Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский государственный технический университет»
Кафедра инженерных проблем экологии

Методические указания по выполнению курсовых работ по предмету «Компьютерные технологии в области техносферной безопасности, экологии и природопользования, часть 2»

Новосибирск 2016

Для выполнения курсовой работы необходимо:

❖ Записать уравнения массо- и теплопереноса с граничными условиями в зерне катализатора в сферических координатах для процесса, указанного в теме курсовой работы. Учесть каталитическую реакцию и обмен теплом и веществом между поверхностью гранулы и внешним газовым потоком. Для описания массопереноса каждого вещества использовать закон Фика, для теплопереноса - закон Фурье. В центре гранулы задать условия симметрии, на поверхности – обмен теплом и массой с потоком.

❖ На основе полученных уравнений построить модель в пакете COMSOL, используя интерфейс "*Coefficient Form PDE*", в котором коэффициенты задаются так, чтобы уравнения пакета соответствовали заданной математической модели:

- выбрать размерность модели,
- выбрать интерфейс для задания уравнений по веществам: коэффициентная форма ДУЧП,
- выбрать интерфейс для задания уравнения по температуре: коэффициентная форма ДУЧП,
- выбрать нестационарный тип задачи,
- задать геометрию и параметры модели,
- определить все коэффициенты в уравнениях по концентрациям и в граничных условиях,
- определить все коэффициенты в уравнении по температуре и в граничном условии,
- выполнить расчет,
- сделать более мелкую сетку у поверхности зерна,
- увеличить время процесса,
- оформить графики,
- по результатам расчета задать формулу для определения степени использования зерна катализатора,
- экспортировать результаты в файл .txt,
- по результатам расчета нарисовать изменение концентрации в виде поверхности,
- выполнить следующие пункты задания и оформить результаты расчетов:

1) В случае исследования внутренней диффузии:

1. Выписать значения концентрации вещества в мольных долях в центре и на поверхности зерна;

2. Найти степень использования зерна катализатора при следующих значениях диаметра зерна:

0.1, 0.5, 1, 2, 4, 6, 8 (мм);

3. Построить зависимость степени использования от параметра Тиле $\psi = R_p(k_1/D_e)^{1/2}$.

4. Определить условия, при которых реакция протекает в кинетической и внутридиффузионной области;

5. Привести профили концентраций в мольных долях веществ по радиусу зерна катализатора для трех областей протекания процесса- кинетической, переходной, диффузионной.

2) В случае исследования внешней диффузии:

1. Провести моделирование процесса при условии, что процесс протекает в кинетической области, т.е. сопротивление массопереносу в зерне катализатора незначительно. Это

допущение верно при значении $D_e \to \infty$. Подобрать значение D_e, при котором внутренняя диффузия не будет лимитировать процесс;

2. Выписать значения концентрации вещества в мольных долях в центре и на поверхности зерна;

3. Найти степень использования зерна катализатора;

4. Объяснить влияние размера зерна и линейной скорости на полученные результаты.

3) В случае исследования одновременного влияния внутренней и внешней диффузии:

1. Провести моделирование процесса, если эффективный коэффициент диффузии равен $D_e = 5.37 \cdot 10^{-6}$ м^2/с. В этом случае внутренняя диффузия может влиять на скорость массопереноса в зерне катализатора;

2. Выписать значения концентрации вещества в мольных долях в центре и на поверхности зерна;

3. Найти степень использования зерна катализатора;

4. Объяснить влияние размера зерна и линейной скорости на полученные результаты.

4) В случае исследования процессов массо- и теплопереноса в неизотермическом зерне катализатора:

1. Выписать значения концентрации вещества в мольных долях и температуры в центре и на поверхности зерна, а также степени использования зерна катализатора при следующих значениях диаметра зерна: 0.1, 0.5, 1, 2, 4, 6, 8 (мм);

2. Построить зависимость степени использования от параметра Тиле $\psi = R_p(k_1/D_e)^{1/2}$.

Литература

1. Сайт ФЕН НГУ http://fen.nsu.ru/fen.phtml?topic=meth – Научные основы инженерного катализа. Компьютерный курс. Верниковская Н.В., Трухан С.Н., Покровская С.А.