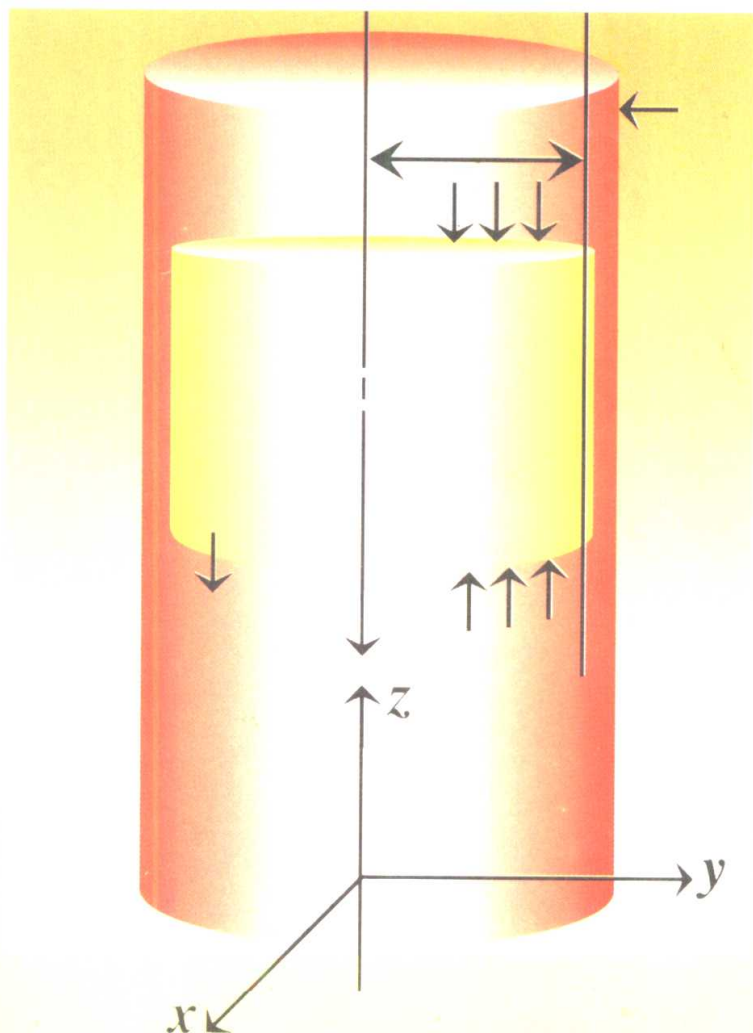


化工数学模型

江体乾 著



化 工 数 学 模 型

江体乾 著

中国石化出版社

内 容 提 要

本书首先对建模过程中的基础知识和技巧进行了介绍,然后密切结合化工实际建议了一套数学模型的建模方法和步骤,并以实例予以说明。本书适合化学工程与工艺、应用化学、石油采输、聚合物加工、生物工程和生物医药工程、应用数学等各专业的大学高年级学生,特别是各类研究生阅读,对上述各专业毕业后的工程师们,尤其是年青的科研人员,也是一本必读的参考教材。

图书在版编目(CIP)数据

化工数学模型/江体乾著.-北京:中国石化出版社,1999

ISBN 7-80043-777-9

I. 化… II. 江… III. 化学工业-数学模型
IV. TQ018

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 02970 号

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)64241850

金剑照排厂排版

北京京丰印刷厂印刷

新华书店北京发行所经销

*

787×1092 毫米 32 开本 6.625 印张 148 千字 印 1—1500

1999 年 5 月第 1 版 1999 年 5 月第 1 次印刷

定价:15.00 元

前 言

《化工数学模型》是在作者应邀为华东理工大学应用数学系毕业班开设的同名课程讲稿基础上改写而成。该课为 40 学时，已经给三届毕业班学生讲授过。该课的目的是培养学生的抽象思维能力，以便能面对实际的化工问题，建立起恰当的微分方程(组)，运用所学的解题方法，求解这些方程式(组)。

