

## Applications of Chemical Software

### 化工软件应用

#### Simulation Design of Chemical Reactors

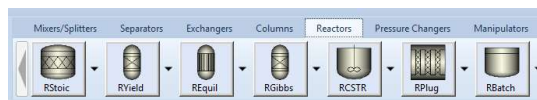
#### 反应器单元的仿真设计

桂霞  
南京工业大学

1

## 4.1 反应器单元模拟概述

- Aspen Plus根据不同的反应器形式，提供了七种不同的反应器模块。



- 这七种反应器模块可以划分为三大类：
  - 生产能力反应器，(RStoic, RYield)；
  - 热力学平衡类反应器 (REquil, RGibbs)；
  - 化学动力学反应器 (RCSTR, RPlug, RBatch)。

南京工业大学

第 2 页

2

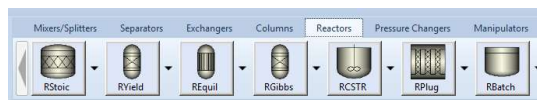
## 4.1 反应器单元模拟概述

模块	说明	功能	适用对象
RStoic	化学计量反应器	规定反应程度和转化率的化学计量反应器模块	反应动力学数据未知或不重要，但化学计量系数和反应程度已知的反应器
RYield	产率反应器	规定产率反应器模块	化学计量系数和反应动力学数据未知或不重要，但产率分布已知的反应器
REquil	平衡反应器	通过化学计量系数计算实现化学平衡和相平衡	化学平衡和相平衡同时发生的反应器和相平衡
RGibbs	吉布斯反应器	通过Gibbs自由能最小实现化学平衡和相平衡	化学平衡和相平衡同时发生的反应器，对固体溶液和汽-液-固系统计算相平衡
RCSTR	全混釜反应器	模拟全混釜反应器	带反应速率控制和平衡反应的单相、两相或三相全混釜反应器
RPlug	平推流反应器	模拟平推流反应器	带反应速率控制的单相、两相或三相平推流反应器
RBatch	间歇式反应器	模拟间歇式或半间歇式反应器	带反应速率控制的单相、两相或三相间歇或半间歇的反应器

3

## 4.2 生产能力类反应器

- Aspen Plus根据不同的反应器形式，提供了七种不同的反应器模块。



- 这七种反应器模块可以划分为三大类：
  - 生产能力反应器，(RStoic, RYield)；
  - 热力学平衡类反应器 (REquil, RGibbs)；
  - 化学动力学反应器 (RCSTR, RPlug, RBatch)。

南京工业大学

第 4 页

4

## 4.2 生产能力类反应器

由用户指定生产能力，不考虑热力学可能性和动力学可行性。

包含两种反应器。

### 1、化学计量反应器 (RStoic)

Stoichiometric Reactor

### 2、产率反应器 (RYield)

Yield Reactor

南京工业大学

第 5 页

5

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

**性质：**按照化学反应方程式中的计量关系进行反应，有并行反应和串联反应两种方式，分别指定每一反应的转化率或产量。

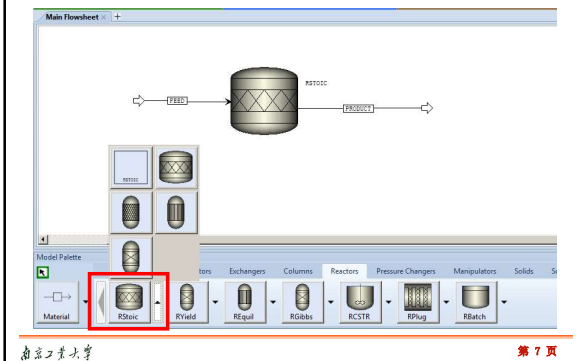
**用途：**已知化学反应方程式和每一反应的转化率或产量；化学平衡数据和动力学数据未知或不重要的反应器；产品的选择性和反应热。

南京工业大学

第 6 页

6

#### 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



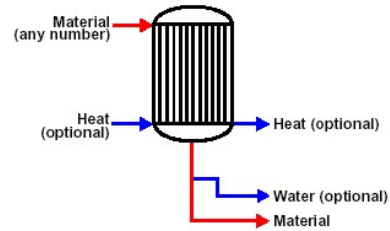
南京工业大学

第 7 页

7

#### 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

**RStoic模块的连接图如下:**



南京工业大学

第 8 页

8

#### 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

- 用化学计量反应器RStoic模拟计算时, 需要规定反应器的**操作条件**, 并选择反应器的**闪蒸计算相态**;
- 还需要规定在反应器中发生的反应, 对每个反应必须规定**化学计量系数**, 并分别指定每一个反应的**转化率**或**产品流率**。

南京工业大学

第 9 页

9

#### 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

**RStoic 模块有七组模型参数:**

- 1、**模型设定** (Specifications)
- 2、**化学反应** (Reactions)
- 3、**燃烧** (Combustion)
- 4、**反应热** (Heat of Reaction)
- 5、**选择性** (Selectivity)
- 6、**粒度分布** (PSD)
- 7、**组分属性** (Component Attr.)

南京工业大学

第 10 页

10

#### 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

##### 1、模型设定(Specifications)

包括**操作条件**和**有效相态**。

##### ➢ 操作条件 (Operation Conditions)

- (1) 压力 (Pressure)
- (2) 温度/热负荷 (Temperature/Heat duty)

##### ➢ 有效相态 (Valid Phases)

汽 / 液 / 固 / 汽-液 / 汽-液-液  
/ 液-游离水 / 汽-液-游离水

南京工业大学

第 11 页

11

#### 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



南京工业大学

第 12 页

12

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

### 2、化学反应 (Reactions)

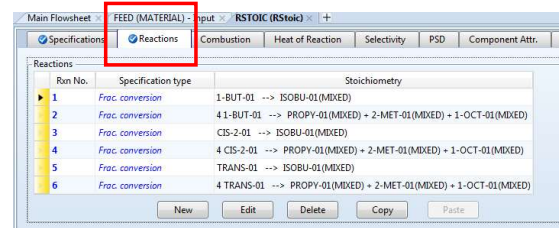
定义RStoic中进行的每一个化学反应的编号、化学计量关系、产物生成速率或反应物转化率。并指明计算多个反应的转化率时是否按照串联反应方式计算。

南京工业大学

第 13 页

13

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



需要规定在反应器中发生的所有反应。

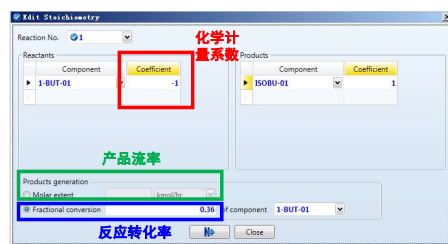
南京工业大学

第 14 页

14

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

定义每个反应时，必须规定化学计量系数，并分别指定每一个反应的转化率或产品流率。

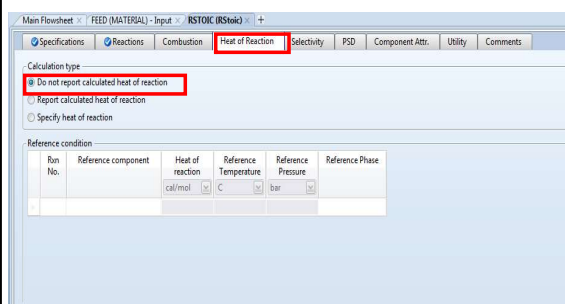


南京工业大学

第 15 页

15

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



南京工业大学

第 16 页

16

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

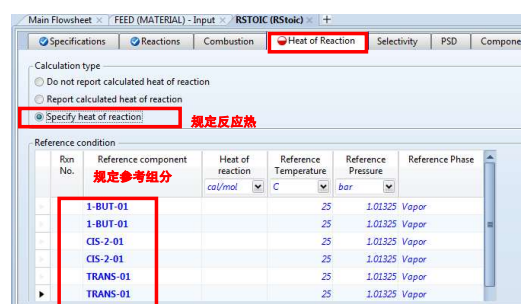


南京工业大学

第 17 页

17

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



南京工业大学

第 18 页

18

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

### 5、选择性 (Selectivity)

计算对于选定组分的选择性，其定义为：

$$S_{P,A} = \frac{[\Delta P / \Delta A]_{real}}{[\Delta P / \Delta A]_{ideal}}$$

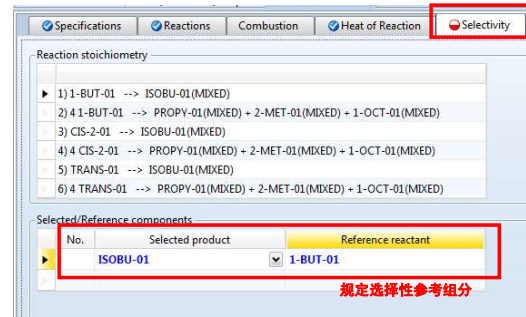
$\Delta P$ 代表选定组分 (selected) P的生成摩尔数；  
 $\Delta A$ 代表参照组分 (reference) A的消耗摩尔数；  
real 代表反应器内的实际情况；  
ideal 代表只有 A→P 一个反应发生时的情况。

