



普通高等教育“十二五”规划教材

化工工程设计概论

(第二版)

杨基和 徐淑玲 主编

中国石化出版社

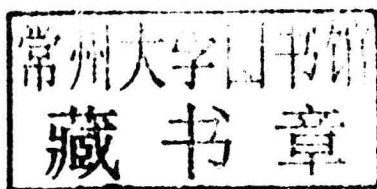
[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)

普通高等教育“十二五”规划教材

化工工程设计概论

(第二版)

杨基和 徐淑玲 主编



中国石化出版社

内 容 提 要

本书为《化工工程设计概论》的修订版,系统介绍了化工工程设计的内容、程序、方法、步骤及相关工艺、绘图和设计技巧,内容包括化工工程设计内容及程序、化工厂厂址选择及总图设计、工艺流程设计、窄点设计、热量集成、化工管道布置设计、安全环保、技术经济等。与第一版相比,本书主要增加了 Statistica 软件的使用及案例、3D 及 CAD 绘图软件的使用及案例、ASPEN 流程模拟软件应用、计算机数值模拟及能量集成相关知识。

本书适用于高等院校从重化工到轻化工专业设计的教学,也可作为研究院所、企业工程技术人员的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

化工工程设计概论/杨基和,徐淑玲主编. —2 版
(修订本). —北京:中国石化出版社,2012. 8
普通高等教育“十二五”规划教材
ISBN 978 - 7 - 5114 - 1725 - 1

I. ①化… II. ①杨… ②徐… III. ①化工工程 - 设计 - 高等学校 - 教材 IV. ①TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 171006 号

未经本社书面授权,本书任何部分不得被复制、抄袭,或者以任何形式或任何方式传播。版权所有,侵权必究。

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail:press@sinopec.com

北京科信印刷有限公司印刷

全国各地新华书店经销

*

787 × 1092 毫米 16 开本 20.25 印张 514 千字

2012 年 8 月第 2 版 2012 年 8 月第 1 次印刷

定价:40.00 元

第二版前言

本书是在《化工工程设计概论》(2005年出版)的基础上,根据目前化工设计的新趋势、新方法、新技巧,加之多届学生及有关设计院所使用后提出的宝贵意见进一步编写的化工类专业教材。

中华人民共和国教育部2011年1月8日正式发文:面向工业界、面向世界、面向未来,培养卓越工程师后备人才,教育部启动实施“卓越工程师教育培养计划”。“卓越计划”是贯彻落实《国家中长期教育改革和发展规划纲要(2010—2020年)》和《国家中长期人才发展规划纲要(2010—2020年)》的重大改革项目,也是促进我国由工程教育大国迈向工程教育强国的重大举措。化工设计是高等学校化学工程与工艺专业必修课,也是落实实施“卓越工程师计划”的一个重要教学环节。

本书系统介绍了化工工程设计的内容、程序、方法、步骤及相关工艺、绘图和设计技巧,内容包括化工工程设计内容及程序、化工厂厂址选择及总图设计、工艺流程设计、窄点设计、热量集成、化工管道布置设计、安全环保、技术经济等,重点突出可行性研究的编制、化工过程最优化、工艺路线及生产流程的组织、绘图和选材等知识的传授及绘图。与第一版相比,本书主要增加了 Statistica软件的使用及案例、3D及CAD绘图软件使用及案例、ASPEN模拟流程软件应用、计算机数值模拟及能量集成相关知识。

本书由杨基和统稿;徐淑玲负责 Statistica、3D、CAD、ASPEN 等相关知识的编写;刘英杰负责计算机数值模拟内容编写及章节整理等工作。

本书适用于高等院校从重化工到轻化工专业设计的教学,也可作为研究院所、企业工程技术人员的参考用书。

由于编者水平有限,文中难免出现错误,敬请广大读者批评指正。

第一版前言

化工设计是高等院校化工类专业必修课，是培养学生独立解决工程技术问题、理论联系实际、提高学生综合素质、由大学生向化工工程师转变的一个重要环节。

《化工工程设计概论》教材是集作者二十多年来化工工程设计理论和实际教学经验，同时参考许多相关资料编辑而成。主要内容包括化工工程设计程序及内容、化工厂厂址选择、总图设计、工艺流程设计、工艺三算、化工管道布置设计、车间布置设计、安全与环保、技术经济等。特别强化技术和经济相结合的最优化设计，如窄点法进行换热网络优化设计、冷却器最优化设计、黄金分割法进行厂址优化等；化工科技文件编制，如项目建议书、可行性研究报告等；工艺路线的选择及生产流程组织；主辅工艺管线流程设计；离心泵安装实际注意事项；化工绘图等内容。

