

引用格式:王瀚彬. 水平隔板调控聚醚多元醇反应器停留时间分布数值模拟[J]. 北京化工大学学报(自然科学版), 2026, 53(4): 32-40.

WANG HanBin. Numerical simulation of the residence time distribution in polyether polyol reactors with horizontal baffles [J]. Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science), 2026, 53(4): 32-40.

水平隔板调控聚醚多元醇反应器停留时间分布数值模拟

王瀚彬

(中石化(上海)石油化工研究院有限公司, 上海 201208)

摘要: 为满足聚醚多元醇生产领域对绿色经济反应的迫切需求,开发了一种带有水平隔板的新型搅拌反应器。通过计算流体动力学(CFD)数值模拟,研究了水平隔板孔道尺寸 δ 、隔板数量 n 及入口流量 Q_A 对反应器流场与停留时间分布(RTD)性能的影响。结果表明:反应器内每层桨叶均可形成独立的径向流场,各腔室的流型结构为经典的双循环流型;当 δ 减小、 n 增加时,当量反应器数 N_{eq} 逐渐增大;当 Q_A 由 $0.011\text{ m}^3/\text{h}$ 增大到 $5.65\text{ m}^3/\text{h}$ 时,均一化停留时间 θ 保持稳定, N_{eq} 逐渐增大且增大趋势变缓;在 $\delta=30\text{ mm}$ 、 $n=3$ 、 $Q_A=1.13\text{ m}^3/\text{h}$ 的优化条件下,搅拌反应器的平均停留时间为 79.87 s , N_{eq} 为 4.19 。

关键词: 搅拌反应器; 聚醚多元醇; 停留时间分布(RTD); 数值模拟

中图分类号: TQ116.2 **DOI:** 10.13543/j.bhxbzr.2026.04.004

引言

聚醚多元醇是生产聚氨酯材料的重要原料^[1-3],其产品质量直接影响聚氨酯制品的性能与应用效果。近年来随着社会经济的发展,我国聚醚多元醇的产能逐年增加,2024年其国内总产能已突破940万吨^[4]。停留时间分布(RTD)是调控聚醚多元醇产品质量的关键参数,物料在反应器内的RTD越均匀,链增长反应的同步性就越高,从而提升聚醚多元醇的质量。因此,精准设计与调控聚合反应器的RTD对优化生产工艺、提升产品质量具有重要的工程意义。

搅拌反应器的流场特性是影响RTD的重要因素^[5-10],许多学者对反应器内流体流动进行了研究。Rutherford等^[5]使用激光多普勒(LDA)技术,可视化研究了搅拌釜式反应器内的流动状态,发现流体流型与桨叶的底部间隙有较大关系。Busciglio等^[7]使用粒子图像测速(PIV)和激光诱导荧光(PLIF)技术

对不同结构搅拌釜式反应器内的流场进行了分析,结果表明进料流量是影响反应器内部流动的重要因素。除实验方法外,还可以通过数值模拟分析反应器内的流场。计算流体动力学(CFD)是一种利用计算机程序研究流体流动的技术^[11-13],与实验方法相比,CFD技术可以节省大量成本,获得更为详细的流体信息。研究表明,利用CFD对搅拌反应器内的流体混合情况进行数值模拟,可以准确捕捉到流体的流动和混合过程^[9]。

国内外学者对搅拌反应器的RTD特性开展了大量研究^[14-20]。Ochoa-Tapia等^[14]构建了耦合RTD特性的搅拌釜CFD模型,阐明了耦合模型对RTD特性描述的优势。Scargiali等^[16]研究了Rushton涡轮搅拌器中固相颗粒的RTD,结果表明全混釜串联模型的模拟数据与实验结果非常吻合,可以较好地表述固相颗粒的RTD特性。Zhang等^[18]基于CFD研究了多级搅拌装置的RTD特性,阐明了搅拌转速、进料流量等参数对体系RTD特征的影响。整体而言,现有研究多集中于常规结构的搅拌设备,侧重探究数学模型、操作参数对RTD的影响,较少从反应器内部结构出发,探究结构参数对流场、RTD性能的

收稿日期: 2025-12-17

作者: 男, 1995年生, 助理研究员

E-mail: wanghanbin22@163.com

影响。

目前,聚醚多元醇行业广泛采用多釜串联工艺^[21-23],该工艺通过多个搅拌反应器串联反应来提高聚醚多元醇的反应转化率、改善聚合度分布。然而随着绿色低碳发展理念日益受到重视,该工艺带来的设备投资与维护费用过高等问题愈发凸显。为此,本研究提出一种带有水平隔板的新搅拌反应器,采用CFD研究了水平隔板孔道尺寸、隔板数量及进料流量对新型搅拌反应器流场和RTD的影响,旨在通过提出的单一反应器实现接近多釜串联的RTD,研究结果可为工业化聚醚多元醇反应器的结构设计提供参考。

1 反应器数学模型

1.1 几何结构

图1为带水平隔板的聚醚多元醇搅拌反应器模型,表1为反应器的几何结构参数。该反应器主要由4层标准 Rushton 桨叶和3层水平隔板组成,桨叶层自下而上依次为第1层、第2层、第3层和第4层,水平隔板自下而上依次编号为1[#]、2[#]和3[#],每层隔板均采用等孔径设计。反应器底部设有进料口A,顶部设有出料口B,管径设计保证两者流通截面积相等。为简化计算模型,忽略工业反应器常用的椭圆封头,该简化主要影响近壁面和封头区域

