

Application of Life Cycle Assessment for Chemical Design

Zhi Guo Yan, Zheng Jiao, Ai Guo Xuan, Yuan Xin Wu

(Key Laboratory for Green Chemical Process of Ministry of Education,

Hubei Key Lab of Novel Reactor & Green Chemical Technology,

Wuhan Institute of Technology, Wuhan, 430073, P.R.China

Email: zhgyan@mail.wit.edu.cn

Abstract: Life cycle assessment is a technique for assessing the environmental performance of a product from the extraction of raw materials to its final disposal, including the phase of manufacturing and use. LCA is an environmental management standard that recognized by contemporary internationally. The LCA technical framework, development and application of LCA software and application in chemical process systems engineering were reviewed. Finally, the prospect of investigation of LCA application in chemical was summarized.

Key words: Life cycle assessment, Environmental assessment, Process systems engineering

生命周期评价在化工中的应用进展

闫志国*, 焦政, 宣爱国, 吴元欣

(武汉工程大学; 绿色化工过程省部共建教育部重点实验室;

湖北省新型反应器与绿色化学工艺重点实验室, 湖北 武汉 430073)

Email: zhgyan@mail.wit.edu.cn

摘要: 生命周期评价 (Life-Cycle Assessment, LCA) 是评估产品生命周期从原料的取得, 到制造、使用和废弃等阶段的环境影响的技术, 是当代国际公认的环境管理标准。对 LCA 的理论框架、LCA 软件的开发与应用以及在化工系统工程上的应用进展进行了综述, 最后对 LCA 在化工上应用的研究进行了展望。

关键词: 生命周期评价; 环境评价; 化工系统工程

1 引言

资源枯竭、环境恶化是人类面临的主要问题。化工行业在国民经济中占重要地位, 但作为自然资源消耗大、环境污染严重的行业, 也对自然环境造成了极大的破坏, 如造成温室效应, 酸雨、粉尘、水污染等问题。如何从根本上解决化工行业的环境污染, 实现可持续发展成为面临的重要问题。

生命周期评价作为当代主要环境管理工具以逐渐发展成为国际公认的环境管理标准。本文系统的介绍了 LCA 的理论框架, 并对 LCA 目前的主流软件进行了介绍与对比, 综述了 LCA 在化工产品以及化工系统工程中的应用, 最后对 LCA 在化工上的发展进行了展望。

基金项目: 国家自然科学基金 (20906073); 重点实验室开放基金 (GCP200808)

2 生命周期评价理论基础与技术框架

2.1 LCA 概念与理论基础

LCA 是一种评价产品、工艺或活动从原材料采集, 到产品生产、运输、销售、使用、回用、维护和最终处置整个生命周期阶段有关的环境负荷的过程^[1]。其理论基础是利用能量守恒原理和质量守恒定律, 对产品生产和使用过程中的物质、能量的使用和消耗进行平衡计算^[2]。

2.2 LCA 技术框架

ISO 14040 标准把 LCA 实施步骤分为目标和范围定义、清单分析、影响结果分析四个部分, 如图 1 所示^[3]。

目标定义即要清楚地说明开展此项生命周期评价的目的和意图, 以及研究结果的可能应用领域。通

常进行生命周期评价的目的包括产品的清洁生产 and 绿色产品的认证。研究范围的界定要满足以保证研究的广度、深度与要求的目标一致。

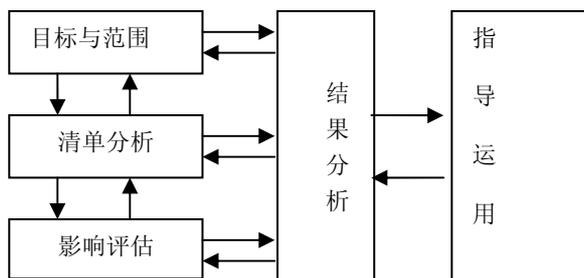


Figure 1. Programm of life cycle assessment
图 1. 生命周期评价实施步骤 (ISO14040, 1997)

清单分析的目的是将环境负荷定量化。对一种产品、工艺和活动在其整个生命周期内的能量与原材料需要量、以及对环境的排放进行以数据为基础的客观量化过程。在清单分析中通常包括以下 3 个过程：

