

第一章 导论

本章是过程动态和控制的一个导论，是为没有接触过或很少接触过实际化工过程的大学生们编写的，目的在于说明应用过程控制的场合，并指出过程控制在化工厂的操作、设计和开发中的重要性。

我确信，这一章导论对于可能用到本书的工程师们不是必要的，他们对于过程动态以及越来越复杂和精密的控制系统的重要性是很清楚的。他们知道，在操作岗位上的工人们，也许有百分之八十的时间是花在控制屏上，花在观察控制屏上众多的记录仪和控制器。控制室是工厂的神经中枢。

1-1 过程动态和过程控制的实例

为说明过程动态和过程控制的意义，最好的办法或许是讨论几个实例。第一个实例描写的是一个简单的过程，它的动态响应即它随时间变化的性质是重要的。第二个例题讨论一个简单的但却是相当典型的化工厂及其常规的控制系統。

例题 1-1 高位槽

图 1-1 所示是一个高位槽，以可变的流量 F_0 (英尺³/秒) 泵入不可压缩 (即密度不变) 液体，由于前面工序操作上的变化，来料的流量可以随时间而变化。垂直放置着的圆筒形槽内的液体高度为 h (英尺) 物料流出槽的流量是 F (英尺³/秒)。

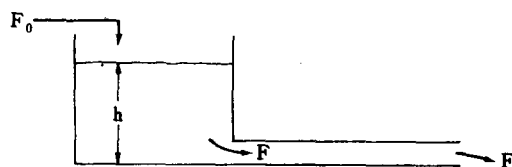


图 1-1 高位槽

现在， F_0 、 h 和 F 都将随时间而变化，因此都是时间 t 的函数，故我们采用符号 $F_0(t)$ 、 $h(t)$ 和 $F(t)$ 。液体从槽底流出，经过一个水平长管排入另一个槽的顶部。两个槽都是敞开的。

我们先来分析稳态情况。在大多数系统中，稳态意味着没有一个量是随时间而变化的。在数学上，这相当于所有的时间导数都等于零，或者参数发生变化需要很长的时间，即近于无限长的时间。在稳态时，流入量必须等于流出量。在本书中，在变量上边加一横线以表示流量的稳态值。因此在稳态时，在我们这个高位槽系统中， $\bar{F}_0 = \bar{F}$ 。

对一个给定的流量 $\bar{F}$ ，在稳态时，槽内的液体高度也应该是某一个常数 $\bar{h}$ 。 $\bar{h}$ 直的大小应该在管线的入口端提供足够的静压头，以便克服液体流过管线时的摩擦损失。流量 $\bar{F}$ 越大，则 $\bar{h}$ 就越高。

在高位槽的稳态设计中，我们当然应该计算出口管线的直径和高位槽的安置高度，使得在预期的最大流量下，不致使槽内液体溢流出来。实际上，保守的设计工程师知道，我们在设计中对槽高还加上了 20—30% 的安全系数。由于本书是一本关于控制及其装置的书，所

以我们还可以提一下，可以安装一个高液位报警器或联锁装置（设计一种装置，当液位太高时就停止进料）以便保证槽内液体不会溢流出来

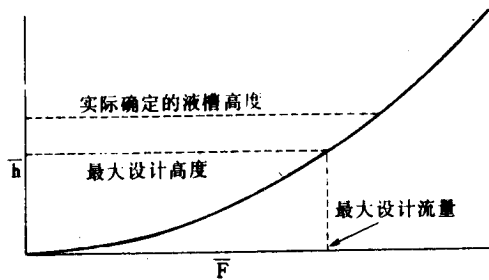


图 1-2 液位高度和流量的稳态关系

F 最后必然会终止在一个新的 F_0 值上。根据图 1-2 的稳态设计曲线，我们是能够容易地确定的， h 将趋于稳态值。但是， $h(t)$ 和 $F(t)$ 是沿着什么途径达到它新的稳态值的呢？

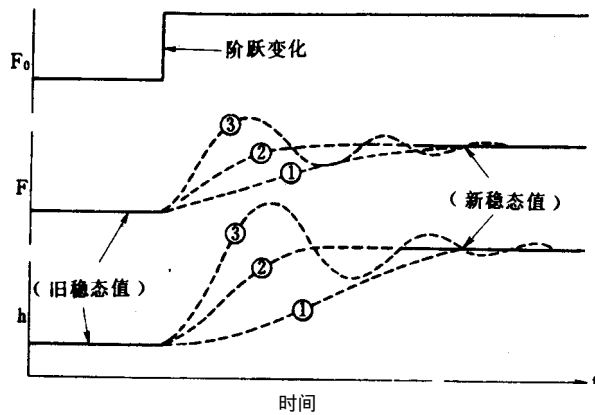


图 1-3 高位槽液位对流量阶跃增加的几种可能响应

识是由研究系统的动态揭示的。在本书的后面部分，我们将再回到这个问题上来，导出它的数学模型，通过模拟计算机模拟，定量地确定它的动态响应。

例题 1-2 化工厂的控制系統

作为我们的第二个例题，我们来考虑图 1-4 所示的过程。两种液体进料，用泵送入一个反应器，它们在其中反应而生成产品。反应是放热的，因此必须从反应器中带走热量，这可以由通入反应器夹套中的冷却水来完成。反应器的流出物，用泵送入预热器后，再送入蒸馏塔，把它分离为两种产品流。

- 应用传统的稳态设计方法，可以确定这个厂的各部分设备。
- 流体力学：泵压头；流量和功率；管路尺寸；塔板布置和尺寸；换热器管及壳侧的程数和尺寸。
- 传热学：从反应器带走的热量；预热器、再沸器和冷凝器需要的传热面积。

由于管子直径越大，液体高度就越低，因此系统的设计应该包括对较高液槽和较粗管的费用之间进行经济核算。图 1-2 就一个特定的数值情况画出了 h 对 F 的关系曲线。

到此为止，我们只是对这个流体流动系统的传统的稳态设计方面作了考虑。现在让我们来想一想，若我们改变 F_0 ，那么会发生什么样的动态过程呢？ $h(t)$ 和 $F(t)$ 将会怎样随时间变化呢？显然

图 1-3 简述了这个问题。问题是哪一条曲线（1，2 或 3）代表 F 和 h 所遵循的途径。曲线 1 表示 F 和 h 十分缓慢地升高到它们的新的稳态值。曲线 2 表示迅速地升高。曲线 3 表示更迅速地升高，且有过调，即在某些时候变量超过了它的稳态值。显然，如果响应有过调，且液体高度过调的峰值高于槽的高度，我们会遇到麻烦。

