

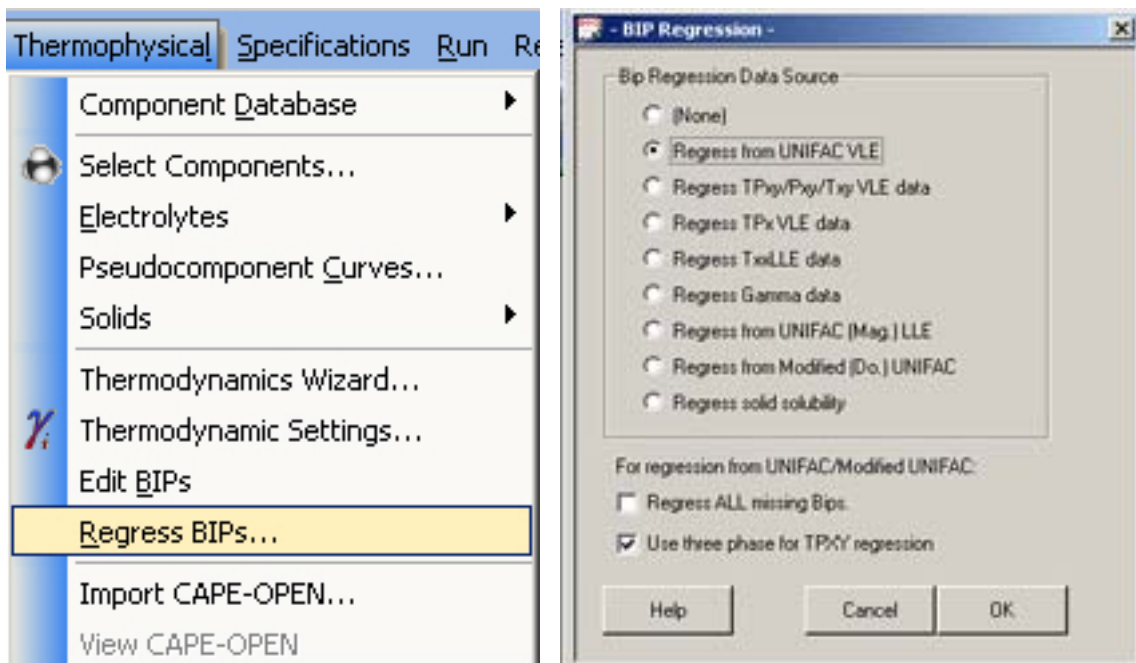
User NRTL BIPs

In CHEMCAD kann man seit 2009 eigene Datenbanken für binäre Daten erstellen. Die in CHEMCAD enthaltenen BIPs (Binary Interaction Parameter) stammen überwiegend aus Dechema Data Collection, eine veröffentlichte Buchreihe der Universität Dortmund mit der Dechema, Frankfurt unter der Leitung von Prof. Dr. Onken und Dr. Gmehling. Diese Reihe entstand etwa um 1970. Daraus wurde u.a. die Dortmunder Datenbank, angeregt durch Uhde, Dortmund sowie die Dechema Datensammlung, DeTherm (www.dechema.de ethem) sowie die Datensammlung der DDBST, Oldenburg.

Während für die Buchreihe keine Neuauflagen geplant sind, werden die genannten Datenbanken weiter gepflegt. Der Erwerb von Daten aus diesen Datenbanken ist kostenpflichtig. Die Daten selbst sind urheberrechtlich geschützt. Die Daten der Buchreihe enthalten sowohl xy-Meßdaten als auch u.a. NRTL Parameter. Die Daten der Datenbanken enthalten nicht selten nur die xy-Meßdaten.

Aus xy-Meßdaten lassen sich in CHEMCAD mit Hilfe der Funktion BIP-Regression 3 NRTL-Parameter generieren. Dass für NRTL gesagte gilt sinngemäß auch für andere Modelle wie Uniquac, Wilson etc. Für mehr als 3 NRTL Parameter muss auf andere Regressionsmethoden verwiesen werden, da dies z.Z. noch nicht in CHEMCAD angeboten wird.

