

Matematický model poloprovozního reaktoru pro odstranění VOC

Brummer Vladimír¹, Leštinský Pavel^{1,2}, Jecha David¹

¹ Ústav procesního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, Technická 2896/2, 616 69 Brno, Česká republika; e-mail: brummer@fme.vutbr.cz

² Institut environmentálních technologií, VŠB – TU Ostrava, 17. listopadu 15/2172, 708 00 Ostrava-Poruba, Česká republika

Souhrn

Pro poloprovozní experimentální jednotku na katalytickou oxidaci VOC byl vytvořen matematický model reaktoru uvažující změnu složení a vlastností plynu vlivem oxidačních reakcí, nárůst teploty vlivem oxidačních reakcí a její pokles vlivem tepelných ztrát a dále změnu tlaku vlivem tlakových ztrát na sypaném katalytickém loži. V případě dostupnosti informací o katalyzátoru a kinetických dat oxidovaných VOC je možné použít tento model pro návrh množství katalyzátoru a technologický návrh katalytického lože.

Klíčová slova: VOC, catalytic oxidation, kinetics, catalyst

Úvod

Emise těkavých organických látek (VOC) vznikají obvykle v rámci zpracování surovin v chemických závodech, při práci s laky, barvami a obecně s rozpouštědly. Výskyt VOC v odplynech je nutno v těchto technologiích redukovat tak, aby byly splněny emisní limity pro vypuštění do atmosféry. Katalytická oxidace je metodou, kterou je možné dosáhnout úspor v podobě spalovaného paliva, neboť použitím vhodného katalyzátoru pro oxidaci VOC dochází k výraznému snížení teploty rozkladného procesu.

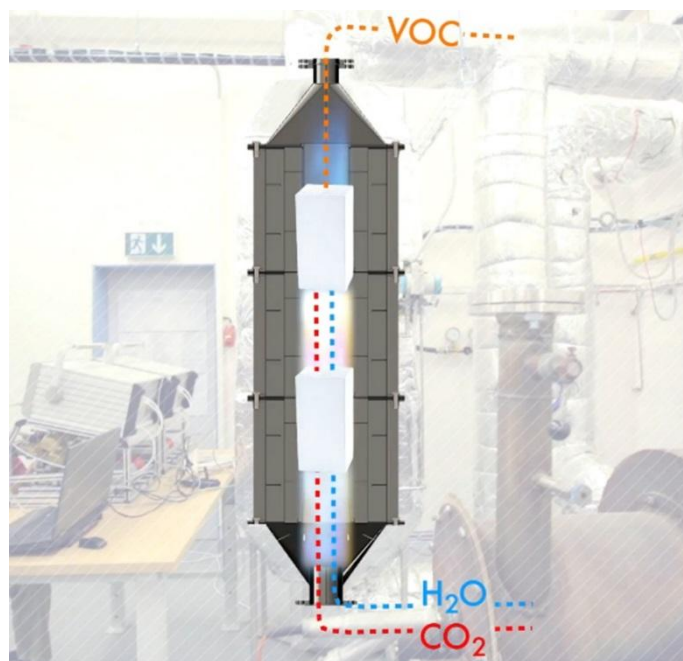
Pro stanovení velikosti katalytické náplně v reaktoru, se v praxi často vychází z doporučených hodnot objemového zatížení katalyzátoru (prostorových rychlostí), které poskytuje dodavatel katalyzátoru na základě svých vlastních laboratorních kinetických experimentů.

Pro jednoduché modelování katalytické oxidace je vhodné použít model trubkového adiabatického reaktoru s pístovým tokem. Použití kinetického modelu oproti prostorové rychlosti nám dovoluje výpočet složení reakční směsi v jednotlivých místech reaktoru při různých podmínkách, na druhou stranu vyžaduje zvolení vhodného tvaru rychlostní rovnice a znalost kinetických dat (aktivační energie, předexponenciální faktor, řád reakce).

Reakce katalytické oxidace uhlovodíků jsou často popisovány rychlostní rovnicí 1. řádu pro nevratnou reakci (Theodore, 2008). Nicméně pokud je k dispozici vhodný laboratorní reaktor pro měření, je možné řád reakce upřesnit a získat kinetická data v ucelené formě: řád reakce pro VOC, předexponenciální faktor, aktivační energie.

Vytvořený model slouží pro popis katalytické oxidace VOC v postaveném poloprovozním zařízení, viz obr. 1, a pro zvolené VOC (toluen, etanol, aceton) a metan.

Vytvoření model tedy slouží jako pomocný a směrodatný nástroj pro návrh plně-provozní aplikace katalytické oxidace VOC. Testování katalytické oxidace na poloprovozní jednotce před samotným projektem a instalací reaktoru v provozu vede k minimalizaci rizika investice do této technologie, nebo minimálně k úspoře času při optimalizaci provozu takového zařízení.



