



高等学校试用教材

基本有机化工过程及设备

南京化工学院等合编

裘元焘 主编

化学工业出版社

高等学校试用教材

基本有机化工过程及设备

南京化工学院等合编

裘 元 泰 主编

化学工业出版社

内 容 提 要

本书主要介绍了基本有机化工生产中常见而又较重要的化工过程及设备。着重分析了生产过程对设备型式的要求，讨论了设备结构、操作性能，对工艺及设备的基本计算方法亦作了较详细的介绍。

全书分两篇共九章，第一篇为反应过程及设备，分五章对均相、气液相、气固相反应器以及管式裂解炉作了介绍；第二篇为分离过程及设备，分四章对多组分精馏、特殊精馏、多组分吸收及吸附作了介绍。

本书为高等学校基本有机化工专业的试用教材，亦可供从事有机化工方面的工程技术人员参考。

—

高等学校试用教材
基本有机化工过程及设备

南京化工学院等合编
裘 元 燕 主编

化学工业出版社 出版
(北京和平里七区十六号楼)
化学工业出版社印刷厂印刷
新华书店北京发行所发行

开本787×1092 1/16 印张28 1/4 字数 695 千字印数 1-13,650
1981年4月北京第1版 1981年4月北京第1次印刷
统一书号15063·3254 (K-248) 定价2.90元

前　　言

《基本有机化工过程及设备》是继化学工程、基本有机化工理论基础等课程后开设的一门专业课之试用教材。主要讨论基本有机化工生产中经常遇到而又较重要的化工过程及设备，着重分析生产过程对设备型式提出的要求，并在此基础上讨论设备构造及其工艺计算。使学生初步学会分析基本有机化工生产设备的构造和操作性能，掌握这些设备的基本计算方法，培养学生具有设备核算和工艺设计的能力。

1978年2月在上海召开的化工专业教材编写工作会议，通过了各门专业课教材的编写大纲，确定了本书内容主要由反应及分离两大部分组成，共分九章，其中第五章及第九章各校可根据具体情况选用。

参加本书编写工作的有南京化工学院濮家驹、李山（第一、二、三章），裘元焘同志（第八章）；浙江大学黄承迂（第四章）；华东石油学院陆绍信（第五章）；北京化工学院朱美文（第六、七章）；华南工学院庞先粦（第九章）。裘元焘主编。初稿完成后，经华东石油学院钱家麟、成都科技大学黄通国以及上海化工学院秦学洵等同志审阅，提了不少宝贵意见，编写人根据审稿会议意见作了认真的修改。但由于水平所限，书中谬误之处，仍在所难免。希各校在使用过程中，发现不妥之处，随时指正，以便今后予以改正。

编　者

1979年9月

目 录

第一篇 反应过程及设备

| | |
|-------------------------------|--------|
| 第一章 均相反应器 | (3) |
| 第一节 反应器计算的基本方程式 | (3) |
| 一、反应动力学方程式 | (3) |
| 二、物料衡算式 | (4) |
| 三、热量衡算式 | (5) |
| 第二节 理想反应器的计算 | (6) |
| 一、两种理想流型 | (6) |
| 二、理想间歇槽形反应器 | (7) |
| 三、理想管式流动反应器 | (10) |
| 四、理想连续槽形反应器 | (20) |
| 第三节 反应器型式和操作方式的评选 | (27) |
| 一、生产能力的比较 | (27) |
| 二、反应选择性的比较 | (29) |
| 第四节 连续流动反应器的停留时间分布和流动模型 | (31) |
| 一、非理想流动 | (31) |
| 二、停留时间分布函数 | (32) |
| 三、停留时间分布函数的测定 | (36) |
| 四、停留时间分布函数的应用 | (40) |
| 五、宏观流体反应过程计算 | (42) |
| 六、微观流体反应过程计算 | (44) |
| 参考文献 | (53) |
| 第二章 气液相反应器 | (54) |
| 第一节 概述 | (54) |
| 一、气液相反应器的特点和应用范围 | (54) |
| 二、气液相反应器的结构 | (54) |
| 第二节 气液相反应过程动力学 | (56) |
| 一、双膜理论 | (56) |
| 二、宏观动力学方程式的建立 | (58) |
| 三、测定气液相反应速度的方法 | (66) |
| 四、反应速度和反应器型式的选择 | (67) |
| 第三节 填料塔的设计计算 | (68) |
| 一、物理吸收 | (68) |

