

高职高专“十二五”规划教材



反应过程与设备

雷振友 主编

The Chemical
Reaction Process
and Equipment



化学工业出版社

高职高专“十二五”规划教材

反应过程与设备

雷振友 主编 邓玉美 副主编
周 波 主审

本书以常见化工反应过程及设备的技术应用为主线,坚持“实际、实用、实践”原则,以能力为本位,突出实用性。采用项目化教学模式编写,用工作任务引领,以项目任务分解原来的知识体系,使学生在完成任务过程中掌握知识,提高技能。内容包括:绪论、均相反应器、气固相催化反应器、气液相反应器。每个项目附有知识目标、能力目标、生产案例、相关知识、任务实施、考核评价、项目小结、项目自测。使学生明确学习目的、学习内容、重点及应达到的要求和能力,以发挥学生主体作用,促进学生自主学习,开拓学生视野。

本书可以作为化工技术类相关专业(石油化工、应用化工、有机化工、精细化工、高分子材料、制药化工、无机化工等)的高等职业教育教材,也可供相关化工企业的职工培训使用,还适用于从事各类化工专业的科研、生产管理的科技人员阅读参考。

图书在版编目(CIP)数据

反应过程与设备/雷振友主编. —北京:化学工业出版社,
2013.8

高职高专“十二五”规划教材

ISBN 978-7-122-17728-5

I. ①反… II. ①雷… III. ①化学反应工程-高等职业教
育-教材②反应器-高等职业教育-教材 IV. ①TQ03②TQ052.5

中国版本图书馆CIP数据核字(2013)第137554号

责任编辑:窦臻

文字编辑:刘砚哲

责任校对:陶燕华

装帧设计:关飞

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印装:大厂聚鑫印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张12 字数298千字 2013年9月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:25.00元

版权所有 违者必究

前 言

本教材按照“以能力为本位，以职业实践为主线，以项目课程为主体的模块化专业课程体系”的总体设计要求，以化工反应岗位的相关工作任务和职业能力分析为依据，以工作过程为导向构建行动体系，打破学科体系，以培养化工反应过程方案选择能力、设备选用与简单设计能力、装置的操作运行能力为基本目标，紧紧围绕工作任务完成的需要，选择和组织教学内容，突出工作任务与知识的联系，教、学、做一体化，使学习者在完成工作任务的过程中掌握知识，提高技能。

项目选取的基本依据是本课程工作领域和工作任务范围。在项目设计过程中，以典型化工产品的工艺过程为载体，产生了具体的工作任务。本教材以常用的反应设备为线索进行设计，分为均相反应器、气固相催化反应器及气液相反应器三个模块，每个模块分为若干个项目，每个项目又分为若干个工作任务，以工作任务为中心引出相关专业知识。以工作过程为导向，通过实际生产案例，展开反应设备的选择、设计及其操作方面相关知识，培养实践技能，充分体现任务引领、实践导向的行动体系的项目课程思想。

本书体例力求灵活多样，每个项目有“生产案例”，每个任务设有“知识目标”、“能力目标”、“相关知识”、“任务实施”、“拓展知识”及“考核评价”，每个模块设有“小结”，使学生明确学习目的、学习内容、重点及应达到的要求，以提高学生学习兴趣，发挥学生主体作用，促进学生自主学习，利于开拓学生视野。

本书可以作为高等职业教育石油化工、应用化工、有机化工、精细化工、高分子材料、制药化工、无机化工等专业及相关专业的教材，为学生毕业后从事反应器操作奠定必要的理论和技术基础；还可以作为相关化工企业的职工培训教材，也适于从事各类化工专业的科研、生产管理的科技人员使用。

本书由辽宁石化职业技术学院雷振友主编，天津渤海职业技术学院邓玉美副主编。绪论、模块一、模块二项目三由雷振友编写；模块二项目一由邓玉美编写；模块二项目二由杨凌职业技术学院李黔蜀编写；模块三项目一由雷振友和河南工业职业技术学院黄秋颖编写，项目二由黄秋颖编写。全书由雷振友统稿。辽宁石化职业技术学院周波教授仔细地审阅了全书，提出了宝贵的意见和建议。本书在编写过程中得到了化学工业出版社的大力支持，也得到了东方仿真公司的支持与帮助，在此表示衷心感谢。