Obr. 1: Průřez poloprovozním reaktorem pro katalytickou oxidaci VOC

Materiál a metody

Vyjádření reakční rychlosti

Pro model byl použit mocninový typ rychlostní rovnice. Vliv teploty na reakční rychlost může být vyjádřen pomocí rychlostní konstanty, kterou můžeme vypočítat pomocí Arrheniovy rovnice:

$$k_a = A_a \cdot e^{-\frac{E_{A_a}}{R \cdot T}} \quad (1)$$

Protože víme, že oxidační reakce VOC jsou exotermické, je nutno uvažovat s adiabatickým ohřevem reaktoru.

$$T = T_0 + \Delta T_{reakce} \text{ [adiab.]} \quad (2)$$

Stupeň konverze lze vyjádřit jako podíl zreagovaného látkového množství zvolené složky k původnímu látkovému množství této složky:

$$X_a = \frac{C_{a0} - C_a}{C_{a0}} \quad (3)$$

Pokud vyjádříme reakční rychlost v závislosti na parciálních tlacích jednotlivých reaktantů, můžeme použít vztah:

$$r_a = k_a \cdot p_a^n \cdot p_b^m \quad (4)$$

Uvažováním prvního řádu u VOC a nultého řádu u kyslíku (Theodore, 2008), můžeme rovnici (4) změnit na tvar, který odpovídá reakční rychlost monomolekulární nevratné reakce:

$$r_a = k_a \cdot y_a \cdot p \quad (5)$$

Bilance složek plynu bude:

$$\frac{d\dot{n}_a}{dW} = r_a \quad [\text{mol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{kg}_{\text{cat}}^{-1}] \quad (6)$$

Oxidační reakce jsou posuzovány jako reakce nevratné, proto vliv termodynamické rovnováhy na reakční rychlost byl zanedbán.

Energetická bilance a fyzikálně-chemické vlastnosti plynů

Pro vstupní data (složení a průtok plynu, vstupní teplota a tlak v reaktoru, množství katalyzátoru apod.) byly použity experimentálně naměřené data z poloprovozní jednotky na obr. 1. Vstupní data jsou shrnuta v tab. 1.

Poloprovozní jednotka nemůže být použita pro získání kinetických dat (Brummer et al., 2016) (aktivační energie, předexponenciální faktory, řád reakce) pro katalyzátory a sledované těkavé organické látky. Proto byla snaha o získání kinetických dat z literatury pro katalyzátory podobného typu, aktivních složek, množství aktivní složky, sledované VOC a mocninový typ modelu. Kinetická data jsou v literatuře uváděny s různými jednotkami, proto bylo nutno konstanty rozměrově sjednotit. Naneštěstí se obvykle v publikované literatuře nepovede dohledat kinetická data přímo pro testovaný katalyzátor a zároveň je výpočet velice citlivý na zadaná kinetická data, takže získané výsledky se budou pravděpodobně od výsledků získaných experimentem značně lišit a validace modelu je tímto ztížená. Získané kinetické data z literatury jsou shrnuta pro toluen v tab. 2.

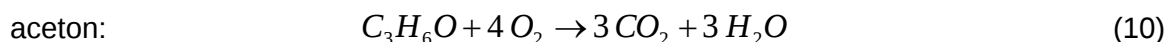
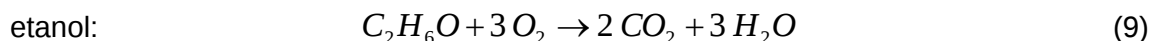
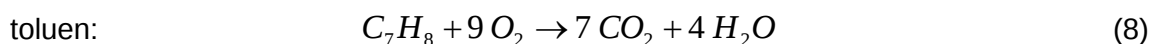
Tab. 1: Experimentálně získaná data použita jako vstupní data pro model

EXPERIMENT			
složení plynu (molární zlomky) y_0	toluen	0,0019	[-]
	CO ₂	0,0474	[-]
	CO	0,0000	[-]
	O ₂	0,1360	[-]
	H ₂ O	0,0100	[-]
	N ₂	balance	[-]
katalyzátor (sypaný)	EnviCat 55068 SPH 4-6mm (Pt/Al ₂ O ₃ ,CeO ₂)		
celková hmotnost katalyzátoru	w_cat_max	0,675	[kg]
normálový průtok plynu	V _N	24,3	[m _N ³ /h]

Tab. 2: Kinetické data získané z literatury

Polutant	Předexponenciální faktor A	Aktivační energie E_a	Katalyzátor	Autor,Reference
[-]	$[mol \cdot s^{-1} \cdot Pa^{-1} \cdot kg^{-1}_{cat}]$	$[J \cdot mol^{-1}]$	[-]	[-]
toluen	-	75 500	Pt/Al ₂ O ₃	(Radic et al., 2004)
toluen	14,08	88 000	Pt/CeO ₂ -ZrO ₂ -Bi ₂ O ₃ /Al ₂ O ₃	(Masui et al. 2010)
toluen	47,42	62 000	Pt/CeO ₂ -ZrO ₂ -Bi ₂ O ₃ /Al ₂ O ₃	(Masui et al. 2010)
toluen	5,57	42 000	Pt/CeO ₂ -ZrO ₂ -Bi ₂ O ₃ /Al ₂ O ₃	(Masui et al. 2010)
toluen	0,03307	99 600	Pt/Al ₂ O ₃	(Ordóñez et al., 2002)