| | |
|------------------------|-------|
| 二、化学吸收 | (69) |
| 第四节 鼓泡塔的设计计算 | (73) |
| 一、鼓泡塔流体力学 | (73) |
| 二、鼓泡塔的传热和传质 | (81) |
| 三、鼓泡塔的设计计算 | (83) |
| 参考文献 | (91) |
| 第三章 气固相固定床催化反应器 | (92) |
| 第一节 固定床反应器的特点和结构型式 | (92) |
| 第二节 固定床反应器内的流体流动 | (94) |
| 一、催化剂颗粒的直径和形状系数 | (94) |
| 二、床层空隙率 | (95) |
| 三、流体在固定床中流动的特性 | (96) |
| 四、流体流过固定床层的压力降 | (97) |
| 第三节 固定床反应器内的传热 | (98) |
| 一、床层对壁总给热系数 | (99) |
| 二、床层有效导热系数和表现壁膜给热系数 | (100) |
| 三、流体与催化剂颗粒间给热系数 | (107) |
| 第四节 固定床反应器内的传质 | (108) |
| 一、流体与催化剂颗粒外表面间的传质 | (108) |
| 二、催化剂颗粒内部的传质 | (111) |
| 三、床层内的混和扩散 | (114) |
| 第五节 总反应速度方程式 | (114) |
| 第六节 固定床反应器的设计 | (116) |
| 一、经验法 | (116) |
| 二、数学模型法 | (120) |
| 参考文献 | (139) |
| 第四章 流化床反应器 | (140) |
| 第一节 流化床的特性及流化现象 | (140) |
| 一、流化床的特性 | (140) |
| 二、流化现象 | (141) |
| 第二节 流化床床径及床高的确定 | (143) |
| 一、临界流化速度 | (143) |
| 二、最大流化速度 | (145) |
| 三、操作流化速度 | (147) |
| 四、床径的确定 | (148) |
| 五、流化床的空隙率和膨胀比 | (149) |
| 六、流化床中流体的阻力 | (150) |
| 七、流化床高度 | (151) |
| 第三节 流化床的内部构件 | (154) |

| | |
|---------------------------|-------|
| 一、挡板与挡网的作用 | (155) |
| 二、斜片挡板的结构与特性 | (156) |
| 三、挡板(挡网)结构参数 | (156) |
| 四、流化床的气体分布板 | (159) |
| 第四节 流化床反应器的传热 | (164) |
| 一、流化床传热的基本形式 | (164) |
| 二、流化床内换热器的结构型式 | (166) |
| 三、流化床内换热器的气膜给热系数 | (167) |
| 四、流化床内换热器的平均温度差 | (169) |
| 五、流化床内换热器传热面积计算 | (170) |
| 第五节 气固流态化内部动态及模型简介 | (173) |
| 一、气泡的行为 | (173) |
| 二、流化床的乳化相 | (176) |
| 三、流化床反应器的数学模型及放大 | (177) |
| 参考文献 | (181) |
| 第五章 管式裂解炉 | (182) |
| 第一节 概述 | (182) |
| 第二节 管式裂解炉的结构 | (182) |
| 一、管式裂解炉的一般构造及工艺指标 | (182) |
| 二、管式裂解炉的炉型改革 | (183) |
| 三、管式裂解炉炉型 | (186) |
| 第三节 管式裂解炉的热平衡 | (189) |
| 一、管式裂解炉的热负荷 | (189) |
| 二、燃料的燃烧计算 | (193) |
| 三、管式炉的热平衡 | (200) |
| 第四节 管式裂解炉中的传热 | (211) |
| 一、辐射传热的基础理论 | (211) |
| 二、管式裂解炉中辐射传热的计算方法 | (222) |
| 三、对流室的传热计算 | (242) |
| 第五节 管式裂解炉的反应管工艺计算 | (245) |
| 一、管式裂解炉工艺设计要求概述 | (245) |
| 二、辐射段反应管的简化经验计算法 | (246) |
| 三、辐射段反应管的逐管计算法 | (248) |
| 参考文献 | (252) |

