤网络,供应网络),是指在物理运动或虚拟运动中将产品或服务从供应商提供给客户的由组织、人、活动、信息和资源组成的协调系统。一个典型的供应链包括生产商、服务商、销售商、销售渠道(例如零售、电子商务)和消费者(终端客户)。供应链管理的主要目的是充分利用资源(包括销售容量、货存和劳动力)以满足客户需求^[94]。

化工领域的供应链管理(SCM)的优化源于 20 世纪 90 年代以来国际石油和化工制造业面临的新挑战。企业要想提高竞争力,必须在产品成本、质量及新产品开发能力、生产灵活性以及用户的售后服务等方面取得优势。为此,应将企业整个生产过程放到供应链中去,使整个企业形成一个有机联系的系统(图 3)。提高整个企业的生产和销售效率,就是提高供应链各环节的效率,对供应链进行动态优化,将所需数量和质量的产品,以最快的速度送到客户的手中。

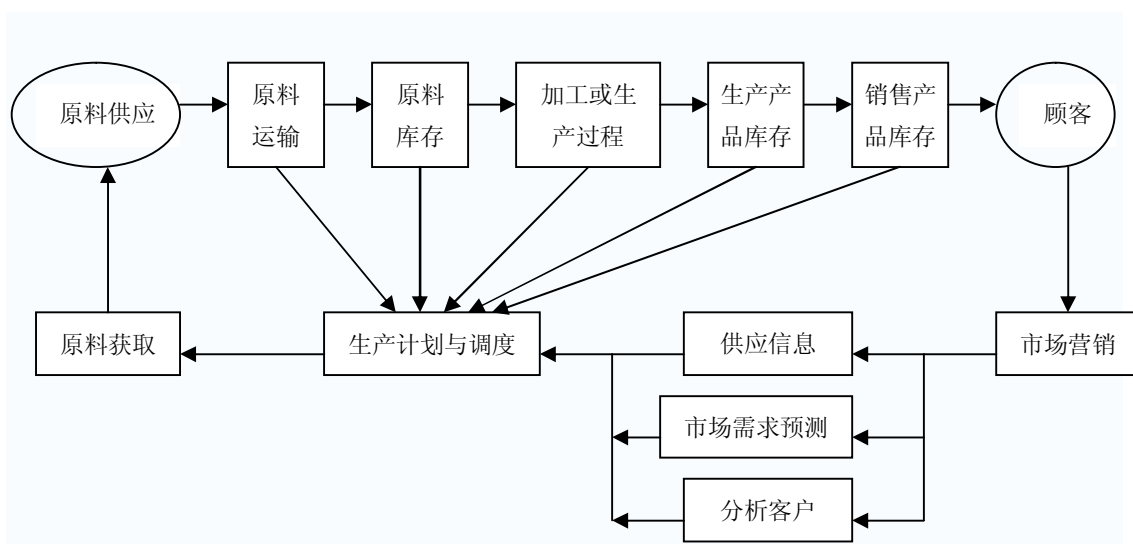


图 3 化工过程供应链管理结构图

近年来国内供应链管理领域的优化进展不大,主要研究对象还是石化企业的生产调度,主要优化手段还仅限于线性规划^[95-99]。

非线性规划方面,主要有生产计划的优化研究^[100-102],优化调度方面的研究^[103],油品调合方面的研究^[104]。其他化工领域,薛耀锋等^[105]将混合整数线性规划应用于基于连续时间的

抗生素多罐并行发酵过程优化调度的建模。江盛树等^[106]建立面向敏捷供需链的系统需求模型和生产计划调度模型，以及在纸张切割过程中建立基于遗传算法的优化数学模型，设计并实现造纸企业的排产信息系统。

(4). 产品设计和产品工程中的优化

随着传统的化学工程在研究三传一反的基本规律、模型、设计和优化方面的日趋成熟，20世纪末，一批西方化工界著名学者在探索21世纪化学工程学科发展方向时，提出了将化学产品工程作为一个重要的前沿学科领域。其中代表性的有美国普林斯顿大学的韦潜光教授的重要报告：“产品工程：化学工程发展的第三个里程碑？”目前这一理论和技术还在发展和探索之中。其中较有影响力的书籍是Cussler和Moggridge的新著^[107]。此书已被国内外多所大学选为教科书，并已有中文版授权在国内出版^[108]。国内华南理工大学和浙江大学等已经开设“化工产品设计”的课程。

目前我国处在工业化进程中，人均拥有的工业品远低于发达国家的水平。石油产品、化工基本原料、中间化学品的市场依然广阔。在过程工业的若干重要过程和大型装备的关键技术方面有许多研究课题。这种由于工业发展阶段的不同导致科学技术发展方向的差异性，由此带来的对于化学产品工程理论和技术的认识差异和学术争议，值得研究和关注。国家自然科学基金委2003年3月举办的化工领域优先发展方向九华研讨会上，有学者也提出建议将化学产品工程作为化学工程研究的一个重要的发展方向。

产品工程的研究领域主要包括以下7个方面^[109]：(1) 化学产品工程学的基础科学问题；(2) 化学产品设计中结构与性能的关系模型；(3) 产品结构的分子模拟和介观尺度模拟；(4) 产品设计、过程设计及过程操作的集成；(5) 产品设计的多尺度模型集成、全生命周期评价及化学供应链；(6) 精细化学品、专用化学品、生物制品、化学传感器的技术创新；(7) 固体产品、复杂结构产品、配方产品的技术创新。近年来国内开始出现这一方向的专题报道和研究论文还非常稀少，在这方面国内还主要局限于概念性的探讨研究^[110-117]。这一前沿领域还值得学术界的积极探索和研究。

