



普通高等教育“十二五”规划教材

反应与分离过程

班玉凤 朱 静 朱海峰 沈国良 编著

中国石化出版社

[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)

普通高等教育“十二五”规划教材

反应与分离过程

班玉凤 朱 静 朱海峰 沈国良 编著

中国石化出版社

内 容 提 要

全书包括反应过程和分离过程两部分。反应过程部分主要介绍间歇操作釜式反应器、连续操作釜式反应器、连续操作管式反应器、固定床反应器、流化床反应器等的基本原理、选型、工艺计算、设计等。分离部分主要介绍多组分单级平衡分离、多组分普通精馏、特殊精馏、多组分吸收与蒸出等的基本原理、基本操作、计算方法、设计等,详细介绍了 Excel 应用于分离过程复杂计算和 ChemCAD 应用于分离过程的模拟计算。全书注重基本理论、基本计算及其在工程实际中的应用,内容简明、实用。

本书可作为高等学校高职高专化工类专业的教学用书、本科化学及化工类专业少学时教学参考书,也可供石油、石化、化工相关生产、设计部门的工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

反应与分离过程 / 班玉凤等编著. —北京:
中国石化出版社, 2012. 2
普通高等教育“十二五”规划教材
ISBN 978-7-5114-1382-6

I. ①反… II. ①班… III. ①化学工程—高等学校—
教材 IV. ①TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 013750 号

未经本社书面授权,本书任何部分不得被复制、抄袭,或者以任何
形式或任何方式传播。版权所有,侵权必究。

·中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail:press@sinopec.com

北京科信印刷有限公司印刷

全国各地新华书店经销

*

787×1092 毫米 16 开本 17 印张 424 千字

2012 年 2 月第 1 版 2012 年 2 月第 1 次印刷

定价:38.00 元

前 言

化工生产过程是由反应过程和分离过程组成的。学习和掌握反应过程、分离过程的基本原理、基本操作、基本计算和设计内容十分重要。目前,公开出版的单独介绍化学反应过程方面的或化工分离过程方面的书籍很多,而两者有机结合在一起的书籍很少。

为满足高职高专化工类专业培养应用型人才的需要和适应课程改革的要求,本书将过去独立开设的化学反应工程与化工分离工程有机结合起来,整合为反应与分离过程。

按照应用型人才培养规律的要求,本书力求避免繁琐的数学描述,着重基本知识、基本理论、基本计算和技术应用的阐述。

反应器是化工生产中的关键设备,在反应过程部分主要介绍间歇操作釜式反应器、连续操作釜式反应器、连续操作管式反应器、固定床反应器、流化床反应器的原理、结构及工艺计算、设计,对工业生产有现实指导意义。

分离过程主要介绍多组分单级平衡分离、多组分普通精馏、特殊精馏、多组分吸收与蒸出等的基本原理、基本操作、基本计算方法。分离过程的基本计算主要涉及平衡分离过程的计算。平衡分离过程的计算是以平衡常数的计算为基础的,严格的平衡常数计算过程非常复杂,一般平衡分离过程的严格计算只能通过编程由计算机来完成。编程比较麻烦,学生自己编程进行计算很难实现。虽然有些书中给出计算程序供学生使用,但读懂乃至应用这些程序同样需要编程技巧,并且程序冗长、难懂。因此,在以往的高职高专化工类专业教学中,对平衡分离过程的严格计算只作简单介绍,并不要求进行严格计算,在一定程度上限定了教学内容,也影响了学生对这部分内容的掌握。

Microsoft Office 是常用的办公软件,其中 Excel 具有强大的运算功能,但过去一直仅用于简单计算。实际上,充分利用 Excel 提供的运算功能,只需输入相应的公式,无需编程,就能完成复杂的化工计算,计算过程简单、直观,学生非常容易掌握。由于 Excel 具有较强的数组公式和公式的复制功能,所以使用 Excel 计算混合物性质具有无可比拟的优越性。本教材首次尝试将 Excel 用于分离过程的计算,既可以实现节省学生做练习的时间,又可在没有编程的情况下对分离过程进行严格计算。