第二篇 分离过程及设备

| | |
|------------------|-------|
| 第六章 多组分精馏 | (254) |
| 第一节 汽液平衡 | (256) |
| 一、汽液平衡关系式 | (257) |

| | |
|-----------------------------|--------------|
| 二、露点温度与泡点温度 | (259) |
| 第二节 多组分单级分离 | (260) |
| 一、气体混合物的冷凝 | (260) |
| 二、液体混合物的汽化 | (263) |
| 三、等焓节流 | (264) |
| 第三节 多组分精馏 | (268) |
| 一、简捷计算法 | (268) |
| 二、逐板计算法 | (279) |
| 第四节 复杂精馏 | (298) |
| 一、复杂精馏流程 | (298) |
| 二、复杂精馏简捷计算 | (299) |
| 三、复杂精馏电子计算机计算 | (306) |
| 参考文献 | (314) |
| 第七章 特殊精馏 | (315) |
| 第一节 非理想溶液的汽液平衡 | (315) |
| 一、二组分溶液的活度系数 | (315) |
| 二、三组分溶液的活度系数 | (317) |
| 三、三组分系统的汽液平衡相图 | (323) |
| 第二节 恒沸精馏 | (325) |
| 一、恒沸物 | (325) |
| 二、恒沸剂的选择及恒沸点的预测 | (328) |
| 三、恒沸精馏流程 | (333) |
| 四、恒沸精馏的计算 | (334) |
| 第三节 萃取精馏 | (348) |
| 一、萃取精馏的基本原理 | (348) |
| 二、萃取剂的选择 | (350) |
| 三、萃取精馏的工艺流程 | (352) |
| 四、萃取精馏的计算 | (353) |
| 五、萃取精馏的注意事项 | (362) |
| 参考文献 | (366) |
| 第八章 吸收过程 | (367) |
| 第一节 吸收过程的特点及分类 | (367) |
| 第二节 吸收设备的类型 | (368) |
| 一、填料塔 | (368) |
| 二、板式塔 | (369) |
| 三、湍球塔 | (370) |
| 四、移除吸收热的措施及装置 | (371) |
| 五、降膜式吸收器 | (373) |
| 第三节 多组分吸收的计算 | (374) |

| | |
|-----------------------------|--------------|
| 一、图解梯级法 | (375) |
| 二、吸收因子法 | (377) |
| 三、塔板效率 | (399) |
| 第四节 蒸出过程及其计算 | (400) |
| 参考文献 | (403) |
| 第九章 吸附过程 | (404) |
| 第一节 概述 | (404) |
| 一、吸附过程的分类 | (404) |
| 二、吸附剂 | (405) |
| 第二节 吸附理论 | (408) |
| 一、吸附平衡 | (408) |
| 二、吸附速率 | (414) |
| 第三节 固定床吸附分离 | (415) |
| 一、吸附剂的活性、吸附负荷曲线与透过曲线 | (416) |
| 二、吸附等温线对固定床传质区和吸附波的影响 | (421) |
| 三、固定床吸附分离的计算 | (424) |
| 第四节 移动床和模拟移动床吸附分离 | (429) |
| 一、移动床吸附分离过程及设备 | (429) |
| 二、移动床吸附分离的计算 | (431) |
| 三、模拟移动床吸附分离过程及设备 | (439) |
| 参考文献 | (444) |

第一篇 反应过程及设备

反应器是化工生产中的关键设备。一般来说，在工业上有机化学反应不可能百分之百地完成，也不可能只生成一种产物。但是，人们可以通过各种手段加以适当的控制，在尽可能抑制副反应的前提下，努力提高转化率。这一点在工业生产上是非常重要的。提高转化率减少副反应不仅可以提高反应器的生产能力，降低反应过程能量消耗，而且可以充分而有效地利用原料，减轻分离装置负荷，节省分离所需能量。一个好的反应器应能保证实现这些要求，并能为操作控制提供方便。

化学反应通常要求适宜的反应条件，例如温度、压力、反应物组成等，特别是温度条件较为重要。温度过低，反应速度慢，工业生产是不希望的；温度过高会使反应失去控制，使副反应增多，收率下降。但要维持最适宜的温度条件并不是一件容易的事，因为化学反应一般均伴随有热效应，必须采取有效的换热措施，及时移出或加入热量，才能维持既定的温度水平。因之，反应器内的过程不仅具有化学反应的特征，而且具有传递过程的特征。除了考虑遵循化学反应动力学外，还必须考虑流体动力学、传热和传质以及这些宏观动力学因素对反应的影响。只有综合考虑反应器内流动、混和、传热、传质和反应诸因素，才能做到反应器的正确选型、合理设计、有效放大和最佳控制等。

