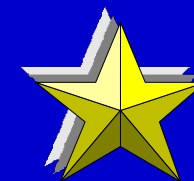




# 化学反应工程



郭锴 唐小恒 周绪美 编（化工出版社 第三版）

北京化工大学

学时：**48**

讲解：李建伟 [lijw@mail.buct.edu.cn](mailto:lijw@mail.buct.edu.cn)

工业催化与反应器研究室

综合楼A座 **531**

电话 **64436787**

# 0 绪论

---

- 一、何谓化学反应工程？
- 二、课程地位与任务
- 三、化学反应工程与其他核心课程的联系与区别
- 四、化学反应工程课程特点
- 五、化学反应工程的学习方法
- 六、课程讲解
- 七、化学反应工程学的发展
- 八、化学反应工程学的内容和分类
- 九、化学反应器放大方法
- 十、《化学反应工程》章节层次与学习方法

# 一、何谓化学反应工程？

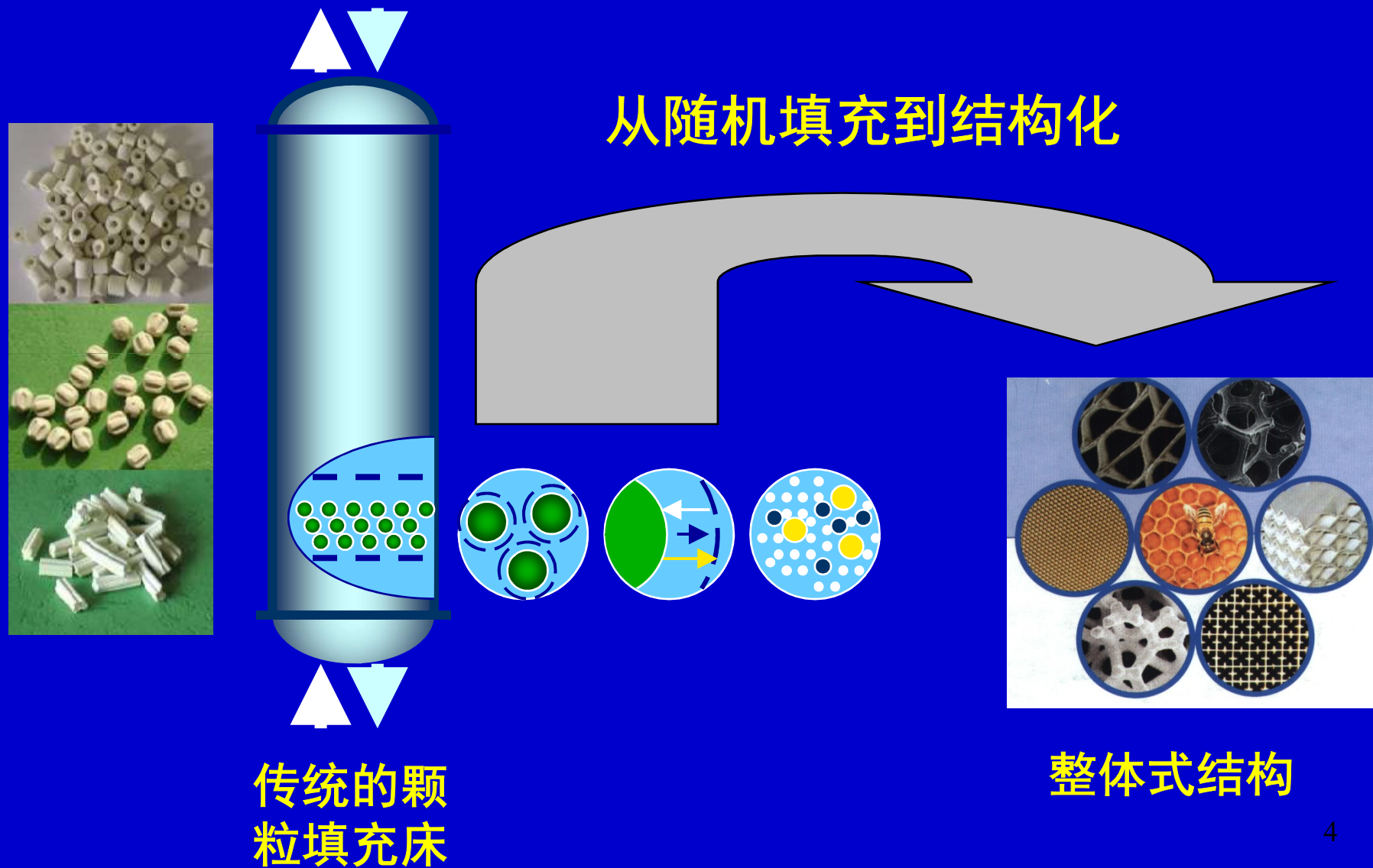
---

**典型反应：**无机化学反应、有机化学反应、酸碱中和、氧化还原反应、络合反应、聚合与分解反应

**基础化学：**中学化学、无机化学、有机化学、分析化学、物理化学（专业基础）

**共同特点：**理想条件下研究化学反应  
反应发生的条件、终结标志、历程、  
 $\text{NaOH} + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{NaHS} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}$   
什么条件下反应最快或较快

