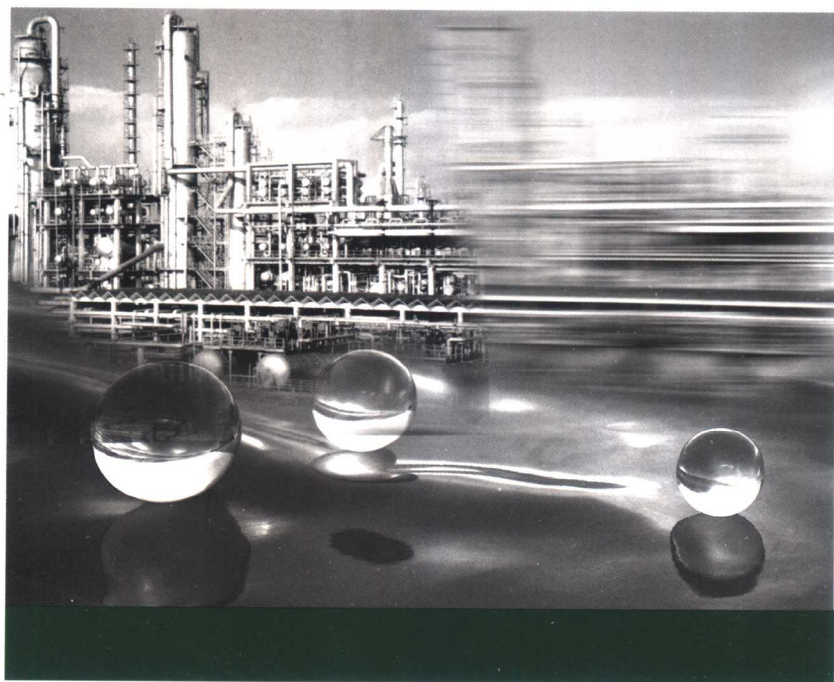


罗雄麟 著

化工过程动态学



Chemical Industry Press



化学工业出版社
工业装备与信息工程出版中心

化工过程动态学

罗雄麟 著



化学工业出版社
工业装备与信息工程出版中心

· 北 京 ·

(京) 新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

化工过程动态学/罗雄麟著. —北京: 化学工业出版社, 2005. 3
ISBN 7-5025-6693-7

I. 化… II. 罗… III. 化工过程-动态-建立模型
IV. TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 014548 号

化工过程动态学

罗雄麟 著

责任编辑: 刘 哲 周国庆 辛 田

责任校对: 洪雅姝

封面设计: 于 兵

*

化 学 工 业 出 版 社 出版发行
工业装备与信息工程出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64982530

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

化学工业出版社印刷厂印装

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 13 字数 300 千字

2005 年 4 月第 1 版 2005 年 4 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-6693-7/TQ·2164

定 价: 30.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

化工过程动态学 (Chemical Process Dynamics), 通过机理动态建模, 研究化工过程动态行为, 是控制系统, 特别是多变量控制系统分析设计与运行的基础, 其重要性至少表现在以下几个方面。

(1) 了解和掌握正在设计的化工过程的动态行为, 为设计控制系统提供依据。特别是对于非线性程度较高的化工过程, 可以大范围内研究其动态行为。

(2) 对化工过程进行稳定性分析, 为控制方案的确定及控制系统的设计提供依据。

(3) 模型可以在计算机上运行 (仿真), 从而可以用于研究先进控制系统和实时优化系统的可行性, 在实验室仿真成功后再用于实际生产过程, 从而提高了在工业装置上实施的安全性, 并通过离线仿真优化控制系统参数, 从而优化控制性能。

(4) 机理模型一般为非线性的, 经线性化后得到的线性模型, 可以作为多变量控制如模型预测控制 (以模型为基础的) 的控制模型, 为多变量控制系统的设计和分析奠定基础。

(5) 机理模型可以作为预测控制等先进控制的预测值, 从而可以结合机理模型与线性预测控制, 提高多变量控制系统的性能。

化工过程动态学从化工过程的机理分析出发, 列出 (推导出) 对象的动态模型, 通过求解动态模型, 找出输入变量 (包括控制变量、可测干扰和不可测干扰) 和输出变量 (包括状态变量) 之间的内在关系。

20 多年来, 化工过程动态学在控制系统的分析、设计中发挥了重要作用, 但存在的建模困难的问题还没能完全解决。就目前来看, 动态机理建模及化工过程动态学的研究工作主要由过程控制的工程技术人员开展, 他们对化工过程机理的分析不够深入和透彻, 建立的动态模型有时不够全面和正确。而掌握化工过程机理的化学工程技术人员对动态建模没有迫切感, 一般对控制系统要求的动态模型也不太了解。正因为如此, 从事控制系统研究和应用的工程技术人员, 以生产测试和系统辨识的方法获取控制所需要的线性动态模型或非线性动态模型 (以神经网络模型为代表)。

