

第一章 绪论

惠州学院化工系

化学工业生产过程的三个组成部分

- 1) 原料的预处理
- 2) 化学反应
- 3) 产物的分离

1) 原料的预处理

化学反应的要求

按化学反应的要求，将原料进行处理

例如，提纯原料，除去对反应有害的杂质；加热原料使达到反应要求温度；几种原料的配料混合，以适应反应浓度要求等等

这些预处理操作一般都属于物理过程

2) 化学反应

化工生产过程的核心

将一种或几种物质转化为所需的物质；或从一组混合物中脱除某一组份

例如，汽车尾气中脱除烃和氮的氧化物，使气体净化达到排放标准等等

这些操作一般都属于化学过程

3) 产物的分离

化学反应的结果

由于副反应的存在，生成不希望的产物；又因反应不完全或某些反应物过量，致使反应产物需要进行分离，获得符合规格的纯净产物

例如，蒸馏、吸收、萃取、结晶、过滤等等。

这些操作一般主要是物理过程

化学反应工程研究的内容:

化学反应过程的原理和反应器

任何化学反应过程的进行和结果除了由该反应本身的特征及规律控制外，还受到物料混合、传质和传热等物理因素的影响。

化学反应工程的研究的两个方面:

一方面: 认识、判断各种类型化学反应的化学热力学和动力学规律

另一方面: 归纳各种物理因素的变化及其规律对化学反应过程的影响。

两方面结合

总结出一些普遍意义的观点和概念
在理论上指导工业反应过程的开发。

1.1 化学反应工程的研究对象和目的

研究对象： 工业规模进行的化学反应过程

目的： 实现工业反应过程的**优化**

优化：

是在一定的范围内，选择一组优惠的决策变量，使“系统”对于确定的评价标准达到最佳的状态。工业反应过程的优化涉及优化目标、约束条件和决策变量等问题。

工业反应过程优化的两种类型：

设计优化：

从设计角度讲，由给定的生产能力出发，确定反应器的型式和适宜的尺寸及其相应的操作条件。

操作优化：

在反应器投产运转以后，还必须根据各种因素和条件的变化作出相应的修正，以使它仍能处于最优的条件下操作，即需进行操作的优化。

设计优化是工业反应过程优化的基础。

1.1.1 约束条件

任何工业反应过程的优化往往受到各种因素的约束。

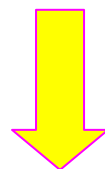
其约束条件可能受到工艺流程上、下游处理能力的限制。也可能为了保证操作安全，某些易燃易爆反应物料的组成受到爆炸极限的约束，总是把易燃易爆的物料浓度控制在爆炸极限以外；又如反应器材料的耐热性能则成为石脑油裂解管温度的约束条件。

总之，**优化过程是有约束的过程优化。**

1.1.2 优化的经济指标

任何一个化学反应过程要实现工业化生产：

- * 技术上是可行的
- * 经济上合理
- * 生产的安全程度、对环境的污染影响及生产过程的劳动生产条件等等。



工业反应过程的评价是一个多目标的优化问题。

1.1.2 优化的经济指标

技术的可行性:

反应过程有合适的催化剂，反应能以一定的速率和选择率进行；

对反应产物有可能进行分离提纯以取得合格产品；

有适宜的反应温度、压力等条件；

反应过程中产生的废料有合适的处理技术，以免对环境污染等等。

1.1.2 优化的经济指标

经济上合理:

工业反应过程的经济指标是指生产某一产品所需的成本或是产品的利润大小。

生产某一定量产品所需的生产费用，包括一次性的投资费（主要是设备和机器费用）及经常性的原料和操作费用。

操作费用主要包括人工费、动力消耗、能量消耗、设备维修和公用工程等方面的开支。

工业反应过程的经济目标直接决定于生产费用的大小。

1.1.2 优化的经济指标

工业反应过程的评价是一个多目标的优化问题。要求在各个优化目标间进行统筹兼顾和合理安排。

为了对工业反应过程进行必要的、简便的优化计算，有二个基本要求：

- * 一是要使多重的优化目标归并、转换成单一目标；
- * 二是要求这单一目标能够以定量的形式表达出来。

1.1.2 优化的经济指标

对于具有多重优化目标的工业反应过程，除了反映过程经济效益的生产成本之外，其余的目标都无法以定量的形式表示，也难以归并在生产成本里。



优化计算和优化讨论中都作如下简化处理：

把工业反应过程的**经济指标**作为**唯一的优化目标**，而把生产安全、环境污染及劳动生产条件等因素作为优化过程的**约束条件**，然后在规定的条件和范围内寻求最佳的经济目标。

1.1.3 优化的技术指标

在建立工业反应过程优化目标的定量关系式——优化目标的函数式时，要把过程的**经济目标与技术指标**联系起来，才能进行优化计算以确定最优的设备条件和操作条件。

反应过程的主要技术指标:

- * (1) 反应速率;
- * (2) 反应选择率;
- * (3) 能量消耗。

反应速率和**反应选择率**作为工业反应过程经济性的两个基本技术指标。

1.1.3 优化的技术指标

反应速率

反应速率的大小，对于确定处理能力的生产过程，实际上决定了反应器的大小或催化剂量的多少，因而也是反应设备费用多少的标志。

反应速率：反应系统中某一物质在单位时间、单位反应区内的反应量。对一定大小的反应设备和物料处理量，反应速率的大小实际上反映了反应物料的转化程度。

转化程度：通常采用反应转化率表示。

1.1.3 优化的技术指标

反应转化率的定义：

反应物中某一组份转化掉的摩尔数与其初始摩尔数的比值。反应转化率常用 x 表示。

反应组份A的转化率为：

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

1.1.3 优化的技术指标

反应选择率

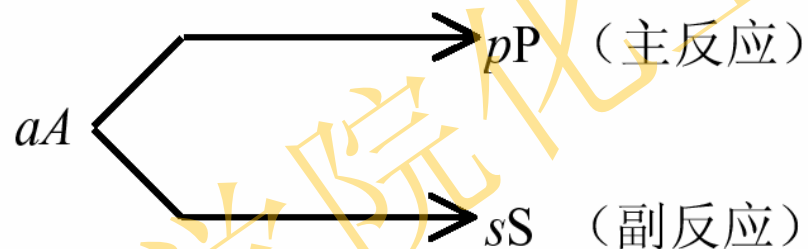
对于复杂反应过程，同一反应原料可以生成几种不同的产物，即需要的目的产物和无用的副产物。此时，不同产物之间的分配比例对该反应过程的经济效益是一个非常重要的指标。产物之间的这种分配比例可以用反应选择率 β 表示。

