

化工过程 数学模型理论

26

江苏科学技术出版社

〔美〕J·H·塞恩费尔德 L·拉皮德思著

化工过程数学模型理论

〔美〕 J.H. 塞恩费尔德 著
L. 拉皮德思
赵维彭 等译
胡宣达 校

江苏科学技术出版社

内 容 提 要

本书从阐述化工过程数学模型化的定义及数学模型分类入手,概述了过程数学模型化的理论基础,然后着重介绍了模型的参数估计和过程识别。

本书可供从事化学工程、化工设计、过程数学模型化、系统工程和应用数学等方面的工程技术人员以及高等院校有关专业师生参考。

参加本书翻译的有赵维彭、季再平、姚虎卿、王明隆、姚守信和郑英娥同志。

J. H. Seinfeld

L. Lapidus

*"Mathematical methods in chemical engineering Volume 3
process modeling, Estimation, and Identification"*

1974 by Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, N. J in U. S. A

化工过程数学模型理论

赵维彭 等译

胡宣达 校

出版: 江苏科学技术出版社

发行: 江苏省新华书店

印刷: 盐城地区印刷厂

开本787×1062毫米 1/16 印张 26.25 字数 665000

1981年6月第1版 1981年6月第1次印刷

印数1—00000册

书号: 15196·057

定价: 2.54元

责任编辑 黄元森

译 者 的 话

现代化工系统的规模日益扩大，过程也日益复杂。因此，实现过程模型化和设计最优化已成为迫切需要解决的问题。而过程的数学模型化又是过程开发、研究和设计的关键。

化工过程的数学模型，按其建立的方法，可以分为机理模型、经验模型和介于这两者之间的混合模型三类。但鉴于化学工程问题本身及其边界条件的复杂性，所以机理模型的建立和求解是不容易实现的。另一方面，由经验数据归纳而得出的经验模型，由于它既不能反映过程的本质，又不适合于作较大幅度的外推，故其应用价值受到限制。因此，根据化学工程学和热力学等基本知识，在对实际过程进行反复实验观测的基础上，按一定的先验信息，将各个变量、系数和参数推演成一个或一组经过适当简化的数学表达式，乃是建立过程数学模型的有效方法。

在如此建立的数学模型中，除通过现有实验技术能独立测定的那些系数外，尚有一部分物理意义不甚明显又无法通过实验确定的参数，就要根据某些实验数据对它们作出最优估计。

其次，在过程模型化中有时对同一个过程可能得出两个或两个以上“竞争”的模型，有待淘汰筛选，从中找出一个最确切的模型，此即所谓的过程识别。

目前，参数估计和过程识别以及与其有关的实验设计问题，已成为各种工程领域中非常重要和十分活跃的课题。因此，我们特将美国普林斯顿大学著名化工数学家L·Lapidus教授和加利福尼亚工学院J·H·Seinfeld教授合著的“Mathematical Methods in Chemical Engineering”丛书中的第三册“Process Modeling, Estimation and Identification”译出。本书从广泛的数学模型理论基础、系统的数学模型化方法一直到在化工过程中的具体应用，都作了较详细的介绍。

由于我们水平限制，译文中存在的问题和缺点，恳望同志们批评指正。

目 录

序言	
第一章 导论	2
第二章 过程模型的类型	5
§2.1 数学模型的基本分类	7
§2.2 模型的基本特征	8
§2.3 常微分方程	9
§2.4 差分方程	14
§2.5 微分—差分方程	19
§2.6 偏微分方程	19
§2.7 积分方程	22
§2.8 积分—微分方程	27
§2.9 提要	28
参考文献	29
习题	31
第三章 Laplace变换	37
§3.1 概述	37
§3.2 输入函数和传递函数	56
§3.3 Laplace变换与状态空间表示法的关系	70
§3.4 离散系统方程与z-变换	74
§3.5 数值反演法	82
§3.6 Laplace变换的应用示例	91
参考文献	111
习题	112
第四章 概率论基础	118
§4.1 随机变量的概念	118
§4.2 联合分布	121
§4.3 条件概率	123
§4.4 随机变量的特征	125
§4.5 矩母函数和特征函数	131
§4.6 常用的概率分布	137
§4.7 随机变量的变换	144
§4.8 中心极限定理	147
参考文献	152
习题	152
第五章 随机数学模型	156
§5.1 离散状态、离散时间随机过程	158
§5.2 离散状态、连续时间随机过程	168
§5.3 连续状态随机过程	178
§5.4 随机过程的特征	188
§5.5 随机动态系统的数学模型化	207
§5.6 确定性模型与随机模型的比较	221
参考文献	224
习题	225
第六章 停留时间分布理论	228
§6.1 基本定义	228
§6.2 停留时间分布的研究	231
§6.3 典型的确定性流动系统模型	234
§6.4 确定性停留时间分布模型的矩	242
§6.5 随机性流动系统模型	244
§6.6 具有内部返混的多级模型	247
§6.7 回流单元模型的矩及其与具有轴向混合系统的连续模型的比较	250
§6.8 化学反应器的随机性混合模型	255
参考文献	263
习题	263
第七章 参数估计	265
§7.1 参数估计的模型形式	267
§7.2 参数的矩估计	280
§7.3 确定性输入情形参数的传递函数估计	290
§7.4 随机性输入情形参数的传递函数估计	294
§7.5 代数模型中参数估计的算法	297
§7.6 常微分方程中参数估计的算法	300
§7.7 偏微分方程中参数估计的算法	313
参考文献	319
习题	321
第八章 参数估计的实验设计	329
§8.1 参数估计的精确度	329
§8.2 参数估计的实验设计	337
§8.3 模型鉴别的实验设计	347
参考文献	350
习题	351
第九章 过程识别：线性系统	353
§9.1 线性系统的进一步理论	353
§9.2 可控性、可观测性与最小实现	355
§9.3 Ho和Kalman的算法	366
§9.4 精确的线性系统实现	369
§9.5 次最优实现	377
§9.6 最小部分实现	378
§9.7 和其它识别方法的比较	383
§9.8 非线性系统的模型化	387
§9.9 具有轴向扩散的吸附塔	388
参考文献	389
习题	390
第十章 过程识别：非线性系统	392
§10.1 Wiener识别理论	392
§10.2 二水平输入的利用	400
§10.3 借助有限Volterra级数的识别	408
§10.4 辊式矿石粉碎磨中泥浆的流动	412
§10.5 提要	414
参考文献	414
习题	416

