

精细化工反应器 及车间工艺设计

左识之 主编

华东理工大学出版社



79.515

162

C.2

精细化工反应器 及车间工艺设计

左识之 徐金保 廖道华 编著

79.515

华东理工大学出版社

内 容 简 介

本书主要由三部分内容组成:第一部分为第一章至第四章,介绍反应器和工艺设计基础知识,包括反应器设计基础、物料衡算、热量衡算及搅拌器;第二部分从第五章至第九章,着重对典型的精细化工单元反应特点、反应器的结构原理进行分析及工艺计算。第三部分为第十章,内容为车间工艺设计。

反应器理论着重于基本原理。反应器的分析和工艺计算中保留了目前仍在使用的传统设备,加强了近年来精细化工领域所用的反应设备介绍。典型反应器的工艺计算从类型上尽量避免重复,分散于不同特点的单元反应之中。车间工艺设计主要介绍初步设计的原则、程序和方法,适量涉及施工图内容。

本书特点除理论原理分析外,附有较多的例题、图表及生产实际数据,故有较强的实用性。本书可作为精细化工、有机合成等化工专业教学用书,亦可供有关专业工程技术人员阅读参考。

(沪)新登字 208 号

精细化工反应器及车间工艺设计

左识之 徐金保 廖道华 编著

华东理工大学出版社出版发行

上海市梅陇路 130 号

邮政编码 200237 电话 021-64104306

新华书店上海发行所发行经销

上海展望印刷厂印刷

开本 787×1092 1/16 印张 17.25 插页 2 字数 417 千字

1996 年 11 月第 1 版 1996 年 11 月第 1 次印刷

印数 1-5000 册

ISBN 7-5628-0709-4/TQ·56 定价 18.50 元

前 言

精细化工产品的生产需经过一系列的化学和物理处理过程。对于物理处理单元过程的原理和设备,都已在“化工原理”、“后处理设备”等课程或专著中介绍,本书不予深入讨论,只以应用为主。本书主要结合精细化工产品生产特点,着重论述化学反应设备和车间工艺设计内容。

反应器设计基础部分,主要介绍基本原理和设计计算方法。对反应器的结构原理分析和工艺计算内容部分,为便于阐述和应用,本书力求与本专业有关合成反应、工艺原理等书籍较好地配套,同时考虑反应过程的工艺特点、腐蚀介质、材料要求及安全技术等,所以按典型单元反应过程分类进行。设计部分则按精细化工厂规模一般较小的特点,着重于介绍单个车间工艺设计的原则、程序和方法。

本书中使用的单位以 SI 制为主,考虑到保留文献数据、图表及公式等原形以及目前国内生产实际情况,仍保留一些其他单位制,另行附设了单位换算表。

本书第一章中第 1 至第 5 节、第五至第十章由左识之编写;第二和第三章由徐金保编写;第四章由廖道华编写;第一章第 6、7 节由唐燕辉编写,全书由左识之统稿。

全书由上海染料公司章杰高级工程师和华东理工大学顾其威教授审阅,并提出了许多宝贵意见,对此表示衷心地感谢。

本书编写过程中得到了张湄录、侯顺林、商慧凤、钱子安、施娟娟、元以中等同志的支持,在此表示谢意。

鉴于水平和能力所限,本书不当之处恳请读者指正,以便以后修改。

编者

1996 年 7 月

目 录

1 反应器设计基础

1.1 概述	(1)
1.1.1 反应的特点及其对反应器的要求	(1)
1.1.2 反应器的分类及操作方式	(2)
1.1.3 反应器设计的几个有关概念	(5)
1.2 间歇操作搅拌反应锅	(8)
1.2.1 间歇反应器容积和数量求算	(8)
1.2.2 间歇操作反应器的动力学计算法	(11)
1.2.3 多工序反应器间的平衡	(15)
1.2.4 等温间歇操作反应器的放热规律	(17)
1.3 理想混合连续搅拌锅式反应器	(19)
1.3.1 单个连续搅拌反应锅	(19)
1.3.2 多个串联连续搅拌反应锅	(22)
1.3.3 理想混合连续反应器热稳定性问题	(26)
1.4 理想混合半分批操作反应器	(29)
1.5 搅拌反应锅的传热	(32)
1.5.1 传热结构的几种形式	(32)
1.5.2 高温热源的选择	(33)
1.5.3 搅拌反应锅传热系数计算	(36)
1.6 理想排挤管式反应器	(41)
1.6.1 等温等容管式反应器计算	(41)
1.6.2 非等温管式反应器计算	(44)
1.6.3 气相变容管式反应器	(47)
1.7 均相反应器设计的优化	(50)
1.7.1 反应器有效容积的比较	(50)
1.7.2 复杂反应的产物分布问题	(56)
1.7.3 反应器设计最优化问题	(64)

2 物料衡算

2.1 物料衡算意义	(65)
2.2 物料衡算常用基本概念和方法	(65)
2.2.1 质量守恒定律	(65)
2.2.2 车间收率和阶段收率	(65)
2.2.3 物料衡算方法及步骤	(66)
2.3 一般过程的物料衡算及举例	(67)
2.4 带循环过程的物料衡算	(73)