对于已有化工生产过程, 如果生产测试时输入变量被充分激励, 数据的信噪比较高, 这样得到的数学模型还是可行的。但如果生产过程中生产技术人员不希望生产测试对生产过程产生强烈的扰动, 以影响安全生产和产品质量, 因而不允许输入变量大幅度改变, 辨识所得到的模型精度就值得怀疑了。更严重的是, 有些生产过程, 如聚丙烯和聚乙烯生产装置, 聚合反应器开环不稳定而不敢对生产过程进行测试, 也就不可能通过生产测试数据来辨识模型, 而采用正常生产时的输入输出数据进行辨识, 其模型精度会很差。

对于还没有任何生产过程可以借鉴的新开发的化工过程, 根本没有生产测试和系统辨识建模的可能, 机理建模及其动态分析则是不可逾越的。

作者曾在化工领域学习、教学、科研和生产等 20 年, 之后逐渐转为从事控制理论和化工过程控制的教学和科研工作, 熟悉化工过程, 掌握化学工程理论和专业知识, 同时熟知化

工动态模型在过程控制中的重要作用，深感对化工过程动态学深入研究的责任。本书是作者多年来从事研究生教学、动态机理建模与分析科研工作的体会和总结。本书的突出特点是既有基本化工过程模型的原理介绍，更注重所论述模型的深度和实用性。

全书共分五章。第一章为概论，介绍模型分类、机理模型建立的普遍方法、线性化方法和分布参数模型的集总化处理方法。第二章为流体流动过程模型化与分析，对气体储罐和液体储罐介绍之后，着重于流体混合与压缩机喘振模型。第三章为传热过程动态学，对几种换热器的动态模型均有介绍，对换热网络动态模型进行了重点介绍。第四章为分离过程动态学，对板式精馏塔的平衡级和非平衡级动态模型均有讲述。第五章为化学反应过程动态学，在介绍理想反应器模型的基础上，重点介绍了聚丙烯反应器、乙炔加氢反应器和催化裂化反应再生系统的动态模型与分析，特别是对反应器的稳定性方面进行了具体分析。

本书的完成和出版，首先感谢作者的三位恩师，他们是李松年教授、林世雄教授和袁璞教授，感谢作者的两位同事左信和杜殿林，感谢石油大学（北京）自动化研究所已经毕业和在读的研究生们，主要有涂飞、青红英、佟世文、王传芳、解增忠、何仁初和王小艳等。

作者

二〇〇四年十月于北京

目 录

第一章 概论	1
第一节 模型的分类	1
一、稳态模型和动态模型	1
二、机理模型和“黑箱模型”	2
三、集中参数模型和分布参数模型	2
四、线性模型与非线性模型	3
五、过程单元模型和系统结构模型	3
六、各种功能的模型	4
第二节 建立数学模型的假设条件	4
第三节 机理模型的建立方法	5
一、对流（流体主体流动）	6
二、相内扩散	7
三、相间传递	8
四、源	8
五、动态方程	9
第四节 线性化处理	9
第五节 分布参数模型的集总化处理	13
一、空间离散化	13
二、示例	14
第二章 流体流动过程	17
第一节 流体流动	17
一、流体流动基础	17
二、流体流动基本方程	18
第二节 液体储罐	20
一、液相流单个储罐	20
二、液相流并联储罐	21
三、液相流串联储罐	22
第三节 气体储罐	22
第四节 混合过程	23
一、温度和液位	24
二、浓度和液位	25
三、温度、浓度和液位	27
第五节 离心压缩系统的喘振模型	29

一、离心式压缩机结构及工作原理	30
二、压缩系统不稳定性	30
三、离心式压缩系统喘振模型的建立	32
四、模型仿真	35
第三章 传热过程	37
第一节 直接接触式换热器	37
第二节 夹套式换热器	39
一、间歇操作	39
二、夹套式换热器（集中参数模型）	39
第三节 管壳式换热器	40
一、动态机理模型	40
二、模型简化	42
三、模型的线性化处理	44
四、实例分析	46
五、多管程多壳程换热器	47
六、多管程多壳程换热器仿真模型库	53
第四节 套管式换热器	54
一、并流操作	54
二、逆流操作	57
第五节 换热网络	59
一、换热网络优化设计	59
二、换热网络动态数学模型	61
三、管壳式换热器仿真模型库在复杂换热网络中的应用	64
第四章 分离过程	69
第一节 板式吸收塔	69
一、平衡级稳态模型	69
二、非平衡级稳态模型	69
三、平衡级动态模型	70
第二节 板式精馏塔	71
一、板式精馏塔模型概述	71
二、精馏塔数学模型建立的基本方法	72
三、平衡级动态数学模型的建立	72
四、非平衡级动态模型	93
五、模型降阶	98
第三节 板式萃取塔	99
一、萃取过程中的传质	100
二、萃取的分类及动态数学模型	100
第四节 填料吸收塔	105

