

一种用于二维稳态固定床的通用计算方法

吴斯侃, 曹志凯*, 周 华, 陈秉辉

(厦门大学化学化工学院, 福建 厦门 361005)

摘要: 针对固定床反应器模拟过程难以形成其模型完整通用的计算模块且编程工作量大的问题, 提出了一种稳态下固定床反应器中反应物和产物温度及浓度分布的通用计算方法. 该方法以关键组分的摩尔分数作为变量, 推导出关键组分在物料与热量衡算中的偏微分方程组中的通式, 并利用正交配置法求解. 同时考虑固定床反应器内气相流速的变化, 将其描述为关键组分摩尔分数的函数进一步实现模型的通用性. 对于特定的反应, 只需提供目标反应的动力学方程及操作条件即可求解. 最后利用所提出的方法实现乙苯催化脱氢制苯乙烯与乙炔法制氯乙烯反应过程的模拟, 结果表明该方法具有通用性和高效性.

关键词: 固定床反应器; 计算模拟; 正交配置法; 二维拟均相模型

中图分类号: TQ 015

文献标志码: A

文章编号: 0438-0479(2016)06-0830-06

凡是反应床层由固定器壁所固定, 流体通过固体催化剂或隔板进行反应的反应器, 统称为固定床反应器^[1], 固定床反应器在化工领域应用非常广泛. 为实现其优化操作, 常对固定床反应器进行模拟. 早在 20 世纪 60 年代, Forment^[2]提出了固定床反应器的二维数学模型, 并给出热量和物料衡算式. 直至今日, 在文献^[2]的基础上已报道了不少有关二维模型的模拟研究工作^[3-5].

随着模拟软件的不断改进^[6], 结合反应动力学来模拟固定床反应器以研究其内部的温度场和浓度场的二维分布成为可能. 利用单管或中试数据实现反应动力学的拟合^[7-9]也有报道, 但对于固定床二维模型的通用计算方法, 近年来进展不大^[10-11]. 文献^[12]通过假设反应器内部气相流速恒定来简化反应器模型的求解, 该方法较易实现单一反应体系固定床反应器的模拟. 由于假设反应器内部气相流速恒定, 对流速或温度变化较大的体系可能导致模拟结果存在一定误差. 为此本文中将模型中的流速转化为摩尔分数的函数, 提出通用的固定床反应器二维数学模型建立的方法, 成功地解决了动力学方程通用模块编程难的问题, 并利用正交配置法在 MATLAB 平台上实现了固定床内

部温度场和组分浓度的二维分布问题的求解.

1 模型的建立

1.1 模型的基本假设

确定的反应体系可通过具体的反应方程式、反应组分、反应动力学及反应装置的特点来建立确实可靠的反应模型^[13]. 但对反应组分或反应体系不确定的抽象对象建立通用的模拟模块具有一定的难度. 为了研究的方便, 可对所研究的对象提出一些符合客观条件的假设. 针对二维拟均相固定床反应器假设如下: 1) 不考虑反应器内的压降; 2) 反应器为轴对称的圆柱; 3) 反应器内气相沿轴向流动且不存在轴向返混和导热.

1.2 物料和热量衡算

为建立固定床反应过程的二维拟均相模型, 首先需确定其衡算方程、本构关系和定解条件. 由于本构关系涉及具体反应体系的动力学速率关系, 因此不在本研究的讨论范围之内, 本节主要介绍物料和热量的衡算方程.

如图 1 所示, 在床层中环绕床层且距床壁径向距

收稿日期: 2016-03-08 录用日期: 2016-04-08

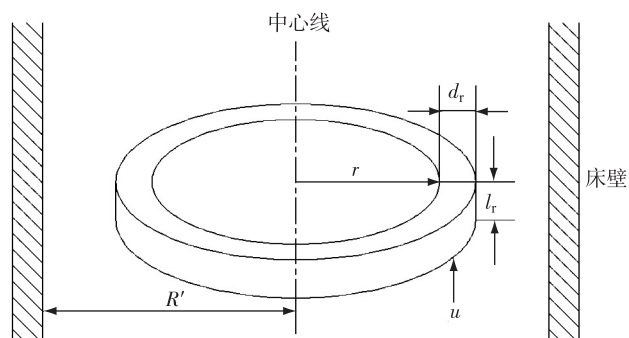
基金项目: 国家自然科学基金(21576228)

* 通信作者: zhikai@xmu.edu.cn

引文格式: 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.