2.5 复杂过程的物料衡算	(74)
2.5.1 基本概念	(74)
2.5.2 复杂过程物料衡算举例	(75)
3 热量衡算	
3.1 热量衡算方程式	(79)
3.2 热量衡算式中各项计算	(79)
3.3 标准化学反应热计算	(81)
3.4 物理过程热效应计算	(87)
3.4.1 溶解热应用于计算浓度变化热	(87)
3.4.2 用无限稀释热计算浓度变化热	(91)
3.5 常用热力学数据估算	(92)
3.5.1 比热容	(92)
3.5.2 汽化热、熔融热及溶解热	(95)
3.5.3 标准燃烧热	(97)
3.6 热量衡算举例	(100)
4 搅拌器	
4.1 概述	(104)
4.1.1 搅拌目的	(104)
4.1.2 搅拌的混合机理	(105)
4.1.3 搅拌液体的流动特性	(105)
4.2 常用搅拌器的型式及性能特征	(108)
4.2.1 推进式搅拌器	(108)
4.2.2 涡轮式搅拌器	(110)
4.2.3 桨式搅拌器	(111)
4.2.4 锚式和框式搅拌器	(111)
4.2.5 搅拌附件	(111)
4.2.6 叶轮的位置及层数	(112)
4.3 搅拌器的选型	(113)
4.3.1 按物料粘度选型	(113)
4.3.2 按搅拌目的选型	(113)
4.4 搅拌功率的确定	(114)
4.4.1 功率关联式	(114)
4.4.2 均相液体的搅拌功率	(115)
4.4.3 液-液非均相系统的搅拌功率	(122)
4.4.4 固-液非均相系统的搅拌功率	(122)
4.4.5 气-液非均相系统的搅拌功率	(123)
4.4.6 附件的附加搅拌功率	(126)
4.5 电动机功率	(126)
4.6 搅拌器的放大	(127)
4.6.1 小型实验	(128)

4.6.2	搅拌器的放大准则	(128)
4.6.3	逐级放大试验	(131)
5	磺化	
5.1	概述	(133)
5.2	磺化反应器	(134)
5.3	磺化反应中的物料衡算	(138)
5.4	磺化器的热量衡算	(141)
5.4.1	热平衡方程	(141)
5.4.2	磺化过程热量衡算举例	(141)
6	硝化	
6.1	概述	(145)
6.2	硝化反应器	(145)
6.3	硝化物料衡算	(149)
6.3.1	硫酸脱水值和废酸计算浓度	(149)
6.3.2	硝化物料衡算举例	(150)
6.4	硝化操作中的热量衡算	(153)
7	卤化	
7.1	概述	(156)
7.2	卤化反应器	(158)
7.2.1	搪玻璃反应锅	(158)
7.2.2	铸铁氯化锅	(159)
7.2.3	沸腾氯化塔	(160)
7.2.4	其他卤化反应器	(160)
7.3	氯化反应器设计举例	(162)
8	硝基物还原	
8.1	概述	(171)
8.2	几种传统的还原反应器	(171)
8.2.1	铁粉还原锅	(171)
8.2.2	锌粉还原锅	(172)
8.2.3	硫化碱还原锅	(173)
8.3	加氢还原反应器	(174)
8.3.1	气固相加氢还原反应器	(174)
8.3.2	气液固三相加氢还原反应器	(175)
8.3.3	加氢反应器设计计算举例	(182)
9	氧化	
9.1	概述	(193)
9.2	常用的氧化反应器	(194)
9.2.1	带搅拌式氧化器	(194)
9.2.2	气固氧化反应器	(194)
9.2.3	鼓泡塔式氧化器	(201)

9.3 鼓泡塔氧化反应器的工艺计算	(202)
9.3.1 鼓泡塔的有关特性及参数	(202)
9.3.2 鼓泡氧化塔工艺计算举例	(206)
9.3.3 分批鼓泡氧化塔的连续化	(214)
10 车间工艺设计	
10.1 工艺路线的选择和论证	(218)
10.2 工艺流程设计	(218)
10.3 设计资料的准备	(219)
10.4 物料衡算	(220)
10.5 能量衡算	(220)
10.5.1 封闭系统	(220)
10.5.2 敞开系统	(221)
10.6 设备工艺设计	(222)
10.6.1 定型设备选用	(222)
10.6.2 非定型设备设计条件单	(224)
10.6.3 设备一览表	(227)
10.7 工艺流程图的设计与绘制	(227)
10.7.1 工艺流程图的内容及绘制步骤	(227)
10.7.2 流程图设计绘制原则和要求	(228)
10.7.3 绘图所需表达方法	(228)
10.8 车间布置设计	(235)
10.8.1 概述	(235)
10.8.2 车间布置的基本原则和要求	(235)
10.8.3 车间布置方法	(236)
10.8.4 设备布置图的绘制步骤及要求	(237)
10.8.5 视图表示方法	(238)
10.8.6 标注方法	(239)
10.9 管道设计	(240)
10.9.1 管道布置基本原则和要求	(240)
10.9.2 管道、管件及阀件的画法	(240)
10.9.3 管道标注	(241)
10.10 向有关非工艺专业提供设计条件和要求	(244)
10.11 车间工艺设计说明书	(245)
10.11.1 初步设计说明书内容	(245)
10.11.2 施工图设计阶段说明书一般内容	(248)
习题	(249)
参考文献	(253)
附录	(255)
习题参考答案	(268)