本教材增加了大量的石油化工领域设计内容和图例，弥补了目前有关教材这方面的不足，因而具有信息量大、覆盖面广的特点。适合于高校化学工程与工艺(含石油加工、有机化工、精细化工、化学工程等方向)；制药工程；轻化工等专业的教学、石化企业职工继续教育指导书及工程技术人员参考用书。

全书由杨基和、蒋培华合作编写，其中杨基和侧重于石油化工、化学工程等重化工方面；蒋培华侧重于精细化工、轻化工等方面。全书由杨基和统筹定稿。本书特邀请江苏工业学院裘兆蓉教授、洛阳石化工程公司李网章及李和喜两位教授级高工审阅。在本书编写过程中引用了许多专家、学者的文献资料，徐峰、徐永洲和宋高峰三位同学参加文字录入和整稿，在此一并表示感谢。

由于编者水平有限，书中错漏敬请批评指正。

目 录

绪论	(1)
第一章 化工工程设计基本程序和内容	(4)
第一节 化工工程设计的开发工作	(4)
第二节 实验设计优化的方法	(6)
第三节 化工工程设计程序及主要内容	(16)
第二章 化工厂厂址选择及总图设计	(24)
第一节 化学工业的主要特点	(24)
第二节 厂址的选择及优化设计	(25)
第三节 总图设计的原则及内容	(36)
第四节 总平面布置	(38)
第五节 厂区竖向布置	(50)
第六节 工程管线综合	(56)
第七节 总平面设计步骤及图纸内容	(60)
第三章 化工工艺流程设计	(62)
第一节 工艺流程设计图的分类	(63)
第二节 工艺流程设计主要流程及辅助流程	(70)
第三节 换热流程优化设计	(82)
第四节 管道仪表流程图的绘制	(92)
第五节 计算机辅助设计软件	(96)
第四章 化工三算	(102)
第一节 物料衡算	(102)
第二节 能量衡算	(122)
第三节 设备工艺设计及其选型	(144)
第五章 管道布置设计	(179)
第一节 概述	(179)

第二节	管架和管道的安装布置	(180)
第三节	典型设备的管道布置	(183)
第四节	管道布置图	(189)
第五节	管道热补偿与管道保温	(196)
第六章	车间布置设计	(203)
第一节	车间平面布置	(203)
第二节	车间设备布置	(206)
第三节	车间布置设计方法	(222)
第四节	车间布置图的绘制	(226)
第七章	经济分析与评价	(233)
第一节	装置投资估算	(233)
第二节	总生产成本估算	(240)
第三节	税金和利润	(244)
第四节	经济评价的几个基本概念和准则	(245)
第五节	风险分析	(253)
第八章	安全与环保	(258)
第一节	化工安全生产	(258)
第二节	压力容器的安全装置及其计算	(263)
第三节	环境保护	(271)
附录一	中国石油炼化化工建设项目可行性研究报告编制规定 (2011 年版)	(275)
附录二	设计说明书的编制	(284)
附录三	安全和环保有关规定	(288)
附录四	工艺流程设计图例	(296)
附录五	工艺管道流程设计规范	(307)
参考文献		(318)

绪 论

一、化工工程设计目的和意义

化工工程设计是将科研成果、新技术付诸于生产实践的过程，是化工企业得以建立的必经之路。

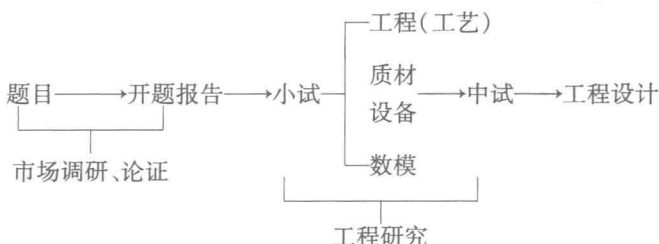
随着化学工业的迅速发展，研究、设计、施工和生产水平也相应迅速提高。正确的设计思想和相应的设计技术不仅体现在新建化工项目过程中，而且对已经投产的装置(如何发现并解决生产中存在的问题，改进工艺，提高生产效率，促进科研成果转化，搞好施工建设)也是十分必要的。具体表现在以下几个方面：

1. 生产方面

对现有生产装置不断采用新技术、新工艺进行挖潜改造，淘汰落后陈旧工艺设备，逐步达到优质高产，低耗高效。如：炼油加工的催化裂化过程反应-再生装置，由最初的等高并列改造为高低并列，然后再实现同轴式操作，使装置占地面积越来越少，安全操作因素越来越高，轻油收率越来越高；原油常减压蒸馏装置换热流程不断进行优化改造(包括采用窄点设计法)使能耗越来越低；乙烯裂解炉炉管技术不断进步，逐步实现了高温、短停留时间、低烃分压的工艺要求等。

