

# 化工工艺过程开发及工艺路线选择

展茂辉 马云宝

浙江华大树脂有限公司 浙江 丽水 323000

**摘要:** 化工工艺过程开发与路线选择是化工产品实现工业化落地、提升生产效益的核心环节。本文系统阐述了二者的内涵与意义,梳理了工艺过程开发中基础研究、实验室小试、中试放大、工业化设计的完整流程及关键支撑技术,明确了工艺路线选择需遵循的技术可行、经济合理、绿色安全、系统协同四大原则。分析了传统与前沿工艺路线评价方法的特点,提出了绿色化、智能化、高效化的优化方向。研究表明,科学开展工艺开发与路线选择,可缩短实验室成果工业化周期、降低生产成本、提升产品质量,推动化工行业技术迭代与可持续发展,为化工项目的工程化实施提供理论与实践参考。

**关键词:** 化工工艺; 过程开发; 路线选择; 评价方法; 优化方向

引言: 化工工艺过程开发是连接实验室与工业生产的桥梁,工艺路线选择则决定了生产流程的核心架构,二者的科学性直接影响项目投资回报率、产品市场竞争力及环境影响。当前,部分化工企业仍存在工艺开发流程不规范、路线选择缺乏系统评估等问题,导致生产效率偏低、能耗偏高、环保压力较大。因此,深入研究化工工艺过程开发的核心流程、关键技术及路线选择的原则与方法,对优化生产流程、降低生产成本、推动行业绿色可持续发展具有重要的现实意义与应用价值。

## 1 化工工艺过程开发及工艺路线选择的内涵与意义

化工工艺过程开发是指通过系统的研究与试验,将化工产品的实验室合成方法,转化为

可工业化放大、连续稳定运行的完整生产流程,涵盖工艺参数优化、设备选型适配、物料与能量平衡调控等核心内容。工艺路线选择则是在多种可行的生产路径中,结合技术特性、资源利用、能耗控制等因素,筛选出最优方案,核心是实现生产过程的高效、节能、稳定,兼顾技术可行性与实际应用价值,两者相辅相成、密不可分。合理开展化工工艺过程开发及工艺路线选择,可有效提升生产效率,缩短实验室成果到工业化生产的周期,降低生产过程中的物料损耗与能耗,控制生产成本。同时能够优化生产流程的稳定性与安全性,减少生产过程中的无用消耗,提升产品质量的均匀性与可靠性。优质的工艺开发与路线选择,可推动化工生产技术的迭代升级,提升行业整体技术水平,助力实现资源的高效利用,为化工行业的可持续发展奠定坚实基础<sup>[1]</sup>。

**通讯作者:** 马云宝, 1982年09月29日出生, 2007年毕业于济南大学, 现就职于浙江华大树脂有限公司。主要从事企业生产技术工作。

## 2 化工工艺过程开发的核心流程与关键技术

### 2.1 基础研究阶段

基础研究是工艺过程开发的前提,核心目标是明确反应本质与工艺可行性。该阶段需聚焦反应机理分析、热力学与动力学计算两大核心内容。通过反应机理研究,明确反应物转化路径、中间产物生成规律及副反应发生条件,为后续工艺优化提供理论依据;热力学计算主要围绕吉布斯自由能、反应焓变、熵变等参数展开,判断反应的自发可能性与能量变化特征,确定反应的温度、压力等基础条件范围;动力学研究则通过测定反应速率常数、反应级数等参数,建立动力学模型,揭示反应条件对反应速率的影响规律,为反应设备选型与操作参数优化提供数据支撑。此阶段还需初步筛选催化剂、溶剂等关键物料,评估物料相容性与反应适应性,为小试阶段奠定基础。

### 2.2 实验室小试阶段

实验室小试是将基础研究成果转化为具体工艺方案的关键步骤,核心任务是验证工艺可行性、优化工艺参数并获取基础数据。小试阶段需在实验室规模下,模拟反应过程与分离纯化环节,通过系统实验筛选最优工艺条件,包括反应温度、压力、停留时间、物料配比、催化剂用量及分离方式等。实验过程中需重点关注反应转化率、产物选择性、收率等核心指标,同时记录物料平衡与能量平衡数据,初步评估工艺的经济性与环保潜力。且小试阶段还需识别潜在的工艺风险,如反应失控、物料分解等问题,为中试阶段的安全设计提供参考。小试阶段的数据准确性与可重复性至关重要,直接决定中试放大的成功率,因此需采用标准化实验流程与精准检测手段,确保实验结果的可靠性。

