

高危化工工艺安全控制策略优化——以氧化，过氧化反应为例

张 哲

江苏省嘉宏新材料有限公司 江苏 连云港 222000

摘 要：氧化与过氧化反应是典型高危化工工艺，在多领域广泛应用，然而其强放热性、反应物/产物不稳定及潜在失控风险，成为化工安全生产重大隐患。近年来，国内外因这类反应失控引发的重大事故频发，暴露出现有安全控制策略在系统性、前瞻性和智能化上的不足。本文聚焦其安全控制问题，先深入剖析危险特性与典型事故模式，再系统梳理评估当前主流安全控制技术，如本质安全设计、过程安全仪表系统 SIS、反应量热技术等的应用现状与局限。基于此，提出“本质安全优先、过程动态监控、智能预警决策、应急快速响应”四位一体的优化策略框架，强调源头削减风险，借助先进技术实现反应过程精细化、智能化管理，为高危化工工艺安全管控提供更优技术路径与理论支撑，推动化工行业本质安全与高质量发展。

关键词：高危化工工艺；氧化反应；过氧化反应；安全控制策略；本质安全；过程安全仪表系统（SIS）

引言

化学工业是国民经济重要支柱，但生产中涉及大量危险物质与复杂变化，属高风险行业。氧化与过氧化反应因独特化学性质，被视为最危险的化工单元操作之一，其高放热性且体系常含不稳定中间体或产物，关键参数超安全阈值易引发灾难性后果。传统安全控制策略多被动防护与事后应急，缺乏对风险源头遏制和过程动态精准把握。随着法规日益严格及新技术发展，对高危化工工艺安全控制要求提高，要“防得住”“控得精”“预得准”。因此，亟需构建以风险预防为核心、技术先进、管理闭环的优化策略。本文以氧化、过氧化反应为研究对象，探究其危险机理，整合现代理念与前沿技术，提出系统性安全控制优化方案，为提升我国高危化工工艺本质安全水平提供参考。

1 氧化、过氧化反应的危险特性与事故模式分析

1.1 核心危险特性

氧化和过氧化反应的高风险性主要由其多重叠加的危险特性构成。首先，这类反应具有极高的放热性，例如烃类完全氧化可释放数千kJ/mol的热量。在工业反应器中，如果冷却系统失效或加料速率失控，反应热无法及时散发，将引发体系温度急剧上升，形成恶性循环，最终导致反应失控。其次，这些反应物和产物的不稳定性增加了风险。许多氧化剂（如浓硝酸、高锰酸钾等）自身强氧化性，与还原物质接触易发生剧烈反应；生成的有机过氧化物对热、摩擦敏感，可能瞬间分解并释放大能量，造成爆炸。此外，复杂的反应网络也是不可忽

视的因素。实际工业反应并非单一进行，而是伴随一系列副反应，这不仅增加了不稳定物质的数量，还产生了额外热量^[1]。最后，当使用气态氧化剂时，气-液相平衡与传质限制也是一大挑战。溶解氧浓度维持较低水平时反应可控，但搅拌停止或分布器堵塞会导致未反应氧气积聚，重新启动时可能发生快速溶解参与反应，从而导致反应速率剧增的风险。因此，精确控制氧化和过氧化反应条件至关重要。

1.2 典型事故模式

基于上述危险特性，氧化、过氧化反应的事故演化通常遵循以下几种典型模式：模式一：冷却失效导致的热失控。这是最常见的事故模式。冷却介质中断、换热器结垢、夹套堵塞等原因导致撤热能力下降，反应热累积，温度飙升，最终触发副反应或产物分解。模式二：加料失控。氧化剂或还原剂加入速度过快，超过反应器的撤热能力或混合能力，造成局部浓度过高，引发剧烈反应。模式三：杂质引发的催化分解。微量的重金属离子（如铁、铜）或其他杂质可能催化有机过氧化物的分解，即使在正常操作温度下也可能引发事故。模式四：后分解（After-reaction or Post-reaction Decomposition）。主反应结束后，体系中残留的不稳定物质（如未反应完的过氧化物）在后续的蒸馏、浓缩、储存等工序中，因受热或扰动而发生分解。模式五：气相空间爆炸。由于通风不良或惰化不充分，挥发性可燃物与空气（或氧气）在反应器顶部形成爆炸性混合物，遇点火源即发生爆炸。

