

**LIST** 



**揉捏、混合、干燥**

**工艺过程模拟  
和可靠的生产规模扩大**  
我们如何帮助您应对  
工艺放大的挑战

来自技术中心的报告

# 如何模拟高黏度流体的复杂工艺过程

涉及处理高黏度流体的工艺过程是众多客户面对的主要挑战。由于传统工艺技术缺少相关物料特定反应的研究，此类流程的实施往往存在重大风险。

LIST可以为您提供专业支持。我们一直专注于高黏度材料的混合和揉捏技术，为该领域的专家。我们发现为了改进现有流程或计算新流程的要求，模拟揉捏过程通常是有益的，甚至是必要的。为了实现这一目标，必须首先建立数学模型来描述该工艺流程。作为该领域的先行者，我们很早就开始自主开发多相混合工艺模型。

在开发此流程时，我们不断改进产品范围，并将其适应客户的需求。毫无疑问，我们的揉捏器应该适用于您的工艺过程。位于瑞士巴塞尔附近的阿里斯多夫技术中心为客户测试要求苛刻的揉捏工艺。该系列测试有助于我们整理数据，然后用于开发新模型。我们使用来自文献和数据库的资料，并通过实验室的实证研究加以补充。

- > 小试测试通常提供有关蒸发率、热交换系数或反应速率的数据。
- > 从文献和数据库中提取的数据包括溶剂的特定热焓、密度或蒸发焓或热力学平衡。

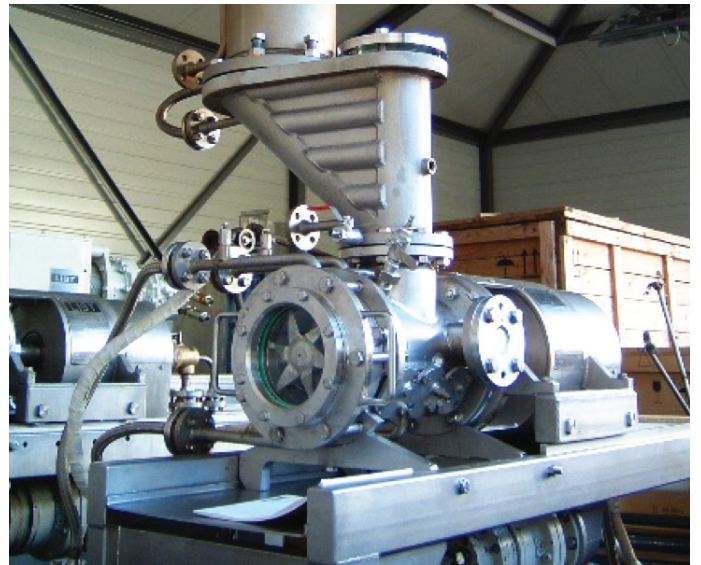
众多客户希望能增加其产量，为实现该目标，他们需要容积更大的揉捏反应器。为获得准确尺寸，我们测试了不同大小的揉捏器。然后，通过测试获得的数据来模拟新揉捏器的工艺过程，并进行放大。

只有从实验中获得充分的数据并建立起可靠的质能平衡方程，该项目才可能成功。模型则可以更具体地用于计算揉捏器的体积如何影响其产出。



“正确的做法是我们的揉捏器应该尽可能适用于您的需求。”

卡斯滕·古德曼 LIST 技术首席执行官、特许工程师



实验室中的测试揉捏器及放大数千倍的揉捏器。





LIST 技术测试中心

## 按比例放大还是过程模拟?

如果可以通过分析性的数学转换轻松计算流程，则被定义为按比例放大，而不是过程模拟。放大可以通过简单的程序（如MS Excel®）计算。相比之下，计算过程模拟则需要复杂的数学或数值工具。因此，用微分方程系统来描述质量和能量平衡是惯例，且需要数值积分来解决该方程系统。某些特性如热力学平衡只是隐式的，即不是分析性的，所以我们需要使用迭代法程序。