第五节 工业乙烯精馏塔·····	106
一、乙烯精馏塔工艺特点·····	106
二、乙烯精馏塔动态数学模型·····	107
第五章 化学反应过程·····	114
第一节 全混流理想反应器·····	114
一、等温反应·····	114
二、非等温反应·····	115
第二节 平推流理想反应器·····	116
一、等温反应·····	116
二、非等温反应·····	117
第三节 聚丙烯反应器·····	117
一、聚丙烯工艺简介·····	118
二、丙烯聚合反应机理·····	120
三、聚丙烯反应器的动态机理建模·····	120
四、聚丙烯反应器的线性化模型·····	122
五、聚丙烯反应器的动态分析·····	125
六、聚丙烯反应器稳定性分析·····	127
第四节 乙炔加氢反应器模型·····	131
一、乙炔加氢反应器工艺简介·····	131
二、反应机理·····	133
三、乙炔反应器动态机理数学模型·····	135
四、乙炔加氢反应器系统动态性能分析·····	144
第五节 工业催化裂化装置反应再生系统·····	148
一、动态机理模型的建立·····	148
二、系统动态特性分析·····	160
三、系统稳定性分析·····	171
四、系统稳定性分析综合仿真实验·····	189
参考文献·····	192

第一章 概 论

化工过程控制系统的分析与设计依赖于动态数学模型及其动态响应规律（动态特性），针对单入单出系统的单回路 PID 控制系统是如此，最近 20 多年来多变量控制系统在化工过程的普遍应用，更加强了数学模型的重要性。因为多变量系统中，各输入变量对各输出变量的影响一般是互相耦合的，即一个输入变量影响到多个输出变量，同样，一个输出变量受多个输入变量的影响。

化工过程动态数学模型可以从两个方法来获得，一种是通过生产测试得到生产装置输入变量和输出变量的时间序列数据，单次连续测试时间应当大于动态响应时间（包括时间纯滞后），化工过程动态响应时间一般在 0.5~8h 不等，单次生产测试时间一般在数小时至 1 天。对测试获得的生产数据采用系统辨识或动态神经网络训练方法可以分别获得线性和非线性动态数学模型，这些模型均为“黑箱”模型，模型是采用数学方法对输入输出数据分析计算得到的。当然，生产测试和辨识（或训练）之前，对具体过程的了解是必要的。

对于一些开环不稳定系统，如聚丙烯和聚乙烯反应器，为强放热、严重非线性和开环不稳定系统，不允许实施生产测试。

另一种建模方法是从过程对象的工艺机理出发，列出（或推导出）对象的动态机理模型。这种方法要求建模者掌握化学工程和自动控制两方面的基础理论与专门知识，对具体建模过程的工艺和控制方案有比较深入的掌握。

生产测试建模方法通用，容易形成通用化方法和通用化软件，但所建模型只能针对当时测试时的生产工况，工况变化太大，模型需要重新测试和辨识，模型更不可能在多个同类生产上移植。机理建模方法也是通用的，因为它依据的就是质量与能量衡算，所建模型本质上是一些代数或微分方程，针对当时工况的数据具体化即可得到控制所需要的数学模型。所建立的数学模型在不同工况进行数据的具体化即可得到相应工况下的机理模型。

第一节 模型的分类

由分析的角度不同，可以将数学模型分成稳态模型和动态模型、机理模型和“黑箱模型”、集中参数模型和分布参数模型、线性模型与非线性模型、过程单元模型和系统结构模型等不同的类型。

一、稳态模型和动态模型

所有系统都存在于时间-空间的连续体中，可由空间和时间构成系统的独立变量。在系统边界所确定的闭域内，与系统有关的所有因变量都可表达成时间变量和空间变量的函数。根据系统中各因变量与时间、空间的关系，可以把数学模型分成动态和稳态模型、集中参数和分布参数模型。