南京工业大学

第 19 页

19

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



南京工业大学

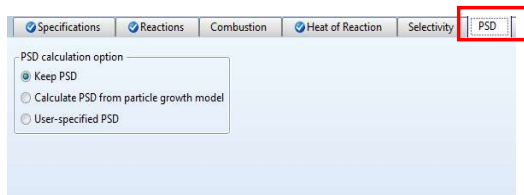
第 20 页

20

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

### 5、粒度分布 (PSD)

当反应生成固体或固体改变时，可以分别在Attr.页面和PSD页面规定组分属性和粒子的尺寸分布。



南京工业大学

第 21 页

21

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

**例4.1** 用化学计量反应器RStoic模拟1-丁烯的异构化反应，涉及到的反应及转化率如下表所示。进料温度为16°C，压力为196kPa，进料中正丁烷 (N-BUTANE)、1-丁烯 (1-BUTENE)、顺-2-丁烯 (CIS-2BUT)、反-2-丁烯 (TR-2BUT)、异丁烯 (ISOBUT) 的流率分别为35000kg/hr、10000kg/hr、4500kg/hr、6800kg/hr、1450kg/hr，反应器的温度为400°C，压力为196kPa。物性方法选用RK-SOAVE。

南京工业大学

第 22 页

22

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

问：①每个反应的反应热是多少？②异丁烯对1-丁烯的选择性是多少？

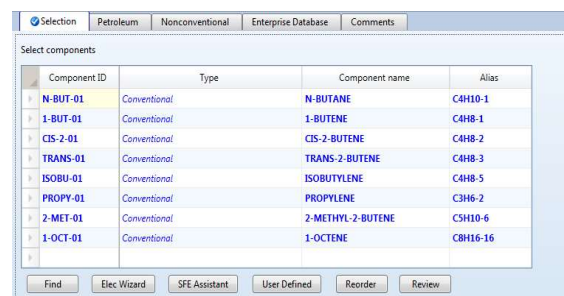
反应	转化率
1-BUTENE→ISOBUT	0.36
4(1-BUTENE)→PROPYLEN+2MET2BUT+1-OCTENE	0.04
CIS-2BUT→ISOBUT	0.36
4(CIS-2BUT)→PROPYLEN+2MET2BUT+1-OCTENE	0.04
TR-2BUT→ISOBUT	0.36
4(TR-2BUT)→PROPYLEN+2MET2BUT+1-OCTENE	0.04

南京工业大学

第 23 页

23

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

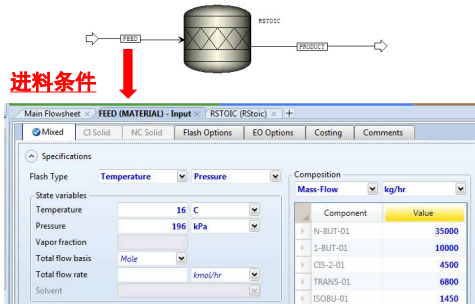


南京工业大学

第 24 页

24

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



**进料条件**

Specifications

Flash Type: Temperature, Pressure

State variables: Temperature 16 C, Pressure 196 kPa, Vapor fraction Mole, Total flow basis kmol/hr, Solvent

Composition: Mass-Flow, kg/hr

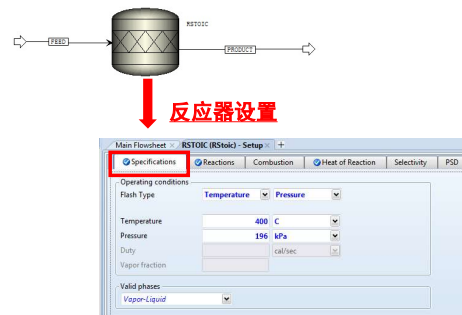
Component	Value
N-BUT-01	35000
1-BUT-01	10000
CIS-2-01	4500
TRANS-01	6800
ISOBUT-01	1450

南京工业大学

第 25 页

25

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



**反应器设置**

Specifications

Operating conditions: Flash Type: Temperature, Pressure

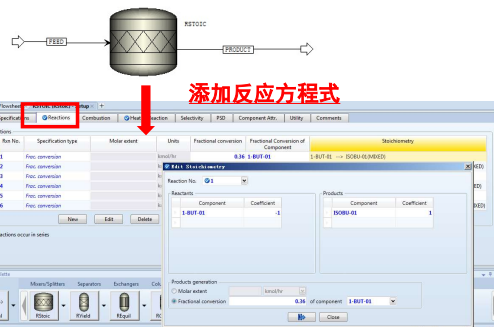
Temperature 400 C, Pressure 196 kPa, Duty cal/sec, Vapor fraction, Valid phases Vapour-Liquid

南京工业大学

第 26 页

26

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



**添加反应方程式**

Reactions

Reaction No. 1, Specification type: Molar extent, Units: kmol/hr, Fractional conversion: 0.36, Fractional Conversion of Component: 1-BUT-01

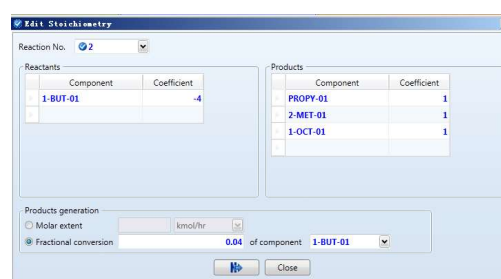
Stoichiometry: 1-BUT-01 -> ISOBUT-01

南京工业大学

第 27 页

27

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



Edit Stoichiometry

Reaction No. 2

Reactants: 1-BUT-01, Coefficient: -1

Products: PROPY-01 (1), 2-MET-01 (1), 1-OCT-01 (1)

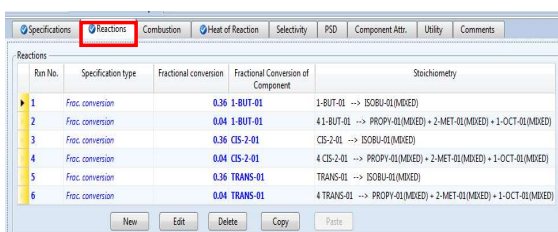
Products generation: Molar extent, Fractional conversion 0.04 of component 1-BUT-01

南京工业大学

第 28 页

28

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



Reactions

Run No.	Specification type	Fractional conversion	Fractional Conversion of Component	Stoichiometry
1	Frac. conversion	0.36	1-BUT-01	1-BUT-01 -> ISOBUT-01(MIXED)
2	Frac. conversion	0.04	1-BUT-01	41-BUT-01 -> PROPY-01(MIXED) + 2-MET-01(MIXED) + 1-OCT-01(MIXED)
3	Frac. conversion	0.36	CIS-2-01	CIS-2-01 -> ISOBUT-01(MIXED)
4	Frac. conversion	0.04	CIS-2-01	4 CIS-2-01 -> PROPY-01(MIXED) + 2-MET-01(MIXED) + 1-OCT-01(MIXED)
5	Frac. conversion	0.36	TRANS-01	TRANS-01 -> ISOBUT-01(MIXED)
6	Frac. conversion	0.04	TRANS-01	4 TRANS-01 -> PROPY-01(MIXED) + 2-MET-01(MIXED) + 1-OCT-01(MIXED)

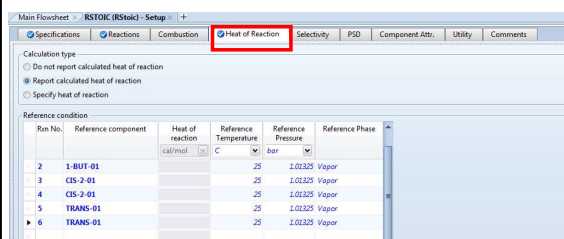
**反应方程式**

南京工业大学

第 29 页

29

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



Heat of Reaction

Calculation type: Report calculated heat of reaction

Reference conditions:

