

迈向可持续化学工程：过程系统工程的作用

约翰·维尔逊、爱德华·戴维斯

隶属机构：化学研究开发中心部

摘要：化学工程产品对人类福祉至关重要，但它们也会导致维持所有人类活动所必需的生态系统产品和服务的退化。为了促进可持续发展性，化学工程需要通过开发化学产品和工艺来解决这一悖论，以满足当前和未来几代人的需求。由于跨空间，时间，流量或学科的影响发生变化，并且超出了自然界提供商品和服务的能力，化学工程的意外危害通常出现在该学科的传统系统边界之外。作为化学工程的一个分支学科，过程系统工程（PSE）最适合确保化学工程对可持续发展做出积极的贡献。本文回顾了PSE在探索可持续化学工程中的作用。它的关注指标、过程设计、产品设计、过程动态和可持续性控制方面的进展。致力于这一个探索的努力已经扩展了PSE的边界，并考虑到过程、产品及其生命周期的经济、环境和社会方面。未来的努力需要考虑到生态系统在支持工业活动方面的作用，以及人类行为和市场对化学产品环境影响的反效果。化学工程科学的还原论与过程系统工程的整体主义之间需要紧密的相互作用，以及工程范式的转变，从想要支配自然到从自然界学习并尊重其极限。

关键词：可持续发展；可持续性指标；过程和产品设计；过程控制；还原论；整体研究

Toward Sustainable Chemical Engineering: The Role of Process Systems Engineering

John Wilson, Edward Davis

Department of Chemical Research and Development Centre

Abstract: Products from chemical engineering are essential for human well-being, but they also contribute to the degradation of ecosystem goods and services that are essential for sustaining all human activities. To contribute to sustainability, chemical engineering needs to address this paradox by developing chemical products and processes that meet the needs of present and future generations. Unintended harm of chemical engineering has usually appeared outside the discipline's traditional system boundary due to shifting of impacts across space, time, flows, or disciplines, and exceeding nature's capacity to supply goods and services. Being a subdiscipline of chemical engineering, process systems engineering (PSE) is best suited for ensuring that chemical engineering makes net positive contributions to sustainable development. This article reviews the role of PSE in the quest toward a sustainable chemical engineering. It focuses on advances in metrics, process design, product design, and process dynamics and control toward sustainability. Efforts toward contributing to this quest have already expanded the boundary of PSE to consider economic, environmental, and societal aspects of processes, products, and their life cycles. Future efforts need to account for the role of ecosystems in supporting industrial activities, and the effects of human behavior and markets on the environmental impacts of chemical products. Close interaction is needed between the reductionism of chemical engineering science and the holism of process systems engineering, along with a shift in the engineering paradigm from wanting to dominate nature to learning from it and respecting its limits.

Keywords: sustainable development, sustainability metrics, process and product design, process control, reductionism, holistic research

1. 是什么让化学工程不可持续？

不可否认，化学工程在提高人类福祉方面发挥了至关重要的作用。也许它最大的贡献是通过哈伯-博斯过程所作的人工肥料，没有它就不可能养活地球上近75亿人。其他主要贡献包括利用资源并提供消费品和运输燃料；用于包装、组织工程和计算的新型材料；药品和医疗设备方面的创新；和其他无数。不幸的是，这些许多的进步有直接和间接的影响而导致生态系统及其为人类提供福祉所必需的商品与服务的能力恶化。这一悖论对化学工程可持续发展的贡献提出了质疑。特别是化学工业里帮助调动了数十亿吨化石资源，而这些资源是大气中温室气体的积累，因而成为了导致全球气候变化的主要贡献者。

由于施用氮肥后排放的一氧化二氮和使用甲烷中的氢生产氨后排放的二氧化碳，人工化肥也有助于温室气体的排放。氮肥和磷肥也与全球水生死区的形成有关，这是由于有害的藻类大量繁殖，它们以肥料径流为食。尽管塑料有许多独特的、看似不可替代的特性，但由于它们会导致固体废物在陆地和海洋中堆积，塑料现在在世界许多地方都被禁止了。这些都是不可持续化学工程的例子之一：尽管化学工程产品和工艺满足了当前的需求，但许多产品正在损害子孙后代满足他们自己需求的能力。因此，许多化学产品和过程的副作用违反了可持续发展的经典定义。

这种负面的副作用总是意料之外的。然而，考虑到不可持续产品和过程的后果违反了工程的“为人类和社会解决问题”的目标，减少不可持续的产品和过程的机会是当今领域面临的最重要的挑战之一。