Byly uvažovány následující oxidační reakce:



Změna reakční entalpie při chemických reakcích se řídí podle Hessova zákona:

$$(\Delta H_T^0)_r = \sum_{\text{produkty}} \varphi_i \cdot (\Delta H_T^0)_f - \sum_{\text{reaktanty}} \varphi_i \cdot (\Delta H_T^0)_f \quad (11)$$

Teplotní závislost změny standardní reakční entalpie je vyjádřena Kirchhoffovým zákonem, zde v integrálním tvaru:

$$\Delta H_{T_2}^0 = \Delta H_{T_1}^0 + \int_{T_1}^{T_2} \Delta c_p \cdot dT \quad \rightarrow \quad \Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^{T_2} \Delta c_p \cdot dT \quad (12) \text{ a } (13)$$

Polynomický rozvoje c_p a jejich koeficienty byly získány pro jednotlivé složky z různých zdrojů (NIST, 2011), (Jelínek, 1986), (Riazi, 2005).

Získáme koeficienty rozvoje respektující stechiometrii reakce:

$$\Delta A = \sum_i \varphi_i \cdot A_i ; \Delta B = \sum_i \varphi_i \cdot B_i \dots \quad (14)$$

a rozdíl měrného tepla produktů a výchozích látek se bude rovnat (uveden příklad pro tvar c_p rozvoje ze zdroje (NIST, 2011)):

$$\Delta c_p = \Delta A + \Delta B \cdot T + \Delta C \cdot T^2 + \Delta D \cdot T^3 \quad (15)$$

Analogicky získáme rozdíl měrného tepla i pro jiné tvary polynomických rozvoje. Po integraci má rovnice pro výpočet standardní změny reakční entalpie tvar (analogicky bylo odvozeno pro jiné tvary c_p rozvoje):

$$(\Delta H_T^0)_r = (\Delta H_{298,15}^0)_r + \Delta A \cdot (T - 298,15) + \Delta B \cdot \frac{(T^2 - 298,15^2)}{2} + \Delta C \cdot \frac{(T^3 - 298,15^3)}{3} + \Delta D \cdot \frac{(T^4 - 298,15^4)}{4} \quad (16)$$

Entalpii složek plynu a entalpii plyní směsi získáme podle vztahů:

$$i_i = \int_{T_1}^{T_2} \Delta c_p \cdot dT \quad i_{sm} = \sum_i i_i \cdot y_i \quad (17) \text{ a } (18)$$

Proces katalytické oxidace vyžaduje pouze nízké tlaky (blízké atmosférickému tlaku), proto pro tyto pracovní podmínky je postačující použití stavové rovnice ideálního plynu:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad (19)$$

Z rovnice ideálního plynu dostaneme vztah pro výpočet hustoty plynu:

$$\rho = \frac{p \cdot M_{r \text{ str}}}{R \cdot T} \quad (20)$$

Střední molekulová hmotnost plynu je definovaná jako:

$$M_{r \text{ str}} = \sum_{i=1}^n y_i \cdot M_i \quad (21)$$

Pro potřeby výpočtu některých fyzikálně-chemických vlastností plynu (viskozita, tepelná vodivost, molekulová hmotnost, hustota apod.), byla použita směs složená pouze z majoritních inertních složek plynu (CO_2 , CO , H_2O s dopočtem N_2 do 100 %) bez složek, které se účastní reakce. Jejich koncentrace je zanedbatelná a na fyzikálně-chemické vlastnosti mají minimální vliv.

Pro výpočet viskozit složek plynu při dané teplotě byly z tabelovaných dat vytvořeny závislosti viskozit na teplotě ve tvaru:

$$\eta_{T,i} = A_i + B_i \cdot T + C_i \cdot T^2 \quad (22)$$

Viskozita směsi byla počítána podle vztahu:

$$\eta_T = \frac{1}{\sum \frac{y_i}{\eta_{T,i}}} \quad [\text{Pa.s}] \quad (23)$$

Pro výpočet tepelných vodivostí složek plynu při dané teplotě byly z tabelovaných dat vytvořeny závislosti tepelných vodivostí na teplotě ve tvaru:

$$\lambda_{T,i} = A_i + B_i \cdot T + C_i \cdot T^2 + D_i \cdot T^3 \quad (24)$$

Tepelná vodivost směsi byla počítána podle vztahu (Perry, 2008):

$$\lambda_T = \frac{\sum y_i \cdot \lambda_{T,i} \cdot M_i^{\frac{1}{3}}}{\sum y_i \cdot M_i^{\frac{1}{3}}} \quad (25)$$

Tepelná kapacita směsi v daném kroku:

$$dC_p = c_{p,i} \cdot \dot{n}_i \quad [\text{J.K}^{-1}.\text{s}^{-1}] \quad (26)$$

Nárůst teploty reakční směsi reakcí:

$$\frac{dT_{r,i}}{dW} = \frac{\sum (-\Delta H_{r,i}(T) \cdot (-r_i))}{\sum (c_{p,i} \cdot \dot{n}_i)} \quad [\text{K.kg}_{\text{cat}}^{-1}] \quad (27)$$

