

普通高等教育规划教材

# 化工过程 开发与设计

HUAGONG GUOCHENG  
KAIFA YU SHEJI



黄英 王艳丽 编



化学工业出版社

普通高等教育规划教材

# 化工过程开发与设计

黄英 王艳丽 编



化学工业出版社

·北京·

TQ02  
H6

化工过程开发是从立项开始,经过研究、设计、建设,直到一项新产品、新工艺或新技术投入生产的整个过程。本书主要介绍在化工过程开发与设计中涉及的共性问题,即有关化工过程开发的若干基本概念、选题和立项原则、市场调研、实验方案安排和数据处理、工艺流程设计、化工过程放大、技术经济评价等内容,教学内容以化工过程开发与设计为主线,注重学生综合能力的培养与提高,并结合实例介绍化工过程开发与设计的基本方法、计算机辅助设计方法。

本书可作为高等学校化学及化工类专业本科生的教材,也可供石油、材料、环境、轻工等行业从事开发工作的工程技术人员、研究人员及教师参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

化工过程开发与设计/黄英,王艳丽编. —北京:化学工业出版社,2008.5

普通高等教育规划教材

ISBN 978-7-122-02702-3

I. 化… II. ①黄…②王… III. 化工过程-高等学校-教材 IV. TQ02

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第057972号

---

责任编辑:何丽

文字编辑:丁建华

责任校对:凌亚男

装帧设计:韩飞

---

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印刷:北京永鑫印刷有限责任公司

装订:三河市万龙印装有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张20½ 字数542千字 2008年8月北京第1版第1次印刷

---

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网址:<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

---

定 价:32.00元

版权所有 违者必究

# 前 言

化工行业是国民经济发展的重要原材料产业，同时，也是资源密集型的高耗能产业，在生产过程中可能会对环境造成污染。“十一五”期间，我国化学工业将继续保持快速发展的态势，但仍面临资源、能源紧张及价格上涨的压力。因此，以科学发展观为指导，调整产业结构，优化产业布局，提高自主创新能力，大力发展循环经济，努力突破一批重大、关键性技术，提高产业技术水平和产品档次，降低能源、资源消耗和污染物排放，是实现化学工业可持续、健康发展的迫切任务。从化工行业本身的特点和我国化学工业面临的问题来看，化学工业在未来的经济中不仅最有条件、最具潜力，而且也迫切需要对化工过程进行合理的开发与设计。

化工过程技术开发的内容主要有以下几个方面：选题、小型试验、模型试验、中间试验、示范工厂，以及各个阶段的技术经济评价、市场研究和开发、概念设计、基础设计、建设、试车投产。这些活动可按顺序进行，也可以根据需要只做其中几项工作。不论采用何种研究开发方法，从技术和经济结合上，探索并实施合理的化工过程开发系统程序，对企业新工艺开发或对原有工艺的改造是十分必要的。对于化工过程完整的开发程序而言，不仅应追求技术上的合理先进、工程上的安全可靠和易于实施，而且在过程的运行成本和投资成本上也应具有综合优势，从而实现化工过程开发技术和经济上的目标统一。

目前，随着我国经济体制改革和科学技术体制改革的深入发展，社会对于人才素质的要求也正在发生深刻变化。促进国民经济高速发展所需要的不单纯是知识型人才，还应是能够理论联系实际，分析问题和解决问题的技能型人才，并使他们在社会主义建设事业中早日发挥作用。在这种形势下，高等学校培养人才的知识结构必然也要发生明显的变化。作为未来的化学、化工科学工作者，所应具备的能力是多方面的。不仅应具备扎实的基础知识，良好的自学能力及分析、解决问题的能力，还应具备很强的综合能力和创新能力。根据我们多年的教学与科研实践，本书在编写过程中，在学时有限的情况下，使学生了解化工过程开发与设计中涉及的选题、立项、市场调研、实验设计与数据处理、工艺流程设计与有关计算、化工过程放大、技术经济评价等多方面的问题，并结合上述有关问题介绍流程模拟、计算机在化工开发与设计中的应用。

本教材较系统地阐述了现代化工过程工程学的核心内容——化工过程开发与

设计、技术经济评价的基本原理、基本程序与方法。

全书共分 11 章。第 1 章概述了化工过程开发与工艺设计的基本内容与程序；第 2 章和第 3 章介绍了化工过程开发中的市场调研与预测的方法、选题和立项问题；第 4 章讨论了化工过程开发实验中的实验设计与数据处理，着重讨论了正交实验设计的方法；第 5 章和第 6 章介绍了化工设计的基本运算——物料衡算与能量衡算的各种方法，对计算机辅助运算方法做了较详细的论述；第 7 章为工艺流程设计，说明了化工工艺流程的基本特征和基本要素，并介绍了计算机辅助流程设计；第 8 章化工过程放大，对化工过程放大的基本方法、反应器选型等有关内容进行了讨论；第 9 章计算机在化工过程开发与设计中的应用，对计算机在化工过程开发与设计中的应用与发展进行了介绍；第 10 章技术经济评价，讨论了优化设计方案所需的技术经济分析与评价问题；第 11 章化工过程开发与技术转让中的相关问题，介绍了化工过程开发中涉及的专利与知识产权等问题。