基本有机化工产品品种繁多，包括各种反应类型（如氧化、加氢和水合等等）和各种物料的聚集状态（气体、液体和固体等）。反应条件差异都很大（如温度和压力），操作方法又各有不同（如间歇和连续），因此与之相适应的反应器是多种多样的。为了便于研究讨论，通常进行如下的分类。

一、按聚集状态分类

按聚集状态可以把反应器分成均相和非均相两种。前者又可分为气相反应器和液相反应器，反应物料均匀地混和或溶解成为单一的气相或液相，如石油烃裂解的管式炉就是气相反应器，生产乙酸乙酯的设备就是液相反应器。非均相反应器又可分为气-液、气-固、液-液、液-固以及气-液-固等五种。基本有机化工生产中应用较多的是气-固和气-液两种。如乙烯直接氧化制环氧乙烷是采用气-固相反应器，苯烃化制乙苯是采用气-液相反应器。

按聚集状态分类，其实质是按宏观动力学特性分类。同样聚集状态的反应有着相同的动力学规律，如均相反应的共同规律和特性是无相界面，反应速度只与温度和浓度等有关；而非均相反应的共同规律和特性是有相界面，反应速度不仅与温度和浓度有关，而且还与相界面大小和相间扩散速度有关。对于气-固催化反应，不论在什么环境中进行，气相组分都必须扩散到固体催化剂表面上，然后在表面上进行反应。对于气-液相反应，不论在什么环境中进行，都有气液相界面的问题和气液相间传递的问题。故以聚集状态分类可以阐明各种相态反应过程的动力学规律。本书将按这种分类进行讨论。

二、按反应器结构型式分类

按反应器结构型式的特征，可以分为槽形（或称釜式）、管式、塔式、固定床和流化床等反应器。按反应器结构型式分类，其实质是按传递过程的特性分类。同类结构反应器其内

部物料往往具有相同的流动、混和、传热和传质等特性，它们对反应结果的影响，可以用同类的传递过程数学模型加以描述。

1. 槽形反应器

槽形反应器主要用于进行液相均相、液相非均相或气液相反应。可间歇操作，也可连续操作。反应器由壳体、搅拌器和换热装置等组成。搅拌器的作用在于使物料均匀混和，强化传热传质。换热装置保持反应所要求的适宜温度，可为夹套式、蛇管或列管式，也可以是外热循环式等。

2. 管式反应器

管式反应器应用于气相或液相连续反应。由于管子通常能承受较高的压力，用于加压下的反应尤为适合，例如油脂或脂肪酸加氢生产高碳醇，多采用管式反应器。裂解反应的管式炉也是管式反应器。

3. 塔式反应器

塔式反应器是指高径比较大的反应设备。广泛应用于气-液反应和液-液反应。如苯烃化制乙苯的烃化塔等。

4. 固定床反应器

固定床反应器系指流体通过静态催化剂颗粒进行反应的反应器。基本有机化工中常见的为气-固相固定床反应器，固体为催化剂，气体为反应物料。

5. 流化床反应器

固体在反应器内处于流化状态称流态化，其反应器称流化床反应器。它主要用于气-固相催化反应，如丙烯氯氧化制丙烯腈、萘或邻二甲苯氧化制苯酐等。流化技术是近年来化工技术发展中的一项重要成就，在基本有机化工中使用也日益广泛。

三、按操作方法分类

操作方法可以分为间歇式(或称分批式)、半间歇式(或称半连续式)和连续式三种。

间歇式操作是一次加入反应物料，经一定时间反应后，取出全部产物。其特点是反应期间反应物和产物浓度均随时间而变化，是不稳定过程。由于存在加料、出料和清洗等非生产时间，设备利用率不高，劳动强度大。适用于小批量、多品种的生产。

半间歇操作是指一种物料分批加入而另一种物料连续加入的情况，或一批加入物料用蒸馏等方法连续移走部分产品等情况，它也是一个不稳定过程。

连续化操作是连续加入反应物和取出产物，反应器内温度和浓度等均不随时间而变，是稳定过程。连续化操作设备利用率高，产品质量稳定，易于自动控制，适合于大规模生产。基本有机化工生产中大多数采用连续操作。

