



计算流体力学模拟辅助纯臭氧氧化/臭 氧催化氧化反应器设计

新南威尔士大学(宜兴)环境技术转移中心

我们在做什么?

采用国际一流的计算机流体力学模拟技术耦合臭氧催化/催化氧 化过程的化学反应过程来优化**纯臭氧氧化/臭氧催化氧化反应器** 的设计。

世界一流模拟技术

🧹 高效

2 流体动力学与化学反应的耦合

模拟的过程包括:

臭氧溶解

气体体积分数分布

Gas mixture.Volume Fraction

0.010 0.009 0.008 0.007 0.006 0.005 0.004 0.003 0.002 0.002 0.001

臭氧自分解 臭氧氧化甲酸 气液两相混合流 高精度

工业化纯臭氧氧化/臭氧催化氧化反应器设计

一系列具有固定反应速率常数的基元反应。

在大型工业化纯臭氧氧化/催化臭氧氧化反应器内的化学反应比较复杂,涉及到**水流**,**物料传输和化学反应之间的相互作用**。

与反应器内三维的水流分布类似,大型反应器内反应物,生成物以及中间产物的浓度的分布也是**不均匀**的。

所以在**大型工业化反应器设计**中,除了通常要考虑的"水力死角"之外,还有一个 "化学反应死角"要考虑。

1 反应动力学模拟

采用传统实验方法结合数值模拟得到臭氧氧化甲酸的反 应动力学模型。

#	基元反应	反应速率
1	$0_3 \rightarrow H_2 O_2 + O_2$	k ₁ =2.21e-4 [s ⁻¹], R = k ₁ [O ₃]
2	$0_3 + H_2 0_2 \to 0 H^* + 0_2 + 0_2^*$	k ₂ =97.6 [L/mol/s], R = k ₂ [O ₃] [H ₂ O ₂]
3	$0_3 + 0_2^* \rightarrow 0H^* + 0_2$	k ₃ =1.5e+09 [L/mol/s], R = k ₃ [O ₃] [O ₂ *]
4	$\mathcal{CO}_3^* + \mathcal{O}_3 \rightarrow \mathcal{HCO}_3^- + \mathcal{O}_2$	k ₄ =1.0e+05 [L/mol/s], R = k ₄ [CO ₃ ²⁻] [O ₃]
5	$OH^* + HCO_3^- \rightarrow CO_3^* + OH^-$	k ₅ =1.22e+07 [L/mol/s], R = k ₄ [OH*] [HCO ₃ ⁻]
6	$CO_3^* + H_2O_2 \rightarrow HCO_3^- + O_2^*$	k ₆ =4.30e+05 [L/mol/s], R = k ₆ [H ₂ O ₂] [CO ₃ ²⁻]
7	$HCOOH + O_3 \rightarrow CO_3^* + O_2^*$	k ₇ =10[L/mol/s], R = k ₄ [HCOOH] [O ₃]
8	$HCOOH + CO_3^* \rightarrow CO_2^* + HCO_3^-$	k ₈ =1.5e+05[L/mol/s], R = k ₈ [HCOOH] [CO ₃ *]
9	$HCOOH + OH^* \rightarrow CO_2^* + H_2O$	k ₉ =3.2e+09[L/mol/s], R = k ₉ [HCOOH] [OH*]
1 0	$CO_2^* + O_2 \rightarrow HCO_3^- + O_2^*$	k ₁₀ =4.2e+09[L/mol/s], R = k ₁₀ [CO ₂ *] [O ₂]

3 连续流实验进行模拟验证





反应器内流速分布

0.05 0.02 0.00 ms*1] 7.2 6.4 5.6 4.8 4.0 3.2 2.4 1.6 0.8 0.0 mg/L

9.0 8.0 7.0 6.0 5.0 4.0 3.0 2.0 1.0 0.00 0.10 0.20 0.30 0.40 沿反应器高度 (m)



新南威尔士大学火炬创新园区 Torch Innovation Precinct at UNSW

联系人: 刘雪菲博士(x.f.liu@unsw.edu.au)