定义：

已经转化掉的反应物摩尔数中，转化为目的产物的摩尔分率。

1.1.3 优化的技术指标

平行反应



反应物A生成的目的产物为P，它们的化学计量系数分别为 a 和 p ，此时的反应选择率：

$$\bar{\beta} = \frac{(n_p - n_{p0}) / p}{(n_{A0} - n_A) / a} \quad (1-2)$$

n_{p0} 和 n_p 分别表示反应开始和结束时目的产物P的摩尔数。

1.1.3 优化的技术指标

工业上乙苯脱氢制取苯乙烯的反应过程

乙苯脱氢反应过程中主反应和主要副反应是：



1.1.3 优化的技术指标

乙苯脱氢反应过程的生产流程

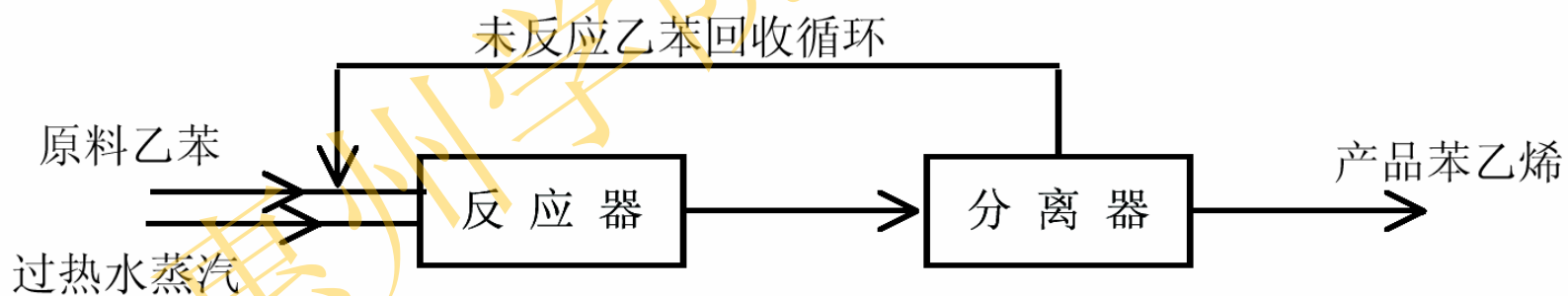


图 1-1 乙苯脱氢制取苯乙烯生产流程示意图

1.1.3 优化的技术指标

现行的生产成本分析

原料费用比例大小成为现代工业生产过程先进性的重要标志。

表 1-1 乙苯脱氢制苯乙烯生产成本分析^[2]

序号	项 目	占总成本百分比 (%)
1	原料乙苯中转化成苯乙烯部分	73.7
2	原料乙苯中消耗于副反应部分	6.6
3	原料乙苯中消耗于非反应部分	5.1
4	能量消耗	4.2
5	催化剂	0.5
6	精馏分离回收	2.2
7	其它	7.7

注：以上分析系按加工 1 吨乙苯为基准

1.1.3 优化的技术指标

苯乙烯生产成本中各可变部分相对比重大小

表 1-2 乙苯脱氢制苯乙烯可变部分成本分析

序号	项 目	占可变部分百分比 (%)
1	消耗于副反应部分的乙苯	25.3 → 选择率
2	消耗于非反应部分的乙苯	19.5
3	能量消耗	15.8 } 转化率
4	催化剂	2.1
5	精馏分离回收	8.2
6	其它	29.1