2. 科研方面

化工装置得以建成的基础是科研工作。课题确定后，从实验室小试到中试的工程研究过程中首先要进行基础设计和概念设计，然后才能进行工业放大，其步骤如下：



3. 施工建设

从图纸到装置建成过程中，设计部门派出工程设计人员作为施工代表与施工单位联系，主要职责是解释图纸、解决施工中出现的问题，如材料代用、因地制宜改造等。

二、化工工程设计专业范围及特点

1. 专业范围

化工工程项目从设计到施工投产涉及许多专业领域，包括厂址选择、总图、工艺、非工艺设计、技术经济等，具体如下表：

专业名称	数字代号	字符代码	备 注
环境保护	10	EP	“三废”治理
技术经济	20	TE	指标有：总投资、成本、投资回收率等
概、预算	21	BE	初步设计和施工图阶段对工程的造价等
总图运输	30	GL	厂区布置、产品、人员流动、管线综合

续表

专业名称	数字代号	字符代码	备 注
工 艺	40	PT	生产方法、流程组织、工艺三算等
系 统	41	PS	输入、处理、输出三要求
管 道	42	PP	管道布置、保温等
模 型	43	MS	施工图阶段由工艺出
自 控	50	IC	操作条件 T 、 P 、 L 、 F 等
土 建	60	CE	厂房、设备基础
建筑结构安装	62	SS	建、构筑物
采暖通风	70	HV	冬季集中采暖, 排除有害气体、粉尘、余热
给排水	82	WS	工业上、下水, 生活用水, 污水, 地下水
电 力	90	EE	全厂高低压供电系统: 避雷、照明、防静电
电 讯	91	CN	电话系统(生产调度)
热 工	100	TE	锅炉动力、蒸汽
机 修	110	MR	全厂正常维修, 装置检修
电 算	120	CA	电子计算机, 集散系统
设 备	130	ME	制作安装, 压力容器制作许可证
起重运输	131	HC	吊车等
工业炉	133	IF	加热炉、裂解炉、工艺炉等

2. 化工工程设计的特点

(1) 各专业集体设计, 其中工艺起组织汇总、龙头作用, 最早开工, 最迟完成, 必须对各专业进行技术交底, 提出工艺要求、条件。

(2) 以图纸、说明书和表格作为最终设计成果, 作为各专业交流、施工建设的依据。

(3) 不断创新, 及时采用新技术、新信息。

三、化工工程设计类型及校审制度

1. 设计种类

我国化工工程设计分为四种:

(1) 通用设计 即定型设计, 为全国或某一地区推广使用的编制, 目的是加快设计进度, 节省设计费用。如大型合成氨装置、原油常减压蒸馏装置、催化裂化装置、乙烯裂解装置等均有定型设计图纸。

(2) 因地制宜设计 对通用设计作因地制宜的改进或补充。

(3) 工程设计 在没有通用设计的情况下新编设计, 一般精细化工产品的设计属此类。

(4) 扩建设计 即技改设计。对工艺过程的某一部分或几部分进行改造或扩大, 如扬子公司乙烯裂解部分从 30 万吨/年到 45 万吨/年, 再到 60 万吨/年。

2. 石油化工行业工程设计资格分级标准[石化总公司 (92)化基设字第 108 号]

(1) 总则

根据建设部建设(1991)504 号文《工程勘察和工程设计单位资格管理办法》通知的精神, 制定本分级标准。

石油化工行业工程设计范围包括炼油和石油化工两部分。

石油化工行业工程设计单位资格分为甲、乙、丙、丁四级。

(2) 石油化工行业大、中、小型设计项目的划分条件

设计项目	计算单位	大 型	中 型	小 型
1. 炼油厂	年加工量, 万吨	250 以上(含 250)	100 ~ 250(含 100), 除重油或两段催化裂化、连续重整和加氢裂化以外的炼油装置以及系统工程	100 以下, 除催化裂化、连续重整、加氢裂化等装置以外的炼油装置以及系统工程或 250 万吨炼油厂部分系统工程
2. 乙烯	年产量, 万吨	15 以下(含 15)	4 ~ 15(含 4)	4 以下
3. 合成氨	年产量, 万吨	15 以上	4 ~ 15(含 15)	4 以下
4. 合成橡胶	年产量, 万吨	4 以上	4 以下(含 4)	1 以下(含 1)
5. 合成树脂及塑料	年产量, 万吨	4 以上(含 4)	1 ~ 4(含 1)	1 以下
6. 化纤单体	年产量, 万吨	4 以上	4 以下(含 4)	1 以下(含 1)
7. 石化联合企业	投资, 亿元	2 以上	2 以下(含 2)	
8. 引进技术项目	外汇额度, 万美元	3000 以上	3000 以下(含 3000)	1000 以下(含 1000)
9. 民用煤气	日产量, 万立方米	100 以上	100 以下(含 100)	50 以下(含 50)
10. 新技术开发项目	投资, 万元	4000 以上	4000 以下(含 4000)	1000 以下(含 1000) 的本企业开发的项目
11. 其他石油化工项目	投资, 万元	20000 以上(含 20000)	20000 以下	8000 以下(含 8000)

