



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

# Engineering

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/eng](http://www.elsevier.com/locate/eng)



Research  
Smart Process Manufacturing—Perspective

## 流程工业智能制造展望：过程系统工程师面临的挑战

Ian David Lockhart Bogle

Center for Process Systems Engineering, Department of Chemical Engineering, University College London, London WC1E 7JE, UK

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 24 November 2016

Revised 16 January 2017

Accepted 17 January 2017

Available online 16 March 2017

#### 关键词

智能制造  
过程系统工程  
不确定性  
灵活性  
优化  
基于模型的控制

### 摘要

本文讨论了流程工业智能制造对过程系统工程 (PSE) 研究人员提出的挑战。现有的研究在实现全厂和全站点优化方面已经取得了很大进展，进行基准化测试能够增加说服力。本文进一步讨论了过程系统工程师在开发可用工具和技术时遇到的技术性挑战，包括灵活性和不确定性，响应性和敏捷性，鲁棒性和安全性，混合物性质和功能的预测，以及新的建模和数学范式。利用大数据进行智能化开发来驱动系统灵活性需要面对新的挑战，例如，如何在漫长又复杂的供应链中确保数据的一致性和机密性。建模方面也存在很多挑战，涉及如何对所有的关键技术进行恰当的建模，特别是健康、安全和环境方面，需要在特定地点对微小却关键的量进行准确预测。对环境方面的关注要求我们紧密跟踪所有的分子种类，以便于它们能被最佳地用于创造可持续的解决方案。而源自于新型个性化产品的破坏性商业模式对环境的影响则难以预测。

© 2017 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of the Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

## 1. 引言

智能制造是包括美国、中国和欧盟在内的大多数经济体明确的优先发展要务。它主要表现在更好地使用大数据，即测量数据和市场数据以及机器内部连接，特别是使用物联网。虽然广泛、及时的数据和大规模的连接性是这场革命的必要条件，但还不是充分条件。开发能够智能地、及时地利用这些数据的智能算法是同等重要的，这是过程系统工程(PSE)的领域。同机械制造相比，流程制造的产品主要是连续流体或具有流体特性和分子级差异的固体流，因而提出了不同的挑战。本文回顾了一些有关智能流程制造的观点，并讨论了过程系统工程

的学术界和实业界在最大化这场革命中可能的贡献和面临的挑战。本文是一篇简短的分析观察，所引用的参考文献有高度选择性，并非旨在全面涵盖。

一般来说智能制造革命有三个阶段：

- (1) 工厂和企业整合以及全厂优化；
- (2) 开发制造智能；
- (3) 创造破坏性的商业模式。

这三个阶段在流程工业中都有共鸣。第一阶段已经开始，PSE业界已经作为先锋，提供便于集成设计和操作的工具和技术。第二阶段的思路和研究结果表明，整个供应链可以更加无缝地整合，以便更迅速、高效和可持续地提供产品；然而，这种整合仍然是行业面临的重

\* Corresponding author.

E-mail address: [d.bogle@ucl.ac.uk](mailto:d.bogle@ucl.ac.uk)

大挑战。尽管过去几十年来, 流程工业的商业模式没有发生很大的变化, 但智能制造有望帮助我们在未来以高效可持续的方式开发新的商业模式, 如提供个性化医疗。因此, 现有的商业模式, 即化学工业中常见的, 对供应链各部分之间大供应量订单订立长期合同的模式并不合适。我们需要一个新的模型, 模型允许生产小供应量、定制的、具有高附加值的产品。其生产过程需要考虑产品开发成本、制造成本和需求强度的影响。这仍然是一个重大挑战。

2008年4月, 一个研讨会讨论了美国智能过程制造面临的一系列挑战, 得出了一个综合报告[1]。Kumar等[2]提出了一个特定的试验台, 即甲烷的蒸气转化, 用于演示和评估进展。最近, Li[3]从工业角度解决了石油化工行业的挑战。这些挑战对国际上具有发达的过程工业基础的国家来说是常见的。从这些贡献中可以看出PSE在智能流程制造的挑战中居于核心地位。

