

高等学校教材

化工过程开发与设计

张浩勤 章亚东 陈卫航 主编

化学工业出版社
教材出版中心
·北京·

(京) 新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

化工过程开发与设计/张浩勤,章亚东,陈卫航主编.
北京:化学工业出版社,2002.6
高等学校教材
ISBN 7-5025-3859-3

I. 化… II. ①张…②章…③陈… 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(2002)第039833号

高等学校教材

化工过程开发与设计

张浩勤 章亚东 陈卫航 主编

责任编辑:高钰

责任校对:顾淑云

封面设计:张昊

*

化学工业出版社 出版发行
教材出版中心

(北京市朝阳区惠新里3号 邮政编码 100029)

发行电话:(010)64982530

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销
北京市昌平振南印刷厂印刷
三河市宇新装订厂装订

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 13 字数 314 千字

2002年7月第1版 2002年7月北京第1次印刷

ISBN 7-5025-3859-3/G·1018

定 价: 20.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

前 言

化学工业是国民经济的重要支柱产业之一，与人类衣食住行密切相关，对解决人类社会所面临的人口、资源、能源、环境等可持续发展的重大问题有重要作用。化学工业具有原料、工艺、产品多方案的基本特征，即同一原料经过不同的加工工艺可得到不同的产品；同一原料经过不同的加工工艺可得到相同的产品；不同原料经过不同的加工工艺可得到相同的产品等。化学工业的技术方案与社会效益、经济效益和环境保护密切相关，研究与开发是技术创新与进步的必由之路。

化工过程开发是从一个化学新产品、新工艺概念的形成，通过实验室研究、中试放大、工艺设计、技术经济评价等环节，直至付诸工业化的全部过程，是范围极广的一门综合性工程技术课程。本书的目的在于让学生更好的了解从实验室到工业化的全过程，使学生具有进行工程实践的基本方法和技能，为毕业设计奠定基础，为进入社会做好准备。

本书着重介绍化工过程开发中涉及的共同性问题，即化工过程开发的基本概念、科学选题、实验室研究、过程放大、工程经济、安全与环保、过程分析与合成、知识产权保护等内容，并简要介绍表述开发结果所必然涉及的工艺设计的基本知识。化学工业对人类生存环境有重要的影响，绿色化学原理与技术的介绍，开阔了眼界，拓展了思路。

本书面向化学工艺及相关专业的学生，内容选材上体现工科教育的特点，为满足研究工作的实际需要，注重科学研究方法论教学，注重化工前沿与交叉学科知识的介绍，理论联系实际，加强工程观点、技术经济观点和安全与环保意识，重在培养有创新意识的工程技术人才。教材内容在化工原理和反应工程的基础上撰写，为避免与所学过的内容重复，有关内容书中未详述，列出了主要参考书，供读者进一步查阅或学习使用。本书文字表述深入浅出，各章配有小结和习题或思考。通过本书的学习，应能拓宽学生的知识面，提高毕业设计、毕业论文的质量，更重要的是将所学知识与化工生产实际和市场需要结合起来，交叉渗透，树立创新意识，培养创新思维方法，提高服务社会的能力。

本书由郑州大学、河南大学、郑州轻工业学院联合编写。张浩勤任主编，章亚东、陈卫航任副主编。张浩勤编写第1章、第8章；章亚东编写第3章、第4章；陈卫航编写第2章、第5章；刘亚莉编写第7章、第9章；马新起编写第6章、第10章。

受水平所限，错误和片面性在所难免，敬请广大读者和同行专家批评指正。

编者
2002.3

内 容 提 要

化工过程开发是从一个化学新产品、新工艺概念的形成,通过实验室研究、中试放大、工艺设计、技术经济评价等环节,直至付诸工业化的全部过程,是范围极广的一门综合性工程技术课程。本书着重介绍化工过程开发中涉及的共同性问题,即化工过程开发的基本理念、科学选题、实验室研究、过程放大、工程经济、安全与环保、过程分析与合成、知识产权保护等内容,并介绍了一些表述开发结果所涉及的工艺设计方面的基本知识。化学工业对人类生存环境有重要的影响,绿色化学技术的介绍,可以开阔眼界,拓展思路。