四、按温度条件和换热方式分类

按照温度条件反应器可分为等温和非等温两种反应器。按换热方式又可分为绝热式、外热式和自热式。由于化学反应用于温度变化的敏感性，传热和温度控制是反应器设计和操作中的主要问题。

对于等温反应器，只考虑浓度变化的影响，从而使反应器的计算大为简化。非等温反应器按换热方式不同，反应器的型式就不同，设备计算方法也不同。

第一章 均相反应器

均相反应是指在气相或均一的液相中进行的化学反应。基本有机化工生产中大量遇到的是气-液反应和气-固反应，它们都属于非均相反应。这里首先讨论均相反应器，主要有如下几方面的原因。

1) 均相反应不存在相界面，不需考虑相间的接触和相间扩散阻力等因素的影响，因而均相反应器的结构和计算通常比较简单。

2) 有些非均相过程，如气液相反应，反应物先由气相主体向液相扩散，并溶解在液相中，然后在液相均相中进行反应。如果传质速率足够快，则液相中的反应速度就决定了过程的总速度，气液相反应过程也就可以简化为液相中的均相过程。这表明均相反应的适应范围并不一定局限于纯均相反应。

3) 均相反应器计算的基本原理和方法，对于非均相反应器也是适用的，它可作为反应器设计的基础。

由于上述原因，我们在讨论各类反应器时，先从均相反应器入手。在本章中，我们主要讨论各种均相反应器的设计计算方法和反应器型式、操作方式的选择等问题。

第一节 反应器计算的基本方程式

反应器计算的主要任务是根据给定的生产任务，在一定的条件下，计算反应所需要的体积，以此确定反应器的主要尺寸。

反应器计算中所应用的基本方程式是物料衡算式、热量衡算式和反应动力学方程式。反应过程如有较大的压力降，并因而影响反应速度时，还要加上动量衡算式。反应器的计算也就是上述方程组的联合求解。

一、反应动力学方程式

对于均相反应，我们通常只限于讨论几种反应物已经混和均匀，在反应时不存在扩散阻力的过程。这时反应过程的总速度，只取决于化学反应速度。

在均相反应中，反应速度常采用下述定义。当组分A为反应物时

$$(-r_A) = -\frac{1}{V} \frac{dn_A}{d\tau} \quad (1-1)$$

当组分A为产物时

$$r_A = \frac{1}{V} \frac{dn_A}{d\tau} \quad (1-2)$$

式中 $(-r_A)$ ——反应物A的消失速度，公斤分子/米³·时；

r_A ——产物A的生成速度，公斤分子/米³·时；

V——反应混合物的体积，米³；

n_A ——组分A的瞬间公斤分子数；

τ ——反应时间，时。

对于均相反应，反应混合物的体积就是反应器的有效体积，又称反应体积。

对于管式流动反应器，由于反应物浓度和反应速度等随位置而变化，又常常用单位反应体积中反应物分子流量的改变来表示反应速度。

$$(-r_A) = \frac{dF_A}{dV_R} \quad (1-3)$$

式中 F_A ——反应物 A 的流量，公斤分子/时。

影响均相反应速度的因素主要为温度、压力和反应物组成。表示反应速度与影响因素间函数关系的式子称为动力学方程式，或称反应速度方程式。如对反应 $A \rightarrow R$ ，系 n 级不可逆反应，其动力学方程式可写成

$$(-r_A) = -\frac{1}{V} \frac{dn_A}{d\tau} = k C_A^n \quad (1-4)$$

式中 k ——反应速度常数， $(\text{米}^3)^{n-1}/\text{时} \cdot \text{公斤分子}^{n-1}$ ；

n ——反应级数；

C_A ——反应物 A 的浓度，公斤分子/ 米^3 。

对于气相反应，又常以组分分压表示

$$(-r_A) = -\frac{1}{V} \frac{dn_A}{d\tau} = k_p p_A^n \quad (1-5)$$

式中 k_p ——反应速度常数，公斤分子/ $\text{米}^3 \cdot \text{时} \cdot \text{大气压}^n$ 。

如可看作理想气体

$$p = CRT \quad R \text{——气体常数}$$

则 $k_p = k/(RT)^n$ (1-6)