书中编入的例题多为工业生产实际反应、分离过程的例子，理论联系实际，有利于提高学生的学习兴趣和分析解决实际问题的能力。

本教材由班玉凤、朱静、朱海峰、沈国良编著，其中1~6章由朱静执笔，7~11章由班玉凤执笔，12章和13章由朱海峰执笔，全书由沈国良审定。

由于编著者的水平有限，教材中存在错误在所难免，恳切希望读者批评指正。

编者

目 录

第1篇 反应过程

第1章 绪 论	(1)
1.1 化学反应过程	(1)
1.1.1 研究内容	(1)
1.1.2 与其他学科的关系	(2)
1.1.3 操作方式	(3)
1.1.4 研究方法	(3)
1.2 化学反应及反应器分类	(4)
1.2.1 化学反应分类	(4)
1.2.2 化学反应器分类	(4)
1.3 反应器计算的基本内容和基本方程	(6)
1.3.1 反应器计算的基本内容	(6)
1.3.2 反应器计算的基本方程	(7)
第2章 动力学基础	(9)
2.1 化学动力学方程	(9)
2.1.1 化学反应速率	(9)
2.1.2 反应速率方程	(11)
2.1.3 收率与选择性	(12)
2.2 反应速率方程的建立	(13)
2.2.1 单一反应	(13)
2.2.2 复杂反应	(16)
第3章 釜式反应器	(19)
3.1 间歇釜式反应器的结构	(19)
3.2 间歇釜式反应器尺寸及数量的计算	(21)
3.2.1 反应器直径及高度的计算	(21)
3.2.2 反应器体积及数量的计算	(21)
3.3 等温间歇釜式反应器的计算	(23)
3.4 变温间歇釜式反应器的计算	(25)
3.5 连续操作釜式反应器	(26)
3.5.1 单个连续操作釜式反应器	(26)
3.5.2 多个串联连续操作釜式反应器	(28)
3.5.3 连续操作釜式反应器的稳定操作	(31)
3.6 釜式反应器的搅拌器	(35)

3.6.1	搅拌的作用和要求	(35)
3.6.2	搅拌釜内的流体流动	(36)
3.6.3	搅拌装置的组成	(37)
3.6.4	搅拌器的分类	(38)
3.6.5	搅拌器的选型	(40)
3.7	搅拌釜式反应器的传热装置	(40)
3.7.1	夹套	(40)
3.7.2	蛇管	(40)
3.7.3	其他型式传热装置	(41)
第4章	管式反应器	(44)
4.1	活塞流模型	(44)
4.2	恒温管式反应器设计	(45)
4.2.1	恒容管式反应器计算	(46)
4.2.2	变容管式反应器计算	(46)
4.3	反应器反应体积的比较	(47)
4.3.1	单个反应器比较	(48)
4.3.2	多个串联连续操作釜式反应器与管式反应器比较	(49)
4.3.3	多个串联连续操作釜式反应器的组合	(49)
4.3.4	自催化反应	(51)
4.4	循环反应器	(52)
第5章	反应器内停留时间分布与流动模型	(55)
5.1	流动模型	(55)
5.1.1	理想流动模型	(55)
5.1.2	非理想流动模型	(56)
5.2	停留时间分布	(58)
5.2.1	概述	(58)
5.2.2	停留时间的定义与表征	(58)
5.3	停留时间分布的实验测定	(60)
5.3.1	脉冲法	(60)
5.3.2	阶跃法	(63)
5.4	停留时间分布的统计特征值	(64)
5.4.1	数学期望	(64)
5.4.2	方差	(64)
5.5	理想反应器的停留时间分布	(65)
5.5.1	活塞流模型	(65)
5.5.2	全混流模型	(66)
第6章	多相催化反应器	(69)
6.1	概述	(69)
6.2	固定床反应器的型式	(69)
6.2.1	固定床反应器的特点	(69)

6.2.2 固定床反应器的型式	(70)
6.3 固定床反应器内的传递过程	(72)
6.3.1 固体催化剂的宏观结构及性质	(72)
6.3.2 固体催化反应过程步骤	(75)
6.3.3 固定床反应器内的传递现象	(76)
6.3.4 固定床内的流体流动	(77)
6.3.5 床层的压力降	(78)
6.4 固定床反应器的设计	(78)
6.5 流化床反应器	(81)
6.5.1 流化床反应器	(81)
6.5.2 散式流化床和聚式流化床	(82)
6.5.3 流化床的压降与流速	(82)
6.6 流化床反应器的型式	(84)
6.7 流化床反应器中的传递现象	(86)
6.7.1 流化床反应器中的传质	(86)
6.7.2 流化床反应器内的传热	(87)
6.8 反应器工艺计算原则	(88)

