



文章栏目：大气污染防治

DOI 10.12030/j.cjee.201904019

中图分类号 X511

文献标识码 A

梁文俊, 刘迪, 任思达, 等. 基于 Fluent 的整体式催化反应系统降解甲苯的数值模拟[J]. 环境工程学报, 2020, 14(2): 457-464.

LIANG Wenjun, LIU Di, REN Sida, et al. Numerical simulation of catalytic combustion of toluene in monolithic catalytic reaction system based on Fluent[J]. Chinese Journal of Environmental Engineering, 2020, 14(2): 457-464.

基于 Fluent 的整体式催化反应系统降解甲苯的数值模拟

梁文俊*, 刘迪, 任思达, 李坚

北京工业大学, 区域大气复合污染防治北京市重点实验室, 北京 100124

第一作者: 梁文俊(1978—), 男, 博士, 教授。研究方向: 大气污染控制。E-mail: liangwenj@bjut.edu.cn

*通信作者

摘要 为得到甲苯在整体式催化系统中的燃烧规律, 利用 Fluent 18.1 对整体式催化反应系统中甲苯-空气在铂(Pt)上的燃烧特性进行了数值模拟。通过假设多孔介质内气固间局部能够达到热平衡, 建立了三维的多孔介质催化燃烧模型。经验证, 该模型能够很好地反映甲苯在整个系统中的燃烧特性。通过对整个反应系统中温度场、浓度场和速度场的工况探究和通过分段控制燃烧反应发现: 贫燃条件有利于催化燃烧, 富燃条件有利于引发热力燃烧; 当量比小于 1, 入口流速小于 $2 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, 有利于催化燃烧, 催化转化率在 96% 以上; 当量比较高, 入口流速较大时, 有利于引发热力燃烧。以上研究结果为该技术的实际应用提供了参考。

关键词 甲苯; 催化氧化; 数值模拟; 反应器; 多孔介质

催化燃烧法是目前处理挥发性有机物(VOCs)常用的有效方法之一^[1-2]。它通过降低反应所需活化能, 缩短反应时间, 提高转化率, 降低反应所需温度, 同时较低的反应温度也使得气体在转化过程中难以生成二次污染物, 对环境更为友好, 因此, 针对催化燃烧的实际应用的研究具有重要意义。工业上常用的催化剂有 2 种: 一种是颗粒状催化剂; 一种是整体式催化剂。颗粒状催化剂在工业上应用时总会发生床层堵塞、颗粒破裂等问题, 并且传热效果、热稳定性等性能都比较差, 学者们从这几方面着手开展工作, 研发出了稳定性好、耐压耐磨、传热效果好、方便装填的整体式催化剂^[3-4]。近些年, 由于整体式催化剂具有良好的特性, 因此, 在汽车尾气净化等工业领域有了较为广泛的应用, 在环保领域有着举足轻重的地位^[3]。

在催化燃烧过程中, 传质、传热、流动机理相当复杂, 因此, 这些问题大多数都没有得到实质性的解决^[5]。电脑的发展以及模拟软件的开发为这一难题提供了另一条思路——通过人为控制条件对反应进行一系列模拟, 从而观察反应的动态规律。目前, 使用最多的模拟软件是 Fluent, 它具有多样的物理模型, 可以适用于环保、能源、航空航天等多个领域; 同时它还具备先进的求解器和求解方法, 通过条件的合理定义, 可以得到准确的仿真结果; 其强大的后处理功能更能使结果

收稿日期: 2019-04-02; 录用日期: 2019-06-06

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFC0204300); 北京市科学技术委员会科技计划(Z161100004516013)

可视化、简单直观地呈现出来。李欣婷^[6]对微型圆管燃烧器内二甲醚的催化燃烧进行了数值模拟,进一步验证了催化剂对二甲醚的吸附能力大于氧气,适当增加氧气含量,有利于催化反应正向进行;曾文^[7]对在均质压燃 HCCI 发动机中的催化燃烧进行了模拟,创建了单维和多维模型,并详细分析了催化燃烧对 HCCI 发动机缸内温度场及 CO、HC、NO 浓度场的影响;王娟等^[8-9]对在整体式催化剂中甲苯的蓄热燃烧和催化燃烧进行了数值模拟,从催化剂孔道水平考察了2种方式的反应特征和适用范围。

