



DOI: 10.16085/j.issn.1000-6613.2019-1207

## 一维平推流反应器动态模型的新型求解方法

祁亮<sup>1</sup>, 张波<sup>1</sup>, 尚秦玉<sup>1</sup>, 王雁冰<sup>2</sup>, 曹志凯<sup>2</sup>, 李薇<sup>2</sup>, 周华<sup>2</sup>( <sup>1</sup> 中国石油天然气有限公司独山子石化分公司热电厂, 新疆 独山子 833600;<sup>2</sup> 厦门大学化学化工学院, 福建 厦门 361005)

**摘要:** 目前对一维平推流反应器动态模型求解时, 常将反应体系中气体的体积流量假设为恒定参数。由于实际过程中气体的体积流量会随着温度等相关参数的改变而不断变化, 该假设会对模拟结果带来一定的误差。本文针对此问题提出一种新的求解方法: 首先通过有限差分法将动态模型中的空间和时间变量均离散化得到相应的代数方程组, 再结合气体状态方程, 推导出浓度关于气体摩尔流量和温度的函数, 然后联立方程组进行求解; 此方法有效克服了动态模拟中由于气体的体积流量变化而导致模型方程难以求解的困难。将所提出的方法应用于丙酮气相裂解生成乙烯酮过程的动态模拟, 并将所得到的模拟结果与线上法动态模拟的结果进行比较, 结果表明所提出的求解方法得到的模拟结果更加精确。

**关键词:** 动态仿真; 平推流反应器; 有限差分法; 体积流量; 算法

中图分类号: TQ015 文献标志码: A 文章编号: 1000-6613 (2019) s1-0070-07

## A novel method for solution of the one-dimensional dynamic mathematical model of PFR

QI Liang<sup>1</sup>, ZHANG Bo<sup>1</sup>, SHANG Qinyu<sup>1</sup>, WANG Yanbing<sup>2</sup>, CAO Zhikai<sup>2</sup>, LI Wei<sup>2</sup>, ZHOU Hua<sup>2</sup><sup>1</sup>Thermoelectric Power Plant of Dushanzi Petrochemical Corporation, Dushanzi 833600, Xinjiang, China;<sup>2</sup>College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, Fujian, China)

**Abstract:** The volumetric flowrate of reactants (*i.e.* gas or liquid) is simplified as constant in dynamic modeling of the one-dimensional piston flow reactor (PFR). However, the volumetric flowrate of the gas is often easily effected by many factors such as temperature, pressure and molar flowrate. Therefore, the relative error of simulation results should be enlarged because of the simplification. To solve this problem, a novel method for solution of the dynamic model of PFR is presented in this work. In the novel method, the finite difference method is improved by introducing a mathematical expression for the flowrate of gaseous feedstock. To validate the method, the provided novel method and classic method of line (MOL) are applied in dynamic modeling PFR of the vapor-phase cracking of acetone to ketene and methane. Furthermore, the simulation results of different methods are compared and more accurate simulation results is obtained by the novel method.

**Keywords:** dynamic simulation; piston flow reactors; finite difference; volumetric flow rate; algorithm

收稿日期: 2019-07-31; 修改稿日期: 2019-08-06。

基金项目: 国家自然科学基金面上项目 (21576228)。

第一作者: 祁亮 (1983—), 男, 工程师, 研究方向为热工。E-mail: rdc\_qiliang@petrochina.com.cn。

通信作者: 周华, 副教授, 研究方向为过程系统工程。E-mail: cezhouh@xmu.edu.cn。

引用本文: 祁亮, 张波, 尚秦玉, 等. 一维平推流反应器动态模型的新型求解方法[J]. 化工进展, 2019, 38(s1): 70-76。

**Citation:** QI Liang, ZHANG Bo, SHANG Qinyu, et al. A novel method for solution of the one-dimensional dynamic mathematical model of PFR[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2019, 38(s1): 70-76.

化工过程模拟通常包含稳态和动态模拟，稳态模拟不考虑过程的瞬态变化，因此无法描述装置开停车和异常工况等特性；而动态模拟能较好地体现化工过程的动态特性，可客观详实地描述化工实际过程。化工过程动态模拟主要包括化工过程动态数学模型的研究和通用动态模拟软件的开发<sup>[1]</sup>。动态数学模型的研究包括过程的建模及模型的求解，化工过程的数学模型常涉及偏微分方程，而动态模型还需考虑时间项的影响，这将导致动态模型的求解过程更加复杂。此外，气体物料广泛存在于化工反应及分离过程中，而气体物料的体积流量容易受到环境参数（如温度、压力等）的影响，该因素也将使得化工过程动态模型的求解更难<sup>[2-4]</sup>。

