



全国高等院校化工类专业规划教材
“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

化学反应工程

第三版

梁 斌 等 / 编著

 科学出版社



全国高等院校化工类专业规划教材
“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

化学反应工程

(第三版)

梁 斌 等 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是针对化学工程与工艺专业本科生的核心课程化学反应工程的课堂教学编写的,包括化学反应动力学、反应器流动特征、反应器热稳定性等化学反应工程基本内容,还包括聚合反应过程、生物反应过程、气液固三相催化反应器、膜反应器、微反应技术内容。本书注重反应工程的基础概念和定义,利用反应工程基础原理对反应过程进行分析,淡化数学模型分析求解,加强对催化、反应及相关化学基础的介绍,丰富化学反应工程的实例,增加数值求解方法的练习和例题。在编写过程中重视科学分析方法、重视反应工程发展趋势、注重基础理论教学。本书引入复杂体系实例分析和计算机求解案例,利用实际例子进行分析和引导,对涉及的相关知识尽可能引用准确的专业定义和解释。

本书可作为高等学校化学工程与工艺及相关专业本科生教材,也可供相关领域研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

化学反应工程/梁斌等编著. —3版. —北京:科学出版社,2019.2
全国高等院校化工类专业规划教材 “十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

ISBN 978-7-03-060486-6

I. ①化… II. ①梁… III. ①化学反应工程-高等学校-教材 IV. ①TQ03

中国版本图书馆CIP数据核字(2019)第016274号

责任编辑:陈雅娴 付林林 / 责任校对:杨 赛

责任印制:师艳茹 / 封面设计:黄华斌

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京市密东印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2003年11月第 一 版 开本:787×1092 1/16

2010年2月第 二 版 印张:19 1/2

2019年2月第 三 版 字数:474 000

2019年2月第十六次印刷

定价:59.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

《全国高等院校化工类专业规划教材》 编写委员会

顾 问 金 涌 戴千策

主 编 王静康

副主编 冯亚青 于建国 李伯耿 曲景平

陈建峰 梁 斌 山红红 胡华强

编 委 (按姓名汉语拼音排序)

鲍晓军 陈 砺 陈建峰 陈卫航 崔 鹏

冯亚青 管国锋 何潮洪 胡华强 黄玉东

计伟荣 纪红兵 乐清华 李伯耿 李文秀

李小年 梁 斌 刘永忠 刘有智 骆广生

马连湘 马晓迅 曲景平 山红红 孙克宁

汤吉彦 王静康 王延吉 谢在库 于建国

张凤宝 钟 宏 钟 秦 周小华 朱家骅

总 序

近十几年是国内外工程教育研究与实践的一个快速发展期,尤其是国内工程教育改革,从教育部立项重大专项对工程教育进行专门研究与探索,到开展工程教育认证,再到2016年6月我国成为《华盛顿协议》正式成员,我国的工程教育正向国际化、多元化、产学研一体化推进。在工程教育改革的浪潮中,我国的化工高等教育取得了一系列显著的成果,从各级教学成果奖中化工类专业的获奖项目占比可见一斑。尽管如此,在当前国家推动创新驱动发展等一系列重大战略背景下,工程学科及相应行业对人才培养又提出更高要求,新一轮的“新工科”研究与实践活动已经启动,在此深化工程教育改革的良好契机下,每位化工人都应积极思考,我们的高等化工工程教育如何顺势推进专业改革,进一步提升人才培养质量。

专业教育改革成果很重要的一部分是要落实到课程教学中,而教材是课程教学的重要载体,因此,建设适应新形势的优秀教材也是教学改革的重要组成部分。为此,科学出版社联合教育部高等学校化工类专业教学指导委员会以及国内部分院校,组建了《全国高等院校化工类专业规划教材》编写委员会(以下简称“编委会”),共同研讨新形势下专业教材建设改革。编委会成员均参与了所在院校近年来化工类专业的教学改革,对改革动向及发展趋势有很好的把握,同时经过多次编委会会议讨论,大家集各院校改革成果之所长,对建设突出工程案例特色的系列教材达成了共识。在教材中引入工程案例,目的是阐述学科的方法论,训练工程思维,搭建连接理论与实践的桥梁,这与工程教育改革要培养工程师的思想是一致的。