实际上化工类研究人员对本书的内容也是十分需要的，国内或国外的化工类学术期刊上几乎每期必有数学模型出现。这是化工学科发展的大势所趋，世纪之交的潮流所向。化工类大学生，尤其是各专业研究生必须迎接这个挑战。因此，与其说本书是为应用数学学生而写，不如说是为化工类的学生更确切些。

考虑到目前大学本科的知识结构，本书的前 4 章均是一些基础性的知识与技巧的补充，而从第 5 章起才接触到数学模型，其中第 8 章与第 9 章则为不同兴趣的读者选读而写的，只有第 5、6、7 章以及第 10 章才是化工中“三传一反”的内容。但由于至今建立数学模型还不完全是“科学”，虽然本书介绍和推荐了若干方法，但其中还含有不少“艺术”成分，所以须要随时留意揣摩，借鉴前人的经验和思路以及洞察力，才能有所成就。

本书的读者对象为化学工程与工艺、应用化学、石油采输、聚合物加工、生物工程和生物医药工程、应用数学各专

业的大学高年级学生，尤其是各专业研究生。本书内容应为上述人员的必读教材，以补其知识结构的缺欠。对上述各类专业毕业后的工程师们，也是一本自学指南书，尤其是年轻的科研人员更是必备的参考资料。

本书的编写原则为“少而精”，不追求长篇阔论，尽量举例说明所推荐的建模步骤如何用于实践，读者或许可以从中悟出别人的解题思路 and “实践-抽象-实践”的技巧和方法。

本书编写过程中，得到各方面的支持和帮助，我的学生宋道云、翁连进、金浩、周纪宁等帮助打印部分手稿。对曾经帮助过作者的女士们和先生们致以衷心的感谢！特别对本书参考过的专著或论文的作者们致以深深谢意。

本书系利用业余时间写就，缺点在所难免，如蒙读者指出缺点和错误，则作者预致谢忱并在再版时予以改正。

本书完稿之年，适逢香港回归祖国，由此引发作者对我国饱受屈辱的近百年史的回忆。愿以本书的出版，作为小小的庆祝。

江 体 乾

1997 年 7 月 1 日于

上 海

目 录

第 1 章 数学模型导论	1
1.1 什么是数学模型	1
1.1.1 形象模型	1
1.1.2 数学模型	1
1.2 化工数学模型的分类	2
1.2.1 经验模型	3
1.2.2 随机模型	3
1.2.3 传递过程模型	4
1.3 化工数学模型的建模方法通论	5
1.3.1 通则	5
1.3.2 实例研究	5
1.4 为什么要建立数学模型	9
符号说明	10
参考文献	11
第 2 章 微观动量、热量、质量守恒	12
2.1 前言	12
2.2 连续性方程	12
2.3 动量衡算与运动方程	14
2.3.1 用应力表示的运动方程	14
2.3.2 应力与形变速率之间的关系	18
2.3.3 Navier-Stokes 方程	19
2.3.4 非牛顿流体的推广	20
2.4 微分能量衡算方程	22
2.4.1 对流体微元加入的热速率	22
2.4.2 表面应力对微元体所作功率	24
2.4.3 能量方程的特定形式	26

2.5 质量传递微分方程	27
2.5.1 传质微分方程的推导	27
2.5.2 传质微分方程的特定形式	29
符号说明	30
参考文献	31
第3章 润滑近似及其他	32
3.1 前言	32
3.2 直观认识	32
3.3 量级分析	34
3.4 润滑方程	38
3.5 涂布分析	39
3.6 润滑近似法的用例	41
3.7 结语和评论	45
符号说明	46
参考文献	47
第4章 积分平均	48
4.1 前言	48
4.2 时间平均	48
4.2.1 时均化的连续性方程	50
4.2.2 运动方程的时均化	51
4.2.3 能量方程的时均化	54
4.2.4 质量守恒方程时均化	54
4.2.5 均匀湍流	57
4.3 面积平均	59
4.4 局部体积平均	61
符号说明	62
参考文献	62
第5章 传递过程模型建立方法	63
5.1 前言	63
5.2 过程描述	63