针对平推流反应器的建模已有大量的文献<sup>[5-13]</sup>报道，其中文献[11-13]经严密推导得到一维平推流反应器动态模型的物料方程为式(1)。而文献[14-18]在对此数学模型求解时，均将反应器中气体的体积流量  $Q$  设为恒定参数，此时动态模型中的物料方程由式(1)转化为式(2)。对于式(2)的求解，文献[18]中给出常用的求解方法：用线上法（method of lines, MOL）将空间离散化，使偏微分方程组转换为常微分方程组，再结合相应的数值算法求解离散化后的常微分方程组。文献[19]同样以式(2)为基本物料模型方程，在求解过程虽有考虑气体体积流量的变化，但将气体体积流量仅看成与气体摩尔流量相关的函数，忽略了气体体积流量也是温度的函数。

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{\partial(Q \cdot c_i)}{\partial V} + r_i \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -Q \frac{\partial c_i}{\partial V} + r_i \quad (2)$$

式中， $c_i$  为组分  $i$  的浓度， $\text{mol}/\text{m}^3$ ； $t$  为反应时间， $\text{s}$ ； $Q$  为反应器轴向一点处体积流量， $\text{m}^3/\text{s}$ ； $V$  为平推流反应器的体积， $\text{m}^3$ ； $r_i$  为组分  $i$  的反应速率， $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 。

经典 MOL 法求解此类模型方程需先简单地假设气体物料的体积流量为恒定参数，由于实际过程中气体体积流量会随温度和气体的摩尔流量等参数变化而变化，按此求解结果必然会产生一定误差。为了弥补 MOL 法的不足，本文以文献[11]中的一维平推流反应器动态模型为基础，分析该数学模型的特点，并在考虑体积流量变化的基础上提出一种新的计算方法。再结合实例，分别使用经典的 MOL 法（将体积流量设为恒定参数）和本文中所提出的

新方法（下文简称本文方法）进行动态模拟来说明本文方法的优越性。

## 1 模型分析

### 1.1 模型的基本假设

流体在反应器中的流动现象极其复杂，平推流模型（也称活塞流模型）是一种经过合理简化后推导出来的最基本的流动模型，常用于描述管式反应器中流体的流动。此模型的基本假设如下<sup>[20]</sup>：①不考虑反应器内压降且气体满足气体状态方程；②反应器为轴对称圆柱，垂直于流体流动方向的任何截面上浓度和温度等分布均匀（即径向混合均匀）；③流体流动方向上不存在流体轴向返混和导热。

### 1.2 物料和热量方程讨论

图 1 为平推流反应器的示意图，原料以一定体积流量  $Q_0$  从反应管左端连续加入，右端流出。由于流体的主体流动和化学反应的结果，平推流反应器轴向各点处浓度和温度等参数会沿着轴向不断发生变化。因此在建立平推流反应器数学模型时需取反应器中一个代表性的微分单元体积  $dV$ （即微元体）为研究对象<sup>[21]</sup>。对此微元体进行物料衡算和热量衡算，再经严密数学推导可得文献[11]中一维平推流反应器的动态模型的物料方程和热量方程，如式(3)和式(4)。

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{\partial F_i}{\partial V} + r_i, \quad i=1,2,\dots,m \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^m c_i c_{ni} \frac{\partial T}{\partial t} = Ua(T_c - T) - \left( \sum_{i=1}^m F_i c_{ni} \right) \frac{\partial T}{\partial V} + \bar{r} \cdot (-\Delta H_{R_x}) \quad (4)$$

式中， $F_i$  为组分  $i$  的摩尔流量， $\text{mol}/\text{s}$ ； $m$  为反应体系中物质组分数； $U$  为传热系数， $\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{s})$ ； $a$  为单位体积的表面积， $1/\text{m}$ ； $T$  为反应器轴向一点处的温度， $\text{K}$ ； $T_c$  为冷却剂的温度， $\text{K}$ ； $c_{ni}$  为组分  $i$  的摩尔比热容， $\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ ； $\bar{r}$  为普遍反应速率， $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ ； $\Delta H_{R_x}$  为反应热， $\text{J}/\text{mol}$ 。

式(3)和式(4)组成的偏微分方程组为一阶双曲型方程组。若此方程组能求解，需知此偏微分方程

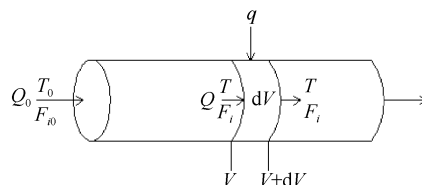


图 1 平推流反应器微元体积示意图

组的初始条件和边界条件<sup>[22]</sup>。由文献[14-18]知其初始条件为  $t=0$  时轴向各点处各组分浓度, 摩尔流量及温度的函数如式(5); 边界条件为第一类边界条件, 选平推流反应器入口  $x=0$  时进料组成和温度如式(6)。

$$t = 0, 0 < x < L; T = T(x), F_i = F_i(x), c_i = c_i(x) \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (5)$$

$$x = 0, t > 0; T = T_0, F_i = F_{i0}, c_i = c_{i0} \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (6)$$

