

贯穿化学反应工程学的三条主线和 学生计算能力培养

张良佺

(浙江科技学院 生物与化学工程学院,杭州 310023)

摘 要: 揭示了化学反应工程学科贯穿的 3 条主线,分别为统一的研究对象、化学反应过程中遵循的 3 个守恒定律及研究方法论,并具体阐述了它们各自的内涵及所包含的范围;同时提出了培养学生工程计算能力的必要性、紧迫性及具体思路。

关键词: 化学反应;工程计算;守恒定律

中图分类号: G642.3;TQ03

文献标志码: A

文章编号: 1671-8798(2011)06-0514-05

On three main lines through “chemical reaction engineering” and training of students’ calculation ability

ZHANG Liang-quan

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

Abstract: The three main lines throughout the “chemical reaction engineering” discipline are revealed in the paper. They are unified object of study. The three conservation laws follow the chemical reaction process and research methodology. The details on their respective content and scope contained are provided. Meanwhile, the necessity and urgency of training students’ engineering computing ability and specific ideas are also presented.

Key words: chemical reaction; engineering calculations; conservation law

浙江科技学院自建校以来,一直以培养高级工程应用型人才为目标,经过多年实践和不断创新,形成了具有自己特色的并和国际接轨的先进的办学模式。化学反应工程作为化学工程与工艺专业的必修主干课程,正是以培养应用型人才为目的,以建立学生工程观念为宗旨,完全和学校的办学模式相吻合。

经过多年的教学实践,笔者深深地感到该课程的重要性,对于培养学生工程应用能力不可或缺。为

收稿日期: 2010-09-26

基金项目: 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。

此,笔者拟从化学反应工程学主要含摄的 3 条主线及如何培养学生的计算能力两方面,阐述该课程在教学过程中所涉及的几个关键问题。

1 化学反应工程学科的 3 条主线

1.1 统一的研究对象

任何一门学科必有统一的研究对象,若无统一的研究对象,则一门学科必不能完整成立。化学反应工程也不例外,它是研究工业规模的化学反应过程。该定义包括了两方面的基本内容:

1) 它研究的是化学反应过程,和其他物理过程不同,化学反应过程具有自己的特质,在运动、变化过程中遵循着特有的规律;

2) 工业规模,这决定了它不同于实验室研究,作为学科,显然它也不同于以反应过程机理研究为特点的物理化学。

物质的运动方式多种多样,其中包括物理运动和化学运动 2 种基本运动形式。物理运动,物质的分子结构不发生变化,分子是保持物质化学性质的最小单元;化学运动则正好相反,它改变了分子中原子与原子之间的排列,旧键断裂,新键生成。就外延而论,化学反应通常分为简单反应和复合反应 2 类。简单反应包括不可逆反应、可逆反应、自催化反应等,复合反应则包括串联反应、并联反应及它们的组合反应。2 类反应存在着较大的差异,对于简单反应,人们一般关心的是转化率;而对于复合反应,由于存在着副反应,单纯的转化率并不能完整表示反应进程,人们往往更为关心的是选择率,即生成目的产物的量占总反应量的比例。

反应过程,研究的是化学反应动力学规律,即化学反应速率和影响因素之间的关系。根据经验,人们总结出化学反应速率的主要影响因素是温度和浓度。浓度和温度对反应速率的影响往往各自成为一体,写成数学形式即为:速率=浓度效应 \times 温度效应。应当说研究化学反应速率的变化规律本是物理化学的内容,但其偏重于机理,以致不能满足化学工程师的需要。于是化学工程师们便自起炉灶,经过长期研究和发展,自成一体,形成了一整套具有工程特色的思路和方法。他们的研究重点注重于实用,关注的是速率和浓度、温度之间量的变化关系,而较少顾及微观机理方面的探讨。

化学工程师的根本任务是为了将化学反应实现工业化,以满足社会生活和经济发展的需要。基于这一根本需要,工程师的研究不可能止步于实验室。有趣的是,和实验室中的研究相比,工业化的反应过程,其复杂性并不来源于化学过程,而是来源于工业化过程所伴生的大量物理过程,也就是所谓的“三传”现象:动量传递、物质传递和热量传递。如前所述,化学反应的本质是分子之间的微观变化,传递过程则具有宏观性,因此往往将它们称为工程因素。大量工程因素的存在,虽不改变化学反应速率的变化规律,但却改变了反应结果。多数情况下,工业化的结果不如实验室中的小试成果,过程恶化,如转化率或选择率下降,这就是所谓的“放大效应”。“放大效应”是工程师们必须面对的一个现象,本学科也可以说研究的就是放大过程所遵循的规律。