我们的稳态设计计算没有告诉我们系统的动态响应是什么样的。它只是告诉我们初值和终值，但没有告诉我们是如何达到的。这种知

化学动力学：反应器的尺寸和操作条件（温度、压力和催化剂等）。

热力学和传质学：塔板数和回流比；反应器的平衡条件。

但是我们怎样用仪表来装备这个工厂呢？我们将用一些时间来探索这个重要的设计问题。事实上，这是本书要解决的基本问题。我们学习数学模型、模拟和控制理论都是为了理解过程动态和控制系统，以使我们能够发展和设计较好的化工厂，并且较有效地管理这些工厂。

在这里，我们只是提一下，图1-4中的控制系统是一个典型的常规控制系统。为了使这个化工厂自动地进行生产，以使操作工人不必一刻不离地在场监视，这大概是最小的控制系统。可以看到，甚至在这样一个最小的工厂里，使用最少的仪表，它的控制环总数也已经高达10个。我们将看到大多数化工过程都是多变量的。

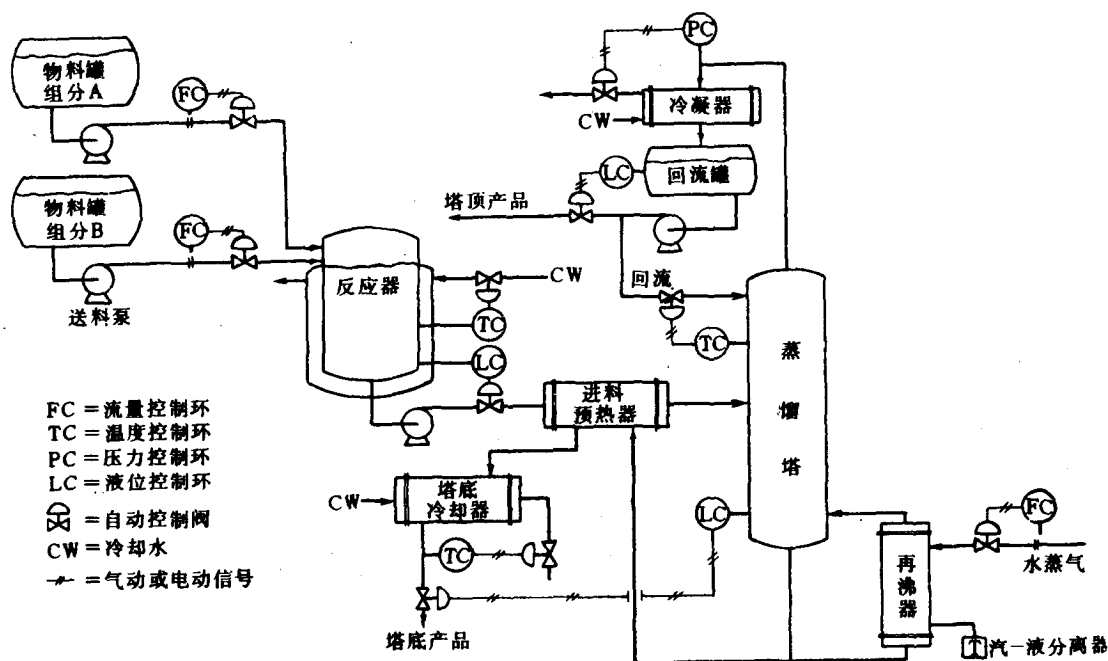


图 1-4 典型的化工厂和控制系统

1-2 学 习 目 的

简短地概括一下我们学习过程动态和控制的目的是有益的。

1. 掌握化工系统的动态，即随时间变化的特性。
2. 学习建立化工系统的现实而合理的数学模型。
3. 研究构成数学模型之方程组的求解方法。
4. 熟悉控制技术（稳定性理论、控制器设计和系统设计），熟悉实用的控制仪表商品（实际控制系统的硬件：敏感元件、变送器、控制器和控制阀等）。

1-3 历史沿革

在四十年代以前，大多数化工厂基本上是手工操作的。仅仅采用了最初级的控制器。一个工厂里需要有许多人来调节各个变量。各个工序之间用大贮槽作为缓冲器或平衡器。虽然这些容器有时是很费钱的，但是用它们可以隔断一个过程各工序之间的联系，以消除一个工序的不正常情况对其它工序某些动态的干扰。

在四十年代和五十年代初期，随着劳务费用和设备费用的增长，随着高强度、大容量和高性能的设备和过程的发展，如果没有自动控制装置，工厂的生产会变得很不经济，而且往往是不可能的。在这个阶段，化工厂中装备了反馈控制器，但是不大考虑和研究过程本身的动态。设计方法只不过是近似计算和实践经验。

航天和电子工程师们发展起来的动态分析方法和控制理论，全部应用于化学工程系统，只是最近十年间的事。在这个期间，除去设计了较好的控制系统之外，化工过程和设备也有了发展和改进，因此更便于控制。

把一个复杂工厂的各个部分，根据它们之间的全部相互关系，考虑为一个整体，并找出控制整个工厂的办法，这门学科就叫作系统工程。

1-4 展望

为了不夸大过程控制在化学工程主要课程中的相对重要性，要说清楚，动态分析不过是工程师必备工具和技术知识中的一部分，尽管它是越来越重要的一部分。无疑，在热力学、动力学、单元操作以及动量、热量和质量传递原理等传统课程里的坚实的基础知识是很重要的。实际上，这种基础是任何人学习过程动态的先决条件，因为我们得出的数学模型只不过是包括随时间变化项在内的传统单元操作的各种方程。控制工程师们有时有一种倾向，那就是过分地关注动态分析而忘掉稳态分析。要记住，如果你不能使工厂在稳态情况下进行生产，那你就不能使工厂在动态情况下进行生产。

还应该清醒地注意到，可以通过学习本书而入门，但它本身不会使你成为过程控制的专家。你将发现，还有许多知识需要学习，但不是多么高深的理论，而是实践经验。一个聪明敏捷的工程师，通过他对工厂设备的攀上爬下，通过与操作人员和维修人员的谈话，通过在仪表车间学习仪表的维修，以及通过在控制室仔细地观察控制屏的正面和背面，你可以学到有关过程动态和过程控制的大量的知识。不论一本书的实际写作方向怎样，这些知识决不可能都写进书里去。

