

第四次课

复习

➤ 物料衡算方程

$$F_{\text{in}} - F_{\text{out}} - F_r = F_b$$

➤ 几种反应时间

(1)反应持续时间 t_r 简称为反应时间，用于间歇反应器。

(2)停留时间 t 和平均停留时间 停留时间又称接触时间，用于连续流动反应器。

(3)空时的定义为：在规定条件下，反应器有效容积 V_R 与流体特征体积流率 v_0 之比值称为空时，用符号 τ 表示，并可写成：

$$\tau = \frac{V_R}{V_0}$$

(4)空速的定义为：在规定条件下，单位时间内进入反应器的物料体积相当于几个反应器的容积，或单位时间内通过单位反应器容积的物料体积，称为空速，用符 S_v 表示，可写成：

$$S_v = \frac{V_0}{V_R} \quad \text{h}^{-1}$$

➤ 简单混合与返混

若相互混合的物料是在相同的时间进入反应器的，具有相同的反应程度，混合后的物料必然与混合前的物料完全相同。这种发生在停留时间相同的物料之间的均匀化过程，称之为**简单混合**。

如果发生混合前的物料在反应器内停留时间不同，反应程度就不同，组成也不会相同。混合之后的物料组成与混合前必然不同，反应速率也会随之发生变化，这种发生在停留时间不同的物料之间的均匀化过程，称之为**返混**。

➤ 理想反应器

在工业上化学反应必然要在某种设备内进行，这种设备就是反应器。根据各种化学反应的不同特性，反应器的形式和操作方式有很大差异。

从本质上讲，反应器的形式并不会影响化学反应动力学特性。但是物料在不同类型的反应器中流动情况是不同的。

➤ 理想反应器的分类

按物料在反应器内返混情况作为反应器分类的依据将能更好的反映出其本质上的差异。

按返混情况不同反应器被分为以下四种类型：

- 间歇反应器**：间歇操作的充分搅拌槽式反应器（简称间歇反应器）。在反应器中物料被充分混合，但由于所有物料均为同一时间进入的，物料之间的混合过程属于简单混合，**不存在返混**。
- 平推流反应器**：理想置换反应器（又称平推流反应器或活塞流反应器）。在连续流动的反应器内物料允许作径向混合（属于简单混合）但不存在轴向混合（即**无返混**）。典型例子是物料在管内流速较快的管式反应器。
- 全混流反应器**：连续操作的充分搅拌槽型反应器（简称全混流反应器）。在这类反应器中物料返混达**最大值**。
- 非理想流反应器**：非理想流反应器。物料在这类反应器中存在一定的返混，即物料返混程度介于平推流反应器及全混流反应器之间。

➤ 间歇搅拌器

- ①由于剧烈搅拌、混合，反应器内有效空间中各位置的物料**温度、浓度都相同**；
- ②由于一次加料，一次出料，反应过程中没有加料、出料，所有物料在反应器中停留时间相同，不存在不同停留时间物料的混合，即**无返混现象**；
- ③出料组成与反应器内物料的最终组成相同；
- ④为间歇操作，有辅助生产时间。一个生产周期应包括反应时间、加料时间、出料时间、清洗时间、加热（或冷却）时间等。

$$\left[\begin{array}{c} \text{单位时间进入} V \\ \text{的物料A的量} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{单位时间排出} V \\ \text{的物料A的量} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{单位时间} V \text{内反应} \\ \text{消失的物料A的量} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{单位时间内} V \text{中} \\ \text{物料A的积累量} \end{array} \right]$$

$$0 - 0 - (-r_A)V = \frac{dn_A}{dt} \quad \text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\frac{dn_A}{dt} = \frac{d[n_{A0}(1-x_A)]}{dt} = -n_{A0} \frac{dx_A}{dt}$$

$$(-r_A)V = n_{A0} \frac{dx_A}{dt}$$

$$t = n_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)V}$$

在恒容条件下，

$$t = c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)} = - \int_{c_A}^{c_{A0}} \frac{dc_A}{(-r_A)}$$