在过去50年中, 针对单元、工厂、企业各层级, PSE研究人员一直致力于开发以计算为主的能够优化整个系统的方法。《美国化学工程师协会杂志》(AIChE)[4]最近有一期庆祝了这一领域的一位先驱的工作, 即Roger Sargent教授, 他自20世纪50年代就一直在该领域开展研究工作。Sargent培养了来自世界各地的许多学生, 影响并启发了更多的人, 这点可以从这一期的38篇论文中反映出来, 它们大部分都是关于该主题的。

本文依次对三个阶段进行了分析, 然后审视了一些关键性技术挑战。笔者将特别探讨PSE研究界在促使智能流程制造获得更快发展这一努力中的研究进展和遇到的挑战。笔者不仅将回顾石化制造业和化工商品制造业, 还将回顾特殊设备和药品制造业, 以及讨论把更广的环境影响作为我们所影响的系统的一部分来考虑这一做法的贡献。虽然一些挑战和机遇与其他制造业相比有一些类似性, 但仍有明显的差异。

## 2. 工厂和企业整合以及全厂优化

智能制造的关键是全厂优化, 这对于流程工程来说并不新鲜。流程工程师一直以来都在研究由单元操作相连接构成的系统, 并寻求更好甚至最优的解决方案。这也是他们一直以来所受到的教育。

全流程的优化是PSE思维的核心。具有嵌入式优化功能的仿真工具的日常使用已经使工厂在盈利上得到优化, 并且在进一步地寻求可持续生产的同时, 实现对环

境影响的最小化。目前已经开发了许多用于过程集成的工具(使用启发式[5,6]、基于优化的[7]或基于属性的[8]方法), 所有这些工具都基于稳态模型。过程集成方法已被用于设计热集成工厂, 并在一定程度上可以设计整个站点[9]。实时优化和基于模型的控制为短期至中等时间尺度范围内优化操作的动态行为(参见参考文献[10])提供了解决方案。虽然全流程优化并不普及, 但是在石油化工厂中已经常见[3]。通过使用整个供应链模型和商业软件系统, 企业集成也已成为目标。

全流程优化已经有许多工具可以使用。在第5节中将讨论利用这些工具的一些经验。全流程优化将受益于更多的基准测试, 以提高可靠性。协调多个企业和他们的客户, 其中大部分是在扩展供应链内的其他企业, 仍然是一个挑战。这不仅是一个技术问题, 而且也涉及合作关系问题, 需要确保已经发展出来的宝贵的商业和战略关系不被提出的任何技术方案所干扰。

## 3. 制造智能

智能制造旨在使客户更紧密地参与, 以便有一个反应更加灵敏和机动的系统。许多国内产品的供应链已经实现按需生产, 生产和交货时间很短。过程工业通常生产中间产品, 这些中间产品要么需要进一步加工, 要么用于生产特定产品。例如, 塑料工业针对不同的最终用途生产多种不同等级的聚合物。在聚合物成为消费者的最终产品之前, 原料聚合物的制造需经过不同的处理、成型、塑造和组装阶段。因此, 大多数流程制造商与最终产品的用户之间关系遥远。每个阶段都有自己的动态、库存、不确定性和商业驱动力。为了更加灵敏和机动, 流程工业需要引入启用了信息技术的制造智能, 与供应链的各部分之间进行沟通。

显然, 商业和技术挑战与此目标相关。这需要能够处理供应链中多个阶段的计算方法, 以支持各阶段的不同类型的商业关系和不同的动态。这需要能够考虑到在每个阶段的制造灵活性上面临的技术限制, 并纳入处理需求和生产的不确定性的能力。

虽然该过程将是客户驱动和市场导向的, 但是同时会包括供应链中的不同组成部分之间各种交易的合同约束。在以消费者为导向的工业生产中, 终端用户的供应商将积累大量显示客户需求变化趋势的数据, 并据此预测消费者的预期需求。而与即时需求数据的结合将迅速影响制造业供应链的各个部分。虽然即时需求数据对