- > 我们使用Mathcad® 软件进行计算，因为它自有的数值积分功能方法。
- > 然而，由于一些未知的原因，该软件只能处理有限的数值迭代。

因此，我们根据正割法开发了独有的程序。

## 过程模拟的两个示例

### 脱气和溶液烘干

为了从聚合物溶液中提取塑料，必须首先从溶液中去掉气体。塑料浓度持续增加，直到所有溶剂在揉合过程中蒸发。我们可以模拟和预测该类型的干燥过程：

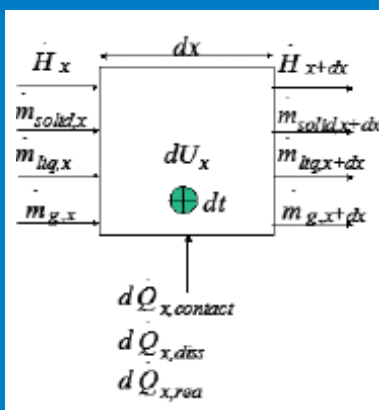
该模型描述了溶液的不同组成成分，例如在液相和气相状态下，某种溶剂及其聚合物含量。

由于揉捏器内的过程是连续的，因此时间因素与此计算无关。揉捏器中进料的情况也是已知和恒定的。通过数值积分，我们可以计算出有多少溶剂已经蒸发，以及发生于揉捏器哪一段。不同相位的物料流在边界相进入平衡状态，能量方程需要考量搅拌器的机械能耗散和接触传热。

然后，此差值提供反应器沿线性每个点的产品温度水平，进而影响物料的平衡和传递。通过迭代法程序计算出所有参数在过去某一时刻的变化。我们开发了特别高效的计算模型来处理这些极其复杂的过程。

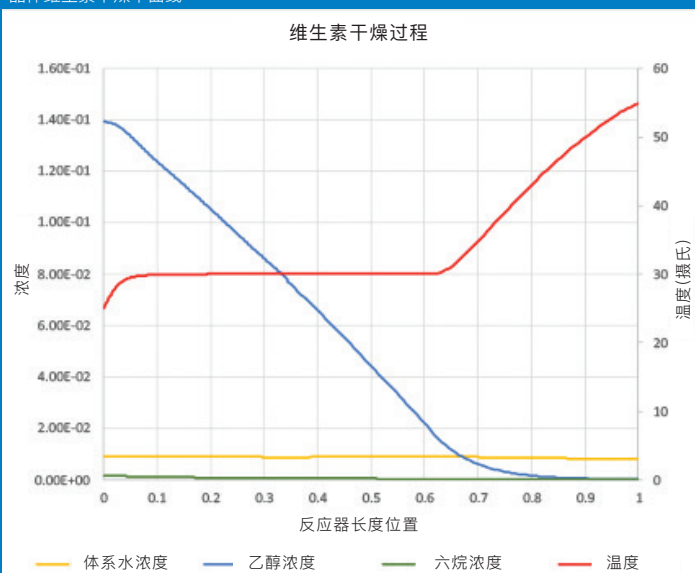
### 当热传输确定过程时

您可以精确定位物料混合物到达沸点的条件。然后，您将此条件应用于能量方程。如果您不希望液体完全蒸发，此方法非常有用，例如，在生产溶剂时，因为它们是可回收材料。但是如果含有多种易挥发性材料，此方法不起作用。为此，我们开发了一种综合方法，以更好地了解 and 描述干燥过程，因为此类型的过程通常在反应器内不同部位进行并由热量和质量传递确定。