➤ 平推流反应器指

通过反应器的物料沿同一方向以相同速度向前流动，像活塞一样在反应器中向前平推，故又称为活塞流反应器或理想置换反应器。具有以下特点：

- ①由于流体沿同一方向，以相同速度向前推进，在反应器内没有物料的返混，所有物料在反应器中的停留时间都是相同的；
- ②在垂直于流动方向上的同一截面，不同径向位置的流体特性（组成、温度等）是一致的；
- ③在定常态下操作，反应器内状态只随轴向位置改变，不随时间改变。实际生产中对于管径较小、长度较长、流速较大的管式反应器，列管固定床反应器等，常可按平推流反应器处理。

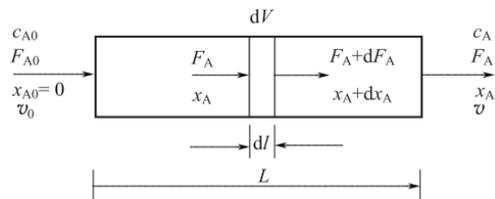


图 3-4 平推流反应器的物料衡算示意图

进入量 = 排出量 + 反应量 + 积累量

$$F_A = F_A + dF_A + (-r_A)dV \quad 0$$

$$F_A = F_A + dF_A + (-r_A)dV$$

$$dF_A = d[F_{A0}(1-x_A)] = -F_{A0} dx_A$$

$$F_{A0} dx_A = (-r_A)dV$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{V}{F_{A0}} &= \frac{\tau}{c_{A0}} = \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)} \\ \tau &= \frac{V}{v_0} = c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)} \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \tau &= \frac{V}{v_0} = c_{A0} \int_{x_{A1}}^{x_{A2}} \frac{dx_A}{(-r_A)} \\ \frac{V}{F_{A0}} &= \frac{V}{c_{A0} v_0} = \int_{x_{A1}}^{x_{A2}} \frac{dx_A}{(-r_A)} \end{aligned} \right\}$$

对恒容系统，平推流反应器的积分设计方程：

$$\left. \begin{aligned} \tau &= \frac{V}{v_0} = c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(-r_A)} = - \int_{c_{A0}}^{c_A} \frac{dc_A}{(-r_A)} \\ \frac{V}{F_{A0}} &= \frac{\tau}{c_{A0}} = - \frac{1}{c_{A0}} \int_{c_{A0}}^{c_A} \frac{dc_A}{(-r_A)} \end{aligned} \right\}$$

表 3-2 等温、变容平推流反应器的计算式（用 ϵ 表示）

反 应	动力学方程	设 计 式
零级	$-r_A = k$	$\frac{V_R}{F_{A0}} = \frac{x_A}{k}$
一级 $A \rightarrow P$	$-r_A = kc_A$	$\frac{V_R}{F_{A0}} = [-(1+\epsilon_A)\ln(1-x_A) - \epsilon_A x_A] / kc_{A0}$
可逆一级 $A \rightleftharpoons bB$ $\frac{c_{B0}}{c_{A0}} = \beta$	$-r_A = k_1 c_A - k_2 c_B$	$\frac{V_R}{F_{A0}} = \frac{\beta + b x_{Ae}}{k_1 c_{A0} (\beta + b)} \left[-(1 + \epsilon_A x_{Ae}) \ln \left(1 - \frac{x_A}{x_{Ae}} \right) - \epsilon_A x_A \right]$
二级 $A+B \rightarrow P$ $2A \rightarrow P$ $c_{A0} = c_{B0}$	$-r_A = kc_A^2$	$\frac{V_R}{F_{A0}} = \frac{1}{kc_{A0}^2} \left[2\epsilon_A (1 + \epsilon_A) \ln(1-x_A) + \epsilon_A^2 x_A + (1 + \epsilon_A)^2 \frac{x_A}{1-x_A} \right]$

新的内容

例 3-2 均相气相反应 $A \rightarrow 3P$ ，其动力学方程为 $-r_A = kc_A$ ，该过程在 185°C ， 400kPa 下在一平推流反应器中进行，其中 $k=10^{-2}\text{s}^{-1}$ ，进料量 $F_{A0}=30\text{kmol/h}$ ，原料含 50% 惰性气，为使反应器出口转化率达 80%，该反应器体积应为多大？