注: ① 如果用技术成熟的炼油装置设计, 或承担因地制宜设计者, 可以超越一级承担设计任务。

② 乙级设计单位承担的中型项目若投资超过 20000 万元以上, 丙级设计单位承担的小型项目若投资超过 8000 万元以上, 必须报总公司主管部门核批、存档。

③ 技术改造、技措项目也按此表划分。

④ 本表所列设计项目仅为典型代表, 适用于与其相近似的其他未列项目。

(3) 各级设计单位承担设计项目的油库工程规模规定

序号	设计项目	单 位	各级设计单位承担的工程设计规模			
			甲 级	乙 级	丙 级	丁 级
1	地上轻油库工程	万立方米	10 以上(含 10)	10 以下	5 以下	3 以下(含 3)
2	地上黏油库工程	万立方米	5 以上(含 5)	5 以下	3 以下(含 3)	
3	地下隐蔽油库工程	万立方米	10 以上(含 10)	10 以下	3 以下(含 3)	
4	水下、水封、盐岩油库工程	万立方米	4 以上(含 4)			
5	成品油输油管道工程	千米	100 以上(含 100)	100 以下	30 以下(含 30)	
6	罐体设计	万立方米	2 以上(含 2)	2 以下	1 以下	0.5 以下(含 0.5)
7	加油站设计	级	不 限	城市、专区、县	专区、县	县
8	油库专用设备设计		能 做	能 做		
9	消防设计(单罐容量)	万立方米	2 以上(含 2)	2 以下	1 以下	0.5 以下(含 0.5)

注: 表中甲级设计单位承担各类工程设计规模规定数以下规模的工程设计均能作。

3. 校审制度

我国化工设计校审分为四级, 即设计、校对、审核、批准。一般来说, 设计和校对人员属同一水平, 为工程师级; 审核人员水平较高, 应为高级工程师级, 一般是企业的总工程师。其中设计约占 60% 的份量, 审核约占 30% 的份量。

第一章 化工工程设计基本程序和内容

化工工程设计包括项目前期科研开发设计和工程放大设计两部分。

第一节 化工工程设计的开发工作

从 20 世纪 50 年代以来,开发工作一般仅注重实验室小试到中试之间的过程研究,以技术可行为目标,而经济因素考虑较少。而现代的开发工作以市场为目标,除保证技术先进可行外,特别注重工程项目的经济评价,使经济效益最大化。在小试到中试过程中,必须进行概念设计和基础设计,强调工程研究。

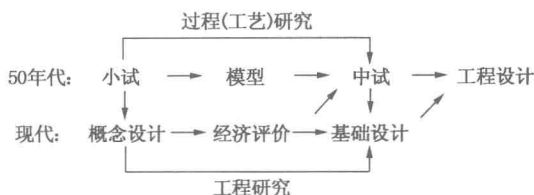


图 1-1 开发工作程序示意图

一、开发工作程序

开发工作程序见图 1-1。

二、开发工作内容

1. 小试工作

过程研究的第一环节是小试工艺试验研究。本环节的任务是：

(1) 从认识研究对象的特殊性着手,把握其本质和规律,构思反应器型式,考虑可能遇到的工程问题。

(2) 以转化率、选择性、催化剂寿命等简单、易于表征的指标来确定工艺条件框架。有些小试的最优工艺条件在设备放大时有明显改变(例如使用流化床的工艺过程),也有的变化不大,例如丙烯二聚生产 2-甲基-1-戊烯长达 2000m 的管式反应器。

(3) 提出设备设计与放大依据。通常是反应动力学,有时以传质速率为依据(例如丁烯氧化生产丁二烯的外扩散控制段),有时以流体流动规律为依据。总之,研究对象的特殊性决定了设计与放大的特殊性。如果设计与放大依据涉及文献中不能提供的传递规律,则应与大型冷模试验环节联合,共同完成。

由此看来,小试阶段的任务,主要是在科学方法论指导下由实验完成。剩余部分,要在化学工程理论与工程经验指导下通过理论思索加以完成。

2. 概念设计

概念设计为工程研究的一个环节,它是在应用研究进行到一定阶段后,按未来的工业生产装置规模所进行的假象设计。它的工作内容主要是根据研究提供的概念和数据,确定流程和工艺条件以及主要设备的形式和材料、三废处理措施等,最终得出基建投资和生产成本等主要技术经济指标。

目的是用小试结果对工程做预设计,促进小试的深化。

内容包括:

- (1) 前言;
- (2) 原料、产品、催化剂规格、名称;
- (3) 流程设计;
- (4) 能耗;