目前,由于缺少挥发性有机物在催化剂表面的反应机理,并且绝大部分模拟仅在催化剂单孔道层面进行,因而,缺少针对整体式催化剂催化有机物的研究工作。本研究以甲苯为 VOCs 的代表物,采用一步反应机理,着眼于整个催化燃烧系统中甲苯转化率、速度变化、当量比和温度分布等因素的研究;并利用多孔介质模型模拟催化燃烧,进一步探索整体式催化反应系统内甲苯催化燃烧的规律分布,再使用 Fluent 软件进行数值模拟,进而对其燃烧特性进行探究,以便为实际应用提供参考。

1 计算模型和反应机理

图1为本研究所采用的甲苯催化燃烧反应器三维物理模型。燃烧器入口直径为20 mm,筒体直径为80 mm,总长度为1 267 mm,从558 mm处布置长度为150 mm的整体式催化剂,流动模型选择湍流模型,催化剂段选取多孔介质模型,催化剂床层段流动为层流。燃烧模型选择组分运输模型,这是因为反应放热,高温下辐射作用不可忽略,故利用辐射模型。

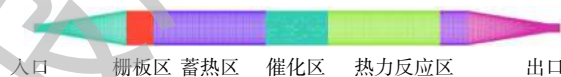


图1 甲苯催化燃烧装置网格图

Fig. 1 Mesh diagram of toluene catalytic combustion unit

在数值模拟中,对所选择模型^[10-12]进行7种假定。

- ①反应器内气体流动及热传递在圆柱横截面方向各个参数相等。
- ②反应器壁面选取绝热壁面,与外界无热量交换,多孔介质区为辐射灰体。
- ③温度梯度引起的质量扩散和浓度梯度引起的热传递忽略不计。
- ④重力的影响忽略不计。
- ⑤所有气体都视为不可压缩流体。
- ⑥模拟催化剂的多孔介质视为均一介质。
- ⑦泡沫陶瓷区域气固温度相等。

VERWIN^[13]研究发现,当泡沫陶瓷换热系数的数量级大于 $10^5 \text{ W} \cdot (\text{m}^3 \cdot \text{K})^{-1}$ 时,充当骨架的固体和流体可作为均一介质对待。泡沫陶瓷的体积换热系数都比较高, FU^[14]分别对10PPI和20PPI的泡沫陶瓷的体积换热系数进行了研究,结果表明,气流速度为 $0.08 \sim 5.56 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 时,测得的体积换热系数为 $100 \sim 1\,800 \text{ kW} \cdot (\text{m}^3 \cdot \text{K})^{-1}$ 。故假设局部热平衡是合理的。

在实验过程中计算参数设置如下。

- ①反应器入口设定为 velocity-inlet, 流速的变化为 $0.16 \sim 4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。
- ②反应器出口设定为 pressure-outlet。
- ③反应器入口温度设为300 K,根据各组分特性,其混合气体的热容量(C)、黏度(η)等参数采用质量加权平均来计算。

④多孔介质区材料选择泡沫陶瓷氧化铝,在多孔方程中选用物理速度,以实现流体在多孔介质的加速过程。为了简化计算,设置物性为常数,取值如下:孔隙率为0.841,密度为 $650 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,热容为 $824.7 \text{ J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$,热导率为 $4.23 \text{ W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$,衰减系数为1 399,散射系数为1 098,吸收系数

为 301; 多孔介质区阻力系数(黏性阻力系数和惯性阻力系数)分别按照吕兆华^[15]研究得到的公式进行计算。

⑤本研究采用甲苯在 Pt 表面反应的一步反应机理^[16], 具体参数设置如下: 指前因子 $A=1.26 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, 活化能 $E_a=92.6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