由于编者的水平有限，难免存在各种问题，敬请同仁及读者指正，以使本教材日臻完善。

编者

2013年3月

目 录

绪 论 1

一、化学反应过程的基本分类	1
二、化学反应的操作方式	1
三、反应器类型与特点	2
四、本课程的主要内容、任务及与其他学科的关系	3
五、本课程的研究方法	4

模块一 均相反应器 6

项目一 间歇釜式反应器的设计和操作 6

生产案例	6
------------	---

预备知识	6
------------	---

一、均相反应动力学基础	6
二、反应器流动模型	16

• 任务一 认识釜式反应器 18

任务实施	19
------------	----

一、釜式反应器的壳体结构	19
二、釜式反应器的搅拌装置	20
三、挡板和导流筒	21
四、釜式反应器的换热装置	21
五、传动装置及密封	22

拓展知识	22
------------	----

新型立卧式球形反应釜	22
------------------	----

考核评价	23
------------	----

• 任务二 间歇釜式反应器的设计 23

相关知识	23
------------	----

一、反应器设计基础	23
二、间歇釜式反应器的基础方程	26

任务实施	26
------------	----

一、间歇釜式反应器反应时间的确定	26
------------------------	----

二、间歇釜式反应器体积计算	28
三、反应釜的结构尺寸确定	29
拓展知识	29
等容非恒温间歇反应过程	29
考核评价	31
• 任务三 连续釜式反应器的设计	31
相关知识	31
一、连续釜式反应器的特点	31
二、连续釜式反应器的基础方程	31
任务实施	32
一、单一连续操作釜式反应器的计算	32
二、多个串联连续釜式反应器 (n -CSTR) 的计算	33
拓展知识	37
连续操作釜式反应器的热稳定性	37
考核评价	39
• 任务四 釜式反应器的操作	40
任务实施	40
一、连续釜式反应器的操作	40
二、间歇釜式反应器的操作	41
考核评价	43
项目二 管式反应器的设计和操作	43
生产案例	43
• 任务一 认识管式反应器	44
任务实施	44
一、管式反应器的类型	44
二、管式反应器的特点	46
拓展知识	46
管式裂解炉	46
考核评价	48
• 任务二 管式反应器的设计	48
相关知识	48
一、理想置换反应器的特点	49
二、理想置换反应器的基础方程	49
任务实施	50
一、等温恒容管式反应器的计算	50
二、等温变容管式反应器的计算	51
拓展知识	52
变温管式反应器的计算	52
考核评价	53

• 任务三 管式反应器的操作	53
任务实施	53
一、熟悉生产原理及工艺流程	53
二、管式反应器的操作	54
考核评价	56
项目三 均相反应器型式和操作方式的评选	57
• 任务一 简单反应反应器生产能力的比较	57
任务实施	57
一、单个反应器生产能力的比较	57
二、多釜串联操作釜式反应器个数的选择	59
考核评价	59
• 任务二 复杂反应选择性的比较	60
任务实施	60
一、平行反应选择性的比较	60
二、连串反应选择性的比较	62
考核评价	63
小结	64
自测练习	64
主要符号	67

模块二 气固相催化反应器

69

项目一 固定床反应器的设计和操作	69
生产案例	69
预备知识	69
一、固体催化剂基础知识	69
二、气固相催化反应动力学基础	75
三、本征动力学方程	81
• 任务一 认识固定床反应器	84
任务实施	84
一、固定床反应器的特点及工业应用	84
二、固定床反应器的类型和结构	85
拓展知识	88
滴流床反应器	88
考核评价	89
• 任务二 固定床反应器的设计	89
相关知识	89
一、催化剂床层特性	89
二、流体在固定床中的流动特性	91

