反应器单元的仿真设计(二)

Simulation Design of Chemical Reactors

化学动力学类反应器

化学动力学反应器

根据流动状况不同，有三种：

1、全混釜反应器（RCSTR）

Continuous Stirred Tank Reactor

2、平推流反应器（RPlug）

Plug Flow Reactor

3、间歇釜反应器(RBatch)

Batch Stirred Tank Reactor

一、RCSTR—全混釜反应器

性质：

釜内达到理想混合，即反应物料和出口物流有相同的组成和性质。

可模拟单、两、三相的体系，可同时处理动力学控制和平衡控制两类反应以及包含固体的反应。

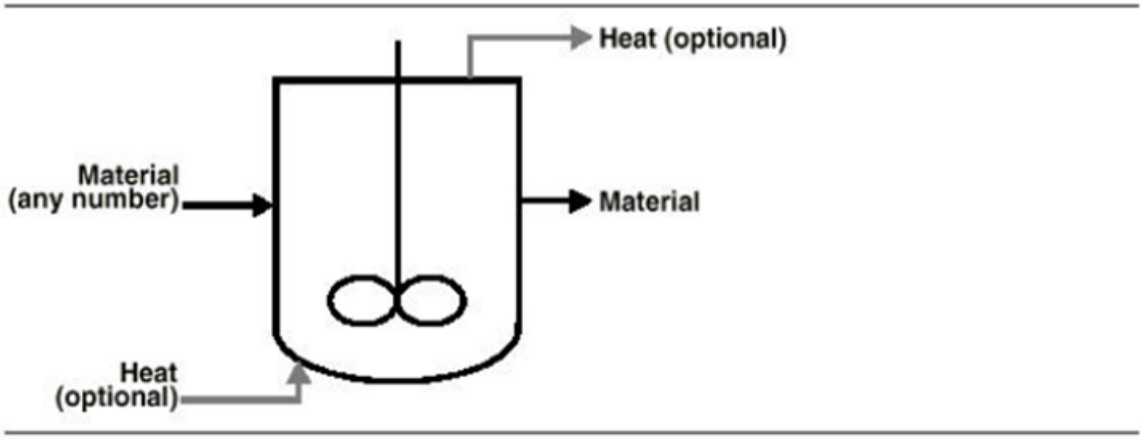
一、RCSTR—全混釜反应器

用途：

已知化学反应式、动力学方程和平衡关系，计算所需的反应器体积和反应时间，以及反应器热负荷。

一、RCSTR—全混釜反应器

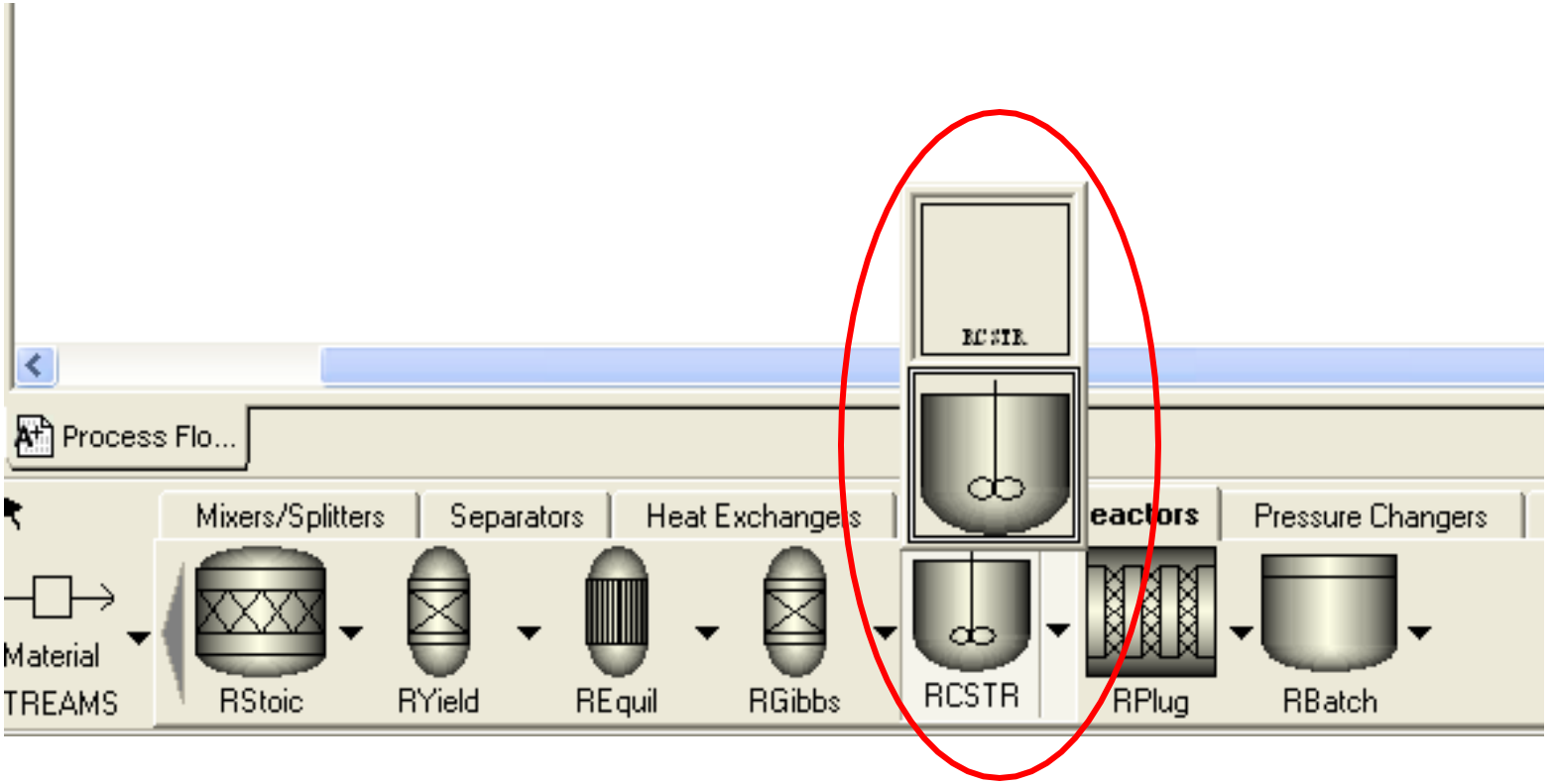
RCSTR 的流程连接



物料流

入口	至少一个物料流
出口	一个物料流

一、RCSTR—全混釜反应器



一、*RCSTR*—全混釜反应器

RCSTR有两组模型参数：

1、操作条件 (Operation Conditions)

1) 压力 (Pressure)

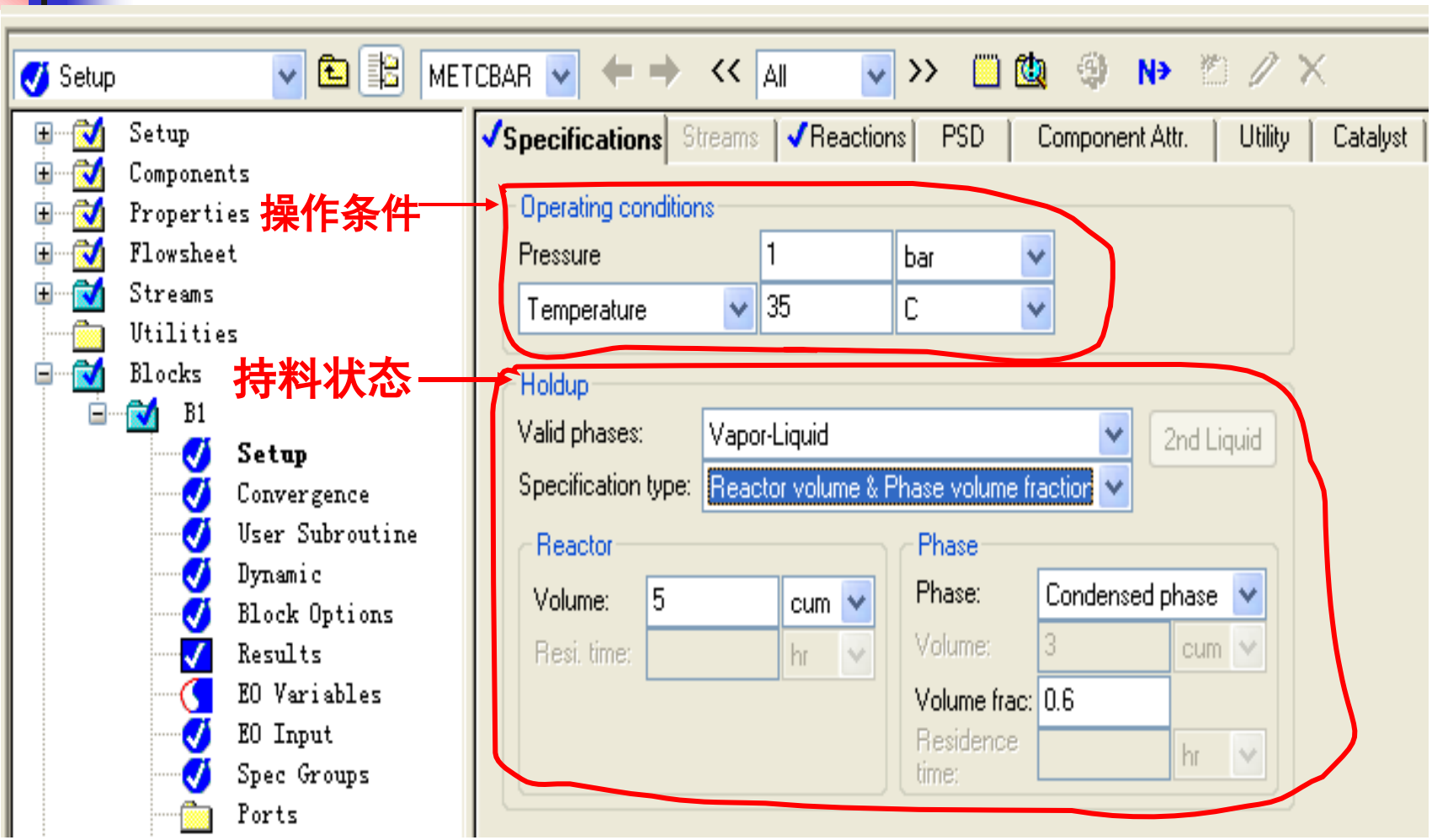
2) 温度/热负荷(Temperature/Heat Duty)

