中国科学院研究生院教材
Textbooks of Graduate University of Chinese Academy of Sciences

化工数学模型方法

毛在砂 编著

Mathematical Modeling in Chemical Engineering

高等教育出版社
Higher Education Press

中国科学院研究生院教材
Textbooks of Graduate University of Chinese Academy of Sciences

化工数学模型方法

毛在砂 编著

Mathematical Modeling in Chemical Engineering

赠过程所图书馆，
毛在砂 2008.3

高等教育出版社
Higher Education Press

内容提要

数学模型方法是化学工程学以及化学反应工程学的重要工具。本书介绍化学工程中常用的数学模型和建模方法，结合化学工程中典型问题，讲述化工单元过程分析、建立数学模型、模型求解等主要步骤所涉及的概念、原则和方法，侧重点是物理、化学模型到数学模型的建模过程。书中有大量化工数学模型的实例，可作为实际应用模型方法解决具体问题的基础。本书首先介绍化工数学模型的学科基础，然后按模型的数学形式，分章讲述经验模型、集中参数模型、分布参数模型、随机模型，并提示了一些提高应用数学模型技巧的方法和经验。书末的习题可供读者作为建模思路的训练，以提高灵活建模的能力。

本书可供从事化工、冶金、能源、环保、食品、生化等过程工业的科研和技术开发人员，有一定工程和数学基础的科技人员和研究生参考和使用。

图书在版编目(CIP)数据

化工数学模型方法/毛在砂编著. —北京：高等教育出版社，2008.2

ISBN 978-7-04-023196-0

Ⅰ.化… Ⅱ.毛… Ⅲ.化学工程-数学模型-研究生-教材 Ⅳ.TQ018

中国版本图书馆CIP数据核字(2007)第197238号

策划编辑 柳丽丽 **责任编辑** 柳丽丽 **封面设计** 王凌波 **责任绘图** 尹 莉
版式设计 王艳红 **责任校对** 金 辉 **责任印制** 陈伟光

出版发行 高等教育出版社
社　　址 北京市西城区德外大街4号
邮政编码 100011
总　　机 010－58581000

经　　销 蓝色畅想图书发行有限公司
印　　刷 涿州市京南印刷厂

开　　本 787×1092 1/16
印　　张 17
字　　数 330 000

购书热线 010－58581118
免费咨询 800－810－0598
网　　址 http://www.hep.edu.cn
http://www.hep.com.cn
网上订购 http://www.landraco.com
http://www.landraco.com.cn
畅想教育 http://www.widedu.com

版　　次 2008年2月第1版
印　　次 2008年2月第1次印刷
定　　价 30.60元

物料号 23196－00

总 序

在中国科学院研究生院和高等教育出版社的共同努力下，凝聚着中国科学院新老科学家、研究生导师们多年心血和汗水的中国科学院研究生院教材面世了。这套教材的出版,将对丰富我院研究生教育资源、提高研究生教育质量、培养更多高素质的科技人才起到积极的推动作用。

作为科技国家队，中国科学院肩负着面向国家战略需求，面向世界科学前沿，为国家作出基础性、战略性和前瞻性的重大科技创新贡献和培养高级科技人才的使命。中国科学院研究生教育是我国高等教育的重要组成部分，在新的历史时期，中国科学院研究生教育不仅要为我院知识创新工程提供人力资源保障，还担负着落实科教兴国战略和人才强国战略，为创新型国家建设培养一大批高素质人才的重要使命。

集成中国科学院的教学资源、科技资源和智力资源，中国科学院研究生院坚持教育与科研紧密结合的“两段式”培养模式，在突出科学教育和创新能力培养的同时，重视全面素质教育，倡导文理交融、理工结合，培养的研究生具有宽厚扎实的基础知识、敏锐的科学探索意识、活跃的思维和唯实、求真、协力、创新的良好素质。

研究生教材建设是研究生教育中重要的基础性工作。由一批活跃在科学前沿,同时又具有丰富教学经验的科学家编写的中国科

学院研究生院教材，适合在校研究生学习使用,也可作为高校教师和专业研究人员的参考书。这套研究生教材内容力求科学性、系统性、基础性和前沿性的统一,使学习者不仅能获得比较系统的科学基础知识,也能体会蕴于其中的科学精神、科学思想、科学方法，为进入科学研究的学术殿堂奠定良好的基础；优秀教材不但是体现教学内容和教学方法的知识载体、开展教学的基本条件和手段，也是深化教学改革、提高教育质量、促进科学教育与人文教育结合的重要保证。

