

# 化学反应工程课程的逻辑结构及工程思维方式

张良全<sup>1</sup>, 张蕴贤<sup>2</sup>

(1. 浙江科技学院 生物与化学工程学院, 杭州 310023; 2. 复旦大学 中国语言文学系, 上海 200437)

**摘要:** 为了详细且严谨地表达化学反应工程课程内在的逻辑结构, 首先应用分类的方法, 根据不同的划分原则对化学反应器进行了划分, 同时针对均相反应器, 采用树状结构分层次地显示了各知识点及其相互关系; 其次对化学反应动力学模型建立过程, 应用框图形式表示了各关键点之间的联系; 最后为培养科学严谨的工程思维方式, 应用框图形式形象地表达了不同的工程因素与化学因素对反应结果的作用机制, 从而为学生学习并牢固地掌握该课程知识体系及后续的化工过程开发创新提供了科学的方法。

**关键词:** 反应工程; 化工过程创新; 均相反应器

中图分类号: G642.3; TQ03

文献标志码: A

文章编号: 1671-8798(2016)05-0401-08

## Logical structure and thinking mode of engineering in discipline of chemical reaction engineering

ZHANG Liangquan<sup>1</sup>, ZHANG Yunxian<sup>2</sup>

(1. School of Biological and Chemical Engineering, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou 310023, China; 2. Department of Chinese Language and Literature, Fudan University, Shanghai 200437, China)

**Abstract:** For a detailed and rigorous expression of the inherent logical structure of chemical reaction engineering discipline, the author firstly uses classification method to divide chemical reactor depending on different principles. And for homogeneous reactor, dendritical structure is applied to hierarchically show each knowledge point and the relationship between them; and then for the establishing process of the chemical reaction kinetics model, block diagrams are applied to illustrate the contact between each key points; finally, for the training of scientific and rigorous thinking mode of engineering, block diagrams are used to visually described the effect system of different engineering factors and chemical factors on the reaction results, which provides scientific ways to learn and firmly grasp the knowledge hierarchy of this discipline and the subsequent development and innovation of chemical process.

**Keywords:** reaction engineering; chemical process innovation; homogeneous reactor

---

收稿日期: 2016-02-17

基金项目: 浙江科技学院重点课程建设项目(F464103G02)

作者简介: 张良全(1965—), 男, 安徽省铜陵人, 教授, 博士, 主要从事绿色化工过程开发研究。

化学反应工程是化学工程与工艺专业必修课,是主干课程之一,而且是任何一位学生成为优秀工程师所必需具备的重要专业基础知识。它的研究对象是以工业规模进行的化学反应过程,简称“工业反应过程”;其研究目的是实现工业反应过程的优化;它的核心内容是“三传一反”,“三传”是指动量传递、质量传递和能量传递,“一反”是指反应动力学;它的主要任务是进行化学反应器的设计与开发,具体而言,即在满足各项约束条件的前提下,选择适宜的反应器型式、结构、操作方式,计算确定相应的各种工艺条件、反应器尺寸(决策变量),以达到合理的反应转化率、选择率(技术目标函数),从而使工业生产过程的生产成本(经济目标函数)达到最低值。显然,为使设计任务得以圆满完成,反应工程研究者需解决的关键问题是提供上述 3 类决策变量与优化的技术指标之间的相互关系。

由此可知,化工过程开发涉及众多且深入的创新课题,创新是化工技术发展的永恒动力,是每个从事化工技术研究的人所必须面对的极具挑战性的话题。因此,深入探讨创新的特点、创新所遵循的规律及创新活动所必须具备的知识储备等系列问题就具有极为重要的意义。

Otto 等<sup>[1]</sup>在《创新:进攻者的优势》一书中首先提出了“S 形曲线的技术进步规律”。他总结了 1930 年到 1980 年间化学工业中的重大新技术的进步规律,发现技术进步一般都要经历一个 S 形曲线的发展周期,如图 1 所示。