当你学完了本书之后，你可能会问：书上讨论的动态分析方法和控制器的设计方法，在工业中真正有多大实用价值？在目前，一个工厂中的大约80—90%的控制环是根据简单的原理和经验，成功地进行设计、安装、整定和运行的。其余的10—20%的控制环由控制工程师自己动手设计。设计这些控制环需要有较多的技术知识。为了达到所要求的性能，可能需要进行设备识别试验、计算机模拟和精心设计控制器或过程的重新设计。这些控制环所占的比例看来不大，但往往是关系工厂成败的关键控制环。

我相信，随着控制工程的工具（计算机商品和控制仪表商品）变得更适宜于工厂的应用，

更重要的是随着受过这种训练的年轻的工程师们来到工厂工作，本书中所讨论过的技术将得到越来越广泛地应用。引用一句古老的波斯人格言：在盲人国里，有一只眼睛的人是幸运的。

1-5 学习过程控制的动机

学习本书内容的动机，在于这些课题具有相当大的实际重要性，它们具有挑战性，具有趣味性。

1. 重要性

控制室是工厂的主要部分。从单环系统到计算机控制系统，不同复杂程度上的生产自动化，都日益普遍了。

2. 趣味性

我已经发现，过程动态是有趣味的。你将有机会运用一些简单的和一些相当高级的数学知识，去解决实际的生产问题。利用过程控制知识和对该过程动态的见识，首先在纸上设计出一台控制器，然后看到它在设备上的实际运行；或者，在具有重大的控制问题的设备上，你能够断定问题在哪里并解决了问题，那你所得到的欢乐是无法比拟的。有时问题存在于过程中，存在于基本设计中，或者是设备功能不良。有时问题是在控制系统中，或者是基本策略不正确，或者是仪表硬件功能不良。你的某种知识在一个成功的控制方案中所起的作用可能是非常宝贵的。

3. 挑战性

为了解决实际问题，你不得不利用你在化学工程的所有领域里的知识，你将应用大部分数学工具（微分方程、拉普拉斯变换、复变函数和数值分析等）。

1-6 一般概念

在本书中，我按照逻辑推导来叙述。我们从原理和简单的概念入手，然后把它们展开，直到这样的展开仍然是有益的范围。首先，我们要学习怎样推导化工系统的数学模型。然后要学习一些方法，以求解所得到的方程，通常是常微分方程。接着，我们将探讨它们的开环（不加控制的）动态特性。最后，我们将学习控制器设计。如果我们足够聪明，那就能使工厂按我们所希望的方式自动地运转。

在详细学习后面各章之前，先来定义动态和控制中一些常用的最重要的一般概念和术语，这是有益的。

1. 动态：一个过程随时间变化的特性。系统中没有控制器时的特性叫作开环响应。

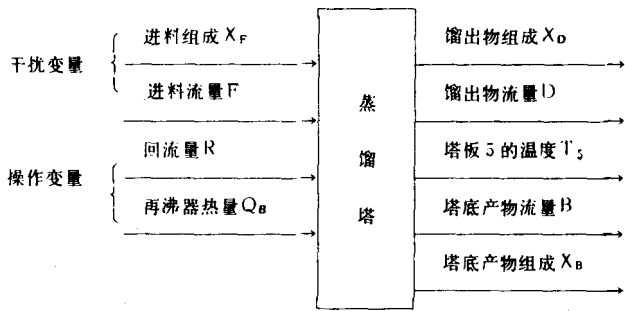
2. 变量：

a. 输入变量：进入一个过程的各个进料流的流量、组成、压力和温度。我们通常把输入变量分为干扰变量（我们不能控制且必须适应的那些输入变量）和操作变量（为了控制生产，我们可以改变的那些输入变量）。

b. 输出变量：离开过程的或过程中的物料流的流量和组成等。某些输出变量是我们在以后将要控制的，某些输出变量我们将不予控制。

例题 1-3 对一个蒸馏塔来说，输入变量可以包括作为干扰变量的进料流的流量和组成，

以及作为操作变量的回流量和再沸器的输入热量。输出变量可以包括塔顶馏出物的流量和组成，塔底产物流的流量和组成，以及在任何或所有塔板上的蒸汽和液体的组成、滞留量和流量。



注意，一个实际的物料流可以认为包括有若干个变量：它的流量、组成和温度等，也就是说包括它所有的内涵性质和外延性质。

3. 反馈控制：控制一个过程的传统的方法是这样的：量测一个需要控制的变量，将这个值同需要的值（控制器的给定值）相比较，把这个差值（偏差）输入给一个反馈控制器，它会改变一个操作变量以推动被量测的变量（被控变量）返回到需要值。信息是如此反馈的：如图 1-5 所示，从输出变量经过量测装置，再经过反馈控制器，最后到达输入操作变量。

4. 前馈控制：近几年来，化学工程师们越来越多地采用了前馈控制。如图 1-6 所示，前馈控制的基本思想是：当干扰进入过程时就检测干扰，并使操作变量有一个适当的改变，以使输出变量保持常数值（或者按照我们的希望而变化）。因此，当检测到干扰进入过程之时，我们就开始采取一个矫正作用，而不是等着干扰传播开来通过过程之后才采取矫正作用。

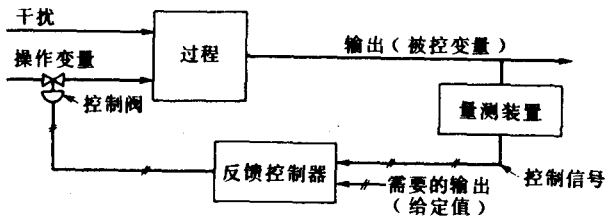


图 1-5 反馈控制

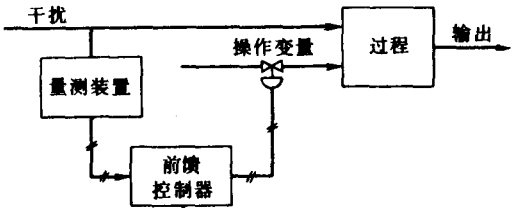


图 1-6 前馈控制

5. 稳定性：一个过程如果它的输出变得越来越大，就说过程是不稳定的。图1-7是几个示例。当然，任何实际系统的输出是不会真的越来越大的，这是因为终将会受到某些限制的。例如，控制阀将全开或全关，或者安全阀突然动作。一个线性过程，如果它振荡且振幅不衰减，甚至在没有干扰时也是这样，就说这个过程正好处于临界稳定状态。