式中,  $x$  为反应器轴向某点距反应器入口的长度,  $m$ ;  $L$  为反应器的管长,  $m$ ;  $T_0$  为进料温度,  $K$ ;  $F_{i0}$  为组分  $i$  的进料摩尔流量,  $\text{mol/s}$ ;  $c_{i0}$  为组分  $i$  的进料浓度,  $\text{mol/m}^3$ 。

分析式(3)和式(4)可发现, 模型方程中变量数比方程数多, 方程无法求解。为此经典 MOL 法将平推流反应器的体积流量  $Q$  设为恒定参数且与入口体积流量  $Q_0$  一致, 此时摩尔流量和浓度的关系由式(7)变为式(8), 则此时物料方程可由式(3)变为式(2), 再联立温度方程式(4)可以求解。

$$F = Q \cdot c_i \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (7)$$

$$F_i = Q_0 \cdot c_i \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (8)$$

式中,  $Q_0$  为进料体积流量,  $\text{m}^3/\text{s}$ 。

本文方法考虑气体体积流量的变化, 以气体状态方程为基础推导得到浓度  $c_i$  为气体的摩尔流量  $F_i$  和温度  $T$  的函数[即  $c_i=f(F_i, T)$ ], 来引入此  $m$  个方程来求解。

## 2 求解思路

经典 MOL 法仅将空间离散化, 将偏微分方程转为常微分方程组来求解; 本文方法用有限差分法将空间和时间均离散化。其具体离散方式如文献[23]所述, 即在求解域(如时间及空间域)内画规则的交叉网格, 当网格分的较细时, 各参数随空间或时间的一阶导数可用相邻两时间点或者空间点的一阶差分近似, 经差分转换后使偏微分方程组的求解问题转化为代数方程组的求解问题。

由式(3)和式(4)所描述的一维平推流反应器的动态模型属于一阶双曲型方程组, 此类型偏微分方程用有限差分法求解时, 常用差分格式有显示格式、隐式格式和蛙跳格式等<sup>[24]</sup>。一般来说显示格式求解简单, 但由于解的稳定性等原因对时间步长有诸多限制; 蛙跳格式为三层格式, 求解过程相对复杂。综合考虑解的稳定性和计算复杂程度, 选隐式格式作为差分格式。以求解域内任意一点 $(j, k)$ 点为例来说明此差分格式在 $(j, k)$ 点处各组分浓度和温度等参数的求解, 其中  $j$  为空间,  $k$  为时间。经网格划分后,

$(j, k)$ 点处原模型方程中气体的摩尔流量和温度随空间的导数可用相邻两空间点的一阶差分近似如式(9)和式(10);  $(j, k)$ 点处模型方程中浓度和温度随时间的导数可用相邻两时间点的一阶差分近似, 如式(11)和式(12)。

$$\frac{\partial F_{i,j}^k}{\partial V} = \frac{F_{i,j}^k - F_{i,j-1}^k}{\Delta V}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (9)$$

$$\frac{\partial T_j^k}{\partial V} = \frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{\Delta V} \quad (10)$$

$$\frac{\partial c_{i,j}^k}{\partial t} = \frac{c_{i,j}^k - c_{i,j-1}^k}{\Delta t}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (11)$$

$$\frac{\partial T_j^k}{\partial t} = \frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{\Delta t} \quad (12)$$

式中,  $c_{i,j}^k$  为组分  $i$  在 $(j, k)$ 点处浓度,  $\text{mol/m}^3$ ;  $F_{i,j}^k$  为组分  $i$  在 $(j, k)$ 点处气体的摩尔流量,  $\text{mol/s}$ ;  $T_j^k$  为在 $(j, k)$ 点处温度,  $K$ 。

将式(9)~式(12)代入动态模型方程式(3)和式(4)得式(13)、式(14)。

$$\frac{c_{i,j}^k - c_{i,j}^{k-1}}{\Delta t} = -\frac{F_{i,j}^k - F_{i,j-1}^k}{\Delta V} + r_{i,j}^{k-1}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (13)$$

$$\sum_{i=1}^m c_{i,j}^{k-1} c_{ni} \frac{T_j^k - T_j^{k-1}}{\Delta t} = Ua(T_c - T_j^k) - \left( \sum_{i=1}^m F_{i,j}^{k-1} c_{ni} \right) \frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{\Delta V} + r_j^{k-1} \cdot (-\Delta H_{R_x}) \quad (14)$$