本书由西北工业大学黄英、王艳丽编，黄英编写前言、绪论、第 1~8 章、第 10 章、附录和负责全书的统稿；王艳丽编写第 9 章、第 11 章。

按 21 世纪人才培养的综合要求，本书在内容上有所创新，注重拓宽基础与学生能力的培养。但由于作者对一些问题的认识水平有限，不妥之处，请广大读者予以指正。

编者

2008 年元月于西安

# 目 录

绪论	1
第1章 化工过程开发与设计概述	4
1.1 化工过程开发及工艺路线选择	4
1.1.1 化工过程开发程序	4
1.1.2 工艺路线选择	9
1.1.3 可行性研究	9
1.2 化工工艺设计	12
1.2.1 化工工艺设计的内容	13
1.2.2 化工工艺设计程序与设计文件	13
1.3 21世纪化工过程开发与设计的创新发展	15
1.3.1 化工过程强化与微化工技术	15
1.3.2 化学工程新的生长点——分子计算科学	16
1.3.3 绿色过程系统工程	17
1.4 工艺设计中的全局性问题	19
1.4.1 厂址的选择	19
1.4.2 总图布置与设计	20
1.4.3 安全与工业卫生	22
1.4.4 公用工程	23
1.4.5 电气设计	24
1.4.6 自动控制	29
1.4.7 土建设计	30
习题	31
第2章 市场调研与预测	32
2.1 化工产品的市场调研方向	32
2.1.1 我国市场调查与咨询服务业组织	32
2.1.2 传统市场调查与现代的网络市场调查	33
2.1.3 4Ps理论	36
2.1.4 以顾客为中心的4Cs理论	38
2.1.5 营销理论的新架构4Rs	40
2.2 化工产品的市场预测	41
2.2.1 概述	41
2.2.2 定性分析	47
2.2.3 定量分析方法	50
习题	63
第3章 选题和立项	64
3.1 选题的基本原则	64

3.1.1	课题的性质和来源	64
3.1.2	选题的基本原则	64
3.1.3	化工产品开发策略	67
3.2	技术经济资料	70
3.2.1	资料来源	70
3.2.2	专业技术经济资料	74
习题		78
<b>第4章</b>	<b>化工过程开发实验中的实验设计与数据处理</b>	<b>79</b>
4.1	单因素实验优选	79
4.1.1	平分法	80
4.1.2	黄金分割法(0.618法)	80
4.1.3	分数法	84
4.2	多因素实验中的正交设计法	85
4.2.1	正交表	85
4.2.2	正交实验设计结果的直观分析	87
4.2.3	正交实验结果的方差分析	101
4.2.4	用计算机进行正交实验设计及统计分析	103
习题		105
<b>第5章</b>	<b>物料衡算</b>	<b>107</b>
5.1	物料衡算的基本概念	107
5.1.1	物料衡算式	107
5.1.2	物料衡算的基本步骤	108
5.2	不同过程的物料衡算	109
5.2.1	物理过程的物料衡算	110
5.2.2	反应过程的物料衡算	114
5.3	化工过程的物料衡算	126
5.3.1	串联设备	126
5.3.2	弛放过程	127
5.3.3	循环过程	128
5.4	计算机辅助计算方法在物料衡算中的应用	129
5.4.1	Matlab在物料衡算中的应用	130
5.4.2	采用单元过程计算软件进行物料衡算	130
5.4.3	化工流程中的物料衡算	133
习题		135
<b>第6章</b>	<b>能量衡算</b>	<b>138</b>
6.1	能量衡算的基本概念	138
6.1.1	能量存在的形式	138
6.1.2	普遍化能量平衡方程式	139
6.1.3	封闭体系的能量衡算	139
6.1.4	稳态下敞开流动体系的能量衡算	139
6.1.5	能量衡算问题的分类与求解步骤	142
6.2	热力学数据及计算	142
6.3	无化学反应过程的能量衡算	145