解：该反应为气相反应 $A \rightarrow 3R$

$$\delta_A = \frac{-1+3}{-(-1)} = 2$$

已知 $y_{A0}=0.5$ ，因此 $\epsilon_A = y_{A0} \delta_A = 1$

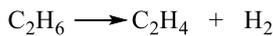
平推流反应器设计方程

$$\tau = c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A}$$

$$\begin{aligned} \tau &= c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dX_A}{-r_A} = c_{A0} \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{kc_A} \\ &= c_{A0} \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{kc_{A0} \left(\frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A} \right)} = 100 \int_0^{0.8} \frac{1+X_A}{1-X_A} dX_A \\ \tau &= 100 \left(-X_A - 2 \ln(1-X_A) \right) \Big|_0^{0.8} = 241.8 \text{ s} \\ V_0 &= \frac{F_0 RT}{p} = \frac{(30 / 0.5) \times 8.314 \times (273.15 + 185)}{400} \\ &= 571.2 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1} = 0.1587 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1} \\ V_R &= \tau V_0 = 241.8 \times 0.1587 = 38.4 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

例 3-3 在一个平推流反应器中，由纯乙烷进料裂解制造乙烯。年设计生产能力为 14 万吨乙烯。反应是不可逆的一级反应，要求达到乙烷转化率为 80%，反应器在 1100K 等温，恒压 600kPa 下操作，已知反应活化能为 347.3 kJ·mol⁻¹，1000K 时， $k=0.0725 \text{ s}^{-1}$ 。设计工业规模的管式反应器。

解：设 A 为乙烷，B 为乙烯，C 为氢气



反应器流出的乙烯的摩尔流率是：

$$F_B = \frac{14 \times 10^7 \text{ kg} \cdot \text{a}^{-1}}{330 \text{ d} \cdot \text{a}^{-1} \times 24 \text{ h} \cdot \text{d}^{-1} \times 3600 \text{ s} \cdot \text{h}^{-1} \times 28 \text{ kg} \cdot \text{kmol}^{-1}} = 0.175 \text{ kmol} \cdot \text{s}^{-1}$$

进料乙烷的摩尔流率是：

$$F_{A0} = \frac{F_B}{X_A} = \frac{0.175}{0.8} = 0.219 \text{ kmol} \cdot \text{s}^{-1}$$

计算 1100K 时反应速率常数：

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$\frac{k_{1100\text{K}}}{k_{1000\text{K}}} = \frac{k_0 e^{-\frac{E}{1100R}}}{k_0 e^{-\frac{E}{1000R}}} = e^{\frac{E}{R} \times \frac{1100-1000}{1100 \times 1000}}$$

$$k_{1100\text{K}} = 0.0725 e^{\frac{347.3 \times 10^3}{8.314} \times \frac{1100-1000}{1100 \times 1000}} = 3.23 \text{ s}^{-1}$$

$$\text{膨胀因子：} \delta_A = \frac{1+1-1}{1} = 1$$

$$\text{膨胀率：} \varepsilon_A = y_{A0} \delta_A = 1 \times 1 = 1$$

进口体积流量：

$$v_0 = \frac{F_{A0}RT_0}{p_0} = \frac{0.219 \times 10^3 \times 8.314 \times 1100}{600 \times 10^3} = 3.34 \text{m}^3 \text{s}^{-1}$$

平推流反应器设计方程

$$\frac{V_R}{v_0} = \tau = c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A}$$

$$V_R = v_0 c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{k c_A} = v_0 c_{A0} \int_0^{0.8} \frac{dx_A}{k c_{A0} \left(\frac{1-x_A}{1+\varepsilon_A x_A} \right)}$$

$$= v_0 \int_0^{0.8} \frac{dx_A}{k \left(\frac{1-x_A}{1+x_A} \right)} = \frac{3.34}{3.23} \int_0^{0.8} \frac{1+x_A}{1-x_A} dx_A$$

$$V_R = 1.03 \left(-x_A - 2 \ln(1-x_A) \right) \Big|_0^{0.8} = 2.50 \text{m}^3$$

➤ 全混流反应器

全混流反应器又称全混釜或连续流动充分搅拌槽式反应器，简称 CSTR。流入反应器的物料，在瞬间与反应器内的物料混合均匀，即在反应器中各处物料的温度、浓度都是相同的。