本书可作为化学工艺及相关专业本科学学生教材,也可作为化工、材料、环境、轻工、冶金等专业的工程技术人员、研究人员及教师的参考用书。

目 录

| | |
|----------------------------|----|
| 1 化工过程开发概论 | 1 |
| 1.1 科学技术及研究方法概述 | 1 |
| 1.1.1 科学理论对研究工作的指导作用 | 1 |
| 1.1.2 搜集事实材料的方法 | 2 |
| 1.1.3 思维加工方法 | 3 |
| 1.2 化工过程开发的内容 | 3 |
| 1.2.1 化学工业在人类社会中的地位 | 3 |
| 1.2.2 化工过程开发的内容 | 4 |
| 1.3 化工过程开发的特点 | 5 |
| 1.3.1 实验室研究与工业生产的不同点 | 5 |
| 1.3.2 化工过程开发的特点 | 6 |
| 1.3.3 放大是化工过程开发的核心 | 7 |
| 1.4 化工过程开发的基本方法 | 8 |
| 1.4.1 实验研究方法 | 9 |
| 1.4.2 数学模型方法 | 9 |
| 1.5 化工过程开发的主要步骤 | 10 |
| 1.5.1 开发基础研究 | 10 |
| 1.5.2 过程研究 | 10 |
| 1.5.3 工程研究 | 11 |
| 1.5.4 化工过程开发中的组织与管理 | 12 |
| 1.6 开发案例 | 12 |
| 1.6.1 合成氨发展史 | 12 |
| 1.6.2 包裹型复合肥料的研究与开发 | 13 |
| 2 科学选题 | 16 |
| 2.1 选题基本原则 | 16 |
| 2.1.1 选题基本原则 | 16 |
| 2.1.2 项目及经费的主要来源 | 17 |
| 2.2 技术经济资料 | 19 |
| 2.2.1 文献调研 | 19 |
| 2.2.2 市场调研 | 23 |
| 2.2.3 资料的分析与整理 | 27 |
| 2.3 开发方案与立项报告 | 28 |
| 2.3.1 开发方案 | 28 |
| 2.3.2 立项报告 | 28 |
| 3 绿色化学与技术 | 30 |

| | | |
|--------|-------------------------------|----|
| 3.1 | 绿色化学及其特点 | 31 |
| 3.2 | 绿色化学原理 | 31 |
| 3.2.1 | 污染防止优于污染形成后的处理 | 32 |
| 3.2.2 | 最大限度地利用资源 | 32 |
| 3.2.3 | 最大限度地使用或产生无毒或毒性小的物质 | 32 |
| 3.2.4 | 设计化学产品时应尽量保持其功效而降低其毒性 | 33 |
| 3.2.5 | 尽量不用辅助剂而需要使用时应采用无毒物质 | 33 |
| 3.2.6 | 能量使用应最小并应考虑其对环境及经济的影响 | 33 |
| 3.2.7 | 最大限度地使用可更新原料 | 34 |
| 3.2.8 | 尽量避免不必要的衍生步骤 | 34 |
| 3.2.9 | 催化试剂优于化学计量试剂 | 35 |
| 3.2.10 | 化学品应设计成使用后容易降解为无害物质 | 35 |
| 3.2.11 | 分析方法应能实现在线监测并在有害物质形成前加以控制 | 36 |
| 3.2.12 | 化工过程物质的选择与使用应使化学事故的隐患最小 | 36 |
| 3.3 | 绿色化学的研究动向 | 36 |
| 3.3.1 | 氧化剂与催化剂 | 37 |
| 3.3.2 | 生物模拟多功能试剂 | 37 |
| 3.3.3 | 组合绿色化学 | 37 |
| 3.3.4 | 可同时防止与解决污染问题的化学技术 | 37 |
| 3.3.5 | 无溶剂反应与无溶剂分离技术 | 37 |
| 3.3.6 | 能源相关的研究 | 38 |
| 3.3.7 | 非共价键衍生物 | 38 |
| 3.3.8 | 无害介质水中的反应 | 38 |
| 3.3.9 | 超临界 CO ₂ 作为绿色溶剂的利用 | 38 |
| 3.3.10 | 毒性与化学品设计中的计算机应用 | 38 |
| 3.3.11 | 可持续性分析 | 38 |
| 3.3.12 | 原子经济性反应的开发 | 39 |
| 3.4 | 绿色化学技术 | 39 |
| 3.4.1 | 生物工程技术 | 39 |
| 3.4.2 | 等离子体技术 | 40 |
| 3.4.3 | 辐射加工技术 | 41 |
| 3.4.4 | 新型绿色催化技术 | 41 |
| 3.4.5 | 超临界流体技术 | 43 |
| 3.4.6 | 传统工艺中的新技术 | 44 |
| 3.5 | 清洁生产 | 45 |
| 3.5.1 | 清洁生产的定义 | 45 |
| 3.5.2 | 清洁生产的内容 | 45 |
| 3.5.3 | 清洁生产的特点 | 45 |
| 3.5.4 | 实施清洁生产的途径 | 46 |
| 4 | 实验室工作 | 48 |

| | | |
|--------|---------------|----|
| 4.1 | 实验工作中的文献资源 | 48 |
| 4.2 | 实验过程的观察与实验方法 | 48 |
| 4.2.1 | 观察 | 48 |
| 4.2.2 | 实验 | 49 |
| 4.2.3 | 实验分类 | 49 |
| 4.3 | 实验研究工作程序 | 49 |
| 4.4 | 实验研究的方法论 | 50 |
| 4.4.1 | 思想模型与理想实验方法 | 50 |
| 4.4.2 | 科学思维的逻辑方法 | 50 |
| 4.4.3 | 科学思维的非逻辑方法 | 51 |
| 4.4.4 | 创造性思维方法 | 52 |
| 4.4.5 | 数学方法 | 53 |
| 4.5 | 实验室安全技术 | 54 |
| 4.5.1 | 实验室常见事故的预防和处理 | 54 |
| 4.5.2 | 实验室安全用电 | 55 |
| 4.6 | 基础实验技术 | 55 |
| 4.6.1 | 常用玻璃仪器及其清洗干燥 | 55 |
| 4.6.2 | 加热与冷却 | 56 |
| 4.6.3 | 干燥 | 57 |
| 4.6.4 | 重结晶 | 58 |
| 4.6.5 | 升华 | 58 |
| 4.6.6 | 蒸馏 | 59 |
| 4.6.7 | 分馏 | 62 |
| 4.6.8 | 萃取 | 63 |
| 4.6.9 | 离子交换分离法 | 64 |
| 4.6.10 | 膜分离 | 64 |
| 4.6.11 | 色谱法 | 64 |
| 4.6.12 | 红外光谱 | 68 |
| 4.6.13 | 核磁共振谱 | 70 |
| 4.6.14 | 催化剂反应性能的测试方法 | 71 |
| 4.6.15 | X射线衍射技术 | 71 |
| 4.6.16 | 热分析技术 | 71 |
| 4.6.17 | 电子显微镜法 | 72 |
| 4.6.18 | 电子能谱法 | 72 |
| 4.6.19 | 常用测量技术 | 73 |
| 4.7 | 实验优选和数据处理 | 77 |
| 4.7.1 | 单因素实验优选 | 77 |
| 4.7.2 | 正交试验设计法 | 78 |
| 4.7.3 | 均匀试验设计 | 80 |
| 5 | 化工过程放大 | 85 |