1 反应器设计基础

1.1 概 述

1.1.1 反应的特点及其对反应器的要求

精细化工产品繁多,涉及的化学反应很多,有时在一个车间完成一个产品的生产就存在着多步化学反应。如在染料分散蓝 2 BLN 生产车间就有氯化、苯氧基化、水解以及溴化等六步主要反应。在还原灰 BG 车间,有氨化、重排、水解、重氮、芳化及环合溴化等十多步反应。完成每一步反应都必须有相应的反应器。所以生产过程中化学反应器往往是生产的关键设备,反应器设计选型是否合理关系到产品生产的成败。由于单元反应特点各异,所以对反应器的要求就各不相同,如固相物料的反应就难于在搅拌反应锅中进行连续化操作,强放热反应要求反应器的传热效果好,非均液相反应则要求良好的传质效果。所以,如何设计和选用合适的反应器就要求我们了解掌握不同化学反应的特点及其对反应器的要求。

精细化工产品生产过程中虽然涉及化学反应多,但仍有其共性,概括起来主要有以下几个特点:

化学反应复杂 精细化工产品生产中含有大量的有机合成反应,这些反应本身常常属于复杂反应,如平行反应、连串反应、可逆反应及链反应等。一个反应过程中往往同时生成多种异构体,伴随着主产物还有副产物生成。因此除合成路线和工艺条件选择外还必须采用合适的反应器,以利于主产品的生成,有利产品的分离提纯和三废治理等问题。

反应物料的相态多样化 在精细化工产品合成反应中经常遇到的是非均相的物料系统,常见的非均相系统有:液、液非均相,如苯、甲苯的混酸硝化;液、固相系统,如蒽醌的硝化、 β -氯蒽醌的氨化;气、液相,如苯的磺化、甲苯的液相氧化;气、固相,如萘和蒽醌的催化氧化、 β -萘酚的羧化;气、液、固相,如硝基物的液相催化加氢还原、苯的沸腾氯化生产氯化苯等等。从这些诸多的非均相系统来说,在反应器的结构设计和选型中要解决传质问题。

许多反应过程热效应大 有许多单元反应过程都有很大的反应热效应,如邻二甲苯空气氧化制苯酐,每摩尔邻二甲苯反应转化生成苯酐将放出 1271.53 kJ 的热量,甲苯氧化制苯甲酸,其摩尔反应放热为 652.8 kJ,硝基苯还原制苯胺,摩尔反应热为 434 kJ,其他如硝化、磺化及氯化等反应都有很强的放热效应。因此为了确保反应在正常的工艺温度条件下进行,必须移除大量的热量,这就对反应器设计和选型时要求具有良好的传热效果。

工艺条件变化范围宽 由于生产中具有繁多的各种化学反应,所以就有各种不同的工艺条件,如从温度来说,有在零度左右进行的重氮化、低温硝化和低温酯化等反应,有在 300℃ 以上进行的氧化反应及碱熔反应。从压力来讲,有在加压条件下的氨化、水解和氢化等反应,也有在减压下进行的烘焙磺化、硝基苯氯化等反应。所以在反应器设计时不仅要考虑到高低温传热剂的应用,还必须考虑到反应器材质的耐温、耐压等问题。

反应介质的腐蚀性强 精细化工生产中几乎涉及整个化工领域的各种腐蚀性介质,如硫酸、硝酸、盐酸、磷酸、氢氟酸、有机酸、高温浓碱、有机溶剂、氯化氢、二氧化硫及氯气等等。因此在不同的工艺条件和物料系统中,选择合适的防腐材料是一个很重要的问题。

1.1.2 反应器的分类及操作方式

1.1.2.1 反应器分类

由于反应器类型结构不同,对在其中进行的化学反应的效果是不同的,如在搅拌反应锅中进行的反应,由于良好的搅拌提供了良好的传质条件。列管式反应器的单位体积物料的传热面积比起夹套反应锅来说要大得多。又如氯化、硝化及还原等单元反应中的许多产品的生产,在使用相同体积的反应器时,由于结构和操作条件的不同能使生产能力提高数十倍甚至上百倍之多。因此,我们在设计和选用反应器时不仅需了解化学反应的特点还必须掌握各种反应器的特点。为便于研究和应用,下面介绍大致按几何形式分类的反应器类型及其特点,见表1-1及图1-1至图1-8。