- (5) 设备表;
- (6) 生产控制, 仪表;
- (7) 消耗定额;
- (8) 安全、三废治理;
- (9) 投资、成本结算;
- (10) 定员;

(11) 对工艺流程放大技术的讨论及工业化存在的问题。如: 催化剂的寿命问题, 在实验室 2~3h 就能完成一个反应, 催化剂的寿命似乎能达到要求, 但要考虑与工厂长周期生产维修相吻合, 满足生产需要。

若概念设计在中试以后进行, 其内容主要还是确定流程和工艺条件, 但其目的则是对中试结果进行进一步的技术经济评价, 确定该项目工业化的可能性和需补充的内容。若结论是肯定的, 概念设计所确定的流程和工业条件可作为下一阶段设计工作的基础。

因此概念设计是设计与研究的早期结合, 一般工程经验与研究对象的特性相结合的一种好方式。通过概念设计, 可以及早暴露研究工作的方法与不足之处, 从而能及时解决问题, 缩短开发周期。

3. 中试工作

当某些开发工作不能采用数学模型法放大, 或者其中有若干研究课题在小试中进行, 一定要通过相当规模的装置才能取得数据或(和)经验才需要进行中试。

中试装置的主要任务是:

- (1) 验证基础研究得到的规律;
- (2) 考察从小试到中试的放大效应;
- (3) 研究一些由于各种因素没有条件在实验室进行研究的课题;
- (4) 进行新设备、新材料、新仪器、新控制方案的实验。

中试装置的设计应注意下列几点:

(1) 中试装置的规模要能满足各项实验任务的要求, 同时由于规模过小而引起设备、仪表或管子附件选型方面的困难应尽量小;

(2) 中试装置的地点应力求选在有同类生产装置的老厂内, 以节省中试的原料和辅助材料费用;

(3) 要求避免全流程试验, 根据试验内容建设必要的相应设施;

(4) 中试装置的流程和设备结构在形式上不一定要与工业装置完全相同, 但必须在实质上反映工业装置的特性和规律, 能得到基础设计所需的全部数据, 使得工业装置投产时不会出现没有预料到的问题。

中试装置设计的内容基本上和工程设计相同, 但由于规模小, 若施工安装力量较强, 可以不出管道、仪表、管架等安装图纸。

4. 基础设计

基础设计是一个完整的技术软件, 是整个技术开发阶段的研究成果。它的质量优劣, 体现了研究开发工作的水平。在一般情况下, 应在研究内容全部完成过程鉴定前进行。

目的是以中试结果为依据, 对反应中的关键部分作详细说明。

其内容包括:

- (1) 详细的三算;

- (2) 主要设备的条件;
- (3) 对仪表、电、土建的要求;
- (4) 经济分析;
- (5) 对工程设计的要求;
- (6) 操作规程;
- (7) 消耗定额;
- (8) 有关的技术资料, 物性数据等;
- (9) 安全技术与劳动保护说明。

基础设计的内容应包括准备建设的生产装置的一切技术要点, 合格的工程技术人员应根据基础设计完成一个能顺利投产, 达到一定产量和质量指标的生产装置。

第二节 实验设计优化的方法

单因素实验优选, 在单因素实验中, 只考虑对指标影响最大的因素, 其余因素不变。进行步骤为:

- (1) 确定评定结果好坏的方法和影响指标的主要因素。用数学语言抽象地说, 就是建立以 x 为影响因素的指标函数 $F(x)$;
- (2) 估计包含最优点的实验范围, 即 x 的取值范围为 $0 < x < b$ 或 $0 < x \leq b$;
- (3) 进行实验;
- (4) 实验结果分析;
- (5) 研究下一轮实验, 再分析结果。如此循环, 直至得到满意的结果;
- (6) 如果发现 3~5 个点对指标的改变并不大, 可认为在实验范围内该因素不是主要影响因素, 不必继续对该因素进行研究。

1. 平分法

使用平分法的基本要求是: 在实验范围内, 不仅指标函数 $F(x)$ 应是单调(单调升或降)的, 而且每做一次实验, 就能决定下一次实验的反向。平分法对实验点的安排原则是: 总在实验范围的中心处安排实验。如果第一次实验点安排在实验范围的重点 $x_1 = (a + b)/2$ 处。若第二次实验应在取 x 更小值处进行, 就将原中点 x_1 以右实验范围舍去, 将新的实验点安排在新的实验范围的中点 $x_2 = (x_1 + a)/2$ 处。如果第三次实验应取 x 更大值处进行, 就将 x_2 以左实验范围舍去。如此类推, 可以很快找到最佳点。在所有优选法中, 平分法达到目的是最快的。但是大多数化学反应无法满足其使用要求, 故常须采用其他的方法。