Citation: 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. (in Chinese)



图1 固定床中的环状微元体积示意^[14]Fig. 1 Cyclic annular micro-unit volume schematic^[14]

离 R' 的中心线上取径向长度为 r 、径向厚度为 d_r 、高为 l_r 的微元环柱体。在该微元内对反应中的关键组分 k 作物料衡算,得到固定床反应器中关键组分 k 的二维拟均相浓度分布模型如下:

$$u \frac{\partial c_k}{\partial l} = E_r \left(\frac{\partial^2 c_k}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c_k}{\partial r} \right) + \rho_B \sum_{j=1}^m (v_{jk} \bar{r}_j), \quad k=1,2,\dots,m. \quad (1)$$

式中: c_k 为第 k 个关键组分的浓度, mol/m^3 ; E_r 为径向有效扩散系数, m^2/s ; ρ_B 为催化剂堆积密度, kg/m^3 ; u 为流速, m/s ; l 为轴向高度, m ; r 为径向长度, m ; v_{jk} 为第 k 个关键组分的第 j 个独立反应的化学计量系数; $\bar{r}_j$ 为第 j 个独立反应的普遍反应速率, $\text{mol}/(\text{kg} \cdot \text{s})$; m 为关键组分数。

与物料衡算不同的是,热量衡算不对反应中的关键组分 k 作热量衡算,而是着眼于整个固定床床层温度的变化。由图1可得固定床反应器中二维拟均相温度分布的微分方程:

$$G \bar{C}_p \frac{\partial T}{\partial l} = \lambda_{er} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \rho_B \sum_{j=1}^m (\Delta H_j r_j). \quad (2)$$

式中: G 为总质量流量, $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$; $\bar{C}_p$ 为混合物平均热容, $\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$; T 为温度, K ; λ_{er} 为拟均相模拟导热系数, $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$; ΔH_j 为第 j 个独立反应的反应热, J/mol 。

1.3 边界条件的建立

数学模型的定解条件为其解是否存在、是否唯一且稳定的依据。定解条件包括初始条件与边界条件,而稳态过程则只需考虑边界条件。据1.1的假设,边界条件可确定如下:

$$l=0, 0 < r < r_0; c_k = c_{k0}, T = T_0; \quad (3)$$

$$r=0, 0 < l < L; \frac{\partial c_k}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0; \quad (4)$$

$$r=r_0, 0 < l < L; \frac{\partial c_k}{\partial r} = 0; \quad (5)$$

$$-\lambda_{er} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) = h_w (T - T_w). \quad (6)$$

式中: r_0 为反应器半径, m ; T_0 为初始温度, K ; L 为管长, m ; h_w 为壁面传热系数, $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$; T_w 为壁面温度, K 。

2 模型参数的计算

在1.2中,利用衡算方程仅仅得到一般性的二维拟均相固定床反应器模型,而对于不同的反应体系,反应动力学方程所涉及的自变量不尽相同。为使模型具有更好的通用性,对原有模型中的参数和自变量进行替换以简化计算和编程难度。

2.1 模型通用化衡算方程

由式(1)和(2)可知,反应体系的物料衡算与热量衡算的对象分别为关键组分的浓度和反应体系的温度。反应体系不同其动力学的表达形式也各异^[15],反应速率实际上可以描述为相关参数(如浓度、分压等变量)的函数。若仍以式(1)中关键组分浓度作自变量,将对模型的通用化造成困难,因此接下来讨论如何对衡算方程中的变量进行替换。

摩尔分数表示混合物中某组分物质的量与混合物总物质的量之比,故采用关键组分的摩尔分数转化反应动力学中相关参数,将使得模型具有通用性。由气体状态方程可知

$$c_k = \frac{p y_k}{Z R_g T}. \quad (7)$$

式中: p 为总压力, Pa ; Z 为气体压缩系数; R_g 为摩尔气体常数, $\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$; y_k 为组分 k 的摩尔分数。