式(13)和式(14)为动态模型方程在网格节点 $(j, k)$ 点处经有限差分法转化后得到的代数方程组。为使该代数方程组可以求解, 将引入气体状态方程。根据浓度与气体的摩尔流量关系式  $F=Q \cdot c$  和气体状态方程<sup>[25]</sup>可知, 反应器内求解域内任意一点的总浓度可用式(15)表示以及入口处进料总浓度可用式(16)表示。

$$c_T = \frac{F_T}{Q} = \frac{p}{ZRT} \quad (15)$$

$$c_{T0} = \frac{F_{T0}}{Q_0} = \frac{p}{ZRT_0} \quad (16)$$

式中,  $c_T$  为反应器轴向某点处所有组分总浓度,  $\text{mol/m}^3$ ;  $F_T$  为反应器轴向某点处所有组分总摩尔流量,  $\text{mol/s}$ ;  $c_{T0}$  为反应器入口处进料总浓度,  $\text{mol/m}^3$ ;  $F_{T0}$  为反应器入口处进料总摩尔流量,  $\text{mol/s}$ ;  $p$  为反应器的总压力,  $\text{Pa}$ ;  $R$  为理想气体常数。式(15)除以式(16)并整理得式(17)。

$$Q = Q_0 \cdot \frac{F_T}{F_{T0}} \cdot \frac{T}{T_0} \quad (17)$$

由式(17)知, 当进料组成和进料体积流量等一定时, 求解域内任意点处气体的体积流量  $Q$  与该点处气体的总摩尔流量  $F_T$  和温度  $T$  成正比。为此式(17)可将反应体系中气体的体积流量的变化特性转化为定量函数来描述。进而将式(17)代入式(7)消去体积流量  $Q$  可得式(18)。

$$c_i = \frac{F_i}{Q} = \frac{F_i}{Q_0 \cdot \frac{F_T}{F_{T_0}} \cdot \frac{T}{T_0}} = \frac{F_i}{F_T} \cdot \frac{F_{T_0} \cdot T_0}{Q_0 \cdot T} \quad (18)$$

将式(16)与式(18)联立消去  $\frac{F_{T_0} \cdot T_0}{Q_0}$  后可得式(19)。

$$c_i = \frac{F_i}{F_T} \cdot \frac{p}{ZRT} \quad (19)$$

式(19)为将浓度  $c_i$  转换为各组分摩尔流量  $F_i$  和温度  $T$  的函数, 因此在求解域内  $(j,k)$  点处浓度  $c_{i,j}^k$  同样可用该点处各组分的摩尔流量  $F_{i,j}^k$  和温度  $T_j^k$  表示, 如式(20)。

$$c_{i,j}^k = \frac{pF_{i,j}^k}{ZRT_j^k \sum_{i=1}^m F_{i,j}^k} \quad i=1,2,\dots,m \quad (20)$$

联立式(13)、式(14)及式(20)解代数方程组得到在  $(j,k)$  点处浓度  $c_{i,j}^k$ , 摩尔流量  $F_{i,j}^k$  和温度  $T_j^k$ 。结合第 1.2 节中所提到此类偏微分方程组的初始条件和边界条件, 按照上述方法可以逐点求解得到平推流反应器轴向各点处浓度和温度等参数在不同时刻处的分布数据。

用有限差分法解偏微分方程时需考虑解的稳定性。本文选用左偏隐式为差分格式对式(3)和式(4)所构成的一阶双曲型偏微分方程组进行求解, 依文献[24]知, 在此差分格式下的稳定条件, 如式(21)。

$$\frac{Q\Delta t}{\Delta V} \in (-\infty, -1) \cup (0, +\infty) \quad (21)$$

平推流反应器中气体的体积流量以及空间和时间步长均为正值, 故其判别式  $\frac{Q\Delta t}{\Delta V}$  一定会大于零, 故平推流反应器动态模型求解中差分步长任意选取均满足解的稳定性条件。

### 3 实例验证与结果分析

为验证本文方法的有效性, 采用文献[11]中所提供丙酮气相裂解生成乙烯酮和甲烷稳态模拟的实例为研究对象进行分析。实例中给出反应器操作压力  $p$  为 162kPa, 进料丙酮气浓度  $c_{a0}$  为

18.8mol/m<sup>3</sup>, 温度  $T_0$  为 1035K, 原料以体积流量  $Q_0$  为 2.037m<sup>3</sup>/s, 从反应器入口连续流入; 初始时刻可假设反应器轴向各点处丙酮浓度  $c_a(x)$ , 乙烯酮浓度  $c_b(x)$  及甲烷浓度  $c_c(x)$  均为 0, 初始温度  $T(x)$  为 1035K 以及初始体积流量  $Q(x)$  为 2.037m<sup>3</sup>/s。该反应动力学模型如式(22)所示。

$$r = kc_a, \quad \ln k = 34.34 - \frac{34222}{T} \quad (22)$$

依据这些数据分别使用经典 MOL 法和本文方法求解得到反应器体积  $V$  为 1m<sup>3</sup> 内轴向各点处在 1s 内温度和浓度的数据。其中反应器入口处进料状况可作为动态模型方程的边界条件; 初始时刻反应器轴向各点处的参数(如浓度、温度等)可作为动态模型方程的初始条件。采用经典 MOL 法求解时, 将空间差分为 40 等分, 然后利用 Matlab 中的 ODE 工具箱进行求解; 采用本文方法求解时, 将空间差分为 40 等分、时间差分为  $n$  等分后利用 Matlab 的 fsolve 函数进行求解。