工程素养的培养是一项系统工程,需要学科内外基础知识和专业知识的系统搭建。为此,编委会对国内外高等学校化工类专业的教学体系进行了细致研究,确定了系列教材建设计划,统筹考虑化工类专业基础课程和核心专业课程的覆盖度。对专业基础课教材的确定,基本参照国内多数院校的课程设置,符合当前的教学实际,同时对各教材之间内容衔接的科学性、合理性和可行性进行了整体设计。对核心专业课教材的确定,在立足当前各院校教学实际的基础上,充分考虑了学科发展和国家战略及产业发展对专业人才培养的新需求,以发挥教材内容更新对新时期人才培养质量提升的支撑作用。

将工程案例引入课程和教材,是本系列教材的创新探索。这也是一项系统工程,因为实际工程复杂多变,而教学需要从复杂问题中抽离出其规律及本质,做到举一反三。如何让改编的案例既体现工程复杂性和系统性,又符合认知和教学规律,需要编写者解放思想、改变观念,既要突破已有教材设计思路和模式的束缚,又能谨慎下笔。对此,系列教材的编写者进行了有益的尝试。在不同分册中,读者将看到不同的案例编写模式。学科不断发展,工程案例也不断推陈出新。本系列教材在给任课教师提供课程教学素材的同时,更希望能给任课教师以启发,希望任课教师在组织课程教学过程中,积极尝试新的教学模式,不断积累案例教学经验,把提高化工类专业学生工程素养作为一项长期的使命。

教学改革需要一代代教师坚持不懈地努力，需要不断探索、总结和反思，希望本系列教材能够给各院校教师以借鉴和启迪，切实推动化工高等教育质量不断迈上新台阶。在针对化工类专业构建一套体系、内容和形式较为新颖的教材目标指引下，我们组建了一支强大的编委会队伍，为推进这项工作，大家群策群力，积极分享教育教学改革成功经验和前瞻性思考，在此我代表编委会对各位委员及参与各分册编写的所有教师致以衷心的感谢。同时，也希望以本系列教材建设为契机，以编委会为平台，加强化工类高等学校本科人才培养、师资培训、课程建设、教材及教学资源建设等交流与合作，携手共创化工的美好明天。

王静康

中国工程院院士

2017年7月

第三版前言

作为一门化工专业基础学科，化学反应工程一直是化学工程与工艺专业本科生的核心课程，也是国内外化工专业教育中的重要内容。化学反应工程把通过物料衡算模型、三传一反动力学模型描述复杂的化学反应器行为作为课程的基础思想，主要包括均相化学反应动力学、非均相催化反应动力学、非均相反应动力学、多孔介质传质、均相反应器、非均相反应器、反应器流动特征、热稳定性等基本内容。化学反应工程已经形成了较为稳定的知识体系和教学逻辑结构，国内外也出版了很多知名教材。例如，H. Scott Fogler 的 *Elements of Chemical Reaction Engineering* 已经出版到第 5 版，国内出版的化学反应工程教材有 20 多种，如李绍芬先生的《化学反应工程》已经出版到第 3 版。各教材之间除章节组织和逻辑处理有差别外，最大的差别在于例证分析不同。

本书于 2003 年初版，2010 年再版，并先后被评为普通高等教育“十一五”国家级规划教材、“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材。结合化学反应工程近年来的发展以及教学手段的不断进步，我们认为有必要进行教材的提炼和改进，增加一些新的例证，介绍一些新的方法，于是在第二版出版 9 年后，我们修订完善了第三版教材。

化学反应工程学科是基于数学模型求解描述化学反应器的宏观特性和动态行为。随着计算机技术不断发展，计算能力成倍提高，对微分方程的求解更多地应用数值方法。根据多年教学实践，我们对第二版教材进行了认真总结，并进行了相应的修订。本次修订增加了部分数值求解方法介绍，还增加了部分软件使用的内容。教学内容强调从基础知识、规律分析和计算方法三个层次进行介绍，以便学生能够全面掌握化学反应工程的核心内容。