# 工业化过程涉及的问题



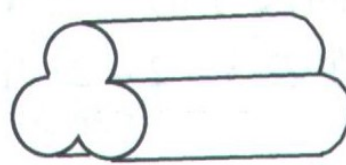
# 活性组分均匀分布型催化剂



球形



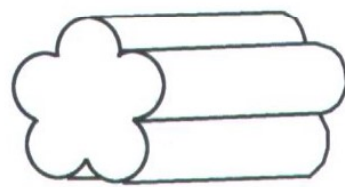
圆柱形



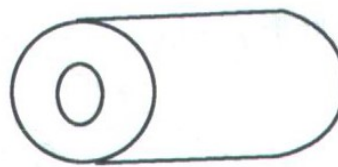
三叶形



四叶形



五叶形



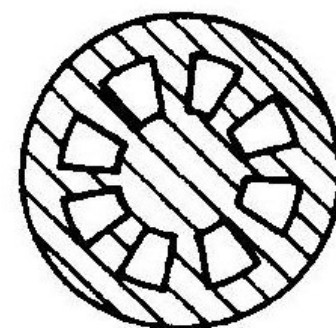
中空圆柱形



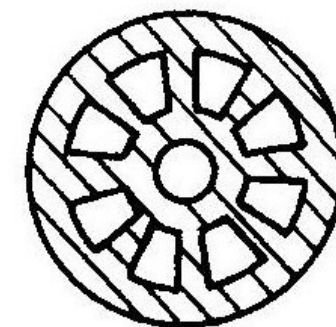
不对称四叶形



蝶形

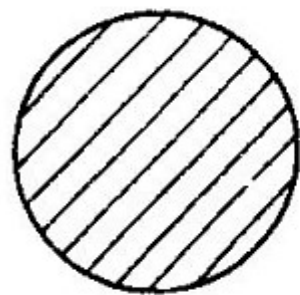


八筋车轮状截面催化剂

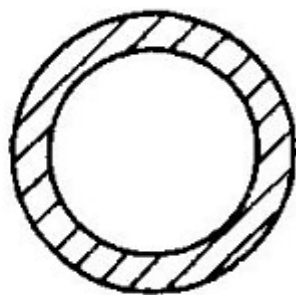


八筋舵轮状截面催化剂

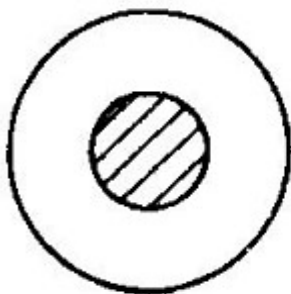
# 活性组分非均匀分布型催化剂



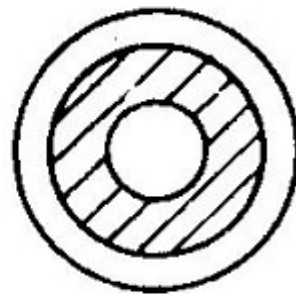
均匀分布



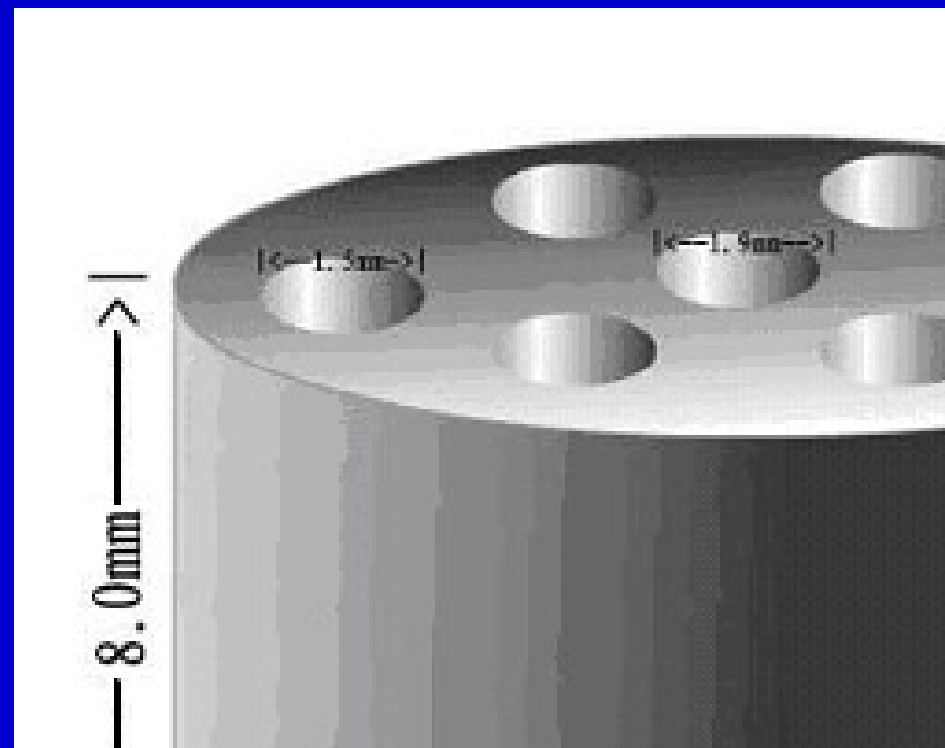
蛋壳型



蛋黄型



蛋白型



燕山YS-7型银催化剂外形图

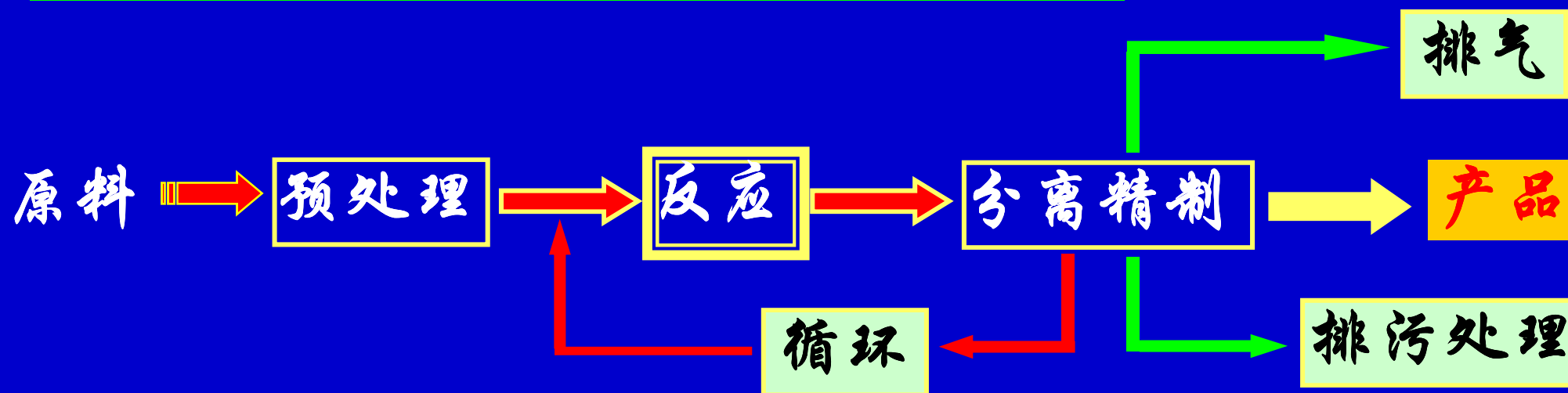
一个化学反应能够在实验室实现，并不等于能够在工业上实现，只有将其在工业规模上实现，才能创造价值。

- ※ **工业过程：物理过程（工程学科）和化学反应过程（化学学科）的综合——工程问题（化学和工程学科的综合）。**
- ※ 对于已经在实验室中实现的化学反应，如何将其在工业规模实现是化学反应工程学的主要任务。
- ※ 化学反应工程是一门研究化学反应工程问题的科学。属于交叉性的边缘学科。