Pro výpočet tepelných a tlakových ztrát bylo nutno vypočítat další parametry plynu:

Reálný průtok plynu:

$$V_{\text{real}} = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} \quad [\text{m}^3.\text{s}^{-1}] \quad (28)$$

Rychlost plynu:

$$w = \frac{V_{\text{real}}}{A_{\text{reaktor}}} \quad [\text{m.s}^{-1}] \quad (29)$$

Reynoldsovo číslo:

$$\text{Re} = \frac{d_{p,\text{cat}} \cdot w \cdot \rho}{\eta} \quad [-] \quad (30)$$

Pro výpočet korekce tepelných ztrát na délkovém elementu dl resp. plošném elementu dS byl uvažován rozdíl mezi teplotou stěny reaktoru a plynu $\Delta T = 10 \text{ K}$, teplota okolí 25 °C ($298,15 \text{ K}$). Pro vedení a přestup tepla materiálem bylo uvažováno s $\lambda_{\text{ocel}} = 22 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, což je přibližná hodnota pro použitou ocel 1.4541 (Cr 18 % Ni 10,5 %) a tloušťkou plechu $d_{\text{ocel}} = 0,002 \text{ m}$ a dále s $\lambda_{\text{sibral}} = 0,095 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pro použitou izolaci Sibral o tloušťce $d_{\text{sibral}} = 0,03 \text{ m}$. Pro součinitel přestupu tepla pro vzduch byla zvolena hodnota $\alpha_{\text{air}} = 5 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$.

Objemový element reaktoru pro integrační krok je:

$$dV = \frac{dw_{\text{cat}}}{\rho_{\text{cat}}} \quad [\text{m}^3_{\text{cat}}] \quad (31)$$

Délkový element reaktoru:

$$dl = \frac{dV}{A_{\text{reaktor}}} \quad [\text{m}] \quad (32)$$

Plošný element reaktoru:

$$dS = 4 \cdot dl \cdot d_{reaktor} \quad [\text{m}^2] \quad (33)$$

Výpočet bezrozměrných kritérií pro výpočet součinitele přestupu tepla pro spaliny:

Prandtlovo číslo:

$$\text{Pr} = \frac{c_{p,kg} \cdot \eta}{\lambda_{T,spaliny}} \quad [-] \quad (34)$$

Grashofovo číslo:

$$\text{Gr} = \frac{d_{reaktor}^3 \cdot \rho^2 \cdot g \cdot \Delta T}{\eta^2 \cdot T} \quad [-] \quad (35)$$

Vzhledem k tomu, že se pohybujeme v oblasti laminárního proudění ($\text{Re} < 2300$), výpočet Nusseltova čísla závisí na tom, zda se uplatňuje volná konvekce. Pokud se volná konvekce významně uplatňuje ($\text{Gr} \cdot \text{Pr} > 2 \cdot 10^5$), tak se Nusseltovo číslo vypočte podle vztahu:

$$\text{Nu} = 0,74 \cdot (\text{Re} \cdot \text{Pr})^2 \cdot 0,2 \cdot (\text{Gr} \cdot \text{Pr})^{0,1} \quad (36)$$

Pokud se volná konvekce významně neuplatňuje, tak se Nusseltovo číslo vypočte podle vztahu:

$$\text{Nu} = 1,86 \cdot (\text{Re} \cdot \text{Pr} \cdot \frac{d_{reaktor}}{l_{reaktor}})^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{\eta}{\eta_w} \quad [-] \quad (37)$$

kde η_w je viskozita při teplotě stěny, hodnota poměru $\frac{\eta}{\eta_w}$ byla odhadnuta na 0,9.

Dále byl vypočítán součinitel přestupu tepla pro spaliny podle vztahu:

$$\alpha_{spaliny} = \frac{\text{Nu} \cdot \lambda_{spaliny}}{d_{reaktor}} \quad [\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}] \quad (38)$$

Součinitel přestupu tepla byl počítán podle vztahu:

$$k = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_{spaliny}} + \frac{d_{ocel}}{\lambda_{ocel}} + \frac{d_{sibral}}{\lambda_{sibral}} + \frac{1}{\alpha_{vzduch}}} \quad [\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}] \quad (39)$$

Tepelné ztráty na délkovém elementu dl budou:

$$dQ_{ztraty} = (T - T_{okoli}) \cdot k \cdot dS \quad [\text{W}] \quad (40)$$

Byla spočítána teplota směsi po tepelných ztrátách

$$T_{out} = - \left(\frac{dQ_{ztraty}}{m_{sm} \cdot c_{p,sm,kg}} - T \right) \cdot k \cdot dS \quad [\text{K}] \quad (41)$$

a pokles teploty díky tepelným ztrátám na krokovém elementu dW resp. dl nebo dS

$$dT_{ztraty} = T - T_{out} \quad [\text{K}] \quad (42)$$

Reaktor je veden v podtlaku hnaním tlakového vzduchu ejektorem. Byly počítány přírůstek tlaku vlivem tlakových ztrát na sypaném katalytickém loži. Pro výpočet tlakových ztrát byl použit vztah podle Levy (Perry, 2008):

$$\frac{|\Delta p|}{L} = \frac{f_m \cdot 2 \cdot G^2 \cdot (1 - \varepsilon)^{3-n}}{D_p \cdot \rho \cdot \phi_s^{3-n} \cdot \varepsilon^3} \quad \left[\frac{\text{Pa}}{\text{m}} \right] \quad (43)$$