由图 1 可以看出,技术的进步是建立在一定的科学知识基础之上的,科学知识是技术创新的原动力。在化学工业领域,正如闵恩泽<sup>[2-3]</sup>所指出的,新催化材料是创造发明新催化剂和新工艺的源泉;新反应工程是开发新工艺的必由之路;新反应的发现是发明新工艺的基础;新催化材料与新反应工程的组合往往带来集成创新。因此,新催化材料、新反应工程、新反应应该是研究的重点。

由此可见,化学反应工程学科的学习对学生创新能力的培养起着基础及关键的作用,为培养学生的创新能力,牢固掌握该课程的主要知识点和内在的逻辑结构,并将其熟练地应用到工业实际反应器的创新开发过程中,就显得十分重要了。本文将着重讨论化学反应工程学科基本的逻辑结构及为每位从事过程开发的工程师提供重要的工程思维方式。

## 1 工业反应器的分类

化学反应工程主要是以工业规模进行反应的反应器为研究对象,揭示其特性和变化规律,为反应器的选型、操作方式的选择及最佳几何尺寸设计提供基础。为牢固地掌握化学反应工程学科知识体系,对其各知识点及相互关系的内在逻辑结构应了然于胸。现首先按照化学反应器的特点采取分类的方法对其进行分类,然后就工业规模进行的均相反应过程讨论各知识点之间内在的逻辑结构关系。

工业规模反应器及其行为特征是化学反应工程所研究的对象,由于其种类多样,因此,对其进行合理的分类是研究的开始。

一般在第一层次上是按反应系统的“相态”进行划分的,通常分为均相和多相反应器两大类。大部分的教材也是按照该特征进行内容编排的,如浙江大学陈甘棠<sup>[4]</sup>所编的《化学反应工程》、北京化工大学郭锴等<sup>[5]</sup>所编的《化学反应工程》等,都是遵循这一模式。而多相反应器又可分为两相和三相反应器,其中两相反应器包括气固相和气液相两类,三相主要是气液固三相反应器。

第二层次上的划分标准则有多种,例如可以按“固体存在状态”对两相反应器进行划分,如对气固两相反应器可分为气固相固定床反应器和流化床反应器;可以按“反应性质的不同”分为气固相催化反应器

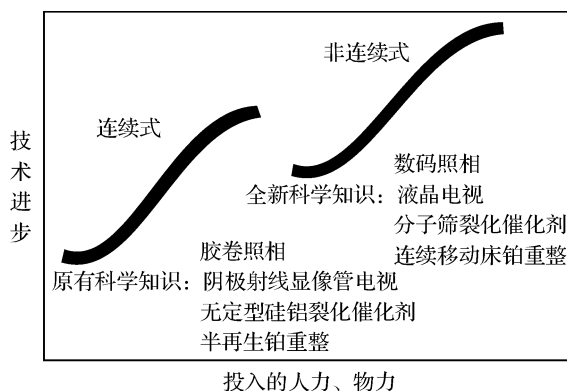


图 1 化工技术进步的 S 形曲线

Fig. 1 S-shaped curve of chemical technology progress

和非催化反应器;也可以按“反应器形状的不同”分为管式、塔式和釜式反应器等,诸如此类,不一而定。又如对气液固三相反应器,可以按固体在床层中的形态分为固体固定型和固体悬浮型,前者有气液并流向下的涓流床反应器,液相向下的逆流涓流床反应器和气液并流向上的填料鼓泡塔反应器;后者则有淤浆床反应器和三相流化床反应器。