反应器某部分的差分热平衡

晶体维生素干燥率曲线



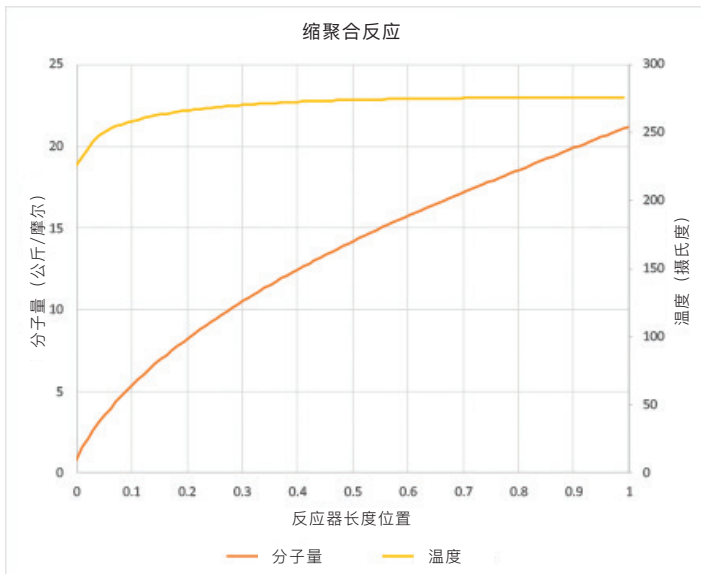


## 我们能够成功模拟的其他工艺过程：

### 复杂反应过程及其他类型反应

- 缩聚合反应：这是一种特殊的聚合，形成聚合物链时会产生挥发性副产品，必须通过蒸发去除，例如，制造聚酰胺PA66，一种用于制造尼龙丝袜和许多其他产品的聚合物。
- 我们成功模拟了基于 CSTR 串联的聚合物添加剂的真空结晶，这是一种分步快速混合模型。
- 根据物料的粘度和反应器单元的进料容量，可以描述搅拌器的机械耗散输出。
- 进料容量情况可根据揉捏反应器的长度计算。

作为我们尊贵的客户，我们希望您从上述模拟过程中获益。



聚酰胺聚合过程中的分子量和温度变化过程

### 系统规划

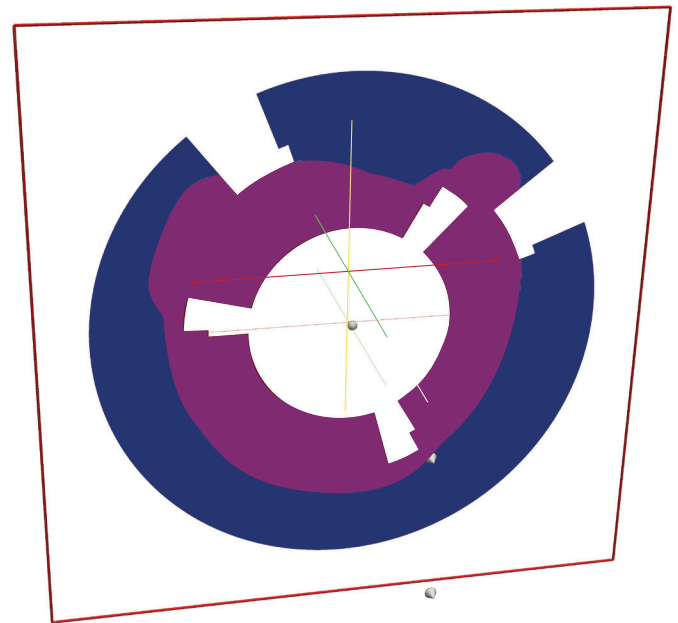
优化流程的挑战不在于改进单个设备，而在于正确组合不同设备和流程要求。我们使用商业软件 ChemCAD 来规划设备和流程的完美组合。该软件提供了众多标准操作，并可依据您的需求进行调整。

- > 例如：对于聚合物溶液，我们通过闪蒸进行预浓缩，并将其与揉捏工艺相结合。这样，我们就能够大大提高揉捏工艺的效率。

## 计算流体动力学

数值流体力学或计算流体力学 (CFD) 使我们能充分描述在揉捏反应器中的物料流状况。在高度复杂的混合单元 (如在揉捏器内) 中，不能用简单的雷诺平均方程 (RANS) 描述单一过程步骤。由于缺少适合研究高粘度混合物物流的商业软件，我们于数年前已开始专门研究计算流体动力学。

2018 年，我们在 OpenFOAM® 软件中为高粘度系统调整了第一个迭代法程序，然后进一步开发了该程序，以便使用者能掌握在揉捏器内物料流动的状况，并更好地了解各种单一过程数值，如混合比、机械能耗散和热传递。



单轴反应器的截面视图：  
红色= 物料的固相，蓝色 = 气相。

### 联系我们

LIST 在工艺过程模拟领域具有广泛的专业知识和经验。我们的目标为进一步改进揉捏工艺过程中的计算以及将揉捏过程标准化。

如果您有关于工艺过程模拟的任何疑问，**请随时与我们联系。**

## LIST Technology AG

Berstelstrasse 23 CH - 4422 Arisdorf / Switzerland  
www.list-technology.com 电话: +41 61 815 30 00