化学反应的进行离不开场所,这个场所就是化学反应器。从不同角度出发,反应器有不同的分类。从形状上来看,反应器一般分为管式、釜式和介于两者之间的塔式。划分的标准是高径比^[1-2],高径比大于 30 时即为管式,高径比小于 3 时为釜式,在 3 与 30 之间则为塔式。对于工业反应器最终采取什么样的结构、形状及采取什么样的操作方式,取决于化学反应过程的特征及工艺对它的要求:如反应速率随转化率的升高而减小,采取平推流管式反应器比连续釜式要优越;如反应速率随转化率的升高而增大,则连续釜式反应器比平推流管式要优越;而在另外一些情况下,如对于自催化反应,将不同形状反应器进行适当的组合往往能取得比单一反应器更好的反应效果。

1.2 3 个定量关系

在化学反应进行过程中,无论过程如何复杂,物理量之间必然遵循 3 个定量关系,这就是动量守恒、物料守恒和能量守恒。3 个守恒定律可以以统一的数学形式来表达^[3-4]:

$$\text{输入量} = \text{输出量} + \text{累积量}$$

该表达式虽普适于一切过程,看似简单,其实变化多端,过程不同,其表现形式也大相径庭。首先,本学科中,化学反应过程是其特有的,为其他学科所无,表达式的最后形式也必然会体现这一特点。而化学反应速率存在不同的表示方法,不同的表示方法将会影响到上式的书写形式,如以反应物的消失快慢表示化学速率,则上述表达式中的输出量就要加上该项;若以生成物的生成快慢来表示化学速率,则输入量便要加上该项。

其次,对不同物系在不同的反应器中,该表达式表现形式亦不相同。如在全混釜中由于搅拌充分,反应釜各处的浓度和温度一致,这时的控制单元就可以取整个反应器,其物料和热量衡算将非常简单,为一组代数方程。若反应在平推流反应器中进行,由于在不同的流动位置,流体微元具有不同的反应时间,反应物或生成物的温度、浓度不同,沿着反应器管长形成分布,故不能以整个反应器为控制单元,而只能取一微元为考察对象,最终反应结果是各微元在整个反应器流动方向上的积分;又由于做出了一维假设,其结果描述该反应器的物料和热量衡算关系为一组常微分方程,比起全混釜反应器来显得复杂很多。若在反应进行的同时,反应物不仅沿流动方向而改变,同时在反应器的径向位置上还存在着返混,则控制单元只能取高度为 dl 、厚度为 dr 的环状微元,最终反应结果是各微元在整个反应器上的积分;又因为做出了圆环假设,三维空间上的积分可以简化为二维,虽然是二维,表示物料和热量衡算关系的将是一组偏微分方程,方程形式和求解过程将更为复杂。

由于化学反应过程为本学科的基本过程,此定量关系也必贯穿整个化学反应过程的始终,所以它们构成了化学反应工程学另一条主线。

1.3 研究方法论

上面讨论的研究对象和定量关系其实都是关于客体方面的,本小节讨论的研究方法论,则偏重于主体思想认识范畴。

对化学反应工程学科来说,研究方法大体包括 3 种:一是实验研究,又名经验方法;二是理论研究方法,又名解析法;三是半经验半理论的研究方法,即所谓数学模型法。

化学反应工程自设立以来,作为一门工程学科,其复杂性往往不仅表现在过程本身,而更表现在化学反应器复杂的几何形状及千变万化的物性,如气固相催化反应器,其化学反应过程速率,人们能够给出恰当的描述,但流体在床层和反应器壁之间的行为与床层中间流体的行为差别极大,同时器壁附近催化剂颗粒表现出各向异性,在床层中颗粒则是各向同性,这一现象称为“壁效应”。对“壁效应”现象做出准确的描述往往非常困难,不同的研究者给出的研究结果往往并不相同,有时甚至相差极大。所以对化学反应过程要想做出如实的数学描述将是一件十分困难的事情。本学科发展至今,应用解析法处理化工过程,还未见一个成功的案例,于是研究方法就只能是经验法和数学模型法了。