通常第一级按相划分标准在化工业界是有共识的,而次级标准则诸多不一了。图2粗略地对不同反应器根据不同标准进行了划分。

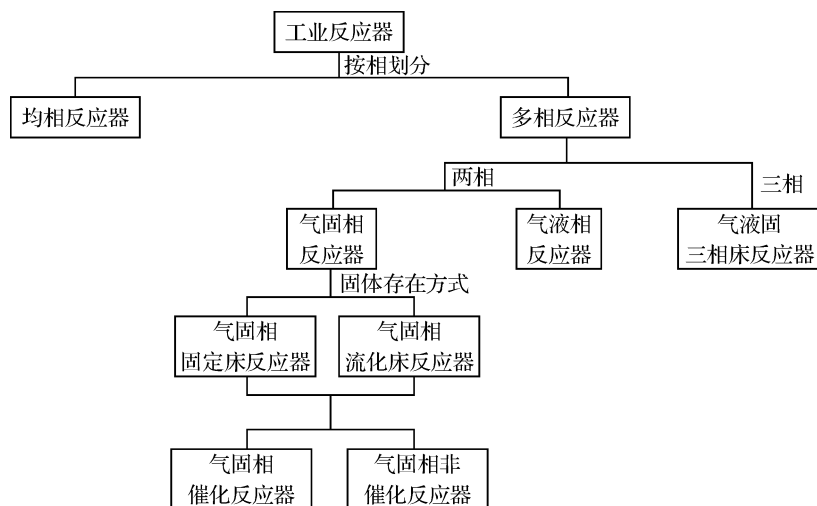


图2 工业反应器的分类

Fig. 2 Classification of industrial reactors

根据反应器不同的特点对其进行分类是化学反应工程研究的基础,十分必要。不同类型的反应器对反应结果的影响是不同的,或者说同一反应在不同类型反应器中其结果往往并不相同,有时会产生极大的差别;同时还必须认识到,反应器型式对反应结果的影响并不是直接的,而是通过影响传递过程进而影响到反应场所的浓度和温度分布,再影响到反应过程。如同一反应过程在管式反应器和在带搅拌桨的釜式反应器中,其反应结果通常并不相同,管式反应器中由于其高径比较大,反应物料在其中的流型可以用平推流拟合,而在带搅拌桨的釜式反应器中,其高径比往往较小,反应器中物料的流型往往表现为全混流,不同反应器中不同的流型对反应结果的影响通常是不相同的。

从学习效果而言,对反应器进行分类,不仅有利于学生尽快地牢固掌握各反应器不同的特征,在化工过程开发时能够易于对号入座,同时,通过对不同反应器特点的对比易于发现它们之间的相同相异之处,进而发现化学反应工程作为一门课程其内在逻辑结构的艺术美。

## 2 均相反应器理论逻辑结构

化学反应器根据其反应体系相态的不同,可以分为均相和多相两大类<sup>[6-13]</sup>,与均相反应过程相比,在多相反应器中各相之间往往存在着传递过程,包括热量传递和质量传递,传递过程的存在对多相反应过程的结果必然产生与均相反应过程不同的影响。例如在气固相催化反应工程中,气固相之间存在反应物与产物之间的质量传递,并进而发生热量传递,当反应过程较快而外扩散过程较慢时,过程表现为外扩散控制,无论本征反应速率如何,表观反应级数总为一级,表观活化能总为外扩散过程活化能;又如在气液相反应过程中,气相与液相之间也存在着反应物及反应产物之间的质量传递,质量传递过程的存在也必然影响到反应速率,尤其是反应速率较快时更是如此。

虽然两类反应器之间存在着一定的差别,但均相反应工程无疑是多相反应工程的基础,多相反应工程所涉及的各相中所发生的过程可认为与均相反应过程无异。因此,在均相反应工程中所建立的许多重要概念、理论和方法,完全可以原封不动地应用到多相反应器理论的讨论中去,如在均相反应器模拟时建



由图3可知,即使是均相反应器,相互之间也存在着很大的区别,因此,第一步是必须要对它们进行分类,可见分类的方法是本学科建立的基本方法。通过分类,人们更清楚地认识到各反应器之间的异同点,如均相反应器按几何形状划分可分为管式、塔式和釜式反应器三类;按换热方式可分为绝热、等温和变温反应器三类;按操作方式可分为间歇、半间歇和连续反应器三类;而按混合方式又可分为平推流、全混流和非理想流动反应器三类。根据反应器不同的特征对其进行划分,所产生的结果可能不同,但由此而获得一个极为重要的工程概念,即反应器型式。反应器型式在反应器设计优化中属于三大决策变量之一,十分重要,在反应器设计中的第一步即是根据反应过程的特点确定反应器型式。