气体混合物体积流率及流速 u 随反应温度的变化和反应进行的程度而变化(对于非等摩尔反应),但直接求解流速 u 较难,所以需对方程进行一些代数变换,以简化其计算难度。由式(7)可知

$$u c_k = \frac{F y_k}{S}, \quad (8)$$

式中: F 为混合物的摩尔流率, mol/s ; S 为反应器横截面积, m^2 。将式(8)对 l 求导得

$$\frac{\partial u}{\partial l} c_k + u \frac{\partial c_k}{\partial l} = \frac{1}{S} \left(\frac{\partial F}{\partial l} y_k + F \frac{\partial y_k}{\partial l} \right). \quad (9)$$

由于

$$\frac{\partial u}{\partial l} = \frac{\partial \left(\frac{F Z R_g T}{S p} \right)}{\partial l} =$$

$$\frac{ZR_g}{Sp}\left(\frac{\partial F}{\partial l}T+\frac{\partial T}{\partial l}F\right),\tag{10}$$

将式(9)和(10)移项整理后代入式(1)得

$$\begin{aligned}\frac{F}{S}\frac{\partial y_k}{\partial l}-\frac{y_kF}{ST}\frac{\partial T}{\partial l}=\\ \frac{E_{\tau}p}{ZR_gT}\left(\frac{\partial^2 y_k}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial y_k}{\partial r}\right)+\rho_B\sum_{j=1}^m(v_{jk}\bar{r}_j).\end{aligned}\tag{11}$$

需要说明的是,模型求解过程中物料衡算与热量衡算方程须联立求解.若反应体系中独立反应数为 m ,则需选取 m 个关键组分并对其进行物料衡算.即式(11)实际涵盖 m 个关键组分的物料衡算方程,将它与式(2)

联立后,即可得到变量 $\frac{\partial y_k}{\partial l}(k=1,2,\cdots,m)$ 和 $\frac{\partial T}{\partial l}$ 的 $m+1$ 元一次方程组.具体如下:

$$\begin{aligned}\frac{\partial y_k}{\partial l}=\frac{SE_{\tau}p}{FZR_gT}\left(\frac{\partial^2 y_k}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial y_k}{\partial r}\right)+\\ \frac{S}{F}\rho_B\sum_{j=1}^m(v_{jk}\bar{r}_j)+\frac{y_k}{T}\\ \frac{\lambda_{\text{er}}}{GC_p}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}\right)-\\ \frac{y_k}{T}\frac{\rho_B}{GC_p}\sum_{j=1}^m(\Delta H_j\bar{r}_j),\tag{12}\\ \frac{\partial T}{\partial l}=\frac{\lambda_{\text{er}}}{GC_p}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}\right)-\frac{\rho_B}{GC_p}\sum_{j=1}^m(\Delta H_j\bar{r}_j).\tag{13}\end{aligned}$$

式(12)和(13)即为固定床反应器通用的二维拟均相稳态物料衡算与热量衡算的微分方程.

2.2 混合物摩尔分数的转化

根据 2.1 可知,式(12)中 F 为混合物的摩尔流率,它实际上可描述为关于 m 个关键组分的摩尔分数 y 的函数,即

$$F=f(F_0,y_1,y_2,\cdots,y_m).\tag{14}$$

若反应体系中组分数为 n ,为方便公式推导,先将化学计量系数矩阵进行初等行变换,得到独立反应的化学计量系数矩阵 $\mathbf{v}$,使得 m 个关键组分的化学计量系数为 1,变换后的系数矩阵中不为 1 的系数用 v_{ij} 表示,即:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}\cdot\mathbf{W}=0,\tag{15}\\ \mathbf{v}=\begin{pmatrix}1&0&\cdots&0&v_{1(m+1)}&\cdots&v_{1n}\\0&1&\cdots&0&v_{2(m+1)}&\cdots&v_{2n}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&1&v_{m(m+1)}&\cdots&v_{mn}\end{pmatrix},\tag{16}\end{aligned}$$

$$\mathbf{W}=\begin{pmatrix}W_1\\W_2\\\vdots\\W_m\\W_{m+1}\\\vdots\\W_n\end{pmatrix}.\tag{17}$$

