

# 羰基合成丁醛反应过程的模拟

陈书成 王健红\* 王璟德 吴慧雄  
(北京化工大学 化学工程学院, 北京 100029)

**摘要:** 对丁醛生产流程中的羰基合成反应过程进行了模型化和动态模拟技术的研究。根据体系的物料平衡和能量平衡的分析,在可靠的热力学和反应动力学基础上,建立了丙烯氢甲酰化全混釜反应系统的数学模型。并根据合理的求解计算方法求解模型体系,最后完成本反应器的动态模拟过程。计算的结果和对比分析表明,本次动态模拟能很好地体现生产变化规律。

**关键词:** 羰基合成; 丁醛; 反应器; 模拟

**中图分类号:** TQ015.9

## 引言

羰基合成反应器是丁醛生产过程的核心环节,它为合成反应提供必要的场所和传质条件。因为羰基合成反应压力高、放热剧烈、传质状况复杂、反应的影响因素多,所以羰基合成反应过程的模拟计算是丁醛工艺过程研究的重点和难点。

前人关于丙烯羰基合成反应有过一些报道,如 Horák 等<sup>[1]</sup>对高压钴催化丙烯羰基合成反应器进行了模拟,采用一级反应动力学方程,研究分析了物料流动方式和反应器容积变化对反应速率和反应器温度的影响,也提出了理论上的液相物料的流型图,但是没有做实验和理论的验证;李达刚等<sup>[2]</sup>采用包含接触效率系数的本征动力学方程对丙烯氢甲酰化鼓泡填料反应器进行了模拟;崔波等<sup>[3]</sup>模拟了高压喷射式环流丙烯氢甲酰化反应器,以丁醛流程中多釜串联的丙烯氢甲酰化反应器为对象,结合现场工况和必要的简化假设,取得了很好的模拟结果;Vleeschhouwer 等<sup>[4]</sup>以气升式循环钴催化反应器为例,采用一级反应动力学方程对羰基合成反应进行了比较系统的建模计算,其中对操作过程中温度扰动带来的极限情况的模拟分析比较透彻。

但是关于以三苯基膦羰基铑为催化剂的低压羰基合成液相循环反应器的模拟研究较少,本文对此

类反应器和反应体系进行了系统的分析,采用全混釜模型,选择适宜模型体系的求解方法,对反应器进行了动态模拟计算。

## 1 反应器模型的建立

### 1.1 反应器分析

本文的研究对象为两个串联的羰基合成反应器,属于鼓泡搅拌式反应器,结构如图1所示。操作压力为 1.8 ~ 1.9 MPa,温度为 85 ~ 97 °C,在均相羰基铑为催化剂的条件下进行,储液量大,剧烈搅拌的同时采用自下而上通过液体的方式进行鼓泡,原料气在鼓泡通过液层上升过程中充分混合<sup>[5]</sup>。根据以上分析可知,反应器内部传质、传热充分,温度、浓度分布均匀,因此丙烯羰基合成反应器可作为全混釜进行模拟计算<sup>[6]</sup>。本反应器的催化剂为三苯基膦羰基铑,其特点是活性高、热稳定性好、选择性高、适用压力相对较低、产物丁醛的正异构比大。

大部分合成气、丙烯和循环回流的催化剂溶液进入 1<sup>#</sup>反应器中进行反应。1<sup>#</sup>反应器的循环泵使反应溶液经冷却器分为 3 股物流,一股返回 1<sup>#</sup>反应器,一股经 2<sup>#</sup>反应器冷却盘管再返回 1<sup>#</sup>反应器,这样两个反应器的反应热同时得到释放。另一股与原料合成气汇合后进入 2<sup>#</sup>反应器进行反应。这样经过两个串联的反应器,提高原料的转化率。

### 1.2 物性数据

物性数据的准确性在很大程度上决定了反应器模拟的质量,因此一系列准确的物性资料尤为重要。本次反应器模拟的数据分两部分获得,现成的化工物性数据库提供了大部分纯组分的物性数据,本实