2 模型验证

对网格进行无关性验证^[17], 网格数量在模拟中起着至关重要的作用。网格精度不够, 不能够满足计算需求; 网格数量太大, 又会增加计算量。无关性验证有助于在网格加密程度与计算精度之间找到一个平衡点。本研究通过对网格进行 1 次加密和 2 次加密, 来探究网格数量对模拟计算精度的影响, 具体模拟结果如表 1 所示。

由表 1 可见, 当网格加密 1 次后, 再进行加密, 对系统内流场各项分布参数几乎没有影响, 故本研究所有计算都是在对网格进行 1 次加密之后进行的。

3 结果分析与讨论

3.1 甲苯/空气混合物当量比的影响

在入口流速为 $2 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的条件下, 改变甲苯/空气当量比, 分别对不同当量比条件下的反应进行数值模拟计算, 考察甲苯/空气当量比对甲苯转化率的影响, 结果如图 2 所示。

甲苯转化率根据式 (1) 进行计算。

$$\eta = \frac{x_{\text{进}} - x_{\text{出}}}{x_{\text{进}}} \times 100\% \quad (1)$$

式中: η 为甲苯转化率; $x_{\text{进}}$ 为入口处甲苯质量分数; $x_{\text{出}}$ 为出口处甲苯质量分数。

由图 2 可以看出, 入口流速保持一定, 增大入口甲苯/空气当量比, 甲苯转化率由原来的基本保持不变到不断下降; 当量比较低时, 甲苯转化率随着入口当量比的增加基本没有下降。当量比由 0.84 增加到 1.04 时, 甲苯经催化剂催化燃烧, 其转化率由 97.08% 下降至 85.79%; 当量比由 1.04 增加到 1.25 时, 其转化率由 85.79% 下降至 77.11%, 以基本一致的水平下降。说明当入口气速一定时, 混合气体与孔道接触时间一定, 反应去除的甲苯量也应该是一定的, 但随着反应放热, 混和气体在孔道内会实现加速, 孔道长度一定, 随着速度的增加, 混合气体与催化剂接触时间缩短, 催化反应去除的甲苯量也会相应减小。

CHI 等^[18]的研究详细介绍了动力学模型和 VOCs 氧化机制。HOSSEINI 等^[19]实验研究发现, 甲苯在 Pd-Au/TiO₂ 金属物催化剂表面发生的氧化反应遵循 L-H 模型, 即氧分子和甲苯分子在催化剂表面竞争吸附。罗孟飞等^[16, 20]根据 L-H 理论, 探究甲苯在铂上的反应动力学, 其表述形式为 $r = kc/(1+bc)$, 其中 b 值大小反映了反应物在催化剂表面吸附的难易程度。可以看出甲苯在铂催化剂表面吸附较为容易。通过控制甲苯入口浓度来调整甲苯和氧气的当量比, 可以看出, 在贫燃条件下, 催化段转化率几乎为 100%; 在富燃条件下, 催化段转化率下降, 但热力燃烧甲苯转化率上