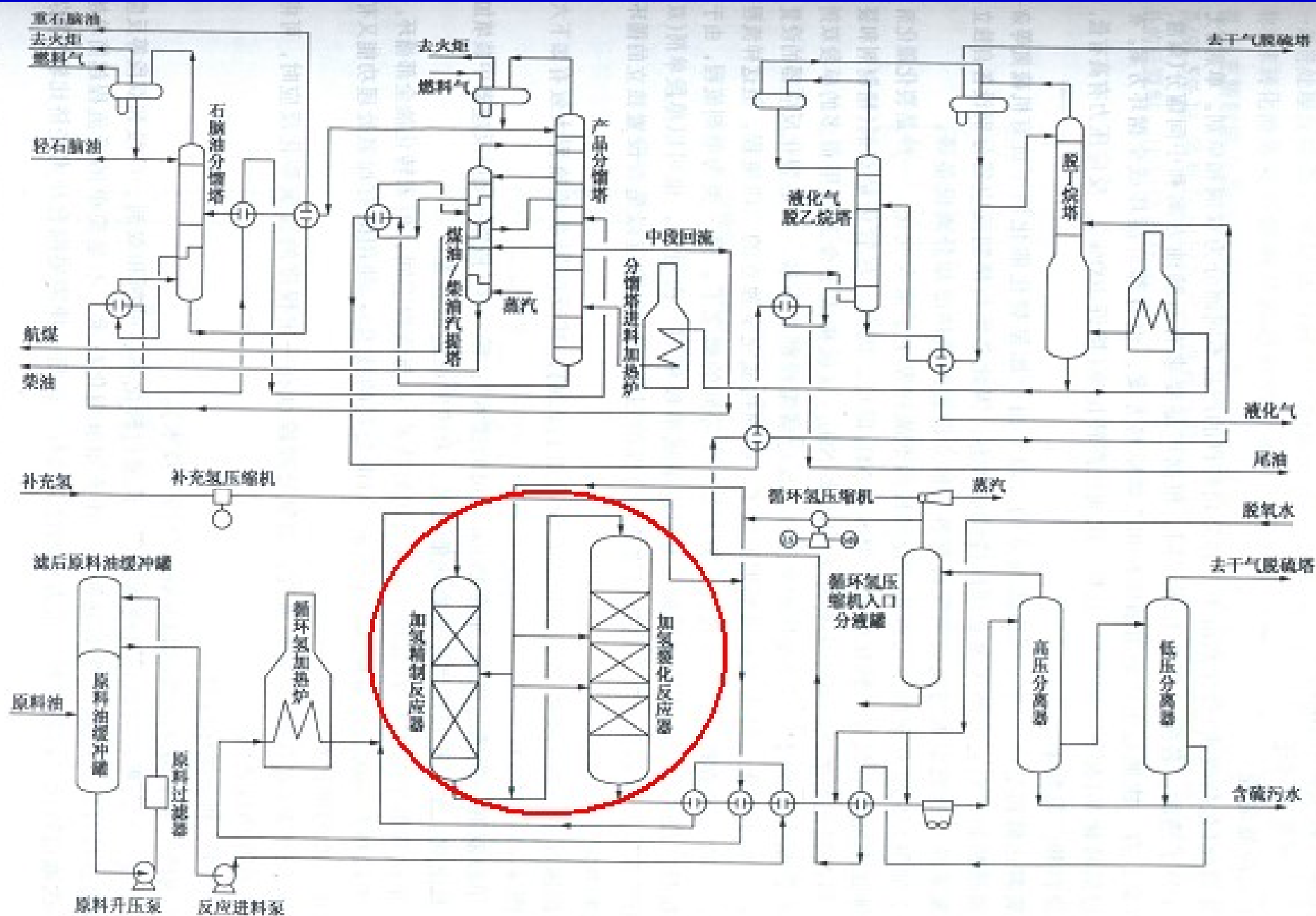
化工生产共同  
点：原料借助于化  
学反应转化为产品

传递过程与反应动力学（过程）（简称三传一反）是构成化学反应工程问题最基本的两个方面，两者的有机结合上升为工业反应过程，成为反应工程研究中最活跃的组成部分

化学反应过程是化工生产的核心







燕山石化公司中压加氢裂化装置流程

**工业规模反应过程：**物理和化学过程共存、相互影响、相互渗透  $\Rightarrow$  影响工业过程反应行为

**物理过程：**不改变动力学规律，但引起时间和空间位置上温度、压力和物料浓度的差异与分布，从而影响工业反应过程的最终结果。**物理过程包括：**流体流动与返混、传质过程、传热过程