对所有组分进行物料衡算分析,以探求混合物的摩尔流率与关键组分的摩尔分数之间的关系,相关表达式如表 1 所示.表中列出了每个组分初始状态和瞬时状态下的摩尔分数以及摩尔流率的数学表达式,根据质量守恒原理可得第 i 个组分瞬时状态下的摩尔流率表达式为:

$$\begin{aligned}f_i=F_0y_{i,\text{in}}+v_{1i}(Fy_1-F_0y_{1,\text{in}})+v_{2i}\\(Fy_2-F_0y_{2,\text{in}})+\cdots+v_{mi}(Fy_m-\\F_0y_{m,\text{in}}),i\in[m+1,n].\end{aligned}\tag{18}$$

式中: F_0 为混合物的初始摩尔流率, mol/s; $y_{i,\text{in}}$ 为组分 i 的进料摩尔分数.由于各组分的摩尔分数之和等于 1,即:

$$y_1+y_2+\cdots+y_n=1,\tag{19}$$

$$y_{1,\text{in}}+y_{2,\text{in}}+\cdots+y_{n,\text{in}}=1.\tag{20}$$

因此将方程联立后即可求得混合物摩尔流率与关键组分的摩尔分数之间的关系:

$$\begin{aligned}F=F_0\left[1-\sum_{j=1}^m\left(1+\sum_{i=m+1}^nv_{ji}\right)y_{j,\text{in}}\right]/\\ \left[1-\sum_{j=1}^m\left(1+\sum_{i=m+1}^nv_{ji}\right)y_j\right].\end{aligned}\tag{21}$$

最后将式(21)代入式(12)即可.

表 1 物料衡算表
Tab. 1 Material balance sheet

组分	初始状态		瞬时状态	
	摩尔分数	摩尔流率	摩尔分数	摩尔流率
W_1	$y_{1,\text{in}}$	$F_0y_{1,\text{in}}$	y_1	Fy_1
W_2	$y_{2,\text{in}}$	$F_0y_{2,\text{in}}$	y_2	Fy_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
W_m	$y_{m,\text{in}}$	$F_0y_{m,\text{in}}$	y_m	Fy_m
W_{m+1}	$y_{m+1,\text{in}}$	$F_0y_{m+1,\text{in}}$	y_{m+1}	f_{m+1}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
W_n	$y_{n,\text{in}}$	$F_0y_{n,\text{in}}$	y_n	f_n
合计	1	F_0	1	F

2.3 正交配置法的应用

正交配置法是一种特殊的点配置方法,其具有接

近于 Galerkin 方法的高精度,又保留了配置方法的简单形式^[16-17].根据 1.1 的假设,利用圆柱对称性正交配置常数,选取适当的正交配置点个数 N 后,即可将原偏微分方程组变为常微分方程组,而后利用 MATLAB 工具箱函数求解.

r 方向的正交配置即对式(12)和(13)的二次偏导项和一次偏导项展开,可得到内配置点上的微分方程:

$$\frac{\partial y_{kj}}{\partial l} = \frac{SE_r p}{FZR_g T} \left[\sum_{i=1}^{N+1} B_{ji} y_k(R_i, l) + \frac{1}{R_j} \sum_{i=1}^{N+1} A_{ji} y_k(R_i, l) \right] + \frac{S}{F} \rho_B \sum_{j=1}^m (v_{jk} \bar{r}_j) + \frac{y_k}{T} \frac{\lambda_{er}}{GC_p} \left[\sum_{i=1}^{N+1} B_{ji} T(R_i, l) + \frac{1}{R_j} \sum_{i=1}^{N+1} A_{ji} T(R_i, l) \right] - \frac{y_k}{T} \frac{\rho_B}{GC_p} \sum_{j=1}^m (\Delta H_j \bar{r}_j), \quad (22)$$
$$\frac{\partial T_j}{\partial l} = \frac{\lambda_{er}}{GC_p} \left[\sum_{i=1}^{N+1} B_{ji} T(R_i, l) + \frac{1}{R_j} \sum_{i=1}^{N+1} A_{ji} T(R_i, l) \right] - \frac{\rho_B}{GC_p} \sum_{j=1}^m (\Delta H_j \bar{r}_j), \quad (23)$$