4、化工过程综合与集成

过程集成的研究始于20世纪70年代末，最初主要用于系统节能，并发展了用于换热网络分析和设计的系统方法——夹点技术，在过程工业领域得到广泛应用。大量的工业实践表明夹点技术对提高系统能量利用率、降低投资和操作成本等具有重要的作用。在换热网络的集成思想和夹点技术的基础上，其应用领域逐步扩展到提高原料利用率、降低污染物排放和过程操作等方面。目前过程集成的尺度主要在宏观范围内，其最简化的层次是单一生产过程内的集成。其次，是把不同工艺过程之间的能量及物质集成统一起来考虑，构成企业级的过程集成。过程集成的最高层次是要考虑过程工业与社会、环境的协调发展，形成生态工业。其中，过程和企业水平上的集成较为成熟。相比之下，工业生态化的过程集成研究则处于起步阶段。随着过程集成技术的发展，其应用尺度不断向更小的分子和更大规模的化学供应链扩展。过程集成的方法也不仅限于夹点分析，数学规划、人工智能技术以及这两种方法与热力学方法的交叉和结合也被引入过程集成。

4.1 过程综合与集成的研究现状

目前过程集成泛指从系统的角度进行设计优化，将化工系统中的物质流、能量流和信息流加以综合集成，为过程的开发提供直接的方法和工具支持。在这种情况下，一些新的过程

集成的概念和技术被提出，如质量交换网络、考虑环境影响的过程集成、多联产系统、工业生态化以及化学供应链集成等。下面将从企业内部和企业间的过程集成两个方面进行阐述。

(1). 企业内部过程集成的研究进展

①热力学目标法：主要包括夹点分析法和炯经济调优法；

夹点分析法：夹点技术已从最初应用的换热网络，逐渐扩展到包括反应、分离和公用工程的整个过程系统，并发展成为一种过程系统能量集成方法，在指导热泵、热机和单塔改造方面 also 具有重要的意义。**90** 年代以来，夹点技术思想推广到质量交换网络中，逐渐发展成了一种质量综合手段，并相继提出了废水最小化的夹点设计方法、氢夹点分析技术等。**AspenTech** 已推出了相应的节水软件包 **Aspen Water**，大连理工大学在这方面做了许多工作，在水夹点技术^[118,119]、全局能量集成^[120-123]和用水与用能同时最小化^[124]等方面取得许多研究成果。

炯经济调优法：

炯分析与技术经济学相结合而产生的炯经济学(**Exergy-economics**)定量地研究了有效能的性质。华贇等^[125,126]将应用于能量转换系统的炯经济学方法首次成功应用于全过程系统，提出的“过程系统三环节能量流结构模型”总体概括了过程系统的能量结构，以此结构可对任何过程系统分层次进行能量分析和炯分析，准确指出用能改进的潜力与方向。近年来，由于对算法研究的深入，使得多目标规划技术取得了较大进展，从而使得这一方法在化工过程环境影响最小化中逐渐得到应用。例如，把 **Exergy** 损失最小作为一个约束条件考虑，王彦峰和冯霄^[127]提出了新的 **Exergy** 分析方法并把它扩展到资源利用和环境影响同时兼顾的基础上。王加璇等^[128-130]利用网络热力学方法把 **Exergy** 和生态系统结合起来进行了有益的理论探索。但由于其计算过程和实际工程体系的复杂性，其实际应用受到了限制。

②数学规划法：**20** 世纪 **80** 年代的数学规划法主要采用混合整数线性模型(**MILP**)，即用转运模型确定最小公用工程用量，用混合整数线性规划法确定最少换热单元数。**90** 年代后，超结构模型成为一种新的研究热点，即先建立一包含所有可能流程的结构模型，再用混合整数非线性规划法(**MINLP**)求解，从考虑问题上看具有更大的合理性。数学规划法的优点是能将反应、分离、公用工程及换热网络各部分同时优化，得到数学上的最优解，但是，对于规模较大，设备单元较多的装置，由于会出现组合爆炸现象，此外模型复杂性使得用一般的优化算法求解十分困难，该方法在实际应用中受到一定的限制。

③混合方法：为了克服上述方法存在的弊端，出现了各种混合方法。如：层次分解法和数学规划法的结合^[131]：即将过程系统分为输入—输出层、反应层、分离层、热集成层四个决策层次，在用具体的 **MINLP** 模型分别优化反应、分离、热集成每个决策层时，将其它两个决策层看作黑箱，只提供、反馈上下游子系统的成本和收入信息，这样反复叠代的分层优化考虑了另外两个决策层次的参数对它的影响，是过程系统的同步优化。这种集成的方法结合了层次分解法充分利用已有的经验而无需对所有替代方案进行详尽评估和超结构的 **MINLP** 优化方法可对系统结构和参数同步优化的优点，缩小问题的求解范围，使问题的求解更加迅速，最终获得更加合理的优化结果。