大多数过程是开环稳定的，也就是说，系统中没有控制器时是稳定的。我们将略为详细也加以研究的放热化学反应器，是一个重要的且十分有趣的例外，它可以是开环不稳定的。所有的实际的过程，都可能成为闭环不稳定的，就是说，系统中加入一个反馈控制器之后，都可能成为不稳定的。因此，在反馈控制系统中，稳定性是相当重要的。

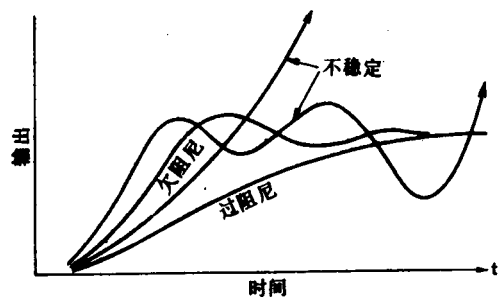


图 1-7 稳定性

第一篇

化工系统的数学模型

第二章 基本原理

2-1 引言

2-1.1 数学模型的用途

无疑，对一个化工系统建立数学模型的最重要的收获，是得到了过程“信息”的知识。这个知识使你能够清除掉许多表面的“混乱因素”，深入到系统的核心。你就能够更清楚地看到各个变量之间的因果关系。

数学模型能用于化学工程的所有方面，从研究、发展，直到生产操作，甚至可用于商业和经济研究。

1. 研究和发展：根据实验室或试验厂的化学反应数据，确定化学动力学机理和参数；探索不同的操作条件的影响，进行最优化研究；辅助放大计算。

2. 设计：为了动态品质，探索工艺设备的尺寸和布置；研究过程各部分之间的相互关系；评价可供选择的各種控制方案；模拟开车、停车和事故的情况及其操作程序。

3. 生产操作：处理控制问题和工艺问题；帮助开车和操作工进行训练；为扩大生产规模排除瓶颈环节，研究所需条件和效果；生产操作的最优化。

用数学模型进行上列各类研究，与直接在生产设备上进行试验相比较，通常要便宜、安全和快速得多。这并不是说设备试验没有必要。正如我们要在后面将要讨论的那样，设备试验是检验模型的真实性及检验由研究模型而得到的重要思想和建议的正确性的极为重要的部分。

2-1.2 范围

在本书中，我们只讨论确定性系统，这是可以用常微分方程或偏微分方程进行描述的系统。大部分重点内容是集中于参数系统（时间是唯一的独立变量，可以用常微分方程描述的系统）。全书只使用英制单位，不过书中的方程式和关系式可以使用任何统一的单位制。

2-1.3 建立方程的原则

基础 数学模型的基础是基本的物理和化学定律，例如质量守恒定律、能量守恒定律和动量守恒定律。因为是研究过程的动态，所以我们将用这些定律的带有时间导数项的一般形式。

假定 在建立模型的过程中，工程师的最重要的工作，大概是运用他的工程判断力去判断能

够作出一些什么样可用的假定。很显然，一个包括各种现象的直到微观细节的非常严密的数学模型将会是相当复杂的，以致于建立这样的模型就要花费很长的时间，并且也许不能够求解。在工程问题上，经常需要工程师在问题的严密描述和能够得到足够好的答案之间取得妥协，这就叫作“最优取舍”。最优取舍包括作出一些合理的简化假定，而没有“在倒洗澡水的时候把婴儿倒掉”。实际上，这个最优取舍的模型相当于一个在计算方便前提下最复杂的模型。

所作的假定都应该是仔细考虑过的和令人满意的。假定是对模型的人为的限制，在评价模型所预言的结果时，应该考虑所作假定的影响。

模型的数学一致性 数学模型的全部方程都写出之后，就要检查方程的数目是否等于变量的数目，这是一个好想法，特别是对于数目大且繁杂的方程组。为了得到一个解，就必须使所谓系统的自由度等于零。如果自由度不是零，则这个系统是欠确定的或过确定的，而且说明我们在建立问题的方程中有某种错误。这种一致性的检查工作，看起来是不重要的，但是，我可以用痛苦的教训来证明：这种检查可以避免许多小时的挫折、混乱，并节省在计算机上的时间。

检查全部方程中所有各项的单位是否一致，也许是另一个平凡而简单的工作，但时常被人们所遗忘。这一步工作是必不可少的，特别要留意动态模型中各参数的时间单位。在我们的大多数例题中，我始终用秒作时间的单位，但是要记住，有许多参数通常不是用秒作时间的单位，例如，总传热系数的单位通常是：英热单位/时·英尺²·°F。

模型方程的解法 在第二篇中，我们再来详细地讨论模型方程的解法。然而，在建立数学模型的时候，必须考虑模型方程可用的求解方法和工具。一个没有方法求解的方程，用农民的土话来说，就象公猪的奶头一样是无用的。

验证，在建立一个数学模型的时候，一个重要的但常常被忽视的工作，就是证明这个模型描述了实际情况。在设计阶段，由于工厂没有建成，这个工作有时不能完成。但是，就是在这种情况下，通常总还有现成的相类似的生产设备或试验设备，用这些设备可以得到一些实验数据。

设计一些实验以验证一个模型的正确性，有时是十分必要的，而且应该认真地完成。在第三篇中，我们将谈到动态试验方法，例如脉冲识别试验。

2-2 基本定律

在这一节里，我们要回顾一下物理学和化学的一些随时间而变化的基本定律，并用几个简单的化学系统来说明这些定律的应用。

2-2.1 连续性方程

总连续性方程（质量衡算式）质量守恒原理应用于一个动态系统时，写为

$$\left(\begin{array}{c} \text{进入系统的} \\ \text{质量流量} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{离开系统的} \\ \text{质量流量} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{系统内质量的} \\ \text{时间变化率} \end{array} \right) \quad (2-1)$$

这个方程中各项的单位，都是每单位时间的质量。一个系统只能写出一个总连续性方程。

标准的总连续性稳态设计方程，我们习惯于说成“进去多少，就出来多少”。总连续性动态方程则要说成“进去多少，最终就出来多少”。

式(2-1)的等号右边，是系统内的质量对独立变量 t 的偏导数 $\partial/\partial t$ ，或是寻常导数 d/dt 。

例题 2-1 考虑图 2-1 所示的理想混合槽。一个液体流以流量 F_0 (英尺³/秒) 进入槽内, 它的密度是 ρ_0 (磅质/英尺³)。液体在槽内的体积滞留量是 V (英尺³), 它的密度是 ρ (磅质/英尺³)。从槽流出的流量是 F (英尺³/秒), 它的密度当然同槽内液体的密度一样。我们要写总连续性方程的系统是槽内的全部液相。我们称这样的系统为宏观系统, 以区别于微观系统。

