

中國工程院 院士文集

袁渭康文集

冶金工业出版社



中國工程院 院士文集

Collections from Members of the
Chinese Academy of Engineering

袁渭康文集

A Collection from Yuan Weikang

北 京
冶金工业出版社
2016

内 容 提 要

本文集收录了袁渭康院士已发表的部分论文,以近二三十年的为主。文集分为中文论著和英文论著两个部分。中文论著部分包括一些评述性的短文及研究论文。英文论著部分收录了他的部分主要研究成果,包括反应器工程、动力学与催化剂、超临界技术、以及一些研究的方法论问题。本书可供我国从事化学工程等研究的科技人员及高等院校相关专业的师生阅读。

图书在版编目(CIP)数据

袁渭康文集/袁渭康著. —北京:冶金工业出版社,
2016. 1
(中国工程院院士文集)
ISBN 978-7-5024-7092-0

I. ①袁… II. ①袁… III. ①化学工程—文集
IV. ①TQ02-53

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 293243 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京市东城区嵩祝院北巷 39 号 邮编 100009 电话 (010)64027926

网 址 www.cnmp. com. cn 电子信箱 yjchs@cnmp. com. cn

策 划 任静波 责任编辑 李 臻 美术编辑 彭子赫

版式设计 孙跃红 责任校对 王永欣 责任印制 牛晓波

ISBN 978-7-5024-7092-0

冶金工业出版社出版发行;各地新华书店经销;北京画中画印刷有限公司印刷

2016 年 1 月第 1 版,2016 年 1 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16;37.25 印张;4 彩页;909 千字;584 页

179.00 元

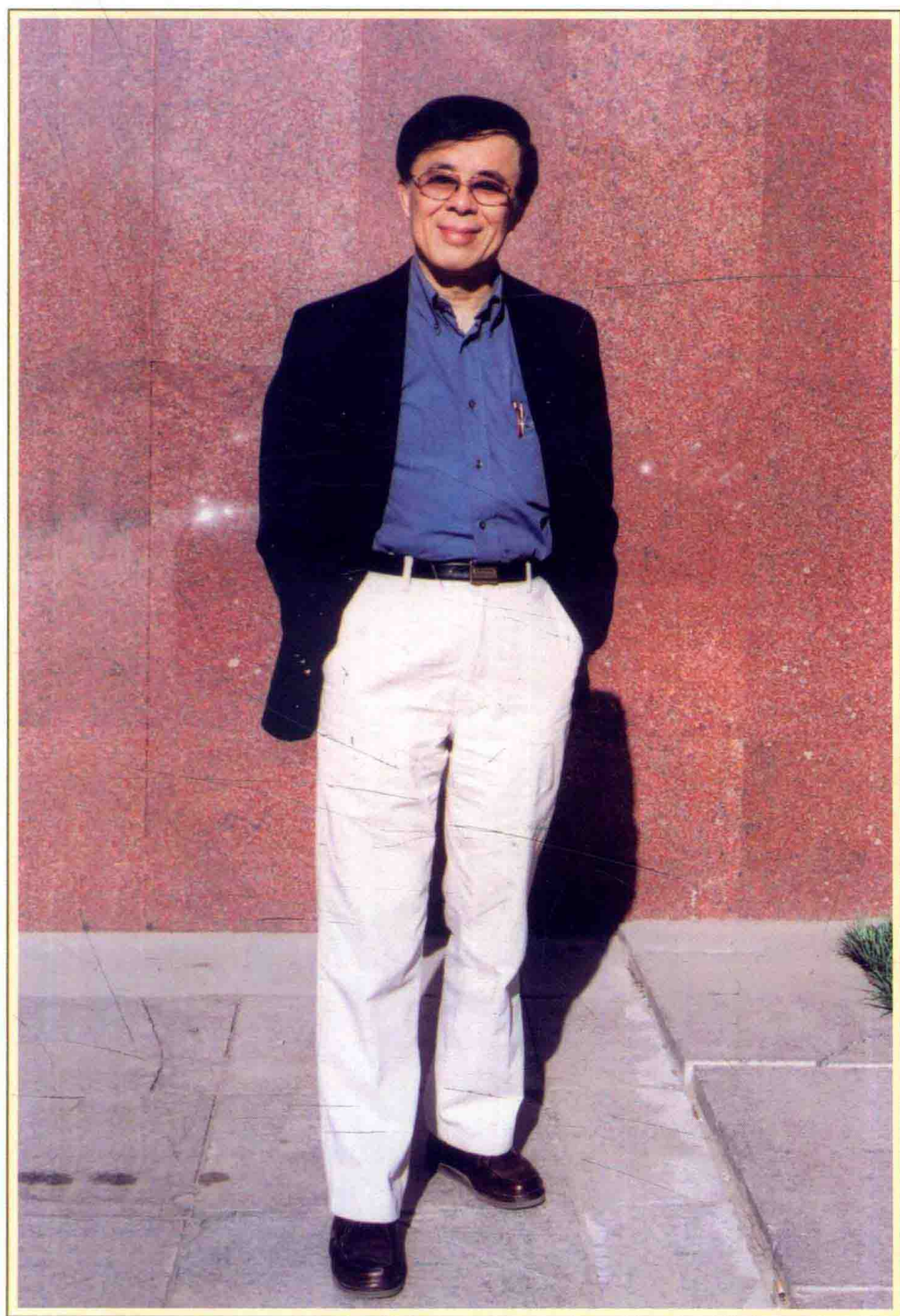
冶金工业出版社 投稿电话 (010)64027932 投稿信箱 tougao@cnmp. com. cn