收稿日期: 2013-03-11

第一作者: 男,1988年生,硕士生

\* 通讯联系人

E-mail: wjhmaster@263.net

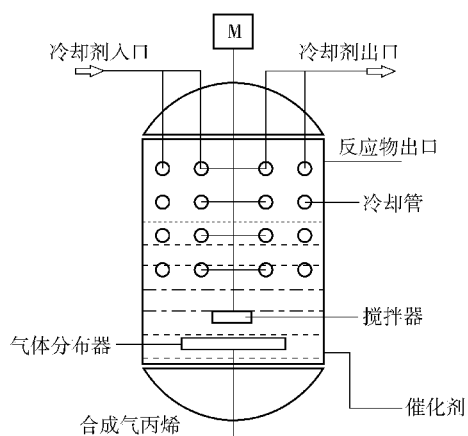


图 1 典型的搅拌反应器示意图

Fig. 1 Diagram of the typical mixing reactor

实验室自主开发的一套物性计算方法提供了现有物性数据体系中没有的物性资料,如副产物三聚物和溶剂三苯基膦(TPP)的物性数据见表 1。

表 1 物性估计数据

Table 1 Estimated material properties

物质	分子量	沸点/ ℃	密度/ kg·m <sup>-3</sup>	临界温度/ ℃	临界压力/ kPa
TPP	262.3	377	1075	603.6	2202
三聚物	216.3	244	829.8	430.8	1971

通过其他已有的模拟软件及其数据库验证了本物性数据的准确性,符合物性变化的基本规律。在最后的实际模拟应用中也进一步证明了物性数据的准确性。

### 1.3 反应器热力学模型的确定

动态模拟的关键就是确定适合模拟体系的热力学模型,精确的热力学性质的计算要求不同物系需要选择相对应的热力学方法。丁醛生产中的羰基合成反应体系涉及的物质种类包括:一氧化碳、氢气、丙烯、丙烷、正丁醛、异丁醛、TPP、三聚物等。化学反应仅在液相中进行,根据物系特点,使用 Soave<sup>[7]</sup>改进的 SRK 方程(MSRK 方程)计算体系的相平衡,MSRK 方程是一个非常成功的两参数状态方程,适用于极性和非极性物质,用于汽液平衡具有较好的效果。因此选择 MSRK 方程,然后利用状态方程法计算系统的汽液平衡。

MSRK 方程为

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)} \quad (1)$$

$$a = a_c \alpha \quad (2)$$

$$a_c = 0.42748R^2T_c^2/p_c \quad (3)$$

$$\alpha = 1 + (1 - T_R)(m + n/p_R) \quad (4)$$

$$b = 0.08664RT_c/p_c \quad (5)$$

式(3)~(5)中: $R$ 为气体常数; $T_c$ 、 $p_c$ 分别为临界温度和临界压力; $T_R = T/T_c$ 、 $p_R = p/p_c$ 分别为对比温度和对比压力。

混合规则

$$a_m = \sum \sum x_i x_j a_{ij} \quad (6)$$

$$a_{ij} = (1 - C_{ij})(a_i + a_j)/2 \quad (7)$$

$$C_{ii} = C_{jj} = 0 \quad C_{ij} = C_{ji} \quad (8)$$

$$b_m = \sum \sum x_i x_j b_{ij} \quad (8)$$

$$b_{ij} = (1 - D_{ij})(b_i + b_j)/2 \quad (9)$$

$$D_{ii} = D_{jj} = 0 \quad D_{ij} = D_{ji}$$

纯组分逸度系数  $\varphi$  的计算式为

$$\ln \varphi = (p_V/RT - 1) \left( 2 \sum x_j b_{ij}/b - 1 \right) - \ln \left[ (V - b)p/RT \right] - (a/RT) \ln(1 + b/V) \quad (10)$$

混合物中  $i$  组分的逸度系数  $\varphi_i$  的计算式为

$$\ln \varphi_i = \left( \frac{p_V}{RT} - 1 \right) \left( \frac{2 \sum x_j b_{ij}}{b} - 1 \right) - \ln \left[ (V - b) \frac{p}{RT} \right] - \frac{a}{RT} \left[ \ln \left( 1 + \frac{b}{V} \right) \right] \left( 1 + \frac{2 \sum x_j a_{ij}}{a} - \frac{2 \sum x_j b_{ij}}{b} \right) \quad (11)$$