这是由于这个系统的尺寸是有界的且有限的。对整个槽, 而不是对槽内的一个很小的微元, 写质量衡算式。

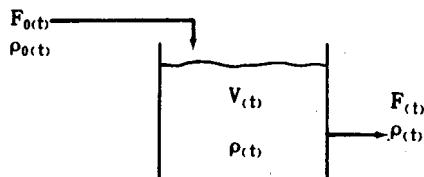


图 2-1 理想混合槽

$$F_0 \rho_0 - F \rho = \rho V \text{ 的时间变化率} \quad (2-2)$$

这个方程中各项的单位都是 (磅质/秒)。

$$\frac{\text{英尺}^3}{\text{秒}} \times \frac{\text{磅质}}{\text{英尺}^3} - \frac{\text{英尺}^3}{\text{秒}} \times \frac{\text{磅质}}{\text{英尺}^3} = \frac{(\text{英尺}^3)(\text{磅质/英尺}^3)}{\text{秒}}$$

由于槽内的液体是理想混合的, 所以槽内液体的密度是处处相同的, 不随槽内径向和轴向的位置而变化, 也就是说, 没有密度的空间梯度。这就是我们能够应用宏观系统的原因, 还意味着只有一个独立变量 t 。

由于 ρ 和 V 只是 t 的函数, 所以在方程 (2-2) 中使用寻常导数。

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = F_0 \rho_0 - F \rho \quad (2-3)$$

例题 2-2 如图 2-2 所示, 流体正在流过一个直径为常数的圆管。流动是湍流, 因此, 我们可以假定是活塞流动状态, 即液体流的每一个薄片如同一个活塞通过这根圆管。因此, 没有速度的和任何其它性质的径向梯度, 不过, 可以存在轴向梯度。

流体沿着轴向即 z 向流动时, 它的密度和速度是可以变化的。因此, 现在有两个独立变量: 时间 t 和轴向位置 z 。密度和速度是 t 和 z 两者的函数: $\rho(t, z)$ 和 $v(t, z)$ 。我们要对一个小薄片系统应用总连续性方程 (2-1)。这个系统现在是一个“微观的”系统。这个微元取在这个管中的任意位置 z 处, 它的厚度是 dz , 它的面积等于这个圆管横截面面积 A 英尺²。

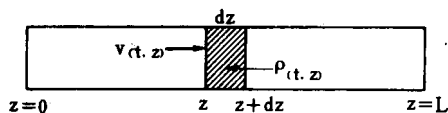


图 2-2 流体流过一段圆管

$$\text{系统内质量的增加速率} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho A dz) \quad (2-4)$$

$A dz$ 是这个系统的体积; ρ 是这个系统的密度。这个方程中各项的单位都是磅质/秒。

$$\text{通过界面 } z \text{ 进入系统的质量} = v A \rho \quad (2-5)$$

注意上式中的单位还是磅质/秒 = (英尺/秒)(英尺²) × (磅质/英尺³)。

$$\text{通过界面 } z + dz \text{ 流出系统的质量} = v A \rho + \frac{\partial}{\partial z} (v A \rho) dz \quad (2-6)$$

上式表示在 $z + dz$ 界面的流量, 可以认为是函数 $f(z)$ 在 z 附近的泰勒级数展开式。函数在 $z + dz$ 位置的值是

$$f(z+dz) = f(z) + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_z dz + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right)_z \frac{dz^2}{2!} + \dots \quad (2-7)$$

如果 dz 很小，这个级数就可以去掉一阶导数项以后的各项。令 $f(z) = vA\rho$ ，便得到方程 (2-6)。

把式 (2-4)、(2-5) 和 (2-6) 代入式 (2-1) 中，便得到

$$\frac{\partial}{\partial t}(A\rho dz) = vA\rho - \left[vA\rho + \frac{\partial}{\partial z}(vA\rho) dz\right]$$

消去上式中的 dz ，假定 A 是常数，便得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v) = 0 \quad (2-8)$$

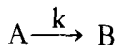
组分连续性方程（组分衡算式），与质量的量是守恒的不同，各个化学组分的量是不守恒的。如果一个系统中发生化学反应，则各个组分的分子数就要发生变化；如果这个组分是化学反应的产物，它的分子数就要增加；如果这个组分是反应物，它的分子数就要减少。因此，系统的第 j 个化学组分的组分连续性方程写为

$$\left(\begin{array}{c} j \text{ 组分进入系统} \\ \text{的分子流量} \end{array}\right) - \left(\begin{array}{c} j \text{ 组分离开系统} \\ \text{的分子流量} \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c} j \text{ 组分的分子} \\ \text{生成速率} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} j \text{ 组分在系统} \\ \text{内的时间变化率} \end{array}\right) \quad (2-9)$$

这个方程中的各项的单位都是每单位时间的分子数。

进入系统的流量和离开系统的流量都可以是两个流量之和：对流的流量（由容积流动产生的）和分子扩散的流量（由扩散产生的）。对系统中的每一个组分，我们都可以写出一个组分连续性方程。对任何一个系统，如果它有 j 种组分，它就有 j 个组分连续性方程。不过，一个总质量衡算式和 j 个组分衡算式并不都是独立的。因为各个组分的分子数乘各自分子量的总和，等于总的质量。因此，对于一个给定的系统来说，只有 j 个独立的连续性方程。我们通常采用一个总质量衡算式和 $j-1$ 个组分衡算式。

例题 2-3 考虑例题2-1中所用过的理想混合槽，但是在槽内的液相中还发生一个化学反应。如图2-3所示，现在的这个系统是一个连续的均混反应器，以后我们用 CSTR 来表示连续均混反应器。在反应器中，组分 A 发生不可逆的化学反应，反应的比速率是 k ，生成一种产物，即组分 B。



用 C_{A0} 表示来料即进料流中的 A 组分浓度（A 的磅分子数 / 英尺³），用 C_A 表示反应器中 A 组分的浓度。假定反应是简单的一级反应，这样，每单位体积中反应物 A 的消耗速率就会正比于槽内 A 组分的瞬时浓度。下面，用反应物 A 的组分衡算来填充方程 (2-9) 中的各项，

A 组分进入系统的流量 = $F_0 C_{A0}$

A 组分离开系统的流量 = $F C_A$

A 组分的生成速率 = $-V k C_A$ 单位为 (英尺³) (1 秒) (磅分子 A / 英尺³)