三、固定床反应器中的传质与传热	93
任务实施	97
一、固定床反应器的计算内容和方法	97
二、催化剂用量的计算	97
三、固定床反应器结构尺寸的计算	98
考核评价	100
• 任务三 固定床反应器的操作	100
相关知识	100
固定床反应器的操作指导	100
一、温度调节	100
二、压力的调节	101
三、氢油比的控制	101
四、空速操作原则	102
五、催化剂器内再生操作	102
任务实施	102
固定床反应器的操作	102
一、熟悉生产原理及工艺流程	102
二、固定床反应器的操作	105
考核评价	106
项目二 流化床反应器的设计和操作	106
生产案例	106
• 任务一 认识流化床反应器	107
任务实施	107
一、流化床反应器的特点及工业应用	107
二、流化床反应器的结构与类型	108
拓展知识	115
悬浮床三相反应器	115
考核评价	116
• 任务二 流化床反应器的设计	116
相关知识	116
一、流态化基本概念	116
二、流化床反应器中的传质	123
三、流化床反应器中的传热	125
任务实施	127
一、流化床结构尺寸设计	127
二、气体分布板的计算	130
拓展知识	131
高速流态化技术	131
考核评价	132

• 任务三 流化床反应器的操作	132
相关知识	133
流化床反应器的操作指导	133
一、流化床反应器开停车操作	133
二、流化床反应器的参数控制	133
任务实施	135
流化床反应器的操作	135
一、熟悉生产原理及工艺流程	135
二、流化床反应器的操作	136
考核评价	138
项目三 气固相催化反应器的选择	139
任务实施	139
一、气固相反应器型式的选择	139
二、气固相反应器选择实例	140
考核评价	142
小结	142
自测练习	142
主要符号	145

模块三 气液相反应器 147

项目一 气液相反应器的设计和操作	147
生产案例	147
预备知识	147
一、气液相反应过程	147
二、气液相反应宏观动力学	150
三、气液相反应过程的重要参数	152
• 任务一 认识气液相反应器	154
任务实施	154
一、气液相反应器的分类	154
二、气液相反应器的结构	154
拓展知识	159
浆态反应器	159
考核评价	160
• 任务二 鼓泡塔反应器的设计	160
相关知识	160
一、鼓泡塔内的流体流动	160
二、鼓泡塔中的传质	164
三、鼓泡塔中的传热	165

任务实施.....	165
鼓泡塔反应器的计算	165
考核评价.....	168
• 任务三 鼓泡塔反应器的操作	168
任务实施.....	168
一、熟悉生产原理及工艺流程	169
二、操作参数的控制	170
三、鼓泡塔反应器的操作	171
考核评价.....	175
项目二 气液相反应器的选择	175
任务实施.....	175
一、气液相反应器型式的选择	175
二、气液相反应器选择实例	176
考核评价.....	177
小结	178
自测练习	178
主要符号	180

绪 论

化工产品种类繁多,生产工艺千差万别。但是不论何种化工产品,其生产过程都可以概括为以下三部分:原料的预处理、化学反应过程以及反应产物的分离与提纯。其中原料的预处理和反应产物的分离与提纯过程主要是物理过程,属于化工单元操作过程所研究的问题。化学反应过程则是整个化工产品生产的核心部分,实现化学反应过程的设备是反应器。一个化学反应要在工业上予以实施,如何选择一个合适的反应器,如何确定适宜的操作方式和工艺条件,使生产过程安全、高效、低消耗是反应过程与设备要解决的问题。因此反应过程与设备是研究如何在工业规模上实现有经济价值的化学反应的一门应用技术。

一、化学反应过程的基本分类

由于化工生产过程中发生的化学反应种类繁多,为了研究化学反应过程与设备的规律,有必要将化学反应进行分类。分类方法很多,表 0-1 列出了化学反应过程的基本分类。

表 0-1 化学反应过程的分类

分类特征		化学反应类型
反应特性	反应机理	简单反应,复杂反应(平行反应、连串反应、自催化反应等)
	热力学特征	可逆反应,不可逆反应
	反应级数	零级反应、一级反应、二级反应、分数级反应等
	热效应	吸热反应、放热反应
相 态		均相反应(气相、液相), 非均相反应(气-液相、气-固相、液-液相、液-固相、气-液-固相)
温度变化		等温反应、变温反应
操作方式		间歇反应、连续反应、半连续(或半间歇)反应