冶金工业出版社营销中心 电话 (010)64044283 传真 (010)64027893

冶金书店 地址 北京市东四西大街 46 号(100010) 电话 (010)65289081(兼传

冶金工业出版社天猫旗舰店 yjgycbs. tmall. com

(本书如有印装质量问题,本社营销中心负责退换)



袁渭康 院士



袁渭康院士在麻省理工学院旁的查尔斯河边
(1979年, 美国波士顿)



袁渭康院士在麻省理工学院做客座研究时与导师韦潜光 (J.Wei) 教授合影
(1979年, 美国波士顿)



袁渭康院士主持第 17 届国际化学反应工程讨论会 (ISCRE-17)
(2002 年, 中国香港)



ISCRE-17 闭幕式上袁渭康院士把标志下届会议主办权的标牌交给
ISCRE-18 的主席——美国普渡大学的 Varma 教授
(2002 年, 中国香港)



袁渭康院士与洛林工大的 Tondeur 教授共同主持 2001 年的
中法化学工程联合实验室年会
(2001 年, 法国里昂)



袁渭康院士在第 7 次全球华人化工研讨会上与美国密歇根大学 Henry Wang
教授 (右) 和清华大学费维扬院士 (左) 愉快交谈
(2014 年, 中国香港)



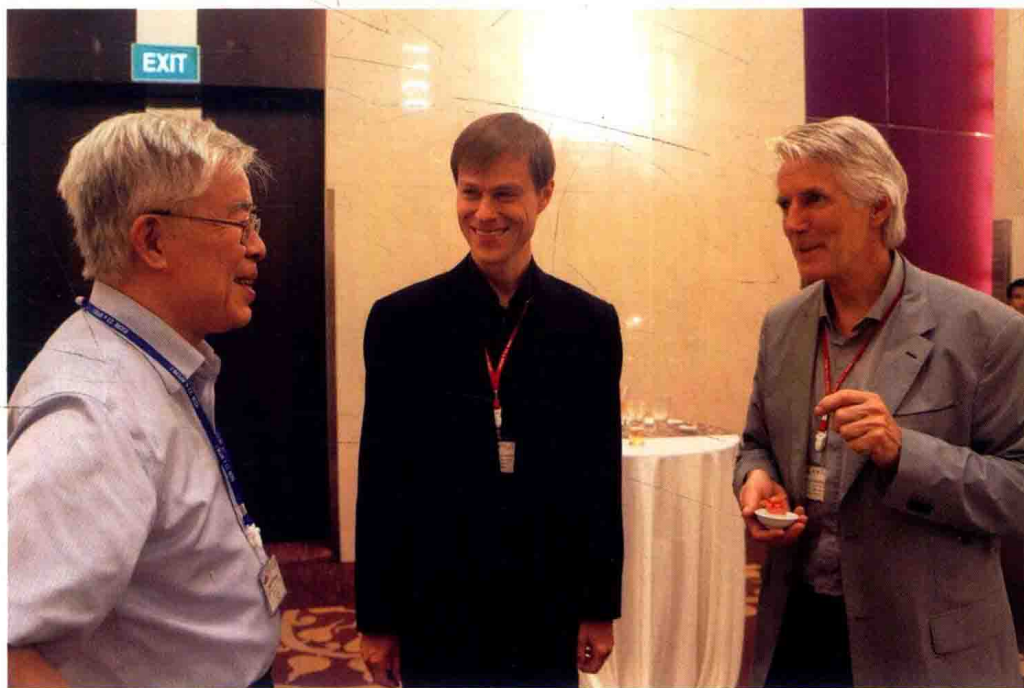
美国弗吉尼亚大学的 Hudson 教授来袁渭康院士家做客
(2003 年, 上海)