5.3 初步分析	64
5.3.1 第一步——确定模拟水平	64
5.3.2 第二步——考虑简化假设	65
5.4 模型开发	71
5.4.1 写出描述方程	71
5.4.2 方程无因次化	73
符号说明	81
参考文献	82
第6章 经验模型——黑匣子模型	83
6.1 前言	83
6.2 因次论分析	83
6.3 化工经验模型建模举例	88
符号说明	92
参考文献	93
第7章 传递过程模型	94
7.1 前言	94
7.2 流动模型	94
7.2.1 密封件在管道中的流动	94
7.2.2 大气污染	98
7.2.3 试井分析	103
7.3 热、质传递模型	110
7.3.1 太阳池	110
7.3.2 冷冻干燥	113
7.3.3 非牛顿流体薄膜流中热质传递模型	118
7.4 伴有化学反应的传递模型	123
7.4.1 甲烷-空气燃料电池	123
7.4.2 伴有二级不可逆反应的幂律流体薄膜流 中的化学吸收	129
符号说明	134
参考文献	135

第 8 章 生物、医学工程中的模型	137
8.1 前言	137
8.2 血液流动的数学模型	137
8.3 血液氧合反应器模型	141
8.4 血液低密度脂蛋白净化过程中过量净化剂 分离——间歇吸附模型	146
8.5 包裹酶反应器	150
符号说明	159
参考文献	160
第 9 章 聚合物加工中的模型	162
9.1 前言	162
9.2 薄膜吹塑	162
9.3 纤维纺丝	169
9.4 压延	175
9.5 挤出	179
9.6 导线涂布	183
符号说明	188
参考文献	188
第 10 章 随机模型	189
10.1 前言	189
10.2 基本定义	190
10.3 停留时间分布的研究	194
10.4 N 个串联的理想混合器模型	195
10.5 随机性流动系统模型	198
符号说明	200
参考文献	201

第1章 数学模型导论

1.1 什么是数学模型

数学模型一词在现代化工文献上已是屡见不鲜了,那么什么是数学模型呢?要回答这个问题,必须先从“模型”说起。

1.1.1 形象模型

不管是通常,还是化学工程学科中,最容易理解的是形象模型。比如,地球仪就是地球的缩小。上海浦东开发初期,首先能见到的是浦东规划的模型,几年以后才能看到建设起来的现代化浦东新区。可以说,形象模型是现实世界的缩放。尽管仅仅是缩放,也是很有用处的。比方说化工厂的设计、管路布置、设备的安装位置、标高等都可以按一定比例缩小的模型来表达,省去平、立面图,对复杂的管路车间尤为合适,这就叫做模型设计。

1.1.2 数学模型

数学模型则与上述不同,它是对过程或现象简化后质的描述。它需要经过真实世界的检验,如图1-1所示。

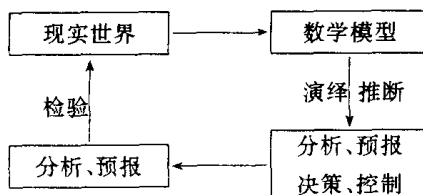


图 1-1 数学模型框图

由上可见，数学模型“源于现实，高于现实”。和通常的艺术“源于生活，高于生活”一样，是一种抽象和提高。艺术可以鞭策丑恶，指导生活，数学模型也是一种抽象，同样它也可以指导现实，指导工程放大。如果要给数学模型下个定义的话，那么，我们可以说：数学模型是对现实世界某指定现象或过程，为特定目的做了一些必要的简化与假设，运用适当的数学工具得到的一个数学结构。

对化学工程学科来说，它经历了本世纪 20 年代到 50 年代的经验时期，其后接踵而来的计算机时期以及 80 年代开始的数学模型时期。现在的化学工程期刊中每一期都有数学模型的文章发表，可见，数学模型的需要正与日俱增，越来越显得重要。