“十年树木，百年树人”。我相信，经过若干年的努力，中国科学院研究生院一定能建设起多学科、多类型、多品种、多层次配套的研究生教材体系，为我国研究生教育百花园增添一枝新的奇葩，为我国高级科技人才的培养作出新的贡献。

中国科学院 常务副院长

中国科学院研究生院 院长

中国科学院 院士

白春礼

二〇〇六年二月二十八日

序

随着现代化学工业的诞生及发展，其学科基础在20世纪初归纳为化工单元操作，60年代又深化为传递过程原理，这是化学工程学科发展的两个标志性里程碑。传递过程原理与差不多同时诞生的化学反应工程学，都明确数学模型是重要的基本研究工具，这不仅大大促进了化学工程学的继续发展，也对化学工业及与其相关的过程工业的进步产生深刻的影响。化学工业的最大特点是在生产过程中不仅涉及多种多样的物理变化，而且往往牵涉到复杂的化学反应网络，因此需要用数学模型方法来定量、准确地描述整个过程和探测过程涉及的物理、化学等方面机理，进而在科学、定量的基础上改进现有的工艺流程，发展新过程和研制新设备。

毛在砂研究员在化工多相反应器和数学模型的基础研究工作中有丰富的知识积累，并深感数学模型方法在培养高级化工科技人才中的重要地位，因此在繁忙的工作中挤出时间承担了中国科学院研究生院“化工数学模型及方法”课程的教学任务。我很高兴看到他的讲义能在中国科学院研究生院和高等教育出版社的支持下编辑成书出版。作为一个长期在化学工程及湿法冶金领域的科学工作者，更希望使用毛在砂研究员编写的《化工数学模型方法》一书的教师、学生和科技人员共同努力，推动中国的化学工程学和化工科学技术持久、深入地向前发展，稳步走向世界化工领域的最前沿。

陈家镛

2007.08.28

前　　言

化学工程学的诞生将近百年，随着对化工单元操作的深入研究，传递过程原理的应运而生，近年来工程数学、计算方法和计算机技术的飞速发展，化学工程学也逐渐由经验归纳的知识积累发展成为体系完整、方法精密、走向成熟的学科。20 世纪 50 年代诞生的化学反应工程学是化学工程学的一个重要分支，以数学模型为其重要工具，它的继续发展在很大程度上影响了化学工程学。数学模型的概念现在已经渗透到化学工程学的各个方面，并在化学工业和其他过程工业，如冶金、能源、环保、食品、生化等生产过程中，得到越来越多的应用。人类进入 21 世纪后，可持续发展、绿色化学、生态化工等新概念的应用和实现，要求有关专业的科技人员能够更自觉、更熟练地掌握和运用数学模型的概念、原理和方法。

数学模型方法在化学工程和化学工艺中大有用武之地。实际应用大致包括三步：首先是分析具体的对象，抓住关键因素，形成物理、化学、工程的模型框架；其次是用数学语言来表述已经模型化了的对象；然后是求解数学模型，并定量地分析对象和实际应用。第三步的求解和分析，已经有不少高水平的化工数学教科书出版。但是关于将物理模型转化为数学模型这方面的教材，还没有多到“百家争鸣”的程度。用化工数学模型方法来认识和分析对象时，我们会发现，由于建模对象变幻无穷，难以用通用的方法和程序来处理，成为数学模型方法应用的最大难点。因此，本书把较多的篇幅放在建立数学模型这一步上，希望对读者有所启发。

数学模型方法的基础是科学，而其运用则更多地是“艺术”。出于培养化工专业高级科技人才的需要，编写一本《化工数学模型方法》教材，以化学工程中的典型问题为实例，帮助读者理解和掌握数学建模方法的思路、步骤和技巧，编著者觉得是很有必要的。也许本书可以给读者在掌握建模的知识基础上提供一点便捷，但运用数学模型方法的“艺术”修养却不是朝夕之间可以养成的。所以，应用和从事化工数学模型工作的科技人员，需要学习、实践，学习、实践，再学习、再实践，终能练成运用数学模型的能力和技巧。

感谢中国科学院研究生院教材编审委员会和高等教育出版社的支持，本书得以和更多的读者见面。同时也感谢在中国科学院研究生院上课的学生提出的宝贵的改进意见。在过程工业的研究和开发工作中，许多人都在用数学模型方法解决具体的问题，心