混合焓差  $\Delta H$  的计算公式<sup>[8]</sup>为

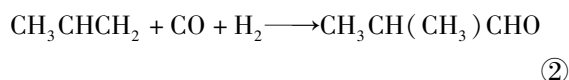
$$\Delta H = H - H^0 = \Phi \{ [-1/b(a - Ta') \ln(1 + b/V)] + RT(Z - 1) \} \quad (12)$$

式(12)中

$$a' = (1/2T) \sum \sum x_i x_j (1 - C_{ij}) [-a_{ci}(m_i T_{Ri} + n_i/T_{Ri}) - a_{cj}(m_j T_{Rj} + n_j/T_{Rj})] \quad (13)$$

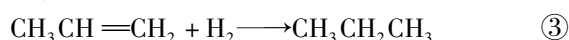
### 1.4 反应器的反应与动力学分析

羰基合成反应器内的主反应为丙烯羰基合成生成正丁醛和异丁醛,反应方程式为



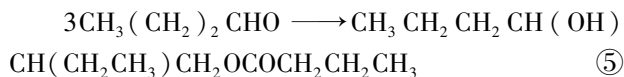
除主反应外,还有以下副反应<sup>[8]</sup>

(1) 丙烯加氢生成丙烷



(2) 丁醛三聚物的生成





反应①~⑤均为独立反应。上述反应是在两个串联的带搅拌的反应器液相中进行的,反应器中装有反应物、产物、副产物以及过量三苯基膦(催化剂溶剂,即 TPP)形成的混合液。

本文研究的羰基合成主反应动力学方程式采用 Alberto 课题组<sup>[9]</sup>得出的羰基合成经验方程式,他们在进行了一系列有效的研究之后,依据可靠的反应机理得到经验关联式为

$$R_n + R_i = 18([C_3]^{0.54}[\text{Rh}]/[\text{PPh}_3]^{0.65}) \exp[-20600/1.98(1/T - 1/373)] \quad (14)$$

而正丁醛和异丁醛的生成比例可由式(15)表示

$$R_n/R_i = 29.2\{ (1 + 6.51[\text{CO}][\text{PPh}_3]) / (1 + 92.3[\text{CO}]/[\text{PPh}_3]) \} \quad (15)$$

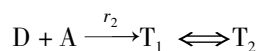
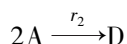
式(14)~(15)中, $R_n$ 、 $R_i$ 分别为正丁醛和异丁醛生成速率, mol/(L·min);  $[\text{CO}]$ 、 $[C_3]$ 和 $[\text{PPh}_3]$ 分别为溶解在反应液中的 CO、丙烯和三苯基膦浓度, mol/L。

本文采用的丙烯加氢副反应的动力学方程出自文献[10]

$$R_{\text{丙烷}} = 60[\exp(11.21 - 7646/T)][\text{Rh}]^{0.5} p_{\text{丙烯}}^{0.9} p_{\text{氢气}}^{0.4} / p_{\text{CO}}^{0.6} \quad (16)$$

式(16)中, $[\text{Rh}]$ 为溶解在反应液中铑的浓度; $p_{\text{CO}}$ 、 $p_{\text{丙烯}}$ 和 $p_{\text{氢气}}$ 分别为 CO、丙烯和氢气的分压, kPa。

醛的缩合反应是反应器中的另一类副反应,文献[9]也得出了此类反应的动力学



其中 A 为丁醛, D 为二缩醛,  $\text{T}_1$  为三聚物 1,  $\text{T}_2$  为三聚物 2。其动力学结果为

$$r_1 = A_1 \exp(-E_1/1.98T)[\text{A}]^{1.36} \quad (17)$$

$$r_2 = A_2 \exp(-E_2/1.98T)[\text{A}][\text{D}] \quad (18)$$

其中

$$A_1 = (32.93 \pm 1.09) \times 10^3 (\text{mol/L})^{-0.86} \text{h}^{-1} \quad (19)$$

$$A_2 = (62.4 \pm 2.43) (\text{mol/L})^{-1} \text{h}^{-1} \quad (20)$$

$$E_1 = (55931.46 \pm 239) \text{J/mol} \quad (21)$$

$$E_2 = (50157.86 \pm 382) \text{J/mol} \quad (22)$$

溶解气体组分  $i$  在混合溶剂中的溶解度问题,使用亨利定律来计算<sup>[11]</sup>

$$\ln(H_i/\gamma_i^\infty) = \sum w_A \ln H_{iA}/\gamma_{iA}^\infty \quad (23)$$

其中

$$w_A = x_A (V_{C_A})^{2/3} / \sum x_B (V_{C_B})^{2/3} \quad (24)$$

$$\ln H_{iA}(T, p_A^{*,L}) = a_{iA} + b_{iA}/T + c_{iA} \ln T + d_{iA} T \quad (25)$$