表 1 网格无关性验证数据对比

Table 1 Comparison of grid-independent validation data

加密情况	标准差	面积加权均匀性指数
不加密	0.273	0.882
加密1次	0.233	0.909
加密2次	0.233	0.909

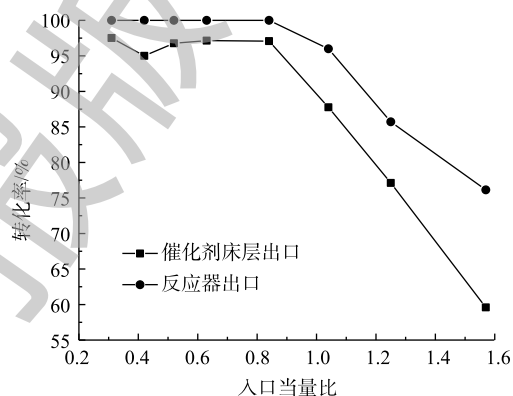


图 2 甲苯转化率随入口当量比的变化

Fig. 2 Change of toluene conversion rate with inlet equivalent ratio

升,由此可知,甲苯在铂上的吸附能力要强于氧气,故适当增加氧气的量有利于催化反应继续进行。

在本次模拟中,将壁面设置为绝热,并通过分区设置反应,在多孔介质区进行以铂为催化剂的催化反应,在多孔介质区后的筒体中进行热力燃烧。当入口当量比为1.04时,催化剂床层出口甲苯转化率为85.79%,反应器出口甲苯转化率为96%,其温度分布和甲苯浓度分布见图3。可以看出,入口当量比为0.63时,高温区出现在催化床层段,入口当量比为1.04时,高温区主要集中在催化床层后,并且高温区整整差了1000 K,催化反应放热达到了甲苯空间热力燃烧的温度,因此在反应器后端发生了热力燃烧,从而将甲苯完全转化,说明甲苯的催化燃烧本身就是一个催化燃烧和热力燃烧相互掺杂的过程。在低温下,只发生甲苯的催化燃烧,随着温度的升高,热力燃烧和催化燃烧共同作用,这也说明,当燃烧温度达到一定高度后,一定范围内的甲苯废气均能取得一个很好的转化效率,说明催化燃烧技术具有很强的浓度弹性,非常适用于在真实工业生产中非恒定浓度的有机废气的净化。而且,催化燃烧和热力燃烧共同作用也可以使系统内温度大大降低,更为有效地减少了二次污染物的产生和氮氧化物的产生。

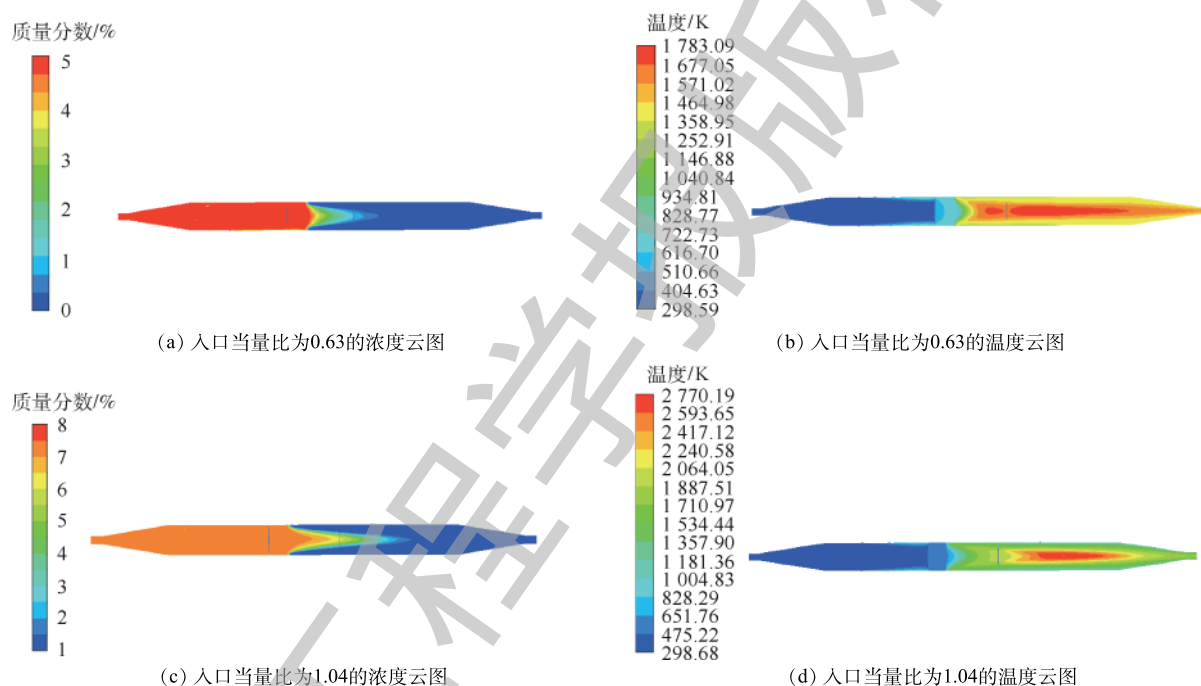


图3 不同入口当量比的浓度和温度云图

Fig. 3 Concentration and temperature clouds of different inlet equivalent ratios

3.2 燃烧温度的影响

温度是影响燃烧的一个重要因素。研究考察了当催化燃烧反应发生时,反应器内温度和甲苯转化率的变化情况。在给定温度为625 K、混合气体入口当量比为1、入口速度为 $4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况下,反应器内温度分布云图如图4所示,高温区主要集中在反应器后端。在同样的条件下,仅改变混合气体入口气速,以分别考察燃烧温度对甲苯转化率的影响,结果如图5所示。可以看出,给定燃烧系统一个温度,在