袁渭康院士陪同德国埃拉根大学 Hofmann 教授 (左) 参观实验室,
右立者为程振民教授
(20 世纪 90 年代, 上海)



袁渭康院士在 ISCRE-23 上与中国科学院李静海副院长（右）愉快交谈
（2014 年，泰国曼谷）



袁渭康院士在 ISCRE-23 上与荷兰德尔夫特大学 Kapteijn 教授（右）、
英国伦敦大学学院 Coppens 教授（中）愉快交谈
（2014 年，泰国曼谷）



袁渭康院士与妻子同摄于埃菲尔铁塔下
(1997年, 法国巴黎)



在第7次全球华人化工研讨会期间, 袁渭康院士为会议参加者在
《半生行悟》上签字留念
(2014年, 中国香港)



中国工程院 院士文集

《中国工程院院士文集》总序

2012年暮秋，中国工程院开始组织并陆续出版《中国工程院院士文集》系列丛书。《中国工程院院士文集》收录了院士的传略、学术论著、中外论文及其目录、讲话文稿与科普作品等。其中，既有院士们早年初涉工程科技领域的学术论文，亦有其成为学科领军人物后，学术观点日趋成熟的思想硕果。卷卷文集在手，众多院士数十载辛勤耕耘的学术人生跃然纸上，透过严谨的工程科技论文，院士笑谈宏论的生动形象历历在目。

中国工程院是中国工程科学技术界的最高荣誉性、咨询性学术机构，由院士组成，致力于促进工程科学技术事业的发展。作为工程科学技术方面的领军人物，院士们在各自的研究领域具有极高的学术造诣，为我国工程科技事业发展做出了重大的、创造性的成就和贡献。《中国工程院院士文集》既是院士们一生事业成果的凝炼，也是他们高尚人格情操的写照。工程院出版史上能够留下这样丰富深刻的一笔，余有荣焉。

我向来认为，为中国工程院院士们组织出版院士文集之意义，贵在“真、善、美”三字。他们脚踏实地，放眼未来，自朴实的工程技术升华至引领学术前沿的至高境界，此谓其“真”；他们热爱祖国，提携后进，具有坚定的理想信念和高尚的人格魅力，此谓其“善”；他们治学严谨，著作等身，求真务实，科学创新，此谓其“美”。《中国工程院院士文集》集真、善、美于一体，辩而不华，质而不俚，既有“居高声自远”之澹泊意蕴，又有“大济于苍生”之战略胸怀，斯人斯事，斯情斯志，令人阅后难忘。

读一本文集，犹如阅读一段院士的“攀登”高峰的人生。让我们翻开《中国工程院院士文集》，进入院士们的学术世界。愿后之览者，亦有感于斯文，体味院士们的学术历程。

徐匡迪

2012年7月



前言

本文集收录了我的一些论著，以近二三十年的为主。更早期的论著多散落各处，且历时已久，查找起来颇费时费事，更何况多半学术价值有限。近二三十年的论著可以通过互联网查找和下载，十分方便，因而成了本文集收录的重点。

文集分中文论著和英文论著两类。中文论著包括两个部分：一部分是与我从事的化学工程专业有关的一些评述性或综论性的小文，主要是经过多年的研究工作实践后形成的一些认识和观念，并没有什么学术性的价值；另一部分收集了近二三十年来发表的一些研究论文，主要是关于反应工程和催化剂工程的。英文论著部分收录了我的部分研究结果和研究论文。