Byla vypočtena tlaková ztráta v integračním kroku (dW):

$$\frac{dp}{dW} = \frac{\frac{dp}{L} \cdot l_{reaktor} \cdot dW_{cat}}{W_{cat,max}} \quad [\text{Pa}] \quad (44)$$

Algoritmus vytvořeného modelu

Model reaktoru byl vytvořen v programu Matlab. V modelu byly diferenciální rovnice pro výpočet změny složení, teploty a tlaku řešeny numerickou integrací s krokem dW (hmotnost katalyzátoru). Všechny teplotně závislé proměnné (hustota, viskozita, tepelné kapacity, tepelné vodivosti, entalpie...) byly počítány v každém kroku pro nově získanou teplotu respektující ohřev vlivem oxidačních reakcí a tepelné ztráty reaktoru. Postup výpočtu je uveden na následovných stránkách.

VSTUP

VLOŽENÍ DAT A KONSTANT

kinetické data	$A_i ; E_{ai}$	← zadání
stechiometrie oxidačních reakcí	φ_i	← zadání
molekulové hmotnosti složek plynu	Mw_i	← zadání
počáteční složení plynu	$y_{0,i}$	← zadání
počáteční střední molekulová hmotnost	$Mw_{str,0i}$	← výpočet

VLASTNOSTI KATALYTICKÉ LOŽE A KATALYZÁTORU

množství katalyzátoru	w_{cat_max}	← zadání
průměr reaktoru	d_r	← zadání
měrná hmotnost katalyzátoru	ρ_{cat}	← zadání
výška lože katalyzátoru	l_r	← zadání
porozita katalyzátoru	ε_{cat}	← zadání
velikost částic katalyzátoru	$d_{p_{cat}}$	← zadání

POČÁTEČNÍ PODMÍNKY

začátek lože	$W_{cat} = 0$	← zadání
normálový průtok plynu	V	← zadání
teplota na začátku lože	T_0	← zadání
počáteční tlak	p_0	← zadání
integrační krok (hmotnost katalyzátoru)	$d_{w,cat}$	← zadání
počáteční látkové toky	$n_{0,i}$	← výpočet
počáteční entalpie složek plynu	$i_i(T)$	← výpočet
počáteční entalpie směsi	$i_{SUM}(T)$	← výpočet
tepelná kapacita směsi	$c_{p,SUM}(T)$	← výpočet
hustota směsi	$\rho_{sm}(T)$	← výpočet
viskozita směsi	$\eta_{sm}(T)$	← výpočet
součinitel tepelné vodivosti spalin	$\lambda_{spal}(T)$	← výpočet

INTEGRACE V CYKLU VÝPOČET POČÁTEČNÍCH HODNOT

rychlostní konstanty	k_i	← výpočet
reakční rychlosti	r_i	← výpočet
změna látkových toků	dn_i	← výpočet

PŘÍRŮSTEK TEPLoty VLIVEM REAKČNÍHO TEPLA A POKLES TEPLoty VLIVEM TEPELNÝCH ZTRÁT

tepelné kapacity	$c_{p,i}(T)$	← výpočet
reakční tepla	$dH_{r,i}(T)$	← výpočet
tepelná kapacita směsi	$dCp(T)$	← výpočet
nárůst teploty vlivem oxidačních reakcí	$\frac{dT_{r,i}}{dW}$	← výpočet
hustota směsi	$\rho_{sm}(T)$	← výpočet
viskozita směsi	$\eta_{sm}(T)$	← výpočet
součinitel tepelné vodivosti spalin	$\lambda_{spal}(T)$	← výpočet
reální průtok plynu	$V_{real}(T)$	← výpočet
Reynoldsovo číslo	Re	← výpočet
střední molekulová hmotnost	Mw_{str}	← výpočet
tepelné ztráty na integračním kroku	$dQ_{ztráty}$	← výpočet
teplotní ztráty na integračním kroku	$dT_{ztráty}$	← výpočet
nová teploty směsi	T	← výpočet

TLAKOVÉ ZTRÁTY

hm. průtok vztažený na průtočnou plochu	G	← výpočet
modifikované Reynoldsovo číslo	Re_m	← výpočet
parametr n	n	← výpočet
modifikovaný třecí koeficient	f_m	← výpočet
tlaková ztráta	$ \Delta p /L$	← výpočet
tlaková ztráta na integračním kroku	$ \Delta p /dW$	← výpočet
nový tlak směsi	p	← výpočet