得体会各有千秋，编著者也在本书文字中融汇了自己粗浅的感受，同大家交流切磋。由于水平有限，错误之处在所难免，欢迎阅读、使用、参考本书的读者不吝赐教。

毛在砂

识于北京中关村

2007 年 7 月

目　录

第 1 章

数学模型引论

1.1 什么是数学模型

为了研究真实世界中的各种各样的物体和现象，往往需要首先研究它们的缩小或简化的形式，这些通常称为模型(model)，而它们在真实世界里的原始参照物称为原型(prototype)。在化学工业和其他过程工业中，为了优化现有的单元过程、流程、系统的生产，为了设计新的过程和流程、扩大生产的规模，我们需要从定性的分析开始，逐渐深化对它们的认识，在半定量以至定量的意义上掌握其内在规律，才能科学地、有把握地进行设计、放大和优化方面的工作。为了作到这一点，必须能够有效地、科学地、艺术地运用数学模型方法。因此，在讨论具体的化工数学模型问题之前，我们需要对数学模型的一般概念和原则有所认识。

广义地讲，原型和模型互为对偶体。原型指在现实世界里的实际对象，在化学、化工领域中包括系统(system)、过程(process)、单元(unit)等。模型是将原型的部分信息提炼、简化而构造成的原型替代物。一个原型，按不同的研究目的，可以构造出许多不同的模型。例如，石油化工中重质油催化裂化反应器，可以用复杂程度不同的数学模型来表示。由于催化裂化涉及气液相反应物在固相催化剂上的催化反应，反应器的高径比较大，最简单的是活塞流理想反应器模型。考虑反应器中的物料混合、返混，反应物在横截面上的不均匀分布，反应热效应和传热、温度控制问题，反应器的模型也必须包含更多的机理，模型本身也变得越来越复杂。

模型可以分为物质模型(形象模型)和理想模型(抽象模型)两大类。前者包括直观模型、物理模型等，后者包括思维模型、符号模型、数学模型等。

1.1.1 物质模型(形象模型)

(1) 直观模型：供展览用的实物模型、建筑设计模型、军事演习的沙盘、DNA 双螺旋模型等，通常是把原型的尺寸按比例缩小或放大，使人们对事物的全貌或细观结构有

直观、清晰的了解。

(2) 物理模型:根据相似原理可以构造出对象原型的模型,通常是尺度上缩小的模型。相似的含义包括:几何相似、流体力学相似、化学反应相似等内容差别很大的内涵。物理模型不仅可以体现原型的几何形状,而且可以用来进行模拟实验,研究原型的某些规律。例如波浪水箱中的舰艇模型用来模拟波浪冲击下舰艇的航行性能,风洞中的飞机模型用来试验飞机在气流中的空气动力学特性。有些现象直接研究原型非常困难,或耗费人力和财力,更应借助于这类模型,如地震模拟装置、核爆炸反应模拟设备等。化学工程中常用的逐级放大方法,就是为了心目中的大化工流程(原型)构建一个缩小的中试和小试装置(试验模型)。应注意验证原型与模型间的相似关系,以保证模拟实验结果的可靠性。物理模型也有成本高、费时、变换实验条件不灵活等缺点。

1.1.2 理想模型(抽象模型)

(1) 思维模型:通过对原型的反复认识,积累的知识以主观经验的形式存在于人脑中,从而可以根据思维或直觉作出相应的决策。如汽车司机对方向盘的操纵,一些技艺性较强的工种(如钳工)的操作,某些领导者凭经验作决策,等等。思维模型往往有模糊性、片面性、主观性、偶然性等缺点,这样的经验在互相传播时容易失真。

(2) 符号模型:在一些约定或假设下借助于专门的符号、线条等,按一定形式组合起来描述原型。如地图、电路图、化学结构式等,具有简明、方便、目的性强等特点。

(3) 数学模型:由数字、数学符号组成的,描述对象定量规律的数学公式、图形或算法,可以按照一定的数学规律用计算机程序语言,实现对实际对象的模拟,对系统或过程进行定量分析。例如通过高速公路上交通流的模拟,可以分析车辆在路段上的分布、交通堵塞发生的原因,找出解决交通堵塞的措施。化工问题的数学模型,一般由代数方程、常微分方程和偏微分方程构成,加上系统复杂、涉及的参数众多,所以模型的求解也不是轻而易举的。但由于可以用计算机来进行求解和数值模拟,数学模型逐渐变得容易,开始表现出成本低、时间短、重复性高、容易灵活地改换模拟对象等优点。特别是近二三十年数值计算方法和计算机技术的飞速进展,数学模型的求解和结果分析变得容易和快捷,数学模型在科学技术和国民经济的发展中起到了越来越重要的作用,也逐渐成为化学工程和化工生产中不可缺少的工具。