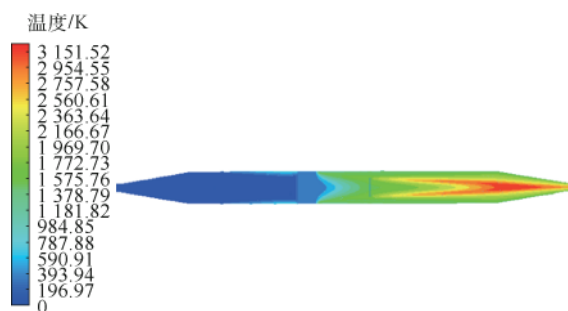


图4 入口流速为 $4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时反应器中温度变化

Fig. 4 Temperature variation in reactor at $4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ inlet velocity

不同入口流速下, 甲苯的转化率均有很大提高; 改变燃烧温度, 不同流速下的甲苯的转化率也均有所提高, 说明燃烧温度是控制甲苯转化率的一个重要因素。入口流速为 $4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 、入口当量比为 1 时, 催化剂床层出口甲苯转化率随着温度的上升变化不大, 说明流速过快导致甲苯和催化剂之间接触时间过短, 此时温度已经不是影响反应的主要因素; 但随着入口流速的减小, 催化剂床层甲苯达到最高转化率时的温度就越低, 但是在反应器出口, 几乎在每一种工况条件下, 甲苯的转化率都已经达到了 100%。这是因为反应放热, 在反应器筒体后腔同样发生了热力燃烧, 从而将甲苯完全转化。这也说明温度是影响反应的一个重要因素。

3.3 入口流速的影响

改变入口流速会导致反应速率和滞留时间发生变化^[21], 从微观角度来讲, 它们都是影响反应进行的重要因素。将入口条件固定如下: 当量比为 1, 温度为 300 K, 入口流速为 $0.16\sim 4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, 甲苯转化率随入口流速的变化情况如图 6 所示。可以看出: 随着入口流速的增加, 入口流速小于 $1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, 催化床层出口和反应器出口均保持几乎 100% 的转化率, 入口流速大于 $1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 后, 催化床层出口转化率逐渐降低; 而反应器出口甲苯转化率很高且保持不变, 产生这一现象的原因是混合气体经催化反应后, 蓄积的热量足够支撑甲苯进行热力燃烧。

由催化反应动力学可知, 反应速率由物质扩散速率控制, 当催化剂长度一定时, 入口流速越大, 混合气体在孔道内的滞留时间越短, 要扩散到铂表面和其活性位点接触的难度就越大, 部分甲苯和催化剂来不及充分接触就被气流带离, 从而使得整个反应的进程变得缓慢; 反之, 混合气体因滞留时间长而能与表面有效位点充分地碰撞接触, 从而使整个反应的效率提升。

WANG 等^[22]通过对铂 (Pt) 催化甲烷的模拟研究得出, Pt 催化剂上的均相反应主要对高、中进口速度下的均质燃烧产生负面影响, 而在低速条件下表现出正面影响, 与本研究模拟结果相同。

图 7 是甲苯混合气体在反应器中的温度变化曲线。可以看出, 中心线温度变化范围较大, 其中有 3 个温度突变: 第 1 个突变是从 300 K 升到 625 K, 这是为了使甲苯能够达到燃烧温度; 第 2 个温度突变是从 625 K 上升到 1700 K 左右, 这是因为甲苯混合气体进入催化床层, 发生了催化反应, 燃烧反应放热, 从而使得温度急剧升高; 随之未反应的混和气体进入反应器筒体后腔, 经过热量的蓄积, 反应器