ULOŽENÍ DAT V DANÉM KROKU

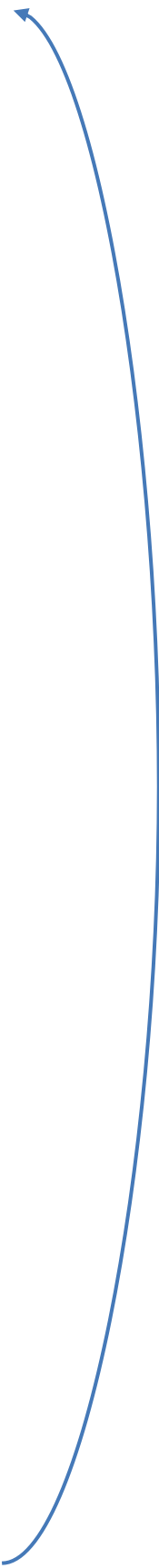
nové látkové toky	n_i	← výpočet
nové složení směsi (molární zlomky)	y_i	← výpočet
nová střední molekulová hmotnost	Mw_{str}	← výpočet
nové entalpie složek plynu	i_i	← výpočet
nová entalpie směsi	i_{SUM}	← výpočet
nová tepelná kapacita směsi	$c_{p,SUM}$	← výpočet
nový stupeň konverze reakcí	x_i	← výpočet

...

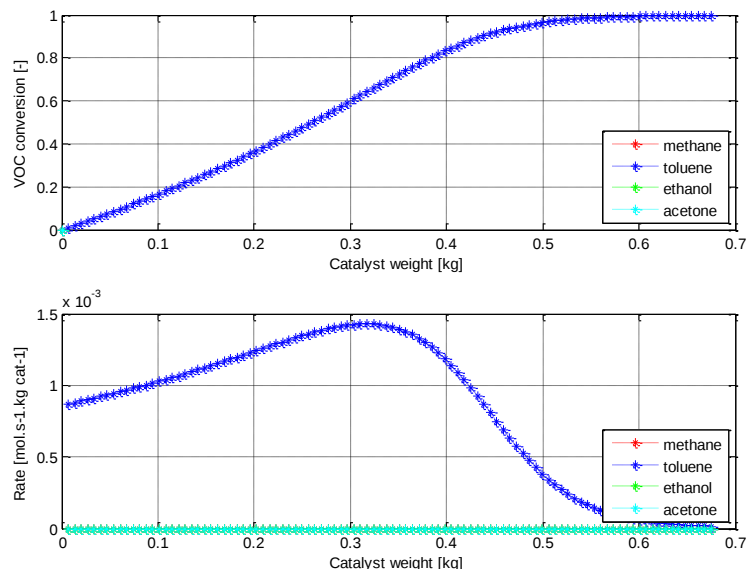
PŘÍRŮSTEK KATALYZÁTORU O INTEGRAČNÍ KROK $W_{cat} = W_{cat} + dW_{cat}$

Pokud látkové množství odstraňovaných látek kleslo na nulu, byl cyklus předčasně ukončen.