- ①物料在反应器内充分返混；
- ②反应器内各处物料参数均一；
- ③反应器的出口组成与器内物料组成相同；
- ④连续、稳定流动，是一定态过程。

物料衡算方程：

进入量 = 排出量 + 反应量 + 累积量

$$F_{A0} = v_0 c_{A0} \quad F_A \quad (-r_A)V \quad 0$$

$$V = \frac{F_{A0} - F_A}{(-r_A)} = \frac{v_0 c_{A0} - v_0 c_A}{(-r_A)} = \frac{v_0 c_{A0} x_A}{(-r_A)}$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{c_{A0}} = \frac{\Delta x_A}{(-r_A)} = \frac{x_A - x_{A0}}{(-r_A)} = \frac{x_A}{(-r_A)}$$

因为全混釜反应器多用于液相恒容系统，故上式可简化为

$$\left. \begin{aligned} \frac{V}{F_{A0}} &= \frac{x_A}{(-r_A)} = \frac{c_{A0} - c_A}{c_{A0} (-r_A)} \\ \tau &= \frac{V}{v} = \frac{c_{A0} x_A}{(-r_A)} = \frac{c_{A0} - c_A}{(-r_A)} \end{aligned} \right\}$$

全混流反应器内浓度温度均一，决定了反应器内反应速率始终是恒定的，因此物料衡算方程是代数方程。

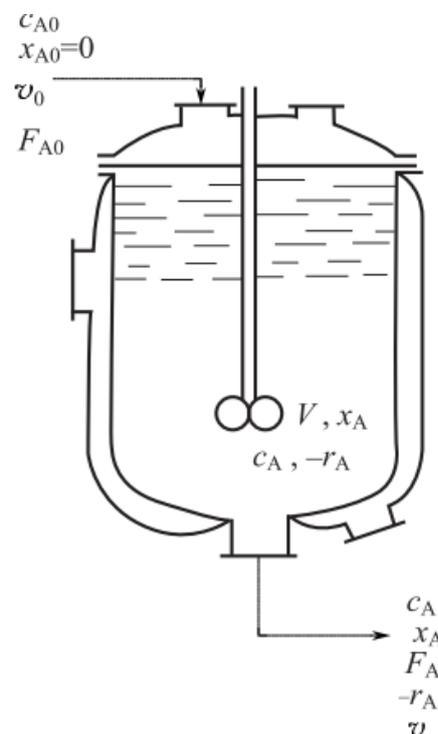


图 3-6 全混流釜式反应器示意图

表 3-3 全混流釜式反应器的设计式 (进料中不含产物)

反 应	动力学方程	设 计 式
1 级 $A \longrightarrow P$	$-r_A = kc_A$	$c_A = c_{A0}/(1+k\tau) \quad \tau = \frac{x_A}{k(1-x_A)}$
2 级 $A \longrightarrow P$	$-r_A = kc_A^2$	
$\frac{1}{2}$ 级 $A \longrightarrow P$	$-r_A = kc_A^{\frac{1}{2}}$	$c_A = c_{A0} + 1/2(k\tau)^2 - k\tau \left(c_{A0} - \frac{k^2\tau^2}{4} \right)^{\frac{1}{2}}$
n 级 $A \longrightarrow P$	$-r_A = kc_A^n$	$\tau = (c_{A0} - c_A)/kc_A^n$
2 级 $A+B \longrightarrow P$	$-r_A = kc_Ac_B$	$c_{A0}k\tau = \frac{x_A}{(1-x_A)(\beta-x_A)}, \beta = \frac{c_{B0}}{c_{A0}} \neq 1$
$A+B \longrightarrow P+S$		$c_{A0}k\tau = \frac{x_A}{(1-x_A)^2}, \beta = 1$
1 级	$-r_A = (k_1+k_2)c_A$	$c_A = \frac{c_{A0}}{1+(k_1+k_2)\tau}$
$A \begin{cases} \xrightarrow{k_1} P \\ \xrightarrow{k_2} S \end{cases}$	$r_P = k_1c_A$	$c_P = \frac{c_{A0}k_1\tau}{1+(k_1+k_2)\tau}$
	$r_S = k_2c_A$	$c_S = \frac{c_{A0}k_2\tau}{1+(k_1+k_2)\tau}$
$A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$	$-r_A = k_1c_A$	$c_A = \frac{c_{A0}}{1+k_1\tau}, c_P = \frac{c_{A0}k_1\tau}{(1+k_1\tau)(1+k_2\tau)}$
	$r_P = k_1c_A - k_2c_P$	$c_S = \frac{c_{A0}k_1\tau^2}{(1+k_1\tau)(1+k_2\tau)}$
		$c_{Pmax} = \frac{c_{A0}}{[(k_2/k_1)^{\frac{1}{2}} + 1]^2}$
	$r_S = k_2c_P$	$\tau_{opt} = \frac{1}{\sqrt{k_1k_2}}$