### 2.3 中试放大阶段

中试放大是连接实验室小试与工业化生产的桥梁,核心目标是解决放大效应带来的技术问题,验证工艺稳定性与工程可行性。实验室小试通常在理想条件下进行,设备规模小、传热传质效率高,而工业化生产设备体积大、操作条件复杂,易出现传热不均、传质效率下降、物料混合不充分等放大效应,导致工艺参数失效与产品质量波动。中试放大阶段需将小试工艺参数按比例放大,通过调整设备结构、优化操作流程,解决放大效应带来的问题。具体任务包括:验证工艺在放大规模下的稳定性与重复性,确定设备材质与规格,优化传热、传质及混合系统设计,评估工艺的安全风险与废弃物处理方案,完善工艺控制策略。中试阶段还需补充完善物料平衡、能量平衡及设备运行数据,为工业化设计提供精准的设计依据,同时优化工艺成本,降低工业化投资风险。

### 2.4 工业化设计阶段

工业化设计是工艺过程开发的最终目标,核心任务是实现工艺的工业化落地,设计出高效、稳定、环保的工业化生产装置。该阶段需综合考虑生产规模、设备选型、流程优化、自动化控制、能耗降低及环保处理等多方面因素。在设备选型方面,需根据工艺要求选择适配的反应器、分离器、换热器等设备,兼顾设备效率、投资成本与运行稳定性,优先选用高效、节能、环保的新型设备;流程优化需实现各单元操作的协同衔接,减少物料损耗与能量浪费,采用连续化生产模式提升生产效率,同时设计原料循环利用流程与废弃物回收系统,提升资源利用率。自动化控制设计需构建精准的工艺参数监测与调控系统,实现温度、压力、流量、组分等参数的实时监控与自动调节,保障生产过程的稳定性与产品质量的均一性。工业化设计还需考虑设备布置、公用工程配套等工程问题,确保生产装置的安全性与操作性<sup>[2]</sup>。

### 2.5 工艺过程开发的关键支撑技术

现代化工工艺过程开发离不开关键技术的支撑,其中反应工程优化、分离纯化技术、过程模拟与数字化工具是核心支撑技术,直接决定工艺开发的效率、成本与质量。反应工程优化通过优化反应器结构与操作参数,强化传热传质效果,提高反应选择性与收率,如微反应器技术可有效解决强放热反应的控温难题,将控温精度提升至 $\pm 1\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,大幅提升反应效率与安全性。分离纯化技术是化工工艺的重要环节,高效的分离技术可降低能耗、提高产品纯度,膜分离、萃取精馏、结晶等新型分离技术正逐步替代传统技术,其中新型膜分离技术单套

装置日处理量可达500立方米,在环保与节能方面展现出显著优势。过程模拟与数字化工具则通过计算机辅助设计与模拟软件等,精准预测工艺性能、优化操作参数、识别设备瓶颈,可将工艺开发周期缩短120天,大幅减少实验成本与开发周期,为工艺优化提供精准的数据支撑,推动化工工艺开发向高效化、精准化方向发展<sup>[3]</sup>。

## 3 化工工艺路线选择的基本原则

### 3.1 技术可行性原则

技术可行性是工艺路线选择的前提,核心是确保所选路线在工业化生产中具备稳定实现的技术条件。通过热力学分析验证反应的可能性,结合动力学研究确定适宜反应条件,确保在工业装置中能高效生成目标产物且副产物可控;优先选用技术成熟、可靠性高的路线,优先选择经过中试或工业示范验证的工艺,规避不成熟技术带来的生产波动、产品不合格等风险。并需保障设备与物料的可获得性,工艺所需反应器、分离器等设备能实现工业化制造,催化剂、原料等供应稳定且质量达标,操作技术易被员工掌握。工艺需具备一定灵活性,可适应原料组分波动、产品规格微调的需求,提升生产适应性,为后续生产调整预留空间。

### 3.2 经济合理性原则

经济性是工艺路线选择的核心指标,需综合平衡投资与运行成本,实现效益最大化。投资成本方面,涵盖设备购置、厂房建设、公用工程配套等固定资产投资,应优先选择投资回报率高、回收期短且设备性价比优的路线,避免盲目追求先进设备导致投资浪费。运行成本包括原料消耗、能耗、人工、废弃物处理等可变成本,需通过优化原料配比、采用余热回收等节能技术、提高资源利用率,严控单位产品成本。并结合产品市场价格波动与需求规模,评估盈利空间,兼顾短期成本控制与长期效益,杜绝单纯追求低成本而牺牲工艺稳定性、产品质量及后续升级潜力。

### 3.3 绿色安全原则

绿色安全是新时代化工工艺选择的重要准则,契合绿色发展与安全生产要求。绿色性上,优先选择原子利用率高、污染物排放少、能耗低的清洁工艺,采用绿色催化剂、环保溶剂替代传统高污染物料,设计废水、废气、固废的回收循环流程,推动“减量化、再利用、资源化”,降低对生态环境的影响<sup>[4]</sup>。安全性上,全面评估工艺潜在风险,重点考量易燃、易爆、有毒物料的储存与使用,防范反应失控、物料泄漏等隐患,优先选择固有安全性高的路线。同时优化设备防爆、防腐结构,规范操作流程,通过危险与可操作性分析(HAZOP分析)