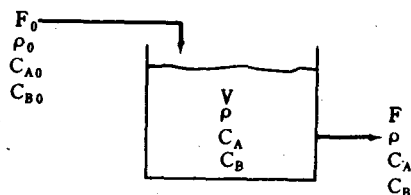


图 2-3 连续的均混反应器

(注意式中的负号, 因为 A 组分是反应所消耗的)

$$\text{反应器内 A 组分的时间变化率} = \frac{d}{dt}(VC_A)$$

把以上各项结合起来即得

$$\frac{d}{dt}(VC_A) = F_0 C_{A0} - FC_A - V k C_A \quad (2-10)$$

因为这是一个集中参数系统, 只有 t 是独立变量, 所以我们用了寻常导数。这个方程中的各项的单位都是 A 的磅分子数 / 秒。方程式的等号左边是动态项。等号右边的前两项是流动项, 最后一项是生成项。由于这个系统是双组分系统 (组分 A 和组分 B 的混合物), 我们或者再写一个组分 B 的组分连续性方程 (式中 C_B 是每立方英尺中 B 组分的磅分子数):

$$\frac{d}{dt}(VC_B) = F_0 C_{B0} - FC_B + V k C_A$$

我们或者就用总连续性方程 (2-3), 这是因为 C_A , C_B 和 ρ 存在着单值对应关系:

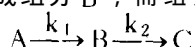
$$M_A C_A + M_B C_B = \rho \quad (2-11)$$

式中 M_A = A 组分的分子量, 磅质 / 磅分子

M_B = B 组分的分子量, 磅质 / 磅分子

通常, 我们采用方程 (2-3) 和 (2-10)。

例题 2-4 假定我们有一个与上例中相同的宏观系统, 但是, 现在这个系统中发生的是连串反应。反应物 A 以比速率 k_1 生成组分 B, 而组分 B 又以比速率 k_2 生成组分 C。



假定都是一级反应, 组分 A, B 和 C 的三个组分连续性方程就是

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(VC_A) &= F_0 C_{A0} - FC_A - V k_1 C_A \\ \frac{d}{dt}(VC_B) &= F_0 C_{B0} - FC_B + V k_1 C_A - V k_2 C_B \\ \frac{d}{dt}(VC_C) &= F_0 C_{C0} - FC_C + V k_2 C_B \end{aligned} \quad (2-12)$$

组分浓度和密度之间还有一个关系式:

$$\sum_{j=A}^C M_j C_j = \rho \quad (2-13)$$

因此, 我们或者使用式 (2-12) 中的三个组分衡算式, 或者使用其中的两个组分衡算式再加一个类似于式 (2-3) 的总质量衡算式。

例题 2-5 用一个管式反应器代替例题 2-2 中流体通过的圆管, 假定其中发生与例题 2-3 中相同的化学反应: $A \xrightarrow{k} B$ 。当物料流成每一薄片通过反应器的长度时, 反应物的浓度 C_A 不断减小, 因为反应物是被消耗的。密度 ρ , 流速 v 和浓度 C_A 都可能随着时间和轴向位置而变化。我们仍然假定是活塞或流动, 因而流速, 密度和浓度都没有径向梯度。

我们规定, 进料到反应器入口 ($z = 0$) 处的 A 组分浓度记为

$$C_A(t, 0) = C_{A0}(t) \quad (2-14)$$

我们规定，反应器出口处（ $z = L$ ）的 A 组分浓度记为

$$C_A(t, L) = C_{AL}(t) \quad (2-15)$$

如图 2-4 所示我们现在要把反应物 A 的组分连续性方程用到一个厚度为 dz 的小微分薄片上。流入项可以分为两种：容积流量和扩散流量。因为在轴向上存在着浓度梯度，所以能够发生扩散。在大多数实际系统中，扩散通常不如容积流动重要，但是在这里我们还是把它考虑进去，是为了看一看它对模型的影响。我们将把 A 的扩散通量记为 N_A （每单位时间每单位面积上通过的 A 的磅分子数），它由费克定律的关系式确定

$$N_A = -\mathcal{D}_A \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad (2-16)$$

式中 $\mathcal{D}_A$ 是扩散系数，它是由分子扩散和湍流扩散两者造成的（湍流扩散即所谓的涡流扩散），它的单位是英尺²/秒。

现在，来分析一般的组分连续性方程 (2-9) 中的每一项。

A 组分进入界面 z 的分子流量 = 容积流量和扩散流量 = $vAC_A + AN_A$

$$\text{单位是} \frac{\text{英尺}}{\text{秒}} \times \text{英尺}^2 \times \frac{\text{磅分子 A}}{\text{英尺}^3} + \text{英尺}^2 \times \frac{\text{磅分子 A}}{\text{秒} \cdot \text{英尺}^2}$$

A 组分进入界面（ $z + dz$ ）的分子流量 = $(vAC_A + AN_A)$

$$+ \frac{\partial}{\partial z} (vAC_A + AN_A) dz$$

A 组分在系统内的生成速率 = $-kC_A Adz$

A 组分在系统内对时间的偏微分 = $\frac{\partial}{\partial t} (Adz C_A)$

都代入到式 (2-9) 便得到

$$\begin{aligned} Adz \frac{\partial C_A}{\partial t} &= (vAC_A + AN_A) - \left[vAC_A + AN_A + \frac{\partial}{\partial z} (vAC_A + AN_A) dz \right] - kC_A dz A \\ \frac{\partial C_A}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial z} (vC_A + N_A) - kC_A \end{aligned}$$

把 (2-16) 式代入上式，以去掉 N_A 则得

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (vC_A) + kC_A = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mathcal{D}_A \frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \quad (2-17)$$

方程中各项的单位都是磅分子 A / 秒 · 英尺³。从左到右的各项，分别是动态项、对流项、反应项和扩散量。

2-2.2 能量方程

热力学第一定律提出了能量守恒原理。对于敞开系统（有流入和流出的系统）能量方程

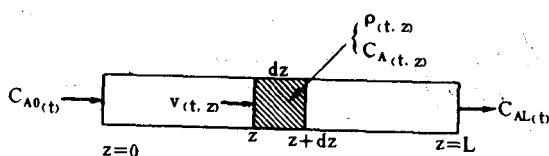


图 2-4 管式反应器

写为

$$\left(\begin{array}{l} \text{由输送和扩散而} \\ \text{进入系统的内能、} \\ \text{动能及势能的流} \\ \text{量} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{由输送和扩散而} \\ \text{离开系统的内能、} \\ \text{动能及势能的流} \\ \text{量} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{由传导和辐射} \\ \text{及化学反应而} \\ \text{加给系统的热} \\ \text{量} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{系统对外界} \\ \text{所作的功} \\ \text{(轴功 + P V 功)} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{系统内的内能、} \\ \text{动能和势能的时} \\ \text{间变化率} \end{array} \right) \quad (2-18)$$