6.4	反应过程的能量衡算	148
6.5	计算机辅助化工流程中的能量衡算	151
	习题	155
<b>第7章</b>	<b>化工工艺流程设计</b>	<b>157</b>
7.1	概述	157
7.2	工艺流程设计的分类	157
7.3	工艺流程设计	158
7.3.1	工艺流程设计原则与方法	158
7.3.2	工艺流程图的绘制	162
7.4	计算机辅助流程设计	175
7.4.1	概述	175
7.4.2	流程模拟软件的组成	177
7.4.3	工艺流程模块计算中应注意的问题	178
7.4.4	化工流程模拟软件应用举例——氯碱工程设计中的氯氢处理流程模拟 开发	179
	习题	181
<b>第8章</b>	<b>化工过程放大</b>	<b>182</b>
8.1	反应过程放大的基本方法	182
8.1.1	逐级经验放大	182
8.1.2	数学模型法	185
8.2	冷模试验	194
8.2.1	相似现象	194
8.2.2	相似理论	195
8.2.3	相似特征数	196
8.3	中试	201
8.3.1	中试的任务	201
8.3.2	中试和实验室研究及工厂生产的差异	202
8.3.3	中试的分类	203
8.3.4	中试应注意的几个问题	204
8.3.5	中试设计中的危险识别与控制	206
8.4	反应器的设计	212
8.4.1	工业反应器的类型和选择原则	212
8.4.2	几种工业常用反应器的设计	216
	习题	223
<b>第9章</b>	<b>计算机在化工过程开发与设计中的应用</b>	<b>224</b>
9.1	分子模拟	224
9.1.1	研究范围	224
9.1.2	研究方法	225
9.1.3	分子模拟软件及其应用	226
9.2	流程模拟	230
9.2.1	稳态过程模拟	230
9.2.2	动态过程模拟	232
9.2.3	过程模拟软件	233



841	9.2.4	流程模拟技术在化工设计中的应用	238
1	9.3	化工 CAD 技术在化工开发与工艺设计中的应用	240
221	9.3.1	工艺设计软件	240
121	9.3.2	管道工程设计	245
721	9.3.3	计算机绘图工具 AutoCAD	254
121	9.3.4	建立和应用 CAD 网络系统	258
8	9.4	计算流体力学的发展及在化工中的应用	259
821	9.4.1	计算流体力学软件	260
121	9.4.2	计算流体力学在化工领域的应用	262
2	9.5	生产控制与计算机管理系统	263
121	9.5.1	化工行业地理信息系统应用的特点	263
771	9.5.2	化工行业制造执行管理系统应用的特点	264
178	9.5.3	企业资源计划系统	264
		习题	265
	<b>第 10 章</b>	<b>技术经济评价</b>	266
1	10.1	评价的基本内容、方法和程序	266
281	10.1.1	评价的基本内容	266
182	10.1.2	项目评价的方法和程序	268
2	10.2	投资估算	269
121	10.2.1	工程项目的投资估算	269
121	10.2.2	工艺装置投资估算方法	272
121	10.2.3	单元设备价格估算	274
2	10.3	产品成本估算	278
121	10.3.1	产品成本的构成	278
102	10.3.2	成本费用估算	279
11	10.4	经济评价	279
202	10.4.1	经济评价中的主要概念	280
202	10.4.2	财务评价	281
204	10.4.3	不确定性分析与方案比较	283
202	10.4.4	项目国民经济评价	288
2		习题	290
	<b>第 11 章</b>	<b>化工过程开发与技术转让中的相关问题</b>	292
2	11.1	科技成果鉴定	292
222	11.1.1	鉴定范围与形式	292
224	11.1.2	认定的程序	293
4	11.2	专利	294
224	11.2.1	专利制度的基本特征	294
222	11.2.2	专利权	295
222	11.2.3	专利类别与基本条件	296
220	11.2.4	如何申请专利	297
110	11.3	知识产权保护	297
222	11.3.1	知识产权的保护范围	298
222	11.3.2	侵犯知识产权的行为特征	298

11.3.3 化工产品侵权检索 .....	299
11.4 成果转化与技术合同 .....	300
11.4.1 科技成果转化的几个原则 .....	300
11.4.2 技术合同内容、特点、认定和分类 .....	301
11.4.3 技术合同签订中要注意的问题 .....	303
习题 .....	305
<b>附录</b> .....	<b>306</b>
附录1 常用正交表 .....	306
附录2 工艺流程设计图例 .....	309
<b>参考文献</b> .....	<b>314</b>