#### 3.1 时间差分值的确定

时间等分越细, 结果越精确, 但同样会加大计算量。为确定时间差分  $n$ , 在空间差分固定为 40 等分的情况下考察时间差分为 40, 80, 160, 320, 640 及 1280 等分时利用本文方法进行求解。图 2 和图 3 分别为本文方法求解得到 0.3s 和 0.5s 时各参数随轴向空间位置的变化曲线。由图 2 和图 3 可知, 时间差分为 40, 80 及 160 等分时, 模拟结果的曲线轨迹相差较大; 当时间差分达到 320 等分以上时, 时间网格数增加对模拟结果影响较小, 故采用本文方法求解时, 时间差分  $n$  确定为 320 较为合理。

#### 3.2 模型验证

为验证所提出方法的有效性, 分别给出了两种方法求解得到平推流反应器中点 ( $V=0.5m^3$ ) 和出口 ( $V=1m^3$ ) 处各参数的稳态值以及文献[11]中的理论值的比较结果如表 1 和表 2 所示。从模拟结果来看, 两种方法得到的温度稳态值和理论值相对误差较小(均低于 0.2%)。但本文方法得到浓度稳态值较 MOL 法得到的浓度稳态值更精确, 反应器中点处 MOL 法求解得到的浓度稳态值与理论值相比的相对误差为 6.065%, 而本文方法得到模拟结果的相对误差为 2.030%; 同样反应器出口处 MOL 法得到结果的相对误差为 8.341%, 而本文方法的相对误差为 1.073%。由于 MOL 法将气体体积流量设为恒定参数, 在反应器中点和出口处体积流量的稳态值与文献[11]中所提供的理论值差距较大, 而本文方法