**化学反应工程的实质：**将化学动力学领域的化学反应规律和化学工程领域的物理过程规律汇总、研究、抽象和提炼出一些重要的反应工程理论，为反应器设计、优化操作和确定最优化操作条件服务

## 二、课程地位与任务

### ◆ 课程地位

化学反应工程属专业理论课程（学位课）  
是化工类专业不可缺少的主干课程

“三传一反”——化工原理，传递工程

### ◆ 课程任务

- ※ 使学生掌握化工生产中的关键过程——化学反应过程的基础理论和基础知识
- ※ 培养学生具体分析、计算和解决化工生产中有关化学反应的实际问题的能力

### 三、化学反应工程与其它核心课程的联系与区别

---

---

化学反应方向与限度——化工热力学

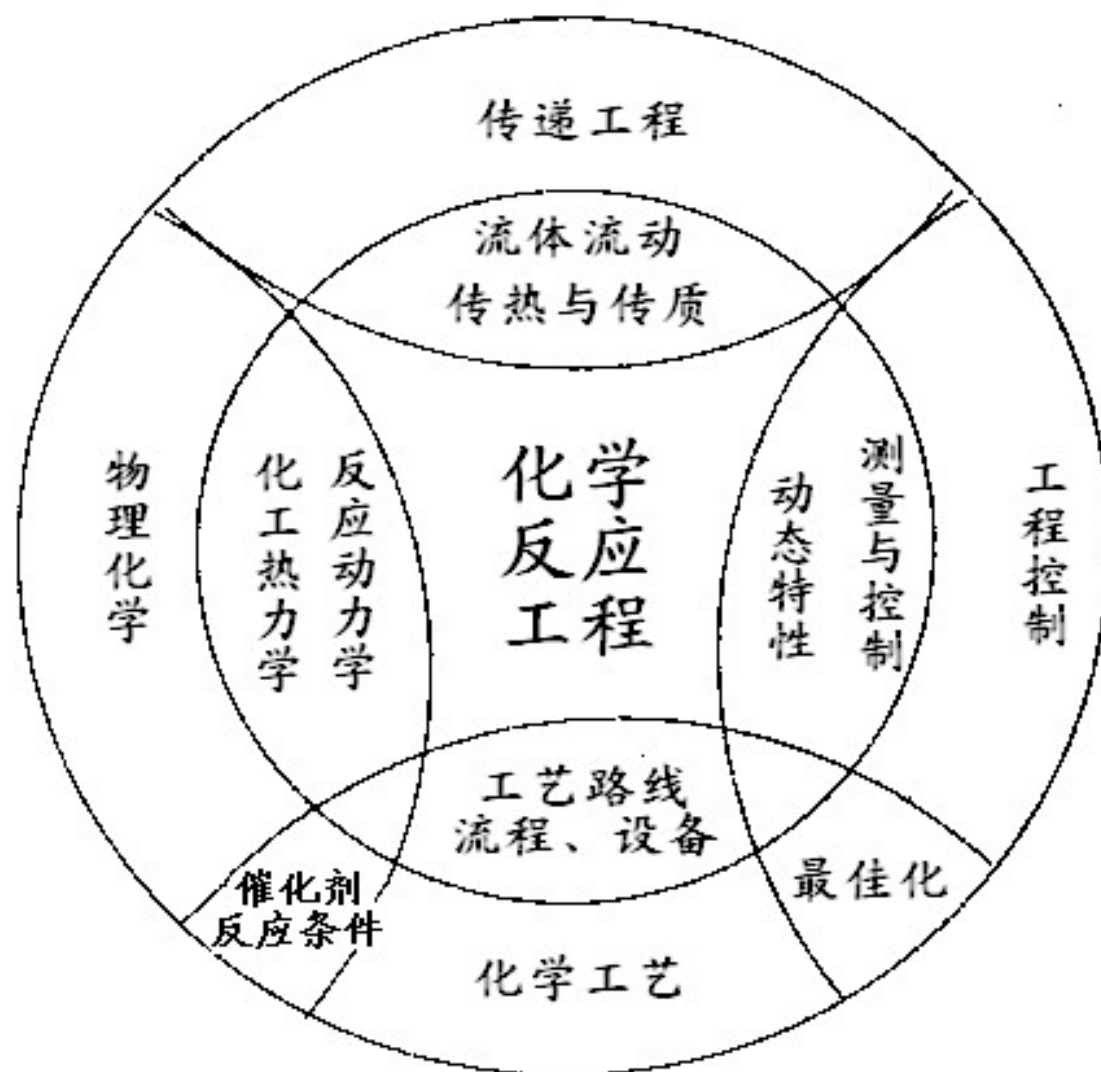
反应历程与速率极限——物理化学

反应器内物流流动与传递——传递过程原理

反应器操作——化工原理—单元操作

反应器设计与操作优化——数学、计算机