于现在的新鲜食品行业和加工食品行业来说已经很普通[11]，但对化学、石化和制药行业来说这只是起步。Cao等[12]提出了一个数据驱动的炼油厂调度模型，它可以纳入超过一天的数据中的突发事件；然而，对于常见的食品工业整体系统的反应来说，这种方法仍然有一条很长的路要走。智能流程制造的目的是支持敏捷、稳健和可持续的过程工业，最大限度地减少浪费，同时最大限度地提高盈利能力。

## 4. 破坏性商业模式

也许过去几十年来化工厂最大的变化就是引进了现有的协调控制系统。在相当长的一段时间内，一整套相连的单元操作的基本结构没有发生较大变化。生产对环境造成的影响给行业带来了巨大的压力，从而使设计和运行更加一体化，末端处理更少。

智能制造可以通过小规模 and 微尺度局部生产来为巨大的变化提供更多的动力，例如，使产品更加贴近消费者。这对于个性化药物的发展至关重要，也可能用于制造更个性化的个人产品和专门用途的智能材料。这种变化将需要新的合成工艺和强化方法。我们也可以看到我们生产的分子和混合物发生的重大变化。最重要的变化可能是跨学科研究的扩大，工程与自然科学、社会科学和医学更加紧密地相互配合，为更快、更准确地满足客户需求提供了框架和工具。

这个阶段在智能制造的三个阶段中是最不清晰的。

## 5. 技术研究挑战

在上面的讨论中，笔者考虑了智能制造的三个阶段，如流程工业中所见。现在将讨论一系列现实的主题和相关的研究挑战。这些主题是：灵活性和不确定性，响应性和敏捷性，鲁棒性和安全性，混合物性质和功能的预测，以及新的建模和数学范式。

### 5.1. “谁知道？”灵活性和不确定性

智能制造的一个关键问题是灵活应对市场和原材料质量的不确定性的能力。自20世纪80年代以来，丰富的研究工作已经解决了这个问题。在假定了不确定性边界的基础上，若干基于优化的方法被提出来以处理不确定性，先采用随机规划[13]，再使用一个上层框架作为优化问题的基准，来最小化一个可量化的不确定性

指数[14]。最新的比较好的综述可以参考Steimel等的工作[15]。大多数方法发现，基于稳态分析的设计将满足所有预期的不确定条件，这不可避免地导致保守设计。Steimel等[16]展示了他们对十二-1-烯的加氢甲酰化的两阶段优化框架。

我们使用结合了历史数据及其中规律的概率法来反馈给设计，以平衡产生大型偏差的可能性。当然，极端事件可能会发生，因此有必要设计出一些环节来应对极端事件，并且利用数据中反映出的模式规律来预警即将到来的极端事件，从而避免做出可能对环境有害、甚至可能导致停机的极端操作。虽然一些研究人员采用控制措施或是增强的设计来处理动态响应[17-19]中的不确定性，但是考虑到离散性决策的需求和替代方案之间的权衡，还需要更多的投入来提升这些工作的全面性和可用性。不同于求解应用于实际问题时计算较为困难的完整动态优化问题，Wang和Baldea[19]使用伪随机信号来识别数据驱动的输入/输出模型。通过简化、数据分析或多层次表现，过程智能的使用提供了一种有效解决大规模问题，同时允许对预测和操作进行持续改良的可能的方法。

确定性优化方法识别产生最小操作空间的参数，以适应其预期的不确定性的全部范围。这些方法产生了保守的结果，因为不确定性范围的外部极值发生的可能性很小，也可能不是关键问题。上文列出的最早的研究[17]使用了一种具有很大潜力的随机方法，正如Sahinidis[20]的综述中所讨论的。随机解决方案允许设计师确定什么级别的风险是可接受的，然后进行相应的设计；因此，他们需要对最终设计的鲁棒性，以及是否必须处理极端事件进行一些工程判断。

所有这些方法在计算上非常昂贵，因为它们需要求解许多优化问题。因此，对从工业实践中提炼出的问题进行测试和评估的方法的效率仍存在很大的提升空间。那么我们可以更全面地确定这些方法的局限性和弱点。但是，我们有一个相当全面的工具集可供使用。设法使这些方法既实用又不过分保守是具有挑战性的。