第2篇 分离过程

第7章 分离过程的类别及在工业生产中的地位和作用	(90)
7.1 分离过程的类别	(90)
7.1.1 机械分离	(90)
7.1.2 传质分离	(91)
7.1.3 反应分离	(95)
7.2 分离过程的地位与作用	(96)
第8章 单级平衡分离过程	(97)
8.1 相平衡	(97)
8.1.1 气液平衡关系式	(97)
8.1.2 相平衡常数的计算	(99)
8.1.3 状态方程	(101)
8.1.4 活度系数模型	(107)
8.1.5 K 因子的经验式	(112)
8.1.6 烃类系统相平衡常数的近似估算—— $P-T-K$ 图	(112)
8.1.7 相平衡常数计算方法的选择	(114)
8.2 泡、露点的计算	(115)
8.2.1 泡点计算	(115)
8.2.2 露点计算	(121)
8.3 部分气化和部分冷凝计算	(125)
8.3.1 等温闪蒸的计算	(128)
8.3.2 绝热闪蒸的计算	(132)

第9章 多组分精馏过程的计算	(142)
9.1 设计变量的确定	(142)
9.1.1 设计变量	(143)
9.1.2 一些典型单元的设计变量分析	(144)
9.1.3 装置的设计变量	(149)
9.2 普通多组分精馏的简捷计算	(152)
9.2.1 清晰分割的物料衡算	(152)
9.2.2 最少理论板数	(156)
9.2.3 最小回流比	(161)
9.2.4 回流比 R 的选择	(162)
9.2.5 简捷法求理论板数	(163)
9.3 逐板算法(Lewis - Matheson)	(166)
9.4 精馏塔的严格计算	(167)
9.4.1 数学模型的建立	(168)
9.4.2 方程合并	(170)
9.4.3 托马斯法解三对角矩阵方程	(172)
9.4.4 泡点法(BP法)	(173)
第10章 特殊精馏	(187)
10.1 萃取精馏及其计算	(187)
10.1.1 萃取精馏的基本原理及萃取剂的作用	(188)
10.1.2 萃取剂的选择	(189)
10.1.3 萃取精馏流程	(189)
10.1.4 萃取精馏过程分析	(190)
10.1.5 萃取精馏过程的计算	(192)
10.2 共沸精馏及其计算	(194)
10.2.1 形成共沸物的条件及其共沸物的特点	(194)
10.2.2 共沸剂的选择	(196)
10.2.3 共沸精馏流程	(197)
10.2.4 共沸精馏的计算	(200)
10.2.5 共沸精馏和萃取精馏的比较	(202)
第11章 多组分吸收和解吸过程	(204)
11.1 吸收过程的分类及应用	(204)
11.2 工艺流程	(205)
11.3 多组分吸收和解吸过程分析	(207)
11.4 多组分吸收的计算	(209)
11.4.1 吸收因子	(210)
11.4.2 多组分吸收的简捷计算	(212)
11.5 解吸(蒸出)过程	(218)
11.5.1 解吸方法	(218)
11.5.2 解吸过程的计算	(219)

11.6 流率加和法(SR 法)计算吸收和解吸过程	(220)
11.6.1 V_j 和 L_j 的校正	(221)
11.6.2 T_j 的校正	(221)
11.7 化学吸收	(229)
11.7.1 化学吸收过程分析	(230)
11.7.2 化学吸收的类型	(230)
11.7.3 化学吸收中的传质速率	(232)
11.7.4 化学吸收计算	(237)
第12章 气液传质设备	(241)
12.1 板式塔	(241)
12.1.1 板式塔的结构	(241)
12.1.2 塔板的组成	(241)
12.1.3 塔板的类型	(242)
12.1.4 板式塔的流体力学性能	(243)
12.2 填料塔	(247)
12.2.1 填料塔的结构	(247)
12.2.2 填料类型及性能评价	(248)
12.2.3 气液两相在填料层内的流动	(251)
12.2.4 填料塔的流体力学性能	(252)
12.2.5 板式塔与填料塔的比较	(253)
第13章 过程系统模拟计算	(255)
参考文献	(261)