序 言

近几年来,化学工程学作为一门基础课程,就其现在所研究的系统的类型而言,确已发生了巨大的变革。这只要浏览一下近期所发行的任何一种化学工程学方面的杂志就可以证实这种变化。

虽然所研究的系统各不相同,但却普遍存在系统模型化这一共同课题,即要用一个可以描述此过程现象的数学模型来模拟从此系统中所观察到的输出。在这本书中,我们想就过程模型化中所涉及到的各种数学方法作一完整而系统的介绍。但鉴于这是数学方法方面的第一本书,所以我们打算着重强调方法的普遍性,而不拘泥于具体的应用。但由于结合实际系统进行应用会加深对方法的理解,故书中常附有可以阐明理论的具体示例。

作为过程模型化的数学方法基础,我们选择了两个重点领域:一、概率论和随机过程;二、参数估计和系统识别。它们代表两门非常重要的学科领域,但过去在对化学工程师的训练中却往往未予以重视。希望我们这本书能够填补这个空白。当然,对上述每一个领域都可以写一本专著,但我们却不准备对每一个领域作详细的介绍,而倾向于作为一学年的课程进行概括性的论述。我们认为,本书所提供的内容将足以使学生具备阅读有关这些领域的文献资料的能力。

有关本书的内容以及取材的主要动机,均概括在第一章中。书中的材料是为低年级的研究生,或者也可以说是为高年级的大学生准备的。所以我们假定读者已经读过传递现象和化学反应器分析等传统课程。虽然这一册书是作为一学年的课程编写的,但对于高年级的学生也可以安排成为一个学期或两个季度的课程,这只要把§5.5、§6.8以及第九和第十两章删去就可以了。第四和第五两章的内容,可以作为一般化学工程分析课的参考资料。而第七到第十章则可作为过程动态学或化学反应器分析课的补充教材。第九和第十两章的内容,比书中其它各章都稍许先进一些,而且对于对控制理论特别有兴趣的学生来讲是非常重要的材料。作者分别在加利福尼亚工学院和普林斯顿大学的部分讲课内容,就是编写本书的基础。

对于协助我们准备第九章内容的Robert Rossen博士,我们表示十分感谢。还要感谢加利福尼亚工学院和普林斯顿大学许多鼓舞我们的大学生,正是由于他们认真地配合,我们才能取得这项试验性工作的经验。

JOHN H. SEINFELD
LEON LAPIDUS

第一章 导 论

对观测到的实验结果作出合理而又理智的分析，长期以来就是摆在科学家和工程师面前的一项关键性的课题。多年来所建立起来的一整套的知识和方法，对分析各种物理系统的观测数据而言，具有普遍的适用性。而本书则要针对化学工程学这一具体领域，介绍一下有关这方面知识的基础。引导此书的基本问题是：我们如何才能从所给系统的数据中提取尽可能多的信息，以便使我们能对此系统建立起一个数学模型？

当然，这并不是一个新问题，而常常是了解某系统的机理的一个主导内容。其中通常包括：假设性模型的选取、模型与数据之间的匹配以及随之而来的对模型的评价和可能还要作的辅助实验等等，直到系统分析人员对此系统的了解感到满意为止。

过程的数学模型化，在化学工程专业课的课表中一般不是一门专设的课程，而只是从传递现象、化学动力学、反应器设计以及热力学等传统学科中引伸出来的内容。而我们的目的则是要通过这本书对过程模型化的基础及分析提出一套在课堂内外进行系统性教学的方法。同时还要结合一些有关的化工系统提出各种具体示例，以便进一步阐明书中所重视的那些计算方法。

本书的第一部分（从第二到第五章），将为过程模型化提供各种数学工具，当然还要讨论那些与数学模型化有关的全部应用数学的问题，但在内容的取舍上，我们只准备选用那些对有关问题直接适用的材料。所以，这本书前半部分的核心是**过程模型化**。对于所选用的过程模型的物理概念，不准备像对待数学概念那样进行详细而广泛的讨论，这由化学工程学中的传统课程去解决可能更加合适。

在第二章中，将讨论过程模型化问题的定义，并介绍各种常见模型的数学表达形式：微分方程、差分方程和积分方程等（以及它们的某些组合形式）。在这一章里，我们还要通过各种典型系统来说明常见的模型的形式。在某些情况下，还将提出明确的解答。所以，第二章的目的就是要对我们经常遇到的那些模型，定义其模型的类型。对于读过工程数学的学生而言，这些内容基本上是属于复习的目的。