表1-1 反应器按几何形式的分类

型式	图号	结构特点	适用场合及应用举例
立式搅拌锅	1-1 a	标准型,带椭圆底或折边球形底	适用于在液体介质内进行的各种反应
立式搅拌锅	1-1 b	带锥形底	结晶型产物或需静止分层的产物
	1-1 c	半球形底	压热反应,如氯化、水解等加压下的反应
卧式反应锅	1-2 a	卧式圆筒内设搅拌	带固体沉淀物的反应,如 β -氯蒽醌的氯化
	1-2 b	圆筒形,内设钢球或磁球,筒体旋转	需要不断粉碎结块固体的场合,用于固相缩合反应等
管式反应器	1-3 a	水平管式	气相或均液相反应,如热裂解、氯化及水解等反应
	1-3 b	垂直排管	气液相反应,带悬浮固体的液固或气液固反应,如液相催化加氢还原
	1-3 c	环形管内设搅拌器	非均液相反应,如芳烃的硝化反应
	1-3 d	水平管带螺杆搅拌器	粘稠物料与半固态物料的反应,例如固相缩合
塔式反应器	1-4 a	圆柱形塔体内设挡板及鼓泡器	气液相反应,气液固三相反应,如芳烃液相氧化及烃化反应,硝基物加氢还原
	1-4 b	塔内部有填充物	气体的化学吸收,苯的沸腾氯化制氯苯
	1-4 c	塔体内部有塔板结构	气液相逆流操作的反应,要求伴随蒸馏的化学反应,如酯化反应、异丙苯氧化反应
	1-4 d	塔体内部有搅拌装置或脉冲振动装置	气液、液液、液固等非均相反应及要求伴随萃取的化学反应,如烃类液相氧化、硝化废酸的萃取
固定床反应器	1-5 a	单筒体内装催化剂	气固、液固、气液固相催化反应,如硝基物气相加氢还原及液相加氢还原
	1-5 b	列管式,管内装催化剂	反应热较大的快速气固相催化反应,如芳烃的气相催化氧化
流化床反应器	1-6	圆筒体,催化剂靠气速或液速呈流化状态	放热量较大的气固相或气液固相催化反应,如芳烃的氧化、硝基物催化加氢还原
喷射型反应器	1-7	类似喷射器结构	气液、液液相快速反应,例如某些中和及酯化反应、气体的化学吸收
泵式反应器	1-8	类似水环泵式透平泵结构	液相、气液相等快速反应如烷基苯的磺化反应,酸性硝基物中和

