第十一次课

例 6.2 在充填直径为 9mm,高为 7mm 的圆柱形铁铬催化剂的固定床反应器中, 在 0.6865MPa 下进行水煤气变换反应。反应气体的平均相对分子量为 18.96, 质量速度 G 为 0.936kg/(s.m^2)。设床层的平均温度为 689K，反应气体的黏度为 2.5×10^{-5}Pa.s。已知催化剂的颗粒密度和床层的堆密度分别为 2000kg/m^3 及 1400kg/m^3， L=1m 。试计算单位床层高度的压力降。

解：

$$d_s = 6\frac{V_S}{S_S} = 8.217\times10^{-3}m$$

床层空隙率为

$$\varepsilon_B = 1-\frac{\rho_B}{\rho_p} = 1-\frac{1400}{2000} = 0.30$$

$$\rho = \frac{18.96\times(0.1013/0.6865)}{22.4\times(689/273)} = 2.348kg/m^3$$

$$u_m = \frac{G}{\rho} = \frac{0.936}{2.348} = 0.3986m/s$$

$$Re_m = \frac{d_S\rho u_m}{\mu(1-\varepsilon_B)}$$

$$= \frac{8.217\times10^{-3}\times2.348\times0.3986}{2.5\times10^{-5}(1-0.3)}$$

$$= 439.5$$

$$\Delta p = \frac{\left(\frac{150}{439.5}+1.75\right)\times2.348\times0.3986^2(1-0.3)}{8.217\times10^{-3}\times0.3^3}$$

$$= 2461 \quad \text{Pa/m}$$

➢ 固定床催化反应器的设计

固定床的操作方式：绝热、换热两种；操作方式的不同，反应器的结构不同。

操作方式由反应的热效应和操作范围的宽窄及反应的经济效益等决定。

从反应器的设计、制造及操作考虑，绝热型比较简单。

从设计上讲，基本方程是一样的。

设计固定床反应器的要求：

1. 生产强度尽量大
2. 气体通过床层阻力小
3. 床层温度分布合理
4. 运行可靠，检修方便

计算包括三种情况：

1. 设计新反应器的工艺尺寸

2. 对现有反应器，校核工艺指标
3. 对现有反应器，改进工艺指标，达到最大生产强度。

模型化

- 对于一个过程，进行合理的简化，利用数学公式进行描述，在一定的输入条件下，预测体系输出的变化。
- 对同一个体系，根据不同的简化和假定，可以构造不同的模型。
- 不同的简化和假定，也决定了模型必然含有一些参数，以修正模型与实际体系的差异。
- 根据不同的简化和假定，分为几种不同层次的模型。

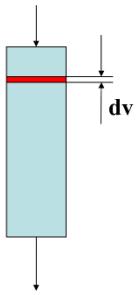
对于固定床反应器，一般有以下模型：

- 一维拟均相平推流模型
- 一维拟均相带有轴向返混的模型
- 二维拟均相模型
- 二维非均相模型
- 二维非均相带有颗粒内梯度的模型
- ……

特点

- 一维：参数只随轴向位置而变。
- 二维：参数随轴向和径向位置而变。
- 拟均相：流相和固相结合，视为同一相。
- 非均相：流相和固相分别考虑。
- 平推流：不考虑轴向返混。
- 带有轴向返混的模型：在平推流模型的基础上叠加了轴向返混。

➢ 一维拟均相平推流模型



质量衡算

在管式反应器中垂直于流动方向取一个微元，以这个微元对 A 组份做物料衡算：

输入 −	**输出**	**=**	**反应**	**+**	**积累**
F_A	F_A+dF_A		$(-R_A)(1-\varepsilon_B)A_i dl$		0

整理得：

$$\frac{dx_A}{dl}=\frac{(-R_A)(1-\varepsilon_B)}{u_0 c_{A0}} \qquad -R_A\text{以催化剂体积计}$$