在第二版的基础上，我们对书稿结构进行了一定的调整，将第二版中的反应器稳定性和其他相关章节进行了合并，以增强内容的连贯性。针对数学模型求解过程，引入了计算机辅助求解方法，补充了复杂数学求解过程的逻辑框架图。在反应过程实例中，增加了近年来学术上和工业过程中逐渐成熟的膜反应器和微反应器内容。另外，还引入了课堂上的分析案例和图例，以方便学生理解和教师演示。本书还链接了数字教学资源，对部分知识点进行补充讲解，以帮助學生进行课外学习。本书链接的数字教学资源来源于教育部高等学校化工类专业教学指导委员会主办的全国“互联网+化学反应工程”课模设计大赛，作品由各高校参赛队伍提供。

本书重点对最基础的反应动力学、传质模型及典型反应器进行阐述，引用更多的体系实例分析，并灵活应用计算机进行计算。同时注意到，现代计算机技术和人工智能技术中，有从以微分方程精确轨迹描述为基础的数学模型向基于统计规律的逻辑运算发展的趋势，这些发展有可能影响今后人们对工程问题的认识，我们拭目以待。这也为今后工程学科的发展提出了新的挑战。

本书是以 2010 年科学出版社出版的由梁斌、段天平、唐盛伟编著的《化学反应工程》(第二版)为基础,由梁斌、唐盛伟、袁绍军、唐思扬共同合作,并总结第二版的使用情况进行修订的。本次修订分工如下:第 1、2 章由梁斌统稿,第 3~5 章由唐思扬统稿,唐盛伟补充编写了 6.5 节内容,袁绍军补充编写了 6.4 节内容。在此感谢第一版及第二版的作者,以及在编写过程中提供支持的老师和同学。同时,感谢科学出版社各位编辑对本书提出的有益的修改意见。

尽管本书进行了案例更新和部分内容补充,但仅以我们在四川大学的教学实践经验为基础,难免带有片面理解甚至是错误的解读。由于教学所面对的学生群体在不同学校具有很大的差异,每位教师在表达方面也有不同习惯,因此需要相关教师在使用本书的过程中进一步加工和提升。同时,欢迎各位读者提出宝贵意见,以帮助我们进一步改进。

作者

2018 年 9 月

第二版前言

化学反应工程是一门专门研究化学反应器或包含化学反应过程的化工单元的学科,是化学工程学科中重要的且必不可少的分支,也是新世纪化工专业高等教育中的一门核心课程。

从 1970 年以后,化学反应工程作为化工专业学生的一门必修课程进入了大学课堂。从 20 世纪 80 年代开始,国内出版了多种化学反应工程教材,如四川大学化工学院王建华先生主编的《化学反应工程》、天津大学李绍芬先生编写的《化学与催化反应工程》、华东理工大学朱炳辰先生编写的《无机化工反应工程》、浙江大学陈甘棠先生编写的《化学反应工程》等,是我国大学课堂上出现的较早的化学反应工程教材。随着化学反应工程学科及相关技术的发展,以及大学教育的发展,化学反应工程方面的教材也在不断修改和完善,很多教材经过了多次再版和修订。

化学反应工程是一门复杂的工程科学,其精髓是利用精确的数学模型,求解复杂的传质、传热及化学反应过程的偶合现象。2003 年,我们参考了国内外很多化学反应工程教材,特别是王建华先生编写的《化学反应工程》、H. Scott Fogler 编写的 *Elements of Chemical Reaction Engineering*,在此基础上编写了《化学反应工程》一书,并由科学出版社出版,在出版后的 5 年中共印刷 4 次,近 20 所大学(据不完全统计)使用。

经过几年的教学实践,我们发现第一版中还有很多地方值得完善和改进。同时,根据现有本科生情况和本科化工专业教学的要求,在本书被列为普通高等教育“十一五”国家级规划教材后,我们对第一版的教学执行情况进行了认真的总结。在第一版基础上,我们将课堂上成功的例子和图例添加到修改稿中,试图让学生更加容易理解,教师更加容易演示。在修订过程中,反复对第一版中的一些表述进行推敲,力图做到语言和基本概念更加准确。

我们认为,化学反应工程的核心内容包括三种典型反应器所涉及的质量、能量衡算方法,相关的流动基本特征和反应速率问题,本学科的复杂性在于这些方面的问题相互影响,需要同时考虑。因此,本书对典型反应器的反应和相关特征进行了重点描述,从物理模型入手,引导学生建立相关的数学模型,并利用相关的数学和计算手段求解反应器模型。