由于Laplace变换在线性系统的分析中的重要性，所以在第三章中将专门介绍它的性质和应用。在求解数学物理的古典边值问题中虽然还有其它的变换方法，但Laplace变换仍然是最有用的方法。这主要是由于系统的传递函数的概念具有重要意义所致。Laplace变换一般适用于分析连续时变的动态系统。但也有许多重要问题是离散化的，故需运用差分方程进行数学描述。与Laplace变换相对应，对于离散系统则建立并运用了 z 变换。所以，第三章的目的就是要对学生介绍一些简单而适用的Laplace变换的处理方法，以使本书的内容达到完整。

如果说第二和第三两章的内容一般对大多数高年级的学生及有学位的工程师来讲是比较熟悉的话，那么第四和第五两章就有些不同了。作为本书前半部分的结束，第四和第五两章将专门讨论非确定性系统的分析问题。由于许多有实际意义的系统仅仅具有有限的信息及不确

定性，所以概率论和随机过程的理论很快就变成了培养工程师所不可缺少的内容。第四章将论述随机变量和概率分布的概念。在这一章里，将介绍在工程应用中经常遇到的几种概率分布，并强调了以矩来描述的概率分布的特征，因为它对本书的后半部分非常重要。

第五章乃是随机过程理论的导论。这部分内容在传统的工程课程中通常是未被包括进去的，但它在复杂系统的分析中却日益显得重要起来。其中，Markov性质的概念尤为重要。随机过程通常用于处理依赖于时间（或连续或离散）的随机变量的问题，而运用Markov性质则能够使我们在描述随机过程的时间性态时达到最大的简化。如果说第四章讨论的是随机变量的性质及其分布，那么第五章则要将随机变量作为时间的函数加以考虑。为了说明随机数学模型的某些特征，书中特别提出了两个比较详细的示例，一个是关于示踪剂在填充床层内的轴向扩散的问题，而另一个是关于在连续搅拌槽式反应器中的进料条件和传热速度受到随机扰动时的问题。在第五章中还汇集了许多在构造复杂的工程系统的确定性或随机性的数学模型时所需要的数学基础。

后面五章专门讨论估计和识别问题。在实际系统的数学模型化当中，最根本的问题是要从系统中收集各种观测数据。显然，实验设计的好坏对模型化的成功还是失败将造成很大的影响。有关这个问题将贯穿在整个后五章的内容之中。对于估计和识别，我们将根据下述定义予以区分。对于数学形式已知的模型，凡是通过对其中未知系数或参数的确定而使其模型与实验数据之间达到拟合的过程，就叫做参数估计。在对实验数据的分析中，这大约是一种最经常遇到的问题。这就是说，过程模型的形式可以根据物质守恒定律以及化学反应动力学等规律推导出来，而可调性参数却保持自由的状态。第六、七、八各章将专门讨论这类问题。

在许多很有意义的化工系统中，如固定床、流化床、分离单元以及湍流流动反应器中，均包含有流体的输运过程，藉以完成热量或质量的传递，或者是引起化学反应（或者是三者间的某种组合形式）。为了预测其传递速率或反应速度，就必须了解流体流过该系统时的性态。一个流体微元通过此类系统的输运过程，即可看作是一个随机过程，而一个流体微元在系统中的停留时间，就是一个连续的随机变量。对于上面提及的几种系统，现已提出各种分析示踪剂实验的方法，即所谓的**停留时间分布理论**。第六章即将介绍停留时间分布理论的基础。停留时间分布理论主要讨论模型的预测值与示踪剂的实验浓度之间的匹配问题，而示踪剂的实验浓度则是根据完全确定的输入形式获得的，如示踪剂的脉冲或者是阶跃函数。模型与停留时间数据之间的匹配过程，就是模型中的一系列参数的选定过程。由于停留时间分布乃是一种概率分布，所以凡能表征概率分布的各种经典方法都非常有用。将实验数据与模型的各阶矩进行匹配，乃是应用最广泛的程序之一。在第六章中，我们将要讨论混合模型的类型和停留时间的实验问题。参数估计的具体方法将是第七章的内容。

第七章将全面讨论参数估计问题。其主导的问题是：假设我们已经有了一个参数未知的过程模型和一组实验数据，那么在模型与数据的匹配中应当采用何种误差准则，并根据这个误差准则我们如何才能实际得出“最好”的参数值？不论模型是否是线性的，针对不同的模型将介绍不同的误差准则，并且将针对每一种准则提出确定这些参数值的详细算法。第七章主要是围绕两方面的问题开展讨论的。第一个是关于在填充物上有吸附作用的填充床反应器的分析；第二个是根据反应器的实验数据确定动力学参数。至于其它系统，如对于滴流床反应器和流化床也作了讨论。

在第六章和第七章中，我们均假设实验数据都是已有的。我们还指出过，实验设计得合理与否，对模型化的成功或失败将产生很大的影响。何谓成功与失败？这取决于我们的目

的。如果我们的目的是要精确地估计参数值，那么就希望我们所作的实验能使估计值越精确越好。另一方面，假若我们的目的是要从有争议的几个模型中评选出一个“最好”的模型，那就希望我们的数据能尽可能放大这些模型之间的差异。第八章就是从这两个目的出发来考虑实验设计的。但这并不是我们要对实验设计进行彻底的解决。相反，第八章只是第七章的一个补充，因为直到分析和使用实验设计之前，参数估计本身的价值是很小的。