# 化学反应工程与相邻学科的关系



# 化学反应工程学的任务

---

- ◆ 现有反应技术与设备的强化和改进  
——达到优质、高产、低消耗的目的
- ◆ 开发新的反应技术和设备
- ◆ 指导和解决反应过程开发中的放大问题
- ◆ 实现反应过程的最优化
- ◆ 发展和完善化学反应工程学的理论和方法

## 四、化学反应工程课程特点

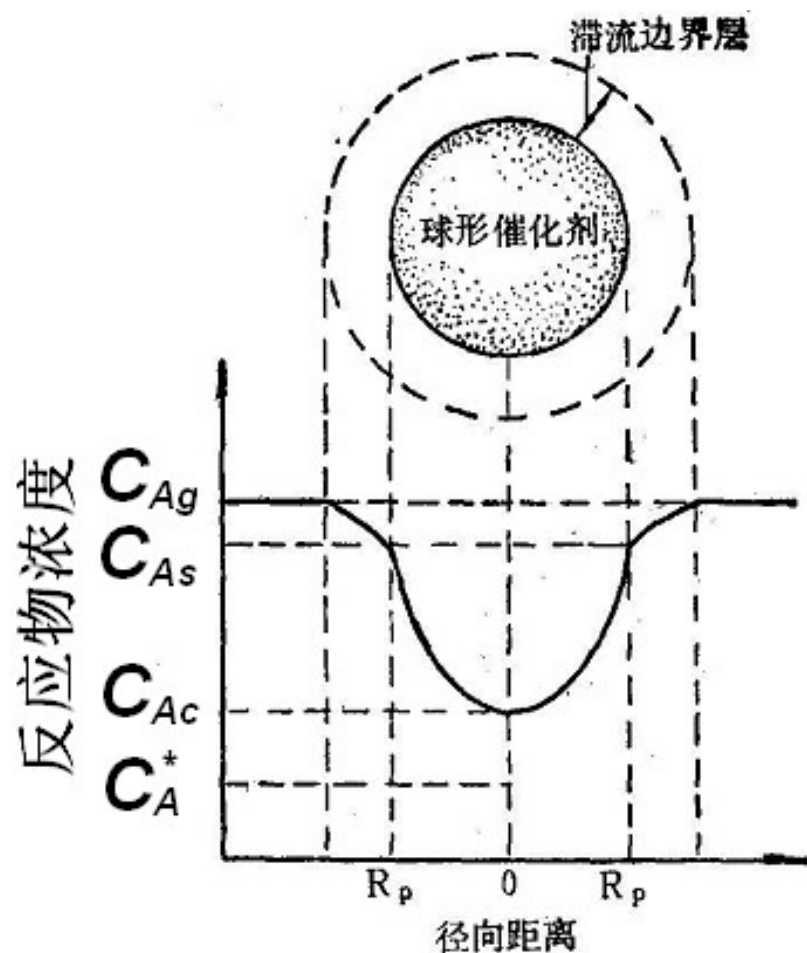
### (1) 抽象

研究的问题许多是看不见、摸不到的，且多为宏观过程的综合

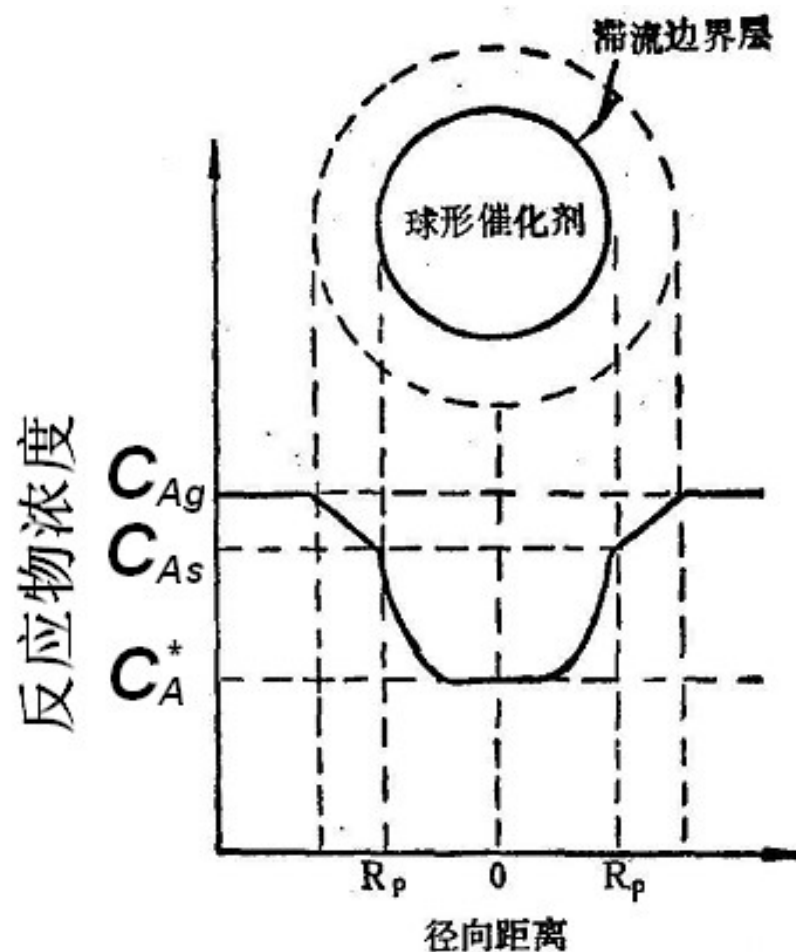
eg. 催化剂颗粒内的温度、浓度分布；催化剂表面上的吸附组成与吸附量。不同于物理化学的直接测定（**BET**  $\text{N}_2$ 吸附量测定）、化学反应现象的直接观察