在化学反应工程领域内,一般多按反应物料的相态进行分类,但从工程角度出发,往往也非常注重操作方式,因为它与反应器的型式、操作条件以及设计方法的确定都密切相关。

二、化学反应的操作方式

1. 间歇操作

间歇操作是指一批物料投入反应器后,经过一定反应时间,然后再取出的操作方式。由

于分批操作时，物料浓度及反应速率都在不断变化，因此间歇操作是一个非定态过程。间歇操作主要适用于反应速率较慢的化学反应，对于产量小的化学品生产过程也很适用，尤其是那些批量少而产品品种多的企业尤为适宜。

2. 连续操作

连续操作是指反应物料连续地通过反应器的操作方式。连续操作属于定态操作过程，即反应器内的物系参数（如浓度及反应温度等）均不随时间而改变，只随位置而变。连续操作一般用于产品品种比较单一而产量较大的场合，具有产品质量稳定、劳动生产率高、便于实现机械化和自动化等优点。

3. 半连续式操作

半连续式操作或称为半间歇式操作，是指反应器中的物料，有一部分是分批地加入或取出，而另一部分是连续地通过的操作方式。如某些液相氧化反应，液体原料及生成物是分批加入和取出，而氧化用的空气则连续通入反应器；或两种液体反应，一种液体先加入反应器，而另一种液体则连续滴加；又或液相反应物是分批加入，但气态反应生成物从系统连续排出等均属于半连续式操作。尽管半连续式操作过程比较复杂，但它具有自己的特点，因此工业生产中某些反应使用该方式进行操作。

三、反应器类型与特点

反应不同、规模不同，反应器型式和操作方式也会不同。为了选择合适的反应器，有必要了解工业化学反应器的类型。一般常见反应器的分类方法见表 0-2。

表 0-2 反应器的分类

分类方法	反应器类型
反应类型	均相反应器、非均相反应器
结构	管式反应器、釜式反应器、塔式反应器、固定床反应器、流化床反应器等
操作方式	间歇式反应器、连续式反应器、半连续(半间歇)式反应器
温度变化	等温反应器、非等温反应器
传热方式	绝热式反应器、自热式反应器、换热式反应器

工业生产中反应器型式、操作方式以及操作条件的选择需结合化学反应和工程两个方面的考虑才能确定。各种型式反应器的特点与应用实例见表 0-3。

表 0-3 各种型式反应器的特点与应用实例

反应器型式	适用的反应	特 点	生产实例
釜式反应器 (间歇或单釜、 多釜连续操作)	液相、液-液相、液固相	操作弹性大,适用性强,产品质量均一。但单釜连续操作返混大	氯乙烯聚合,顺丁橡胶聚合,甲苯硝化等
管式反应器	气相、液相	返混小、所需反应器体积小,比传热面大,仅适于连续操作,停留时间受管长限制	石脑油裂解,管式法高压聚乙烯等
鼓泡塔	气液相、气液固(催化 剂)相	气相返混小、液相返混大,气相压力降大,温度易于调节,流速有限制	苯的烷基化,乙烯基乙炔的合成,二甲苯氧化等
固定床	气固(催化或非催化)相	返混小,催化剂不易磨损,传热性能差,催化剂再生不易	乙苯脱氢制苯乙烯,合成氨,石油重整等
流化床	气固(催化或非催化) 相、催化剂失活很快的 反应	返混大,传质、传热好,催化剂有效系数大,但磨损大	石油催化裂化,苯氧化制苯酚,丙烯氨氧化制丙烯腈等