注：按加工 1 吨乙苯为基准

1.1.3 优化的技术指标

一般而言，当反应过程中伴有副反应发生时，反应选择率往往是最重要的技术指标。

不经过分离回收的工艺流程：工业反应过程中邻二甲苯氧化制邻苯二甲酸酐（苯酐）的生产

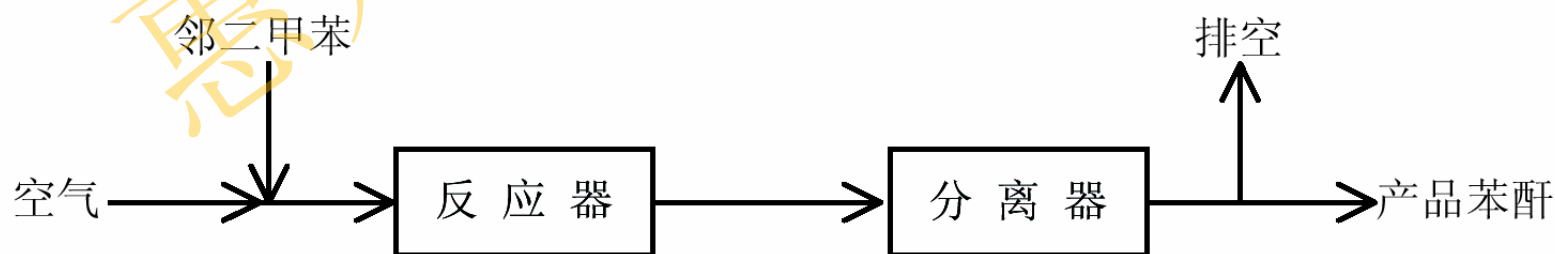


图 1-2 邻二甲苯氧化制苯酐生产流程示意图

1.1.3 优化的技术指标

原料消耗=主反应+副反应+尚未转化部分

因此，在这种工艺流程中原料的消耗除了与反应选择率有关外，还取决于反应的转化程度。



反应收率定义：

得到的产物份数与投入反应系统的原料份数的比值。可以用摩尔数或重量数来表示，分别称为摩尔收率或重量收率。

1.1.3 优化的技术指标

如以摩尔收率表示，则产物P的收率为：

$$\varphi = \frac{(n_p - n_{p0}) / p}{n_{A0} / a} \quad (1-3)$$

反应转化率、反应选择率和收率之间的关系：

$$\varphi = \bar{\beta} x_A \quad (1-4)$$

1.1.3 优化的技术指标

单程收率

对于像乙苯脱氢的回收循环流程，反应物每经过一次反应器就有一定的转化率和选择率，由式(1-4)即可计算得到通过反应器后的收率，这个收率称为单程收率。

因为未反应的原料经过分离回收后都要重新加入反应器进行反应，因而就反应器和分离设备作为一个系统而言，如果不计原料在分离过程中的损耗，则它的反应总转化率为百分之百，此时的收率称为总收率，记作 Φ ：

$$\Phi = \bar{\beta} \quad (1-5)$$

1.1.3 优化的技术指标

原料单耗:

产品的原料消耗若以每份产品所需的反应原料份数来表示, 就称为原料单耗, 也可以用摩尔分率或重量分率来表示。

单耗与收率互成倒数关系

例1-1

工业生产以 C_6H_6 （苯）在 V_2O_5 作活性组份的催化剂上进行催化氧化制 $C_4H_2O_3$ （顺丁烯二酸酐）。为进行开发研究，在单管固定床反应器中进行试验，每小时进空气量为 $2000L$ （S.T.P.），进 C_6H_6 量为 $79ml/h$ ，反应器出口气体中 C_6H_6 含量为 $3 \times 10^{-4}(V/V)$ ， CO 和 CO_2 含量为 $0.015(V/V)$ ， $C_4H_2O_3$ 含量为 $0.0109(V/V)$ ，其余为空气。求进料混合气中 C_6H_6 的浓度，以摩尔分率表示； C_6H_6 的转化率； $C_4H_2O_3$ 的收率和平均选择率。

1.1.4 决策变量

工业反应过程优化的决策变量主要有三个：

- (1) 结构变量(反应器型式和结构尺寸)；
- (2) 操作方式；
- (3) 工艺条件。

选择和设计反应器是工业反应过程开发的主要环节，要做到反应器的最优设计和操作，在进行优化计算前，首先需要对各种类型反应器进行该反应过程的优化研究、比较并确定最优的型式和方案。

1.1.4 决策变量

选择并确定工业反应器的型式和方案

一方面要掌握工业反应过程的基本特征及其反应要求，充分应用反应工程的理论作为选择的依据，对该过程作出合理的反应器类型选择。

另一方面，要熟悉和掌握各种反应器的类型及其基本特征，如它的基本流型、反应器内的混合状态、传热和传质的特征等基本传递特性。

1.1.4 决策变量

工业生产上使用的反应器型的分类方法:

- * 按反应器的形状分,
- * 按操作方式分类;
- * 按反应器传热方式分,
- * 按其反应物相态分类。(最常用)

1.1.4 决策变量

表 1-3 常用工业反应器类型

相 态		反应器型式	工业生产实例		
均相	单相	气相	管式反应器	石脑油裂解、一氧化氮氧化	
		液相	管式、釜式、塔式反应器	酯化反应、甲苯硝化	
非均相	二相	气固	固定床反应器	合成氨、苯氧化、乙苯脱氢	
		气固	流化床反应器	石油催化裂化、丙烯氨氧化	
气固		移动床反应器	二甲苯异构、矿石焙烧		
均相	气液	气液	鼓泡塔	乙醛氧化制醋酸、羰基合成甲醇	
		气液	鼓泡搅拌釜	苯的氯化	
	液固	塔式、釜式反应器	树脂法三聚甲醛		
	三相	气液固	气液固	涓流床反应器	炔醛法制丁炔二醇、石油加氢脱硫
			气液固	淤浆床反应器	石油加氢、乙烯溶剂聚合、丁炔二醇加氢

1.1.4 决策变量

均相管式反应器

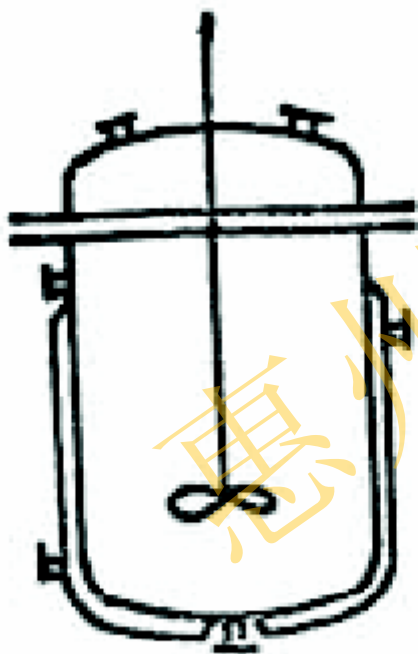


(a) 均相管式反应器

工业生产中常用的反应器型式之一。大多采用长径比很大的园形空管构成。多数用于连续气相反应场合，亦能用于液相反应。物料在轴向的混合很小，其流型趋近于平推流。管径一般都不太大，径向的充分混合，其物料的加热或冷却较为方便，温度易于控制，特别是便于要求分段控制温度的场合。石脑油热裂解、高压聚乙烯等是应用管式反应器的典型例子。

1.1.4 决策变量

釜式搅拌反应器



(b) 均相釜式反应器

应用广泛的反应器。其形状特征是高径比要比管式反应器小得多，因而成“釜”状或“锅”状。釜内装有一定型式的搅拌桨叶以使釜内物料混合均匀。

可采用间歇或连续二种操作方式，它大多用于液相反应场合。间歇操作特别适用于小批量，多品种的生产场合；连续操作适用于大规模的生产要求，能大大减轻劳动强度，稳定产品质量。