$$H_{iA}(T, p) = H_{iA}(T, p_A^{*,L}) \exp\left(\frac{1}{RT} \int_{p_A^{*,L}}^p V_{iA}^\infty dp\right) \quad (26)$$

其中  $a_{iA}$ 、 $b_{iA}$ 、 $c_{iA}$ 、 $d_{iA}$  为常数;  $p_A^{*,L}$  为纯液体饱和蒸汽压, kPa;  $c_A$ 、 $c_B$  为溶剂和溶质的浓度, mol/L;  $H_i$  为亨利常数;  $\gamma_i^\infty$  为无限稀释活度系数。

不同的溶剂和溶质,都有相对应的亨利常数,而这些数据可通过气体溶解数据回归获得。

### 1.5 羰基合成反应器模型的建立

根据前人的研究成果<sup>[10]</sup>,针对本研究课题的反应器类型,对反应器建立模型并进行了模型的求解。为简化计算,建立反应器模型时作如下假设。

(1) 反应器内部剧烈搅拌的同时,采用自下而上通过液体的方式进行鼓泡,原料气在鼓泡通过液层上升过程中充分混合,传质传热瞬间完成,因此反应过程主要为反应过程控制,反应器按照理想全混釜考虑,即假设反应过程中物质浓度、各部分温度均匀,传质、传热充分。

(2) 生产过程中,催化剂始终处于循环再生中,且不挥发,因此认为催化剂浓度始终不变,其活性也不变,其对动力学方程无影响。

(3) 反应器的容积恒定不变。

根据以上对反应过程的分析 and 提出的简化假设,建立反应过程物料衡算的数学模型

$$dN/dt = F_i - F_e + \sum VR_j \quad (27)$$

式(27)中: $N$  为反应器内物料的积累量, kmol;  $F_i$ 、 $F_e$  分别为各输入、输出物流的摩尔流量, kmol/h;  $R_j$  为第  $j$  个反应的反应速率, mol/(L·h)。

对反应过程的每个组分进行物料衡算,则有

$$dN_j/dt = F_{j,i} - F_{j,e} + \sum VR_j^* \quad (28)$$

式(28)中,设反应器中有  $m$  个组分 ( $m = 1, 2, \dots, c$ ),  $F_{j,i}$ 、 $F_{j,e}$  分别为反应器  $j$  组分进口和出口的摩尔流量, kmol/h;  $N_j$  为反应器内  $j$  组分的积累量, kmol。

建立能量衡算方程为

$$d(NT)/dt = \sum F_{k,i} H_{k,i} - \sum F_{l,e} H_{l,e} + Q \quad (29)$$

式(29)中: $k$ 、 $l$  分别为进料流、出料流股数 ( $k, l = 1, 2, \dots$ );  $F_{k,i}$ 、 $F_{l,e}$  分别为进料流股和出料流股的摩尔

流量, kmol/h;  $H_{k,i}$ 、 $H_{k,e}$  分别为进料流股和出料流股的焓, kJ;  $Q$  为外界与反应器之间的热量交换, kJ。

用平均比热来计算物流的焓变, 则式(29)就可转化为

$$c_p d(NT)/dt = F_i c_p T_0 - F_e c_p T_t + N_t \sum ( - \Delta H_i ) r_i + Q \quad (30)$$

式(30)中,  $\Delta H$  为反应热, kJ/mol;  $n$  为独立反应数; 本反应体系的独立反应数为 5, 即  $n \leq 5$ 。初始条件为  $t=0$  时,  $T=T_0$ 。