夹点技术与数学规划法的结合^[132]：根据全局夹点分析得到的目标和结果提出过程系统全局能量集成的各种可行和较优方案，建立包含这些可能方案的能量集成超结构及对应的 **MINLP** 模型。将过程综合和能量集成问题归结为一个数学规划问题这样不仅满足了过程全局夹点分析所规定的能量回收目标和热功集成原则，而且超结构中所包含的都是可行方案，避

免了方案过多导致的组合爆炸问题，可充分发挥两种方法的优点。此外，还有人工智能方法与夹点技术的结合、直观推断法与智能方法的结合等。

过程集成主要从表 1 的几个方面考虑^[133]。

表 1. 过程集成的应用

I	改善自然资源的有效利用
n	产品高选择性
n	高转化率
n	使用环境友好溶剂
n	用可再生资源代替不可再生资源
n	副产品再生循环利用
n	氢气资源利用与管理
n	有毒物质为较少毒性物质让路
n	毒性物质就地生产
I	改进能源利用效率
n	复杂精馏过程的集成
n	热交换网络集成
n	公用设施和热电联产系统的能量转化
I	减少排放和废物最小化
n	水网络的设计
n	反应器网络的设计
I	改善过程操作

(2). 企业间过程集成的研究进展^[133]

过程集成的研究，已经从较为成熟的单元技术过程集成和企业水平上的过程集成向生态工业过程集成发展，企业间的过程集成无疑是这一方向的研究重点。

①工业代谢分析(Industrial Metabolism, 简称 IM)

工业代谢是把原材料和能源以及劳动在一种(或多或少)稳态条件下转化为最终产品和废物的所有物理过程完整集合。与以往的系统分析方法的不同之处在于，它以环境为最终的考察目标，追踪资源从提炼到经过工业生产和消费体系后变成废物的整个过程中物质和能量的流向，给出系统造成污染的总体评价，并力求找出造成污染的主要原因。周哲等曾对煤的工业能源、化工过程进行代谢分析，并根据代谢模型优化得到经济环境最优的煤能源化工产品结构^[134]。Erkman 对近年来在工业代谢方面的研究做了很好的总结^[135]。

IM 应用的成功与否取决于能否获取适当的数据和对代谢过程了解的深度，这些工作量是相当大的。IM 包含了生命周期的概念，与生命周期评价(LCA)不同在于，IM 强调描述被研究对象的代谢过程(物、能的流动、变化)，并不关注其对环境的影响，与 LCA 的清单分析阶段相当。

②投入产出分析(Input-Output Analysis, 简称 IOA)

投入产出分析相对物质代谢分析加强了对物流网络结构深层次的挖掘和分析。由于 IOA 对构成整个经济结构的个体相互关系的关注，使得它成为工业生态学一个重要的分析方法，

应用到对各种不同尺度、不同拓扑结构的工业经济系统的分析中。**IOA** 可以把经济、环境问题结合起来,应用它分析现有系统,提出改进方案或对不同的系统规划方案进行比较选优。如矿业系统可持续发展的投入产出模型^[136]。

③柔性分析

最初柔性分析是用来解决化工过程在操作运行时,由于不确定因素的影响导致化工过程不能处于最佳状态的问题。迄今为止,这方面的研究基本上还处于理论研究阶段,实际应用很少,而且主要在换热网络、精馏塔设计等方面,其他领域甚少。目前已经有一些研究者开始关注柔性分析在生态工业系统方面的应用,清华大学已经成功地应用在鲁北工业园区的设计中^[137]。但是今后柔性分析要基于在方法上更趋实用化;柔性分析应与灵敏度分析相结合,综合优化过程系统;集成应用人工智能、数学规划等发展一套普遍使用的柔性分析方法等^[138]。

④热力学分析方法—熵(**Emergy**)分析

熵为任何资源、商品或劳务在形成过程中直接或间接使用的太阳能,并利用熵定义出的一系列新的反应系统效益的指标,如熵投资率、熵产出率、环境的负荷率、系统可持续发展指数等。杨慧利用熵对煤的热电联产和煤气化联产甲醇进行了分析,并尝试提出了基于熵分析的适用于工业系统的可持续发展指标^[139]。

与传统的衡量工业生态系统资源和能源转化效率指标相比,基于熵的评价指标体系更能体现生态工业所追求的环境与经济协调发展的目标。

⑤生命周期分析方法(**Life Cycle Analysis**, 简称 **LCA**)

LCA 已被纳入即将全面推行的 **ISO14000** 环境管理体系,将成为 **21** 世纪最有效的环境管理工具之一。根据 **ISO14040** 的规定,生命周期评价包括目的与范围确定、清单分析、影响评价和生命周期解释 **4** 个阶段。目前,已经开展了很多 **LCA** 方法的研究^[140]。与工业生态系统面向产品、资源和服务的特点不同,**LCA** 是研究工业系统间物料和能量流。目前,**LCA** 发展面临的挑战主要是数据的缺乏,研究边界的确定,环境因素比较的无目标性及无量化基础^[141]。文献^[142]强调了 **LCA** 的关键本质特征,总结了可用的方法及面临的挑战。

⑥新的交换网络分析方法

国际上已开发了一些新的质量交换网络工具软件,用来识别废水回用和其他“质量交换体”跨过程边界交换的机会^[143]。

Ø **DIME** 工业材料交换软件包(**Dynamic Industrial Materials Exchange**) 由美国 **Bechtel**(现 **Nexant**)工程公司与能源部环境工程实验室联合开发,用来辅助工业副产品协调利用的机会识别及分析。