本书是以 2003 年科学出版社出版的由梁斌、段天平、傅红梅、罗康碧共同编写的《化学反应工程》作为基础,由梁斌、段天平、唐盛伟三人共同合作,并总结第一版书的使用情况进行修订的。在此感谢第一版书作者以及在第一版书形成过程中提供支持和帮助的老师 and 同学。同时,感谢科学出版社各位编辑对本书提出的有益的修改意见。

尽管我们在主观上力图做到编写简单明了,并试图用自己的语言描述对化学反应工程专业问题的理解,但仅以我们在四川大学的教学实践经验为基础,难免带有片面的理解甚至是错误的解读。由于教学所面对的学生群体在不同学校具有很大的差异,每位老师在表达方面又有不

同的习惯，因此需要相关教师在使用本书的过程中进一步提升和加工。同时，我们也热切希望各位同仁提出宝贵意见，以帮助我们进一步提高教学质量和改进教材，使我们在教学中和以后的修订中不断完善。

作者

2009年12月8日

第一版前言

考察实际反应器中传递现象对化学及催化动力学影响,以数学模型方法分析、预测反应器的操作特性,为反应器设计、放大与操作控制提供科学依据,是化学反应工程学科发展的源动力,迄今已取得了丰硕的研究成果。工业反应器内存在的复杂流动现象、质量和热量传递,与反应速率耦合,产生了工程中的非线性动力学问题。反应与分离过程结合,是强化反应过程的有效手段,许多新型和微型化反应器的设计采用了这种结构,应用于相关高新技术领域,其特殊的反应过程和复杂的反应器结构为数值模拟带来了新的困难。应用反应工程原理和方法,研究化学工程及其相关领域的科学问题,反应工程学科得到了不断拓宽和延伸发展,成为工程科学中很有活力的学科分支。

自反应工程作为我国化工类学生重要课程开设以来,各校在 20 世纪 80 年代初,参考国外同类教材编写了很多种版本的有代表性的教材,四川大学化工学院王建华教授主编的《化学反应工程》教材便是其中之一。不同的专业方向对反应工程学科的应用和研究各有侧重,如华东理工大学朱炳辰教授最早的《无机化工反应工程》侧重介绍了无机化工过程中的反应工程问题,浙江大学陈甘棠教授的《化学反应工程》及针对很多特定化工领域的反应工程教材,无疑为反应工程的教学与研究奠定了很好的基础。

在本教材的编写中,我们以现有的《化学反应工程》、《反应器理论分析》及国外相关教材为基础,致力于培养学生的分析问题能力和工程实际知识,减少教材在模型分析解上的过程描述,加强对学生建立模型的训练。在教材中增加有工业应用背景的实例分析和例题,从分析和解决工程问题的过程中让学生掌握基本原理和应用其分析并解决问题的方法。适当介绍微观结构分析和反应微观动力学与反应动力学模型的关系,阐述微观反应机理研究同宏观动力学实验的联系,使教学内容尽量同科学研究和工程实践同步。在教材的编写和结构上,加强同其他课程的结合,使教学安排更加合理,教学效率进一步提高。

本书由梁斌负责全书的统稿和修订,并编写第 1、2 章;段天平作前期策划,编写第 3、5、7 章,参与了第 8 章第 1、2 节的修订;傅红梅编写第 4、6 章;罗康碧编写第 8 章。教育部面向 21 世纪化工高等教育改革课题,为本书的编写提供了面向 21 世纪的机遇。科学出版社对本书的出版给予了长期的关心和支持。作者还要感谢四川大学化工系历任领导对反应工程课程建设的重视。

李成岳教授对本书给予了热情鼓励。王建华教授以多年从事反应工程教学和科研的体验,提出了反应工程要体现数学模型分析,在分析综合的基础上进行反应过程开发的教材建设指导思想。刘栋昌教授仔细阅读了初稿,发现了多个不当的地方。