## 2 反应器模型的求解

### 2.1 模型的计算

本文对模型进行求解, 采用常微分方程组的数值解法。实时性是动态模拟的突出特点, 决定了其过程的复杂性, 代数方程和微分方程一起进行求解计算, 且在运行过程中控制变量(包括干扰变量)随时改变<sup>[12]</sup>。因此采用如下数学方法描述

$$dy/dt = f(x, y, t, c) \quad (31)$$

$$\phi(x, y, c) = 0 \quad (32)$$

$$x|_{t=t_0} = x_0 \quad (33)$$

式(31)~(33)中,  $x$  为纯量, 下标 0 表示初值。对于动态模拟,  $y$  就是温度、压力、组成、流量、液位等过程状态变量的向量。  $c=c(t)$  为时间的函数, 一般是操作变量或随机干扰变量。显式 Euler 法为求解上述常微分方程组的基本数值方法, 即

$$c_k = c(t_k)$$

$$\text{由 } \phi(x_k, y_k, c_k) = 0 \text{ 迭代计算解出}$$

$$y_k = y(x_k, c_k)$$

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k, t_k, c_k) \quad k=0, 1, 2, \dots$$

根据反应过程数学模型的建立和求解计算方法, 用 C 语言编写了羰基合成反应器模拟的程序。

### 2.2 模拟结果分析

#### 2.2.1 系统动态特性的验证

在模拟程序正常运行时, 考察随着反应时间的进行, 反应过程的变化, 其结果如图 2 所示。

由图 2(a) 可见, 从丙烯的转化率判断, 反应大约经过 120 min 达到稳定, 转化率数据符合实际数据, 与实际生产相符合, 在验证了模型合理性的同时, 又体现了本次模拟良好的动态特性。

由图 2(b) 可见, 反应开始时丁醛的正异构比较大, 但随反应进行逐渐变小。因为三苯基膦空间位阻效应, 使丙烯的端基碳获得优先与 Rh 结合的机

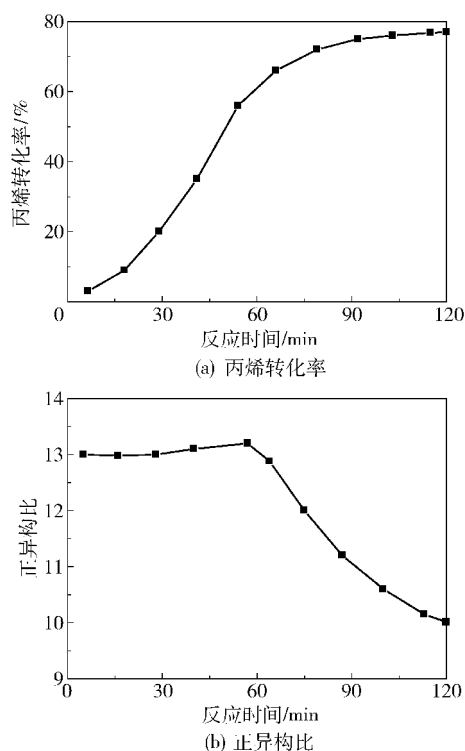


图 2 丙烯转化率、正异构比随反应时间的变化

Fig. 2 Changes in the conversion of propylene and n/i ratio as a function of reaction time

会, 生成正丁醛, 所以在反应开始时丁醛的正异构比较大。而在反应稳定时, 丁醛的正异构比大约维持在 10:1 左右。

#### 2.2.2 反应温度对羰基合成体系的影响

反应器的温度是羰基合成反应过程中操作调节最频繁的参数。本文研究了温度对反应过程的影响, 分析的温度均在适宜或者可能适宜羰基合成反应体系的温度区间内, 即 70~120 °C。本文分别考察并分析了反应过程中丙烯转化率、丁醛正异构比和丁醛产率三方面, 其结果如图 3 所示。

从图 3(a) 可见, 在升温过程中, 丙烯转化率随温度升高而升高, 开始温度较低时, 温度的变化对丙烯转化率的影响较为明显, 在高于 95 °C 时, 转化率随温度提升而产生的变化就没那么明显了。

由图 3(b) 可见, 在适宜丙烯羰基合成的温度范围内, 正异构比随温度变化而产生的变化比较小, 在 120 °C 以上, 正异构比虽然有所增加, 但是此温度范围已经不宜反应进行。