在第六章到第八章中，均假定对系统的规律已充分了解，故只需要运用各种基本定律即可导出所需要的数学模型。这对于比较常见的系统来讲，如填充床和蒸馏塔等，此种假设一般是比较可靠的。但今日工程问题所涉及到的系统是如此广泛和（或）复杂，有时即便是假设性的数学模型也很难提出。例如在建立生物系统的模型时，像神经细胞的动态变化、视觉的过程以及有机组织在某种刺激作用下的响应等等，都会遇到这种情形。在这种情况下，我们则只能“举起双手”求助“黑匣子”方法解决问题。此时，我们实际上能作到的只不过是收集各种输入和输出（即刺激和响应）数据，并根据这些数据对系统建立某种经验模型，这就是对系统的识别。第九和第十两章就是关于系统识别的导论。

第九章所讨论的系统，均假设是线性的。因此，我们就要找出满足线性条件的系统表现（见第二章）。实际上，我们应当寻求变量尽可能少的系统表现，这就是所谓的**最小实现**。书中还介绍了根据输入和输出数据建立最小实现的算法。因此，“黑匣子”是针对线性系统建立的。

第十章所讨论的是一种最复杂的非线性系统。这里是以Volterra和Wiener的基本工作为基础，建立了一套根据输入和输出数据构造经验的非线性模型的方法。其中，有关正交多项式展开的概念以及特定类型的随机输入的应用都是非常重要的。

第二章 过程模型的类型

由于高速度大容量计算机的出现,过程的数学模型化也许已经成为工程系统中整体设计与分析的唯一最重要的方面。为了避免在变化的条件下观察过程的性态,就必须建立小规模模拟装置,以致须付出昂贵的费用与时间上的浪费。在这种情况下,数学模型化就能使下述一些问题得到迅速而彻底的解决,例如对过程未能使用的操作范围的外推,过程的可控性与稳定性,过程对于操作变量变化的灵敏性,以及过程的最优经济操作条件等。数学模型化就意味着以数学的关系式来描述实际系统的性态,使模型的因变量、独立变量及参数与实际系统中的物理量和化学量直接关联起来。

建立模型的基本问题是在对实际系统观察的基础上导出物理系统的一个结构式或一个方程式。我们希望不是凭直觉而是要用严密的、系统的数学程序来做到这一点。由此而得到的模型是这些观察结果的定量的综合,在某种意义上,它完全可以用来代替系统本身。因此,原来的物理系统在用一个数学表达式替代之后,就可以多方面地来探讨这个问题;对此也许要增加某些试验,以便肯定或否定模型的一些特性。

只有在非常特殊的情况下,数学模型才能表示过程的所有细节。一般地讲,我们最多只能指望得到最重要的和系统有关的可观察特性的描述,它将包括关键性操作变量与参数变化时的效果。模型化程序是个自适应程序,即由每一次试验中所得到的信息可改进下一次的试验。因为有理由认为物理过程可能存在多种数学描述,而且可能很多,但总是希望有唯一的模型。如果是这样,那末我们就需要从全部可能的模型中挑选出一个比其余都“好”的模型来。

过程模型化的一般方法系由下述几个步骤组成:

1.明确问题 一开始我们就面临以下的问题:

- (1) 我们希望用数学方式来表示的物理系统是个什么系统?
- (2) 被提出的模型的用途如何?
- (3) 我们将要寻求的数学描述其复杂性如何?
- (4) 我们具有哪一类可用以检验模型的数据?

显然,这些问题之间都是相互联系的。例如数学描述的复杂性与模型的最终用途以及有用数据的质量和数量都有密切关系。

2.过程数据的搜集 数据可以来自特定的实验,也可以取自系统的正常操作。如果要进行特定的实验,那末必然遇到以下两个问题:

- (1) 对哪些变量要施行扰动?
- (2) 应采用什么类型的扰动?

数学模型的形式与所要做的实验类型有密切的关系。例如脉冲、阶跃以及正弦曲线等输入形式的实验,常常是与特定类型的模型结合在一起的。

3.为了建立数学模型,须对系统的性质加以理论分析 我们可以将数学模型分类如下:

- (1) 直接根据物理与化学基本原理建立的模型;也就是说,我们已知系统基本的物理

与化学原理,并在此基础上可以写出模型方程。在多数情况下,这类模型的某些参数或系数可能未知,但它们一定能从系统的数据中估计出来。这种类型的模型与化学工程直接关联,故常被称为传递现象模型。有关大量具有化学工程意义的系统模型其实际推导的详细说明可参考下述著作: Bird等人〔9〕, Carslaw和Jaeger〔12〕, Crank〔14〕, Himmelblau和Bischoff〔25〕以及Richtmyer和Morton〔38〕的有关著作。

(2) 另外一种情形是所谓“黑匣子”模型。此时,对系统基本上不具有已知的先验信息。故模型的建立只能以实际系统的有效数据作为依据。

(3) 大多数实际系统处于这两种极端情况之间。我们通常只有某些有关系统的基本性质的信息,但它们又不足以精确地确定所有变量之间的关系。在这种情况下,模型化的过程中就常常包含着对可供选择的模型进行广泛地比较,并从中确定一个“最好的”模型。故在这种情况下,随机模型得到广泛的应用。