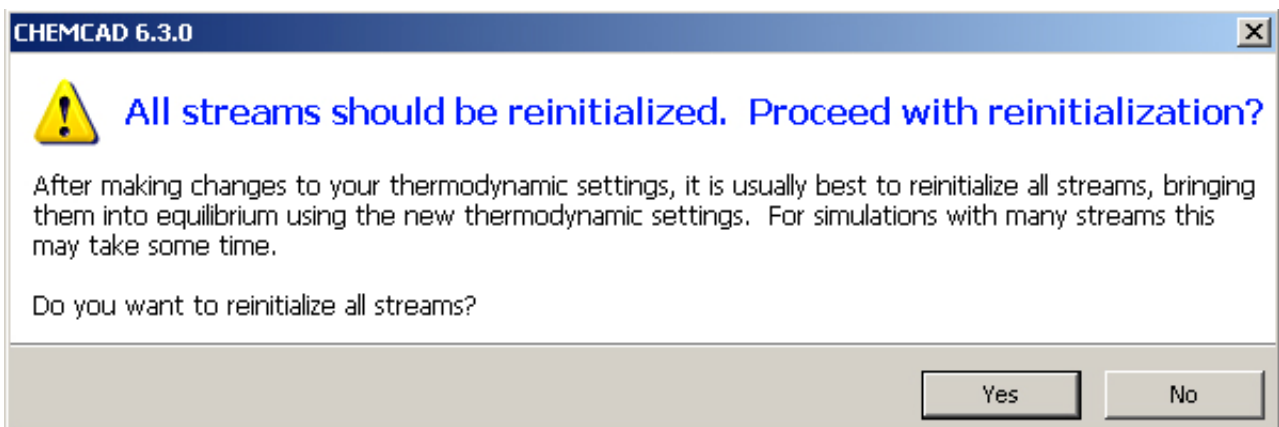
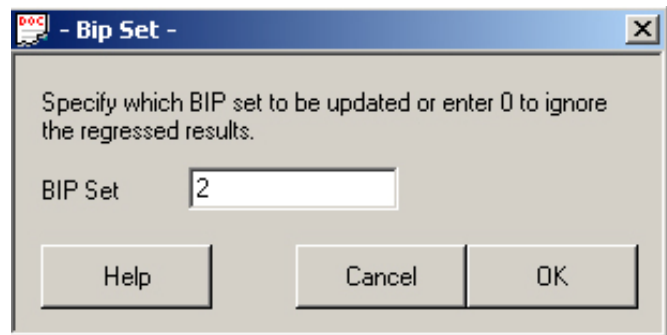
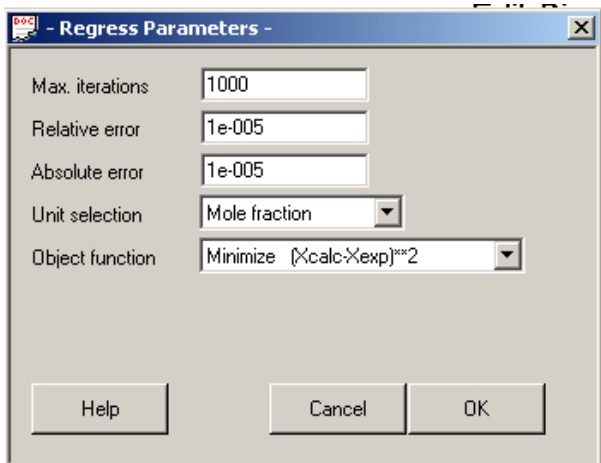
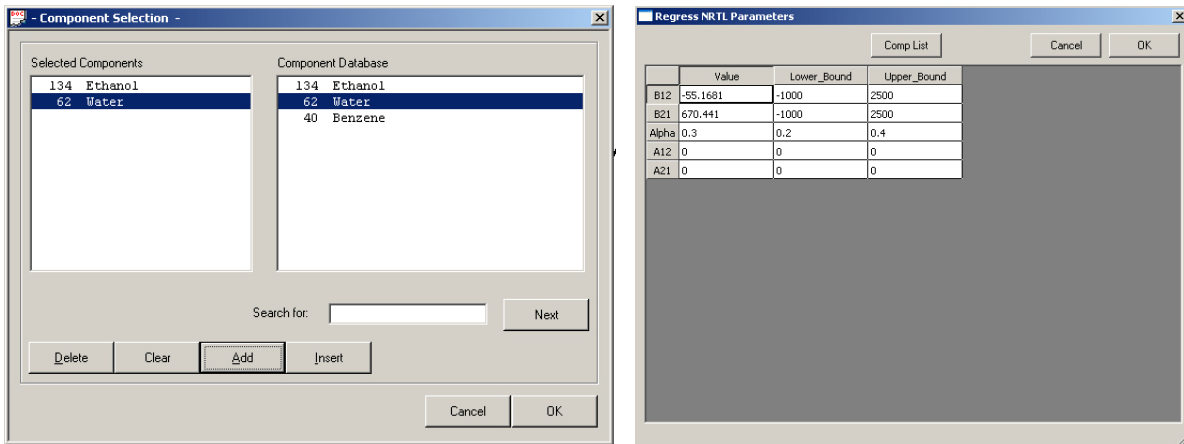
Für die BIP-Regression wählt man:



Es stehen mehrere Möglichkeiten zur Verfügung, je nachdem welche Datenquelle vorliegt. Alle Unifac Methoden nutzen die Generierung von Phasengleichgewichten mit Unifac und berechnen daraus die 3 NRTL-Parameter. Alle anderen Methoden benötigen Messdaten.

Am Beispiel Ethanol-Wasser mit Unifac VLE soll der Weg gezeigt werden, wie man NRTL Parameter gewinnt und diese in einer Datenbank speichert, und welche Möglichkeiten man hat.

Es wird der Job NRTL-User verwendet und aus der Component Liste Ethanol und Wasser ausgewählt.



Als Ergebnis erhält man:

Regressed Parameters :

B12 = 1.8493e+001

B21 = 6.7067e+002

Alpha = 3.9677e-001

Diese Daten sind nun für Ethanol-Wasser im BIP Set 2 gespeichert. Standardmäßig verwendet CHEMCAD folgende BIPs:

	I	J	JbTyp	Comment	Valid Temp	Source	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij	Dji	AlphaT
1	Ethanol	Water	VLE	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Components Database	-55.1681	670.441	0.3031	0	0	0	0	0	0	0
2	Ethanol	Benzene	VLE	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Components Database	99.6264	638.678	0.2899	0	0	0	0	0	0	0
3	Water	Benzene	LLE	NRTL LLE bip from standard CHEMCAD database	0 - 70 (C)	6.3 System Components Database	-5038.54	-426.233	0.2	121.326	66.2057	-17.2695	-10.6575	0	0	0

Wasser-Benzol stammen aus dem LLE Buch der Dechema Data collection und stehen erstmalig in CC6 zur Verfügung. Alle anderen Daten sind identisch mit denen in CC5.