## 绪 论

化学工业是最传统、典型的过程工业，是过程工业中的一个十分重要的分支，它对过程工业的发展起了巨大的推动作用，而化学工业的发展也对化学工程学科不断提出新挑战和新课题。早在 20 世纪初，英国 Davis 及美国 Walker, Lewis 等提出“化学工程学”，从原理上研究各种化学工业生产中的物理变化过程，使化学工业不断得到飞跃发展。20 世纪 50 年代，美国 Bird 教授等从动量、热量、质量的传递角度（三传）研究化学工业中的物理变化过程。差不多在同一时间，荷兰的 van Krevelen 教授在前人基础上提出“化学反应工程学”（一反），来研究化工过程中带有化学反应时的变化过程，这使化学工程学成为更全面的一门学科，称为“三传一反”过程。目前，有学者提出必须关注结构、界面和多尺度问题，研究多尺度结构、界面的量化预测理论和优化调控方法，建立多尺度结构、界面与“三传一反”的关系模型，并与当代先进的计算方法、计算流体力学和计算机模拟相结合，以解决化工过程与设备的优化调控与放大的难题。

目前化学工程的服务对象已由化学工业扩展到冶金、材料、能源、环境、生物等诸多进行物质转化的过程工业，使化学工程学上升为过程工程学。化学工程学科本身也在不断扩大其科学内涵，向着更广泛的研究物质在化学、物理和生物转化过程中的运动、传递和反应及其相互关系的过程工程学科转移。现代化工过程的特征包括以下几方面。

(1) 计算化学工程发展迅速 近 20 年来，计算流体力学（computational fluid dynamics, CFD）及其相关学科的发展使得对复杂多相流动比较准确的量化描述成为可能。CFD 模拟的目的是帮助理解流体流动，建立理论和模拟的数学模型，在工程上支持设计过程和做出决断。与传统的应用领域相比，化学工程领域主要面对的是复杂多相流体系统及流动、传递和反应相耦合的过程。在这样一个涵盖从分子、纳微、单元（颗粒、液滴、气泡）、聚团、设备、工厂直至生态过程等不同尺度与层次的化学工程学科与产业链条上，各个环节之间的关系错综复杂，纯粹依靠理论分析或实验的经验积累进行研究和开发比较困难，而基于前期的实验积累和计算机技术的迅速发展可对过程工业设备内的流动细节如流速分布等参数进行研究，进而计算多相流及反应过程，计算传质过程，进行过程的分析、模拟、优化、集成等，故采用计算流体力学方法研究过程工业设备内的多相流体力学行为被认为是解决过程放大效应问题的有力手段。

(2) 认识时空多尺度结构及其效应 现代化工最重要的特征之一是时空尺度的迅速扩展，从原子尺度下的原子、分子自组装过程，到考虑全球环境变化的生态过程，其时空跨度达十余个数量级。20 世纪 50~60 年代形成的“三传一反”原理是化学工程的基石，但其科学内涵限于宏观现象的数学和物理归纳。随着化学工程向生物、医药、纳米颗粒、材料、环境等复杂体系和过程转移，以及传统化学工业提出的过程调控、放大和优化等复杂问题，使得从分子尺度到宏观过程尺度的多尺度关联势在必行。这就对传统的“三传一反”提出了新的挑战，必须从新的角度来认识化学工程的现象和规律。不均匀时空多尺度结构作为化学工程中众多现象突出的特征，已逐步引起关注。

为适应化学工程发展的新要求，研究方法和手段也将出现新的变化，以满足建立纳、微尺度分子结构与设备尺度的过程之间关系的需求。这些变化主要包括：不同尺度的模拟方法

(如分子尺度的计算化学、介观尺度的结构模拟和计算流体力学、设备尺度的动态过程模拟等);无接触式测量技术和高性能计算能力等。除上述方法、概念和研究手段方面的变化外,以下几方面被认为是应当关注的方向,它们都与多变的时空多尺度结构相关,如:为提高选择性和转化率实施多尺度的调控;采用新的原理和操作方式的过程强化和微化工系统;高值和精细产品设计及相应的过程放大;多尺度多学科交叉的计算等。这些趋势得到很多学者的关注。

(3) 与产品工程的联系日趋紧密 化学工程技术学科经历了百年发展,对过程工业的技术进步做出了巨大的贡献,为社会提供了丰富多彩的化学品。随着人类利用自然资源的深入,化学工业由初级加工向深度加工发展,由大批量连续化的基础化学品生产逐步向多品种小批量的专用化学品的生产发展。随着市场竞争的加剧,化学工业的发展正面临着重要变化。以产品需求为导向开发满足最终使用性能的化学品成为一个重要领域。化学工程研究开始寻求新的概念、理论和工具,以解决新形势下所面对的复杂问题。

化学产品工程是以产品为导向的化学工程科学理论,它以化工产品结构和性质的关系为中心研究内容,要求进行微观层次上的模型、模拟和定量分析;要求设计和控制产品质量,实现从分子尺度到过程尺度的跨越。目前所研究的化学产品工程的共性科学技术问题有:研究化学产品的开发、设计、制造和配送中的共性规律和个性特征。创新、改善与实施化学供应链的决策过程。在微观尺度上,从分子水平和微观尺度,揭示化学产品结构特征、建立模型、预测性能,发现和设计新的分子结构;在中观尺度,调控产品结构和产品性能、加速过程开发、优化工艺条件;在宏观尺度,通过全生命周期设计和评价,集成化学供应链,优化和协调化学产品与环境友好相容的整个生命周期。

