

化学反应工程课程中学生工程思维能力培养探讨

张良佺

(浙江科技学院 生物与化学工程学院,杭州 310023)

摘要: 揭示了培养学生工程思维能力的内涵,包括化学反应器中工程因素的提炼与概括,归纳了工程开发过程中必须遵循的基本原理和一般思路,提出了提高课堂教学效果的相关建议。

关键词: 化学反应过程;传递过程;反应器

中图分类号: G642.0; TQ03 文献标志码: A 文章编号: 1671-8798(2011)05-0396-05

On training ability of engineering thinking for students in chemical reaction engineering course

ZHANG Liang-quan

(School of Biological and Chemical Engineering, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou 310023, China)

Abstract: The engineering content of students thinking ability is revealed in this paper, which includes abstract and summarization of engineering factors in chemical reactor. The basic principles and general ideas followed in the project development process are also summarized. Proposals for improving classroom teaching are offered.

Key words: chemical reaction process; transfer process; reactor

工程思维能力建立在计算能力培养之上,又高于计算能力。一些学生也许有着良好的计算能力,但却不一定称得上一个真正意义上的工程师,其主要原因在于并没有培养出高超的工程思维能力。工程思维能力的建立和培养最重要、最核心、最关键的问题在于工程观念的树立。工程观念主要包括如下内容^[1-4]:有哪些工程因素?工程因素是如何影响化学反应过程的?影响的程度有多大?怎样建立准则来判断这种影响?这属于客体方面;若从认识论角度看,则必须了解哪些工程因素的影响是有利的?哪些是不利的?如何将有利因素发挥最大作用或将不利因素抑制到最小甚至消除,即采取哪些工程手段?以下就如何培养学生工程思维能力提出一点个人思考。

收稿日期: 2010-09-26

资金项目: 浙江科技学院重点课程建设项目(F527103902)

作者简介: 张良佺(1965—),男,安徽省铜陵人,教授,博士,主要从事化学反应工程的研究。

1 关于学生工程思维能力的培养

1.1 工程观念的建立——工程因素的提炼与概括

所谓观念,是指客观事物在人脑里留下的概括的形象。工程观念即是对工程现象的主观反映。而概念则是指人们对客观事物本质属性的反映,故工程观念建立的核心是对工程概念的正确把握。

对本学科而言,首先需要建立的一个观点就是化学反应过程速率中心论。如前所言,化学反应从微观上看是分子与分子之间的碰撞而发生的变化,从宏观上看,则分为体积反应速率和表面反应速率。体积反应是指反应场所遍布于空间,表面反应则是指反应场所在表面上进行。两种反应速率的定义也存在不同,前者是指单位时间、单位体积反应物的消失量或生成物的生成量,后者则是将单位体积改换为单位面积。两种不同定义适应于不同的场合,通常均相反应多为体积反应,气固相催化或非催化反应多为表面反应。对气液相反应,则视反应速率的快慢而分为不同的情况,当为瞬间反应时,整个反应实际是在气液相界面处进行,即为表面反应;若是慢速反应,则反应主要在液相主体中进行,反应为体积反应。应当说无论是体积反应还是表面反应,其过程并无本质区别,表面反应过程其数学表达式也可通过适当的变换而转化为体积反应表达形式。

根据经验,化学反应速率是浓度和温度的函数,可表示为浓度效应与温度效应的乘积。随着化学反应的进行,在反应场所将形成一定的浓度和温度的分布,如在间歇反应器中,虽然在某一时刻,整个反应器的浓度和温度均匀,但随反应时间的不同,浓度和温度亦不相同,即在时间尺度上形成分布。而对平推流反应器,在同一截面上,不同时刻,物料浓度和温度相同,但在反应器不同的轴向位置处,浓度和温度却形成了一定的分布。在以上两种特殊反应器中,分布的形成完全由化学因素决定,又称为自然分布。

在工业规模反应器中,不仅存在化学过程,还存在大量的物理过程。这些物理过程和化学过程交织在一起,相互作用,共同影响着反应结果,所以要牢固树立的第一个工程概念是——返混和不均匀流动及其对反应结果的影响。