Ø **DIET** 设计工业生态系统工具(**Designing Industrial Ecosystems Tool**) 包括设备协调数据库(识别非产品输出的潜在匹配);多目标优化模型(允许对匹配进行环境、经济和社会多目标优化计算);现实性筛选等模块的生态工业园区设计工具雏形。

Ø 利用地理信息系统 **GIS** 设计工业废料交换的一大难题——废料运输。美国德州大学利用 **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%**。

4.2 过程系统综合集成技术的发展目标与前景

(1) 传统的过程设计将被拓展到包含产品设计这一环节。在化学工业中, 要解决的主要挑战包括针对新型单元操作的过程强化和对环境友好的过程设计。由于目前的环境评价体系尚不成熟, 如何选择评价指标、建立合理的评价平台, 使过程系统综合朝着更有利于可持续发展方向进行将是一个非常重要的课题。

(2) 化学供应链集成涉及到产品的发现、设计、制造、配送、销售、使用直至废弃等整个生命周期的各个环节, 是一个多时间跨度、多空间尺度的过程, 它的实现需要在化学供应链各个层次均有所突破, 如分子水平的新产品设计、传统日用化工领域的过程强化、过程控制和环境友好过程的开发、从产品的分子动力学到企业的计划、调度集成的多尺度建模问题、供应链各环节测量、控制和信息系统的集成问题以及相关支撑方法和工具的研究。

5、结束语

目前, 过程系统工程正在一方面迎接全球性竞争的挑战, 一方面迎接可持续发展的挑战。利用过程系统工程方法来考虑中国工业可持续发展问题尤其具有特殊重要的意义, 一方面中国工业企业为连续 10 年国民经济高速增长作出了巨大贡献, 另一方面付出的代价也是巨大的, 而且面临能否可持续发展的问题。除了在原有化工过程模拟、控制与优化等传统方向上继续突破外, 还需要在下一阶段发展中注意以下问题:

- Ø 发展综合集成整体优化中的关键技术, 如需要大尺度微分代数方法 (如流体动力学和分子动力学), 以对体系进行多尺度模拟; 需要新的模拟和优化方法, 用以处理参数是由概率分布函数来描述的模型; 能够处理混合型—整型、离散—逻辑和定量—定性方程的高等离散—连续优化工具, 用以模拟合成、规划、调度等问题; 需要智能的建模工具, 用以提供有启发性和定性的推理。
- Ø 过程集成由单元操作及反应器的集成, 深入到由“三传一反”为基础的全过程集成, 同时, 考虑环境影响最小化的过程系统综合将为单元操作及流程创新开辟新道路。
- Ø 过程已深入到分子级微观领域, 过程系统工程走向与产品工程相结合, 与微化学工程相结合之路;
- Ø 过程 (PROCESS) 已不只是加工制造过程, 也包括商务过程, 通过提高对客户优质服务的能力来改善商业运作, 即具备能迅速改变日程安排以适应客户订单的能力, 以及与工厂现行的进度安排相适应的能力。过程系统工程与管理系统工程相结合, 向管理领域倾斜, 逐渐走向自适应企业 (Adaptive Enterprise)。

总之, 发展过程系统工程的核心和关键技术来解决我国工业企业的可持续发展问题, 是一个迫在眉睫的研究课题, 这对于我国创建环境友好型、资源节约型的和谐社会无疑具有十分重要的推进意义。

