

**ХИМИКОТЕХНОЛОГИЧЕН И МЕТАЛУРГИЧЕН
УНИВЕРСИТЕТ - София**

ФАКУЛТЕТ ПО ХИМИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ

Одобрил:

доц. д-р инж. А. Александров
Директор на ДФМТН

Утвърдил:

Декан: проф. д-р инж. Санчи Ненкова

УЧЕБНА ПРОГРАМА

За образователно-квалификационна степен МАГИСТЪР

**дисциплина: Компютърна симулация на процеси в химичните
реактори**

специалност: CAD/CAE в химичните технологии

кредити: 4,5

Изготвил:

.....

доц. д-р инж. В. Илиев

.....

гл. ас. Д. Мутафчиева

Катедра: Приложна механика

Ръководител на катедра:

.....

доц. д-р инж. А. Александров

2013 г.

УЧЕБНА ПРОГРАМА

По дисциплината: Компютърна симулация на процеси в химичните реактори

I. Хорариум съгласно учебния план

Вид занятия	семестър	хорариум, часа
1. Лекции	II	30
3. Семинарни упражнения	II	15
3. Форма на контрол	II	Тест – 30% Курсов проект – 30 % Изпит – 40%

II. Анотация

Дисциплината запознава с техниките за приложение на компютърните технологии при численото решаване на математични модели, които описват сложни и влияещи се един друг процеси на химично взаимодействие, на масопренасяне и топлообмен в един химичен реактор. Получените знания надграждат тези от бакалавърската степен и позволяват прилагане на компютърна симулация за оптимизиране на проектантския процес, което води до повишаване на продукцията, понижаване на цената и като резултат – до по-голяма производствена печалба. В курса на обучение се усвояват възможностите на симулационния софтуер за решаване на конкретни инженерни задачи, свързани с химично превръщане, стационарни и нестационарни задачи с/или молекулярен и конвективен пренос на количество на движение, топлина и маса (уравненията на Навие-Стокс, уравнението на Фурие и др.) Основно се разглеждат течностни реакции в кубови (със смесване) и тръбни (с изместване) реактори.

Дават се знания и за техники на компютърна симулация на процеси в газотечни реактори, реактори с идеално смесване и идеално изместване, както и в хамагенни и хетерогенни реактори. (адсорбери и абсорбери), които подробно се разглеждат в други дисциплини от курса.

III. ЛЕКЦИОНЕН КУРС

1. Основни принципи на компютърната симулация

4 часа

Избор на софтуер, анализ и моделиране на твърдотелната част. Анализ и избор на хидродинамичен модел за течението, анализ и избор на модел за реакцията. Методи за визуализация и числена обработка на резултатите. Верификация и валидация.

2. Компютърна симулация на процеси в реактор с механично разбъркване

4 часа

Изграждане на геометричен модел, избор на метод за решаване на конститутивните уравнения, контрол на решението, експониране на резултати.

3. Компютърна симулация на процеси в барбутажен и ерлифт реактор

3 часа

Изграждане на геометричен модел, избор на метод за решаване на конститутивните уравнения, контрол на решението, експониране на резултати.

4. Компютърна симулация на процеси в тръбен реактор

3 часа

Изграждане на геометричен модел, избор на метод за решаване на конститутивните уравнения, контрол на решението, експониране на резултати.

5. Компютърна симулация на процеси в реактор с механично разпръскване на течността

3 часа

Изграждане на геометричен модел, избор на метод за решаване на конститутивните уравнения, контрол на решението, експониране на резултати.

6. Компютърна симулация на процеси в реактор при високо налягане

3 часа

Изграждане на геометричен модел, избор на метод за решаване на конститутивните уравнения, контрол на решението, експониране на резултати.

IV.Упражнения

- | | | |
|----|--|---------|
| 1. | Избор на геометричен моделер и създаване на геометричен модел на химичен реактор | 2 часа |
| 2. | Компютърна симулация на необратими химични реакции. | 1 час |
| 3. | Компютърна симулация на обратими химични реакции. | 1 час |
| 4. | Компютърна симулация на химичен процес в реактор. | 1 час |
| 5. | Курсов проект | 10 часа |

V.Литература

Книги:

1. Blumen A., I. Sokolov, G. Zumofen, J. Klafter Simulations of Chemical Reactions. Computational Physics, Springer, 1996
2. Complex Chemical Reaction Systems: Mathematical Modelling and Simulation. J. Warnatz, W. Jäger (Editors), Springer, 1998
3. Thomas P. J. Simulation of Industrial Processes. Butterworth-Heinemann, 1999
4. Ancheyta J., Modeling and Simulation of Catalytic Reactors. John Wiley & Sons, 2011

В Интернет:

1. Център за математично моделиране и компютърна симулация при ХТМУ-София на адрес <http://uctm.edu/mmcentre/>
2. Demo room на ANSYS на адрес <http://www.ansys.com/Resource+Library?type=Demo>
3. Инженерни анализи в "Кем АС Инженеринг" ООД на адрес <http://www.che-service.com/examples.htm>
4. Инженерни анализи в «ТЕАМ» ООД на адрес http://www.team.bg/new/index.php?option=com_content&view=article&id=56&Itemid=79
5. Инженерни анализи в «АПРЕНС» ООД на адрес http://www.aprens.com/BG/consulting/HeatExchangers/heat_exchangers.htm