按是否考虑变量与时间有关，可将数学模型分为稳态和动态两类。

工业装置在运行过程中有两种状态。一种是稳态，此时系统没有受到任何外来干扰，

同时被控变量设定值保持不变,因而被控变量也不会随时间变化,整个系统处于稳定平衡的工况。另一种是动态,当系统受到外来干扰的影响或者在改变了设定值后,原来的定常态遭到破坏,系统的输入输出变量相继发生变化,被控变量将偏离原稳态值而随时间变化,这时系统处于动态。经过一段时间后,如果系统是稳定的,被控变量将会重新达到一个新的稳态值(针对开环控制系统而言,所谓开环控制系统是指控制系统不形成闭合回路,事实上就是控制系统不起作用的情况)或达到新设定值(针对闭环控制系统而言,所谓闭环控制系统是指控制系统形成闭合回路,控制系统在起作用),系统又恢复到稳态平衡工况。根据系统开环时从一个稳态到达另一个稳态的动态行为(或称动态特性、过渡过程、动态响应和瞬态响应)可以设计合适的控制系统,研究系统闭环时的动态特性可以评价控制系统的工作质量。

工艺研究更多的是关心系统的稳态变化,而工艺操作和控制研究则同时关心系统的动态行为。从哲学观点来看,事物运动是绝对的,静止是相对的,因此用静态关系处理事物所得的稳态数学模型只是一种特例。

稳态模型和动态模型两类数学模型的作用各不相同,其中稳态模型用于生产装置设计、分析和离线优化(操作员参考优化操作条件,人工改变控制系统的设定值实现优化操作,是否改变设定值由操作员和工程技术人员决定),而动态模型则用于先进控制与在线实时优化(优化条件作为控制系统的设定值,而不经操作员或工程技术人员确认)。

二、机理模型和“黑箱模型”

建立被控过程的数学模型,一般选择机理分析法和“黑箱”实验法两种方法中的一种。通过对系统内部机理的充分理解,用演绎法建立机理模型,而模型参数则可以通过实验室实验数据或实测工业数据确定。另一种建模方法是,不管系统内部机制,而只利用所测量到的系统输入、输出工业数据建立系统的“黑箱模型”,也称为输入输出模型。

机理模型适用范围宽,但较复杂,求解较困难,主要用于过程分析和离线优化,目前还不适于直接用于过程的在线控制和操作实时优化,并且从机理出发建立数学模型要求对过程有比较深入的认识和理解,同时应当有较好的数学基础。“黑箱模型”形式简单,求解方便,可以直接用于在线控制和实时优化等,但模型外推性差,并且建立“黑箱模型”需要对工业装置进行大量的测试工作,将会对生产操作产生较大的干扰。

三、集中参数模型和分布参数模型

集中参数模型所研究的系统中各变量与空间位置无关,而把各变量看作在整个系统中是均一的,如全混流反应器中浓度和温度等变量,焦化过程中焦炭塔内温度和产品分布等,催化裂化过程中床层再生器内再生温度和再生剂含碳量等,都可以当作集中参数变量,所建立的数学模型为集中参数模型。对于稳态模型,集中参数模型为代数方程;对于动态模型,则为常微分方程。

分布参数模型所研究的系统中至少有一个变量与空间位置有关,如管式反应器中反应温度和转化率都与反应器位置有关,催化裂化装置提升管反应器中反应温度、气体产率、汽油产率、柴油产率、催化剂含碳量和催化剂活性等变量都是提升管高度的函数。所建立的模型对于稳态模型为空间自变量的常微分方程,对于动态模型为空间、时间自变量的偏微分方程。

根据空间变量数的多少, 又可以把分布参数模型分为一维和多维模型。一维模型是对实际过程的一种简化处理, 如催化裂化装置提升管反应器, 一般按平推流反应器近似, 忽略径向上的分布差异而只考虑轴向分布。

四、线性模型与非线性模型

线性模型中变量及其导数都是一次的, 并且该变量的系数是常数值, 不满足这些条件的模型则为非线性模型。

精馏、吸收和萃取等分离过程的简单模型有时表现为线性模型, 而与反应器有关的模型, 只要是非等温过程则为非线性模型。

线性模型的求解是比较容易的, 稳态线性模型求解前不需要作任何简化处理。但作为控制模型所依托的虽然是控制理论, 但线性理论仍然是工程上应用最广泛的, 因此, 非线性模型要用于控制系统, 一般应进行线性化处理, 把非线性模型简化为线性模型。所以线性化处理一般是针对应用于控制工程的动态非线性模型的。