1.1.4 决策变量

固定床反应器



(c) 列管固定床反应器

用来进行气固催化反应的典型设备。下部设有多孔板，板上放置固体催化剂颗粒。气体自顶部通入，流经催化剂床层后自底部引出。催化剂颗粒保持静止状态，故称固定床反应器。

反应热效应较小——反应传热问题易于解决，其反应器的直径较大，设备为简单的筒体式。

反应有很强的热效应——传热成为反应器设计的关键，这时反应器直径不能太大，往往采用成百上千根细管径的管子并联，这种形式的设备称为列管式固定床反应器。

1.1.4 决策变量

固定床反应器

* 固定床反应器按操作及床层温度分布的不同可分为：**绝热式、等温式和非绝热非等温**三种类型。

* 按换热方式的不同可分为：**换热式和自热式**两种不同操作方式。

* 按流体在床层内流动方向不同分为：**轴向床和径向床**。

固定床反应器在石油化工和化学工业中有着极为广泛的应用，如用于乙苯脱氢制苯乙烯的绝热反应器；苯氧化制顺酐的列管式固定床反应器；合成氨的自热式反应器；甲醇氧化的薄床层反应器等。

1.1.4 决策变量

流化床



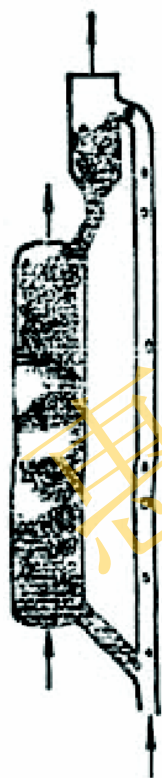
(d) 流化床反应器

也是一种实现气固催化反应的重要反应器型式。主体是一个圆筒，底部有一多孔或其它型式的分布板以使气体均匀分布于床层。气流速度要大到足以使颗粒催化剂呈悬浮状态，此时床层犹如“沸腾”一般，故也称“沸腾床”。

最大特点是由于床内气、固两相呈强烈湍动状态，增强了传质和传热，使床层内温度达到均匀，因而特别适合一些强放热反应或对温度很敏感的过程。如催化裂化、丙烯腈生产过程都采用流化床反应器。

1.1.4 决策变量

移动床反应器

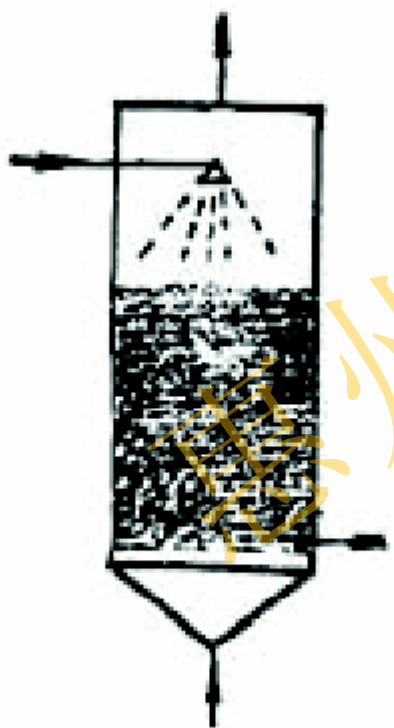


(g) 移动床反应器

用来进行气固催化反应
如二甲苯异构、矿石焙烧

1.1.4 决策变量

涓流床反应器



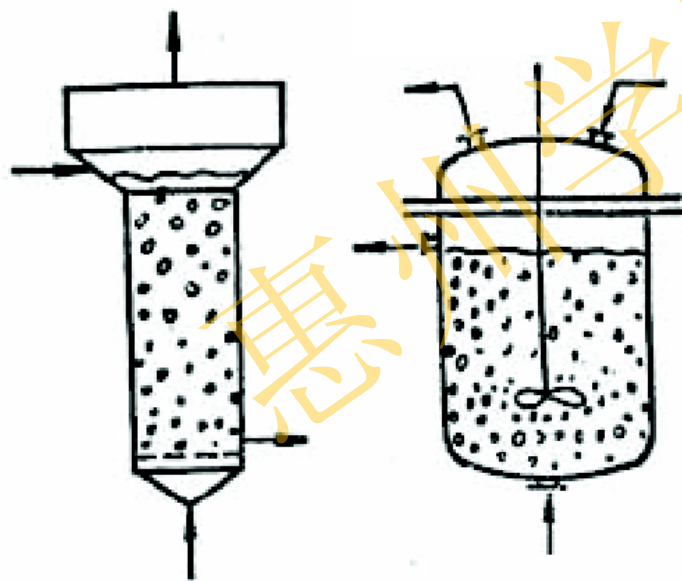
(e) 涓流床反应器

气液两相在固体催化剂作用下发生的反应属于气液固三相反应过程。当二股流体以并流或逆流方式通过催化剂颗粒的固定床层时，称它为涓流床反应器。实际上是固定床反应器的一种特殊型式。

在一些气液系统中的固体催化剂，以颗粒状或细粉状悬浮于液相中，这类反应器称为**淤浆反应器**。

1.1.4 决策变量

气液相反应器



(f) 鼓泡反应器 (h) 鼓泡搅拌釜

气液相反应器是用来进行气液反应的另一大类反应器。由于气液反应的复杂性，对不同的反应条件和传质、传热、返混等的不同要求，形成多种气液反应器的类型和结构型式。工业气液反应器按外形可分为塔式、釜式和管式等。按气液两相的接触形态可分为鼓泡塔、填料塔、鼓泡搅拌釜和喷雾塔等。多数有机物的氧化、氯化都采用气液反应器。