- (1) 系统和系统边界的定义；
- (2) 系统内部流程分析确定；
- (3) 清单数据收集和处理。

环境影响评价是在清单分析基础之上，为了更好地理解清单分析数据与环境的相关性，采用调查所得的环境负荷数据定量分析对人体健康、生态环境、自然环境的影响极其相互关系。环境影响评价方法目前正在发展之中，目前广泛接受的一个“三步走”的模式，这三步是：分类、特征化和量化。

(1) 分类 分类是将清单分析中的输入和输出数据组合成相对一致的环境影响类型。

(2) 特征化 是建立模型对环境损害的程度进行比较分析和量化的过程。

(3) 量化 是确定不同环境影响类型的相对贡献大小或权重，以得到总的环境影响水平的过程。

3 LCA 软件介绍

在实施生命周期评估过程中，往往需要大量的数据以及繁琐的运算才能完成，目前国外的产品生命周期评价多采用计算机分析软件为辅助，目前 LCA 软件开发机构欧洲国家为主，Rice 等^[4]对目前欧洲的 LCA 软件进行了介绍与比较。下面介绍 SimPro、EcoPro、GaBi 三套目前常用的生命周期评估软件。

SimaPro 是由荷兰 Leiden 大学的 CML 中心所研究的，其目的主要在于可以简化流程和数据的量化，

由于各环节的评估过程与结果都可以用系统流量来表示，进而达到保护环境的目的。该软件现在已经发展到第七代。其附属数据库有方法数据库、流程数据库、处理半百分比数据库、物质数据库、单位数据库等五类。

Ecopro 是一套可在 Windows 窗口下操作的软件，内含一套由瑞士环境、森林和景观联邦办公室所建立的数据库，并有三种冲击评估模式（临界体积、效益导向模式和生态乏值）可供选择。Ecopro 主要将系统分为五种形式：一般系统、原料系统、废弃物系统、热能源系统以及电力系统，并可以针对不同形式的产品进行系统的构建。

Gabi 由德国 IKP 大学所发展，其数据库主要由 BUWAL 与 APME 发展而得，Gabi 的模块结构可分为：对象导向的模块单位与考虑生命周期的各阶段的模块两类，它的操作分析主要以 Windows 窗口为使用者接口，选单式的指令与交换式的对话框，让使用者容易了解。

其它细节的比较如表 1。

表 1 Simapro、Ecopro、Gabi 的性能比较
Table 1 Compare of performance of Simapro, Ecopro, Gabi

软件名称	Simapro	Ecopro	Gabi
数据库容量	尚可	差	好
数据库更新	有	有	有
使用者接口	Windows	Windows	Windows
网络联机操作	有	无	无
运算的透明度	尚可	差	尚可
敏感度分析	无	无	有
可视化输入输出	尚可	好	优
操作便利性	优	好	尚可
学习简易度	优	优	尚可
在线说明	有	有	有

基于 LCA 自身的一些局限性和评价中搜集数据繁琐性等原因，验证妨碍了 LCA 在各个领域的中的应用。LCA 软件应用可以提高评价的效率，更加有效推动 LCA 的运用。国内方面贾小平^[5]等开发了流程模拟软件 ECSS 化工之星平台，开展了相关的基础研究工作。目前已经建立了作为 LCA 数据库基础之一的化学物质数据库，并研发了应用于过程设计的环境影响模

块。陆一新^[6]等采用 Delphi 7.0 系统开发语言和 SQL SERVER 数据库,设计了化工产品生命周期评价系统。

4 LCA 在化工中的应用进展

由于可持续发展与环境保护已得到的到社会普遍重视,在 ISO 推出相关环境管理标准后,LCA 应用也越来越广泛,我国在应用 LCA 方面几乎涵盖了所有行业。LCA 在化工上的应用也取得了重大进展。目前,LCA 在化工上的应用主要有产品评估与化工系统工程两个方向。

