

Excel-VBA in der Chemie und Verfahrenstechnik

Zusammenfassung

Zur Anwendung von Methoden in der Chemie und Verfahrenstechnik ist Excel-VBA hervorragend geeignet. Der Anwender lernt neben den Ableitungen von numerischen Methoden deren Umsetzung in Excel-VBA kennen und diese zur Lösung von Aufgabenstellungen anzuwenden.

1 Funktionen für Excel und VBA, eine Einführung

1.1 Erstellen einer VBA Funktion

Sie lernen die Benutzeroberfläche in VBA und die grundsätzlichen Schritte, um ein Makro (Programm) zu erstellen

1.2 Makros, aufnehmen und bearbeiten

Neben der oben beschriebenen Methode, ein Makro (Programm) zu erstellen, lassen sich Makros automatisch aufnehmen. Dadurch wird ein Arbeitsablauf direkt in die VBA Sprache generiert.

1.3 Daten in Tabellen und in VBA verbinden

Der große Vorteil der Programmierung in Excel-VBA liegt darin, dass VBA mit den Daten in einer Tabelle kommunizieren kann.

1.4 Programmablauf beobachten

Kaum ein Makro gelingt auf Anhieb fehlerfrei. Deshalb ist es vorteilhaft, das Makro Schritt für Schritt ausführen zu können.

1.5 Berechnungen in eigener Benutzeroberfläche ausführen

Mit einer sog. User Form läßt sich die Dateneingabe in Excel sehr elegant gestalten. In diesem Beispiel werden 10 J in kcal umgerechnet. Dabei kann die Maßeinheit sowohl für die Eingabe als auch für das Ergebnis gewählt werden.

The screenshot shows a VBA UserForm window titled "UserForm1" with the main heading "Energie umrechnen". It is divided into two main sections: "Eingabe" (Input) and "Ausgabe" (Output). In the "Eingabe" section, there is a text box containing the number "10" and a listbox with four options: "Btu", "kBtu", "MMBtu", and "J", where "J" is currently selected. In the "Ausgabe" section, there is a text box containing the result "0,002388458966" and a listbox with four options: "cal", "kcal", "Mcal", and "Ws", where "kcal" is currently selected. Below the form, a message reads: "Bei Änderungen der Eingabe Auswahl in der Listbox erneuern!".

User Form zur Umrechnen von Energieeinheiten

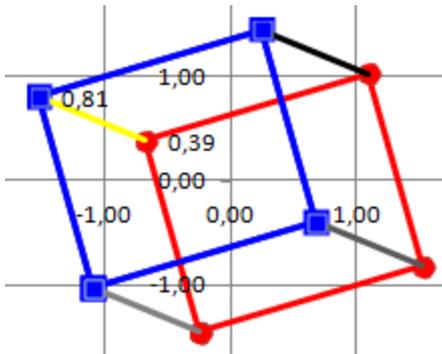
Gestartet wird diese User Form z.B. über ein Makro, welches in der oberen Menüleiste unter [Add-Ins](#) das



Menü anbietet. Damit wird außerdem gezeigt, wie man die Menüleiste in Excel erweitern kann.

1.7 Grafische Darstellungen in 3D

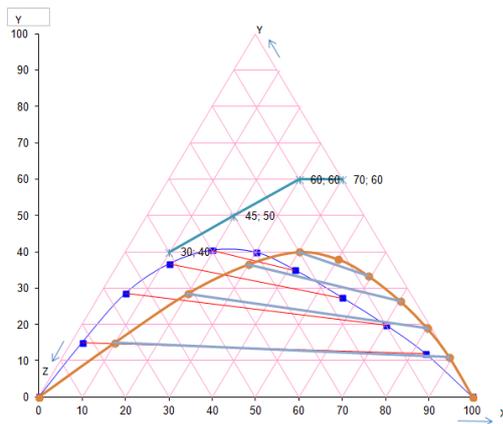
Am Beispiel eines Würfels werden die grundsätzlichen Elemente zur 3D Bewegung vorgestellt. Dabei erfolgt die Berechnung der Koordinaten und die Drehung mit Hilfe der Excel Matrixmethode, d.h. ohne VBA.



Würfel, der in 3D gedreht werden kann

1.8 Dreiecksdiagramme

Am Beispiele eines 3-Stoffgemisches wird gezeigt, wie ein Dreiecksdiagramm entsteht und wie Daten eingetragen werden.