Run No.	Reference component	Heat of reaction cal/mol	Reference Temperature C	Reference Pressure bar	Reference Phase
2	1-BUT-01	25	1.01325	Vapor	
3	CIS-2-01	25	1.01325	Vapor	
4	CIS-2-01	25	1.01325	Vapor	
5	TRANS-01	25	1.01325	Vapor	
6	TRANS-01	25	1.01325	Vapor	

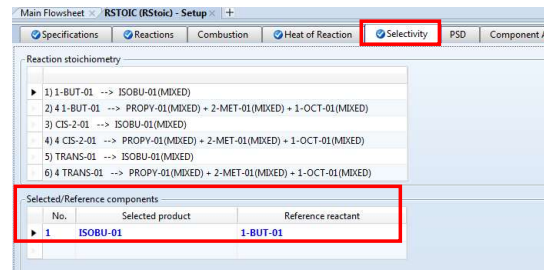
**反应热计算**

南京工业大学

第 30 页

30

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)



设置反应选择性

南京工业大学

第 31 页

31

## 4.2.1 化学计量反应器 (RStoic)

Run No.	Reaction extent kmol/hr	Heat of reaction cal/mol	Reference component	Stoichiometry
1	64.1625	-3964.81	1-BUT-01	1-BUT-01 --> ISOBUT-01
2	1.78229	-6076.08	1-BUT-01	4 1-BUT-01 --> PROPY-01 + 2-MET-01 + 1-OCT-01
3	28.8731	-2314.4	CIS-2-01	CIS-2-01 --> ISOBUT-01
4	0.802032	-4425.67	CIS-2-01	4 CIS-2-01 --> PROPY-01 + 2-MET-01 + 1-OCT-01
5	43.6305	-1454.55	TRANS-01	TRANS-01 --> ISOBUT-01
6	1.21196	-3565.82	TRANS-01	4 TRANS-01 --> PROPY-01 + 2-MET-01 + 1-OCT-01

查看各个反应反应热

No.	Selectivity	Selected product	Reference reactant
1	1.917	ISOBUT-01	1-BUT-01

异丁烯对1-丁烯的选择性

南京工业大学

第 32 页

32

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

**性质:** 根据每一种产与输入物流间的产率关系进行反应，只考虑总质量平衡，不考虑元素平衡。

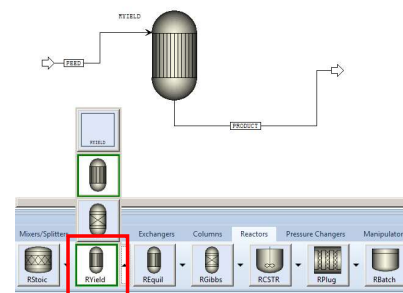
**用途:** 模拟化学计量系数和反应动力学数据未知或不重要的反应，但需要已知反应产物的产率分布。

南京工业大学

第 33 页

33

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)



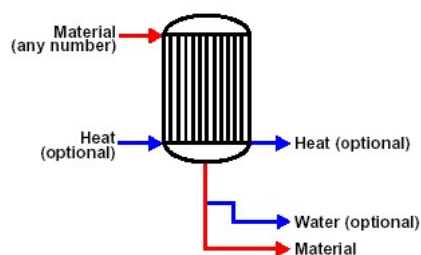
南京工业大学

第 34 页

34

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

RYield模块的连接图如下:



南京工业大学

第 35 页

35

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

RYield 模块有六组模型参数:

- 1、模型设定 (Specifications)
- 2、产率 (Yield)
- 3、闪蒸选项 (Flash Options)
- 4、粒度分布 (PSD)
- 5、组分属性 (Comp. Attr.)
- 6、组分映射 (Comp. Mapping)

南京工业大学

第 36 页

36



## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

### 1、模型设定(Specifications)

包括操作条件和有效相态。

#### ➤ 操作条件 (Operation Conditions)

- (1) 压力 (Pressure)
- (2) 温度/热负荷 (Temperature/Heat duty)

#### ➤ 有效相态 (Valid Phases)

汽 / 液 / 固 / 汽-液 / 汽-液-液  
/ 液-游离水 / 汽-液-游离水

南京工业大学

第 37 页

37

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

南京工业大学

第 38 页

38

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

### 2、产率 (Yield)

产率设置有四个选项：

- 组分产率 (Component yields)
- 组分映射 (Component mapping)
- 石油馏分表征 (Petro characterization)
- 用户子程序 (User subroutine)

南京工业大学

第 39 页

39

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

当选择组分产率选项时，对于反应产物中的每一个组分进行产率规定。

计算的产率基于每单位质量的总进料被圆整，以维持整体的物料平衡，因此产率规定只是建立了一个产率分布，而不是绝对产率。

南京工业大学

第 40 页

40

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

当规定了惰性组分  
(Inert Components)  
后，产率是以单位质量的  
非惰性进料为基础计算的

南京工业大学

第 41 页

41

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

当选择组分映射选项时，需在Comp. Mapping页面设置各种结合 (Lump) 反应和分解 (De-lump) 反应所涉及的组分之间的定量关系。

当反应生成固体或固体改变时，可以在Comp. Attr.页面和PSD页面分别规定它们的组分属性和粒子尺寸。

南京工业大学

第 42 页

42

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

**例4.2** 已知反应 $\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$ ，进料中甲烷、水蒸汽的流率分别为20kmol/hr、80kmol/hr，进料温度为750℃，压力为0.1013MPa。反应在恒温恒压条件下进行，温度、压力与进料相同，反应器出口物流中 $\text{CH}_4:\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{H}_2$ 的摩尔比为1:6:1:4。物性方法选用PENG-ROB。

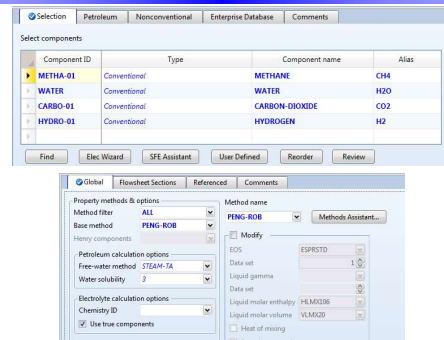
问反应器热负荷为多少？ $\text{CO}_2$ 和 $\text{H}_2$ 的流率分别为多少？

南京工业大学

第 43 页

43

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

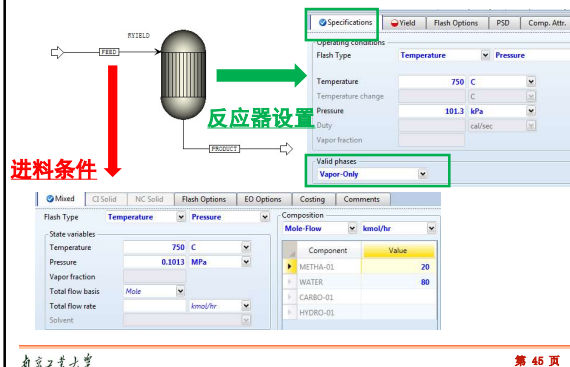


南京工业大学

第 44 页

44

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

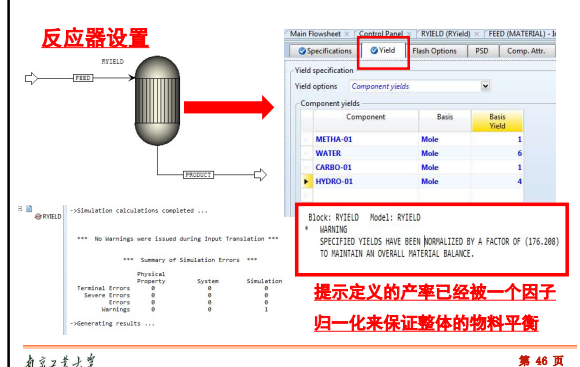


南京工业大学

第 45 页

45

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)



南京工业大学

第 46 页

46

## 4.2.2 产率反应器 (RYield)

Summary			
Outlet temperature	750 C		
Outlet pressure	0.1013 bar		
Heat duty	529.821 kW		
Net heat duty	529.821 kW		
Vapor fraction	1		
1st liquid / Total liquid			

Units			
	FEED	PRODUCT	
Mass Entropy	0.0141245	0.409953	cal/gm-K
Molar Density	1.19098e-05	1.19071e-05	mol/cc
Mass Density	0.000209861	0.000174844	gm/cc
Enthalpy Flow	-1.18608e+06	-1.05953e+06	cal/sec
Average MW	17.6208	14.684	
Mole Flows	100	120	kmol/hr
METHA-01	20	10	kmol/hr
WATER	80	60	kmol/hr
CARBO-01	0	10	kmol/hr
HYDRO-01	0	40	kmol/hr