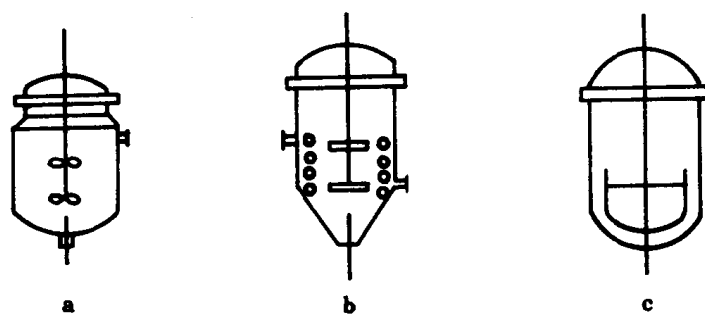


图 1-1 立式搅拌反应锅

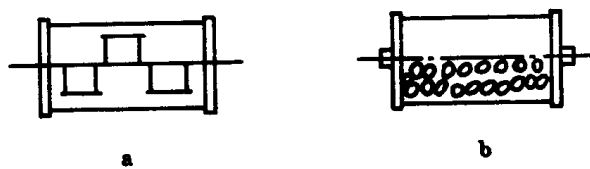


图 1-2 卧式反应锅

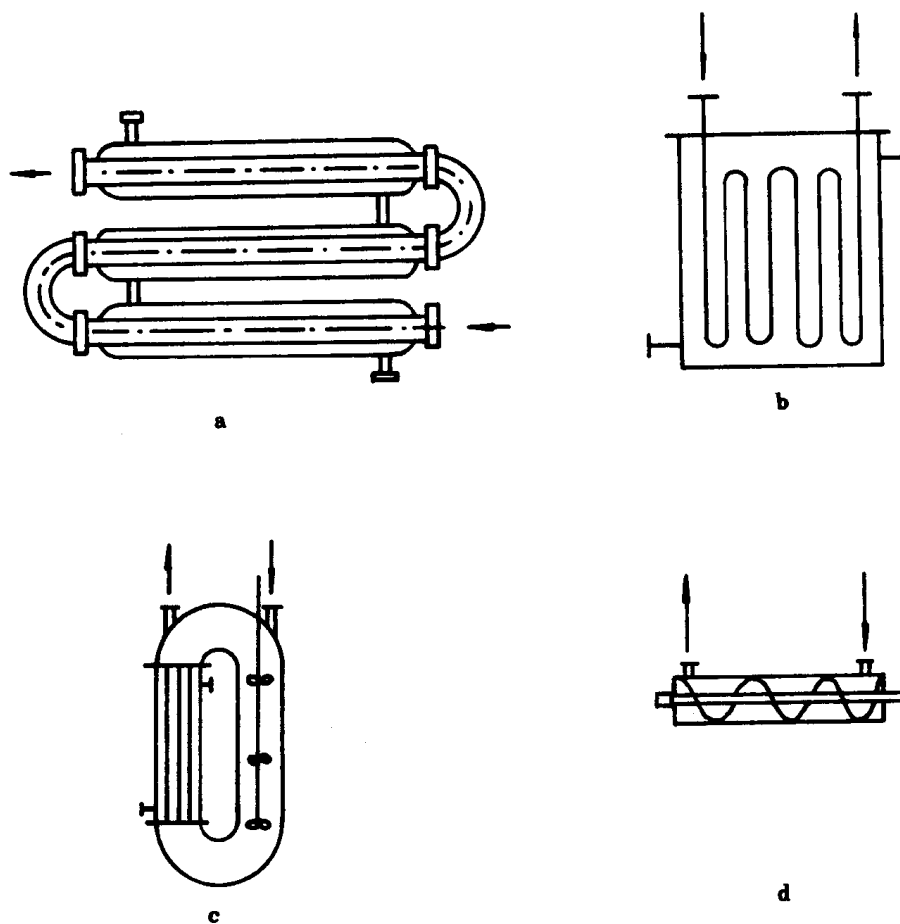


图 1-3 管式反应器

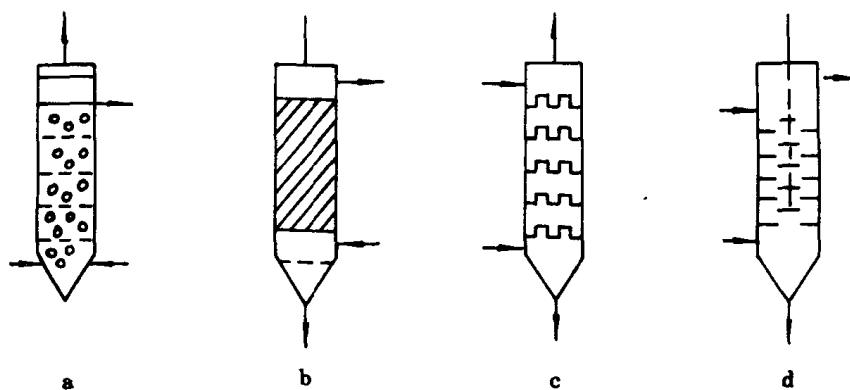


图 1-4 塔式反应器

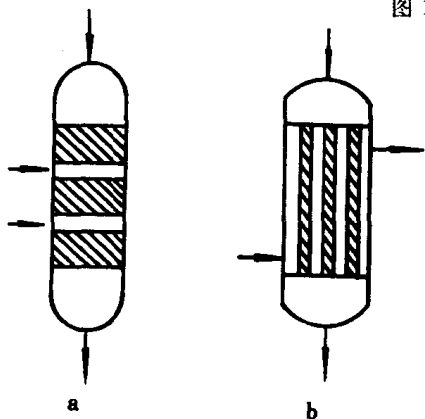


图 1-5 固定床反应器

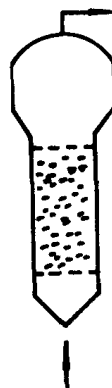


图 1-6 流化床反应器

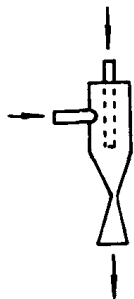


图 1-7 喷射反应器



图 1-8 泵式反应器

有时为了突出某一方面的特点,在设计选用反应器时侧重考虑某一方面因素,还有其他一些分类方法。如,按传热形式来分,有间壁传热式、直接传热式、蒸发传热式、外循环传热式和绝热式等称谓的反应器。间壁传热式即反应物料与传热剂通过反应器的壁、蛇管等间壁进行传热,这是使用最为广泛的一种反应器,其特点是反应物与传热剂不能直接接触,温度控制较严格。直接传热式是使传热剂直接与反应物料接触,其特点是升降温快,如硝基物的铁粉还原是向还原锅中直接通入蒸汽,某些低温下的反应则可向反应器中投入冰。当然这种传热方式适合于允许传热剂和反应物直接接触的场合。蒸发式传热,靠挥发性反应物或产品或溶剂的蒸发移除热量,在沸腾下反应时传热量大,反应稳定易控制,如苯的环上氯化、甲苯等的侧链氯化等许多情况下都使用蒸发移热式。外循环传热式是适合反应器内部不能设置传热结构和反应器壁难于进行传热时使用,为了强化传热,在反应器外部设置足够传热面积的换热器使反应物料不断循环换热。绝热式反应器不需设置传热结构,靠进料的显热及反应热维持反应温度,从反应器结构来说要简单得多,但要允许在一定的范围之内不影响反应,一般在反应热效应不大的情况下使用,如乙烯水合制乙醇的固定床绝热反应