返混是不同反应时间物料之间的混合,在化学反应领域,通常从不同的角度将混合分为4类,依物料之间的反应时间不同可分为同龄混合和非同龄混合,依混合尺度不同分为宏观混合和微观混合。将返混定义为非同龄混合,业内无异议,而约混合尺度来判别返混,则出现分歧。一些研究者认为返混的准确定义应是不同反应时间的物料之间的宏观混合;而另一些研究者则持不同意见,认为与混合尺度无关,只要反应时间不同,不管是大尺度的混合,还是小尺度之间的混合,都是返混。笔者以为将返混定义为宏观混合,从方法论角度来看,也有它的可取之处,因为宏观流体所进行的宏观混合与反应过程,可以进行简单的加和获得最终的反应结果。除一级反应外,化学反应过程都是非线性系统,而混合过程则为线性,故最终结果不能通过两者简单的叠加而获得。但对宏观流体,由于各微团之间完全没有物质的交换互不相干,反应结果仅由各自的停留时间和反应动力学规律所决定,总的结果为各微团的加和。将返混定义为宏观混合其意义正在于此。然而不论返混的定义如何,它并没有改变混合过程的复杂性。当微元与微元之间存在有限混合时,对反应结果的影响,至今仍没有一个简单而有效的模型加以描述。

当流体通过反应器时,由于管壁对流体的阻碍作用,流体的流动往往要形成边界层,从而偏离理想流动状态,造成不均匀流动,形成速度分布。不同微元的流速不同,在反应器中的停留时间也不同,则反应结果必将不同。

要树立的第二个工程概念是传质过程及其对反应过程的影响。如前所言,在均相系统内部,考察的重点是流动与混合过程对反应过程的影响。而在非均相系统中,相与相之间往往存在着质量传递,如气固相催化反应,反应物存在于气相,但反应场所为催化剂表面,若没有催化剂,则反应无法进行。为使反应能够进行,反应物必须先要扩散到催化剂表面,被表面吸附,方能发生反应。若将气体主体流速提高到足够程度,同时催化剂的粒径足够小,能够消除内外扩散影响,反应结果将唯一地由化学动力学因素决定。但在工业反应器中,线速度较大可以保持,故外扩散影响可以忽略,但催化剂颗粒半径却不可能过小,如果粒径

过小,最直接的后果是通过床层的气流压降过大、动力消耗大,因此必须将催化剂粒径维持在一定数值上,否则内扩散影响往往较严重。而扩散过程和反应过程耦合在一起,相互影响,相互作用,必将影响到最终的反应结果。如扩散过程的进行必须藉助于浓度差为推动力,则反应场所的浓度将低于无扩散时的浓度,从而造成反应速率的改变。

必须牢固树立的第三个工程概念是热量传递及其对反应过程的影响。返混是过程连续化的伴生现象,质量传递则是由于非均相反应而引起的,而热量传递的产生则是由于化学过程的热效应引起的。化学反应发生时,由于化学键的破裂所需的能量与合并过程中所放出的热量并不相等,宏观上则表现为放热或吸热。放热或吸热造成了反应场所附加的温度分布,进而影响到反应过程。尤其复杂的是当反应为放热时,由于过程的非线性,在颗粒尺度及反应器宏观尺度上往往呈现出多态现象,以及随之而来的着火和熄火问题。着火和熄火现象其典型特征是温度改变的突变性,从而使传热过程对反应过程的影响更为严重。在正常操作时,应努力避免这种突变性,于是产生了“稳定性”操作问题。“稳定性”实际上是指系统抵抗外界干扰的能力。

以上较为详细地阐述了化学反应过程和 3 个基本的工程概念内涵,总之,对于过程与过程、反应器与过程之间的关系,必须树立的极其重要的整体观念是:

1) 化学反应过程与传递过程相互独立,即反应过程规律不影响传递过程,传递过程规律也不影响反应过程,但由于影响反应过程和传递过程的基本因素是相同的,如温度的高低既影响反应速率的大小,温度差值也同时影响传递过程速率快慢,同样浓度因素也是如此,所以从质的角度来看,过程之间虽然相互独立,但从量的规定性上看,相互之间却交织在一起;

2) 化学反应速率规律不随反应器的型式和规模大小而变化;

3) 传递过程规律也不随反应器的型式和规模大小而变化,但反应器的型式和尺寸大小却影响到传递过程的结果,进而影响到化学反应结果。

它们之间的关系如图 1 所示^[1]。

图中的结合不是化学反应规律和传递规律简单的加和,若是简单的加和则本学科将无存在的价值,因为化学反应速率和传递过程分别为物理化学和化学工程所研究。这种“结合”产生了很多物理化学和化学工程所没有的新现象,如在研究返混对反应过程的影响时,为反映这一影响,人们引进了贝克莱(Peclet)准数, P_e 表征了返混的大小,其值越大,返混影响越小。又如气固相催化反应,为表征扩散过程对反应过程的影响,引进了西勒模数和达姆堪勒准数,西勒模数 Φ 越大,表明内扩散影响越大,达姆堪勒准数 Da 越大,则外扩散影响越严重。对气液相反应,为表示扩散的影响,引进了膜内转化系数 γ ,其意义与上面各准数相类似。