2. 黄金分割法

大多数化学反应的指标函数 $F(x)$ 为单值函数, 对于这种情况, 采取黄金分割法可尽快逼近目标。黄金分割法又称 0.618 法, 即在线段的比例中项值处安排实验点。设线段 ab 长为 1, 其比例中项 x 值可由定义式 $1:x = x:(1-x)$ 确定。解方程 $x^2 + x - 1 = 0$ 求得

$$x = 0.618$$

使用 0.618 法的具体做法是: 在 $x_1 = a + 0.618(b - a)$ 两处安排实验。比较实验结果, 如果第一轮实验说明 x_1 处优于 x_2 处, 就将 a 至 x_2 实验范围舍去, 将新的实验安排在新的实验范围 (x_2, b) 的 0.618 处, 即 $x_3 = x_2 + 0.618(b - x_2)$ 。如果第一轮实验结果是 x_2 处优于 x_1 处, 就将 x_1 到 b 实验范围舍去, 将新的实验点安排在 $(a$ 到 $x_1)$ 的 0.382 处, 其结果再与 x_2

处直接比较。如此类推，直至得到满意的结果。

3. 正交实验设计法

一般化学反应或化工过程的影响因素是多且复杂的，只考虑对指标影响最大的因素，往往远不能满足要求。正交设计法基于数理统计原理来科学地安排实验，并按一定规律分析处理实验结果，从而能较快找到最佳条件，且具有可判断诸多因素中何种因素是主要因素，以及判断因素之间的交互影响情况等优点。正交实验设计采用正交表安排实验，可用最少的实验次数最大限度地获得有关各因素对指标值的影响(主效应)及各种因素之间由于相互作用而引起指标的变化(交互效应)的许多信息。在正交实验中，各因素水平的安排因其正交表的搭配均衡性质具有均衡分散性的特征，因而，正交实验属于最优实验设计，通过正交实验确定的最佳条件，即使不是全面实验中的最佳条件，也往往是相当好的条件，由正交实验确定的最坏的条件，即使不是全面实验中的最坏条件，也往往是相当坏的条件。

以 A、B、C 三因素三水平的实验为例来说明正交实验设计法的简便和高效性。如果按单因素轮换法安排实验，每次只改变欲研究因素的水平，使其他因素水平固定，逐个研究各因素的影响，要进行 27 次实验才能完成。显然，以单因素轮换法安排实验，实际考察的因素水平仅局限于欲考察水平范围的局部区域，不能全面反映因素的整体情况，不仅难以考察因素水平之间的交互效应，而且当固定因素在不同初始水平时，得到的最优条件可能是不一致的。因此，用单因素轮换法进行全面考察，可以找到最佳的实验条件，但其工作量一般较大，且随因素及水平数的增加而迅速增加。而用正交实验设计法安排实验，可以选用 $L_9(3^4)$ 正交表，仅安排 9 次实验，就能获得基本上反映全面实验情况的有关信息。

用正交表安排实验的一般操作步骤，大致如下：确定指标或目标函数，选因素，选水平，绘制因素水平表；根据因素水平表，选择合适正交表，并正确安排实验方案；按实验方案进行实验获得实验指标，并对结果进行分析，或直观分析，或方差分析等等，确定最优条件。若最优条件不在正交表中或属于因素范围边界时，应补充实验加以证实。在因素水平较多时，可以做趋势图，分析是否还有更好的条件，如有，也应补充实验进行分析检验。下面举例说明其实施具体步骤，并讨论有关问题。

【例 1-1】 一化学反应需考察 4 个实验条件(因素)的影响：反应物 1(因素 A)和反应物 2(B)的投入量，反应温度 C、反应时间 D，并设各条件均为 2 个水平。请以正交实验设计安排实验并进行结果分析。

解：(1) 构造因素水平表。指标或目标函数取化学反应中生成物的产率，且产率越高指标越优，根据初步化学实验，选定了因素和水平，由此构造的因素水平表如表 1-1 所示。

表 1-1 因素水平表

项 目	A	B	C/℃	D/h
水平 1	0.2	12	35	2.5
水平 2	0.7	22	65	4.5

(2) 选择正交表，设计试验方案并试验。选择 $L_8(2^7)$ 正交表。将考察的 4 个因素按表头设计分别列在正交表的第 1, 2, 4, 7 列上，第 3, 5, 6 列留作进一步考察因素间的交互效应，实验方案与所得试验结果即指标(产率)见表 1-2。

表 1-2 $L_8(2^7)$ 正交试验方案及结果

因素	A	B	$A \times B$	C	$A \times C$	$B \times C$	D	结果
序号	1	2	3	4	5	6	7	产率
1	1	1	1	1	1	1	1	56.5
2	1	1	1	2	2	2	2	78.9
3	1	2	2	1	1	2	2	57.2
4	1	2	2	2	2	1	1	61.8
5	2	1	2	1	2	1	2	88.9
6	2	1	2	2	1	2	1	93.5
7	2	2	1	1	2	2	1	69.9
8	2	2	1	2	1	1	2	92.3
T_1	254.4	317.8	297.6	272.5	299.5	299.5	281.7	—
T_2	344.6	281.2	301.4	326.5	299.5	299.5	317.3	—
极差	90.2	-36.6	3.8	54.0	0	0	35.6	—