结果查看

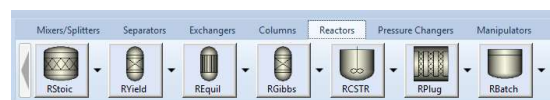
南京工业大学

第 47 页

47

## 4.3 热力学平衡类反应器

- Aspen Plus根据不同的反应器形式，提供了七种不同的反应器模块。



- 这七种反应器模块可以划分为三大类：

1. 生产能力反应器，(RStoic, RYield)；
2. 热力学平衡类反应器 (REquil, RGibbs)；
3. 化学动力学反应器 (RCSTR, RPlug, RBatch)。

南京工业大学

第 48 页

48



### 4.3 热力学平衡类反应器

根据热力学平衡条件计算体系发生化学反应的结果，不考虑动力学可行性。

该类别包含两种反应器。

#### 1、平衡反应器 (REquil)

Equilibrium Reactor

#### 2、吉布斯反应器 (RGibbs)

Gibbs Reactor

南京工业大学

第 49 页

49

### 4.3.1 平衡反应器REquil

平衡反应器REquil按照化学反应方程式中的计量关系进行反应计算，同时计算相平衡和化学平衡，不考虑反应动力学。

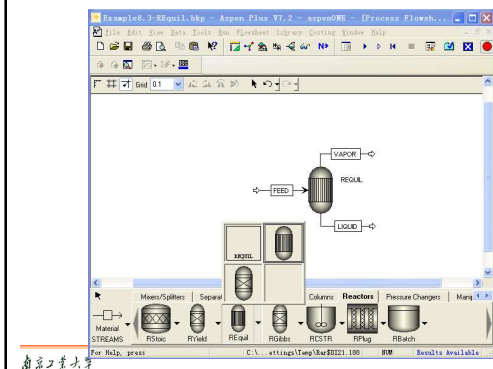
平衡反应器REquil能够模拟单相和两相反应，不能进行三相计算。

南京工业大学

第 50 页

50

### 4.3.1 平衡反应器REquil



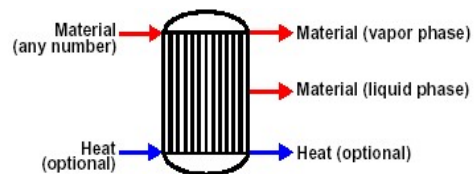
南京工业大学

第 51 页

51

### 4.3.1 平衡反应器REquil

● REquil模块的连接图如下：



南京工业大学

第 52 页

52

### 4.3.1 平衡反应器REquil

● REquil 模块有四组模型参数：

- 1、模型设定 (Specifications)
- 2、化学反应 (Reactions)
- 3、收敛 (Convergence)
- 4、液沫夹带 (Entrainment)

南京工业大学

第 53 页

53

### 4.3.1 平衡反应器REquil

#### 1、模型设定 (Specifications)

包括操作条件和有效相态。



南京工业大学

第 54 页

54

### 4.3.1平衡反应器REquil

#### 2、化学反应 (Reactions)

需要规定在反应器中发生的反应，对每个反应指定化学计量系数。

Rxn No.	Specification type	Stoichiometry
1	Temp. approach	CH4O <-> 2 H2 + CO
2	Temp. approach	CO + H2O <-> H2 + CO2

南京工业大学

第 65 页

55

### 4.3.1平衡反应器REquil

REquil由Gibbs自由能计算平衡常数，可以通过规定产物生成比速率或趋近平衡温度来限制平衡。

- 产物生成比速率Extend=速率/化学计量系数
- 趋近平衡温度 (Temperature Approach) =反应温度+趋近平衡温度

南京工业大学

第 66 页

56

### 4.3.1平衡反应器REquil

Reaction No.: 2

Reactants:

Component	Coefficient	Solid
CO	1	No
H2O	1	No

Products:

Component	Coefficient	Solid
H2	2	No
CO2	1	No

Products generation:

☐ Molar extent: [ ] kmol/hr

☒ Temperature approach: [ ] C

Extent estimate: [ ] kmol/hr

Let's you select if the specified component is a solid.

南京工业大学

第 67 页

57

### 4.3.1平衡反应器REquil

- 平衡反应器REquil处理常规的固体时，把每个特定的固体视为一个单独的纯固相。
- 不参加反应的固体，包括非常规的组分，被视为惰性成分。这些固体不影响化学平衡，只影响能量平衡。

南京工业大学

第 68 页

58

### 4.3.1平衡反应器REquil

#### 3、液沫夹带 (Entrainment)

当有效相态为气-液两相时，可以规定液沫夹带。

Liquid entrainment in vapor stream

Fraction of liquid entrained: [ ]

Solid entrainment in vapor stream for each substream

Substream	Fraction

南京工业大学

第 69 页

59

### 4.3.1平衡反应器REquil

例4.3 由甲醇生产氢气的反应如下：



进料流率为100kmol/hr；

其中甲醇与水的摩尔比为1:4；

进料温度为232°C，压力为0.1013MPa；

反应器温度为232°C，压力为0.1013MPa；

物性方法选用PENG-ROB。

当反应达到平衡时，氢气产品的流率为多少？反应热负荷是多少？

南京工业大学

第 69 页

60

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

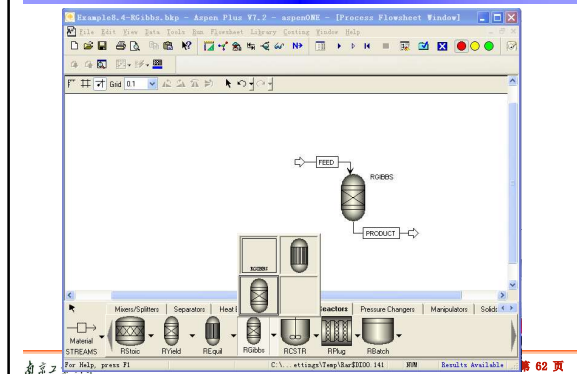
- RGibbs根据系统Gibbs自由能趋于最小的原则，计算同时达到化学平衡和相平衡时的情况。
- 不要求规定反应的化学计量系数，可以应用于发生的反应未知或由于有许多组分参与反应致使反应数量很多的情况。
- 吉布斯反应器RGibbs是唯一能处理汽-液-固相平衡的反应器模块。

南京工业大学

第 61 页

61

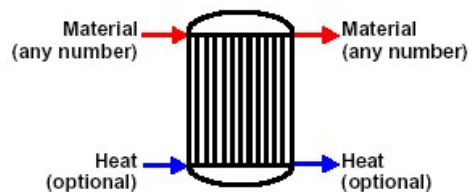
### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs



62

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

- RGibbs模块的连接图如下：



南京工业大学

第 63 页

63

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

- RGibbs 模块有五组模型参数：

- 1、模型设定 (Specifications)
- 2、产物 (Products)
- 3、指定物流 (Assign Steams)
- 4、惰性物 (Inerts)
- 5、限制平衡 (Restricted Equilibrium)

南京工业大学

第 64 页

64

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

#### 1、模型设定 (Specifications)

包括操作条件、计算选项和存在的相态数。

南京工业大学

第 65 页

65

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

计算选项可选择仅计算相平衡、同时计算化学平衡和相平衡、或受限制的化学平衡。

南京工业大学

第 66 页

66

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

#### 2、产物 (Products)

由于不用输入反应，所以需要规定产物的情况：

- ①系统中所有的组分都可以是产物；
- ②指定可能的产物组分；
- ③定义产物存在的相态。

Specifications Products Assign Streams Inerts Restricted Equilibrium

☒ RGibbs considers all components as products  
☐ Identify possible products  
☐ Define phases in which products appear

Hydrate-check: Rigorous

南京工业大学

第 67 页

67

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

#### 2、产物 (Products)

- ①系统中所有的组分都可以是产物；

Specifications Products Assign Streams Inerts Restricted Equilibrium

☒ RGibbs considers all components as products  
☐ Identify possible products  
☐ Define phases in which products appear

Hydrate-check: Rigorous

Products determined by RGibbs  
RGibbs determines the phase of each product as fluid or solid based on its properties.