(4) 绿色化学工程与工业生态园区建设成为化工研发的前沿 资源与环境问题为密切相关的可持续发展两大基本问题。20世纪90年代形成的全球环境发展战略,即是把环境问题的解决与资源利用-经济生产模式的优化关联统一起来,提出建立与环境相容的清洁生产-生态经济新模式。绿色过程工程正是研究与自然环境相容的资源高效-洁净-合理利用的物质转化过程的工程科学,它涵盖了进行大规模资源加工、伴有化学和物理变化的过程工业的重新审视、提升和绿色化更新。

从化工、冶金、能源、石化、轻工等典型过程工业来看,我国资源加工技术已不能再延续十几年前形成的传统工艺,以免造成生产消耗指数高、资源利用率低、大量未被充分利用的资源变成废弃物排放到环境中、效益低下和严重的环境污染。开发过程工业物质转化的高效-洁净-合理利用资源的绿色新过程与工程化实施是急切的社会需求。生产企业再难以承受投入巨大、收效甚微的末端治理重负,急需立足于发展增效,同时实现减污的清洁生产高新技术。绿色过程清洁生产技术的工程化将极大地提高我国工业的总体水平。

过程工业绿色化是综合利用环境与资源、材料、能源、生化工程与计算信息学等多学科的知识,研究物质转化过程绿色化的综合性科学与工程。过程工业绿色化的主要内容包括以下几点。

- ① 建立资源-环境保护新体系的思想方法论与实施策略、源头污染控制与资源-环境同一论的清洁生产策略与生态工业系统。
- ② 原子经济性化学反应处于绿色过程的核心地位,理想的绿色化学反应,即原料中的原子100%地转变为产物,不产生副产物或废弃物,实现废弃物的零排放。
- ③ 运用环境-经济综合评价体系,建立过程工业的物质流程-能量流程-信息流程综合优化与过程集成。
- ④ 发展生物转化技术、洁净能源和可再生资源替代技术。
- ⑤ 模拟自然界物种共生、互生、能量与元素传递循环网络,建立物质分层多级循环优

化利用的生态化产业体系。

应指出的是“绿色”的提法是动态的概念，当一个相对于传统过程的绿色过程已被广泛接受，纳入正常生产的成熟阶段之后，就成为常规技术，又要去追求更理想的绿色新过程。

依据环境-经济两种尺度对过程进行综合优化，包括反应-分离等多序列的综合、物质集成与能量集成，通过质量、热量交换网络等多种综合优化方法-废物最小化的模拟设计来实现。绿色过程更注重追求废物最小化的物质流优化。国外已发展了多种优化方法，国内的系统工程研究也开始进入该领域，但由于没有具体的工程依托，尚限于定性分析阶段。

生态工业园是依据循环经济理念和工业生态学原理而设计建立的一种区域型新型工业组织形式，是绿色化工产业区域建设的体现，是实现世界可持续发展的园区模式，是生态社会建设的理想境界。通过模拟自然系统建立产业系统中“生产者-消费者-分解者”的循环途径，尽可能实现物质闭路循环和能量多级利用。即生态园内企业模拟自然界生态系统，相互之间存在协同和共生关系，将最大限度地利用资源和减少负面环境影响，最后达到工业可持续发展的目标。

### 生态工业园的构建

#### 生态工业园的构建

生态工业园的构建，是指以循环经济理念为指导，以工业生态学原理为基础，通过模拟自然生态系统的物质流和能量流，实现资源的高效利用和废物的最小化排放，最终达到工业可持续发展的目标。生态工业园的构建，是一个系统工程，涉及到多个方面的内容。

首先，生态工业园的构建需要有一个科学的规划。规划是生态工业园建设的蓝图，也是指导生态工业园建设的纲领。规划的内容包括：生态工业园的选址、生态工业园的布局、生态工业园的产业结构、生态工业园的能源利用、生态工业园的废物处理、生态工业园的环境保护等。

其次，生态工业园的构建需要有一个科学的管理体系。生态工业园的构建是一个系统工程，涉及到多个方面的内容，需要有一个科学的管理体系来协调和管理。生态工业园的管理体系应该包括：生态工业园的组织结构、生态工业园的规章制度、生态工业园的考核评价等。