的流体流动细节,但对反应器主体区域的宏观流动及RTD影响有限。反应器的搅拌桨叶离底距离设为 $T/2=100\text{ mm}$ 。

表1 聚醚多元醇反应器的几何结构参数

Table 1 Geometric structural parameters of the polyether polyol reactor

几何结构参数	数值
反应器直径 T/mm	200
搅拌桨叶间距 H/mm	200
搅拌桨叶直径 D/mm	66.7
搅拌轴直径 $D_{\text{shaft}}/\text{mm}$	10
挡板宽度 W/mm	20
入口A直径 D_A/mm	15
出口B直径 D_B/mm	18
水平隔板孔道尺寸 δ/mm	30、133.5、200
水平隔板数量 n	0、1、2、3

1.2 控制方程

1.2.1 流体动量传递方程

反应器流动模型基于雷诺平均连续性方程和纳维-斯托克斯(Navis-Stokes)方程,其基本控制方程如下。

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{\nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) - \rho \overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'}]}{\rho} \quad (2)$$

式中: $\mathbf{U}$ 代表速度矢量, m/s ; t 代表时间, s ; p 代表压力, Pa ; ρ 代表流体密度, kg/m^3 ; μ 代表流体黏度, $\text{Pa}\cdot\text{s}$; $\mathbf{U}'$ 代表速度脉动分量, m/s 。与层流控制方程相比,上述湍流方程引入了湍流系数 $\tau^R = -\rho \overline{\mathbf{U}'\mathbf{U}'}$ 。

相较于大涡模型,标准 $k-\varepsilon$ 模型虽然在捕捉湍流脉动细节上存在不足,但其良好的计算经济性和鲁棒性已被广泛验证,诸多研究^[6,8,17-19]表明该模型能够准确预测搅拌反应器内部流体的流动和RTD特性。因此本研究采用该模型进行模拟,湍流动能 k 及耗散率 ε 可通过以下方程得到。

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (k\mathbf{U}) = \frac{\nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right]}{\rho} + \frac{G}{\rho} - \varepsilon \quad (3)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\mathbf{U}) = \frac{\nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right]}{\rho} + \frac{c_1 \varepsilon}{\rho k} G - \frac{c_2 \varepsilon^2}{k} \quad (4)$$

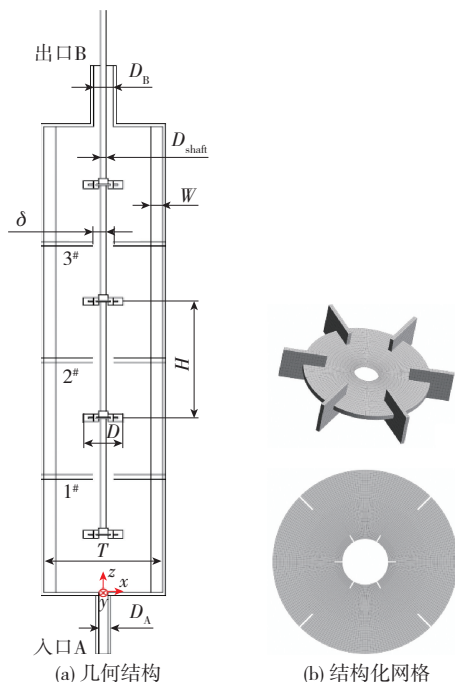


图1 带水平隔板的聚醚多元醇反应器模型

Fig. 1 Polyether polyol reactor model with horizontal baffles

$$\mu_t = c_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5)$$

式中: μ_t 代表湍流黏度, $\text{Pa}\cdot\text{s}$;模型参数 $c_1=1.44$, $c_2=1.92$, $c_\mu=0.09$, $\sigma_k=1.0$, $\sigma_\varepsilon=1.3$;湍流能量项 G 可通过式(6)得到。

$$G = \tau^R: \nabla U \quad (6)$$

1.2.2 流体组分输运方程

为得到RTD曲线,模型采用组分输运方程来模拟脉冲示踪剂在反应器内的扩散活动,其基本控制方程^[24]如下。

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \nabla \cdot (UC_1) = \nabla \cdot (D_1 \nabla C_1) \quad (7)$$

式中: C_1 代表示踪剂的质量分数; D_1 代表扩散系数, m^2/s 。

流体的质量分数 C_2 可通过下式得到。

$$C_2 = 1 - C_1 \quad (8)$$

1.2.3 模型初始及边界条件

为聚焦水平隔板对反应器内流动与RTD的作用机理,本研究选用水替代聚醚多元醇作为模拟介质,这有助于避免非牛顿流体复杂流变特性的干扰,从而可以更清晰地揭示几何结构因素主导下的RTD规律。

对于流场模拟,采用多重参考系法(MRF)建立模型,将计算域划分为旋转动态区和相对静态区。反应器的搅拌转速 $N=800 \text{ r/min}$,原料入口流量 $Q_A=1.13 \text{ m}^3/\text{h}$ 。

对于RTD模拟,采用数值模型进一步对示踪剂在反应器内的输运过程进行求解。设定水的密度 $\rho=1000 \text{ kg/m}^3$,黏度 $\mu=0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$,扩散系数 $D_t=1.29 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ 。示踪剂的物性参数与主流体保持一致。