南京工业大学

第 68 页

68

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

#### 2、产物 (Products)

- ②指定可能的产物组分；

Specifications Products Assign Streams Inerts Restricted Equilibrium

☐ RGibbs considers all components as products  
☒ Identify possible products  
☐ Define phases in which products appear

Hydrate-check: Rigorous

Component	Valid phases
CH4O	Mixed
H2O	Mixed
H2	Mixed
CO	Mixed
CO2	Mixed

南京工业大学

第 69 页

69

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

#### 2、产物 (Products)

- ③定义产物存在的相态。

Specifications Products Assign Streams Inerts Restricted Equilibrium

☐ RGibbs considers all components as products  
☐ Identify possible products  
☒ Define phases in which products appear

Hydrate-check: Rigorous

Phase ID	Phase type	Property method	Spec. type	Component
1	Vapor			*
2	Liquid			

南京工业大学

第 70 页

70

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

#### 3、指定物流 (Assign Steams)

可以选择自动指定出口物流相态，或使用关键组分和截尾摩尔分率指定出口物流相态。

Specifications Products Assign Streams Inerts Restricted Equilibrium

☒ RGibbs assigns phases to outlet streams  
☐ Use key components & cutoff mole fraction to assign phases to outlet streams

南京工业大学

第 71 页

71

### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

#### 4、惰性物 (Inerts)

如果有不参加反应的惰性组分，可以在Inerts页面规定哪些组分为惰性组分，以及该组分不参加反应的摩尔流率或分率。

Specifications Products Assign Streams Inerts Restricted Equilibrium

Non-reacting feed components

Component	Mole flow kmol/hr	Fraction

南京工业大学

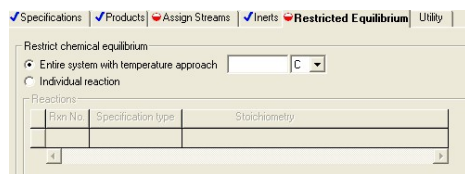
第 72 页

72

#### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

##### 5、限制平衡 (Restricted Equilibrium)

可以通过设定整个系统的趋近平衡温度，或分别指定各个化学反应的趋近平衡温度来限制平衡。



南京工业大学

第 73 页

73

#### 4.3.2吉布斯反应器RGibbs

**例4.3** 由甲醇生产氢气的反应如下：



进料流率为100kmol/hr;

其中甲醇与水的摩尔比为1:4;

进料温度为232°C，压力为0.1013MPa;

反应器温度为232°C，压力为0.1013MPa;

物性方法选用PENG-ROB。

当反应达到平衡时，氢气产品的流率为多少？反应热负荷是多少？

比较REquil模块与RGibbs模块的计算结果。

南京工业大学

第 74 页

74

#### 4.4 化学动力学反应器

- Aspen Plus根据不同的反应器形式，提供了七种不同的反应器模块。



- 这七种反应器模块可以划分为三大类：

- 1.生产能力反应器，(RStoic, RYield)；
- 2.热力学平衡类反应器 (REquil, RGibbs)；
- 3.化学动力学反应器 (RCSTR, RPlug, RBatch)。

南京工业大学

第 75 页

75

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

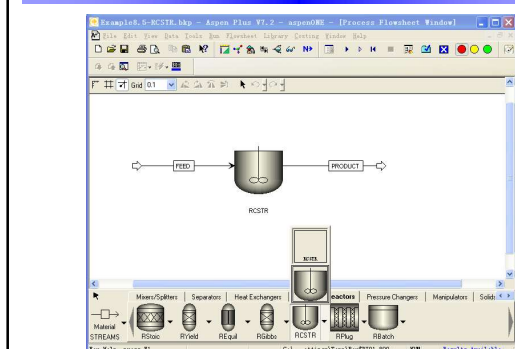
- 全混釜反应器RCSTR可以模拟达到理想混合的连续搅拌釜式反应器；
- 要求已知化学反应式、动力学方程和平衡关系；
- 可模拟单相、两相或三相体系，并可处理固体；
- 可同时计算动力学控制和平衡控制两类反应。

南京工业大学

第 76 页

76

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR



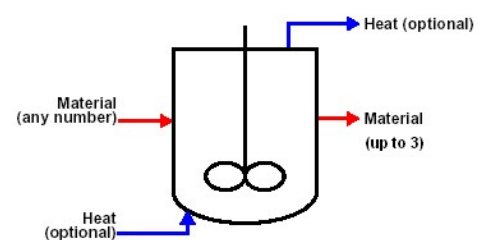
南京工业大学

第 77 页

77

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

- RCSTR模块的连接图如下：



南京工业大学

第 78 页

78

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

##### ● RCSTR 模块有七组模型参数：

- 1、模型设定 (Specifications)
- 2、产品物流 (Streams)
- 3、化学反应(Reactions)
- 4、粒度分布 (PSD)
- 5、组分属性 (Component Attr.)
- 6、公用工程(Utility)
- 7、催化剂(Catalyst)

南京工业大学

第 79 页

79

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

##### 1、模型设定 (Specifications)

- 需要设定操作条件 (Operation Conditions)和持料状态 (Holdup)。
- 操作条件包括：反应器压力、温度或者热负荷；
- 持料状态包括：有效相态 (Valid phases)、反应器体积 (Reactor volume) 或停留时间 (Residence time) 等设定方式。

南京工业大学

第 80 页

80

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

The screenshot shows the 'Specifications' tab of the RCSTR module. Under 'Operating conditions', Pressure is set to 0.1013 MPa and Temperature to 60 C. Under 'Holdup', 'Valid phases' is set to 'Liquid-Only'. The 'Specification type' dropdown is open, showing options: 'Reactor volume', 'Residence time', 'Reactor volume & Phase volume', 'Reactor volume & Phase volume fraction', 'Reactor volume & Phase residence time', 'Residence time & Phase volume fraction', and 'Phase residence time & volume fraction'. The 'Reactor' section shows 'Volume' set to 2100 and 'Resi. time' set to 0.001.

南京工业大学

第 81 页

81

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

##### 2、产品物流 (Streams)

当有两股或两股以上产品物流时应该在该栏设置各产品物流的出口相态。

The screenshot shows the 'Streams' tab of the RCSTR module. It displays a table of product streams. The first stream is named 'PRODUCT' and has a phase of 'Liquid'. The second stream is named '2' and has a phase of 'Vapor'. The table lists various phases: Vapor, Liquid, 1st Liquid, 2nd Liquid, Free water, Vapor-Liquid, Vapor-1st Liquid, Liquid-Free Water, and 1st Liquid-2nd Liquid.

南京工业大学

第 82 页

82

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

##### 3、化学反应(Reactions)

RCSTR中的化学反应通过选用预定义的化学反应对象来设定。

The screenshot shows the 'Reactions' tab of the RCSTR module. It displays two lists: 'Available reaction sets' and 'Selected reaction sets'. The 'Selected reaction sets' list contains one entry, 'R-1'. Below these lists is a 'Define activity' section with fields for 'Name' and 'Value'.

南京工业大学

第 83 页

83

#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

##### 4、催化剂(Catalyst)

当存在催化剂时，需在该页面设定催化剂装填量 (Catalyst loading)、床层孔隙率(Bed voidage)或颗粒密度(Particle density)。

The screenshot shows the 'Catalyst' tab of the RCSTR module. It displays a section for 'Catalyst present in reactor' with a checkbox that is checked. Below this is a section for 'Specifications' with fields for 'Catalyst loading' (set to 1 kg), 'Bed voidage' (set to 0.4), and 'Particle density' (set to 1500 kg/m³).

南京工业大学

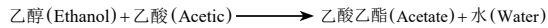
第 84 页

84



#### 4.4.1 全混釜反应器RCSTR

**例4.5** 乙酸乙酯的平衡反应式为：



基于摩尔浓度的反应平衡常数为K,  $\ln K=1.335$ 。进料为0.1013MPa下的饱和液体，其中，水、乙醇、乙酸的流率分别为736kmol/h、218 kmol/h、225kmol/h，全混釜反应器的体积为21000L，温度为60℃，压力为0.1013MPa，化学反应对象选用指数型。

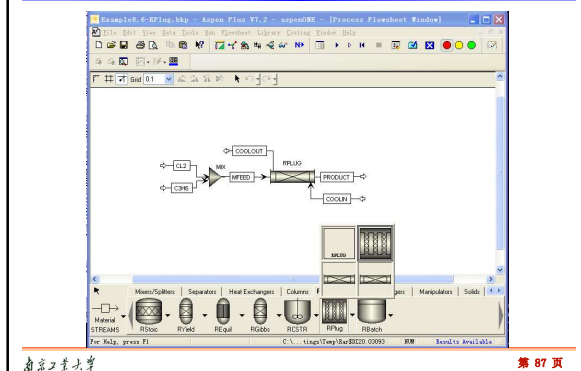
物性方法选用NRTL-HOC。

求产品乙酸乙酯的流率为多少？

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

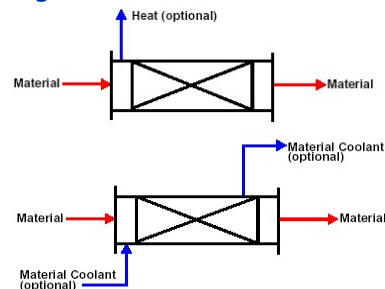
- 平推流反应器RPlug可以模拟轴向没有返混、径向完全混合的理想平推流反应器。
- 该模块只能计算动力学控制的反应，要求已知化学反应式和动力学方程。
- 可模拟单相、两相或三相体系，并可处理固体，也可以模拟带冷却剂物流的反应器。