欢迎使用本书的师生、广大科技工作者提出意见,推动反应工程教学和科研的发展。

作者

2003 年 10 月于四川大学

目 录

总序	
第三版前言	
第二版前言	
第一版前言	
绪论	1
第 1 章 化学反应动力学	4
1.1 均相反应动力学	4
1.1.1 化学反应速率	4
1.1.2 反应速率方程	6
1.1.3 阿伦尼乌斯方程	9
1.1.4 复杂反应体系的反应速率	11
1.1.5 反应机理与速率方程	15
1.1.6 反应速率方程的积分形式	16
1.2 气固催化反应动力学	20
1.2.1 固体催化剂	20
1.2.2 固体催化剂的孔结构	21
1.2.3 气固催化反应的特征	23
1.2.4 化学吸附	24
1.2.5 表面催化反应速率	27
习题	31
第 2 章 均相反应器内流体流动与混合	34
2.1 三种典型反应器	35
2.2 典型反应器的体积计算	38
2.2.1 反应器计算的基本方程	38
2.2.2 间歇过程	38
2.2.3 平推流反应器	39
2.2.4 全混流反应器	41
2.2.5 多釜串联的全混流反应器	41
2.2.6 循环操作的平推流反应器	42
2.3 流动模型与反应器推动力、反应选择性	44
2.3.1 流动模型与反应器推动力	44

2.3.2	流动模型与反应选择性	52
2.4	非理想流动	59
2.4.1	停留时间分布	61
2.4.2	理想流动反应器的停留时间分布	62
2.4.3	非理想流动反应器的停留时间分布	66
2.4.4	停留时间分布的实验测定	70
2.4.5	停留时间分布的特征	74
2.4.6	停留时间分布函数与反应器模型	80
	习题	93
第3章	非均相反应与传递	98
3.1	气固催化反应过程的控制步骤和速率方程	99
3.2	气体与催化剂外表面间的传质和传热	103
3.2.1	传质和传热速率	103
3.2.2	颗粒表面滞流层传递对气固催化反应过程的影响	104
3.3	气体在催化剂颗粒内的扩散	107
3.3.1	孔内扩散	107
3.3.2	粒内扩散	110
3.4	内扩散过程与化学反应	112
3.4.1	等温情况下催化剂颗粒内反应的有效因子	112
3.4.2	非等温催化剂的有效因子	119
3.4.3	内扩散对气固催化反应过程的影响	121
3.4.4	内、外扩散影响分析	123
3.5	气固催化反应过程的数据处理	124
3.5.1	实验室反应器	124
3.5.2	气固催化反应动力学模型的建立	129
3.6	流固非催化反应	130
3.6.1	流固非催化反应模型	130
3.6.2	缩芯模型	131
3.6.3	无固体产物层缩芯模型	135
3.7	流体-流体反应	138
3.7.1	流体-流体相际传质(无化学反应)	139
3.7.2	气液反应宏观动力学	140
	习题	146
第4章	非等温反应器设计	150
4.1	反应器能量平衡	151
4.1.1	反应系统能量	153
4.1.2	热量交换速率	153
4.1.3	功耗	154
4.1.4	摩尔流率	155
4.1.5	热焓	155

4.1.6 反应热的计算	156
4.2 稳态连续流动反应器能量衡算	157
4.2.1 全混流反应器	159
4.2.2 绝热管式反应器	164
4.2.3 换热式管式反应器	169
4.3 平衡转化率	170
4.4 均相全混流反应器的热稳定性	173
4.4.1 反应器的定态与稳定性	174
4.4.2 全混流反应器的多重定态	175
4.4.3 定态点的稳定性分析	177
4.4.4 操作参数对多重定态的影响	178
4.4.5 线性微分方程的稳定性	181
4.4.6 全混流反应器的瞬态特性	183
习题	188
第5章 气固催化反应器	191
5.1 固定床反应器设计基础	191
5.1.1 固定床内的传递现象	192
5.1.2 固定床反应器的数学模型	202
5.2 绝热固定床反应器	207
5.2.1 气固催化反应的最佳操作温度	208
5.2.2 单段绝热固定床反应器	209
5.2.3 多段绝热固定床反应器	211
5.3 换热式固定床反应器	222
5.4 固体催化剂床层的稳定性	225
5.4.1 单颗粒催化剂的多重定态	225
5.4.2 单颗粒催化剂的稳定性	226
5.4.3 固定床催化反应器的稳定性	228
5.5 流化床反应器	230
5.5.1 流化床反应器设计基础	231
5.5.2 流化床中的质、热传递	236
5.5.3 流化床反应器数学模型及设计计算	239
5.6 移动床反应器	244
习题	245
第6章 其他反应过程	249
6.1 聚合反应过程	249
6.1.1 自由基聚合反应步骤	250
6.1.2 聚合反应器	254
6.2 生物反应过程	257
6.2.1 酶反应基础	258
6.2.2 Michaelis-Menten 型酶反应与间歇反应器设计	262