化学反应工程研究需要抽象思维和逻辑推理，正确的学习方法极其重要

## 多相催化过程中的物理传递现象及其描述



球形催化剂中反应物 A 的浓度分布



球形催化剂中存在死区时反应物 A 的浓度分布



## (2) 内在关系复杂

化学反应和物理过程交织进行（耦合），相互影响和制约，描述困难（建模），数学推导复杂，求解难度大（非线性和高度非线性问题多）

## (3) 反应种类多、差异大

不同类型的反应过程，研究方法不尽相同

如何进行化学反应工程的学习和掌握其研究方法？

## 五、化学反应工程的学习方法

目的：建立基本的工程概念，掌握研究化学反应工程问题的基本方法

(1) 学习中要贯穿抓反应类型，理解物理因素，归结于最终目标这一路线

### ◆ 反应类型

- ※ 均相反应、气—固催化反应、气—液反应、流固非均相反应等
- ※ 动力学（本征、宏观）、过程描述、反应器

## ◆ 物理因素

传递过程（热量、质量和动量传递）

颗粒内、外扩散

流动问题—流速分布、返混

## ◆ 最终目标

过程（工程）反应动力学、宏观速率

选择性

反应器分析、设计与优化等

常规的物料、热量衡算方法，微分运算等

$$\sum_i \text{输入} - \sum_i \text{输出} = \sum_i \text{积累} + \sum_i \text{反应}$$

(2) 着重掌握其大概念 (工程概念) 力

## 六、课程讲解

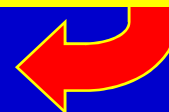
尽量按课本顺序进行

着重基本概念

基本推导

基本运算

传递 + 反应 + 流动 (反应器 - 宏观)



## 七 化学反应工程学的发展

◆ 1957年在荷兰首都阿姆斯特丹召开的国际会议上，正式确认“化学反应工程学”（**Chemical Reaction Engineering**）这一科学的名称

含盖的主要内容：

✘ 化学反应宏观动力学

✘ 连续流动反应器内物料的返混作用与停留时间分布

✘ 化学反应器的热稳定性

✘ 反应过程的最佳化

◆ 1957后，每四年召开一次欧洲化学反应工程学术会议

◆ 1970年在华盛顿召开第一次国际化学反应工程学术讨论会，该学科正式走入新兴学科的舞台

# 课程开设

- ※ 20世纪60年代开始，欧美发达国家将化学反应工程设置为化学工程系的独立课程，为本科四年级或研究生开设
- ※ 我国20世纪70年代末高考制度恢复后才开始普遍开设
- ※ 现国内外化学反应工程专著70余种，我国10余种（均为80年代末期以后出版）

## 八 化学反应工程学的内容和分类

### (1) 化学反应工程学的主要内容

围绕反应器进行三传一反的研究，既有化学反应过程，又有物理过程

#### ※1 化学反应动力学特性的研究

不计及物理过程的（反应）机理及动力学特性研究，重要的是建立动力学模型（方程），为反应器分析、设计、催化剂工程等提供基础工具

**本征动力学：**研究反应分子间的反应机理和反应速率的化学动力学称为～。

## ※2 流动、传递过程对反应的影响

流动和传递过程通过对反应场所浓度、温度和压力等在时间、空间上分布的影响，对整体反应效果（过程）产生影响。实际为宏观动力学的范畴。

**宏观动力学：**研究工业规模化学反应器中化学反应与质量、热量、动量传递同时进行的化学反应与物理变化过程综合的过程动力学称为～。

## ※3 反应器设计计算、过程分析和最优化

将反应动力学特性（宏观）与流动、传递过程规律结合起来研究，为工业反应器优化设计和过程优化控制建立可靠的理论和工具基础。重要的是建模和计算机的使用



## (2) 化学反应工程学的分类

### 1) 按反应系统涉及的相态分类

#### ◆ 均相反应

- ※ 气相均相反应—烃类热裂解制乙烯
- ※ 液相均相反应—水解反应

#### ◆ 非均相反应

- ※ 气固相—氨的合成
- ※ 气液相—吸收
- ※ 液固相—还原、离子交换
- ※ 气液固三相—加氢裂解精制
- ※ 固固相—水泥、电石制备

## 2) 按反应器操作方式分类

- ◆1 间歇操作
- ◆2 连续式操作
- ◆3 半间歇式操作—石灰水吸收 $\text{CO}_2$ ，氯化

## 3) 按反应器形式分类

- ◆1 管式反应器 ( $L/d > 30$ )
- ◆2 槽（釜）式反应器 ( $h/d = 1 \sim 3$ )
- ◆3 塔式反应器 ( $h/d = 3 \sim 30$ )