1.3 网格无关性验证

为求解上述数值模型,采用如图1(b)所示的结构化网格进行反应器网格划分,采用二阶迎风格式对动量方程和组分输运方程进行空间离散化,采用二阶隐式格式进行时间推进。在每个时间步长下,当归一化残差均小于 10^{-6} 时,可视为达到收敛。

图2为对比相关文献进行的模型验证结果。图2(a)中,横坐标表示桨叶中心平面流体径向位置 r 与搅拌桨半径 $D/2$ 的比值,纵坐标表示流体径向速度 V_r 与桨叶叶端速度 V_{tip} 的比值。由图2(a)可以看到,采用350万网格的模拟结果与文献[6]和[25]的实验数据非常吻合,搅拌桨叶中心的无因次径向速度

V_r/V_{tip} 随径向位置 $2r/D$ 的增大而逐渐减小。图2(b)中,横坐标表示停留时间 t ,纵坐标表示停留时间分布密度函数 $E(t)$ 。结果表明,采用350万和850万网格计算得到的RTD曲线基本相同,并且模拟数据与文献[18]的实验数据吻合较好,模拟的RTD与文献数据的误差最大仅为3%。因此,可以认为采用350万网格的数值模型来模拟聚醚多元醇反应器是准确的。

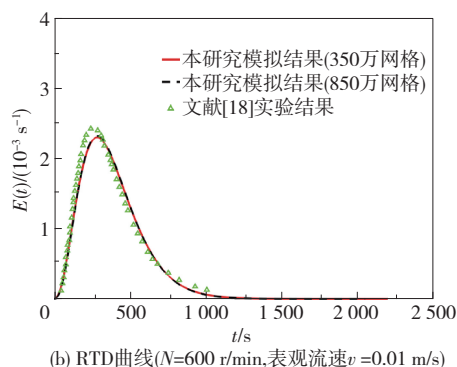
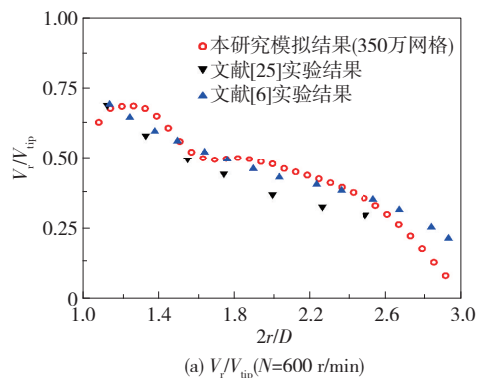


图2 网格无关性验证

Fig. 2 Grid independence verification

2 结果与讨论

2.1 反应器流体流动特性

为探究新型搅拌反应器的流动特性,本研究对稳态宏观流场进行了模拟。图3为反应器内不同搅拌桨叶间的速度分布云图($\delta=200 \text{ mm}$, $N=800 \text{ r/min}$, $Q_A=1.13 \text{ m}^3/\text{h}$)。可以看到流体速度的最大值 (2.8 m/s) 出现在桨叶叶端,约为主流区平均速度的3.1倍,显著高于进料口流速 (1.8 m/s)。这表明与入口进料相比,搅拌桨叶排出流仍对反应器内流体流动起主导地位。同时,速度矢量流型表明反应器内每层桨叶均可形成独立的双循环流型径向流场,该结果与文献[6]和[25]的实验数据一致。此外,进料流对反应器流动也有显著作用,例如第1层桨

叶下方的流体速度约为其他桨层速度的1.5~2倍,该现象主要源于进料流对底部区域的直接动量注入,并与桨叶排出流协同形成局部高剪切区,这一特性显著强化了反应器底部物料的混合强度与微观混合。

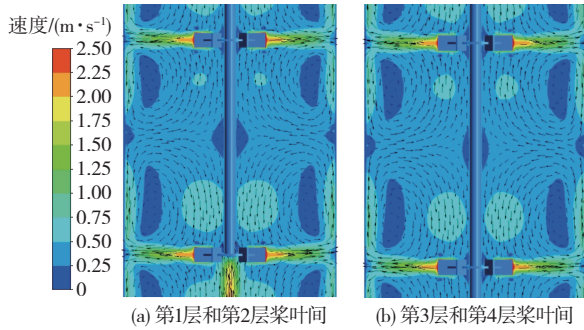


图3 反应器内不同搅拌桨叶间的速度分布云图($\delta=200$ mm, $N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h)

Fig. 3 Cloud diagrams of velocity distribution between different impellers in the reactor ($\delta=200$ mm, $N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h)

2.2 RTD积分计算时间验证

RTD性能由概率密度函数 $E(t)$ 定量描述,其定义为出口示踪剂浓度 $C(t)$ 经归一化处理后的分布函数。本研究监测反应器出口示踪剂的浓度响应曲线,并按下式计算 $E(t)$ 。

$$E(t) = \frac{dC(t)}{dt} = \frac{C(t)}{\int_0^{t_1} C(t) dt} \quad (9)$$

式中 t_1 代表积分计算时间。

代表 $E(t)$ 数学期望的平均停留时间 $\bar{t}$ 可由式(10)得到。

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{t_1} tE(t) dt}{\int_0^{t_1} E(t) dt} = \int_0^{t_1} tE(t) dt \quad (10)$$