### 5.2. “我现在就需要！”响应性和敏捷性

如上所述，智能制造的一个关键要素是通过预测和实时控制来匹配生产和需求。这里有两个要素：根据接收到的信息决定行动过程的能力，以及实现这种生产要求的能力。

在PSE中，第二个要素可通过聚焦可控性来解决：这

些措施是否可以根据模型得到实现, 以及如何才能做到这一点? PSE业界关于可控性已经做了大量的工作(可参考文献[21,22])。这些方法对于大型的非线性问题是不够的, 它很难将启发式知识与经验丰富的从业者相结合。由于过程控制是基于模型的控制, 使得其一直处于主导地位[23]。虽然计算的负担比较突出, 但它允许整体化运营。典型的实时优化器可以使用稳态模型来确定最优策略, 然后使用基于模型的控制器来实现, 以确保系统的协调和响应。虽然这些都是成熟的技术, 但是因为客户的需求在频繁地变化, 他们可能还没有对未来的一些更加灵活的需求进行测试。

虽然已经收集了相当数量的历史运行数据, 但化学工业并没有将大型需求数据库直接纳入其控制系统。然而, 目前包括食品行业在内的许多消费品行业都在进行这项工作。由此产生的响应能力在保证鲁棒性方面提出了新的挑战[24]。数据仓库提供了需求的变化趋势, 在变化是规律的和相对平和的情况下, 其提供的变化趋势是可靠的。然而, 像政治变化导致的市场大转变或者数据提供的趋势失效时就会带来麻烦。使用控制措施来匹配生产与需求是否有可能使系统更加敏感? 还是变得不稳定? 确保所需的数据驱动模型的精度适合于每个特定的区域, 也将是一个重大的挑战。对于不同的领域, 精度要求(如关于需求和原材料或产品的质量)将有很大的不同。

PSE研究人员使用离散优化模型在供应链研究方面做了大量的工作。在最近的研究中, 学者认为供应链优化对于高价值低产量的产品尤为重要[25]。虽然评审人员没有将任何一种方法认定为最好, 但他们得出结论, 分解和分层算法一直以来提供了良好的效果。流程工业将逐渐显现更多客户数据和需求驱动制造之间的关联。Li等[26]展示了数据驱动的全局优化框架如何用于整个复杂石化行业产品的规划过程。Sahay和Ierapetritou[27]阐述如何使用基于媒介的技术来优化多元化供应链。

许多实际技术安装问题涉及客户公司。例如, 企业需要能够处理公司与整个供应链以及广泛的商业和合同关系伙伴之间交涉互动的方法和工具。举例来说, 疫苗生产在紧急情况下需要快速响应, 同时要保持产品的安全和质量在有效期内。个性化医疗将需要非常小规模的生产, 并可能需要一种全新的商业模式和技术解决方案。

### 5.3. “你能保证吗?” 鲁棒性和安全性

除了快速性和敏捷性外, 客户也需要供应、质量和安全的确定性。文献中有关不确定性情况下的设计的讨

论解决了部分问题。因为该设计允许所有预测的不确定性, 因此是保守的设计。当然, 我们的模型是基于所涉及的物理和化学知识的近似值, 并且参数可以是不准确的或有缺陷的。然而, 即使假设我们已经考虑了所有可能的不确定性, 但事情仍然会出错, 如制造过程中的器件损坏、通信系统失效、预测错误等。

在过程工厂中, 探索故障检测技术大有可为[28]。故障检测可能变得更加重要, 因为我们使用越来越复杂的工具以便更好地检测质量, 这也存在更大的预测偏见或完全失效的可能。危险检测必须直接纳入系统, 因为接近最佳运行条件通常会带来额外的负担, 失败的可能性更大。

数据的鲁棒性和安全性是一个新的要考虑的问题。我们能够保证数据精确、确保数据对于竞争对手和其他试图制造困难的代理商的安全性吗? 随着仪器局部智能的提高, 以及物联网中的相互联系越来越紧密, 潜在的安全缺口也在增加, 如最近的黑客攻击案件。虽然PSE研究人员并没有做过这方面的工作, 但计算机科学家在网络安全方面取得了重大进展, 因为大多数国家非常重视网络安全。通过与从事计算机科学研究同事的密切合作, PSE研究人员可以确保网络能够安全地向我们提供方法和软件信息。