4. 模型的求解 模型一经建立,下一步就要对它求解。一般说来,线性模型可以用解析法求解,而非线性模型则必须用数值方法通过计算机求解。由于数值方法在别处已有阐述,例如〔31〕和〔38〕,所以我们不再讨论非线性模型的解法。然而,本书将提出两个求解线性过程模型中最一般而又十分有效的解析方法。这将是第三章的主题。

5. 模型的评价 这一步骤涉及到模型与数据的比较问题。根据模型和数据的类型,模型与数据的匹配,可按照下述几种方法进行:

(1) 如果模型的形式已由机理所确定,则模型与数据之间的匹配通常是通过模型参数的估计以达到最优拟合。这涉及到参数估计问题,它将是第六至第八章的主题。

(2) 如果除了输入-输出数据外,对系统再无其它先验信息,则我们只能对系统构造一个经验模型。这就涉及到识别问题,这将是第九章与第十章的主题。

模型一经建成,即可用来预报系统的未来性态,改进系统过去的性态,简要地提出系统的控制方案或确定一组较好的或经过改进的操作条件。现代科学技术中最活跃和最积极的领域之一,就是对复杂的大系统的模型化问题。例如,在这种系统中包括有:空气流的正面运动〔2〕、山风〔26〕、海洋环流〔34〕、普通气象学〔28〕、高密度汽车交通信号的配置〔13〕、污染气流与空气的诱导混和〔15〕、全球与城市环流中空气污染物的传播〔29〕〔44〕、反应系统〔4、5、21、33〕、结构设计〔36〕、有关经济理论〔16〕的社会经济学问题〔27〕、有关有机体的各种生物学问题〔26〕、肺状循环〔39〕以及动脉血液流动〔46〕等问题。进一步讲,为处理这许多不同模型的分析工作,专用的计算机程序已经变得非常有用〔10、11、22、42〕,它只需要具有很少的经验就能进行。

在复杂系统的数学模型化方面,空气污染的模型化可作为一个特殊的例子提出来;它可概述如下〔45〕:

在建立城市空气扩散的一个切实可行的模拟模型时,关键的一步就是要在规定的精确度与计算的可行性之间取得平衡。空气扩散模型由三个原始模型组成:(1)气象模型,用以描述大气的传递与分散过程;(2)反应动力学模型,用以描述大气的化学反应速率;(3)污染源模型,用以描述机动车辆与主要固定污染源逸出的散发物的质量及其在空间中的分布。

气象模型包括了动力学模型和污染源模型,但气象模型主要用以描述传递与分散过程的方式。反应动力学模型的主要目的是描述作为浓度、放射密度和温度的函数的大气化学反应速率。由于污染物的种类很多,如反应物、媒介物以及大气反应的产物等,所以对反应速率的完整描述是一项巨大任务。而我们的目的是要建立一个简单但在精度上又能令人满意的模

型，这样的模型是由几种易于控制的反应物组分（或组分基团）集中在一起而构成的，它能够预报作为时间与空间的函数的污染的浓度。

当对所有的重要因素均作出完善的数学描述之后，另一项重要任务就是要慎重地考虑城市大气数学模拟的目的。在分析模型的用途时，通常在空气品质方面最重要的是要评价它对散发物的控制效果，并考虑它对大气与污染源数据的确实有效性，这些数据将决定模型合理的复杂程度。通常，对于空气品质一定的区域而言，该模型应能接受诸如机动车辆、发电厂、炼油厂以及地区源等散发物的数据（或者是与特殊的控制策略关联的简化的散发物的估计）的输入，并且对于一组特定的气象条件，要能预报原始（直接从污染源发出的）浓度和作为时间及空间的函数的派生（在大气中由化学反应形成的）污染物的浓度。

本书的目的是研究数学模型化过程中的基本概念。我们不可能把所有必须模型化的各种系统都包括进去。所以我们只准备根据化学工程的应用，以大量的例子阐明数学模型化的主要原理。事实上，我们将非常详细地讨论这些化学工程方面的应用，以说明数学模型化方法的优缺点。

§ 2—1 数学模型的基本分类

对数学模型的分类是一项既困难而又稍微带有任意性的工作。但仍有某些一般特性可用以区分常见的模型类型。我们选择确定性模型与随机模型作为最基本的分类。确定性模型是这样一类模型，在数学描述中既没有随机性的因素（也就是说，变量的值与参数都是些确定的数），并且所得到的模型的解也是响应的精确值。另一方面，随机模型允许在数学描述中有随机性因素。事实上，在随机模型中的量是被当作随机的量，我们完全不知道它的精确值，而仅仅知道该变量取某个值的概率。因此，随机数学模型的输出是一个概率而不是一个确定的数。我们将随机变量与随机模型的讨论留到第四章再开始。

本章将简明地提出本书中所考虑的模型的分类要点。根据不同的对象，按连续变量与离散变量，将模型概括成表2—1。在讨论每一类模型之前，我们对动态系统模型先作一些一般性的介绍。

表2—1 数 学 模 型 的 基 本 分 类

	连 续 变 量	离 散 变 量
一个独立变量	常微分方程 积分方程 不稳定的集中参数系统 ^① 稳态的分布参数系统 ^②	常差分方程 稳态的分阶段系统
两个或多个独立变量	偏微分方程 积分-微分方程 不稳定的分布参数系统 稳态的分布参数系统	微分-差分方程 不稳定的分阶段系统