2、持料状态 (Holdup)

1) 有效相态 (Valid Phases)

2) 设定方式 (Specification Type)

一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

持料状态中的设定方式有7种：

1）反应器体积 (Reactor Volume)

2)停留时间 (Residence Time)

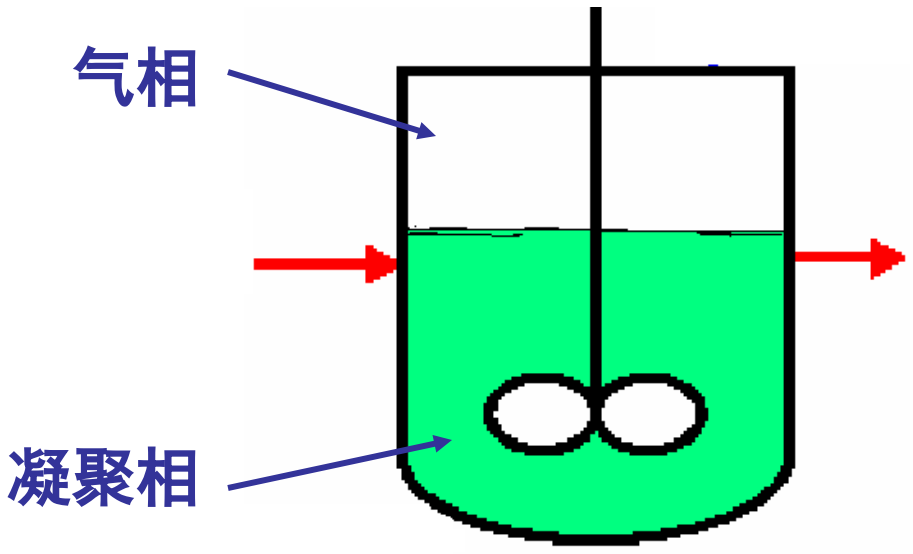
只需输入物料在反应器中的平均停留时间。

一、RCSTR—全混釜反应器

3)反应器体积和相体积 (Reactor Volume & Phase Volume)

必须输入反应器体积、气相 (Vapor phase) 或凝聚相 (Condensed phase) 所占的体积。

一、RCSTR—全混釜反应器



一、*RCSTR*—全混釜反应器

4)反应器体积和相体积分率

(Reactor Volume & Phase Volume Fraction)

必须输入反应器体积和气相/凝聚相所占的体积分率(Volume frac)。

一、*RCSTR*—全混釜反应器

5)反应器体积和相停留时间

(Reactor Volume & Phase Residence Time)

必须输入反应器体积和气相/凝聚相在反应器中的停留时间。

一、*RCSTR*—全混釜反应器

6)停留时间和相体积分率

(Residence Time & Phase Volume Fraction)

必须输入物料在反应器中的总平均停留时间和气相/凝聚相所占的体积分率。

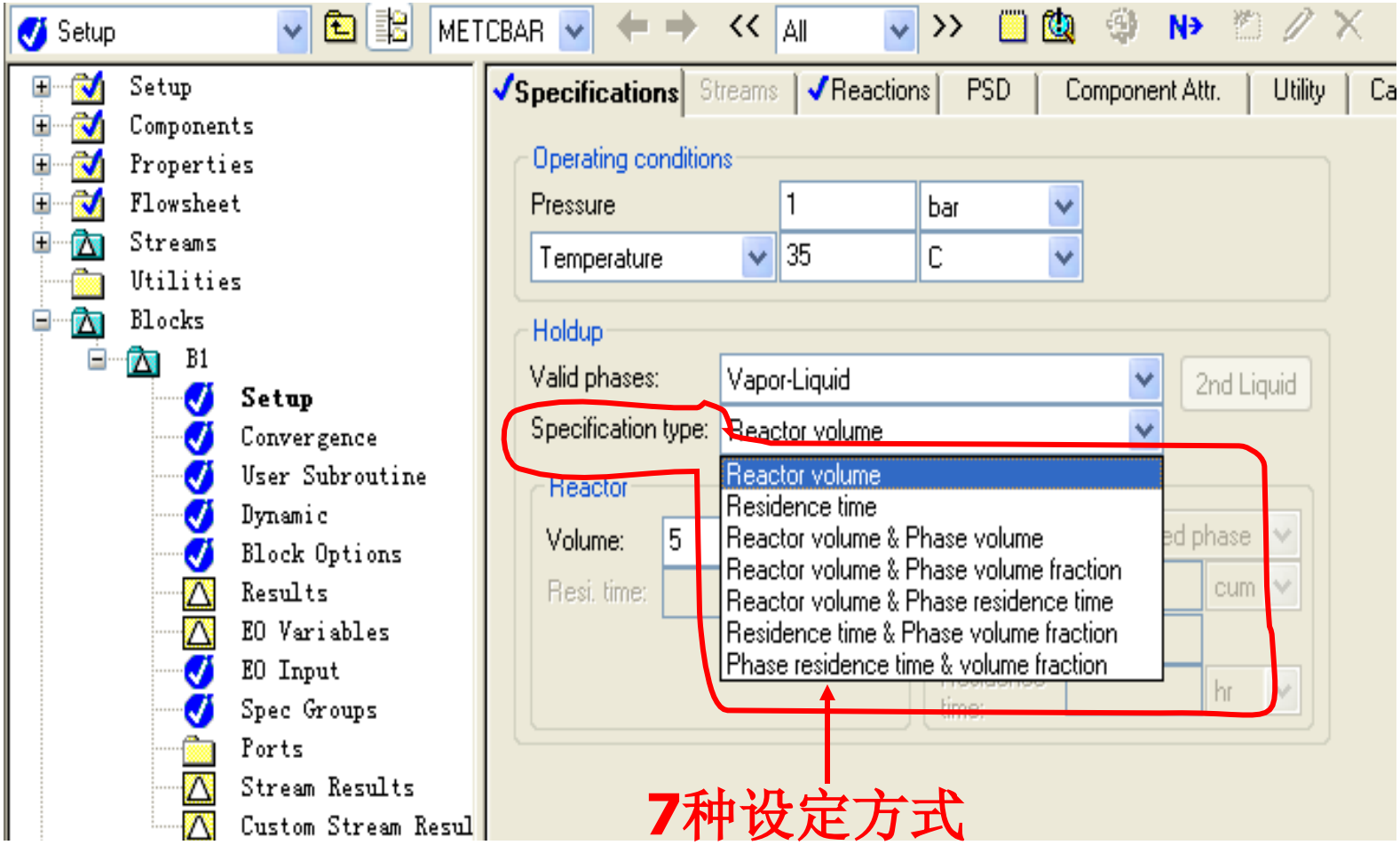
一、*RCSTR*—全混釜反应器

7)相停留时间和体积分率

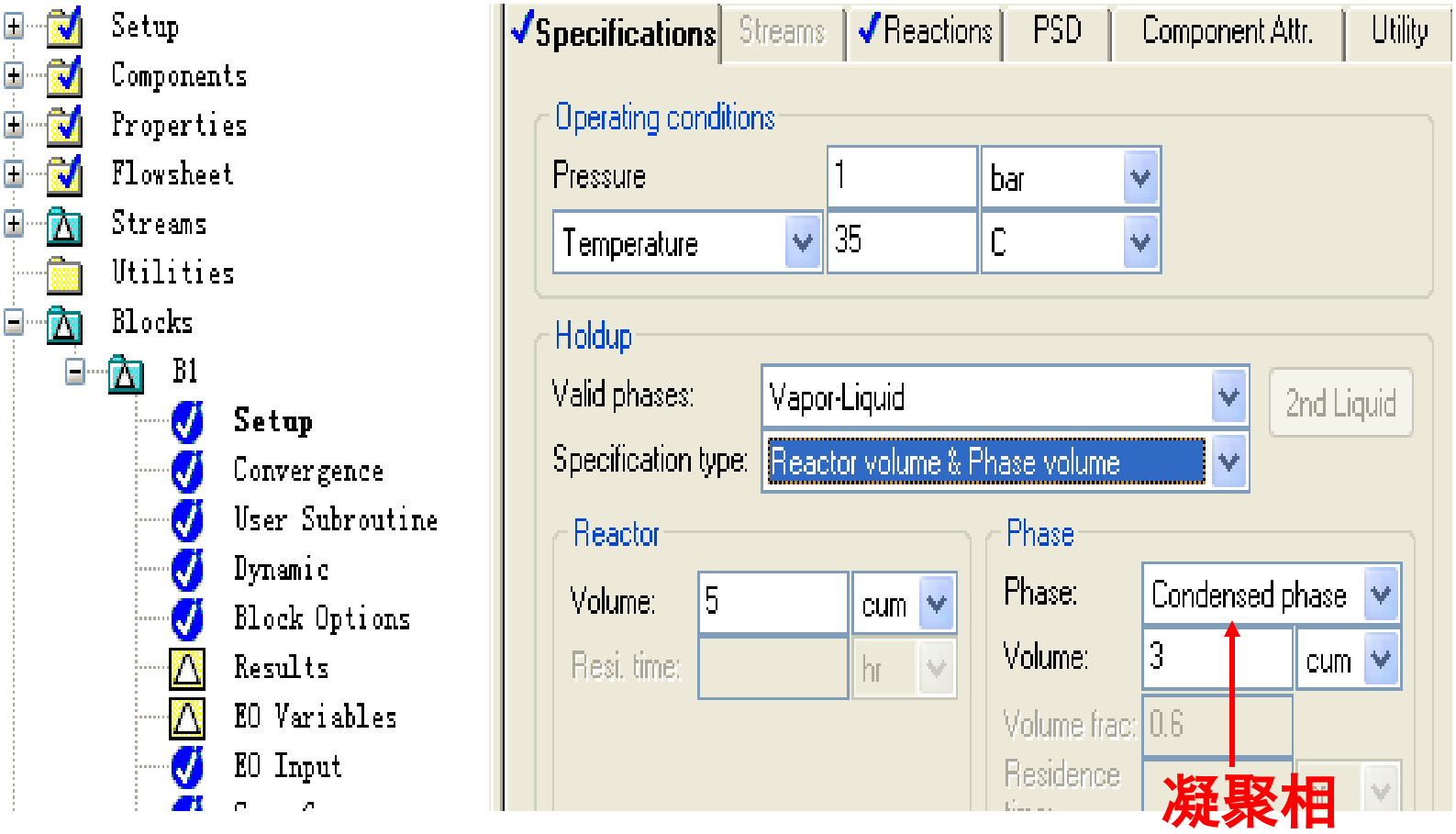
(Phase Residence Time & Volume Fraction)