由图 3(c) 得出, 随着温度升高, 丙烯转化为丁醛的产率下降, 副反应的产量增加, 温度升高虽然有利于反应速率的增加, 但是对本反应体系的主要产

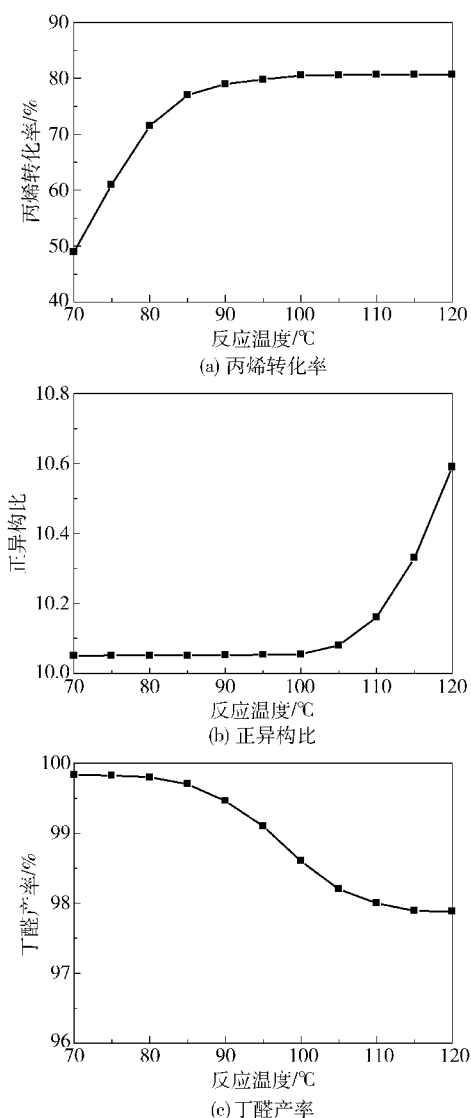


图3 温度对丙烯转化率、正异构比和丁醛产率的影响

Fig.3 Effects of temperature on the conversion of propylene, n/i ratio and butyraldehyde yield

物的生成有不良影响,因此只考虑丁醛产率的时候,要尽量在较低温度下进行。

综上所述,85~97℃是适宜反应进行的温度区间,温度升高虽然可提高反应速率,但不利于催化剂保持活性。在此温度区间内较低的温度,有利于主要产物丁醛的生成,抑制其他副产物的产生,更符合实际生产的要求。

### 2.2.3 动态模拟精度的验证

两个反应器模拟计算结果以及其与生产值的相对误差对比见表2。

从表2数据可以看出,模拟结果与实际生产数据符合程度良好,关键组分和重要生产指标的相对误差都不大于5%,这个误差在工程试验上是允许

的,验证了模拟计算中所选用的物性、物性计算方法、热力学模型和动力学方程都能精确地描述和计算实际生产状况,建模的假设和假设基础上建立的数学模型模拟精度较高,物料平衡和能量平衡分析比较合理。

表2 计算数值和实际生产值的比较

Table 2 Comparison of calculated data with actual production

项目	模拟结果		相对误差/%	
	第一反应器	第二反应器	第一反应器	第二反应器
温度	90℃	90℃	0	0
压力	2.01 MPa	2.01 MPa	0	0
气相出料量	95.2 kmol/h	46.40 kmol/h	-7.83	1.35
液相出料量	856 kmol/h	901.5 kmol/h	1.58	-0.80
丙烯转化率	77.86%	95.95%	-1.88	0.96
正丁醛收率	68.48%	77.34%	2.02	-0.92
异丁醛收率	10.02%	12.89%	-1.86	3.92
正丁醛摩尔分数	60.20%	67.80%	-0.50	-1.60
异丁醛摩尔分数	8.90%	11.00%	1.11	4.76
丙烯摩尔分数	13.50%	3.80%	3.05	2.70
丙烷摩尔分数	6.00%	5.40%	3.45	1.89

## 3 结论

对丁醛工艺羰基合成反应过程进行了系统的分析,选择了合适本反应体系的热力学方法和动力学模型,通过建模很好地描述了羰基合成反应器,建立和开发了羰基合成反应器的动态模拟。通过本次模拟计算和数据分析,得到的计算过程和结果与实际生产中的重要指标和关键组分相对误差不大于5%。并且反应器大约在120 min达到稳定,85~97℃是相对适宜反应器运行的温度区间。