经验研究方法不考虑过程的机理,直接应用实验数据进行关联建立方程,如不考虑反应历程,直接将反应动力学写成幂级数或其他形式,然后进行实验数据的测定和方程参数的回归,最后获得经验方程。毋庸讳言,依赖该方法所获得的方程其普适性存在较大局限,适应范围很难超越实验区间,外推能力弱。虽然经验法存在着这样或那样的缺陷,但它却是极为重要的一种方法,在早期化学反应工程发展过程中,功不可没。同时需要说明的是,对于实验研究,虽属经验,但也具备很强的方法论,并非毫无章法、乱来一气。如研究反应器中物质传递过程时,由于设备因素的复杂性及物性的多样性,如果实验必须遍及一切设备和一切物性,那么这样的实验其工作量将无限庞大而失去指导意义,应用“因次分析”的方法研究传递过程已经在很大程度上解决了这一难题。因次分析法成功与否很大程度上取决于能否将影响过程的主要因素罗列完整。

实验法由于存在固有的缺陷,而解析法又存在难以逾越的困难,在折中平衡当中,化学反应工程学科发展出极具特色的半经验半理论方法,即数学模型法。

应用数学模型法研究化学反应动力学过程,其基本思路为:首先根据自己对过程的理解提出相应的历

程假设,因是假设,其可能历程存在多种,对每一种可能的途径,在“定常态”或“平衡态”的前提下,经过适当的推导,便可以获得多种形式的动力学方程,各种不同方程当中必包含多个反映过程特征的模型参数。进行实验设计,通常用正交法,确定因素数和水平数,对照相应的正交表,确定实验次数。获得实验数据后,再通过线性或非线性回归,求出模型参数。由于设定了多个模型,到底哪个模型更符合实验数据?于是需要对模型进行显著性检验,应用统计学知识,例如进行 F 检验,以获得最佳模型。而“半经验半理论”含义则主要体现在“模型”二字上面:因为是模型,不是客体原型,其理论不可能纯粹,只能是“半理论”;因为是模型,必离不开假设,而一旦有假设,则“经验”成分即包含其中了。同时最为关键的是,模型中一定含有参数,参数的获得不能依靠模型本身,只能依赖实验,实验是该方法的基础,所以“半经验”三字位于“半理论”之前,即是逻辑的必然了!

与经验法相比,模型法具有较大的优越性。如果说经验法的“因次论”在物性上面解决了“由此及彼”、在设备上解决了“由小到大”的话,那么模型法在一定程度上获得了“由表及里”的本质飞跃。虽然模型法中亦需依赖实验以解决模型参数的数值问题,但相比经验法,这时的实验设计无论是工作量、还是目的性都发生了根本的变化。模型法实验设计的目的仅仅是为了验证假设的机理是否正确,其性质为验证性,伴随而来的是工作量大大下降;而经验法中的实验更大程度上是探索性质的,因此必然具备更多的盲目性,无论是工作量还是其风险性都远远高于前者。随着计算机的发展,计算技术的提高,模型方法正以一泻千里之势飞速发展着。

模型法在本学科中应用得最为成功的例子要数氨合成反应动力学的研究,研究者焦姆金将氢气和氮气在一定温度、压力下,在铁催化剂存在时,进行了合成反应。在消除内、外扩散影响的情况下,焦姆金提出了由氮气在催化剂上的非均匀吸附为控制步骤的设想,在此设想下,经过数学推导,获得了反应动力学模型,模型的数学形式是幂级数型。通过合理的实验设计,求出了模型参数。时至今日,该模型仍然在氨合成反应器设计中广泛使用,并且作为典型案例被广泛收录在教科书中。

2 关于培养学生工程计算能力的思考

对学生工程计算能力的培养是化学反应过程中所遵循的3个定量规律提出的必然要求,在3个守恒定律中,由于流体通过反应器时的压降和整个管路的压降相比往往可忽略不计,所以动量守恒定律通常不予考虑,3个衡算定律中便剩下物料和热量衡算2个了。