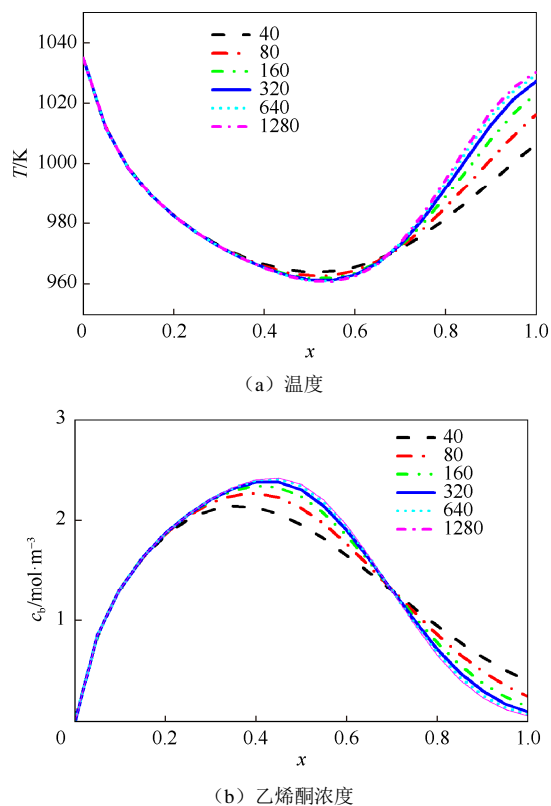


图 2 对时间进行不同程度等分时在 0.3s 时温度和乙烯酮浓度轴向分布

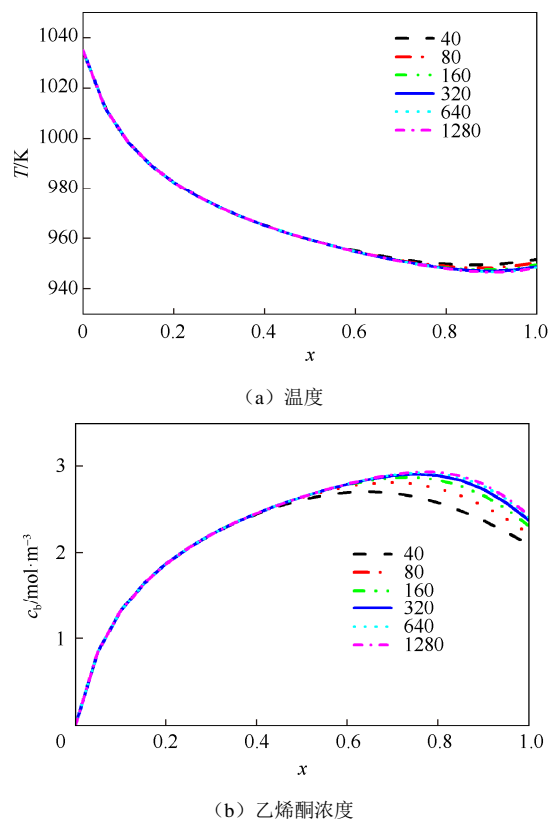


图 3 对时间进行不同程度等分时在 0.5s 时温度和乙烯酮浓度轴向分布

的体积流量的稳态值和理论值基本一致。通过表 1 及表 2 求解结果与理论值的比对说明本文方法的有效性，且本文方法求解得到的结果较 MOL 法求解得到的结果更精确。由此也说明平推流反应器中气体的体积流量将会影响到整个反应体系。

表 1 反应器中点处稳态值与理论值比较

参数	理论值	MOL 法	相对误差/%	本文方法	相对误差/%
温度/K	957.77	958.24	0.049	959.43	0.173
产物浓度/mol·m <sup>-3</sup>	2.704	2.868	6.065	2.649	2.030
体积流量/m <sup>3</sup> ·s <sup>-1</sup>	2.174	2.037	6.302	2.172	0.092

表 2 反应器出口处稳态值与理论值比较

参数	理论值	MOL 法	相对误差/%	本文方法	相对误差/%
温度/K	940.77	940.33	0.047	941.80	0.109
产物浓度/mol·m <sup>-3</sup>	3.261	3.533	8.341	3.226	1.073
体积流量/m <sup>3</sup> ·s <sup>-1</sup>	2.198	2.037	7.325	2.197	0.045

### 3.3 动态响应分析

图 4 和图 5 分别为经典 MOL 法与本文方法求解丙酮气相裂解过程动态模拟得到平推流反应器中点和出口处各参数随时间的变化曲线。由图 4 及图 5 可以清晰地发现，两种方法动态模拟得到温度和浓度随时间变化趋势基本一致。由于初始时刻反应器轴向各点处丙酮浓度假设为 0，只有当原料丙酮从入口流到中点和出口处才能开始反应，为此在中点和出口处反应发生前（如图 4 中约 0.1s 前和图 5 中约 0.2s 前）温度和浓度均为初始值。反应开始后各项参数均随时间发生变化：由于该体系发生的反应为吸热反应，温度会随时间下降；产物乙烯酮浓度曲线会随时间上升。经过一段时间中点和出口处各参数会达到稳态值（图 4 中约 0.4s 后和图 5 中约 0.7s 后）。

虽然两种方法求解得到各参数随时间变化的曲线大致相同，但图 4 和图 5 显示出不同方法得到结果的动态特性并不相同，本文方法得到轴向各点处的各参数开始变化的时间点早于 MOL 法的结果，越靠近反应器出口这种现象越明显。此结果就是由气体体积流量变化所引起的，根据表 1 和表 2 可清晰地发现反应器中点处及出口处气体体积流量的理论值均大于 MOL 法的假设值，即反应器实际流速比 MOL 法的假设值要快，故实际过程物料在反应器中某点处的动态响应点应较 MOL 法所得到的结果要早。