对化学工程来说，上述数学模型定义中最后提到的一个数学结构，广义上讲可以是一个公式或者一个数据表或图(如湿空气 I-X 图)；但狭义上讲，所谓数学模型指的是一个解析表达式或方程组(代数或微分方程组)。

从上述数学模型的定义中我们可以体会到人们对问题的洞察力与想象力的重要性，否则，无从简化、假设和抽象。大科学家爱因斯坦曾说过：“想象力比知识更重要，因为知识是有限的，而想象力概括着世界的一切，推动着进步，并且是知识的源泉。”

本书的重点是建立数学模型，因此，培养想象力和抽象能力自然就成为本书的着眼点。

1.2 化工数学模型的分类

数学模型可以不同的标准(如变量、时间、了解程度等等)进行分类。所以说，对化工数学模型进行分类既困难又多少

带有点任意性。

为了全面起见，本书还是将化工中所用的数学模型分为经验模型、随机模型与传递过程模型三大类，现分述如下：

1.2.1 经验模型

化工中最低级的数学模型是经验模型，因为它仅仅是经验数据的关联。在所论变量之间的函数形式是任意的，虽然这种可能比另一种更便于应用，典型例子如幂级数、指数、多项式等。所选函数的系数是由曲线拟合后求取的。

通常，任何形式函数的项数越多，其与实验数据的符合越好；不过，对实用目的来说，宁愿要一个简单的经验关联式。必须指出，不论其最终的形式如何，经验常数不可能有明确的物理意义。换句话说，经验模型不可能有理论价值。

经验关联式如果应用于原试验的同一个操作过程是很有价值的。换句话说，这种模型用于原试验之外的操作是不合适的。

虽然这种模型不是本书的主题，鉴于它在化工中量大面广，本书将在第6章中予以讨论。

1.2.2 随机模型

不少操作过程由于它过分复杂，不允许我们全部了解其机理，虽然作为基础的现象可以被判别出来，但仍然需要一些实验提供系统特性的附加信息。在此情况下，可以通过显示响应技术得到输入量和输出量之间的经验关联。将示踪物质加到进入系统的物质中去，其响应可以在出口流中记录。但是请注意，就流型而论得到的实验信息是不完全的，它仅仅能给出时间尺度。既然如此，就要假设一个流动模型并且将预测的响应曲线与一个真实系统相对比。这样一来，就探索出一个真实流型的很好的近似(参见本书第10章内容)。

随机模型的变化是复杂的，并且以不同参数的数目为特征，比如在分散模型、串联反应釜、返混模型等中可以看到。这种随机模型在研究反应器(填料的、流态化的等)以及血液循环系统中特别有用。

1.2.3 传递过程模型

一般说来，一个特殊操作的系统变量之间的任何定量关系对模拟此过程或预测其行为都是没有价值的。只有数学模型可以信赖，哪怕超出实验范围亦可。因为化学工程及其相关的科学的理论基础，是建立在守恒和附加的本构关系之上的。

以动量、能量和质量守恒为出发点的基本原理对任何给定的系统，构成了数学描述的基础。

一个完全的描述还需要一些物料特性的信息，这些信息由本构方程来提供。本构关系严格地说，也仅是一种理论的假设，这些表达式的形式由实验或经验认定。

基本方程既可以用于分子水平，也可以用于连续介质水平。传递过程的知识对分子水平是受限制的，在将分子水平分析的结果转化到过程中重要的量上去时，会碰到相当大的困难。但从原理上说，对过程从分子水平上了解还是很希望的，因为它能增长对所论过程的知识，特别是可以借以预测传递系数。

为便于工程分析，常假设为连续介质，如此则相互依赖的变量成为空间以及时间的连续函数。如上所述，传质系数理论上可以从分子理论加以预测。但是大多数情况下，此系数还是从过程中得到的。