由图3还可以看出,针对化学反应器的开发,一般采取两种方法,一是数学模型法,二是经验放大法。在化学反应工程课程中主要讲解的是数学模型法,其基本思路是,应用分解的方法将实际反应器分解为两部分,即过程和反应设备。过程包括化学反应过程和传递过程,由于反应过程规律和传递过程规律相互独立,故对其规律可分别进行研究。而反应设备则主要包含反应器型式和几何因素两大类。

为研究化学反应过程规律,必须要消除掉传递过程的影响,由于化学反应规律和设备大小无关,故化学反应规律可在微型(或台式)反应器中进行。这一点非常重要,如化学反应规律在微型反应器中进行研究,则不仅节省了大量的资金,更重要的是在微型设备中易保持纯化学因素的影响,获得的反应性质、规律可以应用到不同规模的任何反应器中。化学反应过程的性质一般包括化学计量性质、化学反应平衡性质及化学反应动力学性质。

化学反应计量性质是反应平衡性质和动力学性质的基础,对平衡性质和动力学性质的研究都是基于反应计量性质明确的基础上进行的,计量性质主要包括反应系统中各组分之间的定量关系,及系统中独立的反应数。

反应平衡性质主要包括反应热效应和反应极限的计算,尤其是反应平衡常数及平衡转化率的计算。对可逆放热反应而言,平衡性质对过程的影响较为复杂,温度的升高对反应动力学速率往往是有利的,但对平衡而言,平衡常数随温度的升高而降低,所以温度对平衡性质和动力学性质的影响呈现相反的趋势,从而引起问题的复杂化。通常对可逆放热反应存在着最佳温度,且最佳温度随组分转化率的不同而不同,因此,在整个反应过程中,存在一最佳温度曲线,反应沿着最佳温度曲线进行,在转化率一定时,可以使用较少的催化剂。同时还须认识到,在反应后期,即较高转化率接近化学平衡时,反应过程往往是由平衡因素控制的。

化学反应工程研究的主要内容是化学反应动力学规律,化学反应动力学特性是化学反应器选型、操作方式和操作条件确定及反应过程优化的重要依据,因此,反应动力学测定是十分重要的工作。然而,反应动力学的精确测定是一项独立于工艺试验之外的专门实验,它不但要求具备满足实验精度的特定设备,而且在具体进行时又有相当可观的实际工作量。因此,进行动力学测定极为重要,其基本思路如图4所示。

动力学方程通常分为3种形式,一是纯机理型方程,二是半经验半理论型方程,三是纯经验方程。基于碰撞理论、过渡态理论及分子动态学而推导出来的纯机理型方程,一般仅对简单反应体系适用,当前反应工程学科应用这类动力学方程进行反应器设计的并不多见。工业反应体系往往极为复杂,但作为动力学研究发展的方向,纯机理型动力学方程应是每个化学反应工程研究者必须努力的目标;纯经验性的动力学方程如描述微生物生长的 Monod 模型在反应器设计中亦常常使用,但反应工程学科通常使用的是半经验半理论的动力学方程,图4所示指的就是此类方程。

建立动力学方程模型的基本思路一般是先设定一定的基元反应机理,该机理通常分为两类,一是有限基元反应组合机理,二是链式反应机理,在此前提下,根据拟平衡态假设或拟定常态假设,可以推导获