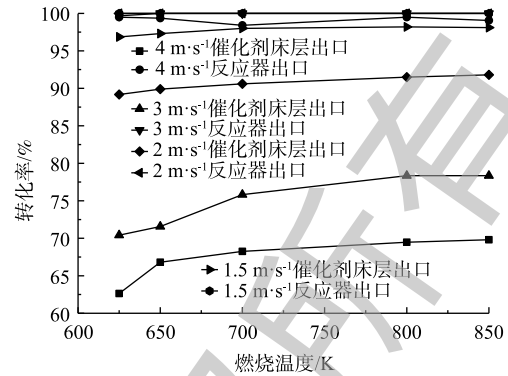


图 5 燃烧温度对转化率的影响

Fig. 5 Effect of burning temperature on percent conversion

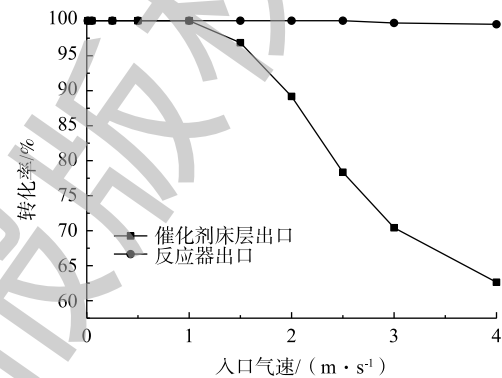


图 6 转化率随入口流速的变化

Fig. 6 Change of conversion with inlet flow rate

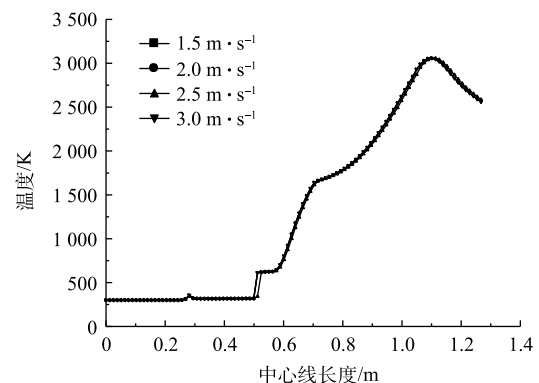


图 7 中心线温度随入口流速的变化

Fig. 7 variation of centerline temperature with inlet velocity

内的温度已经完全能够支撑甲苯直接进行热力燃烧,故可继续放出大量热。

图8是反应器不同位置的平均温度随入口流速的变化曲线。可以看出,当入口流速为 $1.5\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$,在经过60 mm长的催化剂床层后,温度已经基本不变。随着入口流速的升高,催化床层温度有所降低,但都在催化床层末端有温度陡增的趋势。从图9可以看出,随着入口流速的降低,最高温度距离前移,可以看出入口流速越低,越有利于催化反应的发生。

在实际的工程应用中,往往在保证处理效率的前提下,还要考虑能耗和运行费用问

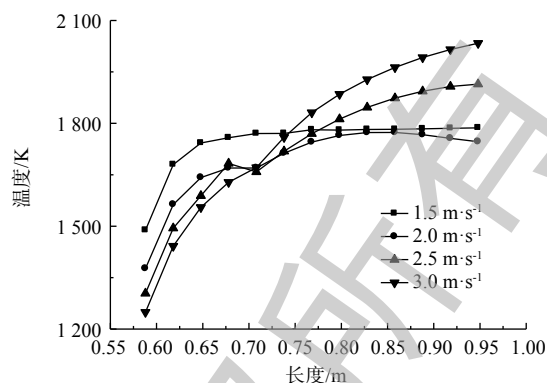


图8 反应器不同位置平均温度随入口流速的变化
Fig. 8 Variation of mean temperature at different positions of reactor with inlet flow velocity