我的专业是化学工程，或者说得更细一些，是化学工程的一个分支——化学反应工程。参加工作数十年来，我基本上没有离开过这个领域。就化学反应工程而言，反应器工程是它的主体部分，也是我研究工作的主要方向。

化学工程是一门传统学科，它的发展历史已逾百年。在这漫长的过程中，化学工程学科已形成了比较完整的理论体系和独特的研究方法，但是与其他的传统学科有类似之处，化学工程学科亦面临内涵更新和结构优化的问题。

— 化学反应工程从传统的意义上着眼于反应器的工程放大，也就是把实验室中小型试验的结果在大型反应器中实施，并且维持比较高的操作水平。这就是我们通常说的工程放大，也是我在 20 世纪八九十年代研究工作的主要内容。进入 21 世纪以来，化学工程的更新步伐有所加快。我们在 20 世纪末就在探索新的研究方向，确立了从化学品多层次结构的性能效应，即通常所说的“构效关系”，并导入化学工程方法和手段对化学品多层次结构的效应进行分析，以获取优化的性能。这实际上就是产品工程的核心。

从 20 世纪 90 年代起，国际学术界普遍认为化学工程的发展会逐步地从“过程”导向向“产品”导向过渡。所谓过程导向，是指人们把主要目标着眼于过程的放大与优化，而产品导向则是更多地注重产品的结构优化，并由

此实现性能优化。

我的研究工作试图与国际学术界的研究方向同步。从最初以过程导向的反应器工程为主，到后来触及从搜索催化剂多层次结构着手的催化剂性能优化，以及用化学工程手段，如超临界技术来优化大宗高分子聚合物的多层次结构，使之成为性能独特的“小众”产品。这也是与我国工业产业结构升级的迫切要求相一致的。我不能说与国际学术界同步得很好，我只是想说明我们是这么去做的。

从20世纪80年代起，我们的研究成果主要是在国际学术刊物上发表。我们也鼓励我们的博士生们在国际上发表他们的结果，让国际同行们来评价他们的工作。这就造成了我们的研究工作，凡是比较有价值的，大体都是在国际杂志发表的事实。因此在选择本文集的论著时，我不得不在数百篇英文论文中作一些选择。好在现代的信息技术使得收选工作比较方便。从我校图书馆系统中我找到了1999年以来发表的240篇论文，再通过其他渠道找到了一些更早期的，初步从中选了80篇。再经过两次取舍，最后选定了现在读者看到的32篇。在这些论文中，有一些我的贡献比较多，有一些的主要贡献是我的同事们和学生们，应该承认，我的贡献是很有限的。

在论著的收录过程中，回顾我已走过的岁月，总的来说缺乏重要的成果与贡献。虽说是在国际上这一领域最有声望的学术刊物上发表了多篇论文，但缺乏真正意义上的创新，因而只能说是业绩平平，但我要在此感谢我的同事们和学生们，他们长期和我一起工作，他们对我的帮助是我时刻铭记在心，永难忘怀的。他们中有与我同龄的同事，有后来成为我同事的当年的学生，也有现在尚在为他们的博士论文而努力的学生们。我的知识结构早已老化，我必须向年轻人虚心学习，事实上，我也确实在向他们学习的过程中获益良多。

袁渭康

华东理工大学

2015年7月



目 录

中文论著

综论

» 《化学工程与技术丛书》序	3
» 我们的化学工程：关于目标尺度微细化的讨论	6
» 化学工程：在演化中提升	11
» 初议超临界条件下的化学反应	16
» 《化学反应工程分析》前言——化学反应工程方法论讲座（第一讲）	24
» 《化学反应工程分析》后语——化学反应工程方法论讲座（第二讲）	28
» 工业反应过程的开发方法	38
» 过程的放大与优化	41

研究论文

» 新型苯加氢反应器的研究	47
» 气液向上或向下并流固定床动持液量测定	54
» 局部面积搜索法在高压相平衡中的应用	60
» 高压脉冲电晕放电等离子体降解废水中苯酚	67
» 脉冲电晕放电等离子体降解含4-氯酚废水	72
» 密闭体系中乳酸的固相缩聚	79
» 催化剂活性组成对纳米碳纤维产率和微结构的影响	84
» 钛硅分子筛/纳米碳纤维催化剂的制备及其液相分离性能	92
» 纳米炭纤维的表面润湿行为	96
» 超声波对甘氨酸溶析结晶过程的影响	105
» 构造理论在工程领域中的应用研究进展	114
» 有机酸杂质对乳酸锌初次成核速率的影响	127