为了体会数学模型是怎样从实际问题中抽象出来,怎样发挥其表达现象、揭示机理的作用,我们先来看两个化学工程以外的例子(姜启源,1993)。这些例子也说明,数学模型的建立和分析是紧紧地依赖于我们所掌握的数学工具的。

例 1-1 核军备竞赛。这个有趣的例子不一定是现实世界真实的描述,但通过模型的建立和分析,可以使我们容易和形象地理解这个问题。设有甲、乙两个超级大国,为了保卫自己的安全,防止"核讹诈",需要发展核军备。

甲方认为,它应持有的核武器的数目 x 与乙方的核武器数目 y 有关,图 1-1 中曲

线 $f(y)$代表甲方核武器数量的最低限度，成为甲方的安全线；若实际核武器数量超过 $f(y)$，则甲方是安全的，因此曲线 $x=f(y)$的右边是甲方的安全区。同样对乙方来说，安全线 $y=g(x)$上方是乙方的安全区。若两条曲线相交于 M 点，则在 M 点的右上方有一个双方都感到安全的双方安全区。至于两条安全线是什么样的形状，是许多政治、经济、科技、文化因素综合作用的结果，实际上很难用一条简单的曲线表示出来。

x_0 是甲方在任何时候都必须保有的核武器的最低数量，即能给对方以决定性的打击，因此也是在对方实施第一次核打击后需要保有的数量，即 $x\,p(r)>x_0$，这里 r 是乙方核武器数量与甲方数量之比，它显然与甲方核武器残存的概率 $p(r)$有关。在乙方全力对甲方进行核打击之后，若甲方保留下来的核武器数量 $xp(r)>x_0$，还能用于反击，则甲方认为是安全的。记此核武器数量为 $x_r=x_0/p(r)$，则按安全线 $x=f(y)$的定义，x_r 即为 $x=f(y)$与直线 $y=rx$ 的交点的横坐标（图 1-2）。即 $x=f(y)$与 $y=rx$ 必定相交，因此 $x=f(y)$曲线是向上弯曲的。这对乙方的 $y=g(x)$亦然。因此必定存在双方安全线的交点 M，即核军备竞赛存在平衡点核稳定区域。

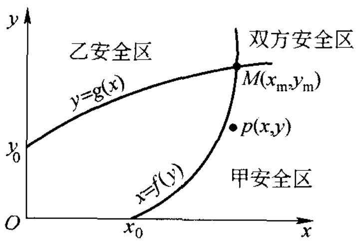

图 1-1　核军备竞赛中双方的安全线和安全区

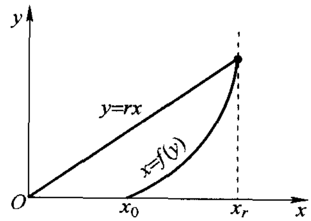

图 1-2　$x=f(y)$曲线向上弯曲与直线 $y=rx$ 相交

若甲方采取措施加固核基地，则它的安全程度上升，新的安全线 $x=f_1(y)$曲线向左移动（图 1-3），M 点在甲方安全区内部，安全感增加；而现在乙方仍在临界的安全线上，乙方将失去安全感。乙方会采取措施得到与甲方相同程度的安全感，或增加核武器数量，使乙方安全线变为 $y=g_1(x)$，使军备平衡点从 M 移至 M_2；或改进反弹道导弹系统，使安全线改变为 $y=g'(x)$，使军备平衡点从 M 移至 M'；最终有可能维持在某一双方均感安全的“中性”位置上。

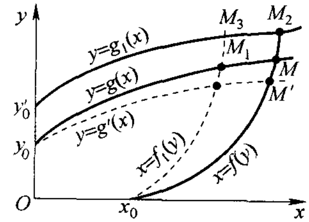

图 1-3　核军备竞赛中甲方加固核基地、发展反弹道导弹时军备平衡的变化

这个例子说明，一个对象即使很复杂，可以首先用较简单的模型把对象中的定性、半定量的成分表达出来。若表达得合理，则可以继续在此基础上发展，成为更准确、定量的模型，就能在分析对象中发挥更大的作用。

例 1-2　生物种群的弱肉强食模型。自然界的海洋

中有甲乙两种生物:甲(食用鱼)靠自然资源生存,乙(鲨鱼)则靠掠食甲为生,即弱肉强食。V. Voltera 提出了这个现象最初的模型。

设食用鱼的数量为 $x(t)$,鲨鱼的数量为 $y(t)$。则两种鱼数量变化的模型可假设为:

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=x(r-\lambda y)\\[2mm]\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}=y(-d+\mu x)\end{cases}\tag{1-1}$$

