

化学工艺 研究方法概论

魏同成/编著

中国石化出版社

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

化学工艺研究方法概论

魏同成 编著

中国石化出版社

内 容 简 介

本书主要介绍在化学工艺研究领域进行科学研究所必需的基本方法。较系统地介绍了从试验室到生产各个重要的科学研究阶段：文献的查阅、收集和加工，实验设计和规划，实验的实施，实验结果的数学加工，过程的模拟和优化，科研报告的编写，以及科研项目的评价等。书中附有较多详实的例题供读者参考。

本书可供从事化学工艺研究的各类人员，如生产部门的科技人员、高等院校和科研单位的师生、研究人员、科技管理人员以及有志从事化工科研开发的人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

化学工艺研究方法概论/魏同成编著

—北京：中国石化出版社，2006

ISBN 7-80164-998-2

I. 化… II. 魏… III. 化工过程-工艺学-研究方法
IV. TQ02-3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 022386 号

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.cn

北京精美实华图文制作中心排版

北京大地印刷厂印刷

全国各地新华书店经销

*

850×1168 毫米 32 开本 14.25 印张 376 千字

2006 年 5 月第 1 版 2006 年 5 月第 1 次印刷

定价：36.00 元

前 言

十六大报告中明确提出：“走新型工业化道路，必须发挥科学技术作为第一生产力的重要作用。注重依靠科技进步和提高劳动者素质，改善经济增长质量和效益。加强基础研究和高新技术研究，推进关键技术创新和系统集成，实现技术跨越式发展。鼓励科技创新，在关键领域和若干科技发展前沿掌握核心技术和拥有一批自主知识产权。”同时还指出：“创新是一个民族进步的灵魂，是一个国家兴旺发达的不竭动力……通过理论创新推动制度创新、科技创新、文化创新以及其他各方面的创新……”这一切都要求由高素质的人才来完成。就目前我国现状而言，在专业科研人员的教育和培养方面，还存在一定的差距。特别是在培养课程的设置上还缺乏系统性，使得刚刚入门的年青学子面对课题处于不知如何入手的尴尬境地。而我国化学工业的飞速发展，又急需大量的科研人才。为适应我国化学工业发展的需要及化学科研人员培养的需要，作者结合自身多年的科研经历，参考有关资料编著本书以飨读者。

由于编著者水平所限，错误之处，诚请专家及同行予以指正。

编者

目 录

第一章 化学工艺研究的方向	(1)
第二章 科研工作的准备与规划	(3)
第一节 科学研究的基本形式与特征	(3)
第二节 科学研究的准备	(4)
一、科研工作的基本阶段	(4)
二、化学工艺设计文件的准备	(7)
三、研究 - 生产循环的典型结构	(8)
第三节 化学反应工程与中试放大技术	(10)
一、化学工艺发展工作的重要性	(10)
二、研究发展工作的步骤	(11)
三、化学工艺研究与发展的周期	(14)
四、反应工程与技术开发的关系	(15)
五、化学工艺放大技术	(17)
第三章 科学情报简介	(22)
第一节 科学情报概述	(22)
第二节 化学与化学工艺领域中重要的情报来源	(23)
第三节 文摘情报	(25)
一、《中国化学化工文摘》	(25)
二、《美国化学文摘》	(28)
三、《苏联化学文摘》	(62)
第四节 快报情报	(69)
第五节 网络情报资源	(70)
一、网络信息资源的特点	(70)
二、Internet 上的化学化工资源搜索工具	(71)
三、Internet 上免费的化学化工资源	(75)

四、搜索引擎的通用检索方法·····	(80)
五、Internet 信息检索的基本步骤·····	(82)
第六节 专利情报简介·····	(83)
一、专利文献·····	(83)
二、专利的查寻·····	(83)
三、各国专利情况介绍·····	(90)
第七节 科技文献的加工方法·····	(116)
第八节 撰写文献资料总结·····	(118)
第四章 科研项目的评价 ·····	(120)
第一节 科学研究项目评价的目的·····	(120)
一、制造的产品水平·····	(120)
二、原材料·····	(121)
三、物料平衡与能量平衡·····	(122)
四、流程图的建立·····	(123)
五、工艺技术评价·····	(126)
第二节 研究项目的评价程序·····	(127)
一、市场研究·····	(127)
二、确定工艺方法·····	(127)
三、经济性评价·····	(128)
第三节 科研项目的投资估算·····	(128)
一、数据资料的准备·····	(128)
二、经济盈利评估的计算·····	(129)
第四节 评价结果分析·····	(165)
一、寻找成本的主要部分·····	(166)
二、科研项目改进的可能性·····	(167)
第五章 实验研究的实施 ·····	(168)
第一节 实验工作概述·····	(168)
第二节 实验装置的设计与研究·····	(169)
一、对实验装置的基本要求·····	(169)
二、实验装置的分类·····	(170)