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug



#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- RPlug模块的连接图如下：



#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- RCSTR 模块有八组模型参数：

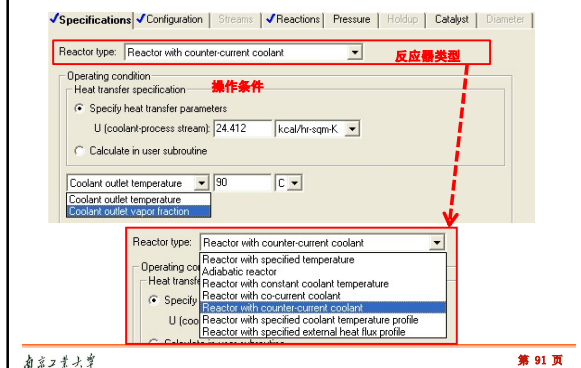
- 1、模型设定 (Specifications)
- 2、反应器构型 (Configuration)
- 3、产品物流 (Streams)
- 4、化学反应 (Reactions)
- 5、压力 (Pressure)
- 6、持液量 (Holdup)
- 7、催化剂 (Catalyst)
- 8、反应器直径 (Diameter)

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 1、模型设定 (Specifications)

- 需要指定平推流反应器RPlug的类型，输入对应的反应器条件（如果带有冷却剂，则包括冷却剂参数）。
- 平推流反应器RPlug的类型包括：指定温度的反应器（Reactor with specified temperature）、绝热反应器（Adiabatic reactor）、恒定冷却剂温度的反应器（Reactor with constant coolant temperature）、与冷却剂并流换热的反应器（Reactor with co-current coolant）、与冷却剂逆流换热的反应器（Reactor with counter-current coolant）等。

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

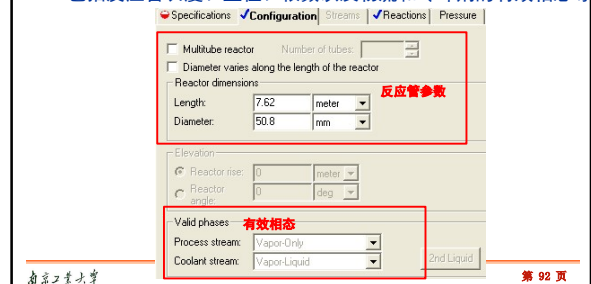


91

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 2、反应器构型 (Configuration)

包括反应管长度、直径、根数以及物流和冷却剂的有效相态等

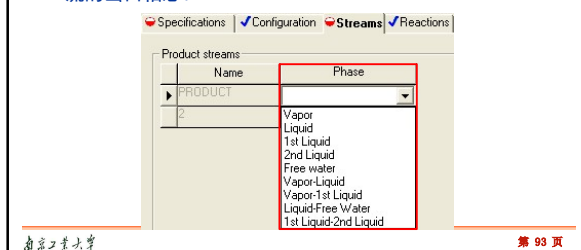


92

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 3、产品物流 (Streams)

当有两股或两股以上产品物流时应该在该栏设置各产品物流的出口相态。

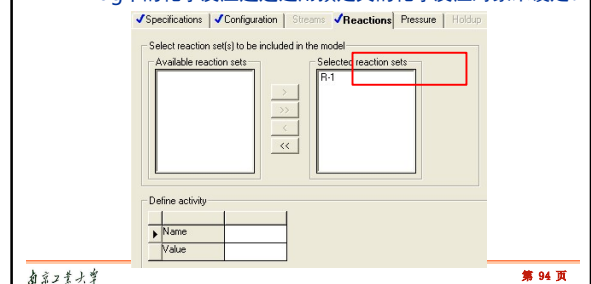


93

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 4、化学反应 (Reactions)

RPlug中的化学反应通过选用预定义的化学反应对象来设定。

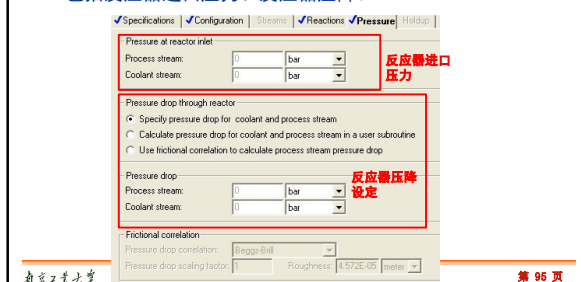


94

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 5、压力 (Pressure)

包括反应器进口压力、反应器压降。

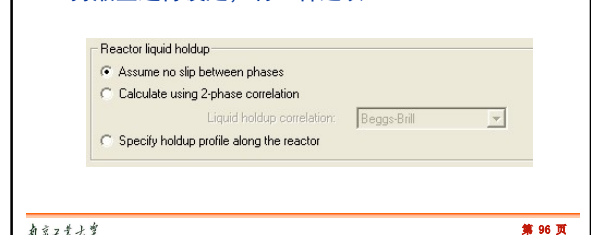


95

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 6、持液量 (Holdup)

当反应器中有效相态不为单相时，需要对反应器的持液量进行设定，有三种选项。

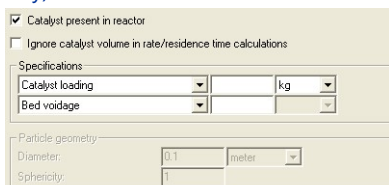


96

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 7、催化剂(Catalyst)

当存在催化剂时，需在该页面设定催化剂装填量(Catalyst loading)、床层孔隙率(Bed voidage)或颗粒密度(Particle density)。



南京工业大学

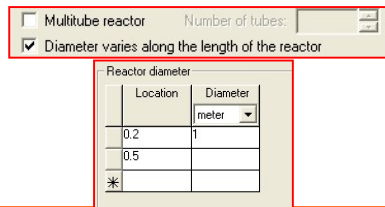
第 97 页

97

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

##### 8、反应器直径(Diameter)

当反应器构型中选择直径随反应器长度变化时，需在该页面定义不同位置的反应器直径。



Location	Diameter
0.2	1
0.5	
*	

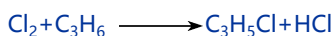
南京工业大学

第 98 页

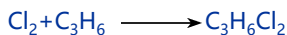
98

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

**例4.6** 反应式和指数型动力学方程如下（其中动力学参数以英制单位为基准，浓度为摩尔浓度，反应相态为气相）：



$$R_1 = 1.5 \times 10^6 \times \exp\left(\frac{-27200}{RT}\right) \times [\text{Cl}_2] \times [\text{C}_3\text{H}_6]$$



$$R_2 = 90.46 \times \exp\left(\frac{-6860}{RT}\right) \times [\text{Cl}_2] \times [\text{C}_3\text{H}_6]$$

南京工业大学

第 99 页

99

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

两股进料混合后进入反应器，进料氯气（Cl<sub>2</sub>）的温度为200℃，压力为0.2026MPa，流率为0.077kmol/h，进料丙烯（C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>）的温度为200℃，压力为0.2026MPa，流率为0.308kmol/h。反应器长7.62m，内径50.8mm，压降为0，传热系数U=24.412kcal/(h·m<sup>2</sup>·K)。用180kg/h的水作为冷却剂与反应器逆流换热，对于水的进口温度可以设定初值为80℃，压力为0.1013MPa，规定水的出口温度为90℃。物性方法选用IDEAL。求冷却剂水的进口温度、产品的温度以及产品中氯丙烯（C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>Cl）和1,2-二氯丙烷（C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>Cl<sub>2</sub>）的流率各是多少？

南京工业大学

第 100 页

100

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- 全混釜反应器是返混趋于无穷大的反应器，平推流反应器是返混为零的反应器，这是两个极端情况。实际反应器有的接近这样的理想情况，因而可用这两个模块进行近似设计、模拟和分析。