①集中参数系统定义如下：其中空间差异被忽略，并且因变量（浓度、压力、温度等）在整个系统中都是均匀的。仅有的差异是随时间的变化，因而引出常微分方程。

②分布参数系统定义如下：其中考虑了空间差异，因变量不但随时间而变化，并且随着在系统中的空间位置而变化，因而导致用偏微分方程来描述。

§ 2—2 模型的基本特征

有一些可应用于几乎所有的数学模型的基本（虽然稍微有点抽象）概念。其中的某一些我们将在这里和本书较后的几章中引进。这些概念的更完整的论述可以在Zadeh和Desoer的著作〔48〕中找到。

考虑图2—1中按时间展开的抽象系统S。

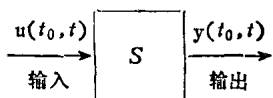


图2—1 抽象输入-输出系统的展示

设在时刻 t_0 有一个输入被加到S，并且观察从 $t = t_0$ 直到 $t = t$ 的输出。我们用向量 $\mathbf{u}(t_0, t)$ 表示输入*①，其中的自变量 (t_0, t) 指明输入适用于整个时间间隔 (t_0, t) ，同时指明该输入通常也依赖于输入被加到S的那个时刻 t_0 *②。输出用向量 $\mathbf{y}(t_0, t)$ 表示。假定系统是确定性的，显然 $\mathbf{y}(t_0, t)$ 将依赖于 $\mathbf{u}(t_0, t)$ 以及在时刻 t_0 时S的条件。现在，我们必须引进系统S的状态的概念。不严格地说：系统的状态可以看作是在任何时刻 t_0 为了确定系统（从该时刻起，对 $t \geq t_0$ ）的性态所需要的信息。因此S的初始条件就是S的初始状态。如果我们把这个初始状态记为向量 $\mathbf{x}(t_0)$ ，那末 $\mathbf{y}(t_0, t)$ 就依赖于 $\mathbf{x}(t_0)$ 与 $\mathbf{u}(t_0, t)$ 。更确切的术语不久我们就要给出。然而需要指出的是，我们不考虑所谓预处理系统，也就是那些输出的现在值依赖于输入的未来自值的那些系统。

图2—1指出所讨论的装置的示意图。偶 $(\mathbf{u}, \mathbf{y})$ 叫做输入-输出偶。例如，如果S以纯量的线性常微分方程（单一的输入-输出关系）

$$\frac{dy}{dx} + a_0 y = u$$

来表征，那末这个方程的解就构成输入-输出偶。我们注意，在这种情形中，S的状态与S的输出是相同的。在更复杂的情形中，也许不一定如此。Sedlar和Bekey〔43〕就是以另一种用有限状态与信号流框图的方法来描述图2—1的。

我们还需要假定集合T为独立变量t值的集合。如果T是实轴，那末S称为是连续的；如果T仅仅是整实数，那末S称为是离散的。这两种结构的每一种，通常都自然地出现于模型

• ①原注：为了表达方法的简洁性，本书常常采用向量记号。如果没有另外说明，我们总是取向量为列向量，如像 $\mathbf{u}(t_0, t)$ ，即

$$\mathbf{u}(t_0, t) = \begin{pmatrix} u_1(t_0, t) \\ u_2(t_0, t) \\ \vdots \\ u_r(t_0, t) \end{pmatrix}.$$

在第二至第八章的材料中，当使用到向量—矩阵记号的情形时，我们所需要的仅仅是非常基本的矩阵代数知识。在第九章和第十章中需要一些另外的概念，当它们出现时将另加说明。

• ②原注：为了说明问题，本章中将考虑只依赖于时间的变量。对于多个独立变量，这些概念容易仿效。

中；例如均匀系统导致连续模型，而分阶段系统则导致离散模型（表2—1）。

另外两个重要概念分别是**非时变**系统即定常系统以及**线性**系统。那些不能纳入这些类型的系统分别称为**时变**系统与**非线性**系统。简单地说，非时变性与在时间的推移下输入-输出偶的不变性有关。换句话说，输入-输出偶与产生作用的时间间隔无关。通常这意味着系统模型中的参数或系数都是常数。

当且仅当系统 S 中的任意两个输入-输出偶的任一线性组合也是 S 中的输入-输出偶时，系统 S 才是线性的。于是，如果 $\tau[(u, y)]$ 是将 u 转换成 y 的一个变换，并且 c 是任一纯量，那末

$$\begin{aligned}\tau[(u_0, y_0) + (u_1, y_1)] &= \tau[(u_0, y_0)] + \tau[(u_1, y_1)] \\ \tau[c(u, y)] &= c \tau[(u, y)]\end{aligned}$$

就是说，系统服从**迭加原理**。

例如，如果我们有二个输入-输出的关系式

$$\frac{dy_0}{dt} + a_0 y_0 = u_0, \quad \frac{dy_1}{dt} + a_0 y_1 = u_1$$

那末线性组合得出

$$\frac{d}{dt} [c_1 y_0 + c_2 y_1] + c_1 a_0 y_0 + c_2 a_0 y_1 = c_1 u_0 + c_2 u_1$$

式中 c_1 与 c_2 是实数。由此，原来的输入-输出偶 (u_0, y_0) 与 (u_1, y_1) 当线性地组合后还是一个输入-输出偶。

线性性质是模型所能拥有的唯一最重要的性质，因为在这种情况下大量的解析工具都是有效的。遗憾的是，某些非常重要的物理系统必须用非线性模型才能表示，这就大大地限制了解析方法的适应性。