| | | |
|-------|------------------------|-----|
| 5.1 | 反应过程放大基本方法 | 85 |
| 5.1.1 | 基本概念 | 85 |
| 5.1.2 | 反应过程放大基本方法 | 87 |
| 5.2 | 传递过程与冷模试验 | 90 |
| 5.2.1 | 传递过程 | 90 |
| 5.2.2 | 冷模实验 | 94 |
| 5.3 | 化学反应器 | 99 |
| 5.3.1 | 化学反应器基本概念 | 100 |
| 5.3.2 | 化学反应器选型 | 103 |
| 5.4 | 中间试验 | 107 |
| 5.4.1 | 中间试验的目的和作用 | 107 |
| 5.4.2 | 中间试验分类 | 108 |
| 5.4.3 | 中间试验要注意的几个问题 | 109 |
| 5.4.4 | 中间试验实例——乙烯氯化制二氯乙烷的开发 | 112 |
| 6 | 工程经济 | 114 |
| 6.1 | 评价的基本内容、方法和步骤 | 114 |
| 6.1.1 | 评价的基本内容 | 114 |
| 6.1.2 | 评价的方法和步骤 | 115 |
| 6.2 | 项目的投资估算 | 116 |
| 6.2.1 | 工艺装置投资 (C_{BL}) 估算 | 116 |
| 6.2.2 | 公用工程及罐区投资 (UTI) 估算 | 118 |
| 6.2.3 | 其他工程费用估算 | 120 |
| 6.2.4 | 联合试运转费和未可预见费 | 120 |
| 6.2.5 | 流动资金估算 | 121 |
| 6.3 | 产品成本估算 | 121 |
| 6.3.1 | 产品成本组成 | 121 |
| 6.3.2 | 固定成本和可变成本 | 122 |
| 6.3.3 | 设备折旧 | 122 |
| 6.3.4 | 成本估算方法 | 123 |
| 6.4 | 经济评价要点 | 123 |
| 6.4.1 | 经济评价中的主要概念 | 123 |
| 6.4.2 | 经济评价要点 | 125 |
| 6.5 | 技术经济评价报告 | 129 |
| 7 | 安全与环保 | 131 |
| 7.1 | 劳动安全 | 131 |
| 7.1.1 | 劳动安全及其设计内容 | 131 |
| 7.1.2 | 化学危险品及其分类 | 131 |
| 7.1.3 | 化工防火防爆及设计要点 | 132 |
| 7.1.4 | 化工防毒和防烧伤及设计要点 | 136 |
| 7.2 | 环境保护 | 137 |

| | | |
|-----------|-----------------------|------------|
| 7.2.1 | 化工环境保护设计的内容 | 137 |
| 7.2.2 | 环境影响评价及其功能与程序 | 138 |
| 7.2.3 | 环境影响评价报告书 | 139 |
| 7.2.4 | 三废治理及噪声控制 | 139 |
| 8 | 过程分析与合成 | 143 |
| 8.1 | 单元操作的知识 | 144 |
| 8.1.1 | 物料输送、混合、粉碎的方法 | 144 |
| 8.1.2 | 改变物料温度的方法 | 145 |
| 8.1.3 | 非均相混合物分离方法 | 145 |
| 8.1.4 | 均相混合物分离方法 | 145 |
| 8.2 | 分析与综合 | 145 |
| 8.2.1 | 分析与综合的基本概念 | 146 |
| 8.2.2 | 比较方案筛选 | 148 |
| 8.3 | 化工过程合成 | 151 |
| 8.3.1 | 探试法 | 151 |
| 8.3.2 | 形态分析——分枝界限法 | 153 |
| 8.3.3 | 功能分析——调优法 | 155 |
| 8.3.4 | 计算机辅助过程合成 | 159 |
| 8.4 | 化工过程合成案例——苯乙烯生产 | 161 |
| 8.4.1 | 生产方法 | 161 |
| 8.4.2 | 乙苯的生产 | 161 |
| 8.4.3 | 乙苯脱氢制苯乙烯分析 | 164 |
| 8.4.4 | 工业乙苯脱氢 | 166 |
| 9 | 工艺设计基础 | 169 |
| 9.1 | 过程开发设计 | 169 |
| 9.1.1 | 概念设计 | 169 |
| 9.1.2 | 中试设计 | 169 |
| 9.1.3 | 基础设计 | 171 |
| 9.2 | 化工工艺设计基础 | 172 |
| 9.2.1 | 可行性研究报告 | 172 |
| 9.2.2 | 初步设计 | 173 |
| 9.2.3 | 流程图规范要点 | 173 |
| 9.2.4 | 施工图设计 | 175 |
| 9.3 | 化工过程计算基础 | 176 |
| 9.3.1 | 物料衡算 | 176 |
| 9.3.2 | 能量衡算 | 179 |
| 10 | 知识产权保护 | 182 |
| 10.1 | 知识产权 | 182 |
| 10.1.1 | 知识产权的保护范围 | 182 |
| 10.1.2 | 侵犯知识产权行为的基本特征 | 183 |