### 5.4. “你想要什么?” 销售分子物、混合物或者功能?

流程工业的业务主要是制造化学产品。长期以来, 我们专注于生产进一步加工所需要的分子, 如甲醇和乙烯。化学工业最初是源于纺织工业染料合成颜色的生产, 用于代替昂贵的天然矿物质。染料制造出了不错的效果或者功能, 使得客户很愿意为此买单。这种功能有时来自单个分子, 有时由混合物产生。事实上, 我们仍然制造具有特定的、明确定义的功能的产品; 例如, 汽油是一种复杂的烃类混合物, 具有特定的功能要求, 如辛烷值、闪点和浊点。个人产品行业也一直在寻求制造具有特定功能的产品。未来, 我们能否根据数据趋势、预测和市场情报, 更紧密地跟踪客户需求? 这个问题包含很多挑战。我们预测功能的能力有限是一个挑战, 因此我们设计混合物以实现客户特定功能需求的能力也受到限制。在设计聚合物共混物、溶剂混合物和电解质的能力方面, 流程工业已经取得了很大进展, 使得许多预测方法在相当多的商业领域中得到应用[29,30]。预测多种物质的复杂混合物的功能效应和设计符合消费者期望的特定功能的混合物时面临众多挑战, 特别是难以使用

模型表征功能本身的时候。许多属性，如味道，都非常个性化并且难以预测。

另一个挑战是需要优化从初级制造到中间体再到最终产品的整个供应链的分子表征。一条供应链可能涉及许多具有不同系统、不同业务模式的企业，它们具有保持其独特卖点(USP)和商业秘密的要求，特别是对于特定产品。这可以实现吗？

最后，个性化医学的发展是一个重大的变化。将根据每个人的疾病及其进展、新陈代谢、身体状况和个人需求对药物进行个性化定制。个性化医药对医药管理者来说也是一个挑战。然而，假设这些挑战得到解决，将需要一个相当不同的制造策略，具有个性化的功能、剂量和交付规格。为了优化客户需求，我们可以考虑对由生产模型集成的生理模型[31,32]进行功能优化。

### 5.5. “请求帮助！”推动因素：建模和数学方法

高性能计算和通信一直以来对PSE研发至关重要。然而，数学一直是PSE工具和技术的核心推动因素，并将继续成为智能流程制造的关键。20世纪50年代和60年代的计算优化技术的发展促使了现在流程工业和其他领域中常用的强大工具和技术的出现。在20世纪80年代和90年代，作为一个可靠和易于处理的问题，离散优化的发展引领了混合整数非线性规划(MINLP)求解技术的发展[33]，相应地使整个领域取得了巨大进步。分离式编程使得我们现在能够处理具有逻辑条件的问题[34]。我们仍然在非连续性和寻找全局最优解[35]方面奋斗，同时，处理全方位的动态场景仍然是一个挑战。我们需要具备大型问题可视化功能的方法来帮助理解和验证获得的解。

另一个推动因素是能够用复杂混合物和复杂几何模型进行大规模问题的建模。一般来说，建模工具仍然是专家的领域。虽然已经在如何最佳实现过程建模工作流程自动化以及单元和系统建模方面取得了进展[36,37]，但这些工具仍然难以使用。工程教育和培训机构已经认识到了这个问题；然而，使工具更直观和更强大肯定会有所帮助。

模型精确度很重要，并且强烈依赖于复杂混合物的性质和功能的预测能力。

最后，当工具与大型数据存储库(历史存储库和与客户需求相关的存储库)进行交互时，可以使用量化不确定性的方法来系统地考虑模型的准确性，如解决数据不可靠的情况。计算机科学研究人员的大型团体正在研