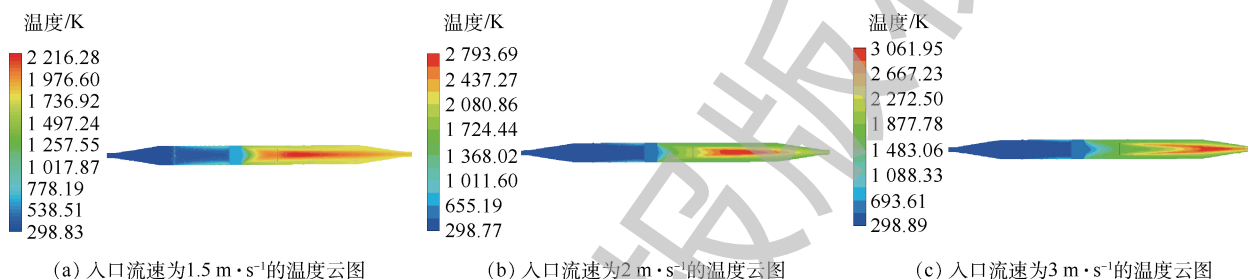


图9 不同入口流速的温度云图

Fig. 9 Temperature clouds at different inlet velocities

题。当燃烧温度足够高时,在一定入口流速范围内,均可获得很好的甲苯去除效果,因此,可以通过一些手段,减少反应器与外界环境之间的换热,降低能量损失,从而促进反应器内催化燃烧和热力燃烧共同作用;同时也可说明催化燃烧技术可以用于气体风量发生波动的有机废气净化。

4 结论

1) 在只改变甲苯入口当量比的情况下,甲苯的催化转化率随甲苯/空气当量比的增大呈现逐渐降低的趋势,这说明催化剂能处理的量是一定的,在甲苯的入口流速为 $2\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 、燃烧温度为 625 K ,入口当量比不高于 0.84 时,甲苯催化转化率均可达到 100% ;在只改变入口流速的条件下,甲苯的催化转化率与流速呈正相关。当入口当量比为 1 ,燃烧温度为 625 K ,入口流速不大于 $1\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,甲苯催化转化率均可达到 100% 。

2) 燃烧温度是影响甲苯转化率的重要因素,催化剂可以有效地降低甲苯起燃温度。当燃烧温度大于 625 K ,甲苯的入口当量比小于 1 ,入口流速小于 $2\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,可保证甲苯转化率在 96% 以上。

3) 通过分段控制燃烧反应,发现贫燃条件有利于催化燃烧,富燃条件有利于引发热力燃烧,同时也可利用此结论,根据所处理废气浓度的波动范围,合理布置催化床层长度。

4) 甲苯混合气体在反应器中发生反应时,催化燃烧和热力燃烧共同起作用,因此,在实际反应器的设计中,要考虑对反应器采取一定的绝热措施,以减少反应器壁面与外界环境之间的换热。

参考文献

[1] 户英杰, 王志强, 程星星, 等. 燃烧处理挥发性有机污染物的研究进展[J]. 化工进展, 2018, 37(1): 319-329.