代表 $E(t)$ 离散度的方差 σ^2 可由式(11)得到。

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^{t_1} (t - \bar{t})^2 E(t) dt}{\int_0^{t_1} E(t) dt} = \int_0^{t_1} t^2 E(t) dt - \bar{t}^2 \quad (11)$$

结合多釜串联返混模型,对方差 σ^2 进行均一化处理,可得到返混模型参数——当量反应器数(N_{eq}),该参数定量表征了实际反应器的返混程度。对于聚醚多元醇反应体系,提高 N_{eq} 意味着减少物料返混,从而有效抑制反应物料的短路,提高反应转

化率。 N_{eq} 可由下式得到。

$$N_{eq} = \frac{1}{\sigma_{\theta}^2} \quad (12)$$

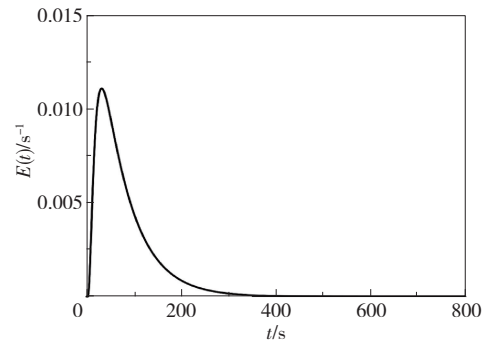
$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{\sigma^2}{\bar{t}^2} \quad (13)$$

均一化停留时间 θ 可由式(14)得到。

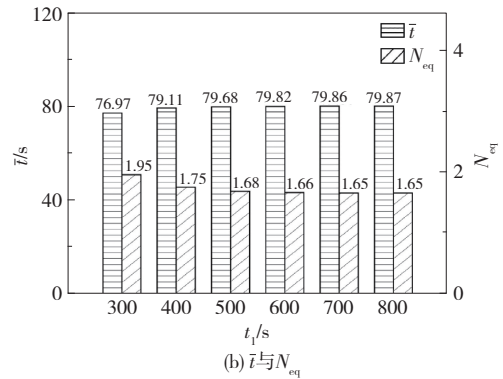
$$\theta = \frac{\bar{t}}{\tau} \quad (14)$$

式中: τ 代表空间时间,s。

图4为聚醚多元醇反应器的RTD性能($\delta=200$ mm, $N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h)。由图4(a)可以看到,RTD曲线的峰值出现在 $t=32.1$ s处,且曲线尾部有明显的拖尾现象。这表明未设置水平隔板的搅拌反应器内部存在流体流动死区。根据式(10)和式(11)可知,RTD性能的定量指标 $\bar{t}$ 和 N_{eq} 不仅受到分布曲线的影响,还取决于积分计算时间 t_1 。图4(b)为 t_1 对 $\bar{t}$ 和 N_{eq} 的影响。可以看到,当 t_1 由300 s增大到500 s时, $\bar{t}$ 逐渐增大, N_{eq} 逐渐减小。当 t_1 由600 s增大到800 s时, $\bar{t}$ 与 N_{eq} 逐渐趋于稳定。当 t_1 由600 s增大到700 s时, $\bar{t}$ 仅增大了0.05%, N_{eq} 仅减小了0.6%,因此本研究确定



(a) RTD曲线



(b) $\bar{t}$ 与 N_{eq}

图4 聚醚多元醇反应器的RTD性能($\delta=200$ mm, $N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h)

Fig. 4 RTD performance of the polyether polyol reactor ($\delta=200$ mm, $N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h)

t_1 为 600 s。

2.3 水平隔板结构参数对 RTD 性能的影响

水平隔板结构主要由水平隔板孔道尺寸 δ 与隔板数量 n 决定。 δ 设置 3 个工况: $\delta=200$ mm、133.5 mm、30 mm, 对应开孔率依次为 100%、45%、2%。 n 设置 4 个工况: $n=0$ 、1、2、3, 其中 $n=0$ 表示无隔板, $n=1$ 表示采用 2# 隔板, $n=2$ 表示采用 1#、3# 隔板, $n=3$ 表示采用 1#、2#、3# 隔板。

2.3.1 隔板孔道尺寸的影响

图 5 为不同隔板孔道尺寸 δ 下反应器的 RTD 曲线 ($N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h, $n=3$)。可以看到, 在 $\delta=200$ mm 条件下, RTD 曲线的峰值出现在 $t=32.1$ s 处, 且峰值较低。随着孔道尺寸减小至 133.5 mm 和 30 mm, RTD 曲线的峰值位置逐渐向右移动, 并且 $\delta=30$ mm 时的峰值大于 $\delta=200$ mm 和 133.5 mm 时的峰值。这表明随着 δ 减小, 搅拌反应器内部各物料微元的停留时间分布逐渐均一。

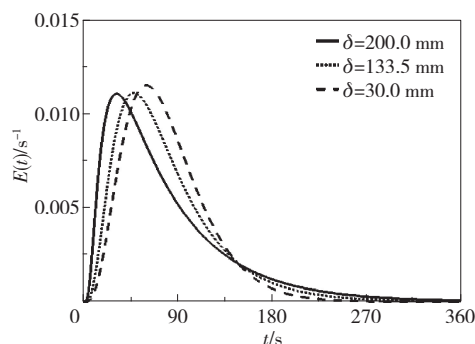


图 5 不同隔板孔道尺寸 δ 下反应器的 RTD 曲线 ($N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h, $n=3$)