三、实验装置的工艺文件·····	(172)
第三节 实验研究的组织与实施·····	(172)
一、实验的准备工作·····	(172)
二、单因素实验的实施·····	(173)
第四节 实验研究实例·····	(174)
一、催化过程的动力学研究·····	(174)
二、吸收过程的研究·····	(177)
三、过滤过程的研究·····	(183)
第六章 化学与化工工艺研究中的试验设计·····	(189)
第一节 单因素实验结果的数学加工·····	(189)
一、确定实验误差·····	(189)
二、最小二乘法·····	(203)
三、相关分析·····	(208)
四、实验重复性的检验·····	(211)
第二节 化学工艺过程的模型化·····	(213)
第三节 寻找优化条件时实验的设计·····	(215)
一、分析原始情报信息·····	(217)
二、以一级多项式描述响应表面·····	(219)
第四节 寻找优化区域的方法·····	(230)
一、快速登高法·····	(230)
二、单纯形法·····	(234)
第五节 优化区域的描述·····	(239)
一、组合试验设计·····	(239)
二、二阶旋转设计·····	(242)
第六节 过程数学模型的分析·····	(259)
一、回归方程的标准变换·····	(259)
二、响应表面的研究·····	(261)
第七节 实验设计法的应用实例·····	(263)
一、分析原始情报·····	(263)
二、一阶多项式响应表面的描述·····	(264)

三、寻找优化区域·····	(266)
四、优化区域的描述·····	(268)
五、回归方程的标准变换·····	(271)
六、研究响应表面并确定过程的优化状态·····	(272)
第七章 均匀设计及其在化学工艺研究中的应用·····	(273)
第一节 均匀设计简介·····	(273)
一、考虑各因素水平间的所有组合的全面试验·····	(273)
二、单因素试验·····	(273)
三、正交设计·····	(274)
四、均匀设计·····	(274)
第二节 均匀设计表的构建·····	(275)
第三节 均匀设计使用表及混合水平均匀设计表·····	(279)
一、均匀设计使用表·····	(279)
二、混合水平均匀设计表·····	(280)
第四节 如何选择合适的均匀设计表来安排试验方案·····	(282)
第五节 应用均匀设计表安排试验方案的注意事项·····	(284)
第六节 均匀设计应用实例·····	(286)
第七节 含有定性因素试验的均匀设计·····	(293)
第八章 正交设计在化学工艺研究中的应用·····	(297)
第一节 正交试验的统计模型和数据分析·····	(297)
第二节 正交表的设计与数据的统计分析·····	(306)
一、单因素试验的统计分析·····	(307)
二、各水平重复试验次数不同的统计分析·····	(310)
三、交互作用与表头设计·····	(311)
第三节 重复试验和重复取样的误差分析与检验·····	(324)
第四节 正交表的扩展使用·····	(327)
一、正交表的并列·····	(327)
二、拟水平法·····	(332)
三、组合法·····	(334)
四、拟因素法·····	(337)

五、部分追加法·····	(340)
第九章 化学工艺研究中各种试验设计方法的比较·····	(347)
第十章 科研文章的撰写·····	(352)
第一节 科研报告的编写·····	(352)
第二节 科技论文和摘要的撰写要求·····	(355)
一、科技论文·····	(355)
二、论文摘要·····	(360)
附 录·····	(363)
附录 1 均匀设计表和正交设计表·····	(363)
附录 2 均匀设计表及其使用表(方开泰)·····	(404)
附录 3 混合水平的均匀设计表(方开泰)·····	(414)
附录 4 随机数表·····	(427)
附录 5 F 检验的临界值(F_α)表·····	(430)
附录 6 检验相关系数 $\rho=0$ 的临界值(r_α)表·····	(441)
附录 7 正态分布的双侧分位数(U_α)表·····	(442)
附录 8 相关数表·····	(443)
参考文献·····	(445)