必须输入气相/凝聚相在反应器中的停留时间和所占的体积分率。

一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

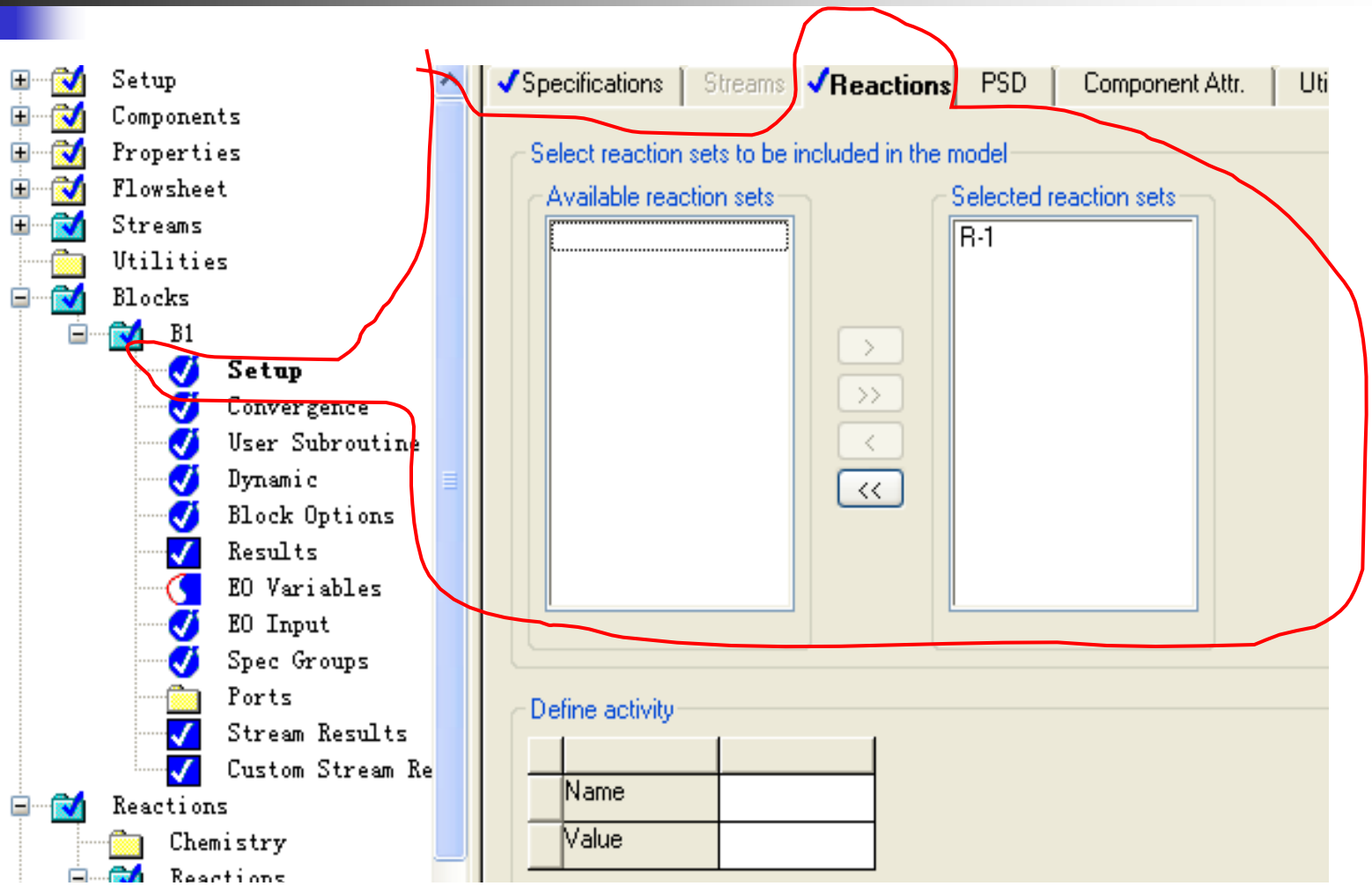


一、*RCSTR*—全混釜反应器

化学反应式的设定：

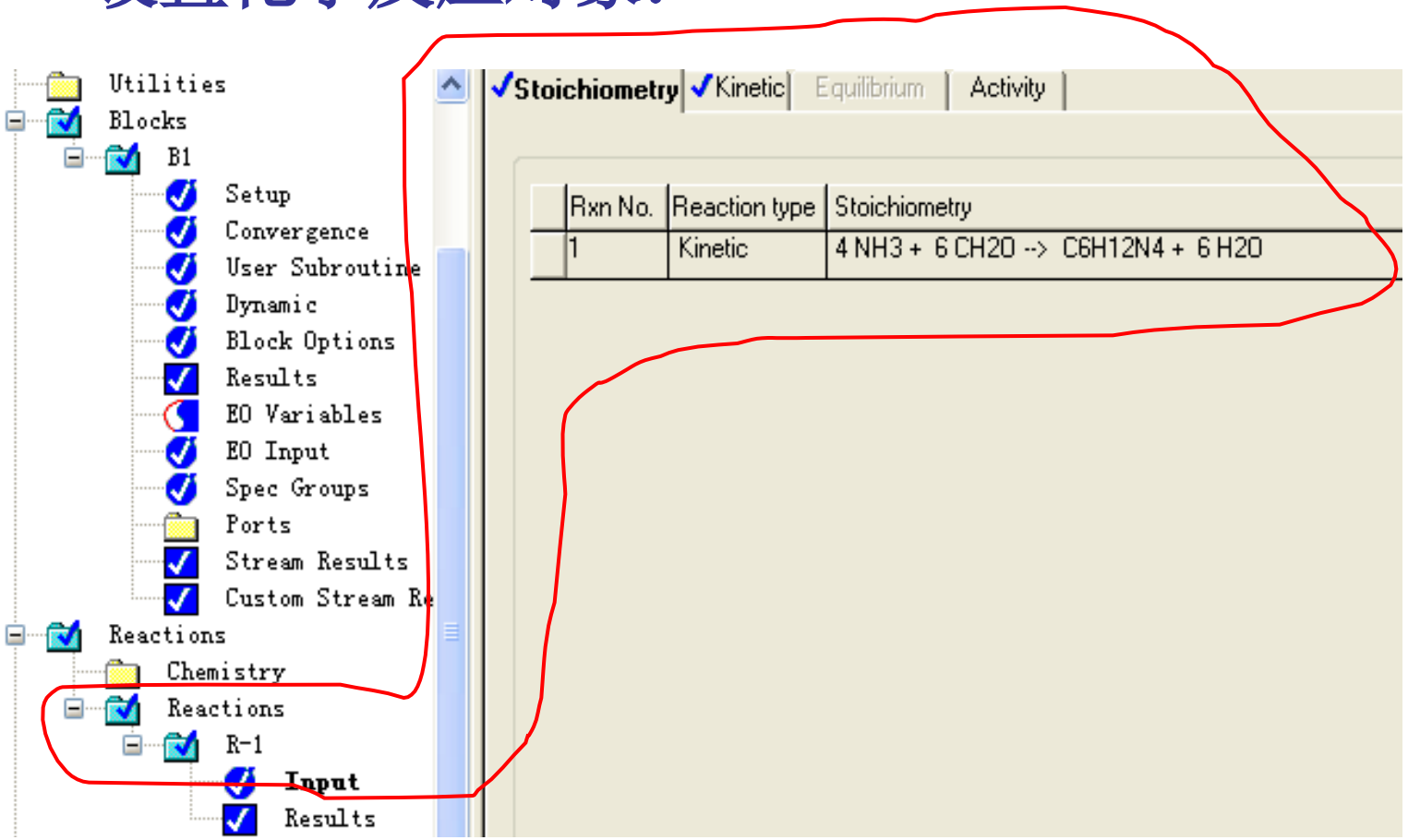
RCSTR中的化学反应通过选用预定义的化学反应对象来设定。

一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

设置化学反应对象：



一、RCSTR—全混釜反应器

设置化学反应对象目的：

为三类动力学反应器模块和 RadFrac 模块提供反应的计量关系、平衡关系和动力学关系。

一、*RCSTR*—全混釜反应器