1.1.4 决策变量

反应器的操作方式

按其操作连续性可以分为：间歇操作、连续操作和半连续操作三种操作状态。

加料方式

一次加料、分批加料和分段加料等不同方式。

1.1.4 决策变量

间歇操作: 应用于生产量少、产品品种多变的过程，可以充分发挥它的简便、灵活的特点。但间歇操作时，每批生产之间需要加料、出料、清洗和升温等辅助生产时间，劳动强度也较大，每批产品的质量不易稳定。

连续操作: 多数大规模的生产过程都采用连续操作。

半连续操作: 介于以上两者之间的操作状态，把一种反应物一次投入反应器内，而另一种反应物连续通过反应器以适应某些反应过程的特殊需要。例如苯的氯化是以氯气连续通过一次投入的苯中进行反应。

1.1.4 决策变量

选择不同加料方式的目的:

主要是为了控制反应过程的浓度和温度,以利于反应的进行。分批加料用于间歇过程,分段加料则用于连续过程。

反应过程的工艺条件: 主要是指温度、浓度、反应时间、操作线速度和催化剂颗粒大小等因素。

对于温度,要选择合理的进料温度、冷却介质温度和反应温度。对于浓度,相应地要确定适当的进料浓度、各反应物浓度的比例、出口的残余浓度水平等。

1.1.4 决策变量

对于一个工业反应过程而言，设计者的任务：

选择适宜的反应器型式、结构、操作方式和工艺条件。在满足各项约束条件的前提下确定合理的反应转化率、选择率和相应的反应器尺寸，使工业生产过程的生产成本达到最低值。

反应工程研究者的任务：

提供上述三类决策变量与最优技术指标之间的关系，以使优化设计的任务得以圆满完成。

1.2 化学反应工程的研究内容

工业反应器中进行的过程不仅发生化学反应过程，同时还伴有许多物理过程。这些物理过程与化学过程的相互影响、相互渗透，必然影响过程的特性和反应的结果，使工业反应过程复杂化。

1.2.1 化学反应过程

化学变化是由分子与分子之间的接触碰撞而发生的。

从微观角度来考察化学反应过程：

一种以分子为单位而参与的物质变化过程。

从宏观角度统计地加以考察：

化学反应过程可以分为两类不同的情况：

1. 容积反应过程
2. 表面反应过程

1.2.1 化学反应过程

1. 容积反应过程

反应过程在一定的容积中发生。

两种典型的容积反应过程：在气相或液相中进行的均相反应过程。

对于某些非均相反应过程，尽管整个反应系统可能包括几个相态，但是只要实际化学反应仅在某一相内发生的话，则就化学反应过程而言仍然是发生在反应相中的容积反应过程。此时，它的化学反应规律与均相容积反应过程并无二致。对于大多数气液非均相反应过程和部分液液非均相反应过程都属此例。

1.2.1 化学反应过程

2. 表面反应过程

在某一表面上发生。如在固体催化剂表面上进行的催化反应。

容积反应过程：单位时间内的反应转化量正比于反应容积

表面反应过程：单位时间内的反应转化量正比于反应表面积的大小



定义这两类反应过程时，它们的反应速率定义不同，应当分别以反应容积或反应表面积为基准

1.2.1 化学反应过程

化学反应速率随反应物料的浓度和反应温度而变化，是浓度和温度的函数。

指发生化学反应场所的浓度和温度。

化学反应动力学所要研究的就是反应速率与浓度和温度之间的关系。

反应速率和浓度等都是统计量，反应动力学就是对化学反应过程作统计的研究结果。

1.2.1 化学反应过程

浓度和温度的自然分布

随着化学反应的进行，参与反应的物料和反应生成的产物的浓度也随之发生变化。在反应进行的同时还伴有能量变化而产生热效应，反应物料的温度也将发生变化。因此，在反应器内即使只有化学反应发生而没有其它过程的话，反应器内的浓度和温度也会由于反应的进行而随空间和时间发生变化，从而在时间和空间上形成一定的浓度和温度分布。这些分布是由化学反应自身所造成的，所以称浓度和温度的自然分布。

1.2.1 化学反应过程

反应器内的浓度和温度存在自然分布。



反应速率应以微分形式表达成为当时、当地的浓度和温度的函数。



整个反应过程或反应器的最终化学变化，应当是这种微分形式的反应速率在时间和空间上的积分结果。

1.2.2 物理过程

工业反应器中的物理过程包括流体流动的均匀性和混合过程、传质过程和传热过程等，这些过程的存在将改变反应器中的浓度和温度分布，最终影响反应结果。

1. 返混和不均匀流动
2. 传质过程
3. 传热过程

1.2.2 物理过程

1. 返混和不均匀流动

是连续流动反应器中发生的两种流动现象。

返混现象：在连续搅拌反应器中，由于搅拌器的搅拌作用，使进入反应器的物料被均匀地分散到反应器内的各个部位。使早先进入的存在于反应器内的物料有机会与刚进入的反应物料相混合，这种混合现象称为返混现象。

不均匀流动：流体在管内流动时呈现的不均匀速度分布。

两类流动现象将改变反应器内物料浓度在空间上的自然分布，从而影响反应结果。

1.2.2 物理过程

2. 传质过程

对非均相反应，大多数情况下反应仅在其中某一相中发生，非均相反应过程中的反应物经常是部分或全部由反应相外部提供。

如气固催化反应、气液反应。气相主体是反应物料供应相，在气相主体中不发生反应。

1.2.2 物理过程

在非均相反应过程中，反应相中的反应动力学规律与均相反应完全相同，但反应相中物料的浓度受到扩散传质过程的影响。

扩散传质过程也是一个速率过程，化学反应要以一定的速率进行就要求反应物能以一定的速率传递进入反应相。反应物要以一定速率扩散传递就要有一定的浓度推动力。

非均相反应过程中由于传质过程的存在，必然伴有浓度差异，从而造成反应场所各部位的新的浓度差异，使反应结果发生变化，影响反应转化率和选择率。

1.2.2 物理过程

3. 传热过程

化学反应过程总是伴有热效应，因此化学反应过程将伴有热量传递过程，即需要向反应相提供热量或是由反应相导出热量。传热过程同样需要传热推动力并由此而引起反应场所各部位的温度差异。