### 参考文献:

- [1] Horák J, Běloblav Z, Mardon F. Analysis of the oscillatory behaviour of an industrial reactor for the oxonation of propene. Evaluation of flow models based on the response to a pulse signal[J]. Collection of Czechoslovak Chemical Communications, 1987, 52(6): 1454-1460.
  - [2] 李达刚, 马玉源, 孙衍文, 等. 钴磷催化剂丙烯低压醛化制丁醇数学模型的研究[J]. 化工学报, 1984(2): 171-181.
- Li D G, Ma Y Y, Sun Y W, et al. Mathematical modeling for hydroformylation of propene to butanol with com-

- plex CO-P catalyst[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering (China), 1984(2): 171-181. (in Chinese)
- [3] 崔波, 张洪全, 畅延青, 等. 高压羰基合成喷射式环流反应器数学模拟[J]. 化学工程, 1994, 22(1): 28-33.
- Cui B, Zhang H Q, Chang Y Q, et al. Jet loop reactor for high pressure oxo synthesis mathematical simulation [J]. Chemical Engineering (China), 1994, 22(1): 28-33. (in Chinese)
- [4] Vleeschhouwer P H M. Analysis of limit cycles in an industrial oxo reactor[J]. Chemical Engineering Science, 1992, 479(9/10/11): 2547-2552.
- [5] 张旭之, 陶志华, 王松汉, 等. 丙烯及衍生物工学[M]. 北京: 化学工业出版社, 1995: 216-217.
- Zhang X Z, Tao Z H, Wang S H, et al. Propylene and derivative technology [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 1995: 216-217. (in Chinese)
- [6] 王锦惠, 王蕴林, 刘光宏, 等. 羰基合成[M]. 北京: 化学工业出版社, 1987: 255-262.
- Wang J H, Wang Y L, Liu G H, et al. Oxo synthesis [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 1987: 255-262. (in Chinese)
- [7] Soave G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state[J]. Chemical Engineering Science, 1972, 27: 1197-1203.
- [8] 朱敬镐, 李阳初, 郭天民. 状态方程应用于非理想溶液的汽液平衡计算: (I)改进的 SRK 模型[J]. 华东石油学院学报, 1983(2): 164-178.
- Zhu J H, Li Y C, Guo T M. Application of equation of state in vapor-liquid equilibrium calculation of non-ideal solutions[J]. Journal of China University of Petroleum, 1983(2): 164-178. (in Chinese)
- [9] Guglielmo G, Giorgio M, Maurizio T, et al. Propene hydroformylation with tris (triphenylphosphine) carbonylrhodium hydride. I. Chemistry of the catalytic system [J]. Chimica e l'Industria, 1980, 62(5): 389-394.
- [10] 张伏生. 低压羰基合成生产丁辛醇装置的模拟[D]. 北京: 北京化工大学, 2005: 70.
- Zhang F S. The all-process simulation of low pressure oxo device to 2-Ethyl hexanol production [D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2005: 70. (in Chinese)
- [11] 张本玲. 羰基合成丁醛、丙醛工艺的模拟与研究[D]. 天津: 天津大学, 2008: 11-12.
- Zhang B L. Simulation and study on oxo synthesis of butyraldehyde and propanal [D]. Tianjin: Tianjin University, 2008: 11-12. (in Chinese)
- [12] 王健红, 冯树波, 杜增智. 化工系统工程理论与实践[M]. 北京: 化学工业出版社, 2009: 96-102.
- Wang J H, Feng S B, Du Z Z. Chemical systems engineering theory and practice [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2009: 96-102. (in Chinese)

## Simulation of the butyraldehyde oxo-synthesis process in a synthesis reactor

CHEN ShuCheng WANG JianHong WANG JingDe WU HuiXiong

(College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

**Abstract:** Dynamic simulations of the mixing kettle reactor in butyraldehyde synthesis have been carried out. According to the equilibria of mass and energy under realistic thermodynamic and kinetic conditions, a dynamic model of the mechanism of butyraldehyde synthesis in the mixing kettle reactor was obtained. A suitable mathematical treatment was chosen based on the form and characteristics of the model and a dynamic simulation program module was developed. Running of the module gave results that are consistent with the production of butyraldehyde in practice.

**Key words:** oxo-synthesis; butyraldehyde; reactor; simulation