



Doctoral Thesis

## Quantitative dynamic modelling of a continuous stirred reactor

**Author(s):**

Dias de sa Nunes dos Santos, Antonio Manuel

**Publication Date:**

1979

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000170388> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss ETH 6366

QUANTITATIVE DYNAMIC MODELLING  
OF A CONTINUOUS STIRRED REACTOR

ABHANDLUNG  
zur Erlangung  
des Titels eines Doktors der technischen Wissenschaften  
der  
EIDGENOESSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE  
ZUERICH

vorgelegt von  
ANTONIO MANUEL DIAS DE SA NUNES DOS SANTOS .

Dipl. Chem. Ing. (I.S.T. Lissabon)

geboren am 9. Januar, 1950  
Beira, Moçambique

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. D.W.T. Rippin - Referent  
PD Dr. L.M. Rose - Korreferent



Zürich  
1979

## ZUSAMMENFASSUNG

In der vorliegenden Arbeit wurde ein dynamisches Modell eines ideal durchmischten Rührkessels entwickelt, das die quantitative Zuverlässigkeit garantiert.

Das Modell wurde in einem Rührkessel mit Kühlschlange mit der exothermen katalytischen Herstellung von Propylenglykol als Modellreaktion untersucht. Das Verfahren beinhaltet die iterative Synthese eines Modells vom Labor- bis zum Pilotmassstab. Laboruntersuchungen der Reaktionskinetik sowie das Mischverhalten, Wärmeübergang mit und ohne Wärmeentwicklung auf Pilotstufe werden über den gesamten Bereich der physikalischen Eigenschaften bei Reaktionsablauf kombiniert.

Ein Vergleich wird angestellt zwischen dem dynamischen Reaktormodell und den Daten, die in der Pilotstufe sowohl aus dem adiabatischen- und nicht-adiabatischen, satzweisen- als auch aus dem kontinuierlichen Betrieb gewonnen wurden. Mit diesem Vergleich können die Schwächen der einfachen Kinetik und des Wärmeübergangsmodells aufgezeigt werden und erst die iterative Verbesserung der Modelle liefert das quantitativ zuverlässige Modell.

Das Modell wird dann zur Auswahl von Bereichen im Parameterraum eingesetzt, wo Unstabilitäten und periodische Schwankungen auftreten können. Ort und Ausmass dieser Bereiche sind, wie die vorliegende Arbeit gezeigt hat, stark abhängig von den Wärmekapazitäten der Reaktorwand, Flanschen und Hilfszuleitungen - dieser entscheidende Faktor muss bei der Modellierung eines Industriereaktors berücksichtigt werden.

## ABSTRACT

The strategy for building a quantitatively reliable dynamic model of a continuous-flow stirred reactor, supplied with a cooling coil, is developed using the exothermic catalysed production of propylene glycol as a model reaction. The procedure involves the iterative synthesis of a model between the laboratory and pilot-plant stages of process development. Laboratory experiments on the reaction kinetics are synthesized with mixing data and transient heat transfer experiments conducted on the pilot-plant, with and without heat generation, over the range of physical property variations met under reaction conditions.

The dynamic reactor model is compared with pilot-plant data for both adiabatic and non-adiabatic batch and continuous-flow operation. This comparison highlights deficiencies in the basic kinetic and heat transfer steps and a good deal of iteration is involved before a quantitatively reliable model is obtained.

The model is then used to map out regions in parameter space within which reactor instabilities and oscillatory behaviour can arise. The location and magnitude of these regions is found to be strongly affected by the thermal capacity of the reactor wall, flanges and ancillary pipework - a significant factor to consider when modelling a real reactor.

## SUMARIO

O objectivo desta tese é o desenvolvimento dum modelo teórico dinâmico que traduza quantitativamente e com exactidão os resultados obtidos experimentalmente por um reactor de fluxo e agitação contínuos (CSTR) contendo uma serpentina de refrigeração no seu interior e usado para produzir glicol de propileno a partir do óxido de propileno catalizado em meio sulfúrico. Este processo envolve a síntese iterativa dum modelo matemático entre os estádios de laboratório e de modelo-piloto. Para tal é necessário conjugar a cinética de reacção obtida no laboratório com resultados de transferência de calor e de mistura obtidos no modelo-piloto.

O modelo teórico final é então comparado com os resultados obtidos experimentalmente no modelo-piloto para o caso de operações adiabática e não-adiabática descontínuas e para operação contínua. Esta comparação indica deficiências tornando necessário um processo iterativo envolvendo os passos preliminares até que se obtenha um modelo quantitativo satisfatório.

Finalmente o modelo é usado para demarcar regiões de estabilidade, instabilidade e de comportamento oscilatório. Estudos de simulação foram igualmente efectuados para averiguar a dependência da localização e da magnitude dessas regiões em face de factores como a capacidade térmica do reactor e razão dos reagentes de alimentação.