第一章 化学工艺研究的方向

无须置疑，化学工艺研究工作应符合化学工艺科技进步的基本方向^[1]。然而在化学工业中，科技进步存在着各种不同的方向，可分为：合成新产品及扩展生产产品的种类；扩大联合装置及扩大生产工艺线；扩大单个装置和设备的生产能力；开发和采用新的工艺过程和完善生产过程；开发和采用新的工艺方法和设备来有效地保护环境以及废弃物料的无害利用与开发；采用自动系统来控制工艺过程、生产组织及企业管理等。这些科技进步方向是相互联系而又相互制约的。解决联合装置大规模合并扩展问题在很多情况下是与生产工艺过程的变化相联系，而有效地利用这种联合装置，只能在操作自动系统安全控制的工作条件下完成。

(1) 合成新产品 在化学工业中开发新型产品的过程是不断进行的，随着生产进步及市场扩展的需要，新型产品不断涌现。不仅国内如此，发达国家化工新品种的问世更是日新月异。

(2) 独立装置、单个设备、工艺线及联合装置的扩展 近年来，科技进步在这一方面取得了长足的发展。在大吨位产品的生产中，更显得尤为突出。由于规模经济的要求，使得各类在市场上取得认同的产品，其生产规模趋向大型化与联合化。实现联合装置扩展和生产工艺线的扩大，可依靠最小的投资、较低的操作费用、较高的生产效率获得产品产量的极大提高。最后必然导致操作工人工作时间的重新调配，增加在自动控制过程中的劳动分配。生产组织的集中的技术经济水平的提高是技术进步的研究方向。

(3) 新的工艺过程的开发和生产方法的改进 这一问题的研究方向主要包括：开发和实行连续生产流程；扩大原料基础；改

善现有原料的利用程度；极大地提高生产能力、降低操作费用；经济地解决环境保护问题；提高自动化水平、改善劳动条件等。

(4) 工艺过程运行、生产的组织与调度、企业经营与管理控制的自动化 在开发与实施自动化系统时，除了控制领域的专家之外，还需利用大量的电子计算机。而在化学工艺过程自动化过程中，化学家与工艺工程师要参与其中。在现代化学生产的特殊条件下(高温、高压和对产品质量较高的要求以及大容量生产能力的机组等)，没有安全可靠的自动控制系统，实施正常的工艺状态是不可能的。现代的自动化系统(DCS)可以顺利完成诸如收集与加工有关企业生产与经营活动的状态与运行的情报；控制产品数量；计算单位成本、盈利指标、生产计划以及综合管理生产材料及财政资金等工作。

(5) 开发和实施安全处理工业废弃物的工艺过程 防止工业废弃物对环境的污染是企业现代化生产的基本要求之一。研究开发和实施新工艺过程，以便合理地综合利用原料，创造无废弃物和内循环的生产方式。由此看来污水及尘气排出物的高效净化和废弃物的综合利用也是化学工艺研究的重要方向之一。研究此类问题是与装置规模增长和化学生产集中水平的提高，原料和能源资源要求的增加相联系的。

从化学工艺科技进步基本方向的不完全统计就可以看出，在这些科学与技术领域中，科研活动有着非常广阔的领地，这绝非偶然。在美国，化学领域拥有大量的科学家，就其专业而言，可有下列的分布情况：化学 31%、陆地与海洋科学 8%、大气科学 2%、物理学 11%、数学 8%、生物科学 16%、心理学 8%、计算机 2%、农业 4%、统计学 1%、经济学 4%、社会学 2%、政治 1%、人类学 1%、语言学 1%。由此不难看出化学科学所涉足的领域是非常广泛的。

第二章 科研工作的准备与规划

第一节 科学研究的基本形式与特征

科学调查和实验设计工作统称为“科学研究”。这是一个很广泛的概念，概括了以新的理论原理形式创建新的工艺形式，从思想认识到其具体化的整个过程。大体上科学研究可分成三种基本形式：理论、探索和应用。

科学研究的过程可以用如下流程表示： $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$ 。其中A——理论研究阶段；B——探索试验阶段；C——应用研究阶段；D——实验和设计开发阶段。按每个阶段从时间与经费的消耗水平来看大致比例为1:3:6:100。显然，实验设计开发和应用研究阶段所耗费的时间与精力，在科学研究中占有很大的比重。

科学研究是复杂的脑力劳动与体力劳动相结合的过程。就其研究本身而言，通常是由五个要素组成：主题、材料、工作方法、思想方法和哲学观点。

(1) 主题 就是要研究什么？解决什么问题？这是科研的先决要素，它影响着其他要素的确定。因为只有主题明确之后，才能决定科研所需材料的范围和内容，以及采用何种方法和手段来收集这些材料。