4.1 LCA 在化工产品评价中的应用

我国在运用 LCA 方法评估化工产品生产方面还处于起步阶段,在化工行业中的应用还没有达到普及的程度,下面介绍 LCA 在我国化工产品评价中的应用情况。白添中等^[7]在我国最早应用了生命期的思想来对化工产品进行了评估,虽然没有运用 ISO 制定的规范 LCA 技术,但整个评估过程采用了 LCA 理论的思想。之后,在 LCA 运用与理论研究方面都有较大进展。不过到近几年,LCA 技术才在化工产品评估方面有了较成熟的运用,在化工纺织品、氧化钴生产过程、聚乙烯生产以及生物柴油生产方面都有报道^[8-11]。

孟祥键^[12]根据生命周期评价的技术框架和原则,从实现精细化工行业可持续发展的目标出发,构建了精细化工生命周期评价体系,以一种新型的杀菌灭藻剂合成系统为案例进行了实证研究,探讨了如何进一步利用 LCA 实现精细化工企业生产技术和方式的改进,进而改善环境性能;并根据 LCA 实证研究结果构建了该杀菌灭藻剂合成系统环境绩效评价模型,并提出了实现企业清洁生产的对策建议。

李芳^[13]对二甲醚生产及应用过程的环境负荷进行了生命周期评价。从我国发展二甲醚城市燃料应用的需求出发,运用 LCA 分析二甲醚全生命周期过程,定量的得出二甲醚全生命周期过程中的资源利用及环境污染物排放情况。建立二甲醚的生命周期清单,为建立我国的燃料生命周期清单库提供了参考;并将煤基二甲醚燃烧与原料煤直接燃烧对比各项资源与环境影响指标,为发展煤基二甲醚产业提供了数据参考。

国外化工行业在 LCA 应用方面已经比较成熟,在各方面都有文献报道,下面介绍近两年国外的进展情况。K.G. Harding 等^[14]利用 LCA 方法比较了生产生物柴油时使用的无机催化剂和酶催化剂的环境负荷。

目前工业上一般运用氢氧化钠做为生产生物柴油中酯交换时的催化剂,酶催化剂尚处于实验室运用阶段,作者通过 LCA 方法比较发现,运用酶催化剂时不仅简化了生产流程,而且在提纯和能量消耗上节省很多。评价结果显示,温室气体排放,富营养化和光化学烟雾排放上减少了 5%。某些毒性水平减少了一般以上。证明了生物生产流程比无机生产流程更具竞争力。

Erwan 等^[15]利用 LCA 对镀铬过程的评价优化了铬酸阳极氧化过程进行了 LCA 评价。Seungdo 等^[16]利用 LCA 方法对玉米发酵制取聚丁酸工艺的能量消耗和温室气体排放进行了评估。Kian 等^[17]对以棕榈为原料制生物柴油进行了生命周期评价。Peter 等^[18]利用 LCA 方法指导催化剂的研究。J.Dufour 等^[19]利用 LCA 比较的甲烷分解制取氢气的多种方案,得出了综合环境,能源消耗的最佳方案。

Ben 等^[20]利用 LCA 方法研究了生物质能源代替化石原料的潜力。Rosalie 等^[21]对化学产品的代谢产物进行了生命周期评价,拓宽了 LCA 的研究范畴。Rosalie 以杀虫剂为例,利用特征因素 (Characterization Factors) 来计算代谢产物的潜在影响,评估比较了原物质和代谢产物的淡水生态毒性,发现代谢产物的影响强度比原物质高出了 5 个数量级之多,而这些我们以往都会忽略掉的。

4.2 LCA 在化工系统工程的应用

目前生命周期评价已经受到过程系统工程领域的关注,作为决策工具应用于过程选择、优化和设计等,贾小平等^[5]提出,为节约资源、保护环境开发工具和技术,研究过程系统设计方法和工具,对促进过程工业的资源、能源、环境污染和经济效益协调统一具有重要意义,进一步研究生命周期评价与过程系统工程集成的技术方法和工具,是过程系统工程研究的新领域之一。近年来,LCA 方法在化工系统工程上的应用也取得了重大进展。