化学反应工程问题的计算通常包括设计型和操作型2种类型^[5-6]。设计型问题的计算,是以反应器处理能力或生产能力为目标,在入口条件和生产任务确定的前提下,计算反应器的空时,空时的物理意义是每处理一个单位体积的原料所需要的反应器的体积,显然其值越大,所需反应器的体积也越大,表明反应器处理原料的能力越小。操作型问题的计算,则是在反应器体积一定的前提下,求解反应器出口处反应转化率或选择率。2种类型的计算由于目的不同,计算思路与方法稍有差别,但基本的依据是相同的,就是2个衡算定律。同时当过程不同、反应器形式不同时,采取的模型也将不同,最终的数学方程将存在较大的差别。如气固相催化反应器的模拟,若采取一维拟均相模型,数学模型将是一阶微分方程组;若采取二维拟均相模型,数学形式将是二维偏微分方程组。无论是方程形式的建立,抑或是边界条件的确定,其难易程度及计算工作量的大小,一维模型均无法和二维模型相比拟。

应当说,目前学生的计算能力确实不容乐观,主要原因是其数学基础过于薄弱,尤其是将实际问题数学化的能力极为欠缺,这也成为当前化学反应工程学科在教学过程中遇到的最为困难、最为棘手的一大障碍,也是学生不能很好地、很自如地学习本课程的主要瓶颈所在。计算能力差,要想培养更为高级的工程思维能力,无异于梦中呓语。因此,如何提高学生的计算能力实在是一件迫在眉睫的艰难任务,笔者在此提出如下几点意见以供参考。

2.1 加强数学基础的学习

一个工程技术人员,如果有良好的数学基础,那么从事开发过程研究,无疑是如虎添翼;相反,如果数

学基础薄弱,或者对数学知识的学习过于轻视,要想在自己专业上有所建树,则如同空中楼阁。加强数学知识的学习,重要的一点是观念的转变,当前学生中普遍或潜在的一个错误认识是:自己是搞化学化工的,只要会做实验就万事大吉了。于是很多学生花费所有的课余时间呆在实验室进行动手能力的训练,而忽视了更为本质的理论思维能力的培养。动手能力固然极为重要,但理论思维能力的训练则是一个经过大学训练的大学生和没有经过大学训练的专科生之间的根本差别。

2.2 强化数学理论的应用训练

工程技术人员所需要的是数学的应用能力,要求他能够将一个实际的工程问题娴熟地从数学角度加以思考,而不要求他去证明或发现一个新的数学定理,因此在课堂教学上应注意培养学生的应用能力。一个有效的措施是在课堂教学中增加案例教学,通过具体案例,学生可以进行模仿练习,从中学习他人解决工程实际问题的思路和方法。耳濡目染,经过一定时间的训练,应当能取得满意的效果。

2.3 加强学生编程能力的训练

学生编程能力的培养非常重要,在教学过程中发现本校学生编程计算能力极为薄弱,虽然大部分学生都有个人计算机,但遗憾的是计算机主要用在了网络游戏上面,没有真正用于培养和提高学生的计算能力上。对本学科,由于涉及大量的数学模型,而这些模型是无法通过手工计算获得结果的,必须要依靠电脑编程的帮助,才能迅速有效地获得计算结果。在教学计划中应充分体现该问题的重要性,增设相关的课程,切实加强这方面的训练,努力提高学生的计算能力。

3 结 语

从以上讨论中可获得以下结论:

- 1) 化学反应工程学科存在统一的研究对象,即工业规模的化学反应过程;
- 2) 在工业规模的反应过程中物理量遵循 3 个基本的守恒定律,守恒定律可以统一表示成“输入量 = 输出量 + 累积量”;
- 3) 从认识论角度考察,反应工程学科存在统一的研究方法,即实验研究方法和数学模型法;
- 4) 提出了培养学生工程计算能力的具体思路,其中主要的是数学知识的应用学习,以及如何将一个工程问题转化为数学问题的案例训练。

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]. 影印版. 北京:化学工业出版社,2002.
- [5] 黄莉,乔旭,崔咪芬,等. 化学反应工程教学刍议[J]. 化工时刊,2008,22(12):66-67.
- [6] 聂伟安,龙立平,熊文高,等. “实践—认识—再实践”教学方法在化学反应工程教学中的应用[J]. 化工高等教育,2007,24(5):86-88.