另一个重要问题就是模型的非唯一性问题，或者换句话说就是**不可分辨性或等价性**问题。在这种情况下，我们不可能由一个实验确定出单一的输入-输出偶。于是考虑两个系统 S_0 与 S_1 ，并试图从所研究系统的一个输入-输出偶 (u, y) 来确定它们。如果这不可能做到，也就是说，不论是 S_0 还是 S_1 从单个或多组实验中都是不可分辨的，那末我们就说 S_0 和 S_1 等价且有 $S_0 = S_1$ 。

然而，上述不确定的情形并不排除每一个系统都存在一个模型这种显然的结论。问题至少是如何去找出一个模型，这个模型称之为一个**实现**，然后再找出一个**最小模型**。这个问题将在第九章中详细考虑。

§ 2—3 常微分方程

我们已经定义作为在时刻 t_0 的信息的系统状态，以及具有特别要求的对于 $t \geq t_0$ 时的输入 $u(t)$ ，它们使得对所有继 t_0 之后的输出 $y(t)$ 的计算成为可能。简述为

$$y(t) = y[x(t_0), u(t_0, t)] \quad t > t_0$$

此外，未来的状态仅依赖于 $x(t_0)$ 与 $u(t_0, t)$ ：

$$x(t) = x[x(t_0), u(t_0, t)] \quad t > t_0$$

一大类物理系统可以用满足形如

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \quad (2-3-1)$$

的向量常微分方程的 n 维状态向量 $\mathbf{x}(t)$ 来描述。因为我们对实际系统的模型化感兴趣，所以常常假定式(2-3-1)的解存在并且是唯一的。式(2-3-1)的存在性与唯一性的条件可以在任何标准的常微分方程教科书中找到。式(2-3-1)写成 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{u}$ 的分量的形式就是

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= f_1(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t); u_1(t), \dots, u_r(t)) \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\dot{x}_n(t) = f_n(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t); u_1(t), \dots, u_r(t))$$

本节将介绍式(2-3-1)的一般线性形式的解法。然而，我们将首先考虑从一个 n 阶常微分方程化到形如式(2-3-1)所示的一组 n 个一阶常微分方程的方法。

例2.1 证明一般的 n 阶常微分方程

$$a_n \frac{d^n y}{dt^n} + a_{n-1} \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} + \dots + a_0 y = u \quad (A)$$

式中 $a_n, a_{n-1}, \dots, a_0$ 是常数，且 $a_n \neq 0$ ，可以表为一般形式

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}\mathbf{x} + \mathbf{G}\mathbf{u} \quad (B)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} \quad (C)$$

我们用 $y(t)$ 的导数来定义一组新的变量 $\mathbf{x}(t) = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ (上标 T 表示转置)，即

$$\begin{aligned} x_1 &= y \\ x_2 &= \frac{dy}{dt} \\ &\vdots \\ x_n &= \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} \end{aligned} \quad (D)$$

那末从(A)与(D)即可直接得到

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_3 \\ &\vdots \\ \frac{dx_n}{dt} &= \frac{1}{a_n} [u - a_0 x_1 - \dots - a_{n-1} x_n] \end{aligned}$$

然后，如果定义

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & \\ -\frac{a_0}{a_n} & & & & -\frac{a_{n-1}}{a_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \frac{1}{a_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = [1 \ 0 \ \dots \ 0],$$

就得到方程组(B)。再由 $\mathbf{x}(t)$ 的一个初始条件与 $u(t_0, t)$ 即可确定(B)的解 $y(t)$ 。把这个初始条件记作 $\mathbf{x}(t_0)$ 并根据(A)的初始条件 $y(t_0), \dots, d^{n-1}y(t_0)/dt^{n-1}$ ，我们可以使

$$\mathbf{x}(t_0) = \left[y(t_0), \dots, \frac{d^{n-1}y(t_0)}{dt^{n-1}} \right]^T$$

于是, $\mathbf{x}(t_0)$ 是 $y(t)$ 的一个初始条件, 并且因为唯有它与 $u(t_0, t)$ 一起是确定在任何时刻 t 的 $y(t)$ 所必需的, 所以 $\mathbf{x}(t)$ 具有 S 的一个状态向量的作用。

式(2—3—1)的一般线性形式

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}\mathbf{x} + \mathbf{G}u \quad (2-3-2)$$

是在过程模型化中一个非常重要的方程。现在讨论受条件 $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ 约束的式(2—3—2)的解。特别注意矩阵 $\mathbf{F}$ 和 $\mathbf{G}$ 不依赖于时间; 也就是说, 它们不随时间而变化或是常数。假定 $\mathbf{F}$ 的维数为 $n \times n$, $\mathbf{G}$ 的维数为 $n \times r$, 这里 $u(t)$ 是一个 r 维向量。那末式(2—3—2)的齐次形式为

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}\mathbf{x} \quad (2-3-3)$$

它的解是

$$\mathbf{x}(t) = e^{\mathbf{F}(t-t_0)} \mathbf{x}_0 = \exp[\mathbf{F}(t-t_0)] \mathbf{x}_0 \quad (2-3-4)$$

用无穷级数定义的矩阵指数为

$$e^{\mathbf{F}t} = \mathbf{I} + \mathbf{F}t + \mathbf{F}^2 \frac{t^2}{2!} + \mathbf{F}^3 \frac{t^3}{3!} + \dots \quad (2-3-5)$$