| | |
|------------------------------|-----|
| 10.1.3 侵犯知识产权行为的法律救济····· | 183 |
| 10.2 技术成果····· | 183 |
| 10.2.1 技术成果认定的范围与形式····· | 184 |
| 10.2.2 技术成果认定的程序····· | 186 |
| 10.3 专利····· | 189 |
| 10.3.1 专利权····· | 189 |
| 10.3.2 专利····· | 190 |
| 10.3.3 如何申请专利····· | 191 |
| 10.3.4 专利文献的使用····· | 191 |
| 10.4 技术转让与技术合同····· | 192 |
| 10.4.1 技术合同及其分类····· | 192 |
| 10.4.2 技术合同的内容····· | 193 |
| 10.4.3 技术合同的签订····· | 193 |
| 10.4.4 技术合同的履行····· | 194 |
| 10.4.5 签订和履行技术合同时应注意的问题····· | 194 |
| 主要参考文献····· | 196 |

1 化工过程开发概论

开发具有开拓、发展、扩张的含义。它是指研制新产品，开拓新方法，发展现有过程，扩大应用领域。化工过程开发是指从实验室研究成果（新产品、新工艺等）过渡到实现工业化的科学技术活动。由于化工过程开发涉及化学工艺、化学工程、机械设备、调节控制，材料与防腐，技术经济等各个领域，同时还包括实验、设计和试生产等各个环节，因此它是范围极广的一门综合性工程技术。

近代的化工产品日新月异的，新技术、新工艺和新设备也在不断涌现。每年大批的成果为实验室技术，而能实现工业化的却只是很少一部分，缺少开发人才是重要原因之一。因此，如何缩短从实验室成果到工业化的开发周期，具有重大意义，归根到底，应大力培养具有工程开发能力的人才。

1.1 科学技术及研究方法概述

“经济建设要依靠科学技术，科学技术要面向经济建设”，“科学技术是第一生产力”。科学技术的定义是什么？科学与技术如何界定？引用辞海的解释，科学是关于自然、社会和思维的知识体系。科学（Science）的任务是揭示事物发展的客观规律，探求客观真理，作为人们改造世界的指南。技术（Technology）指根据自然科学原理和生产实践经验发展成的各种工艺操作方法和技能。科学是发现，技术是发明。科学是创造知识的研究，技术是综合利用知识满足实际需要的研究；科学是认识、改造世界的原动力，技术是改造世界的手段。科学与技术是辩证的统一体。

研究（Research）意指钻研，推究，含义是反复探索；开发（Development）是开拓、发展、扩张的意思。科学研究（R&D）包含了研究与开发的内容，是创造和运用知识的探索工作。科学研究分为基础研究、应用研究和技术开发研究。化工过程开发属于技术开发研究的范畴。

方法（Method）指解决思想、说话、行动等问题的程序、门路、途径等。在科学研究中，方法表示认识的途径，解决问题的手段、工具以及操作的程序。适当的方法是研究者取得成功的钥匙，是提高认知水平的阶梯。好的方法使“事半功倍”，差的方法则可能“事倍功半”，甚至一事无成。对一相同的科学研究问题，不同的研究者，不同的历史时期，采用的方法未必相同，正因为多种研究方法的竞争，才促进科学技术的不断进步。掌握方法比学会知识更重要。遗憾的是方法没有固定的模式，但是，随着科技的进步，科学研究方法论也日趋成熟。

1.1.1 科学理论对研究工作的指导作用

创造起源于观察，创造者必须对创造活动的对象进行观察，包括对其发展历史、研究现状进行分析，力求了解存在的问题、问题的性质及解决问题可能的途径。这里的“问题”是对现有的产品、工艺的不满意或不满足，发现问题从而产生创造的欲望，即形成一种“概念”，以确立研究的课题。课题确立，目标确定，接下来就是寻求实现目标的途径，也就是寻求解决问题的方法。任何研究过程都必须在科学理论的指导下进行。图 1-1 给出科学研究