器。

当着重于表现传质特征时;还可按反应物料的相态进行分类,一般分均相反应器和非均相反应器两大类。对均相按相态相应地称为气相反应器、均液相反应器等。这种反应器的设计一般来说传质不是主要矛盾;对非均相则相应地称为气液相、液液非均相、气固相及气液固相等反应器,对非均相反应过程,反应速率除考虑温度、浓度因素外还与相间传质速率有关。

1.1.2.2 化学反应过程的操作方式

1 分批(或称间歇)式操作

分批操作是指一批反应物料全部投入反应器后让其进行一定时间的反应,然后再全部取出的操作方法。这种操作方式适用于反应速度较慢、热效应较小和生产规模不大的场合,一般均采用搅拌锅式反应器。此种方法属于非定常态操作,反应器内的工艺参数如温度、压力、浓度等都可随时改变,在过程分析上复杂一些,但也有其优点,如便于更换产品、设备可以多能及反应过程易控制等。因此广泛用于精细化工产品的生产中。

2 连续式操作

连续式操作即反应物料连续通过反应器的操作方式。一般用于产品品种比较单一而产量较大的场合。这是一种稳定状态下的操作,反应器内工艺参数,如温度、压力及浓度等不随时间而改变。因连续稳定,所以劳动生产力高,劳动强度小,便于实现自动控制和远距离控制。精细化工生产中许多有机中间体实现了连续化,如苯、甲苯、氯苯、硝基苯等的硝化反应,硝基物的还原反应,硝基氯苯的氨化反应,甲苯、二甲苯、萘及蒽等的氧化反应,烷基苯的磺化反应,苯的氯化反应,异丙基苯、异丙基甲苯及异丙萘等制取苯酚、甲酚及萘酚等的生产中都实行了连续化操作。

3 半分批(或称半连续)式操作

一部分物料一次投入反应器内,另一部分物料则连续地加入或排出反应器,反应完毕后放料,再进行下一周期的操作。这种操作可以通过加料快慢来调节反应速率,对需严格控制反应物料的浓度、强放热反应、可逆反应等尤为适合。半连续操作适用于生产规模较小的产品,和间歇操作一样便于改变工艺条件和生产品种,反应器灵活多能,在精细化工生产中得到广泛使用。

1.1.3 反应器设计的几个有关概念

1.1.3.1 反应器放大

把实验室完成的化学反应用于工业规模的生产时,涉及到化学反应器的放大问题。化学反应器的设计放大是一个复杂的问题,因为化学反应除具备其本身的动力学特征外,还受到物料的流动规律、传质和传热等多方面因素的影响,这些因素的影响在小试设备和大的工业反应器中是不同的,例如由于单位体积物料所提供的传热面积不同,某些反应在实验室小试中需加热来维持反应,而在工业生产中则需冷却才能保持正常的操作。又如为了保证足够的传质效果,在实验室反应器中搅拌的转速可达每分钟千转以上,而在工业反应器中则难以满足,需通过搅拌器的形式、反应器的结构等多方面考虑来满足传质要求。当人们还没有认识这些规律时,往往使工业生产和实验室操作在反应器效率、产品质量、反应选择性和收率等许多方面发生很大的差异,这些差异即人们通常所指的放大效应。

精细化工的生产中,由于产品的产量小,放大倍数就少,广泛采用搅拌锅式反应器,物料流动规律差异较小,传质传热等要求容易解决,放大效应的影响相对较小,所以仍普遍使用着经验放大法进行反应器的设计和选型。所谓经验放大法,即按小规模反应器的几何形状、操作参数进行容积放大至较大规模的反应器,如搅拌锅式反应器就可按几何尺寸容积放大,按搅拌叶端线速度放大设计

搅拌器来满足传质要求；对于管式反应器可按物料流动状态的雷诺数相同进行放大；对塔式反应器则可用气体或液体的空塔速度和停留时间等来放大设计；对于一些固定床反应器，只需把单管变为多管就可达到满意的结果。但随着放大倍数的增大，放大效应影响增大，必须由小至大进行逐级放大，这样需消耗大量的投资，而且开发周期长。随着新产品新工艺的不断发展，对许多产品生产规模的不断增加，完全靠这种经验放大方法显然跟不上现代化生产发展的需要，因此人们研究了各种物理因素对化学反应的影响，建立化学反应器中流体流动、传质、传热及化学动力学的数学模拟方程式，应用电子计算机求解找出各项物理因素与化学反应器性能之间的定量关系来指导反应器的最优化控制和设计工作，这种设计方法通常称为数学模拟法。此法可以从实验室规模试验数据直接设计年产万吨级以上的工业反应器。

1.1.3.2 反应器内物料的流动模型

流动模型一般指连续反应器而言。为了设计计算方便，人们按各类反应器内物料实际流动状态的特点假定了两种极限流动模型，它们分别为理想排挤和理想混合。

1 理想排挤

理想排挤又称为理想置换、平推流或活塞流。此种流动模型的特点是通过反应器的物料沿同一方向以相同速度向前流动，在流动方向上没有物料的返混，所有物料在反应器中的停留时间都是相同的，在稳定操作情况下同一截面上的物料组成不随时间变化，不同停留时间的物料粒子完全不相混合，如图 1-9 所示。