最后，生态工业园的构建需要有一个科学的实施机制。生态工业园的构建是一个系统工程，涉及到多个方面的内容，需要有一个科学的实施机制来推动和实施。生态工业园的实施机制应该包括：生态工业园的投融资机制、生态工业园的激励机制、生态工业园的约束机制等。

生态工业园的构建，是一个系统工程，涉及到多个方面的内容，需要有一个科学的管理体系来协调和管理。生态工业园的管理体系应该包括：生态工业园的组织结构、生态工业园的规章制度、生态工业园的考核评价等。

# 第1章 化工过程开发与设计概述

化工工艺是以化学方法为主，以改变物质组成与物质结构合成新物质为目的的生产过程和技术。其涉及的范畴很广，一般包括原料的选择和预处理；生产方法的选择及方法原理；设备的作用、结构和操作；催化剂的选择和使用；其他物料的影响；操作条件的影响和选定；流程组织；生产控制；产品规格和副产物的分离与利用；能量的回收和利用；对不同工艺路线和流程的技术经济评价等。在化学品的生产过程中，化工过程内在的科学规律是客观存在的，只是在开发之前尚未被人们认识。任何一个新的化工过程都是创造性的工作，它利用化学工程的基本原理和方法与化学工艺有机结合，将分子设计、概念设计的原理与系统工程相结合，将工艺小试与工程放大作为一个系统有机地结合起来，研究过程的特性和规律，研究放大判据和放大规律，解决工程实际问题。

## 1.1 化工过程开发及工艺路线选择

### 1.1.1 化工过程开发程序

化工过程以化学工程的理论为依据，借助若干相互关联的化工单元操作，利用相关设备组成一个完整的工业体系，以完成化学品的生产过程。化工生产过程通常由预处理、化学反应或物理化学加工等生产环节所组成。其中预处理主要由机械操作和传热过程等组成，反应过程需要维持一定的温度与压力，后处理一般包括传质过程、相分离操作等部分。

任何一个新的化工过程都是具有创造性的。但其内在的科学规律，则是客观存在的，只不过以前尚未被认识。化工过程开发是指由实验室研究成果（新工艺、新产品）到实现工业化的科学技术活动。化学工业具有原料、产品、工艺、技术多方案性的基本特征，即不同原料经过不同的加工工艺可以得到相同产品；同一原料经过不同加工工艺可以得到不同产品；同一原料经过不同加工工艺可以得到相同产品。这种多方案性源于科学技术，深刻地蕴含着经济的盈亏、社会效益的大小与环境保护的优劣。而开发研究就是在基础应用研究及各种科技信息的基础上，开展新技术的工艺条件、技术规范、工程放大、技术经济评价等方面的研究，以取得化工生产装置的设计、建设等所需数据与资料，为实现新技术在工业中的应用提供技术服务。开发研究的最终成果是基础设计，而基础设计是工程设计的主要依据。

化工过程开发是从立项开始，经过研究、设计、建设，直到一项新产品、新工艺或新技术投入生产的整个过程。一般是在基础研究（探索研究）和收集技术经济资料的基础上，深入开展工艺条件和工程放大研究，以及技术经济评价等方面工作，以取得设计和建立生产装置，进行生产以及销售经营所需要的数据和资料。

化工过程开发的步骤，并没有固定的模式。化学工业新产品开发的基本步骤可用图 1-1 表示。

由图 1-1 可见，有三次可行性研究将开发的全过程分割成四个阶段。第一阶段的内容是商品信息研究和实验性研究。第二阶段的内容包括小试和概念设计。第三阶段包括模型试

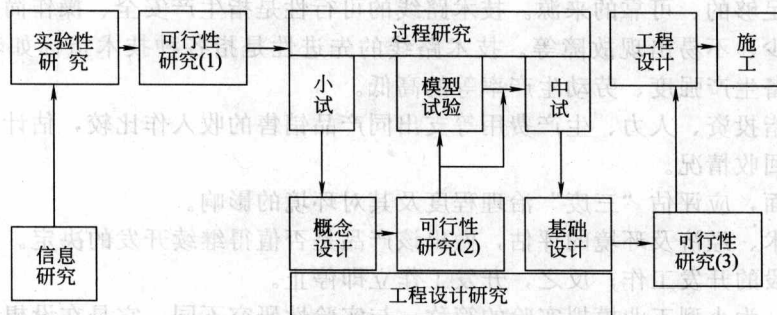


图 1-1 化学工业新产品开发的基本步骤

验、中试和基础设计等内容。第四阶段的内容为工程设计和施工。

(1) 信息研究 其主内容是市场对开发产品的需求量，开发产品与国民经济其他部门的关系，市场前景，收益估算，社会效益以及环境污染情况等。除了经济方面的调研外，还要评估科研水平、社会条件及完成该项目的可能性。