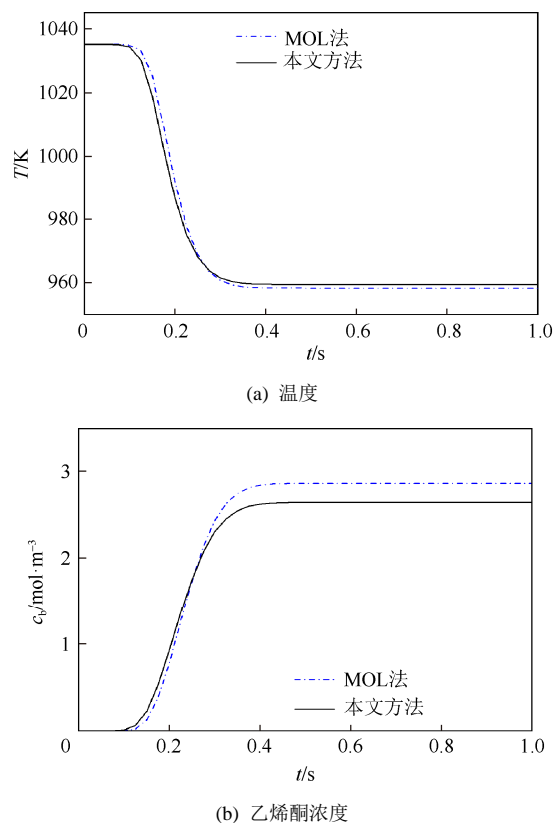


图 4 反应器中点处温度和丙烯腈浓度随时间分布图

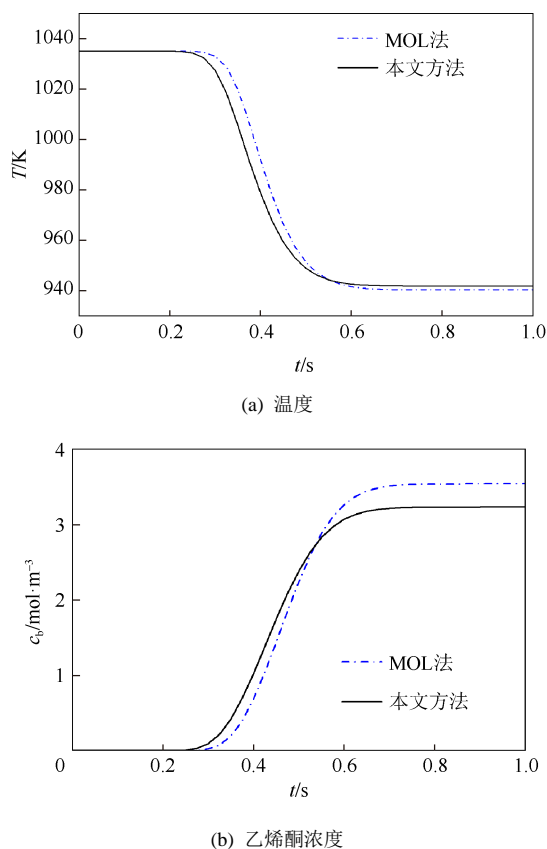


图 5 反应器出口处温度和丙烯腈浓度随时间分布图

图 6 给出本文方法求解得到气体体流量的时空分布图，由图可知原料进入平推流反应器后其体流量在求解域内均大于 MOL 法所假设的恒定值 ( $2.037\text{m}^3/\text{s}$ )，即气体流速更快。为此也说明本文方法较 MOL 法得到的动态响应点更符合实际过程。

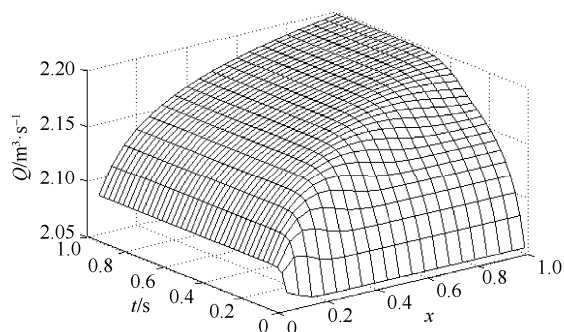


图 6 气体的体流量随空间和时间的分布

## 4 结论

本文提出关于平推流反应器动态模型一种新的求解方法，与文献中常用的经典 MOL 法（仅将空间进行离散化并将气体体流量设为恒定参数）相比，本文的方法将气体的体流量转化为温度和摩尔流量的函数，从而有效地弥补了经典 MOL 法将气体的体流量设为恒定参数的不足。为验证本文方法的优越性，将经典 MOL 法和本文方法应用于丙烯酰胺裂解为丙烯腈的平推流反应器中。模拟结果显示在相同条件下，两种方法得到轴向各点处温度和浓度随时间的变化趋势大致相同，但本文方法模拟的平推流反应器轴向各点处动态响应时间点更符合实际过程，且本文方法得到的动态过程中产物浓度的稳态值的相对误差与经典 MOL 法得到的相对误差相比，反应器出口处浓度的相对误差减小了 7% 以上。

## 参考文献

- [1] 王健红, 陈晓春. 化工装置动态模拟与优化工艺软件平台[J]. 化工进展, 1997, 16(4): 49-51.  
WANG J H, CHEN X C. Dynamic simulation and optimization platform for chemical process[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 1997, 16(4): 49-51.
- [2] 赵毅, 李超, 田健辉. 实时优化技术在乙烯装置在线优化中的应用[J]. 化工进展, 2016, 35(3): 679-684.  
ZHAO Y, LI C, TIAN J H. Application of real-time optimization in on-line optimization of ethylene plant[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2016, 35(3): 679-684.
- [3] 吕媛媛, 张岩, 刘蕾. 先进控制在烯烃厂碳二加氢反应器的应用[J]. 化工进展, 2011, 30(s1): 457-461.