2 理想混合

理想混合又称完全混合或全混流。这种流动模型是指反应物料以稳定的流率进入反应器后能立即与存留在反应器中的物料发生瞬间的完全混合。因此在整个反应器中物料的浓度和温度都是相同的，且等于反应器出口物料的浓度和温度，在反应器内不同停留时间的物料粒子完全均匀混合。其流动模型如图 1-10 所示。

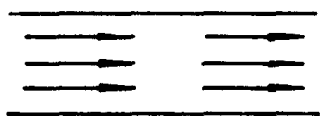


图 1-9 理想排挤流动模型示意图

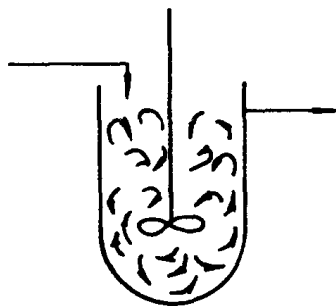


图 1-10 理想混合流动模型示意图

3 非理想流动

凡是流动状态偏离理想排挤和理想混合两种极限情况的流动，统称为非均相流动。如搅拌反应锅由于搅拌效果不好和反应锅结构引起死角，就会使反应锅中的物料混合效果不好，使得物料流动状态偏离理想混合。管式反应器的层流状态，由于管壁的粗糙度和物料的粘滞力造成物料的粒子在反应器中的停留时间不等，湍流状态的涡流扩散等因素引起不同停留时间的物料粒子相互混合（通常称为返混），都使物料流动状态偏离了理想排挤。实际反应器都是非理想流动，按照偏离理想流动模型程度不同而确定能否按照理想流动模型计算。当偏离较大时不能按理想模型计算，需用测定停留时间分布的方法确定流动模型，如偏离程度多大、相当于多少个理想混合模型等进行设

计算。当偏离程度较小时则可按理想流动模型计算,如搅拌良好的锅式反应器可按理想混合模型计算,层流状态的光滑管反应器、湍流状态的管式反应器及气速较大的固定床反应器等都可按理想排挤流动模型计算。

有关非理想流动模型问题在许多化学反应工程的专著中都有详细地论述。

1.1.3.3 反应转化率、产率及选择性

反应转化率、产率及选择性是反应器计算、物料衡算及热量衡算中常用的概念。以下分别介绍。

1 转化率

转化率是对某一反应组分而言的,其定义为反应所消耗掉的物料量与投入反应器的物料量之比值称为该组分的转化率,一般以分率来表示,若用 x_A 表示 A 组分的反应转化率则得:

$$x_A = \frac{\text{反应消耗 A 组分的量}}{\text{投入反应器 A 组分量}} \quad (1-1)$$

2 产率

产率又称为收率,是指主产物的实际得量与按投入原料计算的理论产量之比值。用分率或百分率表示。若用符号 η 表示产率,则得

$$\eta = \frac{\text{反应后主产物实际得量}}{\text{投入反应器原料计算的理论产量}} \quad (1-2)$$

或表示为

$$\eta = \frac{\text{反应后主产物实际得量折成原料量}}{\text{投入反应器的原料量}} \quad (1-3)$$

这里要说明的是单元反应的产率计算中,主产物通常指某一产品,但在实际反应中衡量其收率高低时,有时主产物不是单一的,如甲苯硝化反应得到硝化产物中含有邻、间、对位异构体比例为 60:4:35,其中邻对位异构体同样重要,这种情况下邻、对位硝基甲苯都是主产物。

3 选择性

选择性是针对发生副反应的复杂反应而言,是表示一个主产物占有所有主、副产物的分率或百分率。以符号 Φ 表示选择性则得

$$\Phi = \frac{\text{主产物生成量折成原料量}}{\text{发生反应消耗的原料量}} \quad (1-4)$$

或表示为

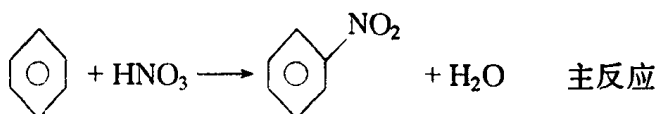
$$\Phi = \frac{\text{主产物生成量}}{\text{发生反应消耗原料应得主产物量}} \quad (1-5)$$

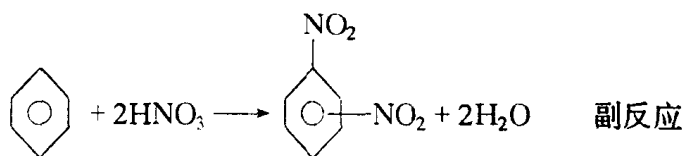
在单元反应中,转化率、产率与选择性之间存在如下关系:

$$\eta = x \cdot \Phi \quad (1-6)$$

[例 1-1] 在苯的混酸硝化生产硝基苯车间,投入含量为 98% 的苯 300 kg,经硝化反应后得酸性硝基物 468 kg,其中硝基苯含量 98%,二硝基苯含量 0.1%,废酸带走损失硝基苯 0.5 kg,忽略其他副反应等损失。求硝化反应中苯的转化率、收率和选择性。