6.2.3 细胞发酵及反应器	263
6.3 气液固三相催化反应器	271
6.3.1 浆态反应器	271
6.3.2 滴流床反应器	275
6.4 膜反应技术	277
6.4.1 膜反应器	277
6.4.2 无机膜与催化膜反应器	278
6.4.3 催化膜反应器设计方程	280
6.4.4 催化膜反应器的反应与传质模型	283
6.5 微反应技术	285
6.5.1 微通道反应器的特性	287
6.5.2 适宜在微通道反应器中进行的化学反应	289
6.5.3 微通道反应器类型	290
6.5.4 微通道反应器的制备	293
参考文献	295

绪 论

人类对化学反应过程的认识经历了漫长的过程，在不断失败的教训与成功的经验中总结出了很多与化学反应相关的经验，如炼丹、染料、制药等一些与化学过程相关的技艺。随着化学理论的主体框架相继建立，各种化学工业过程才在无机化学、有机化学、分析化学和物理化学的基础上发展起来。20 世纪初对化学品加工的大量需求带动了相关工程学科发展，以研究化工单元过程的共性为目标的化学工程学在 20 世纪 20 年代形成，并在以后的几十年中得到了飞速的发展。化学工程学成为现代化学工业发展的基础，被誉为 20 世纪十大工业革命之一的流化催化裂化(fluidized catalytic cracking, FCC)无疑是化学工程学科研究的一大杰作。

在 20 世纪初期和中期，化学工程学解决工程问题大都基于相似放大理论与实验归纳方法，在很多化工单元过程(如流体输送、传热、干燥、蒸馏等物理过程)的应用中取得了很大的成功。相似放大理论或量纲分析方法适用于比较简单的线性系统，从理论上讲，单元设备的很多特征与特征参数成正比，可以直接使用相似放大的方法。例如，对于一个水管系统，管道流速为 1m/s 时，每秒输送的水量为 1m³；如果要设计一个输送 10m³ 水量的管道系统，只需保持管道系统流速一样为 1m/s，将管道系统的截面积扩大 10 倍即可。

但是，在对化工过程的核心设备——反应器的研究中遇到了很多困难，化学反应的非线性特征使反应过程的研究变得更加复杂。实际反应器中，传质、传热与化学反应并存，不能单纯依靠化学动力学的知识来解决反应器的放大等相关问题。相似放大的方法也不能简单地应用于化学反应器的模拟和设计。例如，在实验室中用一个 500mL 的烧瓶作为反应器对某吸热反应进行小试研究，物料通过反应器壁面与油浴进行换热以满足反应的供热需求。如果将反应器扩大到 500L 进行生产，按相似放大的方法，反应器体积增加 1000 倍，期望反应量也增加 1000 倍。但是传热面积只能扩大 100 倍，使热量传递受到影响，从而可能影响反应进行的温度，反应就很难按预计的条件进行。另一种情况，若该反应为放热反应，当反应器体积扩大 1000 倍时，传热面积小而不能有效移走反应热，导致反应系统热量积累使反应物系温度升高。一般而言，温度每升高 10℃，反应速率可能会随之增加 2~4 倍。热量的积累使得温度越来越高、反应速率越来越快。这种情况的出现不仅影响产品的质量，甚至可能产生热爆炸而导致严重的安全问题。

Damköhler 在其著作[*Der Chemie-Ingenieur*, 3, 430(1937)]中首先谈到扩散、流动与传递对反应收率的影响；1947 年，Hougen 和 Watson 在 *Chemical Process Principles* 中阐述了动力学与催化过程；由于各种条件的限制，化学工程学科中以反应过程为主要研究对象的分支学科——化学反应工程，直到 20 世纪 50 年代才逐渐形成。