创建化学反应对象时，需赋予对象*ID*和选择对象类型。对于小分子反应，常用的类型有三种：

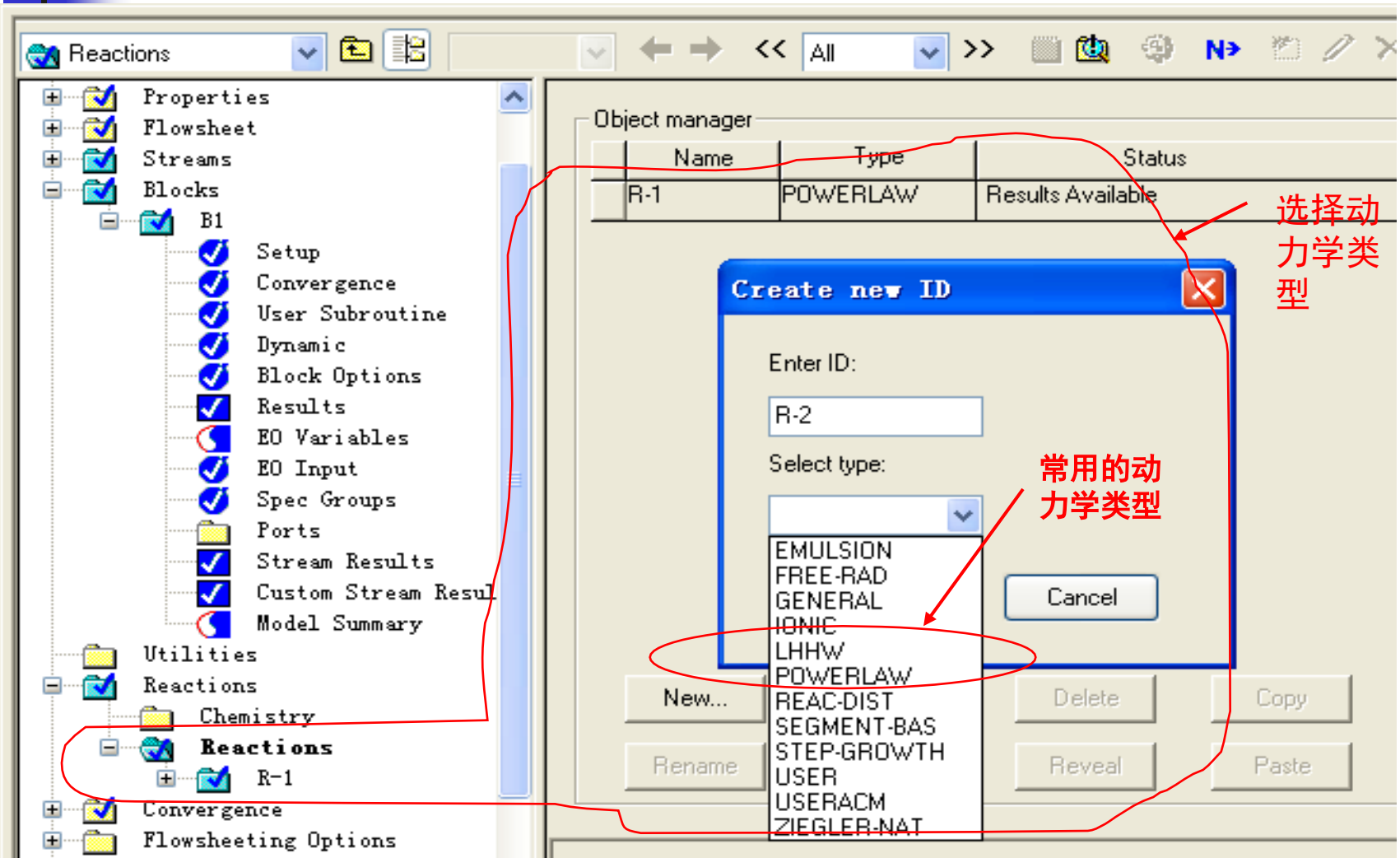
1、LHHW 型

(Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson)

2、幂律型 (Power Law)

3、反应精馏型 (Reac-Dist)

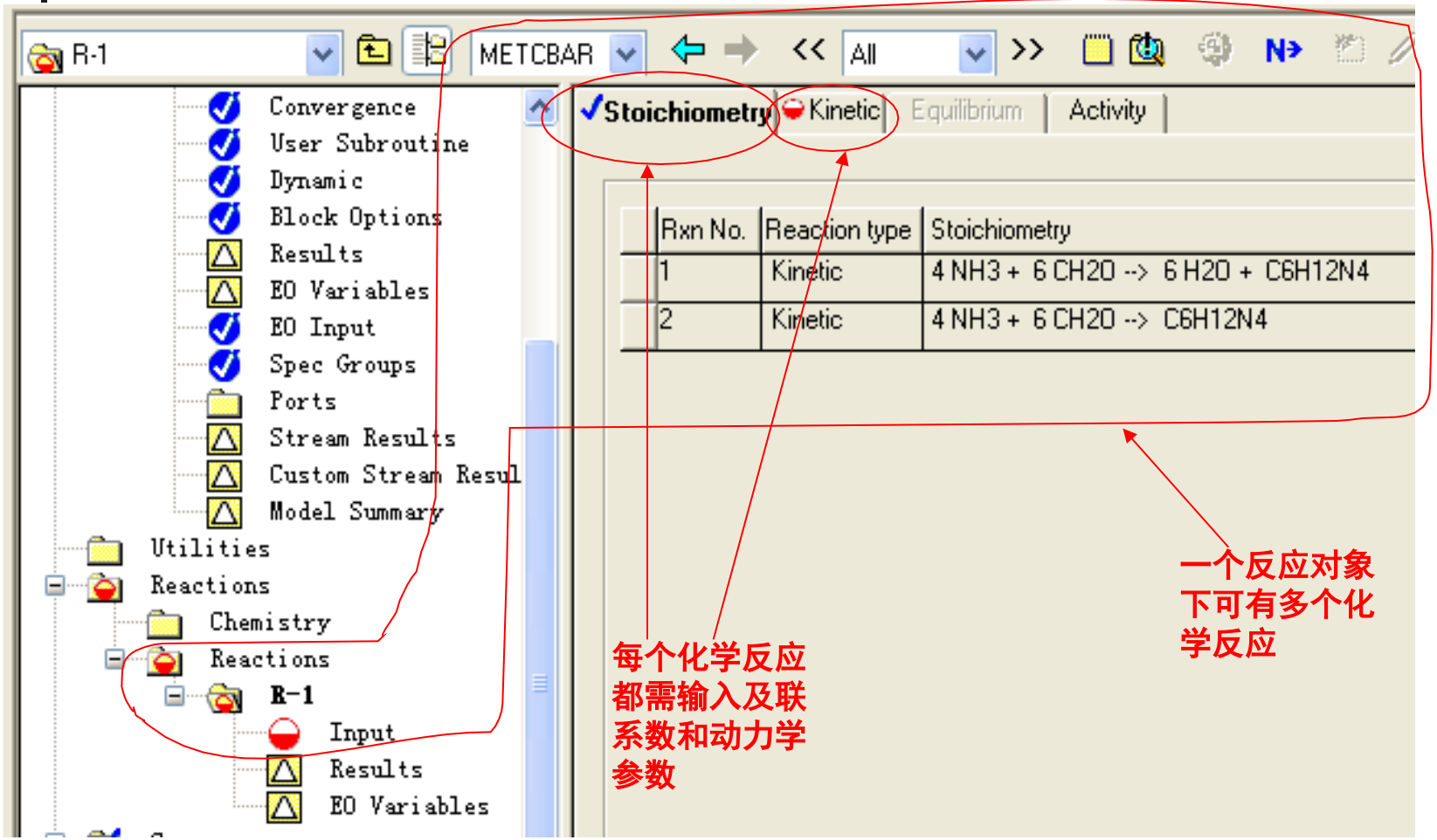
一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

每个化学反应对象可以包含多个化学反应，每个化学反应都要设置计量学参数和动力学参数

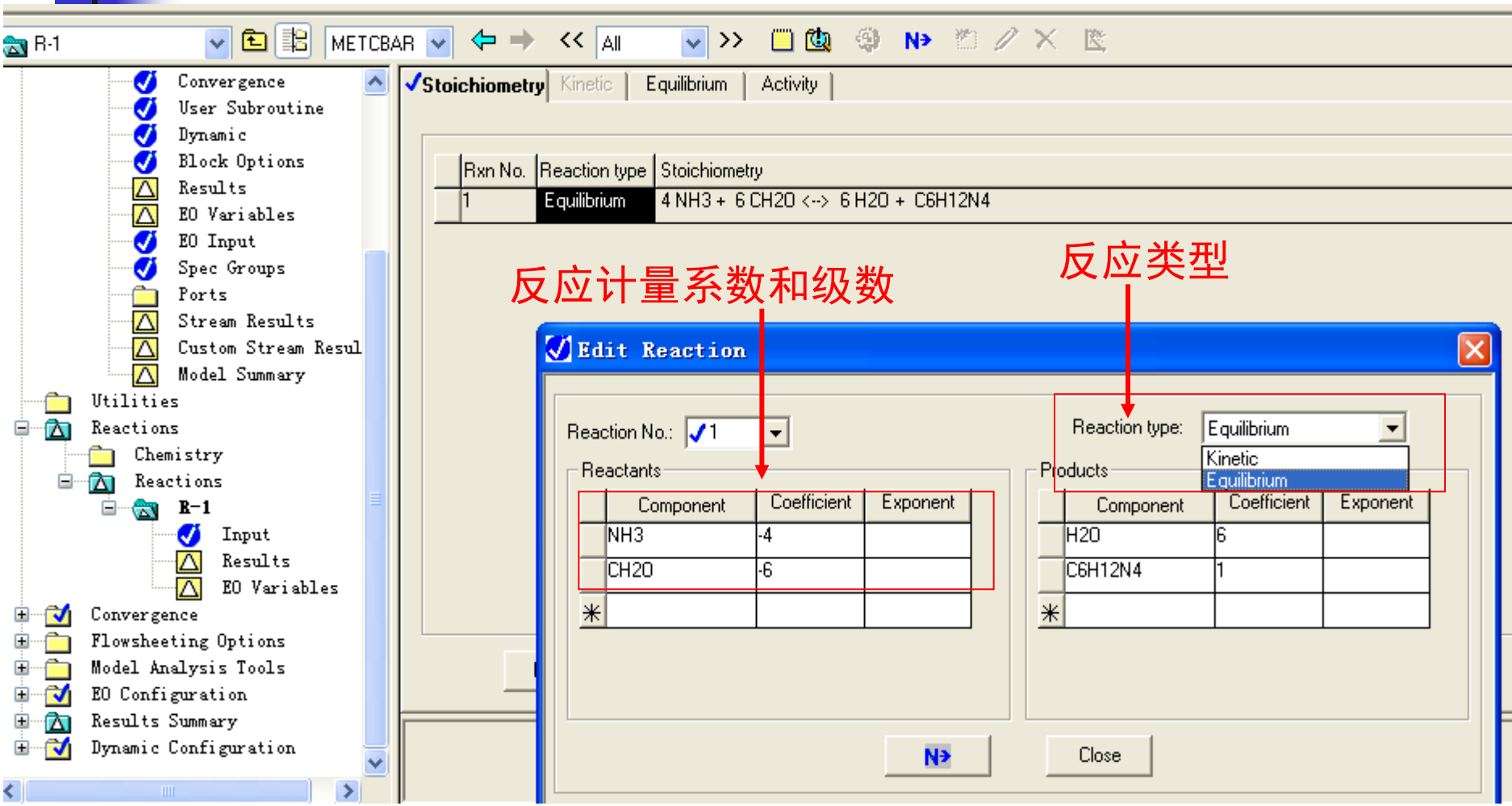
一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