Thermodynamic Settings -

Kvalue Models | Enthalpy Models | Transport Properties

Global K Value Model: **NRTL**

Ethane/Ethylene, Propane/Propylene:

Regular SRK/PR Bips
 Special SRK/PR Bips

Vapor Phase Association:

No Vapor Phase Association
 Vapor Phase Association

Vapor Fugacity/Poynting Correction:

Correction
 No Correction

SRK/PR Alpha function:

Standard SRK/PR
 Boston-Mathias extrapolation

Special PSRK Gas/Physical Solvent Package

Global Phase Option:

Vapor/Liquid/Solid
 Vapor/Liquid/Liquid/Solid

Water/Hydrocarbon Solubility:

Miscible
 Immiscible

Wilson model salt: <None>

No. of BIP sets: 2

Default BIP set: 2

Set Henry components
 Set local thermodynamics
 Clear all local thermodynamics
 Refresh input streams for local H models.

Options in gray are not applicable for this k value option

Help | Cancel | OK

Nach der Unifac Regression, die im Datensatz 2 gespeichert waren, erhält man folgendes Ergebnis:

Wählt man den Datensatz 2

	I	J	SubType	Comment	Valid Temp	Source	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij	Dji	Alf
1	...	Ethanol	Water	VLE		Simulation	18.4928	670.6735	0.396768	0	0	0	0	0	0	0
2	...	Ethanol	Benzene	VLE	Imported from CHEMCAD 5	6.3 System Components Database	99.6264	638.678	0.2899	0	0	0	0	0	0	0
3	...	Water	Benzene	LLE	NRTL LLE bip from standard CHEMCAD database	0 - 70 (C) 6.3 System Components Database	-5038.54	-426.233	0.2	121.326	66.2057	-17.2695	-10.6575	0	0	0

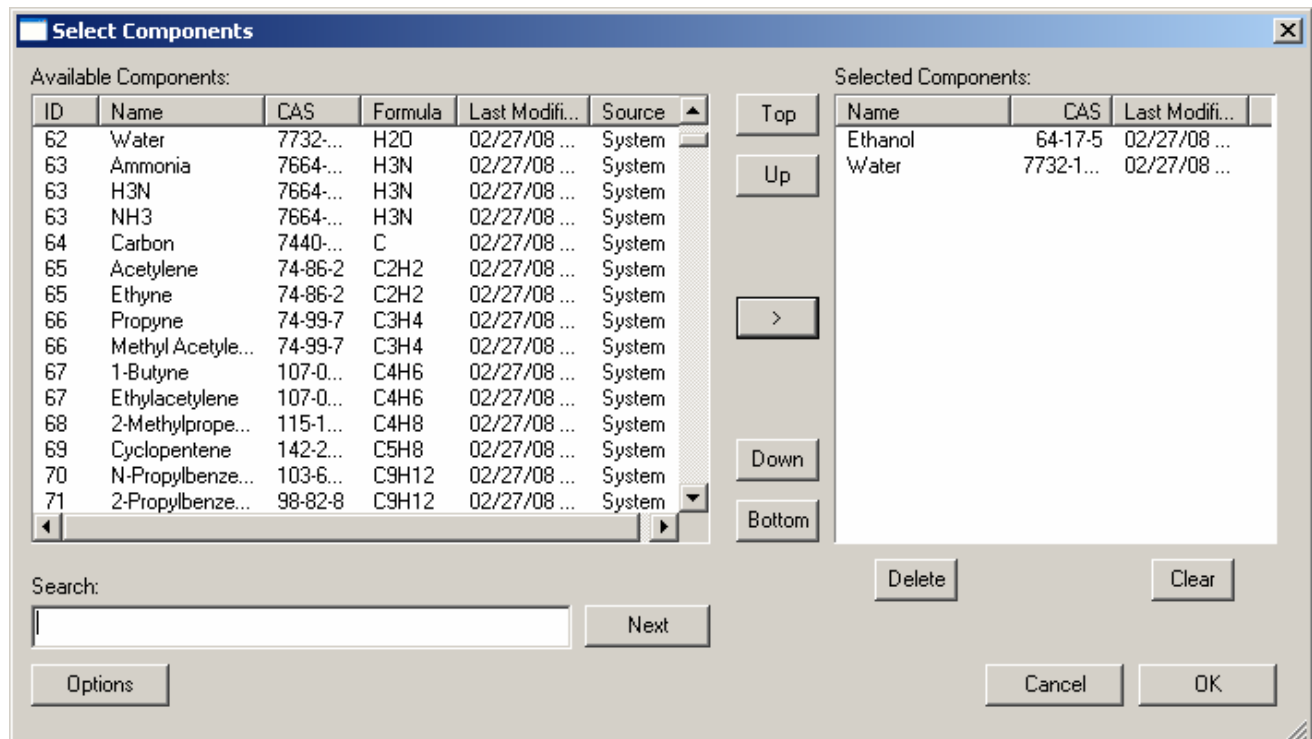
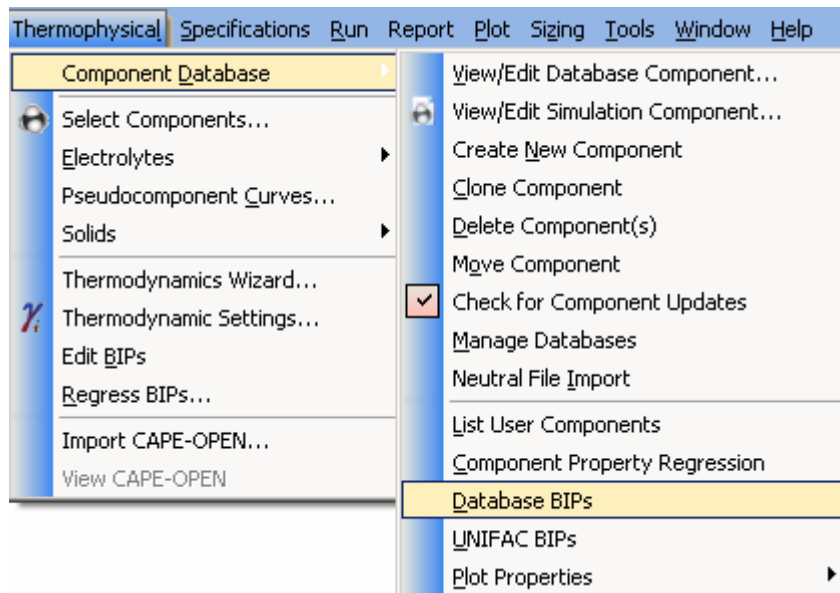
erscheinen zunächst BIP Set 1 s.o. und dann BIP Set 2, s.o.