1957 年，在荷兰阿姆斯特丹召开的第一届欧洲反应工程大会是反应工程学科形成的标志，

会上提出的返混与停留时间分布、反应体系相内和相间的传质传热、反应器的稳定性、微观混合效应等观点奠定了反应工程学科的基础。在 20 世纪 60 年代到 70 年代, 反应工程在世界范围内得到了广泛关注, 得益于反应动力学研究的成果和传递过程领域的发展, 反应工程工作者致力于从理论模型求解来解决反应器的的问题。反应工程的研究成果逐渐被引入大学课堂, 1969 年 Aris 编写的 *Elementary Chemical Reactor Analysis*、1970 年 Smith 编写的 *Chemical Engineering Kinetics*、1972 年 Levenspiel 编写的 *Chemical Reaction Engineering*、1979 年 Froment 和 Bischoff 编写的 *Chemical Reactor Analysis and Design* 等都是有一些代表性的教材。

直到 20 世纪 70 年代末, 化学反应工程的研究成果才开始大量地介绍到国内。华东理工大学的陈敏恒教授、天津大学的李绍芬教授、浙江大学的陈甘棠教授、四川大学的王建华教授等是国内最早从事反应工程教育的学者。20 世纪 80 年代以后, 国内从事反应工程学科研究的队伍迅速扩大, 对反应工程问题的研究已经渗透到各个化工领域, 与世界研究水平之间的距离逐渐缩小, 不同版本的教科书和各种各样的专著不断出版。反应工程成为我国化工专业的一门非常重要的专业课程。

反应工程的精髓是通过模型方法解决反应器的开发放大、结构选型、尺寸设计、操作优化等实际问题, 在 20 世纪 50 年代到 70 年代的一段时间里, 由于计算能力的限制, 很多研究都集中在对现有反应过程简化模型的分析求解上。根据反应体系的特征, 简化模型的分析求解对反应体系的定性分析和变化规律的研究有非常重要的意义, 其分析结果为反应体系的设计和操作提供了很多原则性的指导, 过去的很多教科书便注重对学生进行此基本原理的传授。但反应工程学科本质是建立在实验基础上的, 其动力学基础模型、传质传热模型、流体流动模型等必须通过实验建立, 模型中引用的参数、误差函数只有通过实验数据的回归才能确定。由于很多模型都是高度非线性的微分方程, 很多参数只是统计意义上的估值, 实验的微小误差足以使模型的分析解面目全非, 因此, 对实际体系的分析要比简单的模型求解复杂得多。

随着电子计算机的飞速发展, 价廉的个人计算机也可以完成大量的工程计算, 一般微分方程的求解在计算机上已经不是难事, 复杂的数学模型可以通过高速的计算得到数值解, 在反应工程研究中已不需要刻意追求简化模型来求出分析解, 而研究的重心转移到了如何针对实际反应体系寻找更精确的模型。模型求解的突破, 使应用多维模型描述真实反应体系成为可能, 更接近实际反应条件的不规则边界条件被引入模型求解, 很多在分析求解中只能用平均值的参数可以根据体系的非均匀性引入分布函数, 模型对实际体系的描述更加准确, 研究结果更加可靠。

化学反应速率模型是化学反应工程的核心模型, 建立在实验数据归纳基础上的纯经验模型在描述很多临界条件下的反应行为时常出现较大的偏差。近年来, 化学动力学和催化理论的基础研究成果为寻找准确机理模型提供了很多方便。诺贝尔化学奖得主李远哲教授在分子动力学方面的工作, 为人们展示了寻求分子反应过程细节的可能性。化学家们已经可以对很多催化过程进行模拟, 全过程地描述分子在反应过程中的价键变化过程, 通过对反应过程的分子设计来指导实现对复杂分子的合成。对反应机理的研究已不纯粹是根据中间产物进行猜测, 现代实验手段和价键理论可以直接观察并详细描述分子反应过程。现有的反应动力学模型更多地建立在对反应过程机理的深入研究上, 其应用结果更能反映反应体系的本质规律。

20 世纪 80 年代以来, 工程中的非线性问题研究成果对反应工程学科的研究产生了重大影响。长期以来, 对多孔介质中流固催化及流固非催化过程的研究只能靠固相的平均特性模