(3) 对试验结果进行直观分析, 确定最佳条件。先计算各个因素水平对指标的贡献。将各因素某个水平对应的产率相加即得该水平的效果(或对指标的贡献), 记为 T_i , 比如因素或条件 A 的 $T_1 = 254.4$, 即是因素 A 的水平 1 的四个结果和, 即 $56.5 + 78.9 + 57.2 + 61.8 = 254.4$; 又如 B 的第 2 个水平效果 T_2 的计算为 $57.2 + 61.8 + 69.9 + 92.3 = 281.2$, 等等。因为正交表的搭配均衡性, 计算的 T_i 就代表了第 i 个水平的效果, 因而通过比较各个 T_i 的大小就可确定该因素的最佳水平。本例中最佳条件水平为 $A_2B_1C_2D_2$, 对照表 1-2, 可知这个条件对应的各因素水平不在方案之中, 因此必须补做该最优条件下的实验以检查指标是否确实最优。经补做实验后, 得产物产率为 95.4%, 确实是最高的产率。如果补做实验后的结果并不是最优, 此时首先应该检查各次实验是否有误, 体系是否稳定等等, 因为正交实验结果分析的基础是每次实验都应当准确无误, 否则会产生误差。因而, 对于正交实验一般应做多次平行实验以保证结果分析的准确性和便于进行统计分析。

① 趋势分析。在因素水平较多的情况下, 可以作趋势图判断所选条件之外有无更好的条件。所谓趋势分析就是依据趋势图(因素水平为横坐标, 该因素水平对指标的贡献为纵坐标所作的二维图)的走向决定在实验域外是否可能存在更好的条件。

② 交互效应分析。正交表可以从有关实验(试验)设计册中查到。那些正交表的表头中清楚地标明了各因素列号的先后顺序以及因素交互效应的列号, 使用时一目了然。表 1-2 中 3, 5, 6 列提供了有关 A, B, C, D 四个因素间的交互效应的信息。比如第三列是 A 与 B 的交互效应列, 第 5 列是 A 与 C 的交互效应列, 而第 6 列是 B 和 C 的交互效应列。由 T_1 和 T_2 的结果分析可知, A 与 B 之间存在一定的交互效应(极差为 3.8), 而 B 与 C 及 A 与 C 不存在交互效应(极差为 0)。A 与 B 的交互效应可看成新因素($A \times B$)的 4 个水平, 即 (1, 1), (1, 2), (2, 1), (2, 2), 按前述方法算得各水平对指标的贡献为 135.4, 119.0, 182.4, 162.2。因而因素 A 与 B 的最好搭配应是 A_2B_1 。原分析为 $A_2B_1C_2D_2$ 是最佳条件, 这证明原分析结果是正确的。如果这种搭配在方案中不存在, 应再安排试验进行检验。

由上可知, 用正交实验设计安排试验, 虽只做了 8 次试验, 却获得了关于 4 个因素及其部分交互效应的丰富信息。正确的试验设计能以最优的方式从较少的试验中最大限度地获得需要的相关信息。

【例 1-2】 硝化部分的条件优化。

在邻二甲苯硝化的探索试验中发现，混酸的脱水值、酸和油的体积比、反应温度和反应时间等因素对产品的收率和异构体的分布均有较大的影响。根据实验条件，设计一个四因素三水平的正交实验方案，原始条件见表 1-3。

表 1-3 原始条件

因素水平	反应温度/℃	混酸的脱水值 <i>D. V. S.</i>	酸 - 油比 (相比) ϕ	反应时间/h
1	-5	2.65	0.85	2
2	5	2.85	1.05	3
3	15	3.05	1.25	4

上表中混酸的脱水值是硝化反应终了时，废酸中硫酸和水的计算质量之比，通常用符号 *D. V. S.* 表示。即： $D. V. S. = \text{废酸中硫酸的质量} / \text{废酸中水的质量}$ 。

当已知混酸组成和硝酸比时，脱水值的计算公式如下：

$$D. V. S. = S / [(100 - S - N) + 2N/7\phi]$$

式中 *S*——硫酸在混酸中质量分数，%；

N——硝酸在混酸中的质量分数，%；

ϕ ——硝酸和邻二甲苯的摩尔比。

当 $\phi = 1$ 时，上式可简化为

$$D. V. S. = S / (100 - S - 5N/7)$$

脱水值的大小表示混酸硝化能力的强弱。*D. V. S.* 值愈高，硝化能力愈强。每次实验均以 60g 纯的邻二甲苯为基准，邻二甲苯和硝酸的摩尔比确定为 1:1.05，按照不同的 *D. V. S.* 和不同的酸 - 油比（也称相比，是混酸的体积和邻二甲苯的体积之比）运用上述公式计算并套用 $L_9(3^4)$ 正交实验表得出的结果见表 1-4。