Fig. 5 RTD curves of the reactor for different baffle orifice sizes δ ($N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h, $n=3$)

图 6 展示了不同隔板孔道尺寸 δ 下反应器内部示踪剂的瞬时浓度分布云图 ($N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h, $n=3$)。在 $\delta=200$ mm 条件下, 示踪剂加入后受搅拌桨排出流的影响, 迅速向上扩散, 在 $t=9.8$ s 时到达反应器顶部, 并在后续时间内形成上下两区分布 (图 6(a)), 这表明流体整体混合较快, 但受重力与循环流的影响仍存在宏观分区。与之相比, 在 $\delta=133.5$ mm 和 30 mm 条件下隔板表现出显著的阻隔作用。在 $\delta=133.5$ mm 条件下, $t=9.8$ s 时示踪剂被限制在反应器底部区域, $t=29.8 \sim 79.8$ s 时示踪剂的扩散前沿向顶部移动, 但始终呈现出与 3 层隔板相对应的 4 腔室结构 (图 6(b)), 这说明隔板有效延缓了示踪剂的轴向返混, 促进了腔室间的串联

流动。在 $\delta=30$ mm 条件下, 隔板的阻隔效应更为显著, 示踪剂的流动主要依靠孔道间的缓慢流动, 从而显示出更为清晰的 4 腔室结构及平推流特性 (图 6(c))。

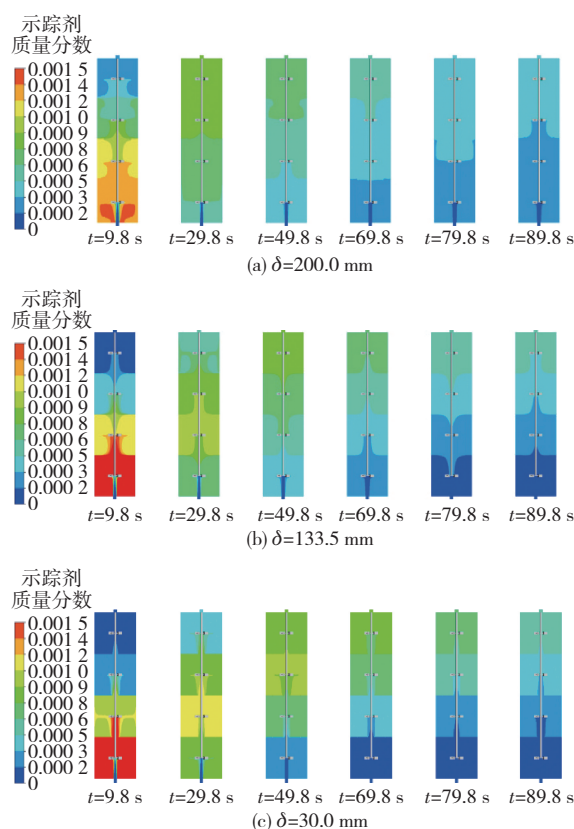


图 6 不同隔板孔道尺寸 δ 下反应器内部示踪剂的瞬时浓度分布云图 ($N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h, $n=3$)

Fig. 6 Cloud diagrams of the instantaneous concentration distribution of tracers inside the reactor for different baffle orifice sizes ($N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h, $n=3$)

表 2 展示了 $\bar{t}$ 和 N_{eq} 随隔板孔道尺寸 δ 的变化 ($N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h, $n=3$)。可以看到, 随着 δ 减小, $\bar{t}$ 保持稳定, N_{eq} 逐渐增大。当 δ 从 200 mm 减小至 133.5 mm 时, 孔道面积缩小了 55%, N_{eq} 增大了约 62%; 当 δ 从 133.5 mm 减小至 30 mm 时, 孔道面积缩小了 95%, N_{eq} 由 2.67 增大至 4.19, 约提升了 56%。这表明随着 δ 的减小, 隔板对返混的抑制作用增强, 反应器的停留时间分布逐渐从全混流向平推流模式过渡。综上, 选择 $\delta=30$ mm 作为新型搅拌反应器的最佳隔板孔道尺寸。

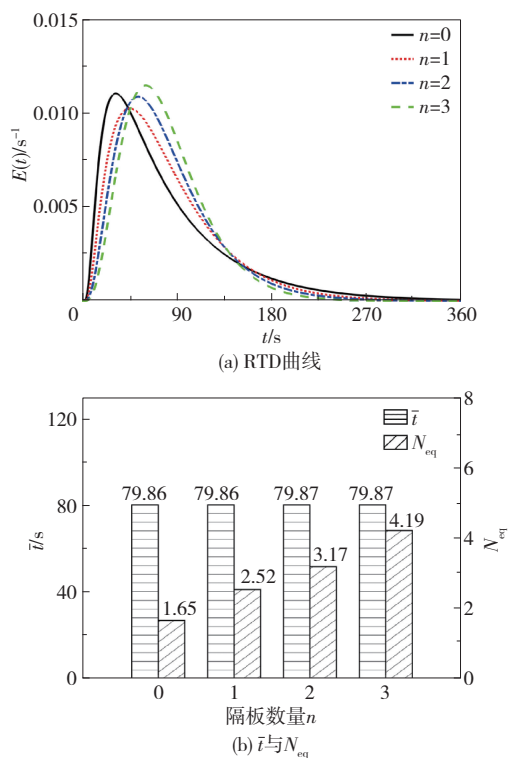
2.3.2 隔板数量的影响

图 7 为水平隔板数量 n 对反应器 RTD 性能的影响 ($\delta=30$ mm, $N=800$ r/min, $Q_A=1.13$ m³/h)。图 7(a)