在技术上，首先要搜集评价各种已工业化的生产方法的资料及新方法的专利文献资料，研究各种生产方法的技术特点，分析和研究得到的资料中的数据是否可靠、完整以及存在什么问题。对于化工过程，一般需要的资料和数据大致是生产过程、流程、主副反应方程式、反应条件（如原料要求、比例、反应温度、压力、催化剂、时间、热效应、环境要求、pH值等）、反应产率（如转化率、选择性、主副产品收率）、产品及副产品规格、主要设备类型、反应动力学及有关的相平衡数据。

其次，对所需要的主副产品、原料及中间产品的基本物化和热力学数据进行收集、计算、整理，力求关键数据准确。这些数据大致包括相对分子质量、密度、熔点、沸点、蒸气压、溶解度、比热容、蒸发热等。

信息研究是开发产品的第一步，若通过信息研究认为所开发的技术能带来显著的经济效益或重大的社会效益，才值得投资进行研究与开发，否则即可就此终止。

(2) 实验性研究 实验性研究包括五个内容：第一是对工艺方法进行研究，如原料路线和生产路线等的研究；第二是对工艺条件进行研究，如转化率、选择性、主副反应的特点、催化剂、反应条件、产品分离方式等；第三是物料平衡、能量平衡和生产成本估算；第四是对原料、半成品和产品的质量进行研究；第五是产品用途及应用产品质量的研究等。这五个方面内容不是逐一完成的，而是交叉进行的。

实验性研究的目的是对可能的若干方案进行初步筛选，力求用最少的原料以经济的手段获得最多的合格产品，以能明确地提出一个较理想的流程，同时获得必要的物性数据。

实验研究时，通过热力学和动力学的理论考察，利用实验设计和分析手段，参照技术经济要求，可以得到开发所需要的基本工艺数据。但实验室的研究结果只能表明该工艺的可能性，其是否在工业生产中实用必须经过后续的有关工作来证明。

通过实验性研究可以确定原料路线，探索反应的可行性，了解副产物的种类、数量及其可利用性；掌握物料对设备结构材料的腐蚀情况、“三废”的排放及其数量、物料的爆炸极限和有关操作中的注意事项等。

(3) 第一次可行性研究 为在信息研究与实验研究的基础上对技术、经济、环境综合的可行性研究。

技术主要指原料路线和技术路线的可行性、可靠性和先进性。原料路线的可行性和可靠性是很重要的，因为在过程工业中原料费约占生产费用的 2/3。为了降低生产成本，只要技术上可行，经济上合理，一般都采用粗原料或劣质原料。当然不论采用哪一种原料（包括能

源)都必须有足够的、可靠的来源。技术路线的可行性是指生产安全、操作简便、操作弹性大、生产环节少、不易出现故障等。技术路线的先进性是指各种技术指标如转化率、选择性、能耗、设备生产强度、劳动生产率等的高低。

经济主要指投资、人力、生产费用等支出同产品销售的收入作比较,估计可能获得的经济效益和投资回收情况。

在环境方面,应评估“三废”治理程度及其对环境的影响。

通过对技术、经济及环境的评估,做出该产品是否值得继续开发的决定。如果值得,便可进行下一阶段的开发工作;反之,开发工作立即停止。

(4) 小试 为小型工业模拟实验的简称。与实验性研究不同,它是在设想流程通过初步技术经济评价,研究工作正式立项后的系统工作。在工艺条件上,通过小试,要求研究得更加细致和具体;在规模上,小试比实验室的规模大一些;在原料上,应当使用生产时所采用的粗原料(如有必要,应进行化学反应前的预处理);在反应器的选型上,应根据实验室研究结果,使用生产时所采用的反应器类型。小试应尽可能采用连续操作方式,模拟化工单元操作。

小试应完成如下任务。

① 验证开发方案的可行性和完整性,确定影响因素。明确过程原料路线,认识所涉及化学反应的特性和影响因素,确定工艺过程,单元操作和工艺条件,完成催化剂的筛选和表征。确定产物分离和精制方案,以及在此基础上完成物料衡算和热量衡算。

② 测定和收集需要的各种物理化学数据。

③ 建立产品分析方法和过程监测方法。

④ 对生产过程中排放的“三废”提出治理的初步方案。

(5) 概念设计 概念设计又称方案设计,设计人员把自己的工作经验与小试结果结合起来,进行生产规模的原则流程设计。

概念设计包括两层含义。其一是依据小试结果和有关文献资料,提出工业化的规模和方案,故亦称预设计。其二是再将预设计规模缩小到一定程度,制定中试方案和进行中试设计、模型研究,形成“预放大-缩小-放大”的开发放大程度。