参考文献

- [1] Maggioris D., Goulas A., Alexopoulos A. H., Chatzi E. G., Kiparissides C. Use of CFD in Prediction of Particle Size Distribution in Suspension Polymer Reactors. *Computers and Chemical Engineering*, 1998, 22S: 315-322.
- [2] Bezzo F., Macchietto S., Pantelides C. C.. General Hybrid Multizonal/CFD Approach for Bioreactor Modelling. *AIChE J.*, 2003, 49: 2133-2148.
- [3] Cabezas H., Bare J.C., Mallick S.K., Pollution Prevention with Chemical Process Simulators: The Generalized Waste (WAR) Algorithm-Full Version. *Comp. Chem. Eng.*, 1999,23:623-634.
- [4] Shonnard D.R., Hiew D. S., Comparative Environmental Assessment of VOC Recovery and Recycle Design Alternatives for a Gaseous Waste Stream. *Environ Sci. Technol.*, 2000,34: 5222-5228.
- [5] Bugaeva L N,Beznosik Y A, Statjukha G A,et al. An Application of Expert System to Chioce,Simulation and Development of Gases Purification Process. *Comp. Chem. Eng.*,1996,20(Suppl):401-406.
- [6] Feng E., Yang H.B., Rao M., Fuzzy Expert System for Real-time Process Condition Monitoring and Incident Prevention. *Expert Systems with Application*, 1998, 15:383-390.
- [7] Neumann J., Deerberg G., Schlüter S., Early Detection and Identification of Dangerous States in Chemical Plants Using Neural Networks. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 1999,12:451-453.
- [8] Fontaine J.L.,Germain A., Model -based Neural Networks. *Comp. Chem. Eng.*, 2001, 25: 1045-1054.
- [9] Zhang X.P., Zhang S.J., He X.Z., Prediction of Solubility of Lysozyme in Lysozyme-NaCl-Water System with Artificial Neural Network. *Journal of Crystal Growth*, 2004, 264: 409-416.
- [10] R-Roda I., Comas J., Poch M.,et al. Automatic Knowledge Acquisition from Complex Process for the Development of Knowledge-based Systems. *Ind. Eng. Chem. Res.*,2001,40:3353-3360.
- [11] 俞金寿.先进控制技术及应用. 自动化信息,2005,11:18-22.
- [12] 周东华,叶银忠. 现代故障诊断与容错控制. 北京: 清华大学出版社,2000.
- [13] 王常力. 最新 DCS 的体系结构和技术特点: 第一讲第四代 DCS 形成原因和体系结构. 自动化博览,2004,21(3):69-71.
- [14] AspenONE 炼厂 EOM 企业运营管理解决方案, AspenTech 2006 中国用户会论文集
- [15] 高维平,杨莹,E.N.Pistikopoulos. 换热网络的优化改进和控制. 化工学报,2003,54(7): 965-971.
- [16] 魏关锋,姚平经,罗行,Roetzel Wilfried. 用遗传算法进行多流股换热器网络综合的研究. 高校化学工程学报,2003,17(4):425-430.
- [17] 魏关锋,孙亚琴,贺高红,姚平经,罗行, Roetzel Wilfried, 用改进的遗传算法进行多流股换热器网络综合(英文). 大连理工大学学报, 2004,44(2):218-223.
- [18] 孙艳泽,冯霄. 芳烃抽提装置换热网络节能改造. 计算机与应用化学,2006,23(2):161-164.
- [19] 吕艳卓,魏关锋,王瑶,匡国柱,姚平经. 常减压蒸馏装置换热网络的节能优化. 石油化工设计,2003,20(3):12-15.
- [20] 冯霄,赵驰峰,孙亮. 聚氯乙烯装置热集成,节能技术, 2006,24(1):3-5,45.
- [21] 袁剑来,华贲. 夹点技术在炼油企业生产计划中的运用. 广东化工,2005,32(4):1-3.
- [22] 严文君,冯霄. 余热的潜热回收换热方案. 计算机与应用化学,2004,21(3):403-406.
- [23] 刘业奎,王黎,严文君,冯霄. 余热多级动力回收系统及其优化. 热能动力工程,2003,18(6):564-567.
- [24] 王松平,罗伟平,陈清林,华贲. 换热强化及其优化设计的新途径. 华北电力大学学报,2004,31(6):20-23.
- [25] 都健,李英,孟小琼,樊希山,姚平经. 水分配网络综合研究. 水科学进展,2003,14(03):285-289.
- [26] 杨友麒. 节水减排优化水网络系统的集成. 计算机与应用化学,2005,21(11):73-78.
- [27] 李英,姚平经. 水夹点分析与数学规划法相结合的用水网络优化设计. 化工学报, 2004,55(2):220-225.

- [28] 乔红梅,徐冬梅,胡仰栋,华贲. 线性规划法确定用水网络最小用水量. 计算机与应用化学,2003,20(5):601-606.
- [29] 徐冬梅,胡仰栋,华贲,王修林. 逐步非线性规划法求解多组分废水最小化问题. 计算机与应用化学,2003,20(6):789-792.
- [30] 张遂,陈清林,尹清华,徐建平,华贲. 过程工业用水系统流结构模型研究. 华北电力大学学报,2004,31(6):111-114.
- [31] 徐冬梅,胡仰栋,华贲,王修林. 含再生再利用的用水网络的优化设计. 高校化学工程学报,2004,18(2):202-207.
- [32] 王洪卫,都健,樊希山,姚平经. 水网络优化设计柔性综合. 计算机与应用化学,2005,22(3):215-217.
- [33] 刘永健,袁希钢,罗伟青. 基于模糊规划的质量负荷不确定水网络的综合. 化工学报, 2006,57(4):867-873.
- [34] 曹殿良,王斌,冯霄. 中间水道水系统集成技术在催化剂厂的应用,计算机与应用化学, 2004,21(3):437-439.
- [35] 冯霄,王斌,刘永忠. 水系统瓶颈的确定及解瓶颈. 华北电力大学学报,2003,30(5):13-16.
- [36] 冯霄,李晋东. 化工系统节能“瓶颈”的辨识及解“瓶颈”. 化学工程,2005,33(3):43-46.
- [37] 尹清华,江山,陈清林,银奇英,华贲,钱宇. 精馏过程多工况优化设计的能量流结构理论. 化工学报,2003,54(6):75-782.
- [38] 苏明,房鼎业,唐宏青. 利用基于模糊综合评判的数据包络分析优化分离序列. 高校化学工程学报,2003,17(5):545-551.
- [39] 董宏光,王涛,秦立民,姚平经,袁一. 精馏分离序列综合邻域结构的研究. 华东理工大学学报,2004,30(1):29-33,56.
- [40] 董宏光,王涛,秦立民,姚平经. 应用遗传算法实现精馏分离序列优化综合. 化工进展,2004,23(2):205-29.
- [41] 安维中,袁希钢. 基于随机优化的热耦合复杂精馏系统的综合(I),模型化方法. 化工学报,2006,07
- [42] 安维中,袁希钢,基于随机优化的热耦合复杂精馏系统的综合(II),计算举例与分析,化工学报,2006,07
- [43] 安维中,袁希钢. 用于热集成精馏序列综合的改进模拟退火算法. 化工学报,2005,56(3):506-510.
- [44] 安维中,袁希钢. 最优化技术在精馏过程综合中的应用及研究进展. 计算机与应用化学,2005,22(5):333-338.
- [45] 朱平,冯霄. 分割式热泵精馏流程的优化设计及运行调优. 化学工程,2004,32(6):10-14.
- [46] 郑东晖,胡山鹰,李有润,沈静珠. 考虑动力学的反应路径多目标优化方法. 化工学报,2003,54(6):770-774.
- [47] 韩方煜,贾小平. 环境友好过程的建模和多目标优化. 计算机与应用化学,2004,21(1):83-87.
- [48] 陈启石. 冯霄. 反应过程中的污染削减方法. 化工学报,2004,55(2):317-320.
- [49] 邵楠,蔡文生,邵学广,潘忠孝. 碳原子簇 $C_n(n=2-20)$ 的结构优化及构型转换. 计算机与应用化学,2004,021(2):186-190.
- [50] 刘宝庆,蒋家玲. 基于传质传热模型的废轮胎裂解塔设计优化(I),模型建立. 化工学报,2006,07
- [51] 李志红,华贲. 间歇化工过程设计和能量综合优化研究进展. 石油化工设备, 2003,32(2):38-41.
- [52] 施文俊,何小荣,陈丙珍,邱彤. TS 法的改进及其在求解化工优化问题中的应用. 化工学报,2004,55(10):1665-1668.
- [53] 邵之江,李翔,钱积新. 化工过程系统优化中的一种混合求导算法,化工学报,,2003,54(10):1397-1402.
- [54] 江爱朋,邵之江,钱积新. 大规模过程系统优化的一种改进简约空间 SQP 算法. 浙江大学学报(工学版),2005,39(10):1470-1474.,
- [55] 邵之江,郑小青. 基于自动微分的精馏塔优化计算灵敏度分析. 化工学报,2004,55(8):1296-1300.
- [56] 江爱朋,邵之江,陈曦,郑小青,耿大钊,方学毅,钱积新. 基于简约空间序列二次规划算法和混合求导方法的精馏塔操作优化. 化工学报,2006,57(6):1378-1384.
- [57] 江爱朋,邵之江,钱积新. 基于简约 SQP 和混合自动微分的反应参数优化. 2004,38(12):1606-1610.
- [58] 陈韬,邵之江. 大规模过程系统的结构化开放方程建模. 工业控制计算机, 2005,18(4):34-35.