工程界对这类问题的普遍反应是开发更多更好的技术。例如，一旦人们接受了氟氯化碳在平流层臭氧消耗中的作用，就会开发出具有较小臭氧消耗潜力的替代品。同样，为了解决与氨基肥料有关的问题，多国正在开发分散氨生产和精确农业的方法，以便使新型可降解塑料不太可能在环境中堆积。为了解决温室气体排放问题，化学工程部正在开发碳捕获、利用和储存的方法。此外，可再生能源系统也被认为是可持续的，许多努力都集中在能源存储和智能电网上。这些和其他技术进步能否确保化学工程不会破坏生态系统，并确保它们的可用性，以造福子孙后代呢？

仔细观察工程所产生的环境和社会不可接受的结果表明，意外伤害几乎总是出现在工程的系统边界之外。传统上，化学工程的边界包括产品、其制造、其原材料和其供应链。环境系统，比如出现臭氧空洞的平流层，

被温室气体积累破坏的全球气候，形成塑料岛屿的海洋环流，以及遭受有害藻华的湖泊和海洋，都不在开发这些产品的工程系统的范围之内。

氢氟烃等较新的制冷剂具有较小的臭氧消耗潜力，但具有较高的全球变暖潜力。因此，这种替代技术将环境影响从一种排放和影响类别转移到另一种。零排放的电动汽车并不意味着它们对环境的影响为零。这是因为排放物可能会从汽车的排气管转移到电力生产商的烟囱和储能所需的材料上。工程还侧重于提高每单位产品的技术效率（例如每升淡化水的能源消耗）、所需产品的产量和燃料燃烧的效率。这些进步确实减少了资源的使用和单位产品的排放量，工程师们通常认为，当产品被更大规模地使用时，这些好处将转移到社会上。不幸的是，这种关于科学创新和技术发展的密集观点没有考虑到大规模采用技术的影响，因为意外的伤害可能跨越学科转移。例如，就提供的每单位服务的成本而言，更高效的设备通常更便宜。这鼓励了经济中的消费并增加了影响，减少甚至抵消了每单位产品的任何好处。这种“反弹效应”将影响从工程领域转移到人类行为和经济学领域。

因此，如果化学工程要开发可持续的解决方案，就需要通过扩大其系统边界来减少这种转变的机会。此外，由于影响出现在环境系统中，因此也需要考虑工程活动对这些系统的影响以及这些系统吸收影响的能力。

基于这种洞察力，很明显，由于影响跨空间、时间、学科或流程的变化，可能会发生工程决策造成的意外环境损害，从而导致不可持续的工程。此外，当活动超过自然吸收排放和减轻其影响或提供资源而不耗尽库存的能力时，就会发生环境损害。这种理解指出了在声称环境可持续性之前需要满足的六个必要但不充分的要求。方法需要考虑四个领域的影响转移：空间、时间、跨学科和流程之间。除了这四个要求外，其方法还需要考虑排放和资源利用所产生的生态系统服务需求，以及相关生态系统提供这些所需商品和服务的能力。

除了环境可持续性之外，产品和工艺还需要在经济和社会方面具有可持续性。由于环境、经济和社会系统之间的复杂相互作用，可持续发展属于“邪恶”问题的范畴。这些问题很难解决，因为在捕获所有需求的同时，我们不可能以一种明确的方式来制定它们。此类问题的复杂性意味着我们可能无法找到“正确”的答案，而只能知道决策是更好还是更差。

受这些挑战的推动，为了确保化学工程对可持续发展做出积极贡献，本文重点关注过程系统工程（PSE）在确保可持续化学工程方面的作用。它对PSE如何实现

这一个目标进行了批判性审查,并建立在以前的审查和观点的基础上。下一节概述了PSE的作用和演变,以及追求可持续性对其近期发展的影响。随后对PSE在四个研究活动领域的进展进行了批判性审查:量化工业过程可持续性的指标、化学过程及其供应链的设计、单分子和多分子产品及其配方的设计以及动力学和控制的化学过程。最后一节描述了一些仍然存在的挑战以及克服这些挑战的潜在障碍。

2.PSE在追求可持续发展中的作用

化学工程的研究大多采用简化论的观点。这种方法擅长于发展新的科学洞察力并将其推向实践。这些工作带来了新的和改进的催化剂、分离过程、生物医学设备和材料的发展,但其狭隘的视角使其容易转移环境影响和意外伤害。它缺乏第1节所述的减少班次和意外伤害的机会所需的系统类型或整体观点。在化学工程中,最能发展出所需要的整体观点的子学科是PSE。