- [2] 汪智伟, 陈明功, 王旭浩, 等. 挥发性有机物处理技术研究现状与进展[J]. 现代化工, 2018, 38(7): 79-83.
- [3] 崔龙, 韩建, 于力娜, 等. 整体式Cu-ZSM-5蜂窝催化剂开发研究[J]. 汽车工艺与材料, 2019(1): 46-50.
- [4] 李涛. VOCs催化燃烧催化剂的制备及反应系统研究[D]. 上海: 华东理工大学, 2015.
- [5] 杨一鸣. 选择性催化还原法(SCR)反应器主体形式及内部结构的设计与优化[D]. 北京: 北京工业大学, 2017.
- [6] 李欣婷. 微型圆管燃烧器内二甲醚催化燃烧的数值模拟[D]. 杭州: 浙江大学, 2018.
- [7] 曾文. 催化燃烧的数值模拟及其在均质压燃(HCCI)发动机中应用的基础研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2006.
- [8] 王娟. 整体式催化剂中甲苯燃烧反应的数值模拟及其结构优化[D]. 广州: 华南理工大学, 2011.
- [9] 王娟, 赵建国, 黄碧纯, 等. 整体式催化剂中甲苯蓄热催化燃烧过程的数值模拟[C]//中国化学会. 第十五届全国催化学术会议论文集. 广州, 2010: 1.
- [10] 王恩宇, 吴晋湘, 刘联胜, 等. 基于FLUENT对惰性多孔介质中湍流预混燃烧的模拟[J]. 河北工业大学学报, 2007, 36(2): 94-99.
- [11] YANG Y M, LI J, HE H. Research and proposal on selective catalytic reduction reactor optimization for industrial boiler[J]. Journal of the Air & Waste Management Association, 2018, 68(7): 737-754.
- [12] 何金桥, 赵华庚, 曾丹, 等. 基于多孔介质模型的低质燃气燃烧排放特性数值模拟[J]. 长沙理工大学学报(自然科学版), 2017, 14(2): 80-84.
- [13] VEREIN D I. VDI-Wärmeatlas[M]. 8th Edition. Düsseldorf: VDI-Verlag, 1997.
- [14] FU X Y. Modeling of a submerged flame porous burner/radiant heater[D]. West Lafayette, IN, USA: Purdue University, 1997.
- [15] 吕兆华. 泡沫型多孔介质中非达西流动特性的研究[J]. 工程力学, 1995, 15(2): 57-64.
- [16] 罗孟飞, 袁贤鑫, 朱波. 甲苯、丙酮在Pt/NM催化剂上深度氧化反应动力学研究[J]. 杭州大学学报(自然科学版), 1993, 20(3): 333-337.
- [17] 杨亚晶, 谢伟, 魏衍举. Mg-O₂和Mg-CO₂预混气燃烧特性及热声振荡的数值模拟研究[J]. 推进技术, 2019, 40(2): 1-13.
- [18] CHI H, JIE C, XIN Z, et al. Recent advances in the catalytic oxidation of volatile organic compounds: A review based on pollutant sorts and sources[J]. Chemical Reviews, 2019, 119(7): 4471-4568.
- [19] HOSSEINI M, BARAKAT T, COUSIN R, et al. Catalytic performance of core-shell and alloy Pd-Au nanoparticles for total oxidation of VOC: The effect of metal deposition[J]. Applied Catalysis B: Environmental, 2012, 111-112: 218-224.

- [20] 罗孟飞, 袁贤鑫, 陈敏. Pt/NM、Pd/NM催化剂上甲苯深度氧化反应动力学[J]. 应用化学, 1994, 6(11): 70-72.
- [21] 李欣婷, 邓尘, 杨卫娟, 等. 微型填充床燃烧器中二甲醚的铂催化燃烧数值模拟[J]. 热力发电, 2018, 47(8): 50-54.
- [22] WANG S X, LI L H, XIA Y F, et al. Effect of a catalytic segment on flame stability in a micro combustor with controlled wall temperature profile[J]. *Energy*, 2018, 165: 522-531.

(本文编辑: 郑晓梅, 张利田)

Numerical simulation of catalytic combustion of toluene in monolithic catalytic reaction system based on Fluent

LIANG Wenjun*, LIU Di, REN Sida, LI Jian

Beijing Key Laboratory of Regional Atmospheric Compound Pollution Control, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China

*Corresponding author, E-mail: liangwenj@bjut.edu.cn

Abstract In order to obtain the combustion law of toluene in the monolithic catalytic system, numerical simulation of the combustion characteristics of toluene-air on platinum (Pt) in a monolithic catalytic reaction system was carried out using Fluent 18.1. Based on the assumption of local thermal equilibrium between gas and solid in porous media, a three-dimensional catalytic combustion model of porous media was established. Experiments showed that the model could well reflect the combustion characteristics of toluene in the whole system. Through the investigation of temperature field, concentration field and velocity field in the whole reaction system and segmental controlling combustion reaction, it was found that the lean combustion condition was favorable for catalytic combustion, and the rich combustion condition was favorable for inducing thermal combustion. At the equivalent ratio less than 1 and the inlet flow rate less than $2 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, which was beneficial to catalytic combustion, the catalytic conversion rate was above 96%. When the equivalent was relatively high and the inlet flow rate was large, it was favorable for causing thermal combustion. This result provided a reference for the practical application of this technology.

Keywords toluene; catalytic oxidation; numerical simulation; reactor; porous medium