方法论框图。

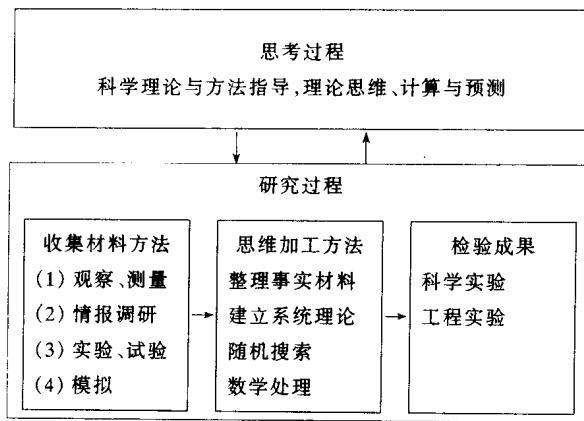


图 1-1 科学研究方法论框图

图 1-1 表明科学的研究方法是在科学理论和方法论指导下的思考过程和实际研究过程。科学理论是指哲学、政治经济学、自然辩证法的有关理论。就方法论而言, 20 世纪几乎同时诞生了几门崭新的学科, 即系统论、信息论和控制论。它们从不同的侧面揭示了客观物质世界的本质联系和运动规律, 为现代科技的发展提供了新的概念和方法。以“三论”为基础, 建立了系统科学体系, 应用现代数学和计算机等工具, 对系统的构成

要素、组织结构、信息交换、自动控制等功能进行分析与研究, 达到最优设计、最优控制、最优管理的目标。

科学理论与方法论始终处于指导地位, 研究过程必须在科学理论与方法论的指导下进行。搜集事实材料、思维加工和检验成果是科研活动的三个主要阶段, 图 1-1 中表明了其顺序关系。特别注意: 图中上位思考的是全局问题, 下位的思维加工指本课题可能采用的处理方法, 思考的是局部问题。

人们总是从认识事物的特殊性开始, 最终才掌握本质和规律的。但开题之初并不了解研究对象有哪些特殊性, 所以要按照图 1-1 的方法搜集大量的事实材料, 查阅文献与调研, 力图从中得到启迪。收集务求全面、整理尽量详细, 作为分析研究、推理判断的依据, 特别要防止在完成研究时才发现他人在许久之之前已有成果报道。

课题分解与实验规划是实验开始之前的一个重要环节, 属于思考过程的内容。系统论认为课题是由诸多层次组成, 而每个层次又包含有很多单元。通常以原理、性质、行为、结构、形态等为基准把复杂的课题分解成一些简单课题(子课题), 把整体分解成若干部局。课题分解有利于分工合作或者逐步解决困难, 获得深入、细致、清晰的认识。注意到单元、层次相互之间的有机结合, 最终获得对整体规律的认识。相反, 不分青红皂白, “黑箱式”的整体研究, 只能得到笼统的、粗糙的、模糊的认识。

初步形成方案后, 进入研究过程的实验阶段(如无需实验的课题, 则进入思维加工阶段)。由于种种原因, 课题分解不会一次成功, 要根据实验信息修改初步分解方案。研究进程在实验阶段与思考过程之间经过多次反复, 认识也逐渐由浅入深地发展。

实验设计即确定实验点的位置与数量。目前的实验设计方法有析因实验设计与序贯实验设计(见第 4 章)。取得一定实验数据后, 研究过程进入思维加工阶段, 例如在其中进行数学模型判断(识别)和参数估算。研究过程转入上位的思考过程, 对结果进行判别后, 又回到实验阶段。思考过程与研究过程之间的反复循环, 直至取得最终成果。上述的多次循环类似于数学上的反复迭代。实验费时耗资, 而思考过程主要发生在研究者的脑海之中, 经济代价极小。因此, 强化思考过程在科研中的主导性和有效性是省时节资的主要途径。

1.1.2 搜集事实材料的方法

直接搜集材料的基本形式有观察法、测量法、实验法和模拟法等。

1.1.2.1 观察法

观察法是人们通过感官，有计划、有目的对自然状态下和人为条件下的事物进行定性、定量、直接或间接的详细考察。观察在天文学、粒子物理等超大与超微领域中有着特别重要的意义。虽然观察只能获得事物的外部特征，但在研究工作中是无法逾越和取代的。

1.1.2.2 测量法

测量是量化信息的手段，没有测量就没有科学。研究者应掌握分析化学有关知识，既要熟悉温度、压强、流量、液位等工程参数的测量方法，也要熟悉现代测试仪器。例如：原子吸收分光光度计，可测试 70 余种金属元素含量；紫外及可见光分光光度计，用于有机化合物的分析和检测、同分异构体鉴别、物质结构测定；红外吸收光谱，用于确定有机化合物或官能团的结构等。

1.1.2.3 实验法

实验指人为的利用仪器、设备，创造特定的环境与条件，为认识事物的本质和规律营造前提和提供可能。通过合理的安排，可以将复杂的研究对象分解到层次、分割成单元逐一进行研究。实验可以在极端的条件下进行，发现一些奇异的现象并揭示出事物本质规律，是人们获取新知识、新技术的重要方法，超临界萃取就是其中一例。改变实验条件，控制研究对象，加速或延缓过程的进行，可获得需要的数据，催化剂寿命评价实验是典型的例子。

1.1.2.4 模拟法

模拟是对难以进行直接研究的对象（火箭，小浪底大坝等）开展的间接研究。模拟分为物理模拟和数学模拟。数学模拟的核心是建立能够反映对象本质（或某一方面性质）的数学模型。数学模型常来源于对物理现象深入的分析 and 适当的简化，往往需要用实验进行验证（详见第 5 章）。