得一定形式的动力学方程。动力学方程通常分为两种,一是幂函数型,另一种是双曲函数型。视方程当中是否含有一阶微分,动力学方程又可分为积分式和微分式两种。

在动力学方程确定后,方程中包含两类物理量,一是伴随反应过程变化而变化的因素,通常是指反应温度、反应物浓度及反应时间;另一类是在反应过程中相对稳定的、反映反应过程性质的模型参数。模型参数无法由模型本身获得,必须通过实验确定,这也正是该动力学方程被称为半经验半理论的原因所在。因为模型参数必须由实验确定,于是就必然涉及实验的设计。实验设计内容通常包含两个方面,其一是实验用反应器的选择,其二是实验条件的确定。实验用反应器类型与工业反应器类型大同小异,不同之处仅仅表现在规模程度上,实验室反应器规模小,通常为 1 L 左右,因此,其传递过程影响易于消除,对反应结果的影响主要是纯化学因素,如此易于反映反应过程的本质。而实验条件的设计方法包括两种,当独立的组分数仅为 1 个时,实验可采用单因素法,当独立的组分因素多于 2 个时,则往往采取正交实验设计方法。

通过实验获得一系列实验数据后,接下来的问题是必须求解出动力学模型参数,求解动力学模型参数的方法有积分法和微分法。基于积分式动力学方程的求解方法称为积分法,基于微分式动力学方程的求解方法则称为微分法。在大多数实际情况下,模型参数求解方法采用的都是微分法。

当反应动力学规律确定后,必须要研究在实际工业规模反应器中通常出现的传递过程规律。为研究传递过程规律,通常可以在没有化学反应的情况下进行,这是因为传递过程是反应器的属性,基本上不因化学反应的存在与否而异。对于一个特定的工业反应过程,化学反应规律是其个性,而反应器中的传递规律则是其共性。因此,传递规律受设备尺寸的影响较大,必须在大型装置中进行。由于需要考察的只是传递过程,不需实现化学反应,完全可以利用惰性物料进行试验,以探明传递过程规律。正因如此,这种试验通常称为冷模试验。

进行冷模试验研究传递过程规律时需要关注的一个重要问题是:所选模拟设备的大小,即传递过程应在多大规模的模拟设备中进行?为保证所获得的传递参数准确、有效,所遵循的原则是必须保持在模拟设备中发生的传递过程与实际反应器中所发生的传递过程应“相似”,即符合“相似性原理”。冷模试验设备的大小必须依据此原理进行选择和设计。

在对反应过程和传递过程进行了充分的研究后,需要对相关成果进行综合处理,这一阶段主要是在计算机上进行模拟并完成的,如图 5 所示。

同时,为验证模拟结果是否可靠,还必须进行中等规模的试验,即中试,又名热模试验。热模试验存在 3 个问题需要解决,一是试验规模,二是试验的完整性,三是运行周期。如果热模试验结果与模型计算