例题：某厂生产醇酸树脂是使己二酸与己二醇以等摩尔比在 70C°用间歇釜并以 H₂SO₄ 作催化剂进行缩聚反应而生产的，实验测得反应动力学方程为：

$$-r_A = kc_A^2 \quad \text{kmol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{min}^{-1}$$

$$k = 1.97 \times 10^{-3} \quad \text{m}^3 \text{kmol}^{-1} \text{min}^{-1} \quad c_{A0} = 4 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$$

每天处理 2400kg 己二酸，若采用 CSTR 反应器，求己二酸转化率分别 80%、90%时，所需反应器的体积。

$$F_{A0} = \frac{2400}{24 \times 146} = 0.684 \quad \text{kmol} \cdot \text{h}^{-1}$$

$$F_{A0} = 0.684 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1} = 0.0114 \text{ kmol} \cdot \text{min}^{-1}$$

$$V_0 = 0.171 \quad \text{m}^3 \text{h}^{-1}$$

$$\text{由设计方程 } V_R = F_{A0} \frac{x_{Af} - x_{A1}}{kc_{A0}^2(1 - x_A)^2}$$

$$\text{代入数据, } x_{Af}=0.8 \text{ 时 } V_R = \frac{0.0114 \times 0.8}{1.97 \times 10^{-3} \times 4^2 \times (1 - 0.8)^2} = 7.23 \text{ m}^3$$

$$\text{代入数据, } x_{Af}=0.9 \text{ 时 } V_R = \frac{0.0114 \times 0.9}{1.97 \times 10^{-3} \times 4^2 \times (1 - 0.9)^2} = 32.6 \text{ m}^3$$

还是这个转化，如果用平推流反应器，则计算转化率分别为 80%、90%时所需平推流反应器的大小。

$$\text{对 PFR } \tau = \frac{V_R}{V_0} = c_{A0} \int_{x_{A1}}^{x_{A2}} \frac{dx_A}{-r_A}$$

$$\frac{V_R}{V_0} = c_{A0} \int_0^{x_{A2}} \frac{dx_A}{kc_{A0}^2(1 - x_A)^2} = \frac{1}{kc_{A0}} \frac{x_{A2}}{(1 - x_{A2})}$$

$$\text{代入数据 } x_A=0.8 \text{ 时: } V_R = \frac{0.171}{1.97 \times 10^{-3} \times 4} \times \frac{0.8}{(1 - 0.8)} \times \frac{1}{60} = 1.45 \quad \text{m}^3$$

$$x_A=0.9 \text{ 时: } V_R = 3.26 \text{ m}^3$$

将以上结果汇总，我们发现：

反应器有效容积	平推流反应器	间歇釜式反应器	全混流反应器
$x_A=0.8$	1.45 m ³	2.17 m ³	7.23 m ³
$x_A=0.9$	3.26 m ³	4.56 m ³	32.6 m ³

从上表可看出，达到同样结果间歇反应器比平推流反应器所需反应体积略大些，这是由于间歇过程需辅助工作时间所造成的。而全混釜反应器比平推流反应器、间歇反应器所需反应体积大得多，这是由于全混釜的返混造成反应速率下降所致。当转化率增加时，所需反应体积迅速增加。

同一化学反应相同转化率所需反应时间比较

反应器类型	间歇釜式反应器	活塞流反应器	全混流反应器
t or τ	$t = c_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_{Af}}{kc_A^\alpha}$	$\tau = c_{A0} \int_0^{X_{Af}} \frac{dX_{Af}}{kc_A^\alpha}$	$\tau = \frac{c_{A0} X_{Af}}{kc_{Af}^\alpha}$
所需反应体积 V	$Q_0(t + t_0)$	$Q_0\tau$	$Q_0\tau$