在大多数的化工系统中，能量方程的一般形式，正如我们将说明的那样，实质上简化为一个焓的衡算式。这个问题最好是用几个具体的例题来说明。

例题 2-6 再来考虑例题 2-3 中的连续均混反应器，为了除去反应放出的热量 λ (英热单位 / 反应 1 磅分子 A)，现在这个反应器内部安装有冷却蛇管。我们将照通常的规定表示 λ ，放热反应时 λ 是负数，吸热反应时 λ 是正数。反应生热的速率是 A 组分消耗的速率与 λ 的乘积加负号。

$$Q_G = -\lambda V C_A k, \text{ 单位为英热单位 / 秒} \quad (2-19)$$

冷却蛇管带走热量的速率是 $-Q$ (英热单位 / 秒)。系统进料的温度是 $T_0 (^{\circ}\text{R})$ ，反应器中的温度是 $T (^{\circ}\text{R})$ 。对这个系统写出式 (2-18)，

$$F_0 \rho_0 (U_0 + K_0 + \phi_0) - F \rho (U + K + \phi) + (Q_G + Q) - (W + F P - F_0 P_0) \frac{1}{J} = \frac{d}{dt} [(U + K + \phi) V \rho] \quad (2-20)$$

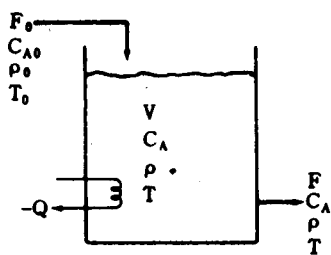


图 2-5 有冷却的连续均混反应器

式中 U = 内能，英热单位 / 磅质

K = 动能，英热单位 / 磅质

ϕ = 势能，英热单位 / 磅质

W = 系统所作的轴功，英尺·磅力 / 秒

P = 系统的压力，磅力 / 英尺²

P_0 = 进料流的压力，磅力 / 英尺²

$J = 778$ 英尺·磅力 / 英热单位

在这个系统中，如图 2-5 所示，不存在轴功，所以 $W = 0$ 。

如果入口和出口处的流速都不是很大，则动能项可以忽略不计。如果入口和出口的高度大致相同，则势能项是很小的。这样，方程 (2-20) 就简化为

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho V U)}{dt} &= F_0 \rho_0 U_0 - F \rho U + Q_G + Q - F \rho \left(\frac{F}{\rho} \right) \frac{1}{J} + F_0 \rho_0 \left(\frac{P_0}{\rho_0} \right) \frac{1}{J} \\ &= F_0 \rho_0 \left(U_0 + \frac{P_0 \bar{V}_0}{J} \right) - F \rho \left(U + \frac{P \bar{V}}{J} \right) + Q_G + Q \end{aligned} \quad (2-21)$$

式中 V 是比容 (英尺³ / 磅质)，它是密度的倒数。焓 H 或 h 定义为

$$h \text{ 或 } H = U + P V / J, \text{ 英热单位 / 磅质} \quad (2-22)$$

我们用 h 表示液体流的焓，用 H 表蒸汽流的焓。因此，对于这个连续均混反应器，式 (2-21)

变为

$$\frac{d}{dt}(\rho V U) = F_0 \rho_0 h_0 - F \rho h + Q - \lambda V k C_A \quad (2-23)$$

在许多系统中，同 U 比起来， $P V$ 项可以忽略不计，因此我们可以用系统焓的时间变化率，代替系统内能的时间变化率。

$$\frac{d}{dt}(\rho V h) = F_0 \rho_0 h_0 - F \rho h + Q - \lambda V k C_A \quad (2-24)$$

焓是组成、压力和温度的函数，但主要是温度的函数。根据热力学，定压比热和定容比热是

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \quad C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v \quad (2-25)$$

为了说明能量方程主要是受温度的影响，让我们用一些假定来简化这个问题。我们假定液体的焓可以表示为绝对温度与定压平均比热 C_p （英热单位/磅质·°R）的乘积， C_p 是常数。

$$h = C_p T$$

内能 U ，一般说来，也是温度、组成和压力的函数。为了简化问题，再让我们假定液体的密度是常数（因此， $C_p = C_v$ ）内能就是 $C_p T$ 。利用这些简化，式（2-23）就变为

$$\rho C_p \frac{d(VT)}{dt} = \rho C_p (F_0 T_0 - F T) + Q - \lambda V k C_A \quad (2-26)$$

要记住我们用式（2-23）导出式（2-26）时所作的几个简化假定，式（2-23）是较少限制的，但也不是最一般的形式。

例题2-7 为了看到两相系统的能量方程的形式，考虑一下图2-6所示的连续均混反应器系统。从反应器流出的液体产物流的流量是 F ，蒸汽产物流的流量是 F_v ，两者的单位都是英尺³/秒。反应器中的压力是 P （磅力/英尺²），蒸汽和液体的体积分别是 V_v 和 V_L （英尺³）。蒸汽相的密度和温度是 ρ_v 和 T_v 。蒸汽中 A 的分子分数是 y_v 。如果汽液两相是热平衡的，则蒸汽温度与液体温度相等， $T_v = T$ 。如果两相是相平衡的，液相组成和蒸汽组成就可以用拉乌尔定律，或者用相对挥发度的关系式，或者其它的汽液平衡关系式相关连（参看2-2.6节）。汽相的焓，一般说来，是组成 y_v 、温度 T_v 和压力 P 的函数。忽略掉动能项、势能项和功项，并且在时间导数中用焓代替内能，那么，这个系统的能量方程（反应器中的液体和蒸汽的）

$$\frac{d}{dt}(\rho_v V_v H + \rho V_L h) = F_0 \rho_0 h_0 - F \rho h - F_v \rho_v H + Q - \lambda V k C_A \quad (2-27)$$