传统上,PSE的重点是化学过程系统的经济可行性。从单个设备的规模来看,PSE在过去几十年逐渐扩展到考虑过程、企业和供应链。这就产生了用于过程设计、企业范围管理和供应链设计的方法。PSE还扩展到考虑更小的尺度,如粒子、分子和原子系统,这些努力已经产生了分子设计的方法。除了提高化学工业的盈利能力的目标外,环境、健康和安全也成为目标或限制因素。

3.PSE在实现可持续性方面的进步

关于可持续性和PSE的第一篇论文出现在大约20年前,也就是“可持续发展”一词在地球首脑会议上所提出的。早期的工作集中在可持续过程设计上,这是最活跃的研究领域。第二个最活跃的领域是定义指标,以确定化学过程和产品的可持续性。可持续产品设计和过程控制受到的关注相对较少。本节将介绍这四个研究领域的一些主要进展。

3.1 指标

仅根据温室气体或水的使用来选择最重要的指标是一种流行的方法,但它可能导致重要信息的丢失和影响转移到其他资源或排放流。为了减少沿供需网络 and 不同类型流动之间空间负担转移的机会,生命周期评估(LCA)的方法一直很受欢迎。这种方法旨在考虑与选定产品或过程相关的所有活动。LCA的一个主要挑战是为大多数活动,庞大而复杂的生命周期网络获取数据。在过去的二十年中,这种方法已经标准化,软件和数据库使应用这种方法相对容易。大多数数据库由设施级数据组成,这些数据基于来自选定区域的多个制造流程的聚合,并且还提出了基于过程模型开发库存数据的方法,特

别适合新兴技术和个别过程的单元。我们已经制定了通过数据对账来提高生命周期库存数据质量的方法。库存数据可在经济规模上作为环境扩展投入产出的模型。

我们已经开发了一些指标来应对这些挑战,但迄今为止使用有限。其中包括可持续发展过程的指数,它量化了当地活动超过当地环境同化能力的程度。该容量根据当地法规定义。这一指标将所有的流量转化为陆地面积,以便与大自然的同化能力或当地环境法规进行汇总和比较。进一步的扩展已经将这些方法应用到单个过程和产品。这一个方法与生态足迹有关,该方法主要在全国范围内应用,主要关注用于吸收二氧化碳排放的土地面积,以及农业等活动对土地的其他直接用途。

评估可持续性的大部分指标都隐含地假设系统是静态的。例外情况包括使用信息论指标,例如“Fisher”信息,这些指标应用于时间序列数据,亦可用于预测复杂系统中的弹性损失。

3.2 流程与供应链设计

这些流程与供应链设计的问题可以被表述为优化问题。传统的工艺设计方法只专注于最大化利润(P),但受设计流程(F)的物理化学约束,决策变量代表设备中的参数(x_{eq})。随着人们对环境影响意识的增强,为了满足法规要求,从而引入了管道末端处理的技术。

这类系统被发现比设计或改造产生更少废物的工艺更具成本效益,因此促使人们研究从经济和环境两方面考虑设计和修改工艺的新方法。在环境过程设计方面,许多最初的努力集中在(a)过程集成以回收化学品和废物和(b)量化过程的环境影响并将其影响纳入设计过程的方法。夹点分析与工艺优化相结合,使工艺设计从零开始,能源和/或水消耗最小,从而带来环境和经济效益。然而,它没有考虑到排放及其对环境的影响。

最近关于可持续设计的工作包括使用多个经常相互冲突的环境目标如创造就业和安全。优化方法的进步也被用于以帕累托曲面的形式量化多个目标之间的权衡。进一步的评估可以帮助从这个表面选择一个特定的解决方案,并导致洞察类似于可持续设计的启发式。在单目标和多目标优化设计问题中,也开发了一些方法来考虑不确定性。

3.3 产品设计

设计化学产品时考虑可持续性是最最近的一项活动。最近的一项综述确定了两种通常由化学工程师设计的产品。单种产品包括小分子,如溶剂和制冷剂,大分子,如表面活性剂和膜。可以配制多种产品,如混合燃料,或功能性产品,如洗涤剂和药品。最后,还有电池和微

胶囊等设备。可持续性与所有类型的产品相关。正如第1节所讨论的,化学产品的历史包括许多不可持续和已被禁止的产品。在许多情况下,例如氟氯化碳,只有在大规模采用后,才会明显看出其不可持续的特性和巨大的环境影响。可持续产品设计的方法需要避免这种情况。此外,在数据可能缺乏的早期设计阶段,也需要一些方法来纳入可持续性。这是因为等到更好的数据可用时,再修改设计可能已经太晚了。