线性化处理一般采用 Taylor 级数在某稳态平衡点附近一个小的邻域内展开, 略去高次项后就可以得到线性化模型。

五、过程单元模型和系统结构模型

无论是机理模型还是“黑箱模型”, 都是表示操作单元内各变量之间的关系, 即用于描述过程单元的, 称为过程单元模型。另一类模型用于描述过程单元间的逻辑关系, 称为系统结构模型。这类模型与过程结构本身在结构性上是一致的, 描述的是过程系统的结构, 表示过程单元间的连接关系及系统变量间的因果关系。过程单元模型与系统结构模型共同构成了系统模型。目前系统模型的开发还只限于稳态流程模型, 即系统模型中过程单元模型为稳态模型。

图论是数学的一个分支。用有向图描述过程系统的结构, 可以使复杂的过程系统中各个单元之间的关系以清晰的、易于理解的方式表达出来。图论的着眼点不在于组成系统的基本过程单元的细节, 而在于系统结构本身, 着重于系统变量间的关系。

图是由节点和连接节点的弧组成的, 如图 1-1-1 所示, 其中用图的节点 $x_1 \sim x_3$ 表示系统中的过程单元, 而单元间物料和能量流用有向弧 $S_1 \sim S_6$ 表示, 这样得到的一个有向图就作为相应过程系统的模型, 从而可以用图论的方法研究整个过程系统结构。

有向图可以描述过程系统的结构, 而图在数学上又可用矩阵表示, 因此, 描述图的矩阵称为结构矩阵。按照图的节点和弧与矩阵的行和列的不同对应关系, 可以分为:

- (1) 节点相邻矩阵, 节点分别与矩阵的行和列对应, 表示节点之间的关系;
- (2) 弧相邻矩阵, 弧分别与矩阵的行和列对应, 表示弧之间的关系;
- (3) 关联矩阵, 又称为流路矩阵, 节点与矩阵的行、弧与矩阵的列对应, 表示节点与弧之间的关系。

例如, 图 1-1-1 可以用关联矩阵表示为

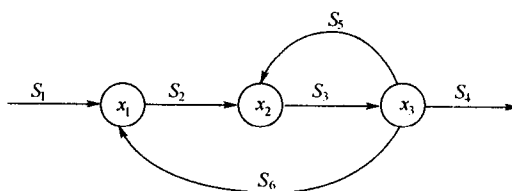


图 1-1-1 有向图示意图

$$S = \begin{matrix} & S_1 & S_2 & S_3 & S_4 & S_5 & S_6 \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

矩阵中各元素含义为

$$s_{i,j} = \begin{cases} -1 & \text{弧 } S_j \text{ 发源于节点 } x_i \\ 1 & \text{弧 } S_j \text{ 止于节点 } x_i \\ 0 & \text{弧 } S_j \text{ 与节点 } x_i \text{ 无关} \end{cases}$$

用计算机处理矩阵是很方便的，并且可以识别过程的结构，如各种形式的循环流等。如催化裂化装置中回炼油和回炼油浆、主分馏塔一中循环回流、稳定汽油一部分至吸收塔顶作为吸收剂等都是循环流。

六、各种功能的模型

根据系统模型的功能，可以将数学模型分为模拟模型、设计模型和优化模型。模拟模型可直接用于模拟计算。模拟模型与设计规定方程一起构成设计模型。模拟模型与目标函数和约束方程一起可以构成优化模型。但设计模型和优化模型目前还只限于稳态过程，也就是说，它们采用的模拟模型是稳态流程模型。上述模型分类之间的关系，以及相应的数学形式，可以归纳成表 1-1-1。

表 1-1-1 过程数学模型的类型

系统模型	模拟模型	单元模型	机理模型	集中参数模型		稳 态	动 态
						代数方程	常微分方程
				分布参数模型	一维	常微分方程	偏微分方程
			多维		偏微分方程	偏微分方程	
		黑箱模型		代数方程	常微分方程		
	系统结构模型					图(矩阵)	
	设计模型	模拟模型+设计规定方程					
优化模型	模拟模型+目标函数和约束方程						

第二节 建立数学模型的假设条件

生产过程中各单元设备中进行流动、传质和传热等物理过程，对于反应器，还存在化学反应。这些物理和化学过程又是相互影响着的。所以，炼油过程既是一个多参数的复杂系统，又是具有强交联作用的系统。要真正弄清楚实际过程的原型存在许多实际困难，因此借助数学模型来描述实际过程，使其能在一定的条件范围内定量地反映过程的实际效果。所以，在实际建立炼油过程的数学模型时并不着意于模型的真实性和等效性，而是着重于模型的等效性。例如，建立催化裂化装置反应-再生系统的数学模型，数学模型不可能完全地体现实际过程的真实情况，但希望原料性质和原料处理量等操作条件发生变化时由模型计算的产品分