对于大多数液相反应和反应前后无分子数变化的气相反应，反应前后物料密度改变不大，可视为等容过程。反应速度又可表示为

$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{d\tau} = k C_A^n \quad (1-7)$$

$$(-r_A) = -\frac{dp_A}{d\tau} = k'_p p_A^n \quad (1-8)$$

式中 k'_p ——反应速度常数， $1/\text{时} \cdot \text{大气压}^{n-1}$ 。

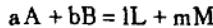
$$k'_p = k(RT)^{1-n} = k_p RT \quad (1-9)$$

必须注意各种反应速度常数的使用场合、单位和相互换算关系，防止在计算中混淆。

反应的动力学方程式通常需由实验测定。

二、物料衡算式

对于简单化学反应，如



只需要对我们所着眼的一个反应物列出物料衡算式，其余的反应物和产物的量就可由化学计量关系确定。

由于反应器内温度和反应物浓度等参数通常随空间（如管式流动反应器）或时间（如间歇情形反应器）而变，化学反应速度也随之改变，因而必须选取上述参数看成不变的单元体积 ΔV 和单元时间 $\Delta \tau$ 作为物料衡算的空间基准和时间基准。

对一个反应物写出的适用于任何型式和操作方式的反应器的物料衡算通式如下：

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间内进} \\ \text{入单元体积的} \\ \text{反应物量} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间内离} \\ \text{开单元体积的} \\ \text{反应物量} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间、单} \\ \text{元体积内转化} \\ \text{掉的反应物量} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间、单} \\ \text{元体积内反} \\ \text{应物的积累量} \end{array} \right\}$$

I II III IV

(1-10)

上式中第 I、II 项表示单元时间 Δt 内进入和离开反应器单元体积 ΔV 的着眼反应物量，第 III 项决定于单元时间 Δt 和单元体积 ΔV 内的温度和反应物浓度条件下的化学反应速度。如着眼反应物为 A，可以写成 $(-r_A)\Delta V\Delta t$ 。 $(-r_A)$ 为单位体积内反应物 A 的消失速度，可由反应动力学方程式求得。第 IV 项表示由于其他三项而造成的在单元时间 Δt 、单元体积 ΔV 内反应物的改变量。

物料衡算式给出了反应物浓度或转化率随反应器内位置或时间变化的函数关系。

三、热量衡算式

不少反应均有显著的热效应，因之，随着化学反应的进行，物系的温度也有所变化，而温度变化又会影响反应速度，所以，必须进行热量衡算，以计算反应器内各点的温度（或各个时间的温度），从而可以确定该点的（或该时间的）化学反应速度。

和物料衡算一样，应选取温度和浓度等参数可视为不变的单元体积和单元时间为基准。

热量衡算通式为

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间内进入} \\ \text{单元体积的物料} \\ \text{所带进的热量} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间内离开} \\ \text{单元体积的物料} \\ \text{带走的热量} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间、单元} \\ \text{体积内由于反应} \\ \text{产生的热量} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间内单元} \\ \text{体积传递至环境} \\ \text{或载热体的热量} \end{array} \right\}$$

I II III IV

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间、单元} \\ \text{体积内热量的积} \\ \text{累} \end{array} \right\}$$

V

(1-11)

上式中第 I、II 项是单元时间 Δt 内，进入和离开反应器单元体积 ΔV 的总物料带入或带出的热量，计算热量时，同一热量衡算式内各项热量计算应取同一基准温度。第 III 项是由于化学反应放出或吸收的热量，可写成 $(-r_A) \cdot \Delta V \cdot \Delta t \cdot (-\Delta H_A)$ ， ΔH_A 是以反应物 A 计算的反应热。

热量衡算式给出了温度随反应器内位置或时间变化的函数关系。

物料衡算式、热量衡算式和反应动力学方程式是相互依存、紧密联系的。如单元体积内的化学反应速度取决于反应物浓度和温度。反应物浓度由物料衡算式确定，温度由热量衡算式确定，温度、浓度对反应速度的影响则由反应动力学方程式确定。对于等温过程，因为温度不随时间、空间改变而发生变化，只需联立解反应动力学方程式和物料衡算式。对于非等温过程，则是上述三个方程式联立求解。