续表

反应器型式	适用的反应	特 点	生产实例
填料塔	气液相	结构简单,返混小,压降小,有温差,填料装卸麻烦	化学吸收,丙烯连续聚合等
板式塔	气液相	逆流接触,气液返混小,流速受限制,可在板间加传热面	苯连续磺化,异丙苯氧化等
喷雾塔	气液相快速反应	结构简单,液体表面积大,气流速度有限制,停留时间受塔高限制	氯乙醇制丙烯腈,高级醇的连续磺化等
滴流床	气液固(催化剂)相	催化剂易分离、带出少,气液分布要求均匀,温度调节较难	焦油加氢精制和加氢裂解,丁炔二醇加氢等
移动床	气固(催化或非催化)相	固体返混小,粒子传送容易,固气比可变性大,床内温差大,调节困难	石油催化裂化,矿物冶炼等

四、本课程的主要内容、任务及与其他学科的关系

为使反应过程能够得到最大的经济效益,需要研究化学反应和反应器的特性。化学反应是反应过程的主体,反应本身的特性即反应动力学是代表反应过程的本质因素,而反应器是实现这种反应的客观环境。在工业反应器内进行的化学反应过程既有物理过程又有化学过程。反应器中的主要物理过程是流体流动过程和传质传热过程。物理过程和化学过程相互渗透、相互影响,导致化学反应特性和反应结果不同,使反应过程复杂化。物理过程虽然不能改变化学反应的动力学规律,但是它可以改变反应器内操作条件如温度和浓度的变化规律,最终导致反应效果发生变化,影响反应结果。因此,我们不仅要研究化学反应动力学,还要研究如何在工业上实现这些反应过程,即反应的工程问题。

1. 反应过程与设备的主要内容

(1) 化学反应动力学 化学反应动力学是指反应过程中,操作条件如反应的温度、反应物的浓度、反应压力、催化剂等对反应速率的影响规律。这些规律一般是在实验室内,通过对小型反应器内的化学反应进行研究得到的,它不包括物理过程的影响。通常我们得到的是用简单的物理量所描述的影响反应速率的动力学方程式。它是对反应器进行设计、计算和分析的基础。

(2) 物理过程 工业反应器内的物理过程主要是指流体流动、传质和传热过程,所以物理过程即传递过程。这些过程会影响到反应器内的浓度和温度在时间和空间上的分布,使得反应的结果最终发生变化。因此,只有对这些物理过程进行分析,找出它们对反应过程的影响规律,定量描述,才能准确分析反应过程,对反应器进行设计和放大。

(3) 反应器的设计和优化 将反应动力学特性和反应过程中的传递特性结合起来,建立数学模型,对化学反应过程进行分析、设计,并对反应进行最优生产条件的选择以及控制。

(4) 反应器的操作 如何进行各类不同反应器的操作也是反应过程与设备的主要内容。具体包括:各种典型反应器的开停车操作,正常运行时的控制要点,反应器常见的不正常工况及排除方法。

2. 反应过程与设备的任务

反应过程与设备的任务是学习化学反应工程的基本原理和规律,掌握反应器的结构、工作原理,能够根据化学反应特点进行反应器型式的选择,并确定反应器的体积及工艺结构尺寸,学会反应条件的确定及反应装置的最优化,掌握典型反应器的操作和调节方法,对简单的异常现象能够做出判断,提出处理方案。