2 现有安全控制技术及其局限性

2.1 本质安全设计 (Inherently Safer Design, ISD)

本质安全是最高层级的风险控制策略,其核心思想是从源头上消除或最小化危害,而非依赖附加的安全设施。其四大原则为:(1)最小化 (Minimize):减少危险物料的在线库存量。(2)替代 (Substitute):用危险性更低的物料或工艺路线替代。(3)缓和 (Moderate):使用稀释、低温、低压等条件降低危险程度。(4)简化 (Simplify):设计简洁、容错性强的工艺流程,减少人为失误。在许多情况下,出于产品性能、成本或技术成熟度的考虑,理想的本质安全替代方案难以实现。例如,某些特定产品的合成必须依赖高活性的过氧化物,无法轻易替代。此外,本质安全设计往往需要在项目早期介入,对于已建成的老旧装置改造难度大、成本高。

2.2 过程安全仪表系统 (Safety Instrumented System, SIS)

SIS是独立于基本过程控制系统 (BPCS) 的保护层,用于在检测到危险工况时,自动执行预设的安全动作(如紧急停车ESD、切断进料、启动紧急冷却等),将过程带入安全状态。其可靠性通过安全完整性等级 (SIL) 来衡量。SIS是一种“事后”或“临界点”干预措施。它依赖于传感器准确、及时地检测到危险信号^[2]。然而,对于一些发展极其迅速的失控反应(如某些过氧化物的分解),从传感器报警到SIS执行动作之间的时间延迟,可能不足以阻止事故的发生。此外,SIS的设计通常基于静态的、离散的安全阈值,难以应对复杂、动态变化的反应过程。

2.3 反应量热与热风险评估技术

反应量热仪(如RC1, ARC)能够精确测量反应的热力学和动力学数据,包括反应热、最大放热速率、绝热温升、分解温度等。这些数据是进行定量风险评估(如TMRad, MTSR计算)和设计安全操作窗口的基础。实验室量热数据向工业规模的放大存在不确定性。小试条件下获得的数据可能无法完全反映大型反应器内的传热、传质和混合效应。此外,量热实验通常是离线的、静态的,无法提供对实际生产过程中反应状态的实时、连续监控。

2.4 在线过程分析技术 (Process Analytical Technology, PAT)

PAT(如FTIR, Raman, FBRM)可在不干扰生产的情况下,实时监测反应体系中的关键组分浓度、颗粒形态等信息,为过程控制提供直接依据。尽管PAT技术日益成

熟,但在高温、高压、强腐蚀性的氧化反应环境中,探头的稳定性和寿命仍是挑战。同时,如何将海量的PAT数据有效转化为可执行的控制指令,仍需强大的数据处理和模型支持。

3 优化安全控制策略框架的构建

3.1 第一层:强化本质安全 (Inherent Safety Reinforcement)

针对现有本质安全实践的不足,优化策略首先强调在可行范围内最大限度地强化源头风险削减。微反应器或连续流技术为此提供了极具前景的解决方案。通过将反应体积缩小至毫升级别的微通道内,可以极大地强化传热和传质效率,从根本上消除了大规模热累积的可能性。对于高危的氧化、过氧化反应,连续流工艺能够实现物料配比和停留时间的精准控制,确保高活性中间体在生成后立即被消耗,避免其在体系中累积,从而显著提升工艺的安全性。与此同时,应积极推动绿色氧化剂的筛选与应用,例如,研发以分子氧(O₂)或空气为终端氧化剂的催化体系,配合高效、选择性的催化剂,从根本上避免使用高浓度过氧化物或有毒重金属氧化剂^[3]。此外,在溶剂和助剂的选择上,也应贯彻缓和原则,优先选用高沸点、高热容且化学惰性的溶剂以提高体系的整体热稳定性,并酌情添加专用稳定剂以抑制过氧化物在储存和反应过程中的非预期催化分解。

3.2 第二层:深化过程动态监控 (Deepened Process Dynamic Monitoring)