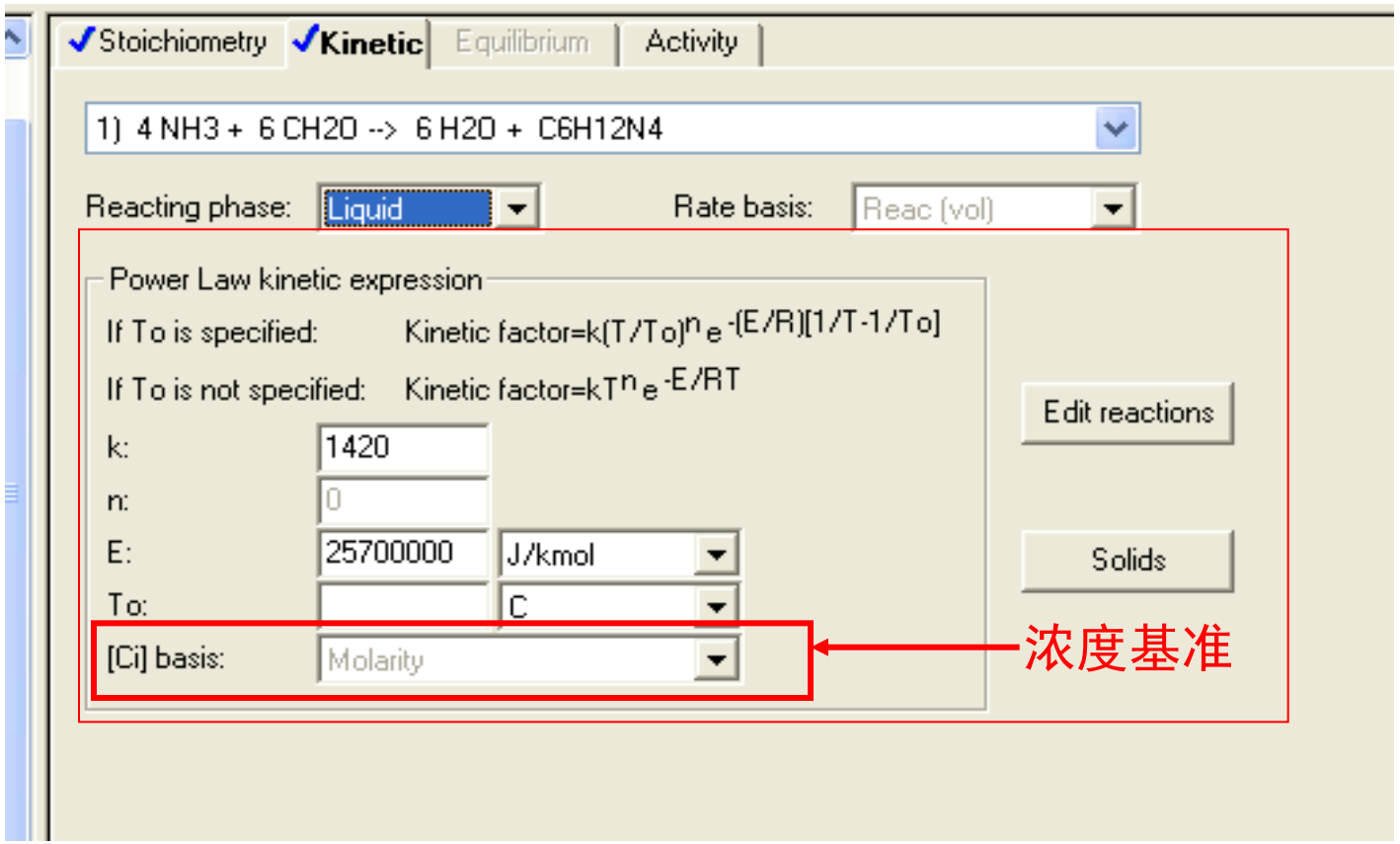
在化学反应计量表单中，为每一个化学反应创建一个对象，并选择对象为动力学（**kinetic**）或平衡（**Equlibrium**）型。输入化学反应计量系数**(Coefficient)**，对于幂律型反应对象，还要输入方程式中浓度因子的级数。