1.1.3 思维加工方法

科技的发展中，已创立了大量的思维加工方法。整理事实材料可以采用分析方法、分类方法、归纳方法、比较方法等。建立系统理论可采用演绎方法、综合方法等。随机搜索性思维方法主要有科学想象、直觉思维、类比方法以及理想化等方法。

这里有两个问题值得重视，其一是事实材料或具体的实验数据一定要准确、可靠，它们是思维加工的基础。如果仅有数量有限的宏观数据，例如温度、压力、流量、组成，只能得到一般的认识，通过回归以经验公式告终。也许这些成果有工程价值，但难于达到理论上深层次地突破。其二用好已有的数据，获得与数据层次相应的认识水平，取决于方法论与科学理论水平。也就是说，既不能超越数据层次（宏观、微观），追求不切实际的认识深度，也不能不加分析，停留在表面上，对本应有的认识深度视而不见。数据是“表”，是内在质的综合表现，要“由表及里”的认识本质，分析是有效的方法。分析后的综合则是认知水平的升华。

1.2 化工过程开发的内容

1.2.1 化学工业在人类社会中的地位

凡是运用化学方法改变物质组成、结构，合成新物质的生产过程和技术称为化学工艺 (Chemical Technology)。运用化学工艺生产化学品的产业部门，即为化学工业 (Chemical Industry)。研究化学工业生产过程中的共同规律，解决规模放大、设计和生产操作的科学，称为化学工程 (Chemical Engineering)。化学工程包括：传递过程（特别是流体力学）、化工

热力学、化学反应工程、过程工程和过程系统工程五个分支。在现代汉语中，化学工艺、化学工业和化学工程都简称为化工。

化工涉及国民经济、国防建设、资源开发和人类衣食住行的各个方面，对解决人类社会所面临的人口、资源、能源和环境可持续发展的重大问题，也起到十分重要的作用。化工是工业革命的助手、农业发展的支柱、战胜疾病的武器，改善生活的手段。化工是国民经济的支柱产业之一。

化学工业的任务主要在于发展满足于国民经济各部门所需的化工新产品，同时化学工业本身需要不断的完善和发展。对老产品的工艺生产方法进行改造，高效催化的开发、新型分离技术的应用、节能设备的开发等都需从实验室研究开始，逐步过渡到工业化装置。目前，化学工业蒸蒸日上，化工过程开发任重道远。表 1-1 列出化工产品在其他领域中的应用。

表 1-1 化工产品在其他领域的应用

| 领域 | 所需化工产品 | 领域 | 所需化工产品 |
|----|-----------------------|-----|-----------------------|
| 农业 | 农药、化肥、薄膜、饲料、生长激素、食品等 | 纺织 | 化学纤维、染整剂等 |
| 能源 | 能源物质开采与加工，太阳能转化，燃料电池等 | 日用品 | 洗涤剂、化妆品、天然物质加工、表面活性剂等 |
| 交通 | 燃料、涂料、结构材料、润滑剂等 | 医药 | 药品合成、医用材料、DNA 技术等 |
| 建筑 | 建筑材料、装饰材料、水泥改性等 | 环境 | 三废治理、降解材料、清洁生产技术等 |
| 制造 | 工程塑料、复合材料、陶瓷材料等 | 信息 | 各种功能材料、纳米技术等 |

1.2.2 化工过程开发的内容

在化工生产中，从原料到产品，物流经过了一系列物理和化学加工处理步骤，化工过程 (Chemical Technological Process) 是围绕核心 (主要) 反应器组织的，其上游为原料 (反应物) 的前处理，以满足主要化学反应工艺条件为目标；下游为产品 (生成物) 的后处理，通过分离、纯化等手段，以达到产品标准为目标。除主要化学反应器外，化工过程主要由进行物理过程的单元操作 (输送、加热，冷却、分离等) 和进行化学过程的单元过程 (化学法净化、氧化、加氢，硝化、磷化等) 组成，有时也将生化处理引入化工过程，例如脱硫或废水处理。

化工过程研究与开发是指从一个有关新产品、新技术或新工艺的概念的形成，到科研、设计、建设工厂，从实验室研究成功地过渡到第一套工业规模生产装置，付诸实施的全部过程。

化工过程研究与开发的目的是：① 产品开发，即开拓满足国民经济需要的新产品；② 工艺过程开发，包括创造已有产品的新生产工艺和开发适用于新产品的新工艺；③ 工艺改进，对现有设备进行改造，达到提高产品质量、节约能耗、减少环境污染等目的；④ 应用开发，为现有产品寻找新的用途，延长产品寿命，使其持续赢利。

研究包括基础研究 (含应用基础研究) 和工程技术研究两个阶段。

基础研究以发现物质世界的规律为目标，核心是高水平的理论创新，包括新的化合物、新的化学反应、新的合成方法等，不强调特定的商业目的。基础研究的成果往往孕育了新发现、新理论、新规律与定律，其表现形式是学术论文或学术著作的推出。在化工领域中，主要研究物理过程和化学过程的基本规律，国家鼓励的研究领域主要有：化工热力学；界面现象与传递过程；新型分离技术；化学反应工程；生物工程和绿色化工等。