第1篇 反应过程

第1章 绪 论

用化学方法将原料加工成产品是化学工业、冶金、石油炼制等所采用的主要手段。一个典型的化工生产过程大致由三个部分组成,如图1-1所示。

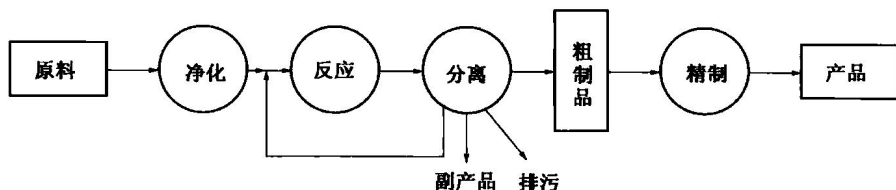


图1-1 化工生产过程示意图

① 原料的预处理 为了使原料符合进行化学反应所要求的状态和规格,根据具体情况,不同的原料需要经过净化、提浓、混合、乳化或粉碎(对固体原料)等多种不同的预处理。

② 化学反应 经过预处理的原料,在一定的温度、压力等条件下进行反应,以达到所要求的反应转化率和收率。反应类型是多样的,可以是氧化、还原、复分解、磺化、异构化、聚合、焙烧等。通过化学反应,获得目的产物或其混合物。

③ 产品精制 将由化学反应得到的混合物进行分离,除去副产物或杂质,以获得符合组成规格要求的产品。

其中化学反应是整个加工过程的核心,是化学反应工程学科的研究对象。化学反应工程主要研究化学反应过程的原理和反应设备,即反应器的设计计算。而其他两步从属于第二步,属于单元操作范畴,是流体流动与传热和分离工程课程所研究的内容。

1.1 化学反应过程

1.1.1 研究内容

化学反应过程是建立在数学、物理及化学等基础学科上而又有着自己特点的应用学科,主要研究反应动力学和反应器设计与分析。反应动力学主要研究化学反应进行的机理和速率。由于化学反应器中进行化学反应的同时还伴有许多物理过程,使得反应过程变得非常复杂,因此对反应动力学往往要进行合理的简化,才能得到便于应用的定量关系。对于一般的反应体系,化学反应速率只取决于反应体系的温度、浓度和压力。反应动力学方程就是表示反应速率与物系参数(温度、浓度)之间的定量关系式。当反应器内进行间歇反应时,反应器内物系参数随反应时间而变;当反应器内进行连续反应时,反应器内物系参数随反应器空间位置而变;当反应器内进行半间歇反应时,反应器内物系参数既随反应时间而变,又随反

反应器空间位置而变。所以，反应器内进行的化学反应的反应速率是变化的。反应器设计是由给定的生产任务确定合适的反应器型式和适宜的尺寸及其相应的操作条件，使化工生产中的反应过程达到最优化，以获得最大的经济效益。

1.1.2 与其他学科的关系

化学反应过程不仅包含化学现象，同时也包含物理现象，即传递现象。传递现象包括动量传递、热量传递和质量传递，再加上化学反应，就是通常所说的“三传一反”。化学反应过程与一些基础学科诸如化工热力学、反应动力学、催化剂、化学工艺、传递工程、工程控制等相互渗透又相互交叉。因此，化学反应过程必然和其他学科之间存在交叉关系，如图 1-2 所示。

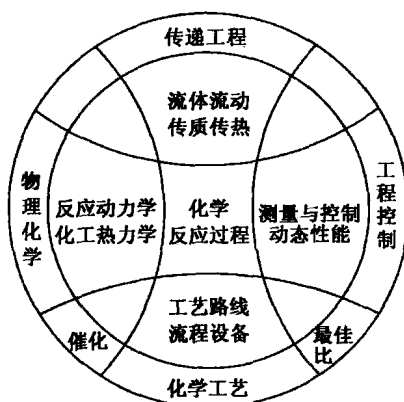


图 1-2 化学反应过程与其他学科的关系

由图可见，化学反应过程与化工热力学、反应动力学、催化剂、化学工艺、传递工程等学科相关，但又存在着差别。

① 化工热力学 主要确定物系各种物性常数（如热容、反应热、压缩因子等）。分析反应的可能性和可能达到的程度，如计算反应的平衡常数和平衡转化率等。

② 反应动力学 专门阐述化学反应速率（包括主反应及副反应）与各项物理因素（如浓度、温度、压力、催化剂等）之间的定量关系。

③ 催化剂 催化剂的问题一般属于化学或工艺的范畴，但也牵涉到许多工程上的问题。如颗粒内的传热、微孔中的扩散、催化剂中活性组分的有效分布、催化剂扩大制备时各阶段操作条件对催化剂活性结构的影响、催化剂的活化及再生等。