为了直接用温度来表示这个方程，我们再一次应用 h 的很简单的关系式（ $h = C_p T$ ），和 H 的同样简单的关系式

$$H = C_p T + \lambda_v \quad (2-28)$$

式中 λ_v 是液体混合物的平均汽化热。在比较严密的模型中， λ_v 可以是温度 T_v 、组成 y 和压力 P 的函数。式（2-27）就变为

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\rho_v V_v (C_p T + \lambda_v) + \rho V_L C_p T] = & F_0 \rho_0 C_p T_0 - F \rho C_p T \\ & - F_v \rho_v (C_p T + \lambda_v) + Q - \lambda V k C_A \end{aligned} \quad (2-29)$$

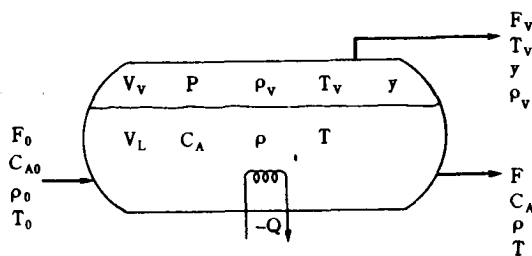


图 2-6 有冷却的两相连续均混反应器

热量可以由温度为 T 的过程流体（反应物和产物）传递给温度为 T_M 的反应器的金属壁，再由金属壁传递给冷却水。要完整地描述这个系统需要有过程流体的、金属壁的和冷却水的能量方程。在这里我们只限于讨论过程流体的能量方程。

例题 2-8 为了说明能量方程对微观系统的应用，我们再来讨论呈活塞式流动的管式反应器问题，而且，现在的情况是流体流过反应器时保持一定的温度变化曲线。我们将再次假定，在径向上不存在流速梯度、浓度梯度和温度梯度（在一些强放热的系统中，如果管径不是很小，没有温度梯度的假定是一个很坏的假定）。假定这个反应器有一个冷却套管，如图 2-7 所示。

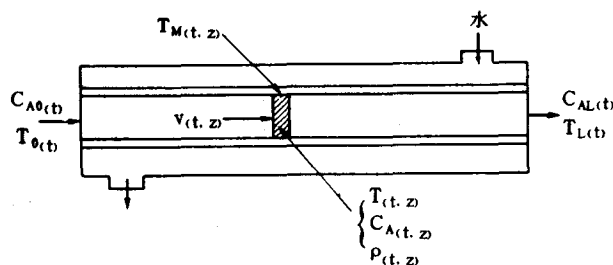


图 2-7 有夹套的管式反应器

取一小片过程流体作为我们要考虑的系统，我们能够导出式 (2-18) 中的每一项。假定势能项和动能项可以忽略不计，而且也没有功项。取用内能和焓的简化形式。比起容积流动来，假定扩散流动可以忽略不计。对于沿着反应器轴向上的传热，我们将考虑分子扩散传热和湍流扩散传热的可能性。

因容积流动而进入界面 Z 的能量流量：

$$v A \rho C_p T \quad \text{单位为: } \frac{\text{英尺}}{\text{秒}} \times \text{英尺}^2 \times \frac{\text{磅质}}{\text{英尺}^3} \times \frac{\text{英热单位}}{\text{磅质} \cdot ^\circ\text{R}} \times ^\circ\text{R} = \text{英热单位} / \text{秒}$$

离开界面 $(z + dz)$ 的能量（焓）流量：

$$v A \rho C_p T + \frac{\partial}{\partial z} (v A \rho C_p T) dz$$

由化学反应而产生的热 $= -A dz k C_A \lambda$

传递给金属壁的热 $= -h_T (\pi D dz) (T - T_M)$

式中 h_T = 传热膜系数，英热单位 / 英尺² · °R · 秒

D = 管子的直径（英尺）

通过 z 界面由热传导而进入的热 $= q_z A$

通过 $(z + dz)$ 界面由热传导而离开的热 $= q_z A + \frac{\partial}{\partial z} (q_z A) dz$

式中 q_z 是由热传导产生的 z 向上的热通量。我们将利用傅里叶定律，用温度推动力表示 q_z ：

$$q_z = -k_T \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2-30)$$

式中 k_r 是有效导热系数 (英热单位 / 英尺 · 秒 · °R)

系统内能的变化速率:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho A dz C_p T)$$

结合以上各项, 得到

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T) + \frac{\partial}{\partial z}(v \rho C_p T) + \lambda k C_A +$$

$$\frac{4 h_r}{D}(T - T_M) = \frac{\partial}{\partial z}(k_r \frac{\partial T}{\partial z}) \quad (2-31)$$

2-2.3 运动方程

如同任何一个高中学生所知道的那样, 牛顿的第二运动定律说明: 不变质量 M 的系统, 作用力等于质量乘加速度。

$$F = \frac{Ma}{g_c} \quad (2-32)$$

式中 F = 力, 磅力

M = 质量, 磅质

a = 加速度 英尺 / 秒²

g_c = 为使单位一致所需要的换算常数 = 32.2 磅质 · 英尺 / 磅力 · 秒²

这是个基本关系式, 用它来建立系统的运动方程。在略微更一般的形式中, 系统的质量可以随时间而变化,

$$\frac{1}{g_c} \frac{d(Mv_i)}{dt} = \sum_{j=1}^N F_{ji} \quad (2-33)$$

式中 v_i = 在 i 方向上的速度, 英尺 / 秒

F_{ji} = 作用在 i 方向上的第 j 个力

这个式子表明, 在 i 方向上的动量 (质量乘 i 向速度) 变化速率等于在 i 方向上的推力的净和。它可以被看成是一个力衡算式。或者, 更恰当些, 叫作动量守恒。真实的空间有三个方向: X 向、 Y 向和 Z 向。因此, 任何系统都可以写出三个力衡算式。所以, 每一个系统都有三个运动方程 (再加上一个总质量衡算式, 一个能量方程和 $(J-1)$ 个组分衡算式)。

代替写三个运动方程的办法, 是把这三个方程写成一个矢量方程。这样作更方便 (而且总是更漂亮) 一些。在本书中, 我们不用矢量形式, 因为我们的全部例题都是简单的一维的烛衡算问题。有几本优秀的教程^①中, 包括有比较复杂的系统, 特别是在流体力学的领域里。

例题2-9 在第一章描述过的高位槽系统, 提供了一个简单的例题, 可用来说明运动方程对宏观系统的应用。参看图 1-1 用 L (英尺) 表示输出管线的长度, 用 A_p (英尺²) 表示输出管

① R. Byron Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, "Transport Phenomena", Wiley, 1960.

H. Schlichting, "Boundary Layer Theory", Pergamon, 1955.

J. R. Welty, C. E. Wicks, and R. E. Wilson, "Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer", Wiley, 1969.