表 1-4 计算结果

列号 试验号	温度 <i>T</i> /℃	脱水值 <i>D. V. S.</i>	相比 ϕ	时间 <i>t</i> /h	HNO ₃ 含量/%	H ₂ SO ₄ 含量/%	H ₂ O 含量/%
1	-5	2.65	1.25	3	27.4	58.1	14.5
2	5	2.65	0.85	2	39.6	51.6	8.8
3	15	2.65	1.05	4	32.4	53.4	14.2
4	-5	2.85	1.05	2	32.2	56.7	11.1
5	5	2.85	1.25	4	27.2	59.4	13.4
6	15	2.85	0.85	3	39.4	52.8	7.8
7	-5	3.05	0.85	4	39.1	53.9	7.0
8	5	3.05	1.05	3	32.0	57.8	10.2
9	15	3.05	1.25	2	27.0	60.5	12.5

九次试验得到的产品经气相色谱分析并校正后获得的数据见表 1-5。

由以上结果可以看出，对产量来讲，影响因素的主次关系为： $B > C > D$ ，说明脱水值和相比对产率的影响较大，反应时间和反应温度对产率影响较小。较优化的组合应为 $A_2B_3C_3D_3$ 。而对于选择性来讲，是反应温度和相比影响较大，脱水值和反应时间影响较小。较优化的组合应为 $A_1B_3C_3D_2$ 。

表 1-5 产品数据

列号 试验号	A	B	C	D	产量	2,3-二甲基硝基苯所占的比例			
1	1	1	3	2	46.93	61.3			
2	2	1	1	1	46.20	52.7			
3	3	1	2	3	46.15	51.0			
4	1	2	2	1	47.95	58.7			
5	2	2	3	3	57.55	56.8			
6	3	2	1	2	39.91	49.4			
7	1	3	1	3	55.45	57.9			
8	2	3	2	2	55.06	55.1			
9	3	3	3	1	57.09	54.6			
	A	B	C	D		A	B	C	D
k_1	150.33	139.28	141.56	151.24	—	177.9	165	160	166
k_2	158.81	145.41	149.16	142.29	—	164.6	165	164.8	168.6
k_3	143.15	167.60	161.57	159.15	—	155	167.6	172.7	165.7
K_1	50.11	46.43	47.19	50.41	—	59.3	55	53.3	55.3
K_2	52.94	48.47	49.72	47.43	—	54.8	55	54.9	56.2
K_3	47.72	55.87	53.86	53.05	—	51.7	55.9	57.6	55.2
R	5.22	9.44	6.67	5.62	—	7.6	0.9	4.3	1.0

我们按照新组合 $A_2B_3C_3D_3$ 进行了实验,得到了高达 73.5g 的产品,产率达到 86%,产品中 2,3-二甲基硝基苯所占的比例也达到了 58.8%,说明优选出的条件是较好的。

4. STATISTICA 软件在正交实验设计及数据处理上的应用

STATISTICA 软件可以进行各种正交实验的设计与分析,并对实验结果进行分析,从较少的实验数据中,获得较多的信息。STATISTICA 8.0 中的 Industrial Statistica & Six Sigma 中 Experimental Design 模块的主要功能模块如下:

2 * * (K-p) standard designs (Box, Hunter & Hunter).	两水平析因标准设计
2-level screening (Plackett-Burman) designs.	两水平筛选因素设计
2 * * (K-p) max unconfounded or min aberration designs.	两水平最大混区或最小偏差设计
3 * * (K-p) and Box-Behnken designs.	三水平和 Box-Behnken 设计
Mixed 2 and 3 level designs.	混合二水平和三水平设计
Central composite, non-factorial, surface designs.	中心复合、非析因和响应面设计
Latin squares, Greco-Latin squares.	拉丁方、Greco-拉丁方
Taguchi robust design experiments (orthogonal arrays).	田口稳健实验设计(正交数组)
Mixture designs and triangular surfaces.	混合设计和三角面
Designs for constrained surfaces and mixtures.	约束面和混合物设计
D-and A-(T-) optimal algorithmic designs.	D-和 A-(T-) 优化算法设计

【例 1-3】 印染过程着色剂生产的情况,由于过程的化学机理不是完全清楚,需进行影响因素的试验研究。研究的响应是产品的色泽(HUE)和亮度(BRIGHTNESS),考虑过程的主要影响因素为聚硫化物(POLYSULF)、回流(REFLUX)、摩尔数(MOLES)、时间(TIME)、溶剂(SOLVENT)和温度(TEMPERATURE)6个。