④ 化学工艺 主要研究原料和生产方法的选择、流程组织、所用设备（反应器、分离器、热交换器等）的作用、结构和操作、催化剂及其他物料的影响、操作条件的确定、生产控制、产品规格及副产品的分离和利用，以及安全技术和技术经济等问题。

⑤ 传递工程 装置中流体流动与混合的情况如何，温度与浓度的分布如何，都直接影响到反应的进程，而最终离开装置的物料组成，就完全由组成这一物料的各质点在装置中的停留时间和所经历的温度及浓度变化所决定。而装置中的这种动量传递、热量传递及质量传递（三传）过程往往是极其复杂的。当规模放大时，“三传”的情况也改变了，因此就出现了所谓的“放大效应”，其实放大效应并不具有科学的必然性，只是由于在大装置中未能创造出与小装置中相同的传递条件而出现的差异而已。如果能做到条件相同，加以适当的匹配，则不一定出现放大效应。总的来说，传递过程与反应动力学是构成化学反应工程最基本的两

个支柱，是反应工程学的基础。

1.1.3 操作方式

工业反应器的操作方式分为三种类型，即间歇(分批)操作、连续操作和半连续(或半间歇)操作。

(1) 间歇(分批)操作

采用间歇操作的反应器叫做间歇反应器(或分批反应器)，其特点是反应物料一次性装入反应器内，然后进行化学反应，经过一定时间后，达到所要求的反应程度时卸出全部物料，然后清洗、安装反应器，继而进行下一批反应物料的装入、反应、卸料清洗和安装反应器。间歇反应过程反应器内物系的组成(如反应温度、物料浓度等)随时间而变，是一个非定态过程，这是间歇过程的基本特征。间歇反应器在反应过程中既没有物料的输入，也没有物料的输出，整个反应过程都是在恒容下进行的。反应物系若为气体，则必充满整个反应器空间，体积当然恒定；若为液体，虽不充满整个反应器空间，但由于压力的变化而引起液体体积的改变通常可以忽略，因此也可以按照恒容处理。

采用间歇操作的反应器几乎都是釜式反应器，间歇反应器适用于反应速率慢的化学反应，以及产量小的化学品生产过程，如医药等精细化工产品的生产。

(2) 连续操作

其特征是原料连续地输入到反应器中，反应产物也连续地从反应器输出，采用连续操作的反应器叫做连续反应器。连续操作的反应器多属于定态操作，此时反应器内任何部位的物系参数，如浓度及反应温度等均不随时间而改变，但却随空间位置而改变。

大规模工业生产中的反应器绝大部分都采用连续操作，因为它具有产品质量稳定、劳动生产率高、便于实现机械化和自动化等优点。

(3) 半连续(或半间歇)操作

原料与产物只要其中一种为连续输入或输出，而其余为分批加入或卸出的操作均属于半连续(或半间歇)操作，相应的反应器称为半连续反应器或半间歇反应器。半连续(或半间歇)操作具有连续操作和间歇操作的某些特征。因此，半连续反应器的反应物系组成必然既随时间改变，也随反应器内的空间位置改变。管式、釜式、塔式以及固定床反应器都可采用半连续操作方式。

1.1.4 研究方法

(1) 经验归纳法

经验归纳法是以相似论和因次论为基础的相似放大法，以试验为主要依据。首先在实验室小型反应器上进行试验，确定合适的反应器型式和最佳的操作条件，之后将反应器规模扩大进行模型试验，根据其试验结果再将反应器放大，进行中间试验，继而放大到工业规模的生产装置。由于工业生产装置规模较大，在由中间试验放大到工业规模装置过程中，需要放大的倍数太大会造成之前得到的许多结论不适用，与实际生产有很大偏差，因此需要经历多次放大，这样逐级放大既费事又费钱，偏差也较大，所以现在很少应用。