一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

输入动力学参数：活化能和频率因子



一、RCSTR—全混釜反应器

反应物浓度基准：

摩尔浓度

质量摩尔浓度

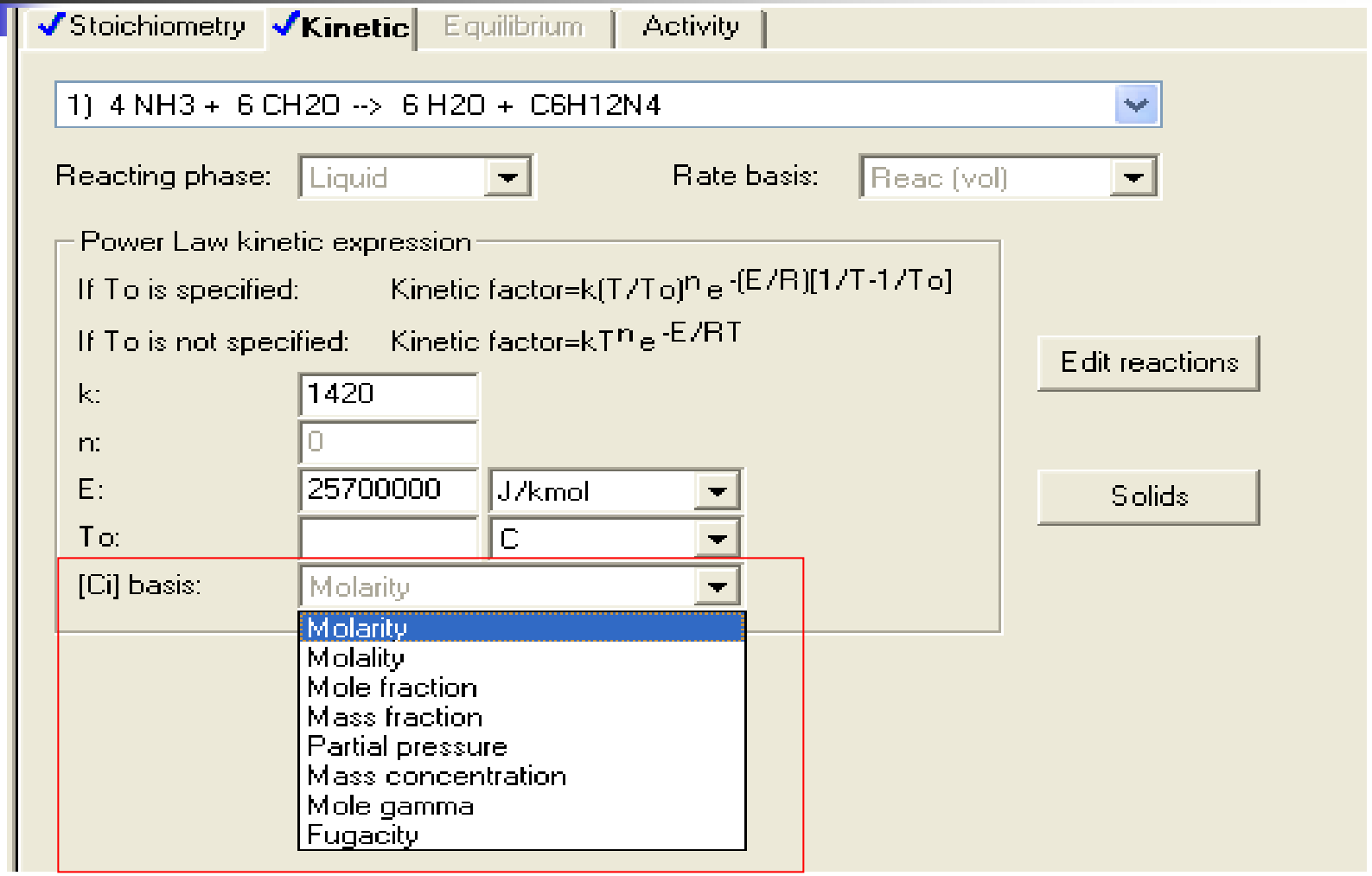
分压

质量浓度

活度（摩尔）

逸度

一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

LHHW型的反应速率方程：

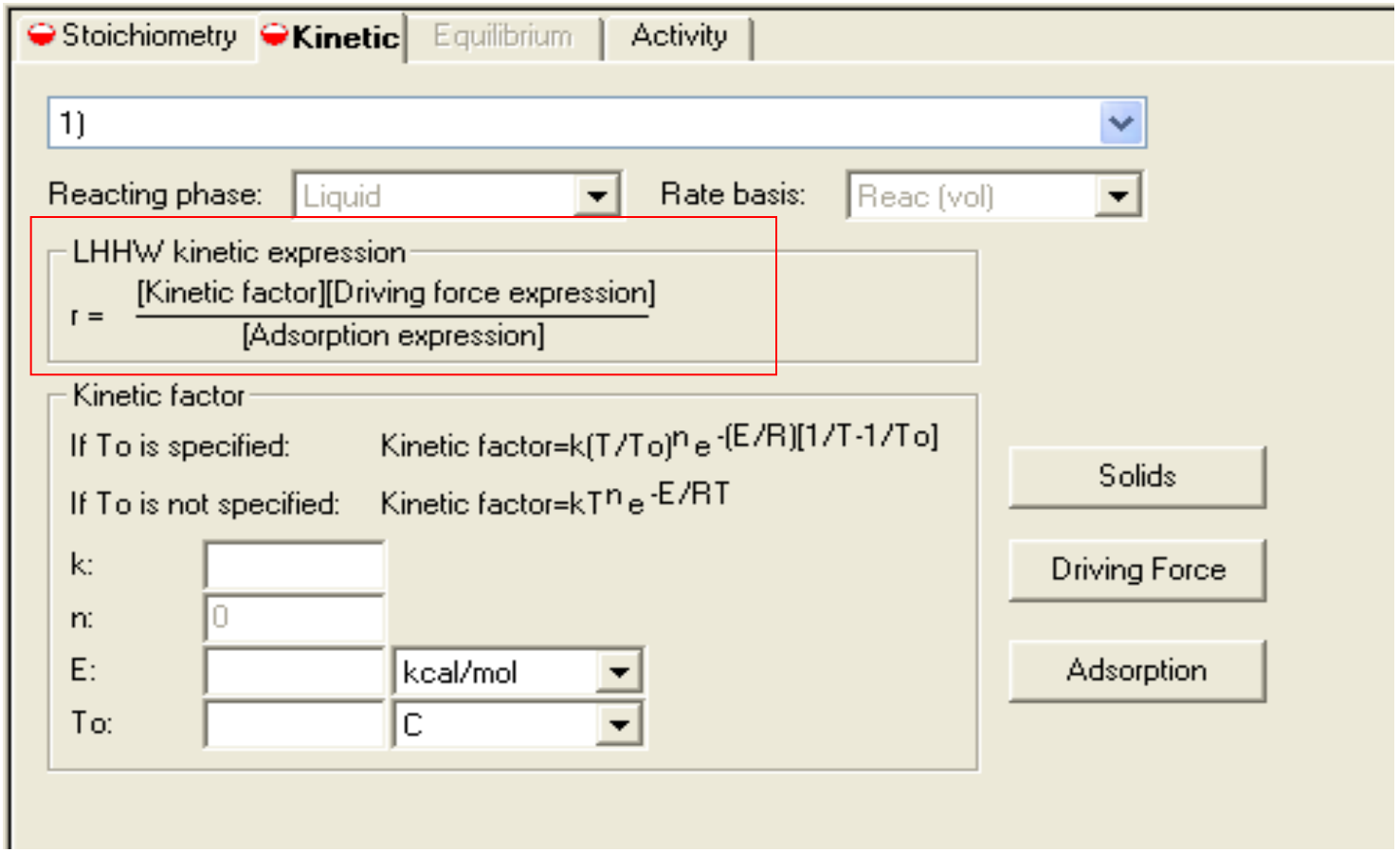
$$-r_A = \frac{[\text{动力学因子}]\cdot[\text{推动力表达式}]}{[\text{吸附表达式}]}$$

动力学因子仍用修正的Arrhenius方程表示：

$$[\text{动力学因子}] = k\left(\frac{T}{T_0}\right)^n \exp\left[-\left(\frac{E}{R}\right)\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_0}\right)\right]$$

一、RCSTR—全混釜反应器

LHHW型动力学方程：



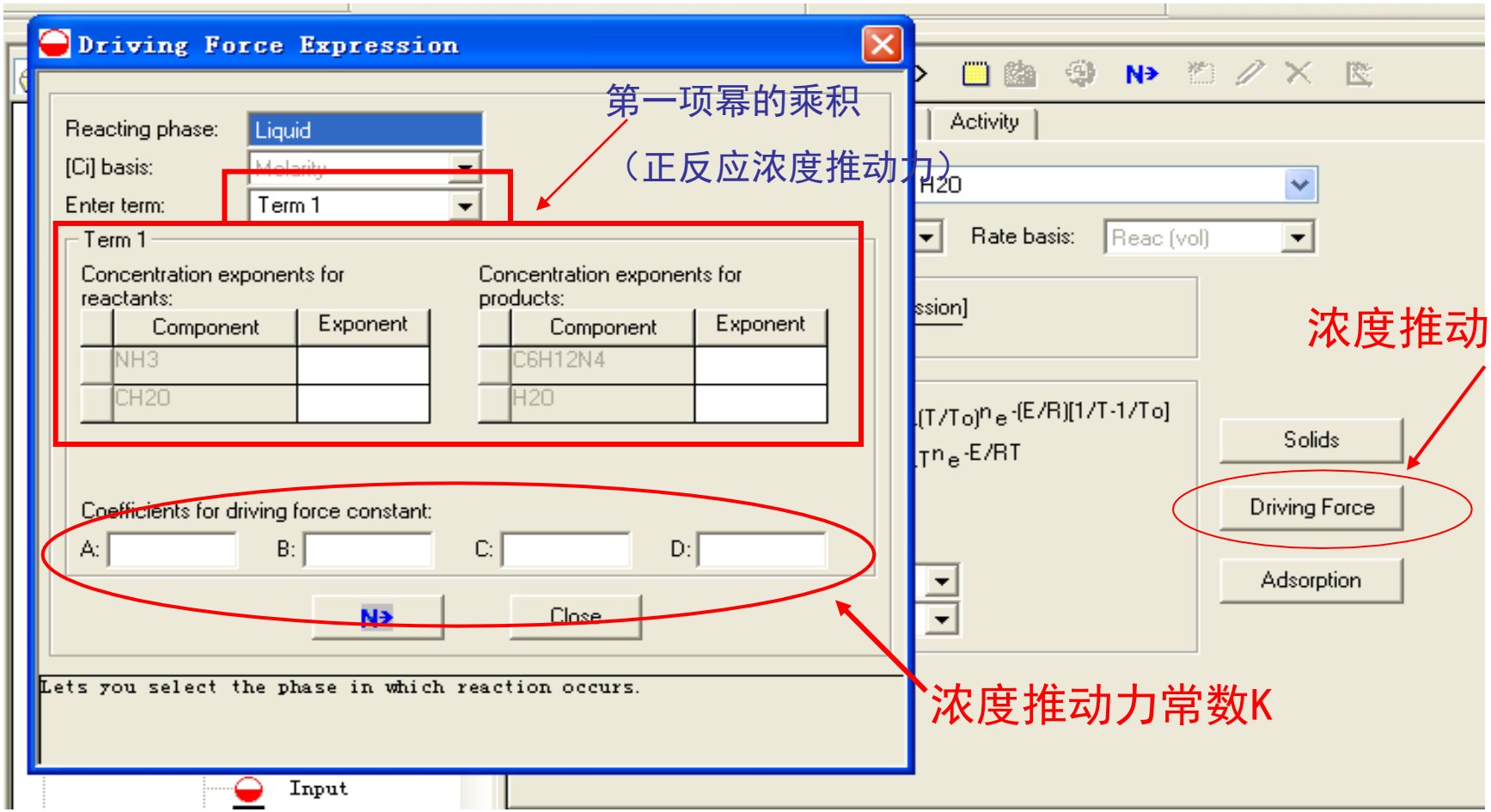
一、RCSTR—全混釜反应器

$$[\text{推动力表达式}] = K_1 \prod_i C_i^{p_i} - K_2 \prod_j C_j^{q_j}$$

其中：　$$\ln K_I = A_I + \frac{B_I}{T} + C_I \ln T + D_I T$$

点击Driving force 弹出浓度推动力表单

一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—全混釜反应器

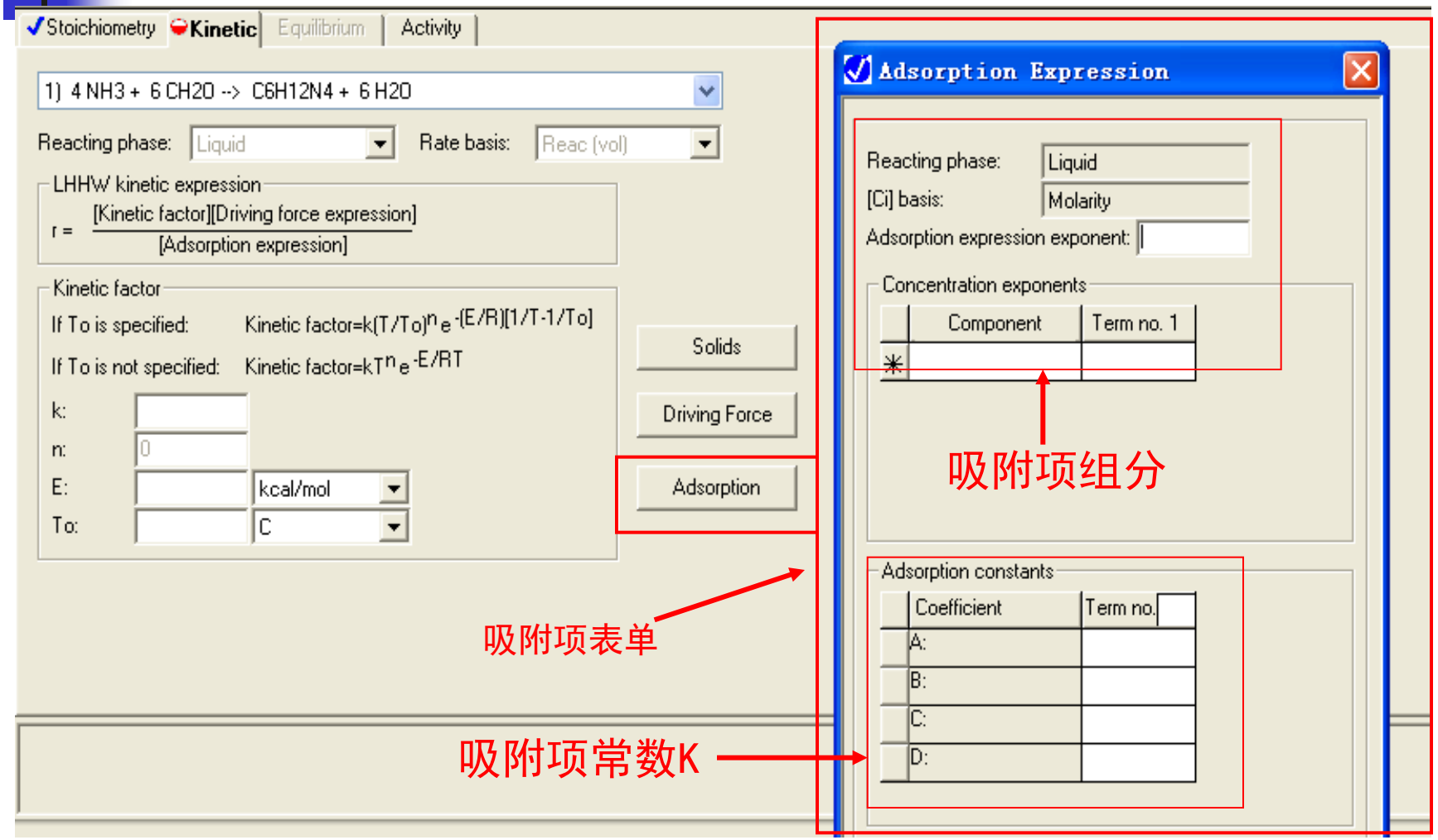
$$[\text{吸附表达式}] = \left[\sum_i K_i \left(\prod_j C_j^{v_j} \right) \right]^m$$