式中 A_{ji} 、 B_{ji} 、 R_j 是正交配置常数.式(22)和(23)中所包含的方程数为 $2N$,而变量数为 $2(N+1)$,为此还需增加浓度和温度的边界条件,即:

$$y_{kN+1} = - \sum_{i=1}^N A_{(N+1)i} y_i(R_i, l) / A_{(N+1)(N+1)}, \quad (24)$$
$$T_{N+1} = \frac{1}{A_{(N+1)(N+1)} + \frac{h_w r_0}{\lambda_{er}}} \left[\frac{h_w r_0}{\lambda_{er}} T_w - \sum_{i=1}^N A_{(N+1)i} T(R_i, l) \right]. \quad (25)$$

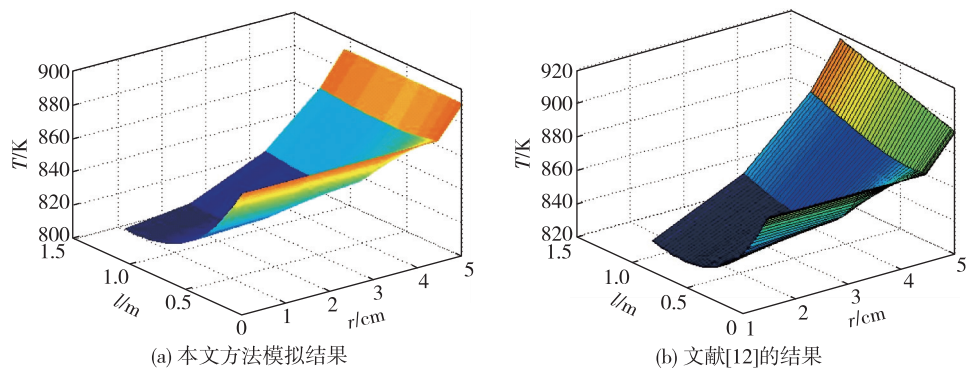


图 3 实例 1 中固定床反应器轴向温度分布
Fig. 3 Axial and radial temperature distribution of fixed-bed reactor of example 1

至此,式(22)~(25)组成常微分方程组封闭,然后利用 MATLAB 工具箱函数求解即可.

3 程序设计与验证

3.1 程序设计框图

图 2 给出了所提出方法的程序设计框图,并求解乙苯催化脱氢制苯乙烯与乙炔法制氯乙烯过程的模型来验证所提出方法的有效性和通用性.

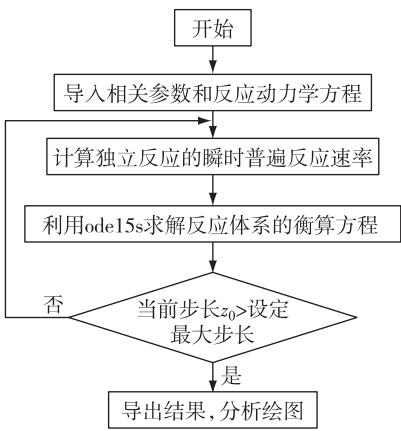


图 2 程序设计流程图
Fig. 2 Program flow diagram

3.2 实例分析

实例 1 为乙苯催化脱氢制苯乙烯的反应,利用所提出的方法结合文献[12]所提供的动力学模型及操作条件对该过程进行模拟,模拟所得到的固定床轴向温度分布和乙苯平均转化率沿管长的分布如图 3~4.

文献[12]模拟得到反应器出口中心处温度为 827.11 K,乙苯最终转化率为 46.83%.采用本文中提出的方法模拟得到反应器出口中心处温度为 819.57

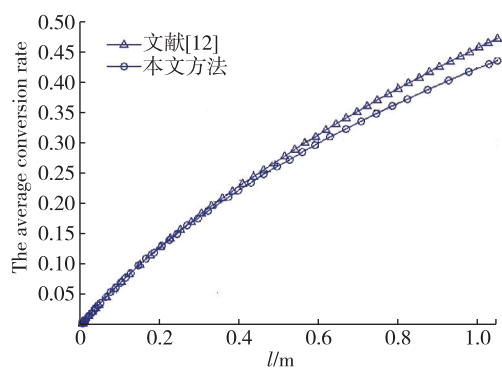


图 4 乙苯平均转化率沿管长的分布
Fig. 4 Axial average percent conversion distribution of ethyl benzene