对于单物种分子的设计,如生物质产品,反应网络通量分析的方法已扩展到包括经济和环境方面的考虑。这种方法已被用于选择从葡萄糖和从生物质中制备生物燃料和生物化学物质的反应途径。在决策的早期阶段,环境因素通常近似于反应热和每条途径所需原材料的生命周期影响。经济方面可以通过简单的设计近似和启发式来近似,并且还开发了一个多尺度框架,将经济规模和生命周期库存数据库中的信息与反应途径信息结合起来。

较为复杂产品设计的系统方法是一个相对较新的研究领域,大多数注意力都集中在满足经济目标上。在设计产品时已经考虑了微观经济方面,例如消费者行为对价格需求弹性的影响。产品设计的大模型也包括可持续性和其他目标。通过LCA和生命周期可持续性评估的方法,可持续性考虑已被纳入。

3.4 动力学和控制

到目前为止所描述的大多数工作忽略了动态行为,尽管与可持续发展相关的技术、生态、经济和社会系统表现出复杂的动态。许多研究工作集中在理解可持续系统的动态本质,过程和社会系统的控制,以满足可持续的目标,并控制正在使用的技术,以迎接可持续工程的挑战。

最近的一篇综述描述了在控制可能对环境影响较小的技术方面的大量工作和挑战。其中包括风能和太阳能,可再生和不可再生资源的整合以及能源储存选项。因此,我们需要对这些技术进行过程控制,其可持续性需要考虑比单一技术更大的系统,以减少转移负担的机会。

在第3.1节中描述的指标已被用于量化环境可持续性,以及其他指标,以量化经济和社会的可持续性。综合经济、生态和社会系统的动态行为已被模拟为最优控制问题,以深入了解此类综合系统的长期行为。这种模拟系统可以洞察复杂系统的动态行为及其可持续性。一个被称为“集合可持续性”的理论框架是基于在一个特定的可持续区域内维持一个动态系统。

在生命周期和更大范围内的系统动力学和控制也受

到了一些关注。这包括在应对气候变化的政策中使用模型预测控制,以及使用经济模型确定税收对生物燃料生命周期的影响。

4. 预后

化学工程从否认其对环境的影响到致力于减少其活动及其生命周期对环境的影响,已经走过了漫长的道路。此外,出于为可持续发展做出贡献的愿望,我们在可再生资源、工艺强化、能源储存、可生物降解聚合物、生物产品、废物管理等领域正在开发大量技术。然而,为了防止这些和未来技术造成的意外伤害和历史重演,我们需要化学工程科学和PSE之间的紧密集成。因此,化学工程科学开发的新技术需要由PSE进行评估,PSE反过来需要提出修改和创新的建议,以减少意外伤害的机会,并确保可持续性。鉴于相互作用的技术、生态、经济和社会系统的复杂性,意外伤害的可能性始终存在。因此,当我们获得有关其对生态和经济系统影响的经验和知识时,需要足够灵活的技术和管理系统进行修改和替换。这样的系统将防止社会长期“锁定”在不可持续的陷阱中,并能够适应复杂的相互作用。

对于一个可持续的化学工程,PSE需要扩展到更大的规模,一直到全球经济和生物圈。此外,它还需要考虑和尊重生态系统,并能够支持工业和其他人类活动的的能力。PSE的研究和应用当然一直在朝着这些方向发展,但前方仍有一些艰巨的挑战。例如,在工程决策中包含自然的能力可能与想要控制和支配自然的传统工程范式相违背。这种模式至少自工业革命以来就一直盛行。此外,可持续性可能表明,目前在简化主义研究中追求的更高效率不是一个适当的目标。相反,如果产生的废物比来自更高效技术的废物更能用于实现循环经济,那么效率较低的技术可能会更好。化学工程实践和范式的这种变化可能会遇到不仅仅是文化上的阻力。例如,尊重自然的极限可能需要工业将所有废物转化为生物或技术营养物质,以实现工业和生态系统之间的协同作用。有些行业甚至可能不可行。与化学工程一样,大多数其他学科也在努力确保它们对可持续发展做出积极贡献。例子包括使用系统思维来实现可持续化学,以及解释自然在经济学和工业过程中的作用。最终,我们需要把工程与生态学和经济学融合在一起,以及一套共同的基本见解是需要的,以确保所有活动的内在可持续性。

教育需要适应这种进步,也需要取得进展来解决工程师相对较低的生态素养。可持续发展工程的课程在化学工程系仍然不常见。大多数工艺设计课本和一些课程确实包括可持续性的材料,因此解决了Cano-Ruiz和