$-r_A = kc_A^\alpha$	$V_{BR} > V_{PFR}$	$\alpha > 0$ 时, $V_{CSTR} > V_{PFR}$
		$\alpha = 0$ 时, $V_{CSTR} = V_{PFR}$
		$\alpha < 0$ 时, $V_{CSTR} < V_{PFR}$

➤ 理想管式循环反应器

一、循环反应器简介

循环反应器是一种把出口产物的一部分循环至反应器入口再进行反应的反应器。最常见的循环反应器是管式循环反应器。其基本的结构如图 1 所示。

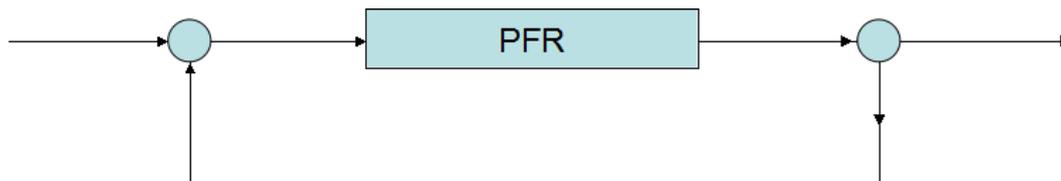


图 1 管式循环反应器基本结构图

循环反应器中一个最重要的概念就是循环比——循环流量与出口流量之比。随着循环比的增加，平推流反应器内的轴向浓度梯度降低，这种循环操作的平推流反应器越来越接近全混流反应器。

这类反应器广泛地用于自催化反应、生化反应和某些自热反应。不同类型的循环反应器有不同的目的。对于反应热很大的反应，采用循环反应器可以进行器外换热，更好地控制床层温度；对于自催化反应，循环部分产品可以加快反应速率；对于反应转化率高时二次反应大的反应，采用循环反应器可以降低原料的一次反应深度，提高主要产品的选择性。

二、循环反应器设计方程

关于反应器的计算，其关键是设计方程的导出。由于存在循环，因此循环反应器不同于之前学过的 CSTR 或 PFR，设计方程也有很大不同。这里仅仅考虑理想的管式循环反应器。循环反应器模型如图 2 所示。

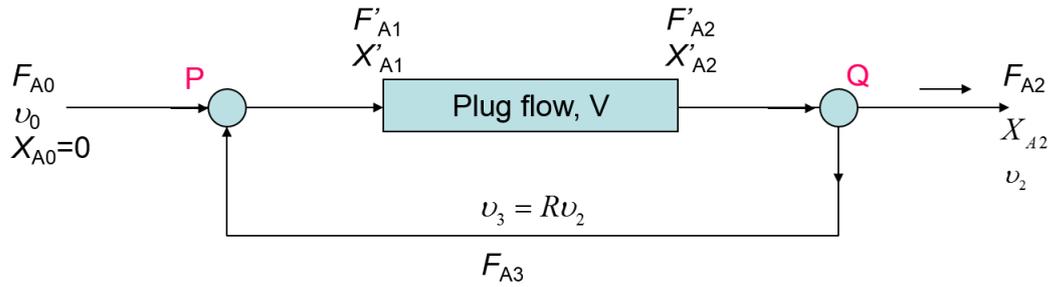


图 2 管式循环反应器模型

$$R = \frac{v_3}{v_2} = \frac{F_{A3}}{F_{A2}}$$

依据上述循环比定义，这里的循环比为 $\frac{v_3}{v_2} = \frac{F_{A3}}{F_{A2}}$ 。也可以看到，当 $R=0$ 时，该反应器就是 PFR；当 $R \rightarrow \infty$ 时，该反应器就是 CSTR。这里，为了便于计算，给出以下定义。

X_A ：A 组分的转化率，也就是反应的 A 的物质的量与输入的 A 的物质的量之间的比值。为了更好的分析整体的情况，我们将中间的反应过程看做一个黑箱（如图 3 所示），那么总