- [59] 邵之江,叶峰,钱积新. 面向对象的流程系统开放式方程模型化研究. 控制工程, 2004,11(4):303-305,355.
- [60] 陈韬, 邵之江, A.W.Westerberg. 面向服务的开放架构复杂过程系统模型化与优化, 化工学报, 2005,56(12):2367-2372.
- [61] 江爱朋, 邵之江, 钱积新. 大规模非线性优化软件包 UniOptima 的设计和开发, 化工自动化及仪表, 2005,32(5):28-32.
- [62] 岳金彩, 杨霞, 郑世清, 韩方煜. 模块环境下的 filter-SQP 用于过程优化. 化工学报, 2006,57(3):614-619.
- [63] 刘丽姮, 王凌, 刘波, 金以慧. 基于一类混合 PSO 算法的函数优化与模型降阶研究. 化工自动化及仪表, 2006,33(2):9-13.
- [64] 张兵, 俞欢军, 陈德钊. 序贯优化化工动态问题的蚁群算法. 高校化学工程学报, 2006,20(1):120-125.
- [65] 程志刚, 陈德钊, 吴晓华, 张兵. 进化规划-蚁群优化算法的构建并用于化工过程操作优化, 化工学报, 2005,56(12):2161-2166.
- [66] 贺益君, 陈德钊. 连续约束蚁群优化算法的构建及其在丁烯烷化过程中的应用. 化工学报, 2005,56(9):1708-1713.
- [67] 秦建华, 李智. 智能蚁群算法在化工过程优化中的应用. 化工自动化及仪表, 2005,32(3):28-30.
- [68] 黄琦, 王弘轼, 凌泽济. 环氧乙烷合成反应器温度-时间优化策略, 化工学报, 2005,56(5):870-874.
- [69] 李为民, 徐春明, 高国生, 许志伟. 基于神经网络-遗传算法优化制氢工艺水碳比. 化工进展, 2004,23(9):998-1000.
- [70] 周昊, 朱洪波, 岑可法. 基于人工神经网络和遗传算法的火电厂锅炉实时燃烧优化系统. 动力工程, 2003,23(5):2665-2669.
- [71] 杨善升, 陆文聪, 陈念贻. DMOS 优化软件及其在化工过程优化中的应用, 化工自动化及仪表, 2005,32(4):36-39.
- [72] 张良栓, 陈纪忠, 祝巨, 张少锋, 吴国华. 固体聚合硫酸铁的制取及工艺优化研究, 高校化学工程学报, 2004,18(4):494-500.
- [73] 冯长根, 胡秀峰, 曾庆轩, 周绍箕. 聚丙烯纤维接枝丙烯酸反应条件优化. 化工学报, 2005,56(3):555-559.
- [74] 张庆轩, 高颖, 朱泽华, 周朝晖, 杨普江. 硅-丙共聚物纳米乳液的合成条件优化. 化工进展, 2006,25(3):329-333.
- [75] 邢承治, 胡兆吉. 共沸精馏提纯丁醇的工艺优化研究及其工程应用. 化工进展, 2006,25(7):825-828.
- [76] 王留成, 王福安, 宋建池, 翟胜利, 朱吉钦. 改进人工神经网络法进行二(2,2,6,6-四甲基-4-哌啶基)马来酸酯合成反应工艺参数优化. 高校化学工程学报, 2004,18(3):362-366.
- [77] 刘建新. 基于神经网络模型的对二甲苯氧化过程优化. 化工进展, 2006,25(6):708-711.
- [78] 杨南林, 瞿海斌, 程翼宇. 用均匀设计和回归分析法优化黄连提取工艺. 高校化学工程学报, 2004,01.
- [79] 邹建新, 王军. 锐钛型钛白粉白段制备工艺参数优化研究. 化工进展, 2004,02,185-187.
- [80] 袁军, 曾鹰, 向建敏, 艾军. 均匀设计法优化固体酒精的制备工艺. 计算机与应用化学, 2006,04.
- [81] 杨洁, 刘永琼, 祝宏, 柏正武, 邹莹. 牛磺酸合成工艺的优化. 化工进展, 2005,11,1269-1272.
- [82] 吴济民, 戴新民, 陈聚良, 郭卫东. 环己烯水合反应生成环己醇工艺条件的优化. 化工进展, 2003,11,1222-1224.
- [83] 李进, 廖良才, 谭跃进. 炼油厂全流程优化建模方法研究. 石油化工自动化, 2006,01.
- [84] 祝雪妹, 王树青. 热集成精馏系统的动态优化策略研究. 化工自动化及仪表, 2005,06,24-25.
- [85] 耿志强, 朱群雄. 动态核聚类算法在乙烯生产中的优化模式识别. 化工自动化及仪表, 2005,02,5-8.
- [86] 薛美盛, 祁飞, 吴刚, 孙德敏. 丁烯-1 精馏装置在线节能优化的研究. 化工自动化及仪表, 2006,03,17-21.
- [87] 何莉, 樊希山. 热偶精馏过程模拟与优化的改进. 计算机与应用化学, 2003,05,611-614.
- [88] 刘一凡, 吴岳棉, 胥布工, 黄道平. 基于神经网络建模和遗传算法的重油脱盐系统优化研究. 计算机与应用化学, 2003,04,528-532.
- [89] 李祥高, 肖殷, 何莉莉. 基于神经网络-遗传算法的 CT-191 合成工艺优化. 计算机与应用化