表2 $\bar{t}$ 和 N_{eq} 随隔板孔道尺寸 δ 的变化Table 2 Variation of the average residence time $\bar{t}$ and the equivalent number N_{eq} of the reactor as a function of the baffle orifice size δ

δ/mm	$\bar{t}/\text{s}$	N_{eq}
200	79.86	1.65
133.5	79.87	2.67
30	79.87	4.19

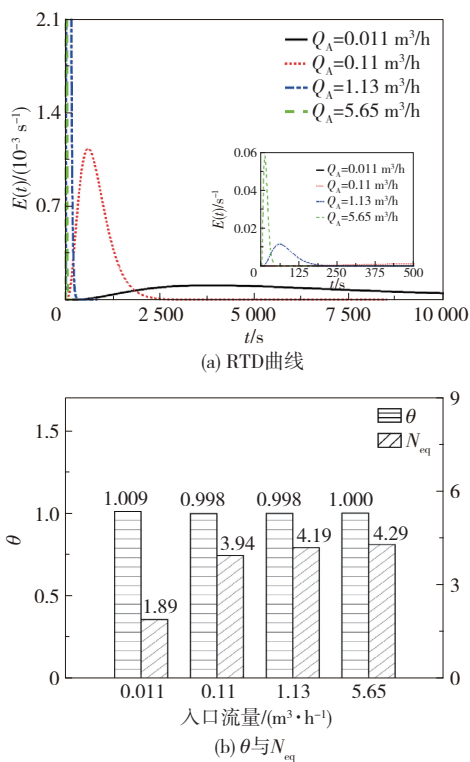
显示,随着 n 增加,RTD曲线的峰值位置逐渐向右移动,曲线的波峰宽度逐渐增大,表现出流体微元的停留时间分布均一度增强。由图7(b)可以看出,随着 n 增大, $\bar{t}$ 保持稳定, N_{eq} 逐渐增大。当 n 由1增加到3时, N_{eq} 由2.52增大到4.19,约增大了66%。综上,选择 $n=3$ 作为新型搅拌反应器的最佳隔板数量。

图7 隔板数量 n 对反应器RTD性能的影响($\delta=30\text{ mm}$, $N=800\text{ r/min}$, $Q_A=1.13\text{ m}^3/\text{h}$)Fig. 7 Effect of the number n of the baffle on the RTD performance of the reactor ($\delta=30\text{ mm}$, $N=800\text{ r/min}$, $Q_A=1.13\text{ m}^3/\text{h}$)

2.4 入口流量对RTD性能的影响

图8为入口流量 Q_A 对反应器RTD性能的影响($\delta=30\text{ mm}$, $N=800\text{ r/min}$, $n=3$)。图8(a)显示,随着 Q_A 增大,RTD曲线的波峰位置逐渐向左移动且峰值

增大。由图8(b)可以看出,随着 Q_A 增大,均一化停留时间 θ 保持稳定,而 N_{eq} 逐渐增大且增大趋势变缓。当 Q_A 由 $0.011\text{ m}^3/\text{h}$ 增大到 $1.13\text{ m}^3/\text{h}$ 时, θ 由1.009减小至0.998(对应的平均停留时间由8074.80 s减小至79.87 s), N_{eq} 由1.89增大到4.19,增大了约122%;当 Q_A 由 $1.13\text{ m}^3/\text{h}$ 增大到 $5.65\text{ m}^3/\text{h}$ 时, N_{eq} 由4.19增大到4.29,仅增大了2.3%,即继续增加 Q_A 不会显著增大 N_{eq} 。综上,选择 $Q_A=1.13\text{ m}^3/\text{h}$ 作为新型搅拌反应器的最优入口流量。

图8 入口流量 Q_A 对反应器RTD性能的影响($\delta=30\text{ mm}$, $N=800\text{ r/min}$, $n=3$)Fig. 8 Effect of inlet flow Q_A on the RTD performance of the reactor ($\delta=30\text{ mm}$, $N=800\text{ r/min}$, $n=3$)

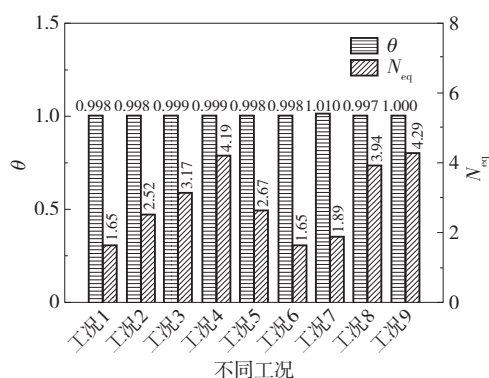
2.5 水平隔板调控RTD性能总结

为证明水平隔板对反应器RTD性能的调控作用,本文总结了不同工况的均一化停留时间 θ 与当量反应器数 N_{eq} 。表3为不同工况的操作参数,图9为不同工况的 θ 与 N_{eq} 比较。可以看到,随着 n 增加、 δ 减小, N_{eq} 逐渐增大。当 $n=3$ 、 $\delta=30\text{ mm}$ 时,新型搅拌反应器的RTD性能达到最优($N_{eq}=4.19$)。此外,通过增大 Q_A 来增加 N_{eq} 存在一临界点($Q_A=1.13\text{ m}^3/\text{h}$),当 Q_A 超过临界点时 N_{eq} 未发生明显增大,表明 $Q_A=1.13\text{ m}^3/\text{h}$ 为新型搅拌反应器的最优入口流量。