Das Diagramm zeigt zwei Binodalkurven

Bei einem 3-Stoffgemisch gilt die Beziehung, dass die Summe der Konzentration = 1 sein muss. Daraus folgt, dass in einem gleichseitigen Dreieck die Horizontale x von links nach rechts zählt, während die y-Achse von rechts unten nach links oben und die z-Achse von oben nach links unten zählt. Dies ist durch die Pfeile verdeutlicht.

Das Excel Programm rechnet daher die in kartesischen Koordinaten eingegeben Daten in Dreieckskoordinaten um. Dies wird an mehreren Beispielen dargestellt.

1.9 Datenaustausch mit Dateien

Wenn der zu verwaltende Datenbereich zu groß ist, müssen Daten ausgelagert werden. Diese Datei wird per Knopfdruck gewählt und die Daten werden aus der Tabelle gelesen und in die Datei geschrieben. Umgekehrt geht's auch und das alles nur per Maus Bedienung. Am Beispiel von 4 Dateien werden Daten gelesen, in der Tabelle ausgetauscht sowie unmittelbar als Grafik angezeigt. Das VBA Programm bedient sich des Explorerfensters, um die Datendatei auswählen zu können. Alles anderes geht wie von Zauberhand, nur mit der Maus. Es ist kaum zu gkauben, welche Möglichkeiten VBA hier bietet.

2 Mathematische Methoden

2.1 Funktionen und ihre grafische Darstellung

Das wissen viele schon, wie macht man eine Grafik in Excel. Aber auch da gibt es Tipps und Tricks. Wenn nötig kann die komplette Grafik per VBA programmiert und erstellt werden.

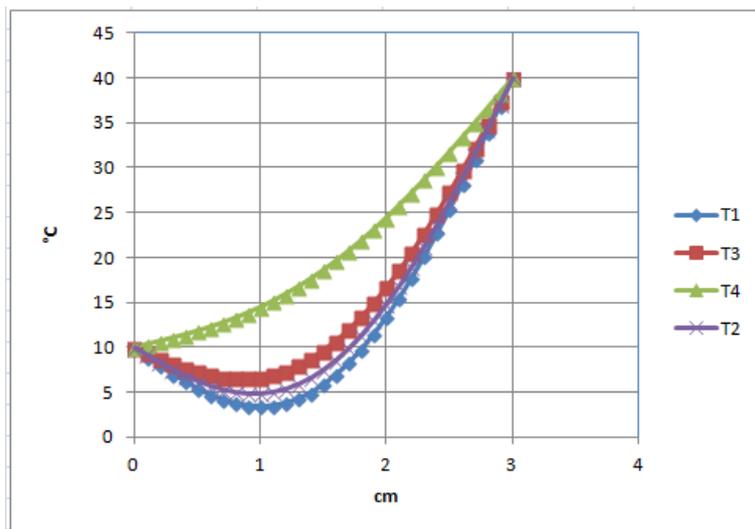
2.2 Berechnen von Reihen

Am Beispiel der instationären Wärmeleitung eines Stabes wird die Methode der Reihenbildung angewandt. Für die eindimensionale instationäre Wärmeleitung eines Stabes gilt das 2. Ficksche Gesetz

$$\frac{\partial T(t, l)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T(t, l)}{\partial l^2}$$

Die Lösung ist eine Fourierreihe der Form

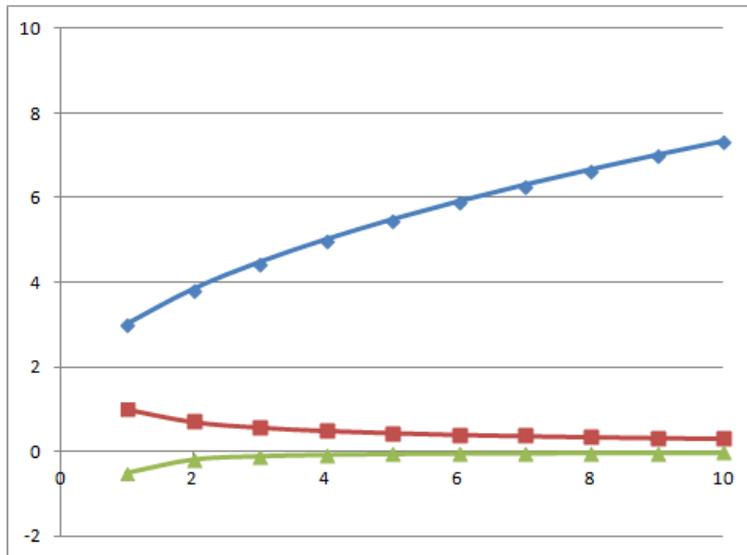
$$T = 10 + 10l + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{30}{n\pi} (\cos(n\pi) - 1) e^{-\frac{2n^2\pi^2}{3 \cdot 3k} t} \sin\left(\frac{n\pi l}{3}\right)$$