- 学,2005,11,998-1000.
- [90] 王延敏,姚平经. 热偶精馏过程模拟优化方法的改进——人工神经网络-遗传算法. 化工学报,2003,09,307-311.
- [91] 叶启亮,简敏,李欣欣,曹发海,房鼎业. 甲苯与戊二烯催化合成戊烯基甲苯反应过程的建模及优化. 计算机与应用化学,2004,06,873-877.
- [92] 吴凯,何小荣,邱彤,陈丙珍. 脱丙烷塔的操作优化. 计算机与应用化学,2003,03,233-235.
- [93] 俞欢军. 复合粒子群优化算法在模型参数估计中的应用. 高校化学工程学报,2005,05,675-680.
- [94] 李志华,陈德钊,胡上序. 基于 M-Agent 的遗传算法及其在二甲苯异构化装置优化中的应用. 化工学报,2003,05,653-658.
- [95] http://en.wikipedia.org/wiki/Supply_chain#Literature
- [96] 李初福,何小荣,陈丙珍,陈勃,龚真直,张秋怡. 炼油企业供应链管理中实沸点切割点的优化. 化工学报,2005,11,2142-2145.
- [97] 郭锦标. 线性规划技术在石油化工行业的应用——生产计划优化的历史、现状. 计算机与应用化学,2004,01,1-5.
- [98] 王景芳,郭书跃,郭武. 生产调度决策优化系统 Orion. 石油化工自动化,2006,03
- [99] 刘朝玮,李初福,何小荣,陈丙珍,龚真直,陈勃,张秋怡. 石化企业生产计划图形建模优化系统的动态格式报表的设计和实现. 计算机与应用化学,2006,02.
- [100] 何小荣,李初福,陈丙珍,张秋怡,陈勃,龚真直. 石化企业生产计划图形建模优化系统. 计算机与应用化学,2006,01,1-8.
- [101] 张冰剑,华贲,陆明亮. 炼油企业生产计划和能量系统集成优化研究(英文). 计算机与应用化学,2005,12,1083-1088.
- [102] 张冰剑,华贲,罗向龙,梁喜革. 炼油企业全厂多周期生产计划优化研究. 计算机与应用化学,2006,01,64-68.
- [103] 罗向龙,华贲,张冰剑. 石化企业蒸汽动力系统的多周期运行优化. 计算机与应用化学,2006,01,41-45.
- [104] 鄢烈祥,胡晨华,麻德贤. 锅炉蒸汽系统多操作周期的优化调度. 化工学报,2003,12,1708-1712
- [105] 曹萃文,顾幸生. 非线性油品优化调合在炼油厂中的应用. 化工自动化及仪表,2005,06,12-15
- [106] 薛耀锋,袁景淇. 抗生素发酵过程优化调度模型的研究. 化工自动化及仪表,2005,04,15-17.
- [107] 江盛树等. 基于遗传算法的造纸排产优化系统设计与实现. 化工自动化及仪表,2003,05,22-24.
- [108] Cussler E L, Moggridge G D, Chemical Product Design, Cambridge: Cambridge University Press, 2001
- [109] Cussler, Moggridge, 化学产品设计, 刘铮等译, 北京:清华大学出版社,2003
- [110] 江燕斌. 第一届化学产品工程学术研讨会会议纪要. 化工学报,2006,03
- [111] 李宏乾. 化工新概念:化学产品工程——访华南理工大学化工学院院长钱宇. 化工管理,2003,09,30-31.
- [112] 钱宇,江燕斌,章莉娟等. 化学产品工程的理论和技术. 化工进展,2003,03,217-223
- [113] 钱宇,阎志国. 化学产品全生命周期集成研究的机会和挑战. 自然科学进展,2004,11,1215-1220
- [114] 钱宇,黄智贤,江燕斌. 化工产品的生命周期成本分析. 化工进展,2006,02, 126-130.
- [115] 吴志辉,钱宇,江燕斌. 化学产品过程开发实验平台-公斤实验室的建设和应用. 现代化工,2005,03,66-68.
- [116] 周齐宏,胡山鹰,李有润,沈静珠,尉志武. 催化重整过程的分子模拟与优化. 计算机与应用化学,2004,03,447-452.
- [117] 袁金彪,华贲,李安学. 流程产品结构优化. 计算机与应用化学,2004,03, 349-355.
- [118] 郑小平,胡山鹰,李有润,沈静珠,杨王乐. 基于多层面生命周期评价方法的产品结构优化. 计算机与应用化学,2004,03, 371-374
- [119] 邱若磐,张沛存,金海勇等. 一种新的过程节水分析方法——水夹点技术及应用研究节能. 节能,2000, 12: 13-15
- [120] 尹芳, 都键, 樊希山. 新型水夹点技术在工程应用中的探讨. 工业用水与废水, 2001, 32(1): 23- 25