其中：

$$\ln K_i = A_i + \frac{B_i}{T} + C_i \ln T + D_i T$$

点击Adsorption项，弹出吸附项（Adsorption）输入表单

一、RCSTR—全混釜反应器



一、RCSTR—示例1

甲醛与氨反应生成乌洛托品反应式如下：

$$4NH_3 + 6HCHO \rightarrow (CH_2)_6N_4 + 6H_2O$$

(A)　(B)　(C)　(D)

$$-r_A = kC_AC_B^{\,2} \qquad kmol/m^3 \cdot s$$

$$k = 1420\exp\left[-\frac{2.57\times10^7}{RT}\right] \qquad m^6/kmol^2 \cdot s$$

RCSTR—示例1

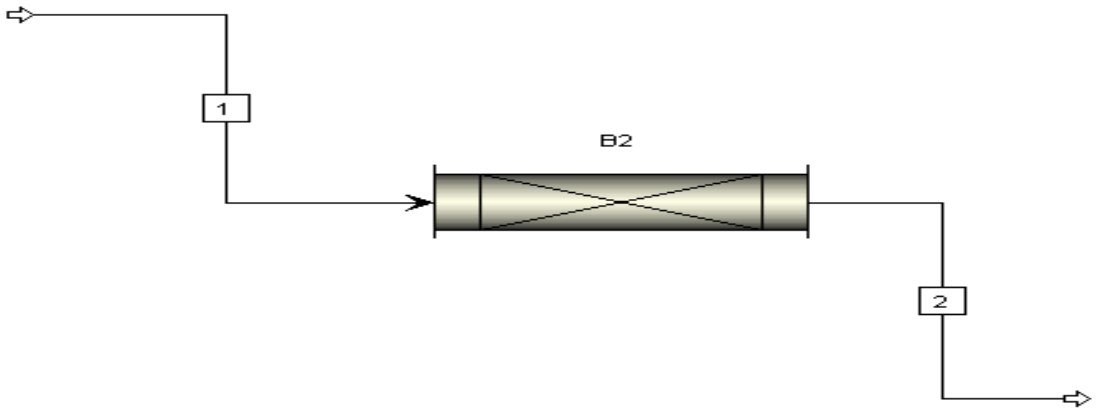
反应器容积为5m^3，装填系数为0.6,为保证釜内惰性环境，输入氮气并使出釜物料的气相分率为0.001，加料氨水的浓度为4.1Kmol/m3，流量为32.5m3/hr，甲醛水溶液浓度为6.3Kmol/m3，流量为32.5m3/hr，求35℃下乌洛托品的产量和输入的氮气量，并分析20-60℃范围内，温度对甲醛转化率的影响。

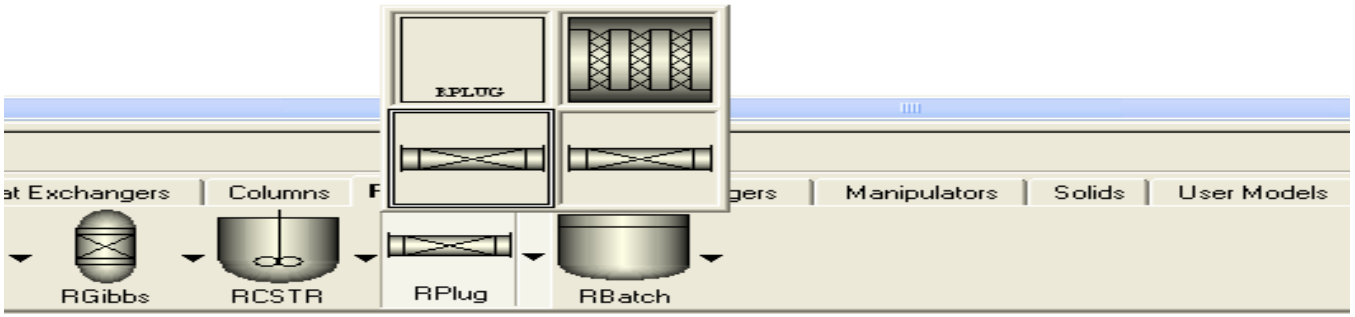
二、R-Plug 平推流反应器

性质：无返混的管式反应器，可有换热夹套，可模拟单、两、三相体系，必须有动力学方程。

应用：已知化学反应式和动力学方程，计算所能达到的转化率或反应器体积，以及相应的热负荷。

二、R-Plug 平推流反应器





二、R-Plug 平推流反应器

R-Plug有四组模型参数：

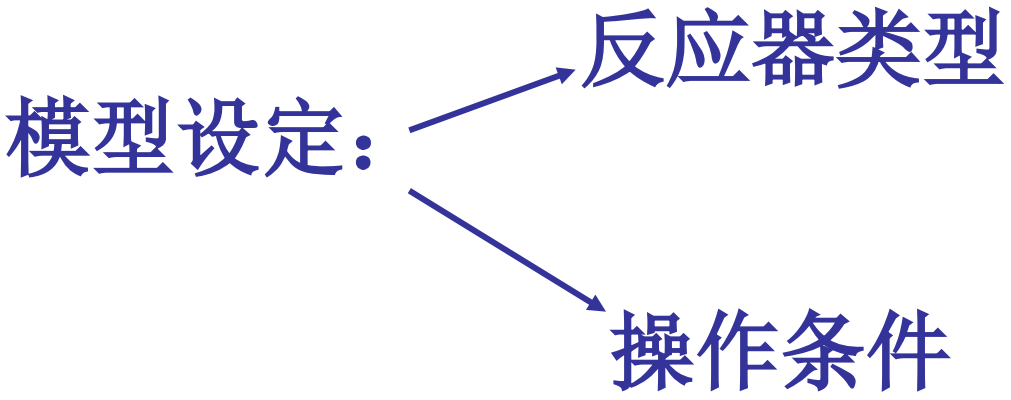
模型设定（Specificationgs）

反应器构型(Configuration)

化学反应（reaction）

压力(Pressure)