或者以催化剂质量计：

$$\frac{dx_A}{dl}=\frac{(-R_A)\rho_B}{u_0 c_{A0}} \qquad \rho_B\text{：催化剂堆密度}$$

$$\frac{dx_A}{(-R_A)\rho_B}=\frac{dl}{u_0 c_{A0}} \qquad \int_0^L \frac{dl}{u_0}=\tau=c_{A0}\int_0^{x_{A出}}\frac{dx_A}{(-R_A)\rho_B}$$

对照平推流反应器模型，二者相同：

$$\frac{V_R}{V_0}=\tau=c_{A0}\int_0^{x_{A出}}\frac{dx_A}{(-r_A)}$$

热量衡算：(仍然是那个红色的微元)

输入热量 − 输出热量+反应热效应=与外界的热交换+积累

输入：G c_p T　　G 质量流量，　　c_p 恒压热容

输出：G c_p(T+dT)
反应热效应：$(-R_A)(1-\varepsilon_B)(-\Delta H)A_i dl$
热交换：$U(T-T_r)\pi d_i dl$　　d_i 反应器直径
积累：0
U:气流与冷却介质之间的换热系数
T_r：环境温度
将各式代入，得

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}l}=\frac{\left((-R_A)(1-\varepsilon_B)(-\Delta H)-U\frac{4}{d_i}(T-T_r)\right)}{uc_p\rho_g}$$

动量衡算：仍然是 Ergun 方程

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}l}=\left(\frac{150}{Re_m}+1.75\right)\left(\frac{1-\varepsilon_B}{\varepsilon_B^3}\right)\left(\frac{\rho_g u_m^2}{d_s}\right)$$

将三个方程联立：

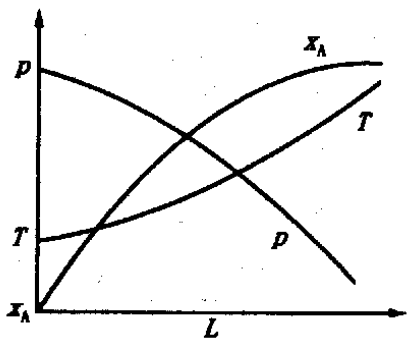
$$\frac{\mathrm{d}x_A}{\mathrm{d}l}=\frac{(-R_A)(1-\varepsilon_B)}{u_0 c_{A0}}$$

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}l}=\frac{\left((-R_A)(1-\varepsilon_B)(-\Delta H)-U\frac{4}{d_i}(T-T_r)\right)}{uc_p\rho_g}$$

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}l}=\left(\frac{150}{Re_m}+1.75\right)\left(\frac{1-\varepsilon_B}{\varepsilon_B^3}\right)\left(\frac{\rho_g u_m^2}{d_s}\right)$$

边界条件：L=0,　$p=p_0$,　$x_A=x_{A0}$, $T=T_0$
需要注意的问题

1. 从解题的角度看，一般壁温恒定，实际情况并非如此。
2. 对于低压系统，压降十分重要。
3. U 不是物性参数，需实验确定。
4. 如果多根管子并联，体系将自动调节各管的流量，使压降相同。



一维拟均相理想流动模型中 T、p、x_A 与 L 关系

两种特殊情况：

1 等温：反应热效应不大，管径较小，传热很好时，可近似按等温计算。

等温时，

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}l}=\frac{\left((-R_{\mathrm{A}})(1-\varepsilon_{\mathrm{B}})(-\Delta H)-U\frac{4}{d_i}(T-T_{\mathrm{r}})\right)}{uc_{\mathrm{p}}\rho_{\mathrm{g}}}=0$$

同时：$\frac{\mathrm{d}x_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}l}=\frac{(-R_{\mathrm{A}})(1-\varepsilon_{\mathrm{B}})}{u_0c_{\mathrm{A0}}}$*的*$(-R_{\mathrm{A}})$*中，反应速率*

常数k为常数，计算大大简化。

2 绝热：若绝热，则 $T=T_r$，或者认为 U=0。

此时，将物料衡算式与热量衡算式合并，可得：

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}=\frac{(-\Delta H)u_0c_{\mathrm{A0}}}{uc_{\mathrm{p}}\rho_{\mathrm{g}}}\frac{A_i}{A_i}=\frac{F_{\mathrm{A0}}(-\Delta H)}{mc_{\mathrm{p}}}=\lambda$$