定义状态转移矩阵为

$$\Phi(t-t_0) = e^{\mathbf{F}(t-t_0)} \quad \checkmark \quad (2-3-6)$$

所以式(2—3—4)可以记为

$$\mathbf{x}(t) = \Phi(t-t_0) \mathbf{x}_0 \quad (2-3-7)$$

此刻不讨论 $\Phi(t-t_0)$ 的计算。

现在, 我们来求解非齐次的情况, 即式(2—3—2), 设

$$\mathbf{x}(t) = \Phi(t-t_0) \mathbf{z}(t) \quad (2-3-8)$$

微分得

$$\dot{\mathbf{x}} = \dot{\Phi} \mathbf{z}(t) + \Phi \dot{\mathbf{z}} \quad (2-3-9)$$

由 $\Phi(t-t_0)$ 的定义可以看出

$$\dot{\Phi} = \mathbf{F}\Phi \quad (2-3-10)$$

$$\Phi(0) = \mathbf{I} \quad (2-3-11)$$

于是式(2—3—9)就是

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}\mathbf{x} + \Phi \dot{\mathbf{z}} \quad (2-3-12)$$

比较式(2—3—2)与式(2—3—12), 发现

$$\Phi(t-t_0) \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{G}u(t) \quad (2-3-13)$$

解 $\dot{\mathbf{z}}$ 而得出

$$\dot{\mathbf{z}} = \Phi^{-1}(t-t_0) \mathbf{G}u(t) \quad (2-3-14)$$

这里我们假定逆矩阵存在。将式(2—3—14)积分则得

$$z(t) = z(t_0) + \int_{t_0}^t \Phi^{-1}(\tau - t_0) G u(\tau) d\tau \quad (2-3-15)$$

在式(2-3-8)中运用式(2-3-15)并解 $x(t)$ (运用 $z(t_0) = x_0$)得出

$$x(t) = \Phi(t - t_0) x_0 + \Phi(t - t_0) \int_{t_0}^t \Phi^{-1}(\tau - t_0) G u(\tau) d\tau \quad (2-3-16)$$

解中这个积分是由输入 $u(t)$ 所引起的。

向量线性常微分方程的更一般的形式是其中的矩阵 F 与 G 是 t 的函数。这样的系统称为非平稳的、非自治的、非定常的系统或简称为时变系统,记为

$$\dot{x}(t) = F(t)x(t) + G(t)u(t), \quad x(t_0) = x_0 \quad (2-3-17)$$

如同非时变的情形一样,解可以通过状态转移矩阵而得到。考虑齐次系统

$$\dot{x} = F(t)x \quad (2-3-18)$$

如果 $n \times n$ 矩阵 $\Phi(t, t_0)$ 满足

$$\frac{\partial \Phi(t, t_0)}{\partial t} = F(t)\Phi(t, t_0) \quad (2-3-19)$$

$$\Phi(t, t_0) = I \quad (2-3-20)$$

那末用直接的代换即可得到式(2-3-18)的一个解为

$$x(t) = \Phi(t, t_0) x_0 \quad (2-3-21)$$

显然,它类似于式(2-3-7)。然而在时变的情况下,转移矩阵通常依赖于 t_0 的值。

状态转移矩阵 $\Phi(t, t_0)$ 满足下述性质:

$$\Phi(t_2, t_0) = \Phi(t_2, t_1) \Phi(t_1, t_0) \quad (2-3-22)$$

$$\Phi(t, t_0) = \Phi^{-1}(t_0, t) \quad (2-3-23)$$

式(2-3-23)的证明由Athans和Falb[6]给出。对于平稳情形, $\Phi(t, t_0) = \Phi(t - t_0)$,并且

$$\Phi(t - t_0) = \Phi(t - \tau) \Phi(\tau - t_0) \quad (2-3-24)$$

$$\Phi^{-1}(t - t_0) = \Phi(t_0 - t) \quad (2-3-25)$$

在式(2-3-16)中运用式(2-3-24)与式(2-3-25),我们可以将式(2-3-16)写成等价形式为

$$x(t) = \Phi(t - t_0) x_0 + \int_{t_0}^t \Phi(t - \tau) G u(\tau) d\tau \quad (2-3-26)$$

同样非常重要,如果 $F(t)$ 在任何一个有限时间间隔内是连续的,那末 $\Phi(t - t_0)$ 对于所有有限的 t 是非异的(Φ 的列向量是线性独立的)。

最后,考虑一般时变式(2-3-17)的受迫(即非齐次)情况。如果设

$$x(t) = \Phi(t, t_0) z(t)$$

平行于式(2-3-8)~(2-3-16)中的程序我们可得到

$$\dot{x}(t) = \Phi(t, t_0) \dot{z}(t) + \Phi(t, t_0) \int_{t_0}^t \Phi^{-1}(\tau, t_0) G(\tau) u(\tau) d\tau \quad (2-3-27)$$

运用式(2-3-22)及(2-3-23)可以将式(2-3-27)改写为

$$\dot{x}(t) = \Phi(t, t_0) \dot{z}(t) + \int_{t_0}^t \Phi(t, \tau) G(\tau) u(\tau) d\tau \quad (2-3-28)$$

有关明确地计算 $\Phi(t, t_0)$ 的方法的充分讨论是由Athans和Falb[6]以及Lapidus和Luus[30]提出的。最明显的程序就是运用式(2-3-5)的无穷级数展开式,并在有限