的转化率 $X_{A2} = \frac{F_{A0} - F_{A2}}{F_{A0}}$ 。

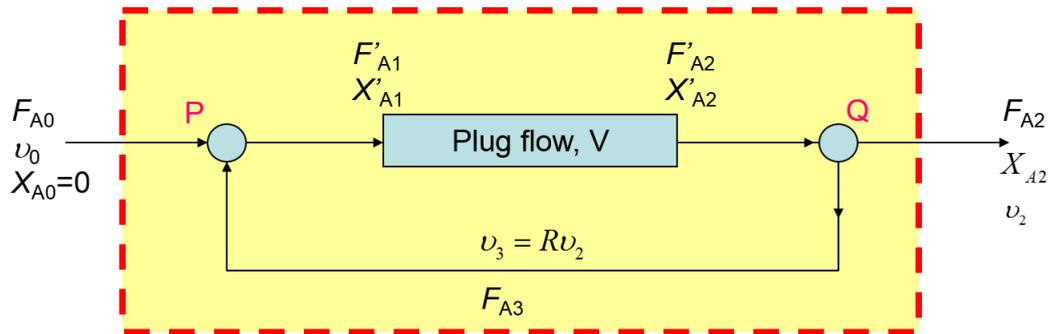


图 3 循环反应器的黑箱模型

为了得到循环反应器的设计方程，通常会沿用 PFR 设计方程，以如下的公式作为循环反应器设计方程：

$$\frac{V}{F_{A1}} = \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (*\text{注：此式有误})$$

但是这里存在一个误区。在 PFR 设计中，选择 $X_A = 0$ 处的 F_A 作为设计方程中的流量值，而这里同样也需要一个 $X_{A0} = 0$ 处的 F_{A0} ，而不是 F_{A1} 。所以这里需要引入一个假想状态，也就是在这个管式反应器前面假设有两个反应器，如图 4 红色框线部分所示。

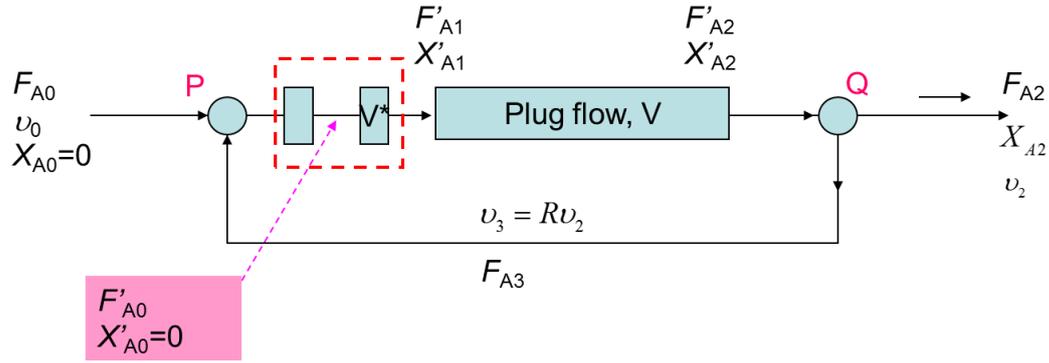


图 4 带有假想反应器的循环反应器模型

上图中，红色框线中左侧的反应器将循环回来的物流中所有的已转化了的 A 组分重新逆向转化为 A，而右侧反应器的输入则是 $X'_{A0} = 0$ 、 F'_{A0} 的物流。假设右侧反应器的体积为 V^* ，原循环反应器的体积为 V ，则对二者组成的系统进行分析，可以知道其设计方程为

$$\frac{V + V^*}{F'_{A0}} = \int_0^{X'_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} = \int_0^{X'_{A1}} \frac{dX_A}{-r_A} + \int_{X'_{A1}}^{X'_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

而

$$\frac{V^*}{F'_{A0}} = \int_0^{X'_{A1}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

因此

$$\frac{V}{F'_{A0}} = \int_{X'_{A1}}^{X'_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A}$$

此即循环反应器的设计方程。但上式中 X'_{A1} 、 X'_{A2} 、 F'_{A0} 均未知，因此需要先将这几个未知量求出。

显然，稳态时，从循环反应器流出的物流组分与最终的输出组分相同，即 $X'_{A2} = X_{A2}$ 。循环

物流 $F_{A3} = R F_{A2}$ ，而由 $X_{A2} = \frac{F_{A0} - F_{A2}}{F_{A0}}$ 可得 $F_{A2} = F_{A0}(1 - X_{A2})$ ，因此