1.2.2 物理过程

物理过程，从本质上并没有改变反应过程的动力学规律（反应的真正动力学规律并不因为这些物理过程的存在而发生变化），但这些物理过程将会影响反应场所的浓度和温度在时间、空间上的分布，从而影响化学反应的最终结果。



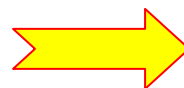
物理过程的存在不影响化学反应速率的微分表达式，但却改变了它在反应器中的积分结果。

1.2.2 物理过程

化学反应是化学过程，其实质是微观的。传递过程是物理过程，则是宏观的。所以对化学反应而言，传递过程往往被称为宏观动力学因素。

化学反应的规律在传统上是物理化学的领域

传递过程的规律在传统上是化学工程的领域



化学反应工程

1.2.2 物理过程

化学反应工程的核心:

研究宏观动力学因素对化学反应过程是否有影响;

用什么标准来判别这种影响;

这些影响的程度有多大;

这些影响是否有利;

如何消除或加强这些因素等等

1.2.2 物理过程

化学反应工程的任务:

研究工业化学反应器的基本原理，对反应器中所进行的化学反应过程特征进行分析，

结合具体的反应装置，综合研究反应器中的反应过程和传递过程，

正确选择反应器的型式和确定最经济的工艺路线和操作条件，

对反应器进行最佳设计和最优控制，为过程开发和反应器的放大提供技术依据。

1.3 化学反应工程研究方法

化学反应工程的研究方法与传统的化学工程研究方法不同

通常的化学工程研究：经常采用相似论和因次分析方法，通过实验进行归纳，得到相应的准数关联式。

化学反应工程除了物理过程之外，还有化学过程发生。在满足物理相似的条件，无法同时满足化学相似。

工业反应过程的研究：主要采用数学模型方法。数学模型方法就是用数学模型来分析和研究化学反应工程问题。数学模型就是用数学言语来表达过程各种变量之间的关系。

1.3 化学反应工程研究方法

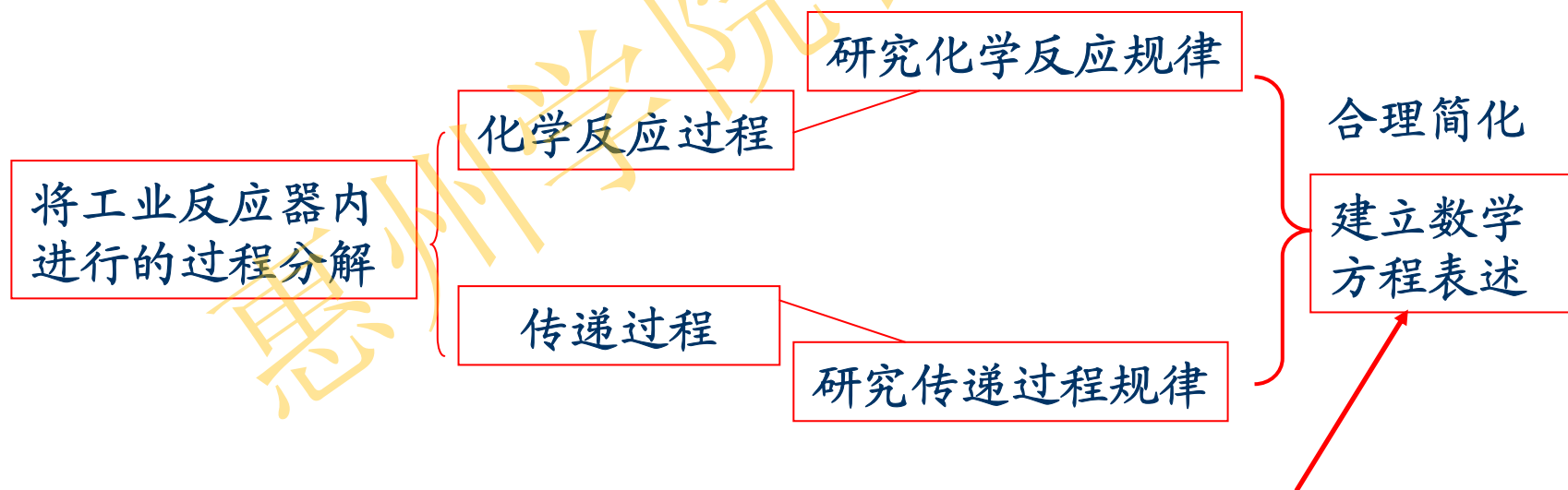
工业反应器中发生的过程:

化学反应过程和传递过程，化学反应过程和传递过程既有不同的特点，同时又相互影响。

化学过程是分子尺度进行的过程，不受设备形状和尺寸的影响。设备尺寸则主要影响流动、传质和传热等过程。真正随设备尺寸而变的不是化学反应的规律而是传递过程的规律。

1.3 化学反应工程研究方法

化学反应工程的数学模型方法



工业反应过程的性质、行为和结果可以通过方程的联立求解获得(过程的综合, 是过程分解的逆过程)

1.3 化学反应工程研究方法

数学模型方法的基本特征：过程的分解和过程的简化。

过程分解：

将工业反应器中两个不同特征的化学过程和物理过程分别研究其规律。

过程简化：

数学模型方法中对对象的简化，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。

1.3 化学反应工程研究方法

数学模型方法的实质:

将复杂的实际过程按等效性原则作出合理的简化,使之易于数学描述。这种简化的来源在于对过程有深刻的、本质的理解,其合理性需要实验的检验。其中引入的模型参数需要由实验测定。