在解物料衡算和热量衡算联立方程时，必须知道反应器内的流动混和状况，因为流动混和状况影响着反应器内的浓度和温度分布。但在实际反应器中，流动混和状况往往难以确

知。为使问题简化，我们首先讨论流型已经肯定了的理想反应器的计算，在此基础上，再讨论非理想流动反应器。

第二节 理想反应器的计算

一、两种理想流型

理想反应器是指流体的流动混和处于理想状况的反应器。对于流动混和，可以设想有两种理想极限情况，一是理想混和，一是理想置换。

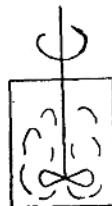


图 1-1 理想混和

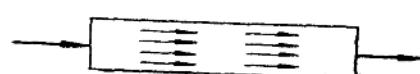


图 1-2 理想置换

理想混和是指反应器内物料达到了完全的混和，各点浓度、温度完全均一。槽形反应器内，物料经强烈的搅拌，可以看成达成了理想混和。

搅拌良好的槽形反应器可以间歇(或半间歇)操作和连续操作。间歇(半间歇)操作时，物料处于封闭式流动状态，反应器内浓度、温度均一，但随时间改变。连续操作时，物料一进入反应器，立即与反应器内物料完全混和，反应器内浓度、温度均一，且与出料的浓度、温度相同，不随时间改变。这种连续操作的槽形反应器称为理想混和反应器。

理想置换是指在与流动方向垂直的截面上，各点的流速和流向完全相同，就象活塞平推一样，故又称“活塞流”。由于这种流动特征，流体的浓度和温度在与流动方向垂直的截面上，处处相等，不随时间改变，而沿着流动方向，随反应的进行，浓度和温度不断变化。在流动方向上不存在流体的混和，所有流体质点在反应器内停留的时间相等。细长型的管式流动反应器可近似地看成理想置换反应器。

两种理想流型反应器内，进行反应 $A \rightarrow R$ 时，反应物 A 和产物 R 浓度变化示意见图 1-3。

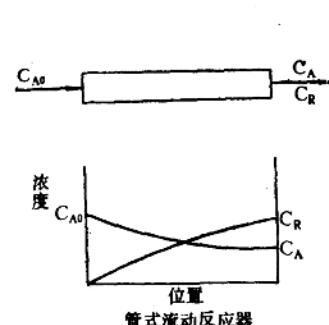
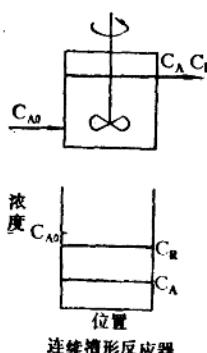
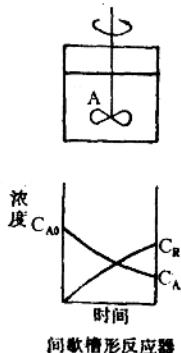


图 1-3 两种理想流型反应器内物料浓度变化

C—浓度 下标：A—反应物 R—产物 0—初始状况

由于理想反应器的计算比较简单，工业生产中许多装置又可以近似地按理想状况处理，故常以理想反应器的设计计算作为实际反应器设计的基础。

二、理想间歇槽形反应器

槽形反应器内设有搅拌装置。在搅拌良好的情况下，槽内物料达到完全混和，浓度、温度均一。反应器内各点的化学反应速度也都相同。当采用间歇操作时，则是一个不稳定过程。随着反应的进行，槽内的浓度、温度和反应速度都随时间而变化。

槽形反应器内常设有换热装置。间歇操作时，根据反应的要求，可以改变换热条件（如传热面积、载热体流量和温度等）维持等温操作或非等温操作。

槽形反应器主要用于液相反应。液体在反应前后密度变化不大，可视为等容过程。

进行间歇槽形反应器体积计算时，必须先求得为达到一定转化率所需的反应时间，然后，结合非生产时间和每小时要求处理的物料量，计算反应器的有效体积。

1. 反应时间的计算

对间歇槽形反应器列出物料衡算式，就可推导出反应时间计算式。

在间歇槽形反应器内，物料衡算通式可简化如下。

1) 由于反应器内浓度、温度均一，不随位置而变，故单元体积可采用反应器有效体积 V_R ，即 $\Delta V = V_R$ 。

2) 由于是不稳定过程， $\Delta \tau = d\tau$ 。

3) 由于间歇操作，物料衡算通式(1—10)中进料项Ⅰ和出料项Ⅱ为零。因而得到理想间歇槽形反应器物料衡算式为：

$$-\left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间、单元} \\ \text{体积内转化掉的} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{单元时间、单元} \\ \text{体积内反应物的} \\ \text{积累量} \end{array} \right\}$$