(2) 数学模型法

数学模型方法就是用数学模型来分析和研究化学反应过程的工程问题。数学模型就是用数学语言来表达过程中各种变量之间的关系。

数学模型法是以试验为研究基础的，其基本特征是过程的分解和过程的简化。过程的分解分别研究化学反应器中两个不同特征的化学过程和物理过程的规律。数学模型方法中对研究对象的简化，不是数学方程中某些项的增减，而是对研究对象本身的某种简化。

数学模型法的一般程序如下：

- ① 实验室小型装置试验 即忽略传递过程对化学反应过程的影响，进行动力学研究；
- ② 小型试验 考察物理传递过程对化学反应的影响；
- ③ 大型冷模试验 探索物理传递过程的规律；
- ④ 中间试验 对数学模型进行检验和修正；
- ⑤ 计算机试验 对各步实验结果进行综合分析，使其达到最优化，建立数学模型进行反应器设计。

1.2 化学反应及反应器分类

1.2.1 化学反应分类

化学反应器内进行的化学反应种类繁多，性质各异，但它们之间并非毫无相似之处。为了研究上的方便，需要将化学反应按照反应的特性或过程进行的条件分类，其分类方法见表 1-1。

表 1-1 化学反应的分类

I 按化学反应的特性分类		
反应机理		单一反应；复杂反应(平行反应；连串反应；连串 - 平行反应)
反应可逆性		可逆反应；不可逆反应
反应分子数		单分子反应；双分子反应；三分子反应
反应级数		零级反应；一级反应；二级反应；三级反应；分数级反应
反应热效应		放热反应；吸热反应
II 按反应系统中相的类别与数目分类		
均相	催化反应	气相反应；液相反应
	非催化反应	
非均相	催化反应	液液相反应；气液相反应；液固相反应；气固相反应；固固相反应；气液固三相反应
	非催化反应	
III 按反应过程条件分类		
操作温度		等温反应；绝热反应；非绝热变温反应
操作压力		常压反应；加压反应；减压反应
操作方式		间歇反应；连续反应；半连续反应

1.2.2 化学反应器分类

化学反应器是化工生产的核心部分，也是化学反应过程的主要研究对象，各种反应器的构形和尺寸相差甚远，但共同点都是为了实现化学反应。化学反应器的分类方法很多，按其结构原理的特点可分为如下几种类型，如图 1-3 所示。

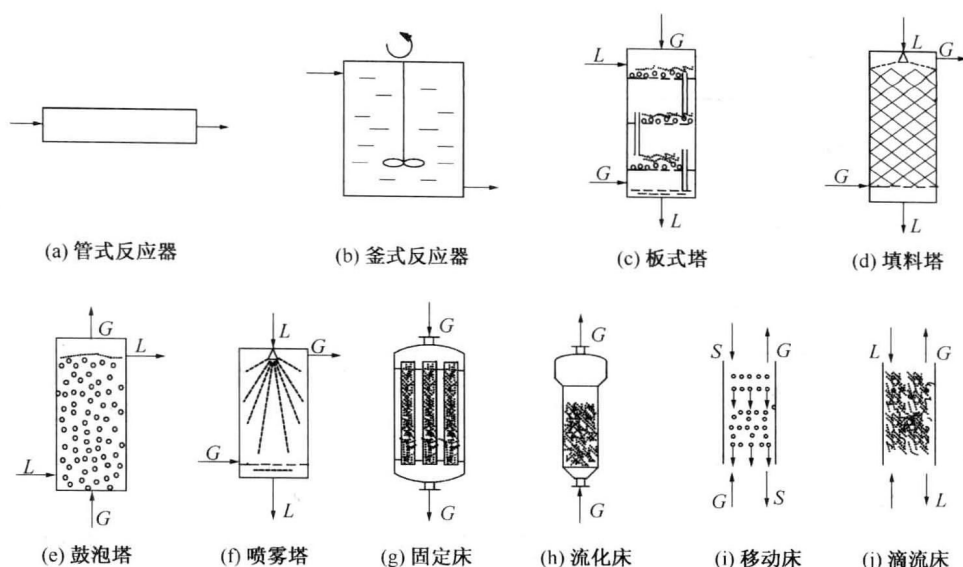


图 1-3 各类化学反应器示意图

① 管式反应器 如图 1-3(a) 所示，其特征是长度远大于管径，内部中空，不设置任何构件；

② 釜式反应器 又称反应釜或搅拌反应器，如图 1-3(b) 所示，其高度一般与其直径相等或稍高，约为直径的 2~3 倍；

③ 塔式反应器 其高度一般为直径的数倍至十余倍，内部设有为了增加两相接触的构件如塔板、填料等，这类反应器包括如图 1-3(c) 板式塔、(d) 填料塔、(e) 鼓泡塔和(f) 喷雾塔反应器等；