二、R-Plug 平推流反应器



二、R-Plug 平推流反应器

反应器类型：

指定反应温度

绝热反应器

恒定冷剂温度反应器

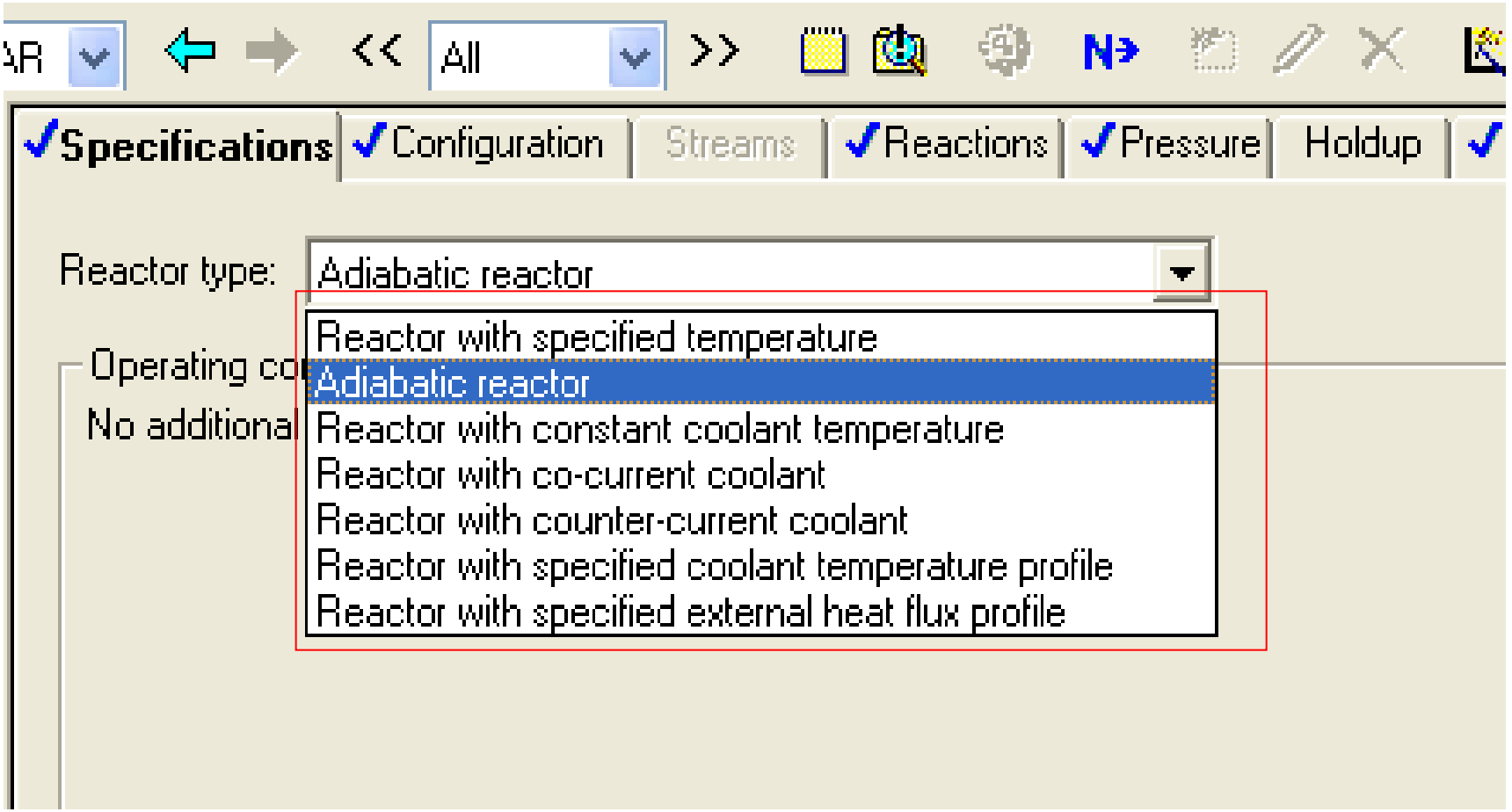
与冷却剂并流

与冷却剂逆流

指定冷却剂温度变化曲线

指定外部热流变化曲线

二、R-Plug 平推流反应器



二、R-Plug 平推流反应器

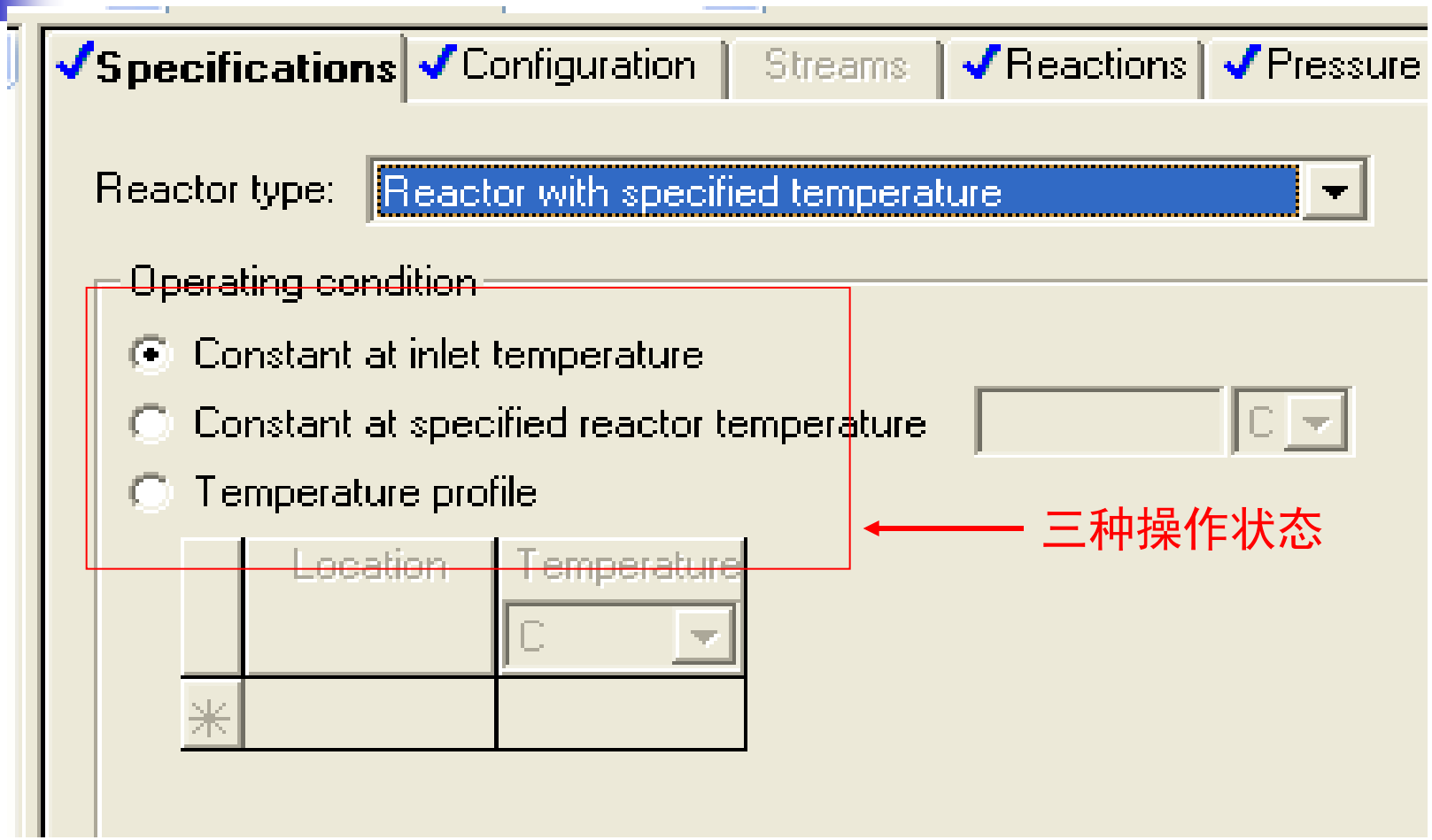
指定反应器温度有三种操作状态

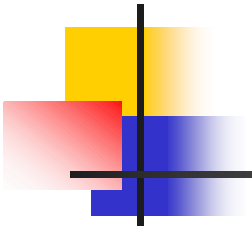
1)进料温度下的恒温

2)指定反应器等温度

3)反应器内温度沿床层分布曲线

二、R-Plug 平推流反应器



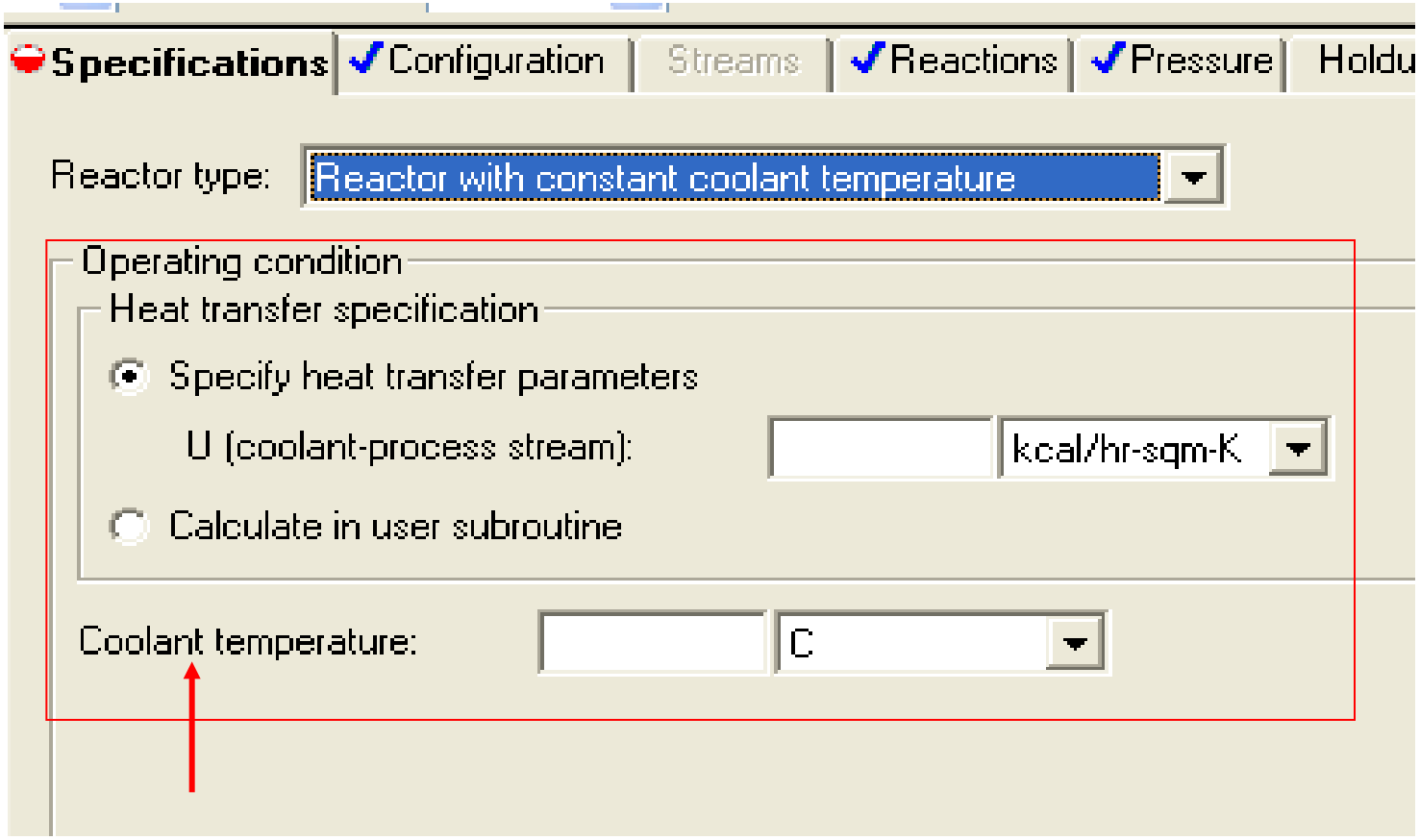


对于有冷却剂的反应器类型：

（流程图中需连接冷却剂）

在操作条件中需输入传热系数U、冷剂出口温度、或蒸汽分率

二、R-Plug 平推流反应器



二、R-Plug 平推流反应器

反应器构型表单：

单管或多管反应器

反应管的根数

反应管的长度或直径

反应物料的有效相态

冷却剂的有效相态