工程技术研究的成果是将实验室的研究成果转化为第一套工业装置，表现形式是研究报告、论文、专利、图纸以及装置，设备，产品等。化工过程开发 (Development of Chemical

Technological Process) 属于工程技术研究阶段。化工过程开发的基本内容为：根据基础理论研究的成果和有关工程资料，按照科学的方法，寻求技术可靠、经济合理的途径来制备该化学品，然后进行扩大试验，评价过程的可行性，设计工业装置，实现工业化。

在化学领域中，20 世纪世界新合成的化合物累积已在 2000 万种左右。合成新化合物的数量，目前正在呈指数级速度增加，然而，这 2000 万种左右的化合物中，具有应用价值的仅约占 1%，真正形成工业产品的则更少。

近年来我国每年登记取得 3 万多项科技成果（已不是单纯的理论论文），形成产业并取得经济效益的只有 5%。科技部负责人认为我国目前科技成果转化率低有两方面的原因：一是技术不成熟，直接可以拿来应用的技术不多；二是科学研究及技术开发与市场需求脱节，实验室成果到工业规模生产之间的桥梁并没有畅通。显然，这座桥梁就是过程开发研究。

1.3 化工过程开发的特点

过程是指相互关联的一系列活动或者变化，是事物的发展，是事情经历的经过。过程内在的科学规律是客观存在的，只不过在以前尚未被认识。所谓开发，宛如照片的显影，是指对过去未能利用的东西加以利用。

化学工艺是化工过程的精髓。开发一个化工过程，就是一种化学工艺的形成过程，包括生产的原料路线，生产方法、技术、操作程序、物料走向，以及相关单元操作设备的某种组合。化学工艺决策对能否进行正常生产以及能否取得效益，至关重要。在工程设计中，设备的失误是局部的，而工艺的失误则是全局的。所以，针对化工过程的特点进行开发是十分必要的。

1.3.1 实验室研究与工业生产的不同点

化工过程开发的成果，首先是在实验室完成的。无论是合成一种新的化合物、从大量配方中筛选到一种最佳配方，还是提出一种新的生产方法、改造一台生产设备，都需要在实验室中对多种可能的方案进行比较实验，确定其中最优的方案。但是，这种实验室的研究结果，只能说明该方案的可能性，还不能直接用于工业设计。原因在于实验室研究与工业生产有许多重大的不同之处。

① 原料来源的影响。在实验室研究中，常常采用化学纯 (Chemically Pure)、甚至分析纯级试剂 (Analysis Reagent) 为原料，其中杂质受到较严格的控制。在工业生产中，工业级原料中混入的微量杂质可能造成催化剂中毒、催化副反应、造成结晶形状、性质的改变。因此，在开发研究的深入阶段，必须采用廉价的工业原料进行重复实验，以考察过程的可靠性和技术经济性。为考察原料中杂质带来的影响及影响的程度，可采用向试剂级原料中逐项添加杂质的方法进行系统的研究。当杂质的影响显著时，要研究可靠的净化工艺。

② 杂质的积累。化学实验常采用玻璃仪器进行，腐蚀较少。工业生产在金属或非金属材料中进行，材料腐蚀对过程的影响不可小视。在连续生产中，杂质的积累到一定程度，就会产生质的变化。副反应的产物也可视为系统中的杂质，过程开发中就要考虑杂质的分离方法，并采取措施减少杂质积累的影响。

五水偏硅酸钠是一种环保型洗涤助剂。其基础理论研究进行较早，20 世纪 30 年代已绘制了各种温度下的结晶相图。由于原料中夹带的铁离子、氯离子会引起晶形的改变，铁离子的存在会促使产品中氯离子含量的提高，所以，过程开发要解决的重要问题之一是掌握杂质积累情况和影响规律，寻找杂质脱出方法以实现结晶母液的再循环。

③ 传递规律变化。实验室中设备规模较小，物料流动状态接近于理想状态。设备规模放大后，流动状态变化导致过程传递规律的变化，对单元操作设备和化学反应器的影响都是巨大的。

化学反应器中传热现象就是一例。实验室小型设备具有较大的比表面积，且直径小，即使是放热反应，热量很容易通过表面传导或辐射等形式导出，常常需要外加热量来维持反应所需的温度。设备增大后，参加反应物质的体积增大，故反应热不易只靠反应器表面导出。因此，小试中还需加热的放热反应，到中试和工业生产时，可能需采取适当的措施除去热量。如果解决不当，反应热不能及时移出，会产生“飞温”，使反应失控，甚至有发生爆炸的危险。

实验室研究的结果，只能说明该过程方法的可能性，但还不足以用来设计生产装置。过程开发的任务是将实验室的研究成果变为工业生产的现实。实验室研究和过程开发是相互衔接的。一般讲，实验室研究以得到一种生产方法的“设想”而告终，过程开发则要对这种生产方法的“设想”在技术上和经济上的可能性和合理性进行考核。为了进行试验而所需的模型装置或中试装置的设计、安装和开车均应包括在过程开发阶段中。

1.3.2 化工过程开发的特点

(1) 原料、生产方法和产品的多样性和化工开发的多方案性

化学工业可从不同的原料出发制造同一产品，也可用同一原料制造许多不同产品。同一原料制造同一产品还可采用许多不同的生产路线。一个产品有不同的用途，而不同产品有时却有同一用途。一种产品往往又是生产别种产品的原料、辅助材料或中间体。这些关系错综复杂，因原料来源、技术、设备和市场等方面的变化，既要互相适应，又有很大的选择余地。