④ 固定床反应器 如图 1-3(g) 所示，其特征是反应器内填充有固定不动的固体颗粒，这些颗粒可以是固体催化剂，也可以是固体反应物；

⑤ 流化床反应器 如图 1-3(h) 所示，是一种有固体颗粒参与的反应器，与固定床反应器不同的是这些颗粒处于运动状态，且运动方向是多种多样的；

⑥ 移动床反应器 如图 1-3(i) 所示，它也是一种有固体参与的反应器，与固定床反应器相似，不同的是固体颗粒自反应器顶部连续加入，自上而下移动，由底部卸出，如固体颗粒为催化剂，则用提升装置将其输送至反应器顶部后返回反应器内；

⑦ 滴流床反应器 如图 1-3(j) 所示，滴流床又称涓流床反应器，从某种意义上说，这种反应器也属于固定床反应器。

表 1-2 为各类反应器的应用特点与生产应用举例。

表 1-2 化学反应器的应用特点与生产应用举例

反应器型式	适用的反应类型	应用特点	应用举例
管式反应器	气相，液相	返混小，所需反应器体积较小，比传热面积大，对慢速反应所需管长，压降大	石脑油裂解，甲基丁烯醇合成等
釜式反应器，单釜或多釜串联	液相，液液相，液固相	适用性强，操作弹性大，连续操作时温度、浓度易控制，产品质量均一，要求高转化率时，反应器体积大	甲苯硝化，氯乙烯聚合，酯化反应等

续表

反应器型式	适用的反应类型	应用特点	应用举例
板式塔	气液相	逆流接触, 气液返混均小, 流速受限制, 如需传热, 需在板间加传热面	苯连续磺化, 异丙苯氧化等
填料塔	液相, 气液相	结构简单, 返混小, 压降小, 有温差, 填料装卸麻烦	化学吸收, 丙烯连续聚合
鼓泡塔	气液相, 气液固相	气相返混小, 液相返混大, 温度易调节, 气体压降大, 流速有限制, 有挡板可减少返混	苯的烷基化, 二甲苯氧化等
喷雾塔	气液相快速反应	结构简单, 液体表面积大, 停留时间受塔高限制, 气流速度受限制	氯乙醇制丙烯腈, 高级醇的连续磺化等
固定床反应器	气固(催化或非催化)相	返混小, 高转化率时催化剂用量少, 催化剂不易磨损, 不易控温, 催化剂装卸麻烦	苯氧化, 甲醇合成, 氨合成, 氯苯脱氢等
流化床反应器	气固(催化或非催化)相	传热好, 温度均匀, 易控制, 催化剂有效系数大, 粒子输送容易, 但磨损大, 床内返混大, 对高转化率不利, 操作条件受限制	萘氧化制苯酐, 石油催化裂化, 丙烯胺氧化制丙烯腈等
移动床反应器	气固(催化或非催化)相	固体返混小, 固气比可变性大, 粒子传送较易, 床内温差大, 调节困难	石油催化裂化, 矿物的焙烧或冶炼
滴流床反应器	气液固(催化剂)相	催化剂带出少, 易分离, 气液分布要求均匀, 温度调节较困难	焦油加氢精制, 丁炔二醇加氢等

1.3 反应器计算的基本内容和基本方程

化学反应器是化工生产中一系列设备的核心。反应器的型式、尺寸大小、流体流动状态等, 在很大程度上影响产品的产量和质量。所以化学反应器的选型、计算、选择最优化的操作条件, 是化工生产中极为重要的课题。

1.3.1 反应器计算的基本内容

反应器计算主要包括以下三项内容:

- ① 选择合适的反应器型式;
- ② 确定最优的操作条件;
- ③ 计算所需的反应体积。

选择合适的反应器型式, 就是根据反应系统动力学特性, 如反应过程的浓度效应、温度效应及反应的热效应, 结合反应器的流动特征和传递特性, 如反应器的返混程度, 选择合适的反应器, 以满足反应过程的需要, 使反应结果最优。

操作条件, 如反应器的进口物料配比、流量、温度、压力和最终转化率等, 直接影响反应器的反应结果, 也影响反应器的生产能力。

反应体积的确定是反应器计算的核心内容, 根据所确定的操作条件, 针对所选定的反应器型式, 计算完成规定生产能力所需的反应器有效体积, 同时由此确定反应器的结构和尺寸。

1.3.2 反应器计算的基本方程

反应器计算可以用经验法和数学模型法进行计算。在反应器型式和操作条件已定的前提下，反应体积的大小由反应组分的转化速率决定，而反应组分的转化速率又取决于反应物系的组成、压力和温度。但是，对绝大多数反应器而言，反应器内反应物系的组成、温度和压力总是随时间或空间位置而改变的，或随两者同时而变。所以，在反应器内化学反应是以变速进行的。为了确定反应体积，就需要找出这些物理量在反应器内变化的属性关系式，即应用以下四个基本方程：

- ① 描述浓度变化的物料衡算式；
- ② 描述温度变化的能量衡算式；
- ③ 描述压力变化的动量衡算式；
- ④ 描述反应速率变化的动力学方程式。

(1) 物料衡算式

物料衡算式以质量守恒定律为基础，是计算反应器体积的基本方程。它给出了反应物浓度或转化率随反应器空间位置或反应时间变化的函数关系。对任何型式的反应器，若知其传递特性，都可以取某一反应组分或产物作物料衡算。如果反应器内的参数是均一的，则可取整个反应器建立衡算式，如浓度、温度均一的全混流反应器。如果反应器内参数是变化的，可认为在反应器的微元体积内参数是均一的，则微元时间内取微元体积建立衡算式，如间歇操作釜式反应器及连续操作管式反应器。

$$\left(\begin{array}{c} \text{微元时间内} \\ \text{进入微元体} \\ \text{积的反应物量} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{微元时间内} \\ \text{离开微元体} \\ \text{积的反应物量} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{微元时间微元} \\ \text{体积内转化掉} \\ \text{的反应物量} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{微元时间微} \\ \text{元体积内反} \\ \text{应物的积累量} \end{array} \right) \quad (1-1)$$

式(1-1)是普遍式，对流动系统或间歇系统都适用，对于不同的情况可作相应简化。

(2) 热量衡算式

热量衡算式以能量守恒与转换定律为基础，给出了温度随反应器位置或反应时间变化的函数关系，反映换热条件对过程的影响。当过程恒温时，反应器有效体积的计算不需要热量衡算式，但是要计算维持恒温条件而应交换的热量和所需的换热面积却必须有热量衡算式。微元时间对微元体积所作的热量衡算如式(1-2)所示。

$$\left(\begin{array}{c} \text{微元时间内进入} \\ \text{微元体积的物料} \\ \text{所带进的热量} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{微元时间内离开} \\ \text{微元体积的物料} \\ \text{所带走的热量} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{微元时间微元} \\ \text{体积内由于反} \\ \text{应产生的热量} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{微元时间内微元} \\ \text{体积传递至环境} \\ \text{或载热体的热量} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{微元时间} \\ \text{微元体积} \\ \text{内累积热量} \end{array} \right) \quad (1-2)$$

式(1-2)也是普通式，对于不同的情况也可作相应简化。

(3) 动量衡算式

动量衡算式以动量守恒与转化定律为基础，计算反应器的压力变化。当气相流动反应器的进出口压差很大，以致影响到反应组分浓度时，就要考虑流体的动量衡算。

动量衡算式与物料衡算式、热量衡算式类似，可简写成：

$$\left(\begin{array}{c} \text{单位时间内} \\ \text{输入的动量} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{单位时间内} \\ \text{输出的动量} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{单位时间内} \\ \text{消耗的动量} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{单位时间内} \\ \text{累积的动量} \end{array} \right) \quad (1-3)$$

式(1-3)系根据牛顿第二定律针对运动着的流体而建立。对于流动反应器的动量衡算，