解:化学反应方程式为





苯、硝基苯和二硝基苯的分子量分别为 78、123 和 168

投入苯 = $300 \times 98\% = 294 \text{ kg}$

$$\begin{aligned} \text{反应消耗苯} &= (468 \times 98\% + 0.5) \times \frac{78}{123} + 468 \times 0.1\% \times \frac{78}{168} \\ &= 291.4 \text{ kg} \end{aligned}$$

$$x_{\text{苯}} = \frac{291.4}{294} = 0.991$$

反应实得硝基苯 = $468 \times 98\% + 0.5 = 459.14 \text{ kg}$

按投入苯应得硝基苯 = $300 \times 98\% \times \frac{123}{78} = 463.62 \text{ kg}$

$$\eta = \frac{459.14}{463.62} \times 100\% = 99\%$$

反应消耗苯折成硝基苯 = $\frac{291.4}{78} \times 123 = 459.52 \text{ kg}$

$$\Phi = \frac{459.14}{459.52} = 99.9\%$$

1.2 间歇操作搅拌反应锅

间歇操作反应器又称为分批操作反应器。由于其结构简单、操作方便、适用范围广而成为人们使用的第二种形式的反应器。早在两千多年前古罗马人就开始用这种形式的反应器进行皂化反应制造肥皂,不过那是一个简单的敞口锅,使用人工进行搅拌。图 1-11 所示的是当今常用的搅拌锅式间歇反应器的一种。反应的物料按一定的比例一次加入反应器内,开动搅拌使整个锅内反应物料保持浓度和温度的均匀,通过夹套或蛇管加热或冷却以控制反应在一定的温度条件下进行,经过一定的时间反应达到要求的转化率和反应温度时将物料排放出反应器,完成一个操作周期。

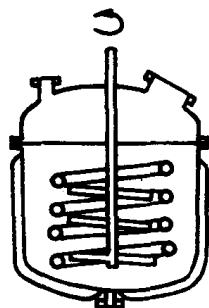


图 1-11 间歇搅拌反应锅

1.2.1 间歇反应器容积和数量求算

当设计一个车间或一套装置时,需要求算需用反应锅的容积与数量。为此首先要取得下列数据。

1 每天处理物料总体积

根据规定的生产任务通过物料衡算可以计算出每一道工序每天所需处理的物料总重量 G_D ,用它除以物料的密度 ρ ,即得每天所需处理物料的总体积 V_D ,

即

$$V_D = \frac{G_D}{\rho}$$

2 操作周期

操作周期又称工时定额,是指生产每一批料的全部操作时间,即从准备投料到操作过程全部完成所需的总时间 τ 。例如萘磺化制取 2-萘磺酸的操作周期计算如下:

检查设备	15 分
加萘	15 分
加硫酸及升温	25 分
反应	160 分
压出料	15 分

操作周期: 240 分或 4 小时

达到规定转化率所需反应时间理论上可以用化学动力学方程式计算,但实际情况较为复杂,例如:

(1) 不少强烈放热的快速反应,反应过程的速率往往受传热速率的控制,不能简单地用动力学方程式来求算反应过程的时间。

(2) 某些非均相反应,过程进行的速率受相间传质速率的影响,也不能单纯地从化学动力学方程式计算反应时间。

(3) 某些反应速率较快的反应,在加料过程及升温过程中已开始反应。在保温阶段之前可能已达到相当高的转化率。有时需分段作动力学计算。

还有应用传热速率方程、传质速率方程与化学动力学方程联合求解等情况。这里把操作周期作为容积和锅数计算的已知条件。

在实际设计工作中操作周期的确定有时需考虑到生产组织管理上的方便。比如操作周期实际需 7 小时,可取作 8 小时,按每一个班(8 小时制)投一批料来组织生产。

3 设备装料系数

设备中物料所占体积与设备实际容积之比称为设备装料系数,以符号 φ 表示。其具体数值根据实际情况而变化,可参考表 1-2 的数值。

表 1-2 设备装料系数

条 件	装料系数范围
不带搅拌或搅拌缓慢的反应锅	0.8~0.85
带搅拌的反应锅	0.7~0.80
易起泡和在沸腾下操作的设备	0.4~0.60
贮缸和计量槽(液面平静)	0.85~0.90

计算的一般方法如下:

(1) 已知 V_D 与 τ , 根据已有的设备容积 V_a , 求算需用设备个数 m 。

设备装料系数为 φ , 则每一锅料的体积为 φV_a , 按设计任务每天需要操作的总次数为:

$$\alpha = \frac{V_D}{\varphi V_a} \quad (1-7)$$

每个设备每天能操作的批数为:

$$\beta = \frac{24}{\tau} \quad (1-8)$$