(2) 材料 (俗称资料)就是研究者对于研究对象从各个不同角度所见到的片面事实、个别部分和表面现象，也就是人们认识客观的初级阶段所得到的感性材料。它主要来自研究者通过各种途径，运用各种手段对研究对象的观测、试验，但也有间接地来自别的科学工作者的观测、试验，或者直接或间接地来自生产实践的经验。这一要素是科学研究最主要的要素。

(3) 工作方法 指通过何种途径，采用何种方式，运用何种

手段，利用何种工具去获取材料，这都需要有适当的、正确的方法作为指导。否则，就会影响材料收集的准确性，甚至失去开展科研工作并取得成功的前提。

(4) 思想方法 在研究过程中，尤其是在理论分析阶段，思想方法是一个重要的要素。因为思想方法的正确与否、将会直接影响科研成果的水平。即使有十分丰富的材料，但思想方法不对头，就难以得出符合客观规律的结论。

(5) 哲学观点 研究者采用什么样的哲学观点来指导科研，这一问题贯穿于科研工作的全过程。特别是在收集资料、整理资料、理论分析等环节中，尤为明显。因为在这些阶段，其工作方法和思想方法在很大程度上都直接受哲学观点的支配。实践证明，科研中正确的哲学观点就是辩证唯物主义观点。

以上五个要素中，相互间既有差别，又有联系。通常而言，首要是选准主题。其次是在正确的哲学观点指引下，运用有效的工作方法和正确的思想方法，收集充分的材料，加以整理，综合分析，充分发挥各个要素的作用，才能做好科研工作。

明确五个要素的作用是科研工作的软件系统。这需要科研人员素质的不断提高与经验的不断积累。关键的问题是科研人员要有远见卓识，选题准确，选题的好坏是成功的关键。曾有人说：“良好的选题是成功之半”。由此可见，选题工作是何等的重要。

第二节 科学研究的准备

一、科研工作的基本阶段

科学研究是一项极为复杂的工作。科学研究的基本阶段大体如下。

(一) 确定研究任务

在此阶段研究者应当清楚地为自己作出问题的结论：研究什么？即要明确研究对象和确定具体的研究目的。

所谓研究对象(课题),可能是未知的,可能是抽象的,也可能是经验的。研究对象的提出是科学研究的主要内容之一。它可能是陈旧领域中的问题,也可能是新的科学思想。然而,科学的最大成就均是以新的思想为基础。

在为研究对象作出结论的准备阶段,要总结以前的理论假定,这里需要理论的推断。研究者不得不遵循直觉,而这种直觉(洞察力)并不是什么神秘的东西,而是广泛和深刻的理论认识,科学和工业生产要求的结果。可以认为研究的客体应满足如下原则:完整性和约束性、稳定性和再现性。

科学的对象不能是一次有效的,任何科学研究结果都应当能够重复再现,不仅在内部实验室,而且在其他的实验室中,由其他科学家也可以重复出现。

化学工艺中的研究客体,通常是化学工艺的典型过程——吸收、精馏、化学反应、过滤、萃取、吸附等。对于化学工艺的典型对象来说,要清楚在特定分类的设备中所进行的典型工艺过程。化学系统包含着特殊的化学工艺过程与设备,以及在其设备内所完成的工艺过程和对过程控制及监测的全部方法。

当研究的对象提出之后,必须清楚地说明研究目的,以决定如何寻找前所未知的结果。

对化学工艺研究来说,重点是研究化学或物理化学的基本化学工艺过程(如:化学反应动力学、反应机理、吸收过程的静力学等);或是确定进行化学工艺过程的最适宜状态与条件;以及被研究过程与已知过程的比较评价等。

(二) 现有情报的分析

研究者应根据课题的需要收集如下的情报资料:针对本课题的国内外专利研究资料;有关课题研究与生产现状的评述与综合性文献资料及生产实践资料;有关本课题研究适宜性的技术经济分析资料;有关本课题的国内外研究方法与分析检测方法方面的资料。关于本阶段工作的具体方法与内容将在后面的章节中详细叙述。

(三) 分析解决课题研究的方法与条件

在此阶段，主要是对理论的实质或工艺过程进行研究与分析；确认研究的方法；完成理论研究和确立解决特定任务的方法。

(四) 原始假定的理论分析和结论

科学研究的重要任务之一便是提出假定。诸多假定的研究是在研究者发现的时候，因所获得假定的新的事实，并没有贯注在现存的科学知识体系内，因此假定应以某种特定的形式作出结论，由此而创造出有关课题、现象推理的新条件，并不依赖于经验材料。