Im Unterschied zum 1. BIP Set stehen im 2. BIP Set in Zeile 1 die Daten aus der Unifac Regression. Klickt man in Zeile 1 auf die 3 Punkte, erscheint:

Type	Subtype	Pr...	Description	Valid Temp Range	Source
NRTL	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
NRTL	VLE	2	Unifac Regression 2011	20 - 90 (C)	Simulation

In der Zeile „Simulation“ befinden sich die soeben erstellten Daten.

Nun sollen diese gespeichert werden.



View/Edit Database BIPs

The following list shows the available BIPs for the component pair: Ethanol (6.3 System Components Database) and Water (6.3 System Components Database)

Type	Subtype	Pr.	Description	Valid Temp. Range	Source
NRTL	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
Wilson	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
UNIQUAC	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
ESD	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
SAFT	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...

Buttons: Help, View/Edit, New, Delete, Copy, Close

Select Thermo Method

Thermo Method of new BIP: NRTL

Subtype of new BIP: VLE

Buttons: Help, Cancel, OK

- NRTL BIPs -

Component I: Ethanol
Component J: Water

Priority: 2 Subtype: VLE

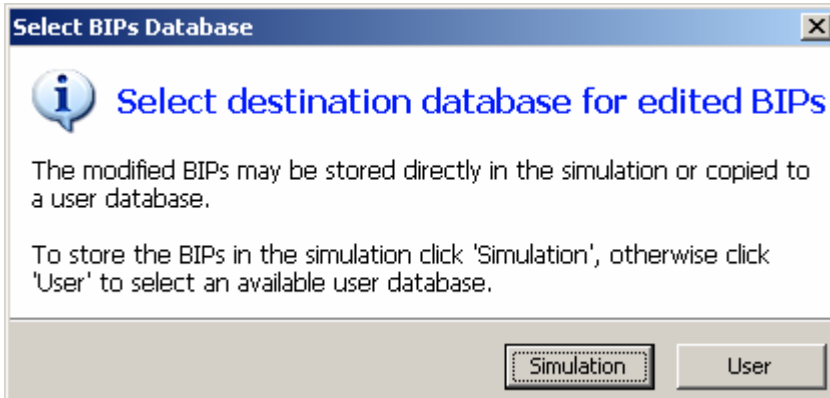
Unifac Regression 2011

Valid Temperature Range
Min: 20 C Max: 90 C

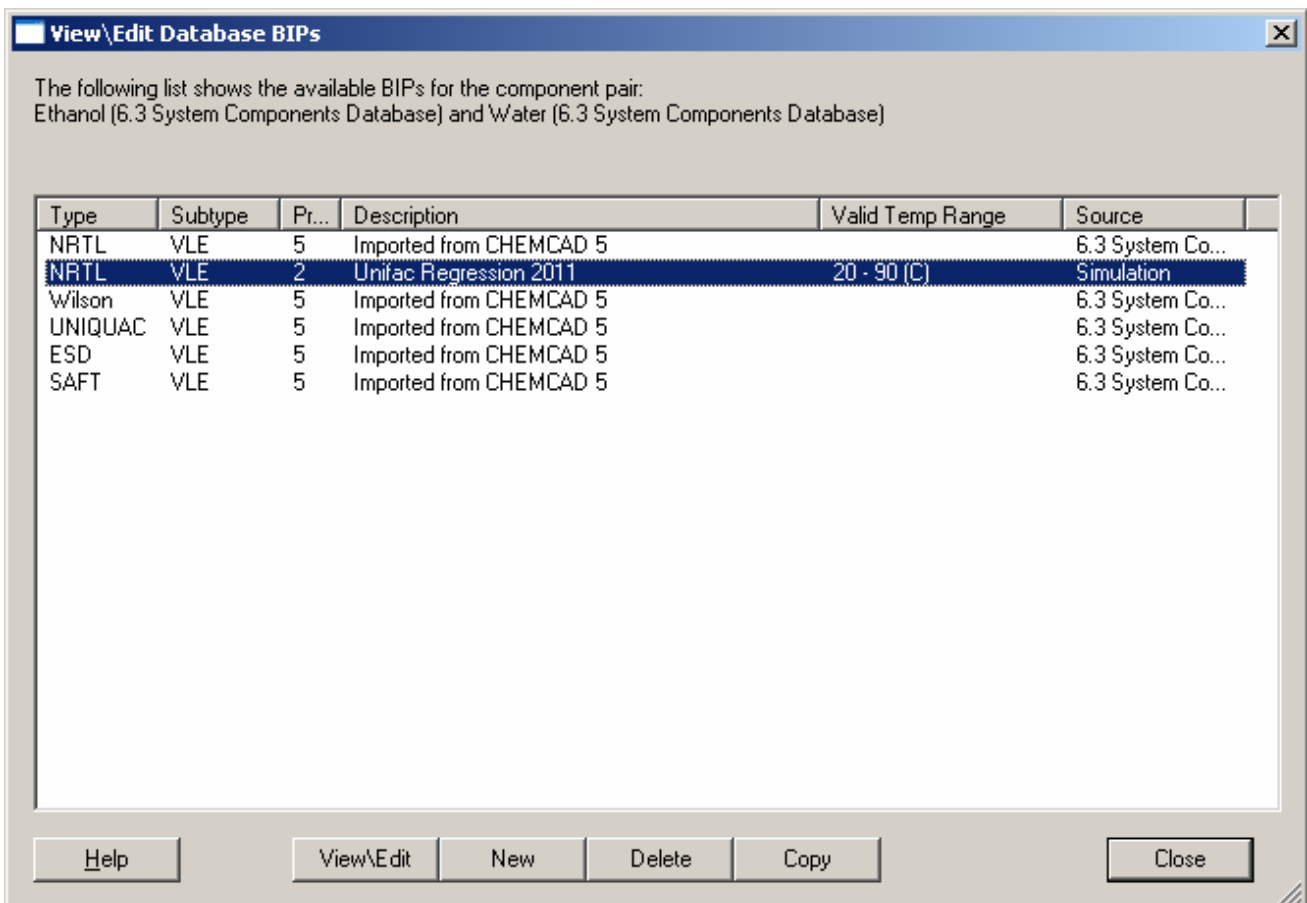
I, J	Bij: 18.4931	J, I	Bij: 670.67
	Alpha ij: 0.39677		
	Aij:		Aij:
	Cij:		Cij:
	Dij:		Dij:

Buttons: Help, Cancel, OK

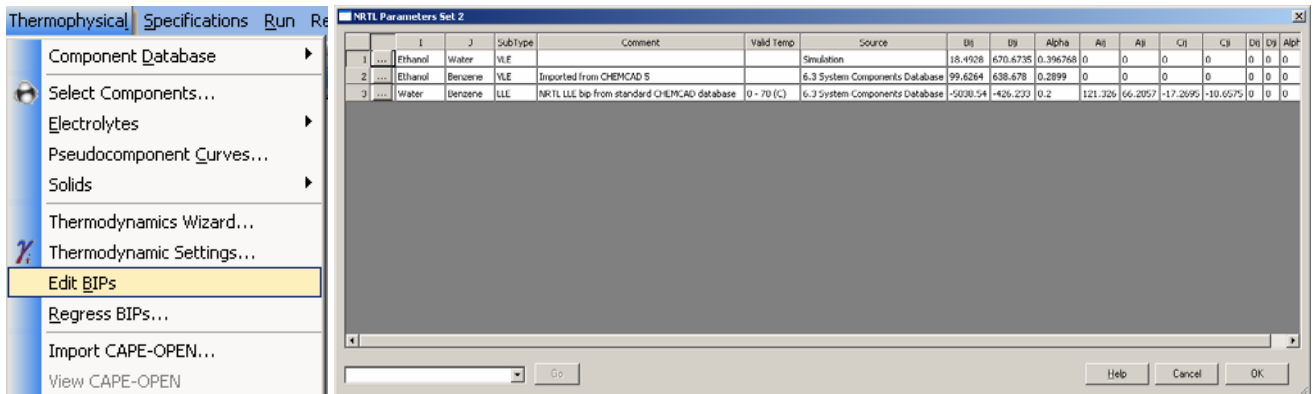
Hier sind die oben erhaltenen Daten aus der UNIFAC Regression in das zunächst leere Menü eingetragen. Eine automatische Übernahme ist z.Z. nicht möglich. Wählt man „Simulation“, erfolgt die Speicherung in den Job, ansonsten in eine Datenbank.



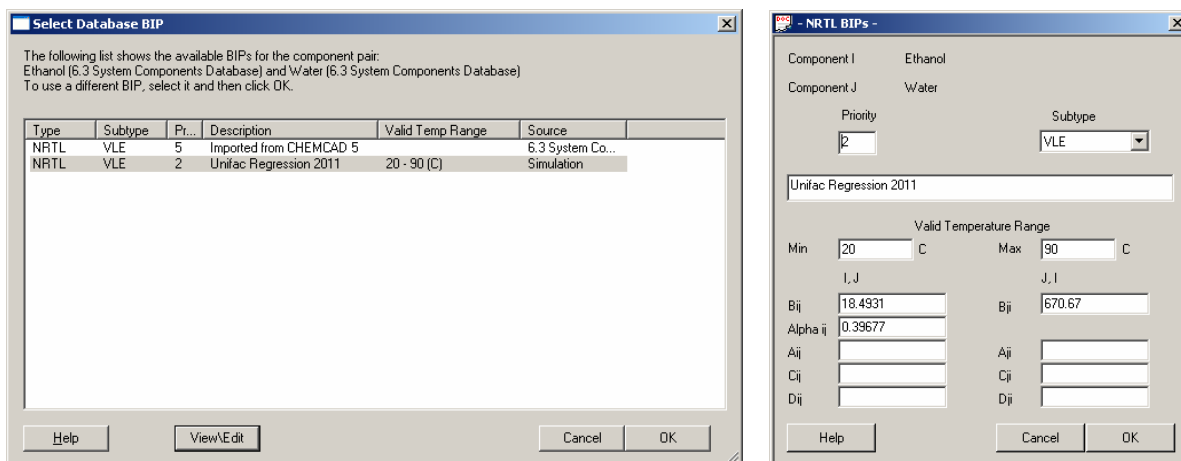
Speichern in „Simulation“:



Mit „Edit BIPs“

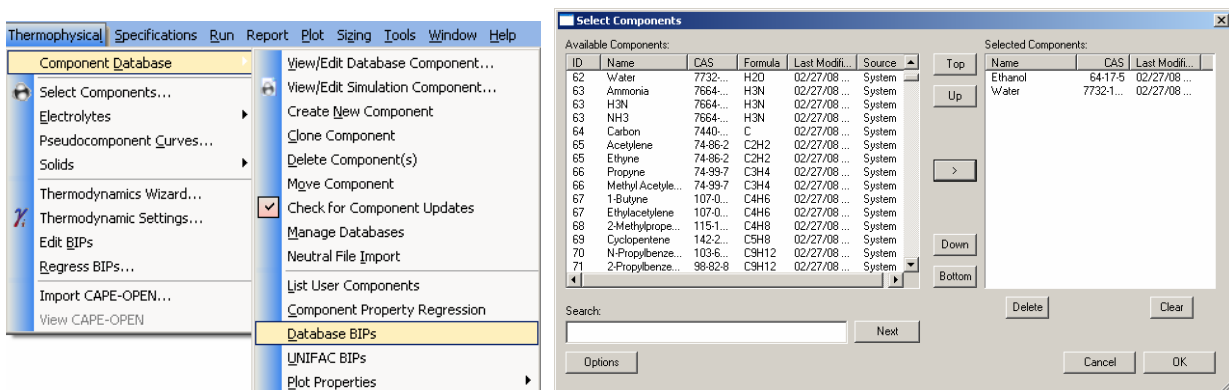


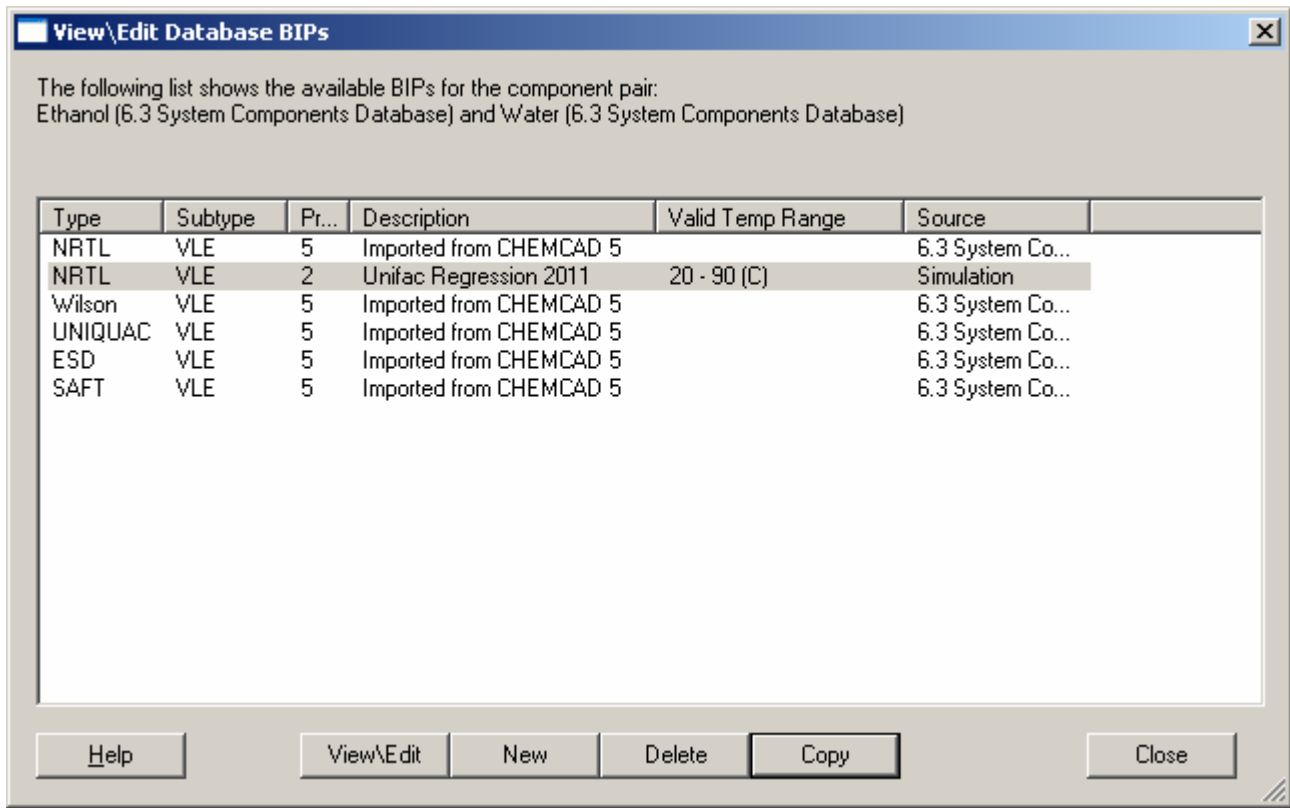
erhält man in BIP Set 2 die Ansicht „NRTL Parameters Set 2“, rechts. Klickt man nun in der 1. Zeile auf die 3 Punkte, erhält man die Ansicht:



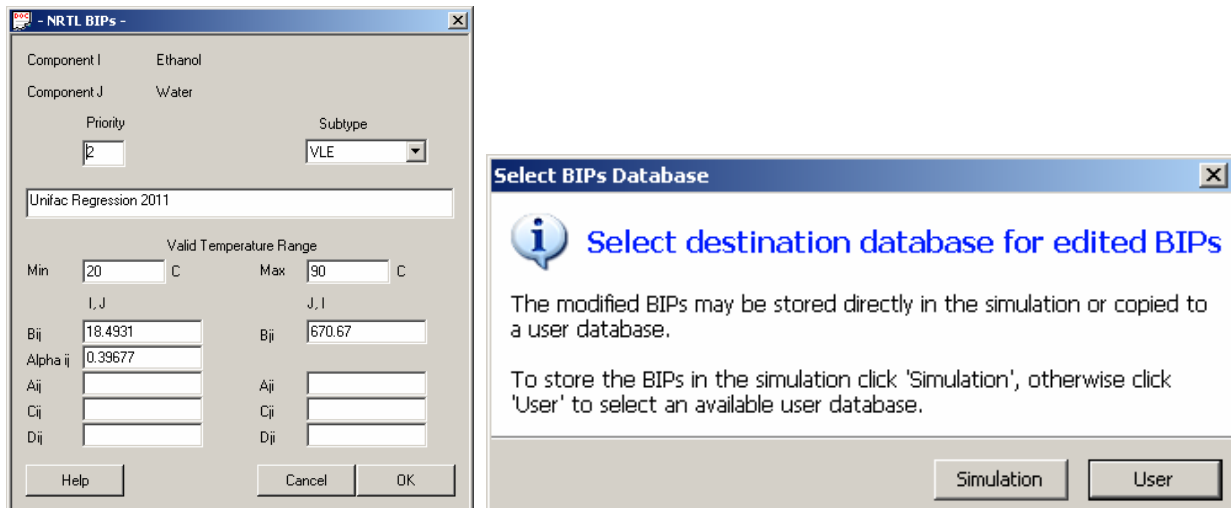
Nun sind 2 Datensätze zu erkennen. Klickt man in der Zeile Simulation auf „View/Edit“, erhält man die Original Daten wie in der Ansicht rechts zu sehen. Auf diesem Weg kann man für jeden BIP Set auswählen, welche BIPs einer der verfügbaren Datenbanken verwendet werden sollen.

Nun sollen diese Daten in eine Datenbank kopiert werden.

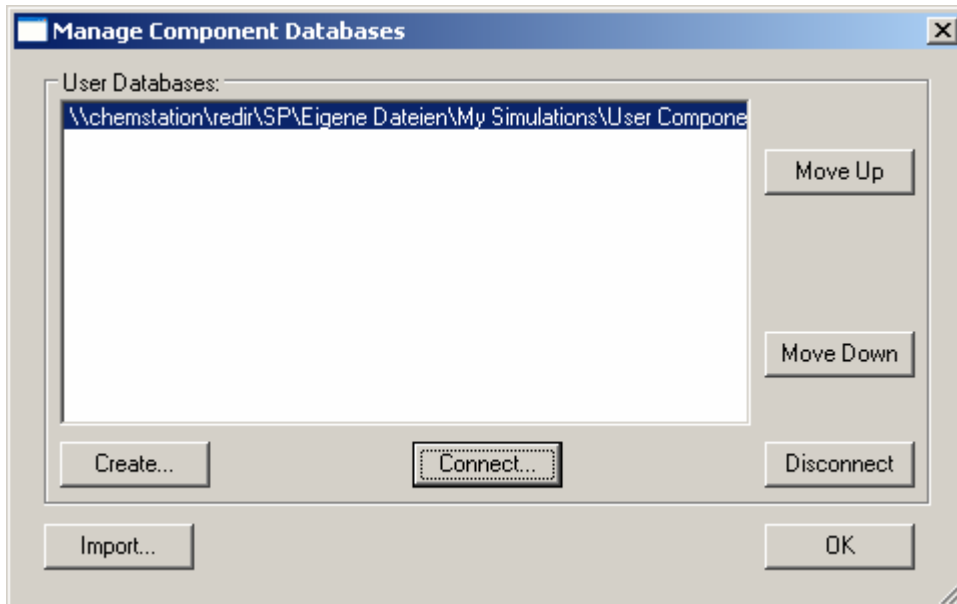




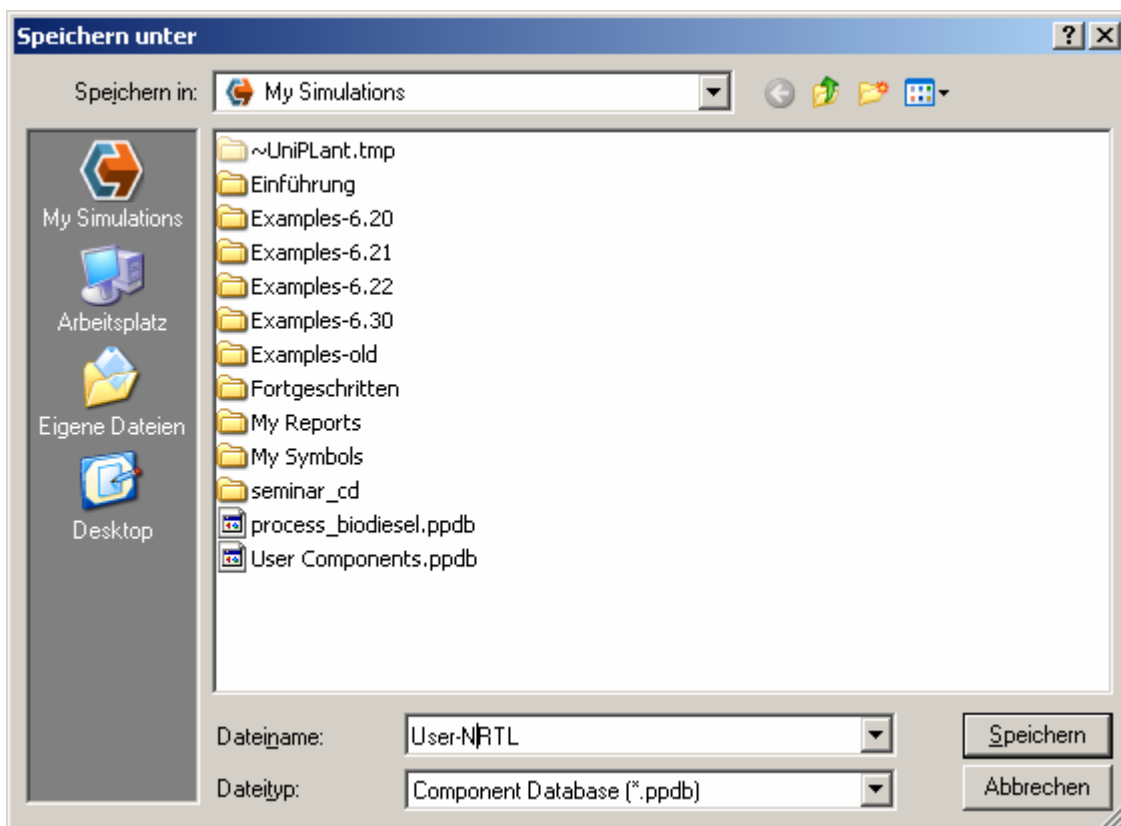
Wählt man die Zeile „Simulation“ und „Copy“ erscheint:



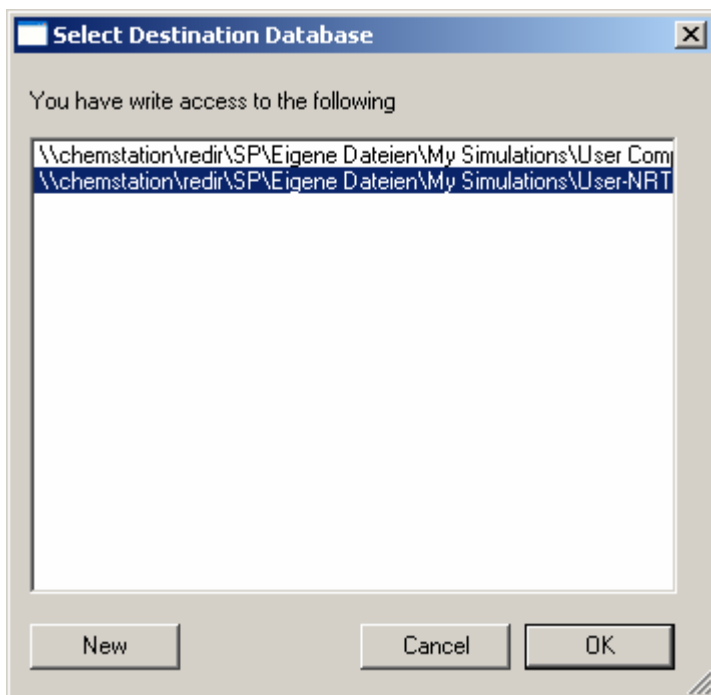
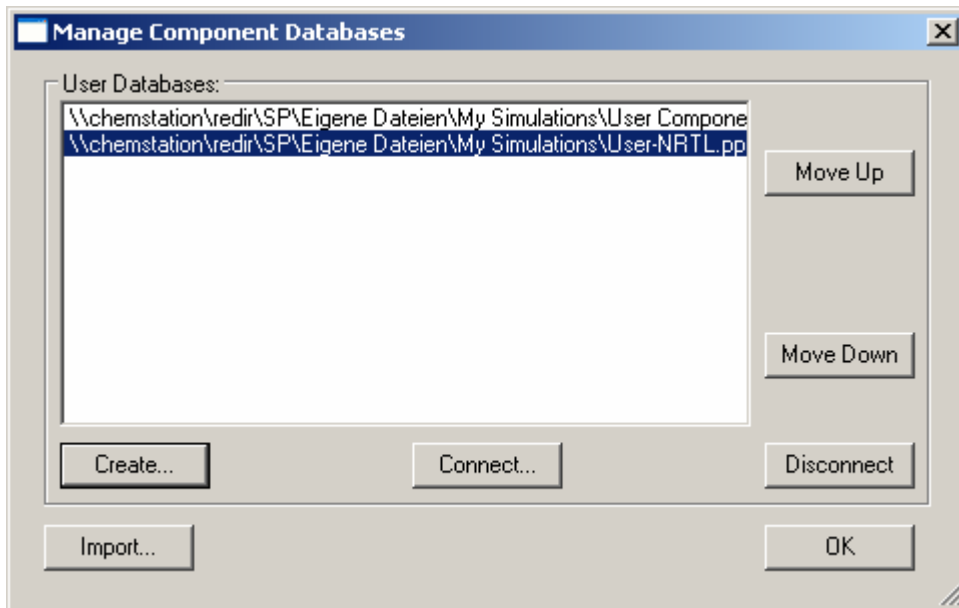
Hier wird „User“ gewählt:



Mit OK würden die Daten in die angezeigte Datenbank „User Components.ppdb“ gespeichert, es soll aber eine eigene Datenbank angelegt werden: Daher wird „Create“ gewählt:



Die neue Datenbank soll „User-NRTL“ heißen.



Die Regressionsdaten stehen nun sowohl unter „Simulation“ als auch unter „User-NRTL“ zur Verfügung. Würde man nun erneut „Edit BIPs“ wählen und mit Ethanol und Wasser auf die 3 Punkte in der 1. Zeile klicken, könnte man dies sehr gut nachvollziehen.

View/Edit Database BIPs

The following list shows the available BIPs for the component pair:
Ethanol (6.3 System Components Database) and Water (6.3 System Components Database)

Type	Subtype	Pr...	Description	Valid Temp Range	Source
NRTL	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
NRTL	VLE	2	Unifac Regression 2011	20 - 90 (C)	User-NRTL
NRTL	VLE	2	Unifac Regression 2011	20 - 90 (C)	Simulation
Wilson	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
UNIQUAC	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
ESD	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...
SAFT	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co...

Buttons: Help, View/Edit, New, Delete, Copy, Close

Autor. W. Schmidt

Chemstations Deutschland GmbH

Febr. 2011