布与实际过程一致，至于提升管中的气固流化情况、床层再生器中温度分布的细节等就不一定去描述了。

数学模型不可能完全反映实际生产过程，在建立数学模型之前，必须先提出一些假设条件，这样不至于使数学模型过于复杂。复杂的数学模型不但求解困难，而且不一定就能反映实际生产过程，实践证明，过于复杂的数学模型有时可能更加不准确。提出的假设条件，一方面应尽可能地与实际生产过程接近，假设条件最终应得到模拟结果的验证，模拟结果与实际生产结果不一致，首先应考虑假设条件是否正确；另一方面，假设条件的严格程度往往代表了将来所建立数学模型的简繁程度。在正确的假设条件下，条件越严格，所建立的模型越简单；反之亦然。提出假设条件应遵循以下两个条件。

(1) 可分离性。炼油过程是极其复杂的，反应器、分离设备和换热设备等互相连接在一起，各变量之间都是互相关联的。在对研究对象进行分析和建立模型时，总是假定绝大部分的相互关系是可以忽略的，即把对象作为一个隔离体来进行研究。

(2) 选择性。在所有可能的相互作用之中，与研究目的有关的仅是其中的一部分。例如，在建立催化裂化装置提升管反应器数学模型时，一般可以忽略随再生烟气跑损的催化剂和每天补充的催化剂对再生催化剂活性的影响。

第三节 机理模型的建立方法

建模过程实质上就是将质量衡算和能量衡算进行具体化，这时可能用到化学反应动力学及动力学常数、相平衡及相平衡常数和传质、传热速率方程用传递系数等。

由过程机理建立数学模型的方法需要足够和可靠的化学工程和工艺知识，才能导出正确的原始代数或微分方程式。这些方程式的推导基于质量衡算和能量衡算关系。对于化学反应过程，列出每种物料的质量衡算关系时，还应考虑反应中生成和消耗的物料。在列写能量衡算方程式时，应考虑化学反应热效应。衡算关系表示成一般的形式为

$$[\text{输入速率}] - [\text{输出速率}] + [\text{源}] = [\text{累积速率}] \quad (1-3-1)$$

其中“源”主要指化学反应过程带来的影响，对于质量衡算，该项与反应速率有关；对于能量衡算，该项为反应热效应。“输入速率”和“输出速率”包括对流动（即流体的主体流动）和扩散（包括相内扩散和相间传递）。流体相内或相间存在的“浓差”，是扩散的推动力。这里所谓的“浓差”包括密度差、温度差和混合物组分组成差等。“累积速率”为变量对时间的导数，稳态建模时该项为 0；而动态建模时，该项一般不为 0，但不考虑某变量动态响应时，即认为该变量与其他变量相比，其动态变化过程极快，可以按拟稳态处理，这时“累积速率”近似为 0。

单元操作中，可以把流体性质分成以下四类：

- (1) 质量，以密度 ρ 表示；
- (2) 组分，以各组分组成 C_i 表示；
- (3) 热量，以 $(\rho c_p T)$ 表示，其中 c_p 为流体比热容， T 为流体温度，一般情况下， ρ 、 c_p 为常数；
- (4) 动量，以 (ρu) 表示，其中 u 为流体速度。

这四类性质在质量衡算和能量衡算中表现出相似性，为了简单起见，可以统一用符号 Γ

表示。

一、对流（流体主体流动）

流体速度为 u ，对于性质 Γ (ρ 、 C_i 、 $\rho c_p T$ 、 ρu)，遵循流体连续性方程

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla(\Gamma u) = 0 \quad (1-3-2)$$

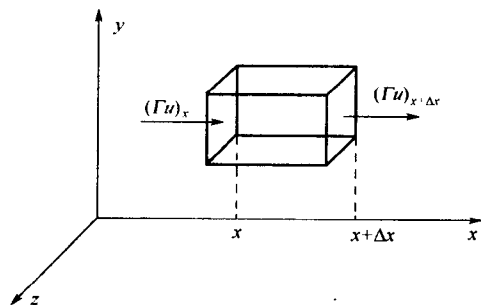
其中， ∇ 为散度，定义式为

$$\nabla u = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}$$

连续性方程可以写成

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{\partial(\Gamma u)_x}{\partial x} + \frac{\partial(\Gamma u)_y}{\partial y} + \frac{\partial(\Gamma u)_z}{\partial z} = 0 \quad (1-3-3)$$