化工过程开发中多方案性还表现在同一催化剂可催化不同的反应。完成同一反应可使用的反应器形式有多种，杂质脱除、分离纯化都有许多种方法可供选择，各种单元操作组合时的位置也灵活可变。

上述的多方案性使得化工过程开发工作既充满魅力，又极具挑战性。

煤、石油、天然气都可作为合成氨的原料。

以苯为原料，通过磺化可制成苯磺酸；通过硝化可制成硝基苯；通过氯化可制成氯苯。以苯磺酸、硝基苯、氯苯作为中间体，又可制造出大量的化学品。

在以石英沙为原料制备硅酸钠的过程中，有干法和湿法两种流程。以硅酸钠和烧碱为原料可以制备出偏硅酸钠、正硅酸钠、倍半硅酸钠等。就五水偏硅酸钠的制备来说，有溶液结晶法；结晶粉碎法；一次造粒法等几种方法。溶液结晶法由于工艺简单，设备投资较小，产品质量高，为国内多数厂家所采用，但分离后有大量母液需要回收（循环使用）；一次造粒法是国外最先进的制造技术，可用计算机控制进行连续生产，一次投资很大，对原料中杂质含量要求相当严格。图 1-2 为五水偏硅酸钠工艺流程示意图。

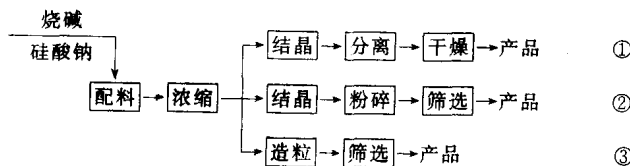


图 1-2 五水偏硅酸钠工艺流程示意图

(2) 化工过程开发要十分重视能量和资源的充分利用

化学反应伴随着能量的变化,在生产过程中或是吸热反应或是放热反应。化工生产耗能较多,因而节能潜力大。例如,换热器的设计,过去曾强调减少传热面积以减少投资,现在为了有效利用能源,即使增加投资,也要尽可能地减少传热温差,尽可能地提高能量利用效率。

化学工业的资源主要有以下几种。①矿物原料:煤、石油、天然气、磷矿、各种金属矿等;②生物原料:粮食、玉米秆、麦秆类农业废料、林业中木材加工副产物、相关生物质等;③水(含海水、盐湖水等)和空气。

石油工业的发展是20世纪社会取得飞速发展的重要原因之一。应当指出:矿物原料是消耗性资源,地球上煤、石油的储量是有限的。能源危机是实实在在的威胁。由于光合作用,许多生物原料却年年生长,属于可再生资源。显然,可再生资源的开发利用将是21世纪化工发展的重要方向。

(3) 环境保护和过程安全是化工过程开发中必须重视的问题

环境污染影响了人民健康,危害了生态平衡,例如:美国联合碳化物公司在印度博帕尔市的农药厂1984年12月因毒气泄漏事故,造成2000人中毒死亡;日本因汞中毒造成水俣病。各国为了防止污染,相继制定了环境保护法,对化学工厂的原料贮运,生产过程中产生的废气、废液、废渣,以及对跑、冒、滴、漏现象的处理,产品的包装和储运,都相继规定了严格的技术规程和标准。现代化工生产,要求把副产品、甚至废弃物都进行利用。近几年绿色化学与化工提出原子经济反应概念(见第3章)就是为了解决这个问题。化工过程常含有易燃、易爆和有毒物质,安全问题要特别重视。

(4) 在化工过程开发中技术经济观点十分重要

技术是为经济服务的,技术上先进必须在经济效益中体现出来,一般讲,没有经济效益的项目是没有开发价值的。例如,1973年用膜分离技术将海水淡化制成饮用水在技术上已基本成熟,美国军方在1979年完成了野战所需的水处理装置的设计。但是,淡化海水的成本过高使其迟迟难以大工业化,就国内而言,1996年才利用膜分离技术建成广东石化大亚湾海水淡化工程。

必须指出:经济观点是重要的,但决不是惟一的判据,因为有许多其他因素是难以用经济来表示的。例如:

- ① 产品对资源的利用程度如何,能否采用可再生资源代替消耗性资源;
- ② 产品使用性能是否优于其他方法生产的产品,在使用功能终结时是否对环境无害;
- ③ 装置的噪音、热量的扩散,过程中“三废”的排放等对周围环境有无破坏作用;
- ④ 生产过程危险性如何(包括爆炸、火灾、危险品泄露等),对操作人员的健康有无危害。

因此,在过程开发时必须同时对技术、经济、环境、安全、资源等一系列问题作综合的考虑,必须考虑社会效益。

1.3.3 放大是化工过程开发的核心

当前化学工业的迅速发展,首先在于化学这门科学的不断创新,以及采用了新型的材料和先进的机械装备。但是,就化工过程本身而论,主要取决于“化学工程”的发展。在过程开发时,不再全凭经验,自觉地运用化学工程的理论和方法,可以大大缩短工业化的周期,加速化学工业的发展。