1.2 工程开发过程的基本原理和思路

工业反应器的开发一般要解决 3 个基本问题:一是反应器的选型;二是反应器的操作方式;三是反应器的大小设计。本学科发展至今,已经在很大程度上解决了这 3 个问题,建立了一整套具有自己特色的反应器开发思路。

在工业规模反应器中,虽然反应过程和大量物理过程同时存在,相互影响,但各自所遵循的规律却不因对方的存在而发生改变。这是一条极其重要的原理,它带来的直接好处有两条:一是避免了在实验室里直接研究工业反应器的困难,若实验室中直接将工业反应器作为研究对象,不仅经济成本高昂,更重要的是技术上的不可行,因为大规模尺度容器中,反应过程和各种传递现象交织在一起,从而无法有效地了解和把握相互之间的影响;二是可以经过分解的手段,将化学反应过程和传递过程分离开来,分别单独地加以研究。

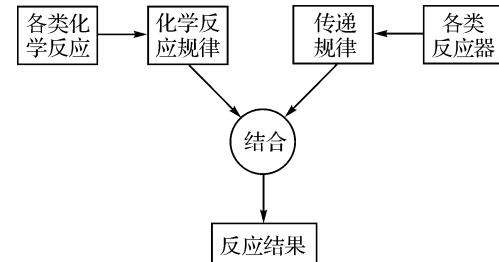


图 1 化学反应过程与传递过程之间的关系

Fig. 1 Relationship between chemical reaction process and transfer process

首先将反应过程剥离出来,在实验室规模上消除传递过程的影响,对反应动力学进行研究。如在微型间歇反应釜中进行均相反应动力学的研究,在充分搅拌下,反应釜中各处的浓度和温度相等,不存在浓度和温度分布,同时由于混合的是同龄物料,故混合过程也不影响反应结果,反应结果仅由化学动力学因素决定,故所测为本征动力学方程。对非均相反应,最常见的是气固相催化反应,为消除外扩散,必须保持高的线速度;为消除内扩散,则必须减小催化剂的颗粒直径,所获得的动力学方程亦仅由纯化学因素决定。在排除了这些工程因素的影响后,所得到的将是过程中最为基本的要素,从而更利于把握过程的本质。

动力学方程包含着关于浓度和温度的重要信息,根据浓度效应,基本上可以确定工业反应器应当具有什么样的型式,如图1所示,反应器的型式、结构尺寸影响的是传递过程的速率大小,进而影响到反应结果。不同型式的反应器中物流所具有的传递过程对反应结果的影响并不相同,如对均相反应,若采取釜式反应器,则必须充分考虑混合过程的影响,如反应级数为1级,微团之间的混合没有影响;当级数小于1时,混合对反应结果有利;而当级数大于1时,混合对反应结果不利。

根据反应温度效应,确定反应器的操作方式^[3]。通常操作方式分为绝热、等温和非等温3种形式,当反应的热效应不大(反应热较小,活化能较低),采用绝热操作是最方便的;对中等热效应的反应,亦可考虑采用绝热操作,因为绝热反应器结构简单、经济;对热效应较大的反应,要求在整个反应过程中同时进行有效的热交换,例如采取列管式反应器等;对极为快速的反应,一般考虑采用绝热操作,或者利用溶剂的蒸发来控制温度。

当反应器的型式确定后,为进行反应器大小的准确设计,必须对该反应器中所发生的传递过程进行定量的研究,一般都建议进行大型冷模实验以获取传递过程数据。但笔者以为,因次分析法所需遵循的一个重要原则是“由小及大”,故传递过程的研究亦不妨先在实验室中进行,而将大型冷模实验由探索型改为验证型。这样不仅可以减少工作量,降低成本,更重要的是提高了实验的科学性和预见性。

在具备“三传一反”等基础数据后,接下来需要进行的是过程的综合,即反应器的模型设计。反应工程学没有排斥经验放大法,但作为一门学科,尤其是在当前计算技术的快速发展背景下,它更强调数学模型法的重要性。如气固相催化反应中,常用的模型包括拟均相一维模型、二维模型乃至非均相模型等,通过计算机手段,进行模拟及优化。