南京工业大学

第 101 页

101

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- 但是在某些情况下，由于实际设备中死角和挡板等的存在形成了滞留区域，也可能由于不均匀的流路导致流体的旁通，因而，流体的流型不同于全混釜和平推流中流体的流型，而是介于它们之间的一种型式，这时候可采用多个模块组合的方法进行模拟。

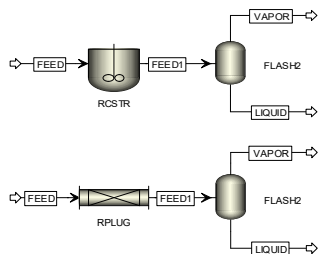
南京工业大学

第 102 页

102

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- ① 多相产物反应器 RCSTR模块或RPlug模块+Flash2模块。



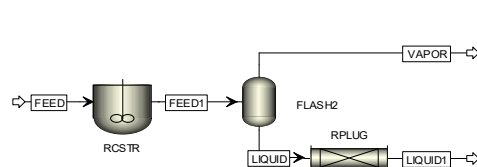
南京工业大学

第 103 页

103

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- ② 存在滞留区域的全混釜反应器 RCSTR模块+Flash2模块+RPlug模块。



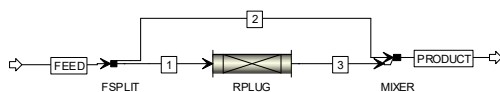
南京工业大学

第 104 页

104

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- ③ 产生旁通的平推流反应器 Fsplit模块+RPlug模块+Mixer模块。



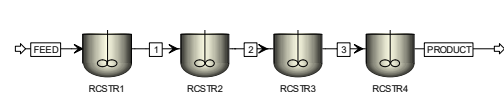
南京工业大学

第 105 页

105

#### 4.4.2 平推流反应器RPlug

- ④ 带有返混的平推流反应器 多个RCSTR模块串联。



南京工业大学

第 106 页

106

#### 4.4.3 间歇式反应器RBatch

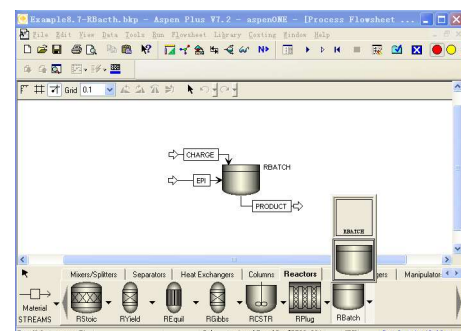
- 间歇式反应器RBatch可以模拟达到理想混合的间歇或半间歇操作的搅拌釜。
- 通过规定化学反应式和动力学参数可计算物料平衡和能量平衡。
- 间歇式反应器RBatch只能够处理动力学类型的反应。

南京工业大学

第 107 页

107

#### 4.4.3 间歇式反应器RBatch



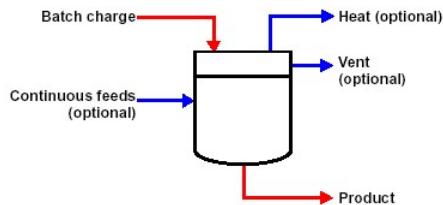
南京工业大学

第 108 页

108

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

- RBatch模块的连接图如下:



南京工业大学

第 109 页

109

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

- RBatch 模块有六组模型参数:

- 1、模型设定 (Specifications)
- 2、化学反应 (Reactions)
- 3、停止判据 (Stop Criteria)
- 4、操作时间 (Operation Time)
- 5、连续加料 (Continuous Feeds)
- 6、控制器 (Controllers)

南京工业大学

第 110 页

110

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

##### 1、模型设定 (Specifications)

包括反应器操作设定、压力设定和有效相态。

南京工业大学

第 111 页

111

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

- 其中反应器操作设定的类型包括:

- 1、恒温 (Constant temperature)
- 2、温度剖面 (Temperature profile)
- 3、恒定热负荷 (Constant heat duty)
- 4、热负荷剖面 (Heat duty profile)
- 5、恒定冷却剂温度 (Constant coolant temperature)
- 6、传热用户子程序 (Heat transfer user subroutine)

南京工业大学

第 112 页

112

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

- 压力设定包括:

- 1、指定反应器压强  
(Specify reactor pressure)
- 2、指定压强剖面  
(Specify reactor pressure profile)
- 3、计算反应器压强  
(Calculate reactor pressure)

南京工业大学

第 113 页

113

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

##### 2、化学反应 (Reactions)

RBatch中的化学反应通过化学反应对象定义。

南京工业大学

第 114 页

114

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

##### 3、停止判据 (Stop Criteria)

停止判据为间歇式反应器RBatch一个操作周期结束的条件，可以设定一个或多个，计算过程中达到任何一个判据设定值后，反应就停止。

Specifications Reactions Stop Criteria Operation Time

Stop criteria	
Criterion no.	1
Location	Reactor
Variable type	Time
Stop value	1.5
Component	
Substream	
Property set ID	
Approach from	

南京工业大学

第 115 页

115

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

判据位置有三种可选：反应器、排气收集器、排气管。

Criterion no.	1
Location	Reactor
Variable type	Reactor
Stop value	Vent accumulator
Component	Vent

南京工业大学

第 116 页

116

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

变量类型有13种可选：反应时间、摩尔分率、质量分率、转化率、温度、压力等。

Variable type	Time
Stop value	1.5
Component	Mole fraction
Substream	Mass fraction
Property set ID	Conversion
Approach from	Total moles
	Total mass
	Total volume
	Temperature
	Pressure
	Vapor fraction
	Vent mole flowrate
	Vent mass flowrate
	Prop-set property

南京工业大学

第 117 页

117

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

##### 4、操作时间 (Operation Time)

- 为间歇式反应器RBatch的操作周期 (Batch cycle time) 设定时间指标有两种设定方式：
- 设定一个操作周期的时间 (Total cycle time) ；
- 设定间歇进料时间 (Batch feed time) 和辅助操作时间 (Down time) 。
- 还需要设定最大计算时间 (Maximum calculation time) 和时间间隔 (Time interval between profile points) 。

南京工业大学

第 118 页

118

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

Specifications Reactions Stop Criteria Operation Times

Batch cycle time

☐ Total cycle time: [ ] hr

☒ Batch feed time: [ 1 ] hr

Down time: [ 0 ] hr

Profile result time

Maximum calculation time: [ 2 ] hr

Time interval between profile points: [ 1 ] min

Maximum number of profile points: [ 122 ]

南京工业大学

第 119 页

119

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

##### 5、连续加料 (Continuous Feeds)

当存在连续加料流股时，在连续加料表单中设置各个连续加料流股的流量随时间的变化情况。有两种设置方式：

- 基于加料流股的恒定流量  
(Flow is constant at inlet value)
- 指定不同时刻的流量剖形  
(Specify flow vs time profile)

Continuous feed mass flow

Stream: EPI

☒ Flow is constant at inlet value

☐ Specify flow vs time profile

Time	Flow

南京工业大学

第 120 页

120



#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

##### 6、控制器 (Controllers)

当设置反应器温度为恒温或指定温度剖形时，可以通过控制器对反应釜温度进行PID控制。

当设置反应器压力为计算反应器压力时，可以通过控制器对反应釜压力进行PID控制。

南京工业大学

第 121 页

121

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

PID控制器的温度控制参数包括：

- ①比例增益因子 (Proportional gain)
- ②积分时间常数 (Integral time constant)
- ③微分时间常数 (Derivative time constant)

南京工业大学

第 122 页

122

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

PID控制器的压力控制参数包括：

- ①压力设置值(Pressure set point)
- ②比例增益因子 (Proportional gain)
- ③积分时间常数 (Integral time constant)
- ④微分时间常数 (Derivative time constant)
- ⑤最大进料速率(Maximum feed flow rate)

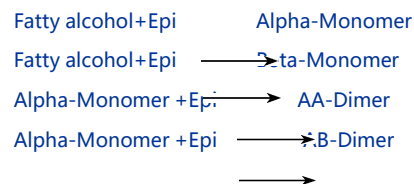
南京工业大学

第 123 页

123

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

**例4.7** 用间歇式反应器RBatch模拟烷基甘油醚反应，反应包括两个单体反应和两个二聚反应，化学反应对象选择指数型。



南京工业大学

第 124 页

124

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

对于上述所有反应，动力学参数 $k$ 均为 $8.71358 \times 10^{10}$ ，活化能依次为 $E_1=69019400\text{J/kmol}$ ，