K,乙苯最终转化率为 43.15%。

为不失一般性,将文献[13]中的乙炔法制氯乙烯体系作为实例 2 进行研究,将所得到的固定床轴向温度分布和乙炔转化率轴径向分布的模拟结果列于图 5~6 中.文献[13]模拟结果为:固定床反应器内最高温度 391.7 K,出口温度 374.3 K,反应器出口处乙炔平均转化率 81.52%.本文方法模拟结果为:固定床

反应器内最高温度 387.14 K,出口温度 372.65 K,反应器出口处乙炔平均转化率 88.09%。

通过 2 个实例的模拟结果分析,可知本文中所提出的方法解决了二维稳态固定床反应器模型的通用求解问题,所得到的模拟结果与文献变化趋势吻合,但具体数据略有差异,这是由于原文献均未考虑流速 u 的变化。

4 结 论

本文中提出了一种固定床反应器稳态模型求解的通用计算方法,该方法有效处理了床层反应中气相流速随着反应进程的变化而不断变化的问题,且该方法适用于反应动力学函数的不同形式.为满足模型的通用性,首先将模型中的气相流速转化为关键组分摩尔分数的函数,避免了将模型中流速视为常数而引起求解误差的问题,从而提高了模拟结果的准确度,又降低了编程工作量.然后在此基础上确立程序设计的基本步骤和算法框图,并在 MATLAB 上实现了相应的功能.最后运用该方法模拟了固定床反应器中的 2

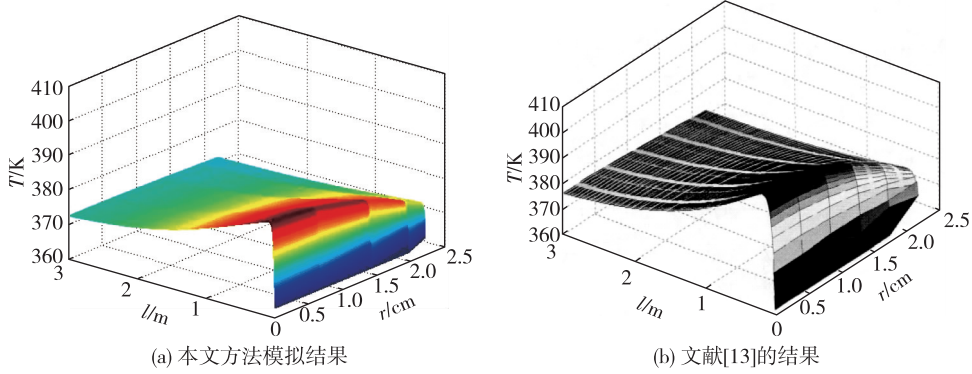


图 5 实例 2 中固定床反应器轴向温度分布
Fig. 5 Axial and radial temperature distribution of fixed-bed reactor of example 2

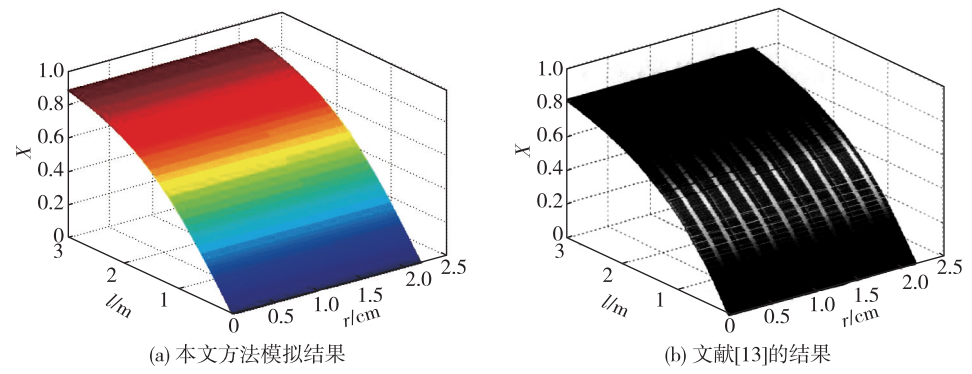


图 6 乙炔转化率轴径向分布
Fig. 6 Axial and radial percent conversion distribution of acetylene

个具体实例,模拟结果与文献结果趋势相符,验证了该方法的通用性和有效性。

参考文献:

- [1] 朱炳辰. 化学反应工程[M]. 北京: 化学工业出版社, 2009: 140-141.
- [2] FROMENT G F. Fixed bed catalytic reactors-current design status[J]. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1967, 59(2): 18-27.
- [3] AKPAN E, AKANDE A, ABOUDHEIR A, et al. Experimental, kinetic and 2-D reactor modeling for simulation of the production of hydrogen by the catalytic reforming of concentrated crude ethanol (CRCCE) over a Ni-based commercial catalyst in a packed-bed tubular reactor[J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62(12): 3112-3126.
- [4] WANG Y N, XU Y Y, LI Y W, et al. Heterogeneous modeling for fixed-bed Fischer-Tropsch synthesis: reactor model and its applications[J]. *Chemical Engineering Science*, 2003, 58(3/4/5/6): 867-875.
- [5] ODENDAAL W, GOBIE W, CARBERRY J. Thermal parameter sensitivity in the simulation of the non-isothermal, non-adiabatic fixed bed catalytic reactor: the two-dimensional heterogeneous model[J]. *Chemical Engineering Communications*, 1987, 58(1/2/3/4/5/6): 37-62.
- [6] ALI N B, PETERSEN K, WOHLIN C. A systematic literature review on the industrial use of software process simulation[J]. *Journal of Systems and Software*, 2014, 97: 65-85.
- [7] YANG Y B, YAMAUCHI H, NASSERZADEH V, et al. Effects of fuel devolatilisation on the combustion of wood chips and incineration of simulated municipal solid wastes in a packed bed[J]. *Fuel*, 2003, 82(18): 2205-2221.
- [8] SHIN D, CHOI S. The combustion of simulated waste particles in a fixed bed[J]. *Combustion and Flame*, 2000, 121(1/2): 167-180.
- [9] NIJEMEISLAND M, DIXON A G. CFD study of fluid flow and wall heat transfer in a fixed bed of spheres[J]. *AIChE Journal*, 2004, 50(5): 906-921.
- [10] BERNINGER J A, WHITLEY R D, ZHANG X, et al. A versatile model for simulation of reaction and nonequilibrium dynamics in multicomponent fixed-bed adsorption processes[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1991, 15(11): 749-768.
- [11] LIAPIS A I, RIPPINT D W T. A general model for the simulation of multi-component adsorption from a finite bath[J]. *Chemical Engineering Science*, 1977, 32(6): 619-627.
- [12] 黄华江. 实用化工计算机模拟: MATLAB在化学工程中的应用[M]. 北京: 化学工业出版社, 2004: 144-148.
- [13] 陈静. 乙炔法氯乙烯反应器模拟与优化研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2011: 33-35.
- [14] 陈甘棠. 化学反应工程[M]. 3版. 北京: 化学工业出版社, 2007: 203-205.
- [15] KISSINGER H E. Reaction kinetics in differential thermal analysis [J]. *Analytical Chemistry*, 1957, 29(11): 1702-1706.
- [16] 李希. 化工问题的建模与数学分析方法[M]. 北京: 化学工业出版社, 2006: 288-291.
- [17] FINLAYSON B A. Packed bed reactor analysis by orthogonal collocation[J]. *Chemical Engineering Science*, 1971, 26(7): 1081-1091.

General Calculation Method for Two-dimensional Fixed-bed at Steady State

WU Sikan, CAO Zhikai*, ZHOU Hua, CHEN Binghui

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: Fixed-bed reactor is the most widely used reactor in the chemical process. However, the programming for solving its mathematical model has been case by case via solving partial differential equations till now. In such a situation, it is impossible to build up a complete calculation module for the fixed-bed reactor model and incur the workload and burden in simulation. In this work, a general method to obtain the distribution of temperature and concentration of fixed-bed reactor at steady state is proposed. The method makes use of mole fractions of key components as variables and then applies orthogonal collocation to solve the formula of partial differential equations, which is deduced in the material and heat balance. Molar flow rate of reaction mixture is introduced at the same time and the relationship between the instantaneous molar flow rate, the initial value and mole fraction of key components are also built with a variable transfer method, to make the solution have versatility. Therefore, the computing module, which is used to solve partial differential equations, becomes programmable independent of a specific reaction, i.e., a common program module. For a specific reaction, only a kinetic equation program is required to be added into the module.

Key words: fixed-bed reactor; computational simulation; orthogonal collocation method; two-dimensional pseudo-homogeneous model