前已指出，像这样的描述不可能构成一个数学模型。对所研究过程的深入了解，对判定现象中各量孰重孰轻，特别

是数学等价是必须的。在这个基础上，基本方程式可因舍弃所有不相干的项数而得到简化，如此，就构成了给定问题的数学模型。对数学量处理方法的改进，增加了解析解或数值解的机遇。

简而言之，直接根据物理或化学基本原理建立的模型，虽然其参数或系数是未知的，须由实验数据估计，但此类模型与化学工程直接相关联，称为传递过程模型，是一种确定性模型，也是本书的重点所在(参见第7章和第8章)。

1.3 化工数学模型的建模方法通论

1.3.1 通则

包括一个以上因变量的物理场模型的建模原则：

- (1) 先深入了解此物理场的充分内涵；
- (2) 选择基本变量，依据是守恒原则和物理的性质；
- (3) 选择特征变量，即这些变量便于测量，又与基本变量有明确的关系；
- (4) 应用守恒原理以列出描述方程(或称基本模型方程)；
- (5) 考查方程是否满足此物理场的初始及边界条件；
- (6) 满足即是数学模型，否则重选基本变量。

以上通则可以框图形式列出，如图1-2所示。

1.3.2 实例研究

现选化学工程中最简单的问

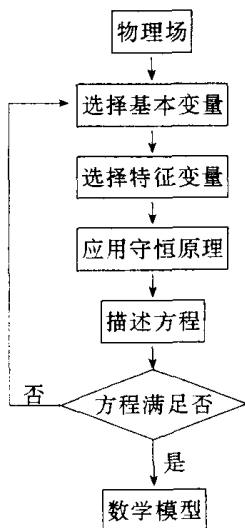


图 1-2 建模通则框图

题，作一建模实例研究。

例 1-1 圆柱形水箱的加水和排(放)水问题，是化工中最常见、最简单的问题。

设进口流量 q_i 与出口流量 q (m^3/s) 均为常数。

本问题的基本变量是质量。流体密度 ρ (kg/m^3) 为常量，要解决的问题是水位高度 h (m) 与质量的关系。

取限定容积为水箱，如图 1-3 所示。任何时刻 t 时，质量为 $\rho Ah(t)$ ，在时间间隔 $[t+\Delta t-t]$ 内，为 $\rho q_i \Delta t$ 和 $\rho q \Delta t$ 。此处， A 为水箱的截面积 (m^2)。

按照质量守恒定律，得变量之间关系为：

$$\rho Ah(t+\Delta t) - \rho Ah(t) = \rho q_i \Delta t - \rho q \Delta t$$

亦即
$$h(t+\Delta t) - h(t) = \frac{1}{A} (q_i - q) \Delta t$$

以上限制条件为： Δt 时间内 q_i 与 q 均不随时间而变化，否则写成积分形式，即

$$\rho Ah(t_2) - \rho Ah(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \rho q_i(t) dt - \int_{t_1}^{t_2} \rho q(t) dt$$