实验是模型研究的基础,数学方法和计算技术是模型方法成功的关键

1.4 化学反应工程在工业反应过程开发中的作用

一个工业反应过程开发就其核心问题而言需要解决三方面的问题:

- * 反应器的合理选型;
- * 反应器操作的优选条件;
- * 反应器的工程放大。

1.4 化学反应工程在工业反应过程开发中的作用

逐级经验放大方法

基本步骤:

通过小试确定反应器型式和优选工艺条件；通过逐级中试考察几何尺寸变化的影响。

一方面反映了设备由小型经中型再到大型工业装置的逐级放大的过程，另一方面也表明了开发过程的经验性质，其开发过程是依靠实验探索逐步来实现的。逐级经验放大方法完全依赖于实验所得到的结果，从实验室装置一步一步地扩大规模向工业生产规模过渡。

1.4 化学反应工程在工业反应过程开发中的作用

逐级经验放大方法的特点:

既不对过程的机理进行深入考察，又不对过程进行化学过程和物理过程的分解分别研究。其放大过程经常无法预测某些技术经济指标下降的趋势和程度，又无法提出对这种指标变化加以控制或改进的措施。

逐级经验放大方法是一种立足于经验的、费时费钱的方法，长期以来阻碍着工业开发工作的进展和质量提高。

1.4 化学反应工程在工业反应过程开发中的作用

数学模型方法

通过对实际过程的深入理解，作出合理的分解和简化，然后再进行数学描述和综合求解结果。

实际工业化学反应过程的开发，应该在化学反应工程理论指导下进行，以避免纯经验的局限性。

化学反应工程的基础理论研究：

- 概括了各种宏观动力学因素
- 提供了大量重要概念和科学结论
- 提供了若干重要类型反应器的传递特征

1.4.1 概括了各种宏观动力学因素

宏观动力学因素（工程因素）：

在化学反应器中存在着流体流动、传质和传热等过程，对化学反应产生各种有利或不利的影晌。这些因素通常称为工程因素或宏观动力学因素。

例如，物料在连续流动反应器中的返混及停留时间分布可能对反应结果产生严重影响；物料微团之间的微观混合对快速反应会产生不良的后果；多态及热稳定性现象对强放热气固催化反应是特别需要加以注意的问题；加料方法的不同或是操作方式的变化也会得出截然不同的反应结果。

1.4.2 提供了大量重要概念和科学结论

通过对最基本的化学反应（包括简单反应、可逆反应、平行反应和串连反应等）大量的单因素研究，通过理论推导和数学运算，得出以下重要概念和结论：

* 在低转化率（ $< 50\%$ ）时返混的影响较小，可以不予考虑。高转化率（ $> 95\%$ ）时，其影响很大。因而要充分重视化学反应末期动力学特征。

1.4.2 提供了大量重要概念和科学结论

* 对于气相慢反应，预混合问题可以不予考虑；对于快反应，预混合可能严重影响反应选择率。而反应快慢的分界是秒级，即反应所需时间为几秒的属慢反应，反应时间为分秒级的属快反应。

* 对气固强放热催化反应，催化剂颗粒与气流主体间可以存在明显温差，从而对反应结果带来很大的影响。而反应热强弱的标志不是克分子反应热，而是反应物系的绝热温升。

1.4.3 提供了若干重要类型反应器的传递特征

反应工程的理论和实验已经对一些典型的工业反应器，如搅拌釜、列管式固定床反应器、绝热式固定床反应器、流化床反应器、涓流床反应器、鼓泡床反应器等进行了大量研究，掌握了这些反应器的型式、结构特征和传递特性。