$E_2=69780000\text{J/kmol}$ ，

$E_3=75532200\text{J/kmol}$ ，

$E_4=76060200\text{J/kmol}$ 。

其中浓度基准为体积摩尔浓度Molarity。

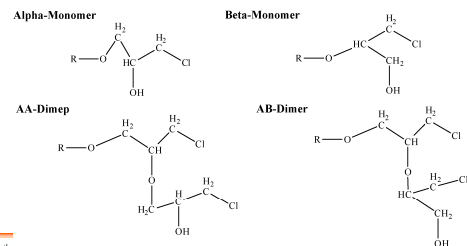
南京工业大学

第 125 页

125

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

反应式中Epi为环氧氯丙烷 $\text{C}_3\text{H}_5\text{ClO}$ ，Fatty alcohol为1-十三烷醇 $\text{C}_{13}\text{H}_{28}\text{O}$ ，Alpha-Monomer、Beta-Monomer、AA-Dimer、AB-Dimer的结构式分别为：



南京工业大学

第 126 页

126

#### 4.4.3间歇式反应器RBatch

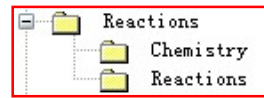
间歇进料Fatty alcohol总量为3257kg，温度为65℃，压力为0.1013MPa；连续进料Epi总量为1710kg，温度为65℃，压力为0.1013MPa，并以1140kg/h的流率连续进料1.5h。反应器温度为65℃，压力为0.1013MPa，反应为液相反应，反应1.5h后结束，计算时间间隔设为1min，物性方法选用NRTL，求反应产品的组成流率。

南京工业大学

第 127 页

127

#### 4.5 化学反应对象



化学反应对象可以用于动力学反应器（RCSTR、RPlug、RBatch）和反应精馏（RadFrac）的计算。化学反应对象是独立于反应器模块或塔模块的，可以同时应用于多个模块中。

南京工业大学

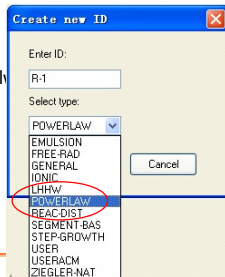
第 128 页

128

#### 4.5 化学反应对象

- 建立新的化学反应对象需要输入反应ID并选择对象类型，常用的对象类型有三种：

- ① LHHW型（Langmuir-Hinshelwood）；
- ② 指数型（Power Law）；
- ③ 反应精馏型（Reac-Dist）。



南京工业大学

129

#### 4.5 化学反应对象

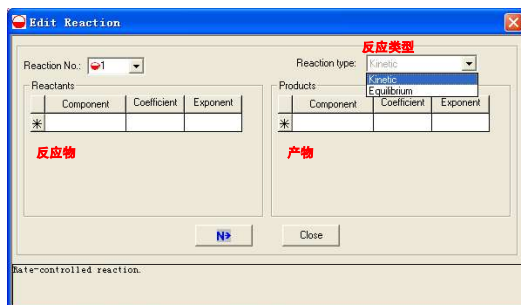
- 反应类型有两种：动力学（Kinetic）和平衡型（Equilibrium）
- 需输入反应物（Reactants）、产物（Products）以及对应的化学计量系数（Coefficient）。
- 对于指数型反应对象，还要输入动力学方程式中每个组分的指数（Exponent），若不输入则默认为0，即反应速率的大小与该组分无关。

南京工业大学

第 130 页

130

#### 4.5 化学反应对象



南京工业大学

第 131 页

131

#### 4.5 化学反应对象

如果反应类型（Reaction type）选择Kinetic，在Kinetic页面，需要规定反应相态、反应速率控制基准、动力学参数以及浓度基准。

指数型：反应动力学常数(Kinetic factor,  $k'$ )，它与温度的关系用修正的Arrhenius方程表示：

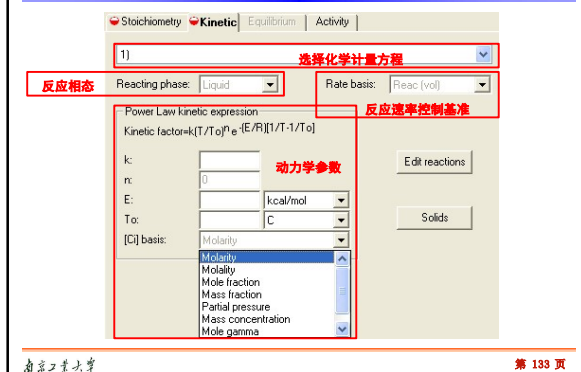
$$k' = k \left( \frac{T}{T_0} \right)^n \exp \left[ - \left( \frac{E}{R} \right) \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$$

南京工业大学

第 132 页

132

## 4.5 化学反应对象



133

## 4.5 化学反应对象

LHHW型的反应动力学方程：

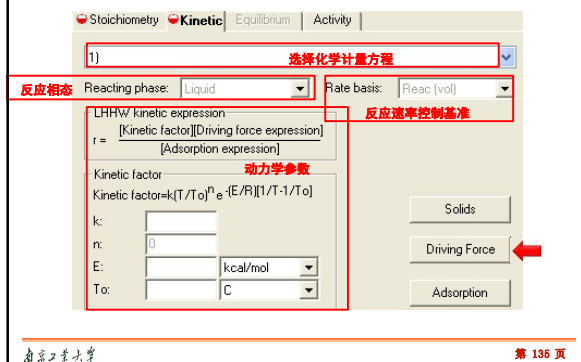
$$-r_A = \frac{[\text{动力学因子}] \cdot [\text{推动力表达式}]}{[\text{吸附表达式}]}$$

动力学常数仍用修正的Arrhenius方程表示：

$$[\text{动力学因子}] = k \left( \frac{T}{T_0} \right)^n \exp \left[ - \left( \frac{E}{R} \right) \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$$

134

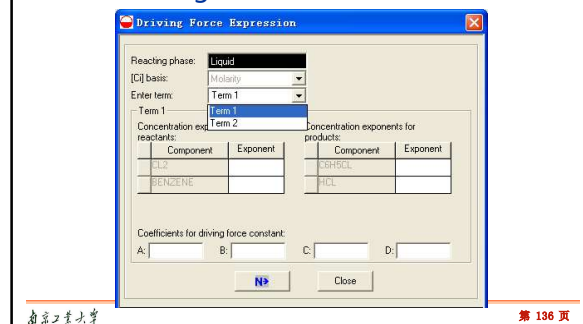
## 4.5 化学反应对象



135

## 4.5 化学反应对象

点击Driving force, 进入如下页面。



136

## 4.5 化学反应对象

- 推动力表达式为：

$$\text{Driving force expression} = K_1 \Pi C_i^{\alpha_i} - K_2 \Pi C_j^{\beta_j}$$

$$\ln K_i = A_i + \frac{B_i}{T} + C_i \times \ln T + D_i \times T$$

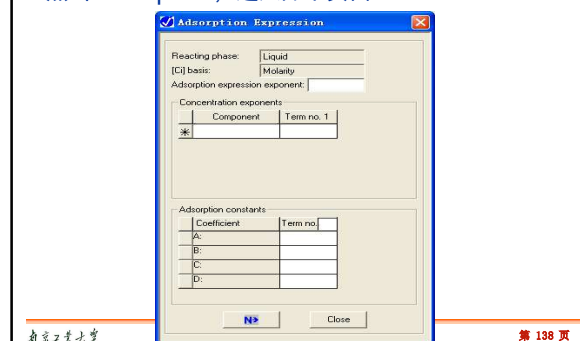
Term1和Term2分别代表正反应和逆反应的推动力。

南京工业大学 第 137 页

137

## 4.5 化学反应对象

点击Adsorption, 进入如下页面。



138

## 4.5 化学反应对象

- 吸附表达式为：

$$\text{Adsorption expression} = [\sum K_i (\prod C_j^{v_j})]^m$$

$$\ln K_i = A_i + \frac{B_i}{T} + C_i \times \ln T + D_i \times T$$

如果不存在吸附过程的影响，则只需令  $m=0$  即可。

南京工业大学

第 139 页

139

## 4.5 化学反应对象

如果反应类型（Reaction type）选择 Equilibrium，在 Equilibrium 页面需要规定反应相态、趋近平衡温度，还需要选择平衡常数的计算方法：Gibbs energies 或 built-in expression

南京工业大学

第 140 页

140

## 4.5 化学反应对象

南京工业大学

第 141 页

141

## 4.5 化学反应对象

- 另外，还可以使用用户提供的动力学子程序来计算反应速率，在 Reactions | Reactions 页面创建一个新反应类型，选择 Subroutine 子程序对象

南京工业大学

第 142 页

142