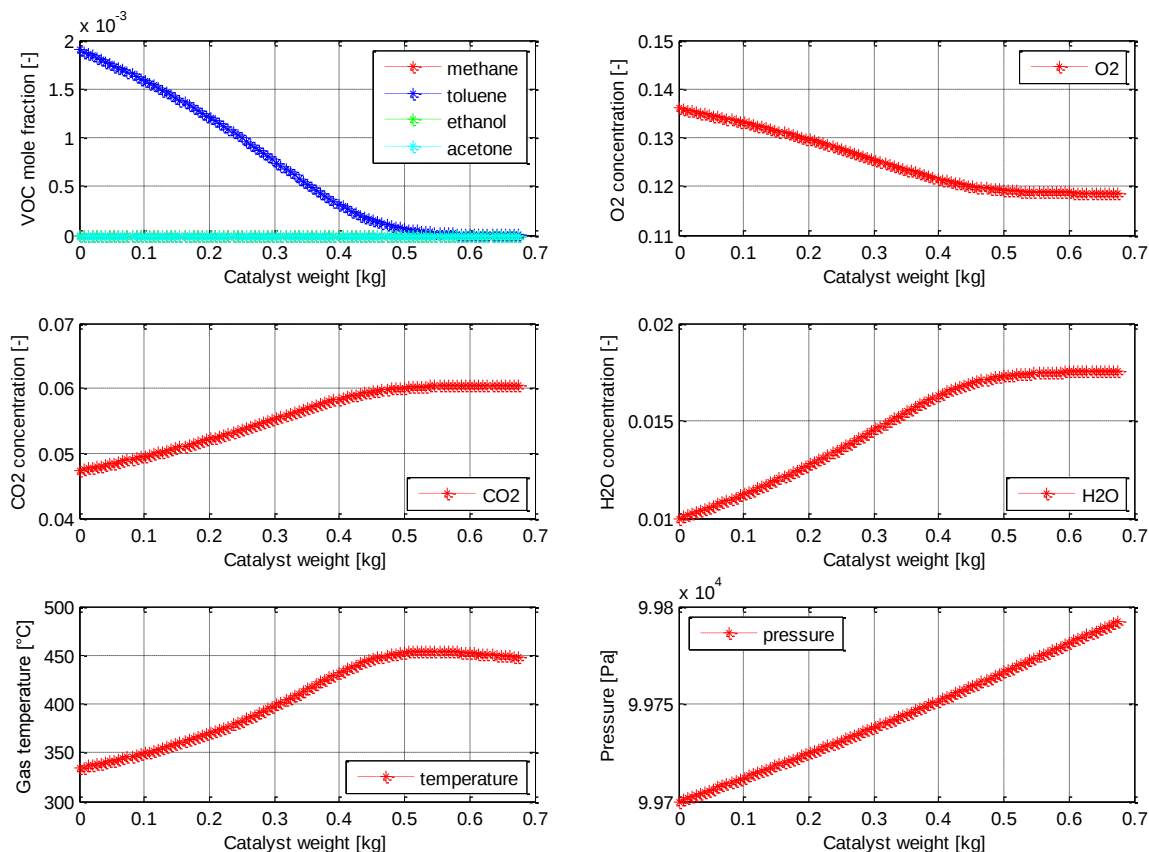
Výsledky a diskuze



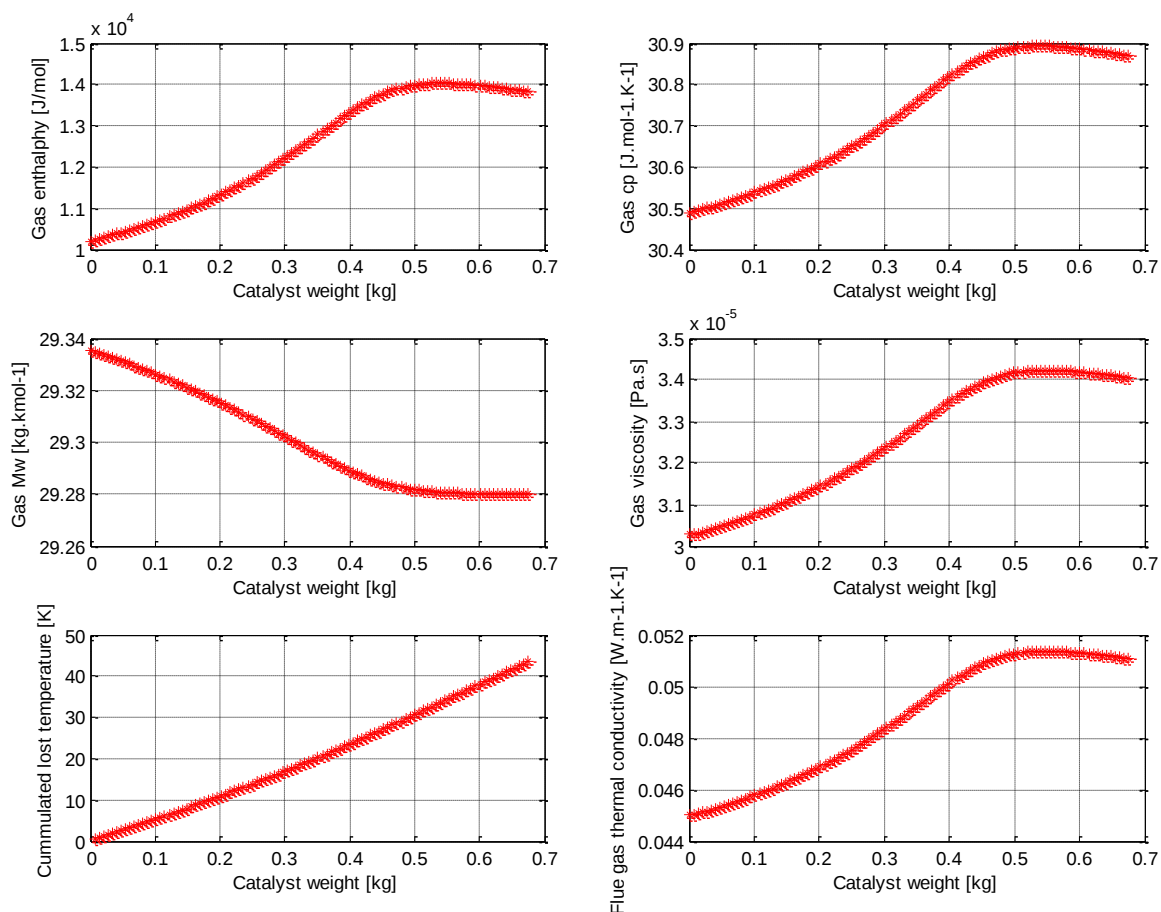
Byl vytvořen matematický model trubkového adiabatického reaktoru s pístovým tokem, pro výpočet katalytické oxidace vybraných VOC. Data získaná z modelu byla porovnána s experimentálními údaji získanými na poloprovozní jednotce katalytické oxidace. Optimální by bylo získání kinetických dat pro sledované katalyzátory a VOC na mikroreaktoru a použití těchto dat pro model. Byla použita aktivační energie pro typ katalyzátoru se stejným nosičem i aktivní složkou podle (Radic et al., 2004). Výsledky modelu jsou ukázány na obr. 2, obr. 3 a obr. 4 pro toluen.