只能作为定性的或半定量的估计

1.4.3 提供了若干重要类型反应器的传递特征

在实际反应过程开发研究中，化学反应工程理论指导体现在两个方面：

一是反应工程理论可以决定哪些因素必需予以重视，哪些因素可以忽略，即可提供工程因素利与弊的半定量指导；

二是对不同类型反应器结构、操作方式、操作条件等各种工程因素对反应场所温度和浓度产生的影响程度进行预示，并确定相应的对策。

1.4.3 提供了若干重要类型反应器的传递特征

反应工程工程思维方法

要求把反应器型式、操作方式及操作条件等对反应结果的影响分解为以下三部分：

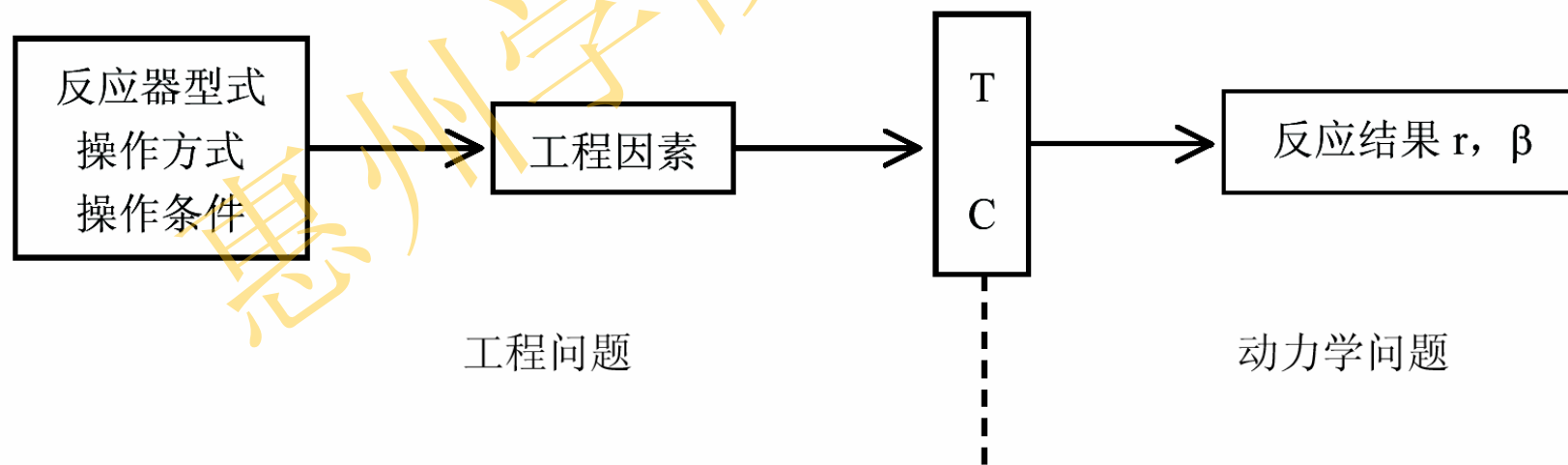


图 1-4 反应工程工程思维方法示意图

1.4.3 提供了若干重要类型反应器的传递特征

(1) 反应器型式、操作方式和操作条件对有关工程因素的影响。

(2) 各种工程因素对实际反应场所温度和浓度的影响。温度和浓度是指实际反应场所的温度和浓度，而不是指反应器进口，出口的温度和浓度。如，气固催化反应过程，反应实际场所的温度和浓度是指催化剂表面的温度和浓度。

(3) 实际反应场所温度、浓度通过化学反应的温度效应和浓度效应对反应速率和反应选择率的影响而改变反应结果。

1.4.3 提供了若干重要类型反应器的传递特征

整个反应过程的问题可分解为两大部分：**动力学问题**和**工程问题**。

动力学问题：

是化学反应规律的研究，是反应的个性问题。由于化学反应规律不因设备尺寸而异，所以化学反应规律可以在小型装置中通过实验揭示。反应工程理论已把反应分为若干典型的反应类别和特征。

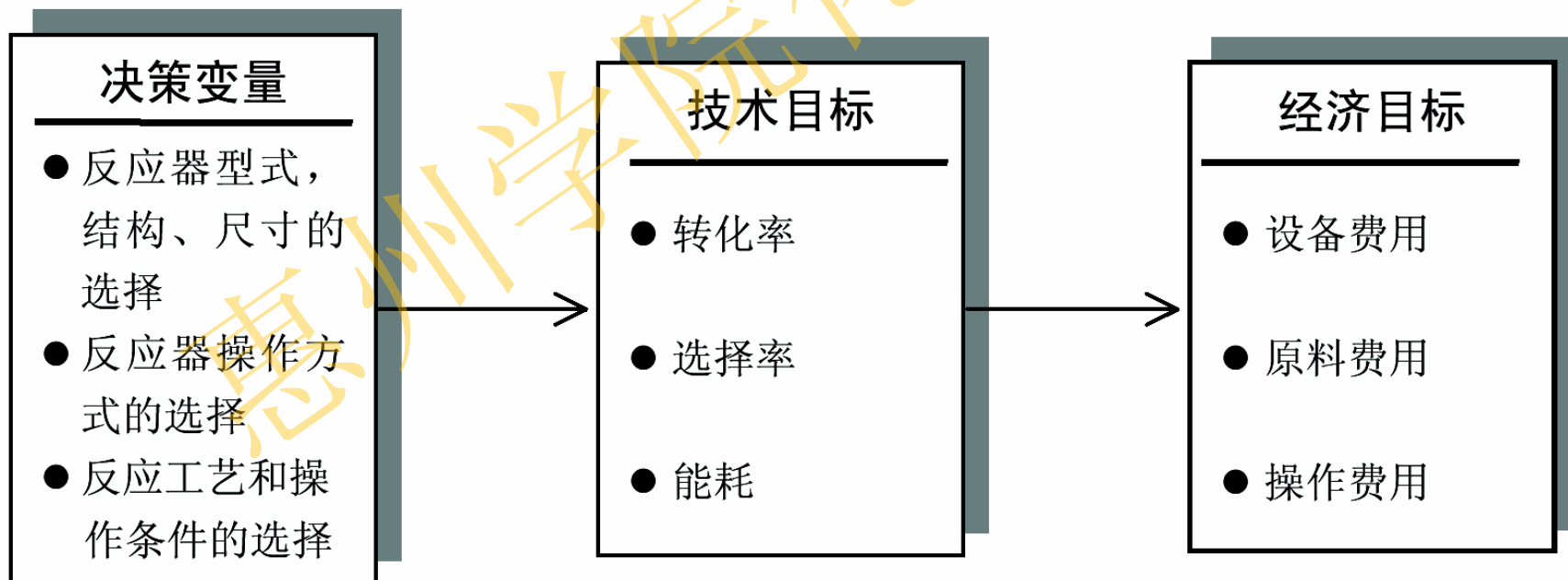
1.4.3 提供了若干重要类型反应器的传递特征

工程问题:

是反应器的传递规律研究，工程因素将改变反应场所的温度和浓度。传递规律是反应器属性，基本上不因在其中进行的化学反应而异。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，完全可以利用惰性模拟物料进行试验，以探明传递过程规律。这种试验通常称为**冷模试验**。

本章小结

1. 化学反应工程研究内容



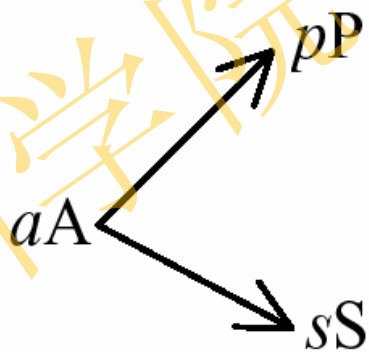
本章小结

2. 化学反应工程的任务



本章小结

3. 优化的技术指标



本章小结

转化率: $x_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}};$

$$x_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

选择率: $\beta = \frac{(n_p - n_{p0}) / p}{(n_{A0} - n_A) / a};$

$$\beta = \frac{(C_p - C_{p0}) / p}{(C_{A0} - C_A) / a}$$

收 率: $\Phi = \frac{(n_p - n_{p0}) / p}{n_{A0} / a};$

$$\Phi = \frac{(C_p - C_{p0}) / p}{C_{A0} / a}$$