表3 不同工况的操作参数

Table 3 Operating parameters for different conditions

工况	隔板数量 n	隔板编号	隔板孔道尺寸 δ /mm	入口流量 Q_A / ($\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)
1	0			1.13
2	1	2 [#]	30	1.13
3	2	1 [#] , 3 [#]	30	1.13
4	3	1 [#] , 2 [#] , 3 [#]	30	1.13
5	3	1 [#] , 2 [#] , 3 [#]	133.5	1.13
6	3	1 [#] , 2 [#] , 3 [#]	200	1.13
7	3	1 [#] , 2 [#] , 3 [#]	30	0.011
8	3	1 [#] , 2 [#] , 3 [#]	30	0.11
9	3	1 [#] , 2 [#] , 3 [#]	30	5.65

图9 不同工况的 θ 与 N_{eq} 比较($N=800$ r/min)Fig. 9 Comparison of θ and N_{eq} for different operating conditions ($N=800$ r/min)

3 结论

(1)为使单一反应器接近多釜串联的停留时间分布效果,本研究提出了一种带有水平隔板的新搅拌反应器。流场数据表明反应器内每层桨叶均可形成独立的径向流场,且各自腔室流型结构为经典的双循环流型,这与相关文献的实验数据一致。

(2)水平隔板结构参数显著影响反应器的当量反应器数 N_{eq} 。当水平隔板孔道尺寸 δ 减小、隔板数量 n 增加时, N_{eq} 逐渐增大,最优的结构参数为: $\delta=30$ mm, $n=3$ 。

(3)对比了不同入口流量 Q_A 下搅拌反应器的停留时间分布性能,当 $Q_A=1.13$ m^3/h 时,反应器的平均停留时间为79.87 s, N_{eq} 为4.19,RTD性能较优。

作为新型搅拌反应器的初步开发,本研究基于单相水体系与等比缩小结构研究了水平隔板对RTD性能的调控规律,然而实际工业涉及物性变化

及尺度放大等复杂效应。为推动新型搅拌反应器的工程应用,后续工作的重点为:(1)研究搅拌反应器的放大效应,分析尺度变化的影响;(2)引入实际物性,考察非牛顿流体特性对反应器性能的影响。

参考文献:

- [1] 王雪珂,杨瑞刚,贾世谦,等.高碱度PO对DMC催化合成聚醚多元醇的影响及改进[J].聚醚工业,2025,40(5):23-26.
WANG X K, YANG R G, JIA S Q, et al. Effects of high alkalinity PO on the polyether polyols catalyzed by DMC and improvements [J]. Polyurethane Industry, 2025, 40(5): 23-26. (in Chinese)
- [2] 李明友,李海东,段玉龙,等.几种植物油聚醚多元醇的合成及应用评价[J].聚醚工业,2024,39(5):44-46.
LI M Y, LI H D, DUAN Y L, et al. Synthesis and application evaluation of different vegetable oils-based polyether polyols [J]. Polyurethane Industry, 2024, 39(5): 44-46. (in Chinese)
- [3] 付晓燕.低气味聚醚多元醇研究进展[J].聚醚工业,2024,39(3):11-14.
FU X Y. Progress in research of low-odor polyether polyols [J]. Polyurethane Industry, 2024, 39(3): 11-14. (in Chinese)
- [4] 任小娜.聚醚多元醇2024—2025年度报告[R/OL].(2024-11-14)[2025-12-17].<https://www.oilchem.net/24-1114-16-e9afbca718997d7b.html>.
REN X N. The 2024—2025 annual report on polyether polyols[R/OL]. (2024-11-14)[2025-12-17]. <https://www.oilchem.net/24-1114-16-e9afbca718997d7b.html>. (in Chinese)
- [5] RUTHERFORD K, LEE K C, MAHMOUDI S M S, et al. Hydrodynamic characteristics of dual Rushton impeller stirred vessels [J]. AIChE Journal, 1996, 42(2): 332-346.
- [6] KRESTA S M, WOOD P E. Prediction of the three-dimensional turbulent flow in stirred tanks [J]. AIChE Journal, 1991, 37(3): 448-460.
- [7] BUSCIGLIO A, MONTANTE G, PAGLIANTI A. Flow field and homogenization time assessment in continuously fed stirred tanks [J]. Chemical Engineering Research and Design, 2015, 102: 42-56.
- [8] RAVE K, LEHMENKUEHLER M, WIRZ D, et al. 3D flow simulation of a baffled stirred tank for an assessment of geometry simplifications and a scale-adaptive turbu-