λ：绝热温升，如果在一定范围内视物性为常数， λ 将不随 x 及 T 变化。则：

$T-T_0=\lambda(x-x_0)$温度与转化率形成一一对应关系，温度可以由 $T=T_0+\lambda(x-x_0)$代替。

$$\frac{\mathrm{d}x_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}l}=\frac{(-R_{\mathrm{A}})(1-\varepsilon_{\mathrm{B}})}{u_0c_{\mathrm{A0}}}\qquad \textit{变形：}\qquad \frac{(1-\varepsilon_{\mathrm{B}})}{u_0c_{\mathrm{A0}}}\mathrm{d}l=\frac{\mathrm{d}x_{\mathrm{A}}}{(-R_{\mathrm{A}})}$$

左端上下同乘床层截面积：

$$\frac{A_{\mathrm{T}}(1-\varepsilon_{\mathrm{B}})\mathrm{d}l}{A_{\mathrm{T}}u_0c_{\mathrm{A0}}}=\frac{\mathrm{d}V_{\mathrm{P}}}{F_{\mathrm{A0}}}$$

要求与反应动力学方程$(-R_{\mathrm{A}})$*中的基准对应，如果动力*

学方程以颗粒体积为基准，则：

$$\frac{\mathrm{d}V_{\mathrm{P}}}{F_{\mathrm{A0}}}=\frac{\mathrm{d}x_{\mathrm{A}}}{(-R_{\mathrm{A}})}$$

如果动力学方程以颗粒质量为基准，则：

$$\frac{\mathrm{d}W}{F_{\mathrm{A0}}}=\frac{\mathrm{d}x_{\mathrm{A}}}{(-R_{\mathrm{A}})}$$

固定床反应器的设计方程：

$$\frac{W}{F_{\mathrm{A0}}}=\int_0^{x_{\mathrm{A}}}\frac{\mathrm{d}x_{\mathrm{A}}}{(-R_{\mathrm{A}})}$$

固定床反应器的操作方程：

$$T-T_0=\frac{F_{\mathrm{A0}}(-\Delta H)}{mc_{\mathrm{P}}}(x-x_0)=\lambda(x-x_0)$$

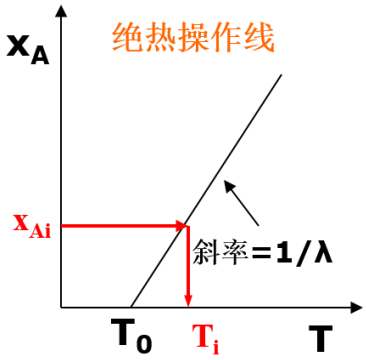
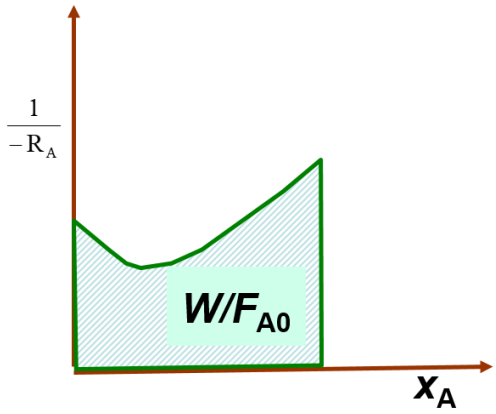
图解法步骤

（1）由设计方程在 x_A-T 图中作绝热操作线；

（2）在绝热操作线上读出若干组（ x_{Ai}，T_{i} ）数据；

（3）由（ x_{Ai}，T_{i} ）数据计算（$-R_{\mathrm{Ai}}$）和 1/（$-R_{\mathrm{Ai}}$）；

（4）作 1/（-R_A）~ x_A 曲线。该曲线下方介于 0~ x_{Af} 之间的面积大小即为 W/F_{A0}。

（5）床层高度

$$L = \frac{W}{S\rho_B}$$