- LÜ Y Y, ZHANG Y, LIU L. Industrial application of advanced process control in hydrogenation reactor of olefin plant[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2011, 30(s1): 457–461.
- [4] 吴斯侃, 曹志凯, 周华, 等. 一种用于二维稳态固定床的通用计算方法[J]. *厦门大学学报(自然科学版)*, 2016, 55(6): 830–835.  
WU S K, CAO Z K, ZHOU H, et al. General calculation method for two-dimensional fixed-bed at steady state[J]. *Journal of Xiamen University (Natural Science)*, 2016, 55(6): 830–835.
- [5] MOHAMMAD O, ERLING R, MAGNE H. Evaluation of kinetic models for Fischer-Tropsch cobalt catalysts in a plug flow reactor[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2016, 114: 236–246.
- [6] GEERT H, TSILLA B. Comprehensive Fischer-Tropsch reactor model with non-ideal plug flow and detailed reaction kinetics[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2016, 84(4): 281–289.
- [7] LI Y F, MARIA S, BAO J. A dynamic plug flow reactor model for a vanadium redox flow battery cell[J]. *Journal of Power Sources*, 2016, 31(15): 57–67.
- [8] SAVVAS S, JOANNE D, TIM P, et al. Biological methanation of CO<sub>2</sub> in a novel biofilm plug-flow reactor: a high rate and low parasitic energy process[J]. *Applied Energy*, 2017, 202(15): 238–247.
- [9] KÖNIG S, SURIYAH M R, LEIBFRIED T. A plug flow reactor model of a vanadium redox flow battery considering the conductive current collectors[J]. *Journal of Power Sources*, 2017, 360(31): 221–231.
- [10] DONG X J, HE Y J, SHEN J N, et al. Multi-zone parallel-series plug flow reactor model with catalyst deactivation effect for continuous catalytic reforming process[J]. *Chemical Engineering Science*, 2018, 175(16): 306–319.
- [11] FOGLER H S. *Essentials of chemical reaction engineering*[M]. 4th ed. New York: Pearson Education, 2010: 504–508.
- [12] LUYBEN W L. *Process modeling, simulation and control for chemical engineers*[M]. 2nd ed. New York: McGraw-Hill Higher Education, 1989: 19–25.
- [13] 李复, 吴慧雄, 解娅男. 硫磺回收工艺的动态模拟[J]. *北京化工大学学报(自然科学版)*, 2015, 42(6): 37–41.  
LI F, WU H X, XIE Y N. Dynamic simulation of the sulfur recovery process[J]. *Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science)*, 2015, 42(6): 37–41.
- [14] ALOPAEUS V, LAAVI H, AITTAMAA J. A dynamic model for plug flow reactor state profiles[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2008, 32(7): 1494–1506.
- [15] ROININEN J, ALOPAEUS V. The moment method for one-dimensional dynamic reactor models with axial dispersion[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2011, 35(3): 423–433.
- [16] 解娅男, 李复. Gsp 气化炉建模与动态模拟[J]. *计算机与应用化学*, 2017, 34(6): 465–470.  
XIE Y N, LI F. Modeling and dynamic simulation of Gsp gasifier[J]. *Computers and Applied Chemistry*, 2017, 34(6): 465–470.
- [17] XU Y L, ZHOU J L, QU Y Y, et al. Dynamics and oxygen transfer of a novel vertical tubular biological reactor for wastewater treatment[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2010, 156(1): 92–97.
- [18] INGHAM J, DUNN I J, HEINZLE E, et al. *Chemical engineering dynamics: an introduction to modelling and computer simulation*[M]. 3rd ed. Ontario: John Wiley & Sons, 2008: 340–344.
- [19] 刘永康, 张树增, 王健红. 光气合成反应器动态仿真[J]. *计算机仿真*, 2005, 22(10): 280–283.  
LIU Y K, ZHANG S Z, WANG J H. Dynamic simulation of phosgene synthesis reactor[J]. *Computer Simulation*, 2005, 22(10): 280–283.
- [20] 李绍芬. *反应工程*[M]. 3 版. 北京: 化学工业出版社, 2012.  
LI S F. *Reaction engineering*[M]. 3rd ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2012.
- [21] 陈涛, 张国亮. *化工传递过程基础*[M]. 3 版. 北京: 化学工业出版社, 2001.  
CHEN T, ZHANG G L. *Fundamental of transport phenomena for chemical process*[M]. 3rd ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2001.
- [22] DANCKWERTS P V. Continuous flow systems: distribution of residence times[J]. *Chemical Engineering Science*, 1953, 2(1): 1–13.
- [23] 陆金甫, 关治. *偏微分方程数值解法*[M]. 2 版. 北京: 清华大学出版社, 2003.  
LU J F, GUAN Z. *Numeric solution for partial difference equations*[M]. 2nd ed. Beijing: Tsing University Press, 2003.
- [24] 易大义, 蒋叔豪, 李有法. *数值方法*[M]. 杭州: 浙江科学技术出版社, 1984.  
YI D Y, JIANG S H, LI Y F. *Numerical method*[M]. Hangzhou: Zhejiang Science & Technology Press, 1984.
- [25] 王正烈, 周亚平. *物理化学*[M]. 4 版. 北京: 高等教育出版社, 2001.  
WANG Z L, ZHOU Y P. *Physical chemistry*[M]. 4th ed. Beijing: Higher Education Press, 2001.