其中,$r>0$ 为食用鱼的自然增长率,常数 λ 则反映鲨鱼掠食食用鱼的能力,鲨鱼的自然死亡率为 d,常数 μ 反映食用鱼对鲨鱼的供养能力。

上述方程组的两个平衡点是$(0,0)$和(x_0,y_0),其中 $x_0=d/\mu$,$y_0=r/\lambda$。平衡点的重要特性是它的稳定性,可以用线性化的方法研究第一个平衡点的稳定性。先计算偏导数:

$$\begin{cases}f_x=r-\lambda y\\f_y=-\lambda x\\g_x=\mu y\\g_y=-d+\mu x\end{cases}\tag{1-2}$$

即在原点附近(1-1)式的线性近似式为:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f_x & f_y\\g_x & g_y\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}\tag{1-3}$$

按常系数常微分方程奇点稳定性的判据,行列式

$$q=\begin{vmatrix}f_x & f_y\\g_x & g_y\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}r & 0\\0 & -d\end{vmatrix}=-rd<0$$

故(0,0)点不稳定,一旦有微小扰动,鱼的数量会增加。此奇点在常微分方程论中称为鞍点。

要分析(x_0,y_0)点的稳定性,可以直接讨论模型方程组。从方程组消去 $\mathrm{d}t$ 得:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}=\frac{x(r-\lambda y)}{y(-d+\mu x)}\tag{1-4}$$

即:

$$\frac{(-d+\mu x)}{x}\mathrm{d}x=\frac{(r-\lambda y)}{y}\mathrm{d}y\tag{1-5}$$

积分得:

$$r\ln y-\lambda y+d\ln x-\mu x=C_1$$

或：

$$(y^r e^{-\lambda y})(x^d e^{-\mu x})=C \tag{1-6}$$

下面研究上式中 C 常数取不同正值时 x 和 y 的关系，在相平面内作图可得一组互不相交的封闭曲线（见图 1-4），具体的分析过程可参考姜启源的《数学模型》(1993，p209)。

这里用另外一种方法导出这一结果。在平衡点 $P(d/\mu,r/\lambda)$ 的附近，方程组可以展开为：

$$\begin{cases} \dot{x}\approx f_0+f_x(x-x_0)+f_y(y-y_0)=0+0+(-\lambda x_0)(y-y_0) \\ \dot{y}\approx g_0+g_x(x-x_0)+g_y(y-y_0)=0+(\mu y_0)(x-x_0)+0 \end{cases} \tag{1-7}$$

若将坐标原点从(0,0)移至(x_0,y_0)，则方程组变为以 x' 和 y' 表示的

$$\begin{cases} \dfrac{dx'}{dt}=-(\lambda x_0)y' \\ \dfrac{dy'}{dt}=(\mu y_0)x' \end{cases} \tag{1-8}$$

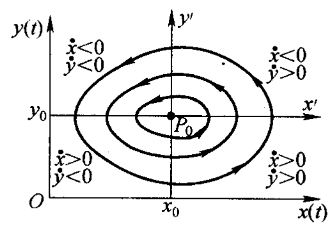

图 1-4 方程组的椭圆环轨迹

(1-8)式中的二式相除得：

$$\frac{dx'}{dy'}=-\left(\frac{\lambda x_0}{\mu y_0}\right)\frac{y'}{x'}$$

积分可得到椭圆的方程：

$$(x')^2+\left(\frac{\lambda x_0}{\mu y_0}\right)(y')^2\approx C \tag{1-9}$$

因此至少在(x_0,y_0)点的附近，相平面上的轨迹是一组同心椭圆环（图 1-4）。常微分方程论中称为中心。

封闭轨迹线对应着方程组的周期解：$x=x(t)$，$y=y(t)$。设周期为 T，利用方程组可以求出 $x=x(t)$ 和 $y=y(t)$ 在一周期内的平均值：

$$\bar{x}=\frac{1}{T}\int_0^T x(t)\mathrm{d}t=\frac{1}{T}\int_0^T \frac{1}{\mu}\left(d+\frac{\dot{y}}{y}\right)\mathrm{d}t=\frac{d}{\mu}+\frac{1}{\mu T}\ln y(t)\Big|_0^T=\frac{d}{\mu} \tag{1-10}$$

因为周期性，$y(T)=y(0)$。同样，

$$\bar{y}=\frac{r}{\lambda}$$

即：

$$\bar{x}=x_0=\frac{d}{\mu},\bar{y}=y_0=\frac{r}{\lambda} \tag{1-11}$$