究处理大数据所涉及的问题。这将涉及新的数据形式，如大量图像、文本等，并需要知识管理工具[38]。

因为PSE研究人员的工作方法是有效的，所以新方法开发将是后续工作的重要组成部分。我们还将继续与其他学科的同事合作，包括计算机科学、数学和物理等学科在内。智能流程制造业面临着越来越多的跨学科挑战。

## 6. 讨论和总结

流程工业已经在智能制造理念方面取得了进展，PSE研究人员和从业者是关键推动因素。笔者已经提到了一些已发表的重要研究工作。其中许多想法已经付诸实践。但是，公有领域的基准很少。这些信息的出版总是有争议的。因此需要整合有关全流程优化的具体收益的报告——也许是在匿名的基础上，或整合由一个或多个工业规模的厂房和站点中的应用产生的报告。

笔者强调了PSE研究界在实现智能制造的全部收益方面所面临的一些挑战。许多挑战涉及特定供应链中所有企业的操作单元、工厂和园区之间信息的分享和传递。建模方面也存在很多挑战，涉及如何对所有的关键技术进行恰当的建模，特别是健康、安全和环境方面，需要在特定地点对微小却关键的量进行准确预测。尽管我们有一些快速灵活地响应客户需求的技术，但流程行业与终端用户之间直接或间接的关系使其成为特别的挑战。很难预测这一转变是否会带来全新的商业模式。

一个关键的信息是，为了制定智能制造体系，PSE研究和实践团体需要与其他学科合作。在大多数情况下，流程行业一直是以挑战为导向的，其团队不是基于传统的学科界限。大学对工程师的教育和培训也越来越跨学科发展。合作一定是实现智能过程制造的关键条件。

## 致谢

非常感谢审稿人对本文提出具有帮助性的意见。

## References

- [1] Davis J, Edgar T, Porter J, Bernaden J, Sarli M. Smart manufacturing, manufacturing intelligence and demand-dynamic performance. *Comput Chem Eng* 2012;47:145–56.
- [2] Kumar A, Baldea M, Edgar TF, Ezekoye OA. Smart manufacturing approach for efficient operation of industrial steam-methane reformers. *Ind Eng Chem Res*