3. 反应过程与设备和其他学科的关系

反应过程与设备和其他学科（如物理化学、化学工艺、传递工程及工程控制）存在着一定的关系，如图 0-1 所示。

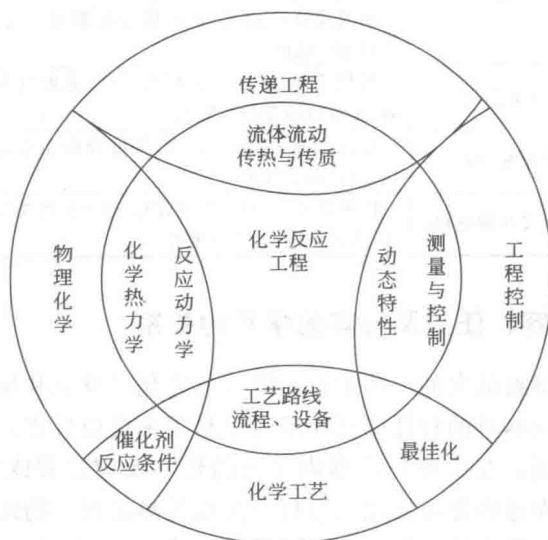


图 0-1 反应过程与设备和其他学科的关系

在化学热力学中，主要分析反应的可能性、反应条件和可能达到的反应程度等，如计算反应的平衡常数和平衡转化率。反应动力学专门阐明化学反应速率与各项物理因素（如浓度、温度、压力及催化剂等）之间的定量关系。而在反应过程与设备中，则需要对在热力学上具有一定的反应能动性的化学反应通过反应动力学研究，选择适宜的操作条件及反应器结构型式、确定反应器尺寸等，使其达到较好的反应效果。

传递工程主要是研究传递过程的普遍规律，而在反应过程与设备中，则讨论反应过程中的动量传递、热量传递和质量传递过程的基本规律。这些规律直接影响到工业反应器内的流体流动与混合、温度与浓度的分布，使得反应效果发生改变。

一项反应技术的实施有赖于适当的操作控制。工程控制主要研究操作条件的实施与控制，如温度、压力、进料配比、流量等。而在反应过程与设备中，工程控制主要是讨论反应过程中的操作条件的实施与控制，使反应条件选择在稳定的操作点上，并力求实现最优化。

化工工艺研究工艺流程、化工设备、工艺条件分析与确定。而在反应过程与设备中，则是工艺与工程密切结合，综合考虑的结果。如为了实现某反应，可以有多种技术方案，包括热量传递、温度控制、物料是否循环等，何种方案最为经济合理，流程就据此拟定。

例如合成氨反应，在热力学上有很大的能动性，化学平衡常数较大，但反应速率却很慢，通过动力学的研究，在体系中加入催化剂后，反应速率得到大幅提高；并且在工业上选择了自热式固定床反应器，确定了合适的工艺条件，使其达到很好的反应效果。因此，反应过程与设备的研究和其他学科是密不可分的。

五、本课程的研究方法

工业反应器开发要解决的问题是反应器的合理选型、反应器优化操作条件及反应器的工程放大。其基本研究方法有经验法和数学模型法。数学模型法是目前最佳的方法。

模型方法的程序为：①建立简化物理模型；对复杂客观实体，在深入了解的基础上，进行合理简化，设想一个物理过程（模型）代替实际过程。简化必须合理，即简化模型必须能够反映客观实体，便于进行数学描述。②建立数学模型；依照物理模型和相关的已知原理，写出描述物理模型的数学方程及其初始和边界条件。③用模型方程的解讨论客观实体的反应特性规律。

数学模型法的核心就是数学模型的建立。用数学模型法进行反应器开发的步骤为：①小试研究化学反应规律；②根据化学反应规律合理选择反应器类型；③大型冷模试验研究传递过程规律；④利用计算机或其他手段综合反应规律和传递规律，预测大型反应器性能，寻找优化条件；⑤热模试验检验模型的合理性。

这些步骤对反应过程进行了分解研究，研究了反应过程内部规律性，并使过程简化，大大提高了反应器开发速率和效率。这一方法是反应器开发过程中采用的主要方法，本书中采用此方法研究问题。

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

附录 反应器设计基础

模块一

均相反应器

均相反应是指在均一的液相或气相中进行的反应，这类反应包含的范围很广泛。如石油经热裂解反应为气相均相反应，而酸碱中和、酯化、皂化等反应为典型的液相均相反应。化学工业中常见的均相反应器有釜式反应器和管式反应器，在石油化工、有机化工、高分子化工、精细化工、医药化工等领域更是广泛应用。

项目一 间歇釜式反应器的设计和操作

»»»» 生产案例 ««««

乙酸乙酯是一种快干性的工业溶剂，能配制多种溶剂型胶黏剂，是重要的香料添加剂，在纺织工业中还可用作清洗剂，还能用作油漆的稀释剂以及制造药物、染料的原料等。乙酸乙酯的生产是用原料乙酸和乙醇在釜式反应器中发生酯化反应生成乙酸乙酯，再用饱和碳酸钠溶液和未反应的乙酸在釜式反应器中发生中和反应，最后使用萃取精馏操作分离出未反应的乙醇，得到乙酸乙酯产品。酯化和中和反应是液相均相反应，对产品的质量、收率起着关键的作用。反应设备使用的是釜式反应器。