在概念设计的过程中,要检验小试研究的完整性和可靠性。因此,概念设计往往还会对小试工作提出进一步要求,使小试在早期就尽可能实现工艺与工程的结合,从而保证小试研究质量。

概念设计的主要内容如下。

① 以投产两年后市场需求为依据,提出建立工业化规模生产的方案。包括原料和产品规格、工艺流程、工艺条件、流程叙述、物料衡算、热量衡算、消耗定额、设备清单、生产控制、“三废”处理、人员组成、投资以及成本估算等工作。

② 讨论实现工业化的可能性。对可进入中试研究的项目,确定中试规模,提出中试方案。

③ 提出对将来进行基础设计的意见。

尽管包括这么多内容,概念设计仍是不完整的,仍只是一种放大方案,不足以作为工程设计和建设的依据。

(6) 第二次可行性研究 第二次可行性研究有时称作方案论证。其内容与第一次可行性研究差不多。在此之前由于有了概念设计、物料衡算和能量衡算,对技术、经济的分析就比较准确。可进一步估算工厂规模、投资费用、成本及经济效益等。

第二次可行性研究也要做出开发应该中止或继续的决定。若继续进行,还应下阶段的工艺和过程的研究提出指导性意见。例如哪些环节可以采用现有的成熟技术,哪些环节需要



引进或购买专利,哪些环节只需作粗略的研究,哪些环节需要作深入细致的研究等。有了这些指导性的意见后,就可以对下阶段的研究拟定具体的计划。

第二次可行性研究可以作为同有关部门签订合同的依据。

(7) 模型试验 模型试验一般都是对工业生产中的某些重要过程作放大的工业模拟试验。在模型设备中进行研究的主要内容有:考察化工过程运行的最佳条件;考察设备内传热、传质、物料流动与混合等工程因素对化工过程的影响;观察设备放大后出现的放大效应;寻找产生放大效应的原因;测定放大所需的有关数据或判据等。模型试验分冷模试验和热模试验两种。

冷模试验只研究过程的物理规律,不研究化学反应。它可以采用物理性质与实际工业生产物料相近的惰性物质进行试验。

热模试验是用实际生产物料并按实际操作条件进行的试验,属于综合性试验考察。

(8) 中试 中试是中间试验的简称,所谓中间试验是介于小试和生产之间的试验。当某些开发项目不能采用数学模型法放大,或其中有若干研究课题无法在小试中进行,一定要通过相应规模的装置才能取得数据或经验时需进行中试。

中试是在小试完成并通过技术经济评价后,在概念设计基础上进行的放大试验工作。其规模介于实验室规模和工业装置规模之间,但具体规模没有明确规定。对于精细化工产品,中试资料按千克已足矣,而对许多基本化工产品扩试研究所建中试工厂规模都相当可观,甚至达到年产数千吨生产能力。

中试工作必须按工业化条件,其主要任务是:

- ① 建立一定规模的放大装置,对开发过程进行全面模拟考察,明确运转条件及操作、控制方法,并解决长期连续稳定运转的可靠性等工程问题,其中,包括对原料和产品的处置方法、必要的回收循环工艺,以及对反应器等设备的结构和材质的考察;
- ② 验证小试条件,收集更完整、更可靠的各种数据,解决放大问题,提供基础设计所需全部资料;
- ③ 考察可达到的生产指标,在可信程度较大的条件下计算各项经济指标,以供对工业化装置进行最终评价;
- ④ 研究“三废”处理、生产安全性等问题;
- ⑤ 示范操作,培训技术工人,研究开停车和事故处理方案,获得生产专门技能和经验;
- ⑥ 提供一定量产品(大样),供市场开发工作所需(反应器的选型和放大以及随之而来的反应状况的研究,是中试研究的基础);
- ⑦ 提出物料综合利用和“三废”治理措施;
- ⑧ 提出带控制点的工艺流程图、工艺参数、物料衡算和能量衡算的数据等。

化工过程开发中的若干问题往往不可能都在小试阶段充分暴露,只有留在中试时加以研究和解决。例如,在管式反应器上进行的反应,小试因设备尺寸所限,不可能对喷嘴之类结构进行详细研究,设备放大后就要认真解决这类关键问题。又如,对气固催化反应催化剂的筛选工作,一般在小型固定床反应器上进行,中试才可能研究流化床反应器,进一步考察反应器结构、材质、散热等一系列问题。

(9) 基础设计 基础设计有时称作初步设计或扩(大)初(步)设计。它是根据中试结果而进行的生产规模的全面设计,是工程研究的终结,也是开发研究成果的表现形式。

① 装置说明:设计依据、技术来源、生产规模、原材料规格、辅助材料要求、产品规格及环境条件。

② 生产工艺流程说明:详细说明工艺生产流程的过程,主要工艺特点、反应原理、操