所以
$$h(t_2) = h(t_1) + \frac{1}{A} \int_{t_1}^{t_2} [q_i(t) - q(t)] dt$$

引用中值定理：

$$h(t+\Delta t) - h(t) = \frac{1}{A} (\overline{q_i - q}) \Delta t$$

当 $\Delta t \rightarrow 0$ 时，得

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{A} (q_i - q) \quad (1-1)$$

或者写为

$$\frac{d}{dt} \rho Ah = \rho (q_i - q) \quad (1-2)$$

以上就是 q_i 、 q 均为常量的简单物理场的数学模型。

但是，只要稍微改变一下条件，比如，水箱几何形状改为三角形，式(1-1)或式(1-2)就不能满足，需另加局部关系式。

考虑如图 1-4 所示的三角剖面水槽，其宽为 B ，长为 L ，其他符号同前。

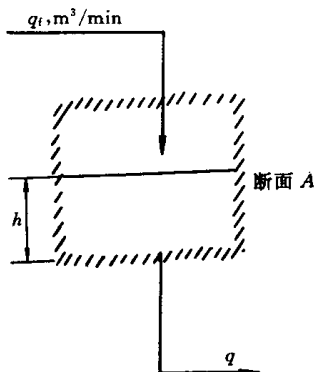


图 1-3 限定容积图

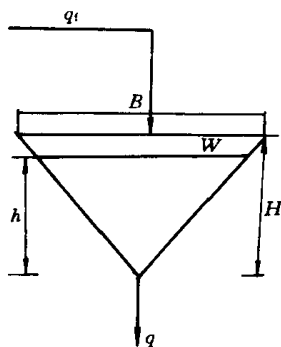


图 1-4 三角形水槽

按上述步骤可得：

$$\rho V(t_2) = \rho V(t_1) + \rho \int_{t_1}^{t_2} [q_i(t) - q(t)] dt$$

或者
$$\frac{dV}{dt} = q_i - q \quad (1-3)$$

式(1-3)是描述方程。其中尚不知道 V 、 h 、 t 的具体函数关系。因此，尚不能说明问题，必须补充局部关系式。

由图可知，

$$V(t) = \left(\frac{hW}{2} \right) L = \frac{BLh^2}{2H} \quad (1-4)$$

将式(1-4)代入式(1-3)，可得

$$\frac{dh^2}{dt} = \frac{2H}{BL}(q_t - q)$$

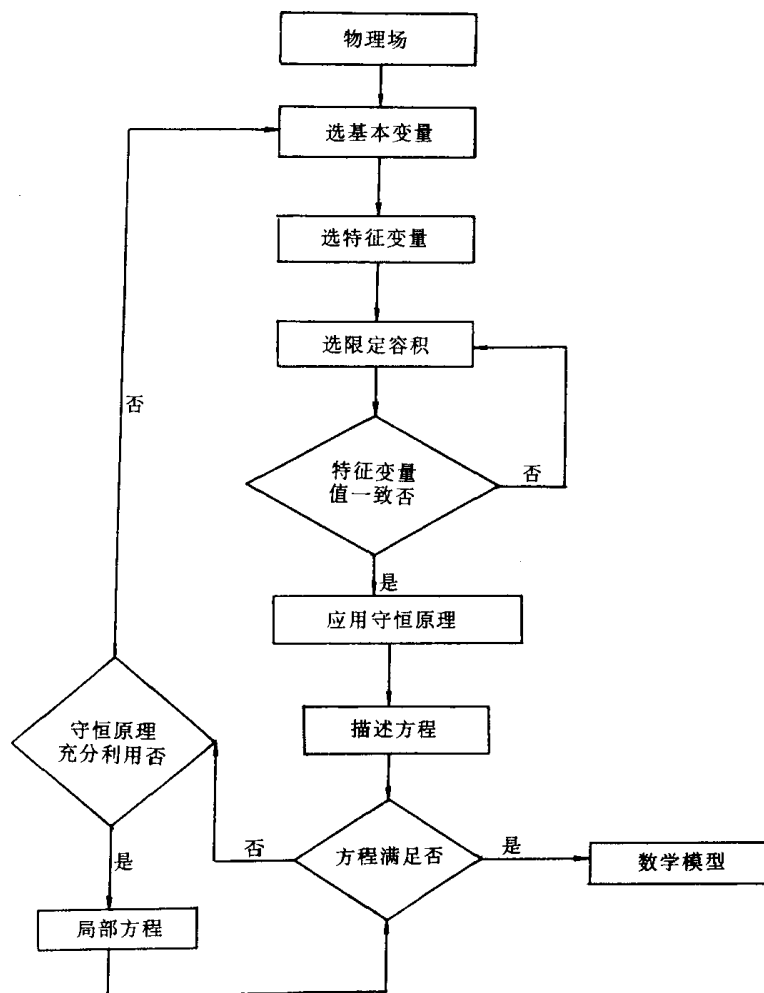


图 1-5 修正过的框图

假设 q_t 与 q 都等于常数，则有下列积分：