钱宇等^[22]从产品生产工艺的选择、产品生命周期设计和产品生命周期成本分析着手,提出了采用生命周期成本分析和 LCA 进行化工产品设计的方法。

Faisal 等^[23]为过程设计提出基于风险的 LCA 和决策方法,建立了以环境、成本和技术可行性为属性的决策模型。提出了生命周期指数系统用于化工产品设

计与过程设计^[24]。近两年,在过程优化和化工过程设计方面,多名学者做了深入研究。Gonzalo 等^[25]应用 LCA 优化化工过程设计的流程。在优化模型中文章整合了 LCA 和混合整数数学模型,特别的,此优化设计还尝试了运用非线性整数模型解决了最小化成本问题。

避免污染或环境影响最小化的关键步骤在于概念设计或过程综合阶段。在这一阶段优化设计的机会多而且研究成本低。将 LCA 运用于化工系统工程上,是从源头上减少化工生产的环境污染的有效方法。LCA 与成本、技术质量以及生产安全的综合研究,作为化工设计的依据及标准,是实现化工行业可持续发展的重要手段。

5. 结论

LCA 作为国际环境管理标准,是评估产品环境影响的有效方法。虽然 LCA 在方法论与实际应用中都有些不足,但相信随着对 LCA 研究的深入,以及体系的完善,LCA 会为可持续发展做出重大贡献。我国在 LCA 在化工应用上还处于起步阶段,还许多研究工作要做:(1) LCA 方法论上的完善,如:清单分析方法,环境负荷的量化等;(2) LCA 数据与软件系统的开发,建立适合我国环境特点的 LCA 数据库和软件;(3) 将 LCA 应用于化工系统工程中,指导产品的全生命周期设计,优化产品生产流程,为我国的化工行业向环境友好型转变做出贡献。

References (参考文献)

- [1] Fava J, R Denison, B Jone, M Curran. A Technical Framework for Life-Cycle Assessment. SETAC, Pensacola, FL, 1993.
- [2] Jiang Jin-long, Wu Yu-ping, Ma Jun, Yuan Li-hua, XU Jin-cheng. Technical framework of life cycle assessment and its progress[J]. Journal of Lanzhou University of Technology. 2008, 31(4): 23-26.
姜金龙, 吴玉萍, 等. 生命周期评价的技术框架及研究进展[J]. 兰州理工大学学报. 2008, 31(4): 23-26.
- [3] Wang Shou-bing, Yang Jian-xin, Hu Dan. Methodology and Progress of Life-Cycle Assessment[J]. Shanghai Environmental Sciences. 1998, 17(11): 7-10.
王寿兵, 杨建新, 等. 生命周期评价方法及其进展[J]. 上海环境科学. 1998, 17(11): 7-10.
- [4] Rice G, Clift R, Burns R. LCA software review: Comparison of currently available European LCA software[J]. International Journal of LCA, 1997(1): 53-59.
- [5] Jia Xiao-ping, Xiang Shu-guang. Life cycle assessment and its application in process in systems engineering[J]. 2007, 27(1): 335-358.
贾小平, 项曙光, 等. 生命周期评价及其在过程系统工程中的应用[J]. 现代化工. 2007, 27(1): 355-358.
- [6] Lu Yi-xin. Life cycle assessment system research for chemical products[D]. Cheng Du: Southwest Jiaotong University. 2007.