Temperaturverlauf entlang eines Stabes für 4 verschiedene Zeiten

2.3 Steigung und Minimum einer Funktion

Prinzipiell kann man von jeder Funktion eine Ableitung bilden und erhält eine neue Funktion. Bei komplexen Funktionen kann das aufwändig werden. Hier wird gezeigt, wie man mit numerischen Methoden die Werte der 1. und 2. Ableitung erhält.



Funktion sowie deren 1. und 2. Ableitung, numerisch berechnet

2.4 Nullstellensuche

Mit Hilfe der Nullstelle einer Funktion lässt sich der Wert einer Funktion an einer beliebigen Stelle auch dann finden, wenn die Funktion sich nicht nach der gesuchten Stelle auflösen lässt. Beispiel: Geg sei $y = f(x)$, gesucht wird $x = f(y)$. Der bekannte Algorithmus nach Newton wird in der modifizierten Form des Bisektion (Halbschritt) angewandt.

2.5 Lösen von kubischen Gleichungen durch die Cardanische Formel.

Kubische Gleichungen wie die van der Waals Gleichung lassen sich mit Hilfe Cardansichen Gleichung lösen.

2.6 Lösen von Gleichungssystemen, die Gauß-Jordan und die Matrix Methode

Die Gauß-Jordan Methode löst ein Gleichungssystem schrittweise nach einem vorgegeben Entscheidungsalgorithmus, während die Matrixmethode zwei Matrizen dividiert.

2.7 Numerische Integration einer Funktion nach Simpson

Für Funktionen, die nicht oder nur mit großem Aufwand integriert werden können, bietet die Simpson Methode einen stabilen numerischen Algorithmus, der schnell und genau ist.

2.8 Numerische Lösung von Differentialgleichungen, die Runge-Kutta-Methode

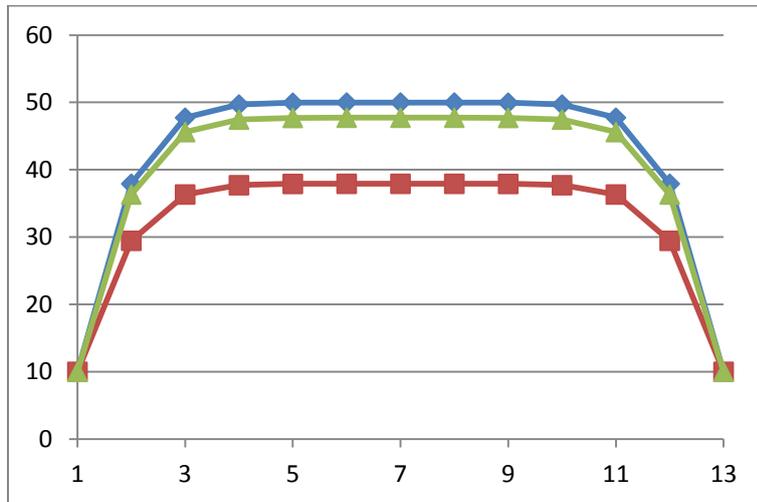
Die Prinzipien der numerischen Lösung einer Differentialgleichung werden abgeleitet und führen zur Euler Methode. Die genauere Runge Kutta Methode wird an einem einfachen Beispiel erklärt.

2.9 Partielle Differentialgleichungen, instationäre Wärmeleitung eine Quaders

Die Fourierrechnung

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$

beschreibt den instationären 3D Wärmeaustausch. Die numerische Lösung dieser partiellen Differentialgleichung ergibt die Temperaturen unter vorgegebenen Randbedingungen für jeden Punkt eines Quaders in Abhängigkeit von der Zeit.



Temperaturverlauf einer Schnittfläche z als Funktion der Strecke y für verschiedene Parameter ist x zu einer bestimmten Zeit

2.10 Lineare Regression

Für die Regressionsparameter a und b einer linearen Funktion

$$y = a + bx$$