Obr. 2: Průběh konverze a reakční rychlosti VOC v katalytickém loži – model



Obr. 3: Průběh koncentrací složek plynu, teploty a tlaku – model



Obr. 4: Průběh vlastností plynu a teplotních ztrát – model

Experimentálně naměřené parametry jako je konverze VOC, výstupní teplota a tlaková ztráta reaktoru byly porovnány s výstupy navrženého modelu reaktoru. Porovnání těchto parametrů je shrnuto v tab. 4.

Tab. 4: Porovnání výstupních parametrů – model vs experiment

EXPERIMENT				MODEL					
konverze VOC	x _a	0,9820	[-]			0,9986	[-]		
počáteční teplota	T _{IN}	334,8	[°C]	607,95	[K]	334,8	[°C]	607,95	[K]
výstupní teplota	T _{OUT}	440,0	[°C]	713,15	[K]	454,2	[°C]	727,35	[K]
EXPERIMENT				MODEL					
počáteční tlak	p ₀	99 700	[Pa]			99 700	[Pa]		
konečný tlak	p _{OUT}	99 849	[Pa]			99 792	[Pa]		
tlaková ztráta lože	dp	149	[Pa]			92	[Pa]		

Závěr

Byl navržen model pro adiabatický reaktor s pístovým toku plynu zahrnující i tepelné ztráty přes konstrukci reaktoru. Pro ověření správnosti modelu byly provedeny srovnávací experimenty. Experimentální podmínky (složení plynu, průtok, vstupní teplota a tlak do reaktoru) byly použity jako vstupní data výpočetního modelu. Výsledky pro katalytické spalování toluenu jsou v dobré shodě s naměřenými výsledky. Experimentálně zjištěná tlaková ztráta reaktoru je vyšší než tlaková ztráta z modelu, ale to mohlo být způsobeno umístěním odběrových bodů pro diferenční tlakoměr. Ty nejsou umístěny přímo na vstupu do a výstupu z katalytického lože.

Pro model reaktoru v poloprovozním měřítku již není možné zanedbat tepelné ztráty konstrukcí reaktoru, protože by teploty získané z modelu bez uvažování tepelných ztrát byly značně nadhodnocené, co ovlivňuje samozřejmě i samotnou konverzi sledovaných VOC.

Poděkování

Tento článek byl vytvořen v rámci projektu LO1202 za finanční podpory MŠMT v rámci Národního programu udržitelnosti I, ve spolupráci na projektu Centrum kompetence pro energetické využití odpadů TE0200023.

Literatura

THEODORE, Louis. *Air pollution control equipment calculations*. Hoboken, N.J.: John Wiley, c2008, xii, p. ISBN 978-047-0209-677.

NIST WebBook Chemie. NIST. *NIST Standard Reference Database Number 69* [online]. c 2011 [cit. 2014-06-16]. Dostupné z: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

JELÍNEK, J. Výzkum a vývoj modernizovaných bloků konverze metanu - doporučené postupy pro výpočet látkových vlastností: Výzkumná zpráva č. 1/010/86. Brno: VÚCHZ Brno, 1986.

RIAZI, M. R. *Characterization and properties of petroleum fractions*. W. Conshohocken, PA: ASTM International, 2005. ISBN 08-031-3361-8.

PERRY, Robert H. a Don W. GREEN. *Perry's chemical engineers' handbook*. 7th ed. / . New York: McGraw-Hill, c2008. ISBN 978-007-1422-949.

BRUMMER, Vladimír, David JECHA, Tomáš OSIČKA a Pavel LEŠTINSKÝ. Měření kinetiky oxidace VOC na poškozeném sypaném katalyzátoru Pt-Pd/Al₂O₃. In: *TVIP 2016*. Hustopeče: CEMC, 2016, 113(1-9). ISBN 978-80-85990-28-7.

RADIC, Nenad, Bosko GRBIC a Ana TERLECKI-BARICEVIC. Kinetics of deep oxidation of n-hexane and toluene over Pt/Al₂O₃ catalysts. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2004, 50(3), 153-159. DOI: 10.1016/j.apcatb.2004.01.011. ISSN 09263373. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S092633730400044X>

MASUI, Toshiyuki, Hayato IMADZU, Naoto MATSUYAMA a Nobuhito IMANAKA. Total oxidation of toluene on Pt/CeO₂-ZrO₂-Bi₂O₃/γ-Al₂O₃ catalysts prepared in the presence of polyvinyl pyrrolidone. *Journal of Hazardous Materials*. 2010, 176(1-3), 1106-1109. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2009.11.108. ISSN 03043894. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0304389409019086>

ORDÓÑEZ, Salvador, Lisardo BELLO, Herminio SASTRE, Roberto ROSAL a Fernando V. DÍEZ. Kinetics of the deep oxidation of benzene, toluene, n-hexane and their binary mixtures over a platinum on γ-alumina catalyst. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2002, 38(2), 139-149. DOI: 10.1016/S0926-3373(02)00036-X. ISSN 09263373. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S092633730200036X>