通过本项目的学习，在了解均相反应过程及反应器结构特点的基础上，学会选择、设计合适的釜式反应器，并能进行反应器的开、停车操作及简单的事故处理。

»»»» 预备知识 ««««

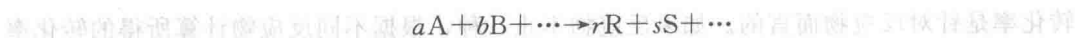
一、均相反应动力学基础

研究均相反应过程，首先要掌握均相反应动力学。均相反应动力学是解决工业均相反应器的选型、操作与设计计算问题的重要理论基础。

(一) 基本概念

1. 化学计量方程

(1) 化学反应式 反应物经过化学反应生成产物的过程用定量关系式描述称为化学反应式。



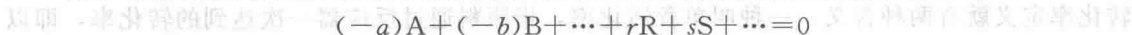
式中 a 、 b 、 r 、 s ——化学反应中各组分的分子数，称计量系数。

化学反应式不是方程式，不允许按方程式的运算规则将等式一侧项转移到等式的另一侧。

(2) 化学计量方程 化学计量方程只表示反应物、生成物在化学反应过程中量的变化关系。



化学计量方程是方程式，因此允许按照方程式的运算规则加以运算，如：



上式是化学计量方程普遍的表达形式，也可表示为：



其中 a_A 、 a_B 、 a_R 、 a_S 、 a_I 分别是 A 、 B 、 R 、 S 、 I 组分的计量系数。化学计量方程中的计量系数与化学反应式中的计量系数之间有以下关系。

若 I 组分为反应物，则该组分在化学计量方程中的计量系数与其在化学反应式中的计量系数数值相同但符号相反，即

$$a_A = -a, a_B = -b, a_I = -i$$

若 I 组分为反应产物，则该组分在化学计量方程中的计量系数与其在化学反应式中的计量系数相同，即

$$a_R = r, a_S = s, a_I = i$$

2. 反应程度

对于任一化学反应， $a_A A + a_B B + a_R R + a_S S = 0$ ，反应时，各组分的起始时物质的量分别为 n_{A0} 、 n_{B0} 、 n_{R0} 、 n_{S0} 。反应进行到一定程度，反应终态物质的量分别为 n_A 、 n_B 、 n_R 、 n_S 。由化学计量方程可知：任何一个反应在反应进行过程中，反应物的消耗量与产物的生产量之间存在一定的比例，等于各自化学计量系数之比，即

$$\frac{n_A - n_{A0}}{\alpha_A} = \frac{n_B - n_{B0}}{\alpha_B} = \frac{n_R - n_{R0}}{\alpha_R} = \frac{n_S - n_{S0}}{\alpha_S}$$

从上式可以看出，任何组分的反应量（或生成量）与其化学计量系数的比值为一定值，称为反应程度，用 ξ 表示：

$$\xi = \frac{n_I - n_{I0}}{\alpha_I} \quad (1-1)$$

式中 n_{I0} 、 n_I —— I 组分起始及终态时物质的量，mol；

ξ ——反应程度，无量纲；

α_I ——计量系数，无量纲。

反应程度 ξ 可以用来描述反应进行的程度。反应程度是一个累计量，其值永远为正，且随反应时间而变化。反应进行到一定时刻，各组分的物质的量与反应程度的关系为：

$$n_I = n_{I0} + \alpha_I \xi \quad (1-2)$$

3. 转化率

转化率是指某一反应物转化的百分率，用 x 表示。生产中经常用转化率来表示反应进行的程度。

$$x_A = \frac{\text{某一反应物的转化量}}{\text{该反应物的起始量}} = \frac{(n_{A0} - n_A)}{n_{A0}} \quad (1-3)$$