- 
- ✖ 固定床—甲醇合成
  - ✖ 流化床—丙烯氨氧化制丙烯腈、奈氧化制苯酐
  - ✖ 移动床—煤气化、催化裂化、矿石焙烧
  - ✖ 滴流床、涓流床—气液固三相反应器  
焦油加氢精制、加氢裂解、丁炔二醇加氢
  - ✖ 反应精馏、萃取精馏等

## 4) 按传热条件分类

◆1 等温反应器

◆2 绝热反应器

◆3 非等温非绝热反应器

## 5) 按流体流动状态分类

理想流动反应器、非理想流动反应器

---

## (3) 化学反应工程学的研究方法

### ◆1 逐级经验放大 (模型试验)

※1 通过小试确定反应器型式

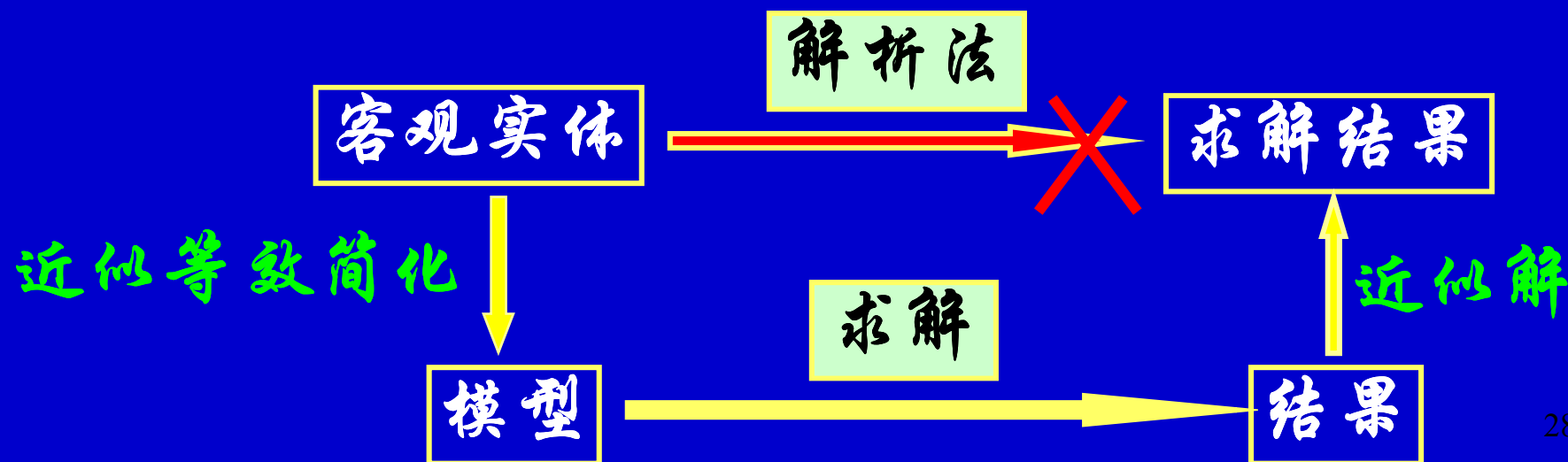
※2 通过小试确定工艺条件

※3 通过逐级中试考察几何尺寸的影响，直至工业规模

## ◆2 解析法

## ◆3 模型法（重点内容）

**模型法（数学模型化法）**：基于对所考察反应过程一定深度的理解，简化/构化出与反应相关的各参数之间的相对关系，并以适当的方式描述。其中心问题是抓住主要矛盾，对复杂过程简化处理，建立数学模型。



## ◆1 模型法的总体要求

- ※ 不失真
- ※ 能满足应用
- ※ 适合现有试验条件，以便进行模型鉴别和参数估值
- ※ 适应计算机的运算能力

## ◆2 模型法的程序

- ※ 建立简化物理模型—方便数学描述
- ※ 建立数学模型—方程、初始和边界条件
- ※ 用模型方程讨论客观实体的特性规律

**化工数学模型：**用数学方法描述工业反应器中各个参数之间的相互关系，这种数学表达式称为～。

### ◆3 化学反应工程中用模型法进行开发的步骤

※1 小型实验—研究化学反应规律

※2 反应器类型的适宜选择

※3 大型冷模实验

※4 计算机模拟实验

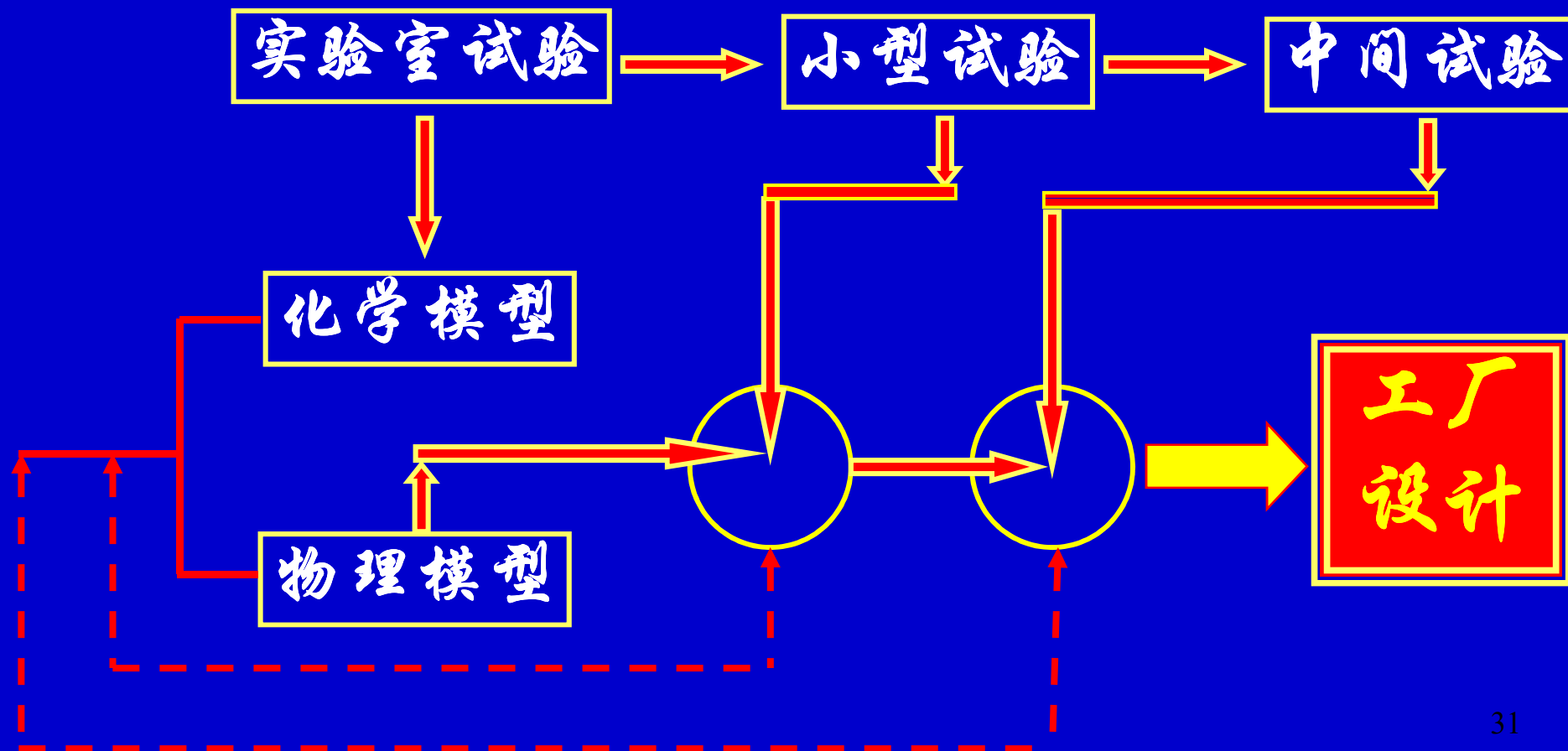
※5 热模实验

※6 工业反应器设计

## 本课程沿模型法思路学习

## 九、化学反应器放大方法

- ◆ 实验放大;
- ◆ 相似放大;
- ◆ 准数放大;
- ◆ 模型化放大



## 参考书

- ※1 化学与催化反应工程李绍芬 化工出版社