即 $-(-r_A)V_R d\tau = dn_A$

一般常以着眼反应物 A 的转化率形式表示

$$\because n_A = n_{A0}(1 - x_A)$$

$$\therefore dn_A = -n_{A0}dx_A$$

式中 n_A ——任一瞬间槽内反应物 A 的公斤分子数；

n_{A0} ——反应开始时，槽内反应物 A 的公斤分子数；

x_A ——反应物 A 的转化率。

代入上述关系后得到

$$(-r_A)V_R d\tau = n_{A0}d \cdot x_A$$

$$d\tau = \frac{n_{A0}d \cdot x_A}{V_R(-r_A)}$$

积分得到

$$\tau = n_{A0} \int_0^{x_{A_f}} \frac{dx_A}{V_R(-r_A)} \quad (1-12)$$

式中 τ ——反应时间；

x_{A_f} ——反应物 A 的最终转化率。

式(1—12)为间歇槽形反应器反应时间计算式。它是间歇槽形反应器基础设计方程式，无论是等温、非等温、等容和变容过程均可应用此式。

对于变容和非等温过程，特别是非等温过程，式(1—12)求解是比较复杂的，可以参考理想管式流动反应器变容和非等温过程的计算方法。以下只讨论简单的等温等容过程计算。

在等容情况下，反应过程 V_R 不变，故式(1—12)中的 V_R 可移至积分号外，且因

$$\frac{n_{A0}}{V_R} = C_{A0}$$

式中 C_{A0} ——反应开始时反应物 A 的浓度，公斤分子/米³。

代入上述关系后，式(1—12)改变为

$$\tau = C_{A0} \int_0^{x_{At}} \frac{dx_A}{(-r_A)} \quad (1-13)$$

由式(1—13)可以看出，达到一定转化率所需要的反应时间只与反应物初始浓度和反应速度有关，与处理量大小无关，因此通过小试验找出一定初始浓度和一定温度下的转化率和反应时间的关系，如果大生产装置在搅拌和换热方面能保持和小装置相同的条件，就可以简单地计算出大生产装置的尺寸。

将式(1—13)用于计算反应时间时，尚需找出反应速度与转化率之间的函数关系，以便进行积分。

对于一级反应，反应速度方程式为

$$(-r_A) = kC_A$$

式中 k ——反应速度常数，时⁻¹。

在等容情况下， $C_A = C_{A0}(1 - x_A)$

则 $(-r_A) = kC_{A0}(1 - x_A)$

代入式(1—13) $\tau = C_{A0} \int_0^{x_{At}} \frac{dx_A}{kC_{A0}(1 - x_A)}$

在等温情况下， k 为常数，可移至积分号外。

$$\tau = \frac{1}{k} \int_0^{x_{At}} \frac{dx_A}{1 - x_A} = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - x_{At}} \quad (1-14)$$

对于二级反应， $2A \rightarrow C + D$ 或 $A + B \rightarrow C + D$ ， $n_{A0} = n_{B0}$ 。反应速度方程式为

$$(-r_A) = kC_A^2 = kC_{A0}^2(1 - x_A)^2$$

式中 k ——反应速度常数，米³/公斤分子·时。

$$\begin{aligned} \tau &= C_{A0} \int_0^{x_{At}} \frac{dx_A}{kC_{A0}^2(1 - x_A)^2} = \frac{1}{kC_{A0}} \int_0^{x_{At}} \frac{dx_A}{(1 - x_A)^2} \\ &= \frac{x_{At}}{kC_{A0}(1 - x_{At})} \end{aligned} \quad (1-15)$$

2. 反应器有效体积 V_R 的计算

间歇槽形反应器由于分批操作，每处理一批物料都需要有出料、清洗和加料等非生产时间，故处理一定量物料所需要的有效体积不但与反应时间有关，还与非生产时间有关。

$$V_R = V_0(\tau + \tau') \quad (1-16)$$

式中 V_R ——反应器有效体积，即物料所占有的体积，米³；

V_0 ——平均每小时需要处理的物料体积，米³/时；

τ ——达到要求转化率所需反应时间，时；