- lence model[J]. *Chemical Engineering Science*, 2021, 231: 116262.
- [9] TEKE G M, GAKINGO G K, POTT R W M. Towards improved understanding of the hydrodynamics of a semi-partition bioreactor (SPB): a numerical investigation[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2022, 177: 210–222.
- [10] 李志鹏, 高正明. 涡轮桨搅拌槽内流动特性的大涡模拟[J]. *高校化学工程学报*, 2007, 21(4): 592–597.
- LI Z P, GAO Z M. Large eddy simulation of flow field in a Rushton impeller stirred tank[J]. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities*, 2007, 21(4): 592–597. (in Chinese)
- [11] WANG J H, HUANG F L, ZHANG K, et al. Suspension of a single sphere in a stirred tank with transitional flow[J]. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 2023, 18(4): e2910.
- [12] PENG H, JIA X L, GUO X F, et al. Removal of deposited metal particles on a horizontal surface by vertical submerged impinging jets[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2025, 83: 137–147.
- [13] LI Z P, HU M T, BAO Y Y, et al. Particle image velocimetry experiments and large eddy simulations of merging flow characteristics in dual Rushton turbine stirred tanks[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2012, 51(5): 2438–2450.
- [14] OCHOA-TAPIA J A, HERNANDEZ-RODRIGUEZ R, ALVAREZ-RAMIREZ J. Effect of the residence time distribution on the dynamical behavior of isothermal continuous stirred tank reactors: a nonlocal modeling approach[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2025, 64(12): 6433–6444.
- [15] GKOGKOS G, KAHIL E E, STOROZHUK L, et al. Scaling study of miniaturised continuous stirred tank reactors via residence time distribution analysis and application in the production of iron oxide nanoparticles[J]. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2024, 203: 109880.
- [16] SCARGIALI F, GRISAFI F, CERMAKOVA J, et al. Residence time distribution of solid particles in a continuous, high-aspect-ratio multiple-impeller stirred vessel[J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59(17): 3601–3618.
- [17] ZHANG L F, PAN Q M, REMPEL G L. Liquid backmixing and phase holdup in a gas-liquid multistage agitated contactor[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2005, 44(14): 5304–5311.
- [18] ZHANG L F, PAN Q M, REMPEL G L. Residence time distribution in a multistage agitated contactor with Newtonian fluids: CFD prediction and experimental validation[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2007, 46(11): 3538–3546.
- [19] 张海彬, 李正强, 黄斯珉, 等. 连续流搅拌反应器的停留时间与流动可视化研究[J]. *广东化工*, 2023, 50(14): 114–116, 120.
- ZHANG H B, LI Z Q, HUANG S M, et al. Residence time and flow visualization study of a continuous flow stirred reactor[J]. *Guangdong Chemical Industry*, 2023, 50(14): 114–116, 120. (in Chinese)
- [20] WU J B, GUO J H, LIU Y D, et al. Study on pilot-scale inline jet flow high shear mixer: discharge, macro-mixing time, and residence time distribution[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, 504: 158812.
- [21] 郭媛媛, 李杨. 聚醚多元醇生产工艺改进探讨[J]. *广东化工*, 2025, 52(4): 76–77, 75.
- GUO Y Y, LI Y. Discussion on the improvement of polyether polyol production process[J]. *Guangdong Chemical Industry*, 2025, 52(4): 76–77, 75. (in Chinese)
- [22] 安维中, 李佳, 董凤蕾, 等. 半间歇搅拌釜式乙氧基化反应器的数学模拟[J]. *化工进展*, 2009, 28(5): 773–777, 787.
- AN W Z, LI J, DONG F L, et al. Mathematical simulation of semi-batch stirred ethoxylation reactor[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2009, 28(5): 773–777, 787. (in Chinese)
- [23] 陈运铎. 双金属氰化物催化剂合成聚醚反应器研究进展[J]. *化学推进剂与高分子材料*, 2012, 10(4): 15–19.
- CHEN Y D. Research progress in reactors for preparing polyether by using double metal cyanide catalyst[J]. *Chemical Propellants & Polymeric Materials*, 2012, 10(4): 15–19. (in Chinese)
- [24] HUI Y Y, FENG X, DUAN X X, et al. Experimental and numerical study on the residence time distribution in a stirred membrane reactor[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2023, 62(16): 6486–6499.
- [25] VAN DER MOLEN K, VAN MAANEN H R E. Laser-doppler measurements of the turbulent flow in stirred vessels to establish scaling rules[J]. *Chemical Engineering Science*, 1978, 33(9): 1161–1168.

Numerical simulation of the residence time distribution in polyether polyol reactors with horizontal baffles

WANG HanBin

(Sinopec Shanghai Research Institute of Petrochemical Technology Co., Ltd., Shanghai 201208, China)

Abstract: To meet the urgent demand for green economic reactions in the production of polyether polyols, a new type of stirred reactor with horizontal baffles has been developed. Using computational fluid dynamics (CFD) numerical simulation, the effects of varying the channel size δ of the horizontal baffles, the baffle number n , and the inlet flow rate Q_A on the reactor flow field and residence time distribution (RTD) were studied. The results show that each impeller layer in the reactor can form an independent radial flow field, and the flow pattern in each chamber is the classic double circulation type. As δ decreases and n increases, the equivalent reactor number, N_{eq} , gradually increases. When Q_A increased from 0.011 m³/h to 5.65 m³/h, the normalized residence time θ remained stable, while N_{eq} gradually increased and the rate of increase decreased. Under the optimized conditions of $\delta=30$ mm, $n=3$, $Q_A=1.13$ m³/h, the average residence time of the stirred reactor was 79.87 s, and N_{eq} was 4.19.

Key words: stirred reactor; polyether polyol; residence time distribution (RTD); numerical simulation

(责任编辑:于少云)