- 2015;54(16):4360–70.
- [3] Li D. Perspective for smart factory in petrochemical industry. *Comput Chem Eng* 2016;91:136–48.
- [4] Grossmann IE, Doherty MF, Harold MP. A tribute to Roger Sargent. *AIChE J* 2016;62(9):2950.
- [5] Smith R. *Chemical process: Design and integration*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd.; 2005.
- [6] Douglas JM. *Conceptual design of chemical processes*. New York: McGraw-Hill Book Company; 1988.
- [7] Biegler LT, Grossmann IE, Westerberg AW. *Systematic methods of chemical process design*. Englewood Cliffs: Prentice-Hall; 1997.
- [8] Jaksland CA, Gani R, Lien KM. Separation process design and synthesis based on thermodynamic insights. *Chem Eng Sci* 1995;50(3):511–30.
- [9] Dijkema GPJ, Basson L. Complexity and industrial ecology: Foundations for a transformation from analysis to action. *J Ind Ecol* 2009;13(2):157–64.
- [10] Hebert D. Real-time optimization with MPC. *Control [Internet]*. 2013 Sep 12 [cited 2016 Oct 20]. Available from: <http://www.controlglobal.com/articles/2013/real-time-optimization-with-mpc/>.
- [11] He X, Hayya JC. The Impact of just-in-time production on food quality. *Total Qual Manage* 2002;13(5):651–70.
- [12] Cao C, Gu X, Xin Z. A data-driven rolling-horizon online scheduling model for diesel production of a real-world refinery. *AIChE J* 2013;59(4):1160–74.
- [13] Grossmann IE, Sargent RWH. Optimum design of chemical plants with uncertain parameters. *AIChE J* 1978;24(6):1021–8.
- [14] Halemane KP, Grossmann IE. Optimal process design under uncertainty. *AIChE J*. 1983;29(3):425–33.
- [15] Steimel J, Harrmann M, Schembecker G, Engell S. A framework for the modeling and optimization of process superstructures under uncertainty. *Chem Eng Sci* 2014;115:225–37.
- [16] Steimel J, Engell S. Optimization-based support for process design under uncertainty: A case study. *AIChE J* 2016;62(9):3404–19.
- [17] Mohideen MJ, Perkins JD, Pistikopoulos EN. Optimal design of dynamic systems under uncertainty. *AIChE J* 1996;42(8):2251–72.
- [18] Washington ID, Swartz CLE. Design under uncertainty using parallel multi-period dynamic optimization. *AIChE J* 2014;60(9):3151–68.
- [19] Wang S, Baldea M. Identification-based optimization of dynamical systems under uncertainty. *Comput Chem Eng* 2014;64:138–52.
- [20] Sahinidis NV. Optimization under uncertainty: State-of-the-art and opportunities. *Comput Chem Eng* 2004;28(6–7):971–83.
- [21] Yuan Z, Chen B, Zhao J. An overview on controllability analysis of chemical processes. *AIChE J* 2011;57(5):1185–201.
- [22] Sharifzadeh M. Integration of process design and control: A review. *Chem Eng Res Des* 2013;91(12):2515–49.
- [23] Ellis M, Durand H, Christofides PD. A tutorial review of economic model predictive control methods. *J Process Contr* 2014;24(8):1156–78.
- [24] Youssef MA, Youssef EM. The synergistic impact of time-based technologies on manufacturing competitive priorities. *Int J Technol Manage* 2015;67(2–4):245–68.
- [25] Sousa RT, Shah N, Papageorgiou LG. Supply chains of high-value low-volume products. In: Pistikopoulos EN, Georgiadis MC, Dua V, Papageorgiou LG, editors *Process systems engineering: Supply chain optimization*, volume 4. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA; 2008. p. 1–27.
- [26] Li J, Xiao X, Boukouvala F, Floudas CA, Zhao B, Du G, et al. Data-driven mathematical modeling and global optimization framework for entire petrochemical planning operation. *AIChE J* 2016;62(9):3020–40.
- [27] Sahay N, Ierapetritou M. Multienterprise supply chain: Simulation and optimization. *AIChE J* 2016;62(9):3392–403.
- [28] Venkatasubramanian V, Rengaswamy R, Yin K, Kavuri SN. A review of process fault detection and diagnosis: Part I: Quantitative model-based methods. *Comput Chem Eng* 2003;27(3):293–311.
- [29] Zhang L, Babi DK, Gani R. New vistas in chemical product and process design. *Annu Rev Chem Biomol* 2016;7:557–82.
- [30] Jonuzaj S, Akula PT, Kleniati PM, Adjiman CS. The formulation of optimal mixtures with generalized disjunctive programming: A solvent design case study. *AIChE J* 2016;62(5):1616–33.
- [31] Bogle IDL. Recent developments in process systems engineering as applied to medicine. *Curr Opin Chem Eng* 2012;1(4):453–8.
- [32] Ashworth W, Perez-Galvan C, Davies N, Bogle IDL. Liver function as an engineering system. *AIChE J* 2016;62(9):3285–97.
- [33] Duran MA, Grossmann IE. An outer-approximation algorithm for a class of mixed-integer nonlinear programs. *Math Program* 1986;36(3):307–39.
- [34] Ruiz JP, Grossmann IE. Global optimization of non-convex generalized disjunctive programs: A review on reformulations and relaxation techniques. *J Global Optim* 2017;67(1–2):43–58.
- [35] Floudas CA, Pardalos PM. *State of the art in global optimization: Computational methods and applications*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers; 2012.
- [36] Brandt SC, Morbach J, Miatidis M, Theißen M, Jarke M, Marquardt W. An ontology-based approach to knowledge management in design processes. *Comput Chem Eng* 2008;32(1–2):320–42.
- [37] Zhao Y, Jiang C, Yang A. Towards computer-aided multiscale modelling: An overarching methodology and support of conceptual modelling. *Comput Chem Eng* 2012;36:10–21.
- [38] Lopez Flores R, Belaud JP, Negny S, Le Lann JM. Open computer aided innovation to promote innovation in process engineering. *Chem Eng Res Des* 2015;103:90–107.