

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММЫ CHEMCAD В КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ

Велиева Ф.М., Зейналов Н.Ю., Алиева В.Ф.

Бакинский Государственный Университет AZ 1148, Баку, ул. З. Халилова, 23

Химико-технологические системы ХТС, без которых не существует современного химического производства, стоят в начале третьего этапа развития. Все это вывело компьютерное моделирование на высокий уровень развития, позволяющий проектировать более экономичные и надежные ХТС и эффективно управлять работой действующих установок.

На основе компьютерного моделирования возникла новая отрасль компьютерная химия. Она основана на применении компьютерных методов, теории графов и комбинаторики к химическим задачам.

В качестве примера типовых задач компьютерной химии можно назвать поиск зависимостей «структура-свойство», «компьютерный синтез», распознавание химических структур по идентификации физико-химическим базам данных. При решении подобного типа задач применяются методы искусственного интеллекта.

На уроке «Процессы и аппараты химической технологии», студенты химического факультета Бакинского Государственного Университет знакомятся с пакетами программ компании ChemStations, Inc. Программа CHEMCAD составляет основу пакета и предназначена для статистического моделирования процессов, расчета геометрических размеров и конструктивных параметров аппаратов, оценки стоимости оборудования. Дополнительные модули пакета: CC-DYNAMICS – для расчета динамических параметров, CC-THERM – для расчета теплообменников (типа труба в трубе, пластинчатых, кожухотрубных, аппаратов воздушного охлаждения), CC-BATCH – для моделирования процесса ректификации и ряда других. Данная программа содержит в себе базу данных по химическим компонентам, физико-химическим уравнениям, коэффициенты: фазового равновесия, энтальпии, энтропии, плотности, вязкости, теплопроводности и т.д. С помощью программы можно разрабатывать технологическую схему химического производства.

В докладе приводятся результаты расчета, полученные студентами процесса дегидроалкилирования метилциклогексена метанолом на зерне катализатора с учетом конвективного и диффузионного переноса тепла. Вычислены коэффициенты радиальной диффузии для катализаторов с гладкой и шероховатой поверхности $D_{ef} = 3.47 \cdot 10^3 \text{ м}^2/\text{сек}$. Съем целевого продукта с единицы объема катализатора имеет максимальное значение, приходящееся на время контакта 0,9–0,912 с и достигается в двухсекционном аппарате. Минимальная погрешность вычислений показывает хорошую согласованность экспериментальных и расчетных данных.