在强化了本质安全的基础上,优化策略的第二层致力于构建一个全方位、深层次的过程动态监控体系。该体系不再局限于传统的温度、压力等宏观参数,而是通过部署一个集成了常规传感器与先进PAT(如在线红外、拉曼光谱)的综合感知网络,实现对反应体系从宏观状态到微观化学组成的全面洞察。这种多源信息的融合感知能力,使得操作人员能够实时掌握反应的真实进度和关键组分的变化趋势。更为重要的是,应将实验室反应量热所获得的动力学模型嵌入到实时控制系统之中。这样一来,系统便能够根据当前实时采集的物料浓度、温度等数据,动态计算出体系的即时热负荷、潜在的绝热温升(ΔT_{ad})以及到达最大反应速率所需的时间(TMR_{ad}),从而对当前操作点的安全裕度进行实时、定量的评估,为后续的智能决策提供坚实的数据基础。

3.3 第三层:构建智能预警与决策 (Intelligent Early Warning and Decision-Making)

有了精准的动力学数据,优化策略的第三层便着眼于利用先进算法实现智能预警与自主决策。基于模型的预

测控制 (MPC) 是其中的核心技术。MPC 利用预先建立的机理模型或数据驱动模型, 能够预测未来一段时间内关键过程变量的变化轨迹。当预测结果显示某个参数 (如反应温度) 有超出安全限值的趋势时, 控制器会提前、平滑地调整操作变量 (如冷却水流量或原料进料速率), 将过程主动引导回安全区域, 真正实现“防患于未然”。为了支撑 MPC 的运行并提升整体系统的韧性, 应构建物理反应器的高保真虚拟映射——数字孪生平台。该数字孪生体集成了设备的几何模型、物料的物性数据、详细的反应动力学方程以及传递过程模型, 能够逼真地模拟各种正常与异常工况^[4]。操作与管理人员可以在孪生体上进行“假设分析” (What-if Analysis), 安全地演练冷却失效、误加料等突发场景下的系统响应, 从而不断优化应急预案和 SIS 的连锁逻辑。同时, 这个虚拟平台也是培训操作员、提升其应急处置能力的理想工具。

3.4 第四层: 完善应急快速响应 (Enhanced Emergency Rapid Response)

即便拥有前三个层次的严密防护, 完善的应急快速响应机制仍是保障最后一道防线的关键。优化策略主张建立一个与实时风险评估结果紧密联动的分级响应机制。该机制不再依赖单一的报警阈值, 而是根据动态计算出的 TMRad 等关键指标, 将风险划分为不同等级, 并对应不同的响应预案。例如, 当 TMRad 大于 24 小时, 系统仅发出低级别预警, 提醒操作员关注; 当 TMRad 降至 8 小时以内, 则自动启动强化冷却程序并减缓加料速率; 而一旦 TMRad 逼近 1 小时的临界值, 系统将立即触发 SIS, 执行紧急停车并将反应物料倾倒入专用的淬灭罐

中。未来的 SIS 也应朝着智能化方向演进, 它不应仅仅是执行硬接线的简单连锁, 而应能够接收来自数字孪生平台和 MPC 的高级指令, 执行一系列经过优化的、复杂的应急动作序列, 以最有效的方式化解危机。

4 结语

氧化、过氧化反应安全控制是复杂系统工程。本文剖析其危险特性, 指出现有安全控制技术局限, 创新提出“本质安全优先、过程动态监控、智能预警决策、应急快速响应”四位一体优化策略框架。该框架实现安全管理模式根本转变: 本质安全设计与预测控制前移防线, 从被动防御转为主动预防; 先进分析技术和实时评估让操作人员对反应过程“看得见、测得准”; 数字孪生等使决策逻辑从“基于规则”升级为“基于预测”; 还整合全生命周期安全管理要素, 形成有机整体。未来研究可聚焦几个关键领域: 开发极端化工环境的高可靠性 PAT 传感器; 建立普适精准的高危反应耦合模型; 探索人工智能在异常模式识别等中的应用; 推动相关标准规范更新, 为前沿技术工业应用扫清障碍。

参考文献

- [1] 张玉芳, 刘春蕾, 沙洪芳. 危险化工工艺生产过程安全管理模式研究[J]. 化工管理, 2025, (33): 98-101.
- [2] 郝鑫. 化工工艺安全设计中的危险因素及防范措施[J]. 化工管理, 2025, (32): 85-88.
- [3] 刘洋, 李文超. 精细化工工艺安全设计与事故预防策略[J]. 中国石油和化工标准与质量, 2025, 45(22): 63-65.
- [4] 刘洋, 李文超. 精细化工工艺安全风险识别与防控策略[J]. 中国石油和化工标准与质量, 2025, 45(20): 185-187.