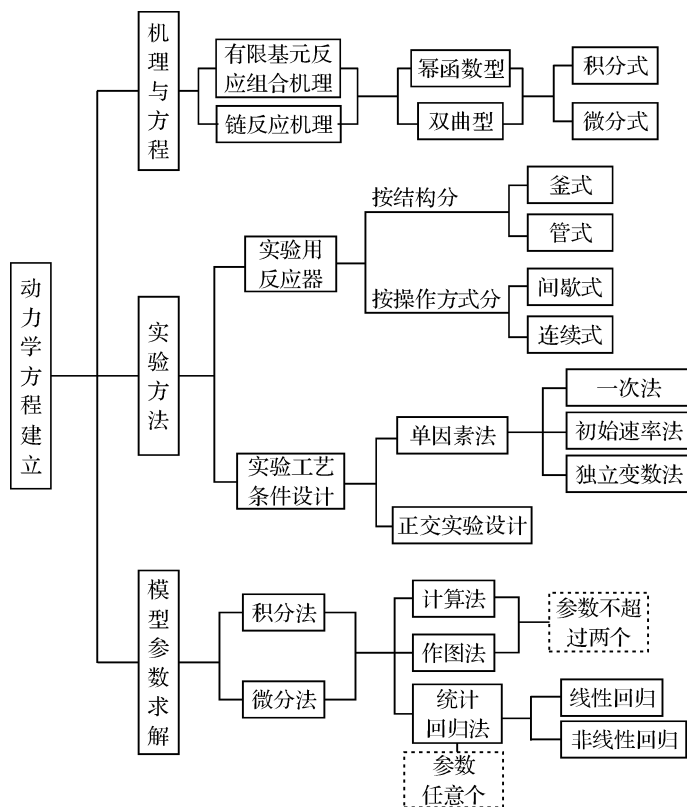


图 4 反应动力学实验测定框图

Fig. 4 Experimental determination of reaction kinetics

结果相符,说明模型正确,能够反映实际规律;如果不相符,则需要修正模型,直至与热模试验结果相符为止。

具备了传递过程规律和小试测定的反应过程规律,并且经过了热模试验验证,就能直接设计工业反应器了,这样就不存在设备的放大问题。数学模型方法本身可以直接通过计算就能获得大型反应器的设计,说明工业反应过程的开发并不必然地必须经过由小型反应器到中间规模反应器再到工业规模反应器的整个过程。

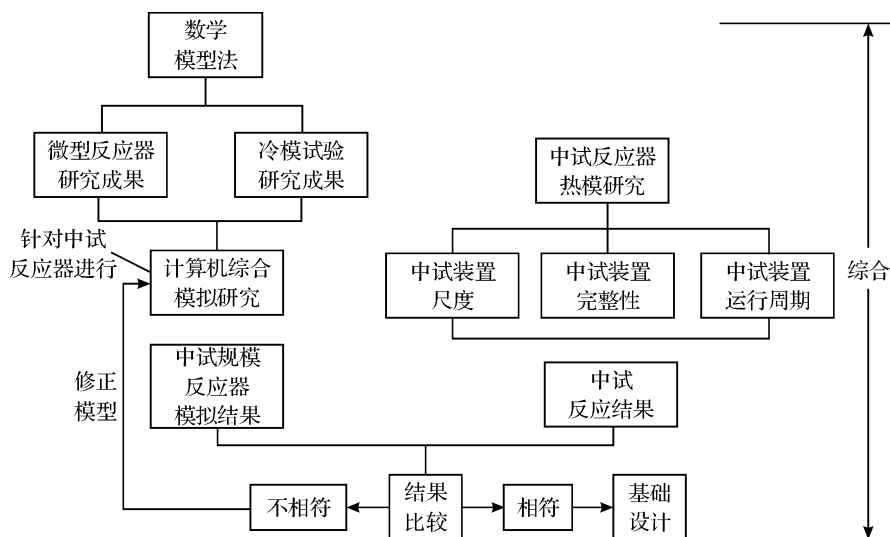


图5 中试研究的逻辑结构

Fig. 5 Logical structure for medium-sized experiment

最后应当要注意的是,数学模型法要想获得成功,必须要具备2个基本前提:一是它要求有可靠的反应动力学方程;二是还要有大型装置中的传递方程,两者缺一不可。

例如,固定床反应器,虽然不少反应的动力学模型研究较为完整,然而由于具体工业反应器模型参数难以正确测定,尤其对复杂的工业反应,其本征动力学参数也难以把握,因此,对固定床反应器的数学模拟放大,迄今尚未有比较满意的工业应用。

化学反应动力学测定虽然有相当大的工作量,但它毕竟可以在小装置中进行。而工业反应器的传递模型却不是小装置所能解决的,它不但要求大型冷模试验和必要的热模检验,还需要工业规模的测试数据和工程研究的长期经验积累。因此,当没有可靠的大型设备传递模型时,数学模拟放大只能是纸上谈兵。此时,精确的动力学测定必然是徒劳的。当然,这并不意味着不需要有关的动力学知识和对反应动力学特征的认识。一个开发者应当充分具备动力学基础知识,并据此巧妙地安排工艺试验,以便把握反应动力学特征和有关影响因素,为工业反应器的选型和优化服务。

由此可见,从化学反应工程的观点出发,机理的、定性的、半定量的动力学特征研究应当是结合工艺试验进行的重要任务。只有当工业反应器的传递模型足够可靠时,精确的动力学实验才是必要的,并可用于数学模拟放大。