- ※2 化学反应工程（2<sup>th</sup>，3<sup>th</sup>），朱丙辰，化工出版社
- ※3 基本有机化工反应工程，邹仁鋆， 化工出版社
- ※4 **Chemical Reaction Engineering 3th Edition By O.Levenspiel**
- ※5 反应器分析与设计，**G.F.Froment**，化工出版社  
（中译本）
- ※6 化学反应工程，陈甘棠，化工出版社
- ※7 化学反应工程简明教程，姜信真，西北大学出版社





**搅拌釜式反应器**



**邻二甲苯氧化制苯酐多管式固定床反应器**





## 乙苯加氢气液塔式反应器



轻油裂解制乙烯管式非催化反应器





# 催化裂化流化床反应器





## 十、《化学反应工程》章节层次与学习方法

---

### 模型化层次分类:

- ◆ 化学反应本身特性研究，工业反应器内传递、流动特性研究

- ◆ 反应器内流动、传递和化学反应耦联关系

#### (一) 动力学层次

- ◆ 微观（本征）动力学：解决化学反应速率问题，难以理论计算，须借助于实验完成

- ◆ 宏观动力学：多数工业反应均为非均匀过程

## （二）工业反应器的设计与计算

反应场所、条件的变化对反应物种的流体力学、热力学状态、化学反应特性影响很大（氢脆、氮脆）。不同类型的化学反应器具有不同的反应工程特性。

### 基础化学反应器类型：

- ◆ 管式流动反应器  $\Rightarrow$  理想置换 (**PFR**)
- ◆ 搅拌釜式反应器  $\Rightarrow$  理想混合 (**CSTR**)
- ◆ 搅拌间歇反应器  $\Rightarrow$  均匀混合 (**BR**)

其它反应器均可视为上述反应器的不同级别的组合



# （三）各类反应过程的学习方法

层次上：

- ◆ 基础动力学 —— 本征动力学
- ◆ 综合动力学 —— 宏观动力学
- ◆ 化学反应器 —— 分析与设计（概念性的）

类别上（由易到难）：

- ◆ 均相反应
- ◆ 两相（气—固/气—液）催化反应
- ◆ 多相（气/液/固）催化/非催化反应（不讲）
- ◆ 复合型（反应精馏）（不讲）
- ◆ 反应器热稳定性和灵敏性分析