英文论著

研究方法论

- » Targeting the Dominating-scale Structure of a Multiscale Complex System:
a Methodological Problem 137
- » Reactor Engineering: Science, Technology, and Art 155
- » An Algorithm for Simultaneous Chemical and Phase Equilibrium Calculation 164
- » Intensification of Phase Transition on Multiphase Reactions 180
- » Controlling Sandwich-structure of PET Microcellular Foams Using Coupling of
CO₂ Diffusion and Induced Crystallization 194

动力学与催化剂

- » Modeling Silver Catalyst Sintering and Epoxidation Selectivity
Evolution in Ethylene Oxidation 215
- » First-principles Calculations of C Diffusion through the Surface and
Subsurface of Ag/Ni(100) and Reconstructed Ag/Ni(100) 230
- » Catalytic Reduction of Hexaminecobalt(III) by Pitch-based
Spherical Activated Carbon(PBSAC) 250
- » Mechanistic Insight into Size-dependent Activity and Durability in Pt/CNT
Catalyzed Hydrolytic Dehydrogenation of Ammonia Borane 263
- » Kinetics of Gas-liquid Reaction between NO and Co(NH₃)₆²⁺ 272
- » DFT Studies of Dry Reforming of Methane on Ni Catalyst 283
- » First-Principles Study of C Adsorption and Diffusion on the Surfaces and
in the Subsurfaces of Nonreconstructed and Reconstructed Ni(100) 300
- » Diffusion-enhanced Hierarchically Macro-mesoporous Catalyst for
Selective Hydrogenation of Pyrolysis Gasoline 315

反应器工程

- » Dryout Phenomena in a Three-phase Fixed-bed Reactor 329
- » Influence of Hydrodynamic Parameters on Performance of a
Multiphase Fixed-bed Reactor under Phase Transition 340
- » Redistribution of Adsorbed VOCs in Activated Carbon
under Electrothermal Desorption 351
- » Process Flow Diagram of an Ammonia Plant as a Complex Network 362
- » Determination of Effectiveness Factor of a Partial Internal
Wetting Catalyst from Adsorption Measurement 372
- » Deep Removal of Sulfur and Aromatics from Diesel through Two-stage
Concurrently and Countercurrently Operated Fixed-bed Reactors 384
- » A Hybrid Neural Network-first Principles Model for Fixed-bed Reactor 395

>> Hydrodynamic Behavior of a Trickle Bed Reactor under “Forced” Pulsing Flow	402
>> Practical Studies of the Commercial Flow-reversed SO ₂ Converter	413
>> Nanomaterials Synthesized by Gas Combustion Flames: Morphology and Structure	424

超临界技术

>> Co-pyrolysis of Residual Oil and Polyethylene in Sub- and Supercritical Water	437
>> Experimental Measurements and Modeling of Solubility and Diffusivity of CO ₂ in Polypropylene/Micro- and Nanocalcium Carbonate Composites	452
>> Effect of Supercritical Carbon Dioxide-assisted Nano-scale Dispersion of Nucleating Agents on the Crystallization Behavior and Properties of Polypropylene	471
>> CO ₂ -induced Phase Transition of Isotactic Poly-1-butene with Form III upon Heating	489
>> CO ₂ -induced Polymorphous Phase Transition of Isotactic Poly-1-butene with Form III upon Annealing	506
>> Supercritical Carbon Dioxide-assisted Dispersion of Sodium Benzoate in Polypropylene and Crystallization Behavior of the Resulting Polypropylene	521
>> Controlling Crystal Phase Transition from Form II to I in Isotactic Poly-1-butene Using CO ₂	533
>> Effects of Crystal Structure on the Foaming of Isotactic Polypropylene Using Supercritical Carbon Dioxide as a Foaming Agent	552
>> Foaming of Linear Isotactic Polypropylene Based on its Non-isothermal Crystallization Behaviors under Compressed CO ₂	567

中文论著

- 综论
- 研究论文