可以从下图出发推导连续性方程（从三个不同空间方向）。



$$\begin{aligned} [\text{输入率}] - [\text{输出率}] &= (\Gamma u \Delta y \Delta z)_x - (\Gamma u \Delta y \Delta z)_{x+\Delta x} \\ &\quad + (\Gamma u \Delta x \Delta z)_y - (\Gamma u \Delta x \Delta z)_{y+\Delta y} \\ &\quad + (\Gamma u \Delta x \Delta y)_z - (\Gamma u \Delta x \Delta y)_{z+\Delta z} \\ &= -\Delta(\Gamma u)_x \Delta y \Delta z - \Delta(\Gamma u)_y \Delta x \Delta z - \Delta(\Gamma u)_z \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} \Delta(\Gamma u)_x &= (\Gamma u)_{x+\Delta x} - (\Gamma u)_x \\ [\text{累计增率}] &= \frac{(\Gamma \Delta x \Delta y \Delta z)_{t+\Delta t} - (\Gamma \Delta x \Delta y \Delta z)_t}{\Delta t} = \frac{\Delta \Gamma}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned}$$

其中

$$\Delta \Gamma = \Gamma_{t+\Delta t} - \Gamma_t$$

由

$$[\text{输入率}] - [\text{输出率}] = [\text{累计增率}]$$

得

$$-\frac{\Delta(\Gamma u)_x}{\Delta x} - \frac{\Delta(\Gamma u)_y}{\Delta y} - \frac{\Delta(\Gamma u)_z}{\Delta z} = \frac{\Delta \Gamma}{\Delta t}$$

取极限， Δx ， Δy ， Δz 为微元体，根据偏导定义，得到

$$0 = \frac{\partial(\Gamma u)_x}{\partial x} + \frac{\partial(\Gamma u)_y}{\partial y} + \frac{\partial(\Gamma u)_z}{\partial z} + \frac{\partial \Gamma}{\partial t}$$

或

$$0 = \nabla(\Gamma u) + \frac{\partial \Gamma}{\partial t}$$

不同性质 Γ : ρ 、 C_i 、 $(\rho c_p T)$ 和 (ρu) , 连续性方程分别表示为

(1) 质量

$$0 = \nabla(\rho u) + \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1-3-4)$$

(2) 组分

$$0 = \nabla(C_i u) + \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (1-3-5)$$

(3) 热量

$$0 = \nabla(\rho c_p T u) + \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} \quad (1-3-6)$$

(4) 动量

$$0 = \nabla(\rho u^2) + \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} \quad (1-3-7)$$

二、相内扩散

这一概念源于热传导。与对流(流体主体流动)不同,这种传递方式是分子运动的传递过程。扩展用于各种不同性质 Γ , 对流传递速率为 (Γu) , 由连续性方程

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla(\Gamma u) = 0$$

相内扩散速率定义为 j , 只存在扩散时, 满足连续性方程

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla j = 0 \quad (1-3-8)$$

其中

$$\nabla j = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

对于分子扩散, 可用 Fick 定律描述各方向上的扩散速率

$$\left. \begin{aligned} j_x &= -\vartheta \frac{\partial \Gamma_x}{\partial x} \\ j_y &= -\vartheta \frac{\partial \Gamma_y}{\partial y} \\ j_z &= -\vartheta \frac{\partial \Gamma_z}{\partial z} \end{aligned} \right\}$$

即正比于负的梯度

$$-\text{grad}(\Gamma_x) = -\vartheta \frac{\partial \Gamma_x}{\partial x} \quad (1-3-9)$$

从而

$$\nabla j = -\vartheta \left(\frac{\partial^2 \Gamma_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Gamma_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Gamma_z}{\partial z^2} \right) = -\vartheta \nabla^2 \Gamma$$

式中, ϑ 称为扩散系数, 因此相内扩散连续性方程

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} - \vartheta \nabla^2 \Gamma = 0 \quad (1-3-10)$$

不同性质 Γ : ρ 、 C_i 、 $(\rho c_p T)$ 和 (ρu) , 扩散系数分别用 ϑ 、 D 、 a 和 ν 等不同符号表示, 相内扩散连续性方程分别表示如下。

(1) 质量

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \vartheta \nabla^2 \rho = 0 \quad (1-3-11)$$

(2) 组分

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} - D \nabla^2 C_i = 0 \quad (1-3-12)$$

(3) 热量

$$\frac{\partial (\rho c_p T)}{\partial t} - a \nabla^2 (\rho c_p T) = 0 \quad (1-3-13)$$

(4) 动量

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} - \nu \nabla^2 (\rho u) = 0 \quad (1-3-14)$$