- 陆一新. 化工产品生命周期系统设计研究[D]. 成都: 西南交通大学, 2007.
- [7] Bai Tian-zhong, Zhao Yan-fei, Zheng Xiao-bin, Liu Jun-liang, Pan Hua, Zhang Wen-xiao. Evaluation on 60000t/a Methanol Fuel from Coke-oven Gas by life Cycle in Shanxi Province[J]. Coal Chemical Industry. 1998(4): 18-21.
白添中, 赵焰飞. 山西介休利用焦炉气拟建 6 万 t/a 甲醇燃料工程生命周期评价[J]. 煤化工. 1998(4): 18-21.
 - [8] Ma Su, Zhou Mei-hua, Huang Li. Life Cycle Assessment of Cotton Fabric in Chemical Industry[J]. Guang Dong Chemical. 2007, 1(34): 66-69.
马骥, 周美华, 等. 化工纺织品的生命周期评价[J]. 广东化工. 2007, 1(34): 66-69.
 - [9] Huang Dai-di, Xia Ding-guo. Application of Life Cycle Assessment in Cobalt Oxide Production[J]. Environmental Science & Technology. 2007, 30(7): 56-58.
黄带弟, 夏定国, 等. 生命周期评价方法在氧化钴生产中的应用[J]. 环境科学与技术. 2007, 30(7): 56-58.
 - [10] Li Man, Wang Zhen, Sun De-zhi. Study on Life Cycle Assessment of Polythene Production[J]. Environmental Science & Technology. 2009, 32(5): 191-195.
李蔓, 王震, 等. 聚乙烯生产生命周期评价的研究[J]. 环境科学与技术. 2009, 32(5): 191-195.
 - [11] Hou Jian, ZHANG Pei-dong, YUAN Xian-zheng, WANG You-le. The methodology to analysis the energy consumption and CO₂ emission of chemical synthesis of biodiesel based on life cycle assessment[J]. Renewable Energy Resources. 2009, 27(4): 72-75.
侯坚, 张培栋, 等. 基于生命周期评价的化学法合成生物柴油能耗与 CO₂ 净排放评价方法[J]. 可再生能源. 2009, 27(4): 72-75.
 - [12] Meng Xiang-jian. The Research on Life Cycle Assessment of Isothiazolinone Derivatives[D]. Da Lian: Dalian University of Technology. 2006
孟祥健. 异噻唑酮类化合物生命周期评价研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2006.
 - [13] Li Fang. Life cycle assessment and Economical Cost analysis for DME production and application[D]. Shang Hai: Tongji University. 2008
李芳. 二甲醚生产及应用过程的生命周期评价及价格体系研究[D]. 上海: 同济大学, 2008.
 - [14] K.G. Harding, J.S. Dennis. A life-cycle comparison between inorganic and biological catalysis for the production of biodiesel[J]. Journal of Cleaner Production. 2007(16): 1368-1378.
 - [15] Erwan Harscoet, Daniel Froelich. Use of LCA to evaluate the environmental benefits of substituting chromic acid anodizing[J]. Journal of Cleaner Production. 2008(16): 1294-1305.
 - [16] Seungdo Kim, Bruce E. Dale. Energy and greenhouse gas profiles of polyhydroxybutyrates derived from corn grain: A life cycle perspective[J]. Environ. Sci. Technol. 2008(42): 7690-7695.
 - [17] Kian Fei Yee, Kok Tat Tan. Life cycle assessment of palm biodiesel: Revealing facts and benefits for sustainability[J]. Applied Energy. 2009(86): S189-S196.
 - [18] Pter A. Holman, David R. Shonnard. Using Life Cycle Assessment to Guide Catalysis Reserch[J]. Ind. Eng. Chem. Res. 2009(48): 668-6674.
 - [19] J. Dufour, J. L. Galvez. Life cycle assessment of hydrogen production by methane decomposition using carbonaceous catalysts[J]. International Journal of Hydrogen energy. 2010(35): 1205-1212.
 - [20] Ben Brehmer, Remko M. Boom, Johan Sanders. Maximum fossil fuel feedstock replacement potential of petrochemicals via biorefineries[J]. Chemical Engineering Research and Design. 2009(87): 1103-1119.
 - [21] Rosalie Van Zelm, Mark A. J. Transformation products in the life cycle assessment of chemicals[J]. Environ. Sci. Technol. 2010(44): 1004-1009.

- [22] Qian Yu, Huang Zhi Xian. Life cycle costing of the chemical products. [J], Chemical Industry and Engineering Progress. 2006, 25 (2) : 126-130.
钱宇, 黄智贤, 等. 化工产品的生命周期成本分析[J]. 化工进展. 2006, 25 (2) : 126-130.
- [23] Faisal I. Khan, Rehan Sadiq, Tahir, B. Veitch. Life cycle iNdeX (LInX) : a new indexing procedure for process and product design and decision-making[J]. Journal of Cleaner Production. 2004 (12) : 59-76.
- [24] Gonzalo Guillen-Gosalbez. Application of life cycle assessment to the structural optimization of process flowsheets[J]. Ind. Eng. Chem. Res. 2008 (47) : 777-789.