- [121] 修乃云, 滕虎. 应用全局夹点分析的加 / 减原则改善全局能量集成. 高校化学工程学报, 2000, 14(4): 363~ 368
- [122] 修乃云, 尹洪超, 姚平经. 能量集成改造的全局夹点分析法. 大连理工大学学报, 2000, 40(4): 409~ 412
- [123] 尹洪超, 张英, 李振民. 改进的全局能量集成法及其在炼油联合装置中应用. 大连理工大学学报, 2001, 40(4): 409~ 412
- [124] 尹洪超, 李振民, 袁一. 过程全局夹点分析与超结构 MINLP 相结合的能量集成最优综合法. 化工学报, 2002, 53(2): 172- 176
- [125] 都健, 孟小琼, 樊希山等. 用能与用水同时最小化过程综合方法研究. 大连理工大学学报, 2003, 43(2): 141- 146
- [126] Zhang G. X., Hua B., Chen Q. L. Exergoeconomic Methodology for Analysis and Optimization of Process Systems . Computers and Chemical Engineering, 2000,24: 613-618.
- [127] Chen Q. L, Yin Q. H., Hua B. An Exergoeconomic Approach for Retrofit of Fractionating Systems Energy, 2002, 27(1): 65-75.
- [128] 王彦峰, 冯霄. 中国科学(B 辑), 2001, 31(1): 89~96
- [129] 王加璇, 王清照. 现代电力, 1996, 13(2): 35~38
- [130] 王清照, 程伟良, 王加璇. Yong 在生态建模中的作用. 现代电力, 1997, 14(1): 20~25
- [131] 王加璇, 王清照, 程伟良. 网络模式热经济学引论. 热力学分析与节能论文集. 北京: 科学出版社, 1997, 2-8
- [132] Daichendt M.M Grossmarm I. E. Integration of hierarchical decomposition and mathematical programming for the synthesis of process flowsheets. Computers and Chemical Engineering, 1997, 22(1/2): 147-175.
- [133] 尹洪超, 李振民, 袁一. 过程全局夹点分析与超结构 MINLP 相结合的能量集成最优综合法. 化工学报, 2002,53(2): 172-176.
- [134] 龚俊波, 杨友麒, 王静康. 可持续发展时代的过程集成. 化工进展. 2006, 25 (7): 721-728.
- [135] 周哲, 李有润, 沈静珠等. 计算机与应用化学, 2001, 18(3): 193-198.
- [136] Erkman S. 工业生态学. 徐兴元译. 北京: 经济日报出版社, 1999.
- [137] 彭秀平, 潘长良. 矿业研究与开发, 2004, 24(1): 5-8.
- [138] LiYourun, Shen Jingzhu, Hu shanying, et al. Journal of Chemical Industry and Engineering (China), 2001, 52: 189-204.
- [139] 王洪卫, 都健, 樊希山等. 化工时刊, 2003, 17(9): 12-18.
- [140] 杨慧. 工业生态系统分析. 北京: 清华大学出版社, 2001.
- [141] 汪劲松, 段广洪, 李方义等. 计算机集成制造系统, 1999, 5(4): 1-8.
- [142] Richards D J . The industrial green game : implications for environmental design and management. Washington D C: National Academy Press, 1997.
- [143] Pennington D. W.,Potting J., Finnveden G., et al. Life Cycle Assessment Part 2: Current Impact Assessment Practice. Environment International, 2004,30:721-739.
- [144] Alen D T, Bumer R S. Chem. Eng. Progr., 2002, 98(1): 40-45.