$F_{A3} = R F_{A0}(1 - X_{A2})$ 。当将该部分循环物流中已经反应了的 A 再次转化为 A 的时候，该部

分物流流量为 $F'_{A3} = R F_{A0}$ 。因此，假想态的 F'_{A0} 为：

$$F'_{A0} = F_{A0} + F'_{A3} = (1 + R) F_{A0}$$

接下来计算 X'_{A1} ， X'_{A1} 的计算也要依据上述原则，即从循环中假想的 $X'_{A0} = 0$ 处开始计算。因此

$$X'_{A1} = \frac{F'_{A0} - F'_{A1}}{F'_{A0}} = \frac{(1+R)F_{A0} - [F_{A0} + RF_{A0}(1-X_{A2})]}{(1+R)F_{A0}} = \frac{R}{R+1} X_{A2}$$

将上述计算出来的三个未知量带入原设计方程中，得

$$\frac{V}{(1+R)F_{A0}} = \int_{\frac{R}{R+1}X_{A2}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{R X_{A2} - r_A}$$

即

$$\frac{V}{F_{A0}} = (1+R) \int_{\frac{R}{R+1}X_{A2}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{R X_{A2} - r_A}$$

该式即为理想管式循环反应器的设计方程。在反应的动力学已知、初始流量已知、出口转化率已规定好的情况下，给出循环比，则对应循环反应器体积可以依据上式求出。

三、循环反应器摩尔衡算汇总

计算中包含假想部分的循环反应器模型如图 4 所示。

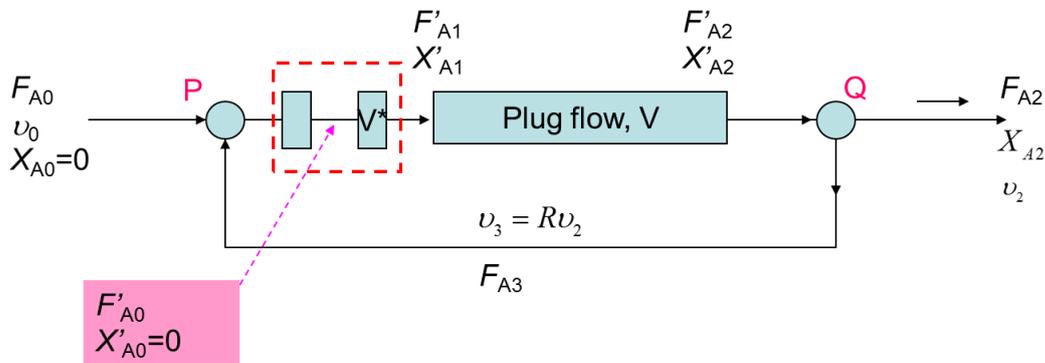


图 4 带假想反应器的循环反应器模型

其中主要位置的摩尔衡算汇总如下：

$$\begin{aligned} F'_{A1} &= F'_{A0}(1 - X'_{A1}) \\ F'_{A2} &= F'_{A0}(1 - X'_{A2}) = F'_{A0}(1 - X_{A2}) \\ F_{A2} &= F_{A0}(1 - X_{A2}) \\ F'_{A1} &= F_{A0} + F_{A3} = F_{A0} + RF_{A2} \\ F'_{A2} &= F_{A2} + F_{A3} = F_{A2} + RF_{A2} = (R+1)F_{A2} \end{aligned}$$

➤ 组合反应器

平推流反应器的串联



对串联的 N 个反应器而言

$$\frac{V_R}{F_{A0}} = \sum \frac{V_{Ri}}{F_{A0}} = \sum \int_{x_{A,i-1}}^{x_{A,i}} \frac{dx_A}{(-r_A)} = \int_0^{x_{An}} \frac{dx_A}{(-r_A)}$$

平推流反应器的并联

$$V_R = V_{R1} + V_{R2}$$

因为是并联操作，总物料体积流量等于各反应器体积流量之和：

$$V_0 = V_{01} + V_{02}$$

由平推流反应器的设计方程 $\tau = \frac{V_R}{V_0} = c_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{-r_A}$

尽可能减少返混是保持高转化率的前提条件，而只有当并联各支路之间的转化率相同时没有返混。如果各支路之间的转化率不同，就会出现不同转化率的物流相互混合，即不同停留时间的物流的混合，就是返混。因此，

$$\tau_1 = \tau_2, \quad V_{R1} : V_{R2} = V_{01} : V_{02} \quad \text{是应当遵循的条件}$$