求出关于工业反应器的重要工艺尺寸后,需要进行热模试验验证,一般认为热模试验应在工业规模反应器上进行,看实验数据和模型计算是否一致。若不一致,则修正模型;若一致,则表明模型选择正确。但热模实验是否一定要维持在工业规模,是个见仁见智的话题。从方法论角度讲,答案将是否定的,即不一定取工业规模;不过考虑安全因素,却似有必要。

以上粗略介绍了反应器开发过程大致思路,因问题实在重要,再次总结如下:

- 1)研究反应系统计量学特征,了解反应属于简单反应还是复合反应,抑或为反应网络;
- 2)研究反应动力学特征;
- 3)进行工业反应器的初步选型;
- 4)进行传递过程研究;
- 5)进行过程综合,建立反应器数学模型,计算反应器重要的工艺参数;
- 6)进行热模实验,验证模型正确与否。

2 关于提高课堂教学效果的一点建议

2.1 教材内容的精选

当前,关于本学科可选的教材颇多,但浅深不一,所取材料亦大为不同。总之是各有特色,尤其是本学科与其他学科互相交叉、互相渗透的势头迅猛,产生了很多新的领域,如生物反应工程、聚合反应工程、电化学反应工程及环境化学工程等。而现在的教学为满足“厚基础,宽口径”的要求,教学时数不升反降,如何在教材内容不断扩展而时数不断下降之间寻找一合适的平衡点,实在是每个化学反应工程教学工作者

面临的一个必须选择的难题。为此笔者认为在目前情势下,面面俱到地把每一部分內容都涉及到已不可能,不妨采取所谓“解剖麻雀”的方式,抓住一点,旁及其余。例如:大多数教材都是按“相”进行内容的编排,而最基本的则是均相,反应过程自然是其核心,但在反应进行的同时,对均相出现的工程因素是“返混和不均匀流动”及“热量传递”;而对非均相反应,不过是在这两个工程因素之外,还出现了“质量传递”,3个工程因素同时出现。从这里实际上已可窥见无论是均相反应还是非均相反应,过程的计算和分析方法其实具有极大相似性。若真正对均相反应过程有透彻了解,则对非均相过程的学习便可以起到事半功倍的效果。至于非均相反应之间,如气固、气液之间,其类似性更易比拟了。因此笔者认为对均相反应应花费主要精力进行讲解,对于非均相反应则以气固相催化反应为主,对于气液、液液及气液固三相等内容,可以少讲或以自学为主,这样可以有效的解决内容广泛和课时不足之间的矛盾。

2.2 课件的广泛使用

课件的使用,目前已经非常普遍,本学科也不例外。使用课件的好处主要有二^[5-6]:一是信息量较大,这在一定程度上有利缓和课时少的矛盾;二是对比较复杂的反应器设备,可以方便地以图形方式呈现在学生面前,使其较快地增加感性认识。但过分地依赖课件,也会产生一些弊端,效果不一定能达预期。因此比较常用的办法是课件与黑板上的板书相结合,或许效果更佳。

2.3 加强实验教学

如前所言,化学反应工程从根本上来讲是一门实验科学,尤其是对培养工程应用型人才的高校,若无实验教学,实在不堪设想。对实验教学,不仅要求学生会进行实验的操作及数据处理,更重要的是须强调实验方法论,为今后自己独立地从事化工科研或指导实际化工生产打下坚实的基础。

3 结语

工程思维能力最为重要的是工程观念的建立和培养,具体包括:返混和不均匀流动及其对反应结果的影响,传质过程及其对反应过程的影响;热量传递及其对反应过程的影响。工业规模化学反应器开发的一般思路是研究化学反应计量学特征;研究反应动力学特征;工业反应器的初步选型;进行传递过程研究;进行过程综合,建立反应器数学模型,计算反应器重要的工艺参数;进行热模实验,验证模型正确与否。针对上述工程思维能力培养要求,在课堂教学过程中应采取相对策,如教材内容精选,广泛使用课件,加强实验教学等。

参考文献:

- [1] 张濂,许志美,袁向前.化学反应工程原理[M].上海:华东理工大学出版社,2007.
- [2] 郭锴,唐小恒,周绪美.化学反应工程[M].北京:化学工业出版社,2007.
- [3] 陈甘棠.化学反应工程[M].北京:化学工业出版社,2007.
- [4] LEVENSPIEL O. Chemical Reaction Engineering[M]. 北京:化学工业出版社,2002.
- [5] 王垚,金涌,程易,等.化学反应工程教学新理念和实践探索[J].化工高等教育,2009,26(2):1-4,8.
- [6] 李金龙,贾丽华,隋国哲,等.化学反应工程教学改革探讨[J].高师理科学刊,2005,25(3):105—107.