### 3 化学反应工程思维方式

如上所说,在剖析化学反应工程课程各知识点及相互逻辑关系时,本研究采用了分类、分解和综合的思维方式,而分类、分解其实属于分析的方法。所以,分析、综合是反应过程开发中的基本方法,应深加注意,其中尤以分析方法更是在各种科学思维方式中处于最基本的地位。

对于图3、图5所示的化学反应工程逻辑结构,当将它们具体应用到实际的化工过程开发中时,也可

用图 6 简略地表示。图 6 表示了化学反应工程课程所提供的特有的工程思维方式。

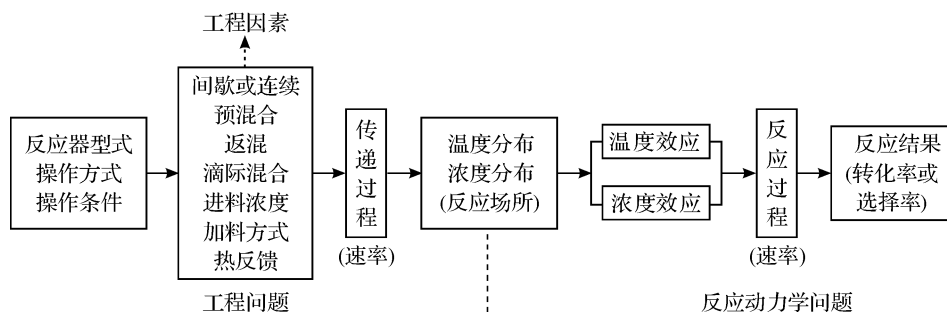


图 6 工程思维方法

Fig. 6 Method of engineering thinking

#### 4 结 语

化学反应工程课程是一门具有严密的内在逻辑结构的知识体系,它由一系列含义明确并能进行定量运算的概念及规则、规律所组成,且其模型推演结果需经实验验证,故该学科具备完整的科学三性,即逻辑性、定量性和可验证性。化学反应工程课程为化工过程开发提供了全面且严谨的工程思维方式,运用分解的方法将复杂的工业反应过程分解为传递过程和反应过程,并利用各过程的特点分别在不同的设备中进行分析测试;运用综合的方法将由分解所获得实验结果综合在一起以模拟实际的工业反应过程。

本文运用树状结构形象地表示了该课程的各知识点及逻辑结构,易于学习和把握;同时,也利于深化理解,从而为将来的过程开发和创新打下坚实的基础。

#### 参考文献:

- [1] OTTO E R, FOSTER R. Innovation; The Attacker's Advantage[M]. New York: Summit Books, 1986.
- [2] 闵恩泽. 石油炼制催化原始创新之路的探寻[J]. 石油与天然气化工, 2011, 40(1): 6.
- [3] 闵恩泽. 石油化工: 从案例探寻自主创新之路[M]. 北京: 化学工业出版社, 2009: 66.
- [4] 陈甘棠. 化学反应工程[M]. 北京: 化学工业出版社, 2007: 5-7.
- [5] 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: 1-3.
- [6] 于遵宏. 化工过程开发[M]. 上海: 华东理工大学出版社, 2009: 91-171.
- [7] 张谦, 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, 2014: 290.
- [8] 李望, 朱晓波. 《化学反应工程》课程教学方法初探[J]. 教育教学论坛, 2015(43): 157.
- [9] 钱炜鑫, 张锐, 曹发海, 等. 反应动力学贯串的化学反应工程教学思路及教学案例[J]. 化工高等教育, 2013, 57(6): 39.
- [10] 秦祖赠, 文衍宣. 工程案例讨论与分析在《化学反应工程》教学中的应用[J]. 广州化工, 2013, 41(16): 208.
- [11] 金涌, 程易, 颜彬航. 化学反应工程的前世、今生与未来[J]. 化工学报, 2013, 64(1): 34.
- [12] 李翔, 王安杰, 陈永英. 化学反应工程教学难点和教学方法体会[J]. 广州化工, 2015, 43(19): 207.
- [13] 赵启文, 张兴儒. 化学反应工程研究方法探析与教学实践[J]. 化工高等教育, 2013, 30(2): 37.