(五) 进行实验研究

在此阶段有如下工作要完成：研究实验装置的流程；研究实验方案选择的理论依据；进行理论计算；实验装置的设计和制造。此时进行实验工作的目的，在于校验和确定所采用的理论解，数学加工实验结果，讨论实验数据。

(六) 对原始假定的校验与修正

本阶段是在所获得事实的基础上，对研究工作的理论部分进行必要的改变。

(七) 研究所获事实的最终结论

在阶段是以总结工作结果为前提，写出科学研究总结报告，同时提出需要保护研究成果的发明专利申请。

(八) 工业放大与工业实施

即在工业上贯彻所取得的实验室研究成果阶段。本阶段要求研究者要参与设计，就是要参与解决按设计文件进行处理过程中阶发生的实际问题。在装置建设和掌握阶段进度上要进行直接监督，参与工业装置工艺规程的编写及对全体操作员工的培训，参与试车并了解和掌握所设计的整个工艺过程，并对其进行考查，总结并得出最终的结论。有关本阶段的详细研究方法将在下面的章节中再作详细论述。

二、化学工艺设计文件的准备

在研究与开发新工艺过程时，必须从工艺设计文件加工需要的角度出发，建立工作计划、确定研究次序与工作量。设计新工艺过程所涉及到的新生产过程所需的原始资料的组成与容量，有时不是一个实验室人员所能完成的，可能需要其他实验室，甚至整个研究院各专业机构的共同努力来完成。

设计新的化学生产装置的原始数据分类清单为：

- ① 有关新工艺过程的概述。
- ② 已完成的实验室研究工作鉴定资料。
- ③ 作为设计用基础原始数据的规定与说明。
- ④ 推荐的生产方法的技术经验依据。
- ⑤ 产品的市场前景和消费情况。
- ⑥ 专利申请手续说明。
- ⑦ 原料与辅助材料的基础和最终产物的技术特性及目的用途的评述。
- ⑧ 主要产物的应用范围，物理化学常数和原料、中间产物、副产物及最终产物的性质。
- ⑨ 工艺过程所遵循的反应历程及其物理化学原理。
- ⑩ 生产工艺的原则流程。
- ⑪ 未来工作所需的生产工艺参数和生产装置的物料平衡及能源动力平衡。
- ⑫ 副产物和生产可利用的废弃物的技术特性以及废物利用的方法和其应用的范围。
- ⑬ 工艺过程与设备的数学描述及数学模型的建立。
- ⑭ 用于计算、设计和选择的各主要工艺装置的数据和建筑结构的防护数据。
- ⑮ 生产过程自动化设计建议书。
- ⑯ 生产过程的分析检验方法与设备。
- ⑰ 三废处理方案：工业污染废水净化的工艺参数和方法、消除

废气危害的工艺参数与方法、消除有毒排放物的工艺参数和方法。

⑱ 技术安全、工业卫生及消防预防等方面的设施及编制相应的工作报告手册。

⑲ 有关所研究的生产工艺的参考文献。

⑳ 基于科研成果而用于设计的基础数据。其中要包括有易燃易爆的原料、中间产物及最终产物的清单表。

三、研究 - 生产循环的典型结构

在化学工业中建立新的工艺过程是主要的任务之一。对于整个研究 - 生产循环而言，社会、生产和实际的需求是扩展的基础。然而，所有新的生产仅在其技术经济指标达到或超过类似生产的设计值时才可获得效益。在化学工业中，进行研究 - 生产循环的典型流程和程序列于图 2-1 中。

研究 - 生产循环的特性在于特定时间和资金的消耗，其两者绝对值和其相互间的关系构成设计规划、资金供给和利用科研成果的基本系统。

与工业化生产相比较，一般应用研究的时间大约为 1~2 年；开发研究 1~2 年；工业设计 1~2 年；工程建设 2~3 年；熟练掌握技术 1~2 年；而整个研究 - 生产循环约为 6~11 年。在化学与石油化学工业中，上述的循环周期将会增至 15 年，可是由于近代工业放大技术的发展，上述年限有可能缩短。

在典型的研究 - 生产循环流程中，不包括基础研究阶段。虽然基础研究是根本，而且又处于循环之首，其所导致的长期性和资金消耗是与基础研究相关的，而针对新工艺的具体开发研究工作实际上是不可能的。因为首先基础研究的成果要应用到各个部门。其次这些成果不一定可以应用到技术开发阶段上，在生产中基础研究成果实施的可能性很小，平均为 5%~10%。