等方法排查风险,制定完善的安全防控与应急处置措施,保障人员、设备及周边环境安全。

### 3.4 系统协同原则

化工工艺是多单元联动的复杂系统,路线选择需遵循系统协同原则,实现整体效益最优。需优化各单元操作的衔接的参数匹配,合理布局工艺流程,缩短物料输送距离,减少能量损耗与物料浪费。兼顾公用工程配套性,确保水、电、蒸汽等供应稳定,实现能量梯级利用与资源综合利用,提升公用工程利用率。并需预留工艺升级与产能扩张空间,考虑后续技术改进、新产品开发的适配性,确保工艺路线能长期适应行业技术发展与市场变化,实现生产系统的可持续优化与稳定运行。

## 4 化工工艺路线的评价方法与优化方向

### 4.1 传统评价方法

化工工艺路线传统评价方法结合定性分析与定量计算,主要包括指标对比法、层次分析法、生命周期评价法,广泛用于工艺初步筛选与综合评估。指标对比法选取转化率、收益率、能耗等核心指标,量化对比不同工艺,简单直观、适用于初步评价,但难以权衡多指标制约关系。层次分析法将工艺选择分解为目标层、准则层、方案层,通过判断矩阵确定指标权重,解决复杂多目标优化问题,适用于大型化工项目工艺筛选。生命周期评价法覆盖工艺全生命周期,评估环境影响与资源消耗,为绿色工艺提供依据,但评价周期长、数据收集难度大。

### 4.2 前沿评价技术

随着科技的发展,新型评价技术逐步应用于工艺路线选择,大幅提升评价的精准性与高效性。“三参数差值法”以吉布斯自由能、原子利用率、固有安全指数为核心参数,通过计算实际与理想反应的参数差值,综合评价工艺的热力学可行性、绿色性与安全性,为工艺设计与优化提供理论支撑。专家增强深度学习模型结合数据驱动与专家经验,构建工艺路线评分体系,实现多步骤工艺的精准评价,提升结果的一致性与可靠性,已应用于精细化工等复杂工艺评价。此外,数字化孪生技术通过构建工艺虚拟模型,模拟不同路线运行状态,预测工艺性能与潜在风险,无需大量试产即可完成优化,降低成本、缩短周期,为工艺动态优化提供技术支持。

### 4.3 工艺路线优化方向

结合行业发展趋势,化工工艺路线优化需向绿色化、智能化、高效化方向协同推进。绿色化优化聚焦原子经济性与污染物减排,通过开发新型高效催化反应、采用电气化合成等清洁技术,替代传统高能耗、高污染工艺,实现原料的最大化高效利用与生产废弃物的最小化,减少有毒有害原料使用,推动化工生产与生态环境协调发展。智能化优化依托人工智能、大数据及物联网技术,构建精准工艺参数优化模型,实现反应条件实时监测、动态调控与故障预警,提升生产效率与产品质量稳定性。高效化优化通过反应器集成、反应-分离耦合等过程强化技术,简化流程、缩短周期,降低设备投资与能耗,突破传统工艺瓶颈。同时需加强多学科融合,推动生物化工、新型功能材料与化工工艺交叉创新,开发新型绿色高效工艺,拓展化工产品的高端制造、生物医药等领域的应用,助力行业高质量升级<sup>[5]</sup>。

结束语:化工工艺过程开发及路线选择兼具复杂性与系统性,需依托科学全面的实施策略推进。既要夯实基础研究与小试数据支撑,优化中试放大与工业化设计的有效衔接,也要坚守技术可行、经济合理、绿色安全、系统协同的核心原则,借助先进评价技术推动路线持续优化。唯有构建贯穿开发全周期、兼顾效率与绿色、持续迭代升级的工艺管理体系,方能从根本上推动化工工艺技术提质增效,为行业可持续发展与高质量升级筑牢坚实保障。

### 参考文献

- [1]王建龙.化工设备与化工工艺适应性设计探讨[J].化工管理,2023(32):129-131.
- [2]杨骏.过程模拟优化在化工工艺设计中的应用研究[J].化工管理,2025(4):148-150.
- [3]胡希春,高健,李维海,盖丛敏,武庆臣.化工工程工艺中的绿色化工关键技术分析[J].清洗世界,2024,40(05):72-74.
- [4]杨孝栋.绿色化工技术在化学工程工艺中的运用[J].化学工程与装备,2023(10):37-39.
- [5]陈庭强,何雯,刘梦,等.碳中和背景下绿色化工的技术创新路径研究[J].生态经济,2023,39(12):72-78.