



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

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
- ✓ 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。

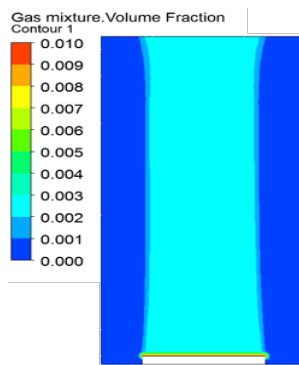
#	基元反应	反应速率
1	$O_3 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	$k_1=2.21e-4 [s^{-1}], R = k_1 [O_3]$
2	$O_3 + H_2O_2 \rightarrow OH^* + O_2 + O_2^*$	$k_2=97.6 [L/mol/s], R = k_2 [O_3] [H_2O_2]$
3	$O_3 + O_2^* \rightarrow OH^* + O_2$	$k_3=1.5e+09 [L/mol/s], R = k_3 [O_3] [O_2^*]$
4	$CO_3^* + O_3 \rightarrow HCO_3^- + O_2$	$k_4=1.0e+05 [L/mol/s], R = k_4 [CO_3^*] [O_3]$
5	$OH^* + HCO_3^- \rightarrow CO_3^* + OH^-$	$k_5=1.22e+07 [L/mol/s], R = k_5 [OH^*] [HCO_3^-]$
6	$CO_3^* + H_2O_2 \rightarrow HCO_3^- + O_2^*$	$k_6=4.30e+05 [L/mol/s], R = k_6 [H_2O_2] [CO_3^*]$
7	$HCOOH + O_3 \rightarrow CO_3^* + O_2^*$	$k_7=10 [L/mol/s], R = k_7 [HCOOH] [O_3]$
8	$HCOOH + CO_3^* \rightarrow CO_2^* + HCO_3^-$	$k_8=1.5e+05 [L/mol/s], R = k_8 [HCOOH] [CO_3^*]$
9	$HCOOH + OH^* \rightarrow CO_2^* + H_2O$	$k_9=3.2e+09 [L/mol/s], R = k_9 [HCOOH] [OH^*]$
10	$CO_2^* + O_2 \rightarrow HCO_3^- + O_2^*$	$k_{10}=4.2e+09 [L/mol/s], R = k_{10} [CO_2^*] [O_2]$

2 流体动力学与化学反应的耦合

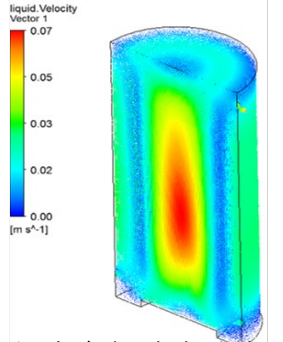
模拟的过程包括：

- 臭氧溶解
- 臭氧自分解
- 臭氧氧化甲酸
- 气液两相混合流

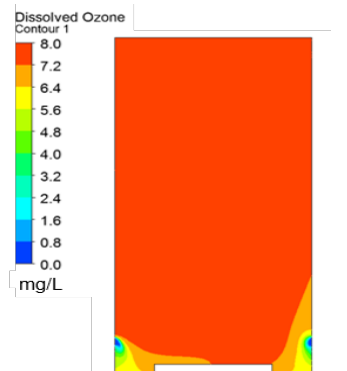
气体体积分数分布



反应器内流速分布



溶解态臭氧浓度分布



3 连续流实验进行模拟验证