McRae的批评。然而，化学工程的核心课程需要在所有课程中包括可持续工程的基本原则来应对所有这些研究和教育挑战涉及到PSE的一个关键角色。

参考文献:

- [1] Harris R. 2017. *Rigor Mortis: How Sloppy Science Creates Worthless Cures, Crushes Hope, and Wastes Billions*. New York: Basic Books
- [2] Ioannidis JP. 2005. Why most published research findings are false. *PLOS Med.* 2:e124
- [3] Garrison KE, Tang D, Schmeichel BJ. 2016. Embodying power: a preregistered replication and extension of the power pose effect. *Soc. Psychol. Personal. Sci.* 7:623 – 30
- [4] Klein RA, Ratliff KA, Vianello M, Adams R, Bahník Š, et al. 2014. Investigating variation in replicability: a “many labs” replication project. *Soc. Psychol.* 45:142 – 52
- [5] Natl. Renew. Energy Lab. 2018. Photovoltaic Research: Device Performance. Golden, CO: Natl. Renew. Energy Lab. <https://www.nrel.gov/pv/device-performance.html>
- [6] Cohen SM. 2012. Postsynthetic methods for the functionalization of metal–organic frameworks. *Chem. Rev.* 112:970 – 1000
- [7] Keskin S, van Heest TM, Sholl DS. 2010. Can metal–organic framework materials play a useful role in large–scale carbon dioxide separations? *ChemSusChem* 3:879 – 91
- [8] Burtch NC, Jasuja H, Walton KS. 2014. Water stability and adsorption in metal–organic frameworks. *Chem. Rev.* 114:10575 – 612 20. Groom CR, Allen FH. 2014. The Cambridge Structural Database in retrospect and prospect. *Angew. Chem. Int. Ed.* 53:662 – 71
- [9] Zhang B, Wang ZM, Kurmoo M, Gao S, Inoue K, Kobayashi H. 2007. Guest–induced chirality in the ferrimagnetic nanoporous diamond framework $\text{Mn}_3(\text{HCOO})_6$. *Adv. Funct. Mater.* 17:577 – 84
- [10] Zhang C–Z, Mao H–Y, Wang Y–L, Zhang H–Y, Tao J–C. 2007. Syntheses of two new hybrid metal–organic polymers using flexible aliphatic dicarboxylates and pyrazine: crystal structures and magnetic studies. *J. Phys. Chem. Solids* 68:236 – 42
- [11] Volkringer C, Loiseau T, Férey G, Morais CM, Taulelle F, et al. 2007. Synthesis, crystal structure and ^{71}Ga solid state NMR of a MOF–type gallium trimesate (MIL–96) with μ_3 –oxo bridged trinuclear units and a hexagonal 18–ring network. *Microporous Mesoporous Mater.* 105:111 – 17
- [12] Chang W–M, Cheng M–Y, Liao Y–C, Chang M–C, Wang S–L. 2007. Template effect of chain–type polyamines on pore augmentation: five open–framework zinc phosphates with 16–ring channels. *Chem. Mater.* 19:6114 – 19
- [13] Schull TL, Henley L, Deschamps JR, Butcher RJ, Maher DP, et al. 2007. Organometallic supramolecular mixed–valence cobalt(I)/cobalt(II) aquo complexes stabilized with the water–soluble phosphine ligand p–TppTp (p–triphenylphosphine triphosphonic acid). *Organometallics* 26:2272 – 76
- [14] Kiskin MA, Aleksandrov GG, Bogomyakov AS, Novotortsev VM, Eremenko IL. 2008. Coordination polymers of cobalt(II) with pyrimidine and pyrazine: syntheses, structures and magnetic properties. *Inorg. Chem. Commun.* 11:1015 – 18
- [15] He J, Yang C, Xu Z, Zeller M, Hunter AD, Lin J. 2009. Building thiol and metal–thiolate functions into coordination nets: clues from a simple molecule. *J. Solid State Chem.* 182:1821 – 26
- [16] Konno T, Yoshinari N, Taguchi M, Igashira–Kamiyama A. 2009. Drastic change in dimensional structures of D–penicillaminato $(\text{AuI } 2\text{PtI } 2\text{ZnII})_n$ coordination polymers by moderate change in solution pH. *Chem. Lett.* 38:526 – 27
- [17] Abrahams BF, Grannas MJ, Hudson TA, Robson R. 2010. A simple lithium(I) salt with a microporous structure and its gas sorption properties. *Angew.*