三、相间传递

如果体系中存在两相或多相, 则相间接触面上可能存在质量和热量的传递。如热量从温度较高的相传递到温度较低的相。

相间传递一般采用“双膜理论”, 如图 1-3-1 所示。接触面上的“浓差” $\Delta \Gamma$ 即为传递的推动力。传递速率正比于推动力

$$I = \sigma A \Delta \Gamma \quad (1-3-15)$$

式中, σ 为传递系数; A 为接触面面积。

定义比表面积

$$\Omega = \frac{A}{V}$$

单位体积传递速率

$$\frac{I}{V} = \sigma \frac{A}{V} \Delta \Gamma = \sigma \Omega \Delta \Gamma$$

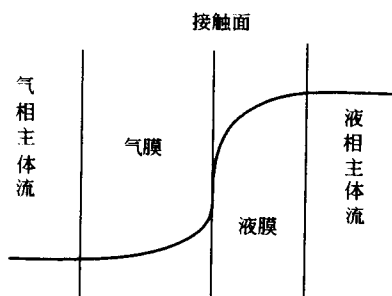


图 1-3-1 相间传递双膜示意图

不同性质 Γ : ρ 、 C_i 、 $(\rho c_p T)$ 和 (ρu) , 传递系数分别用 γ 、 β 、 α' 和 γ' 等不同符号表示, 传递速率分别表示为

- (1) 质量 $\gamma \Omega \Delta \rho$;
- (2) 组分 $\beta \Omega \Delta C_i$;
- (3) 热量 $\alpha' \Omega \Delta (\rho c_p T)$;
- (4) 动量 $\gamma' \Omega \Delta (\rho u)$ 。

四、源

定义为单位体积、单位时间产生(消失)的量 G , 主要指化学反应引起的热量和各组分质量的变化。设反应速率为 r , 反应热为 ΔH , 引起各性质的变化如下。

- (1) 质量: 总质量总是守恒的, 因而与化学反应无关。
- (2) 组分:

$$G = \nu_i r \quad (1-3-16)$$

式中, ν_i 组分反应系数, 与反应方程式有关, 生成物为“+”, 反应物为“-”。

(3) 热量:

$$G = r(-\Delta H) + Q \quad (1-3-17)$$

$r(-\Delta H)$ 为化学反应热效应, Q 为其他热源。物理化学规定, 反应吸热为正, 放热为负, 与对象吸热为负, 放热为正的含意相反, 因此, 在热效应前置一负号。

(4) 动量:

$$G = \text{grad}(p) \quad (1-3-18)$$

式中, p 为压力。

五、动态方程

守恒定律具体化后, 如果包括上述各项, 则得到动态方程

$$-\nabla(\Gamma u) + \vartheta \nabla^2 \Gamma - \sigma \Omega \Delta \Gamma + G = \frac{\partial \Gamma}{\partial t} \quad (1-3-19)$$

(1) 质量性质

$$-\nabla(\rho u) + \vartheta \nabla^2 \rho - \sigma \Omega \Delta \rho + G = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1-3-20)$$

其中, 总质量是守恒的, 源为 0。

(2) 组分性质

$$-\nabla(C_i u) + D \nabla^2 C_i - \beta \Omega \Delta C_i + \nu_i r = \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (1-3-21)$$

(3) 热量性质

$$-\nabla(\rho c_p T u) + a \nabla^2(\rho c_p T) - \alpha' \Omega \Delta(\rho c_p T) + \nu_i r(-\Delta H) + Q = \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} \quad (1-3-22)$$

如果 ρ, c_p 为常数, 热量动态方程简化为

$$-\rho c_p \nabla(T u) + a \rho c_p \nabla^2 T - \alpha' \Omega \rho c_p \Delta T + \nu_i r(-\Delta H) + Q = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1-3-22')$$

(4) 动量性质

$$-\nabla(\rho u^2) + \nu \nabla^2(\rho u) - \gamma' \Omega \Delta(\rho u) + \text{grad}(p) = \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} \quad (1-3-23)$$

如果 ρ 为常数, 则动量动态方程简化为

$$-\rho \nabla u^2 + \nu \rho \nabla^2 u - \gamma' \Omega \rho \Delta u + \text{grad}(p) = \rho \frac{\partial u}{\partial t} \quad (1-3-23')$$

第四节 线性化处理

大多数化工过程属于非线性系统, 因此非线性系统的处理对于化工过程动态的分析研究和控制系统设计具有特别重要的意义。

由于非线性系统微分方程难以解析求解, 在非线性系统动态行为的研究中一般是采用下列三种方法之一:

(1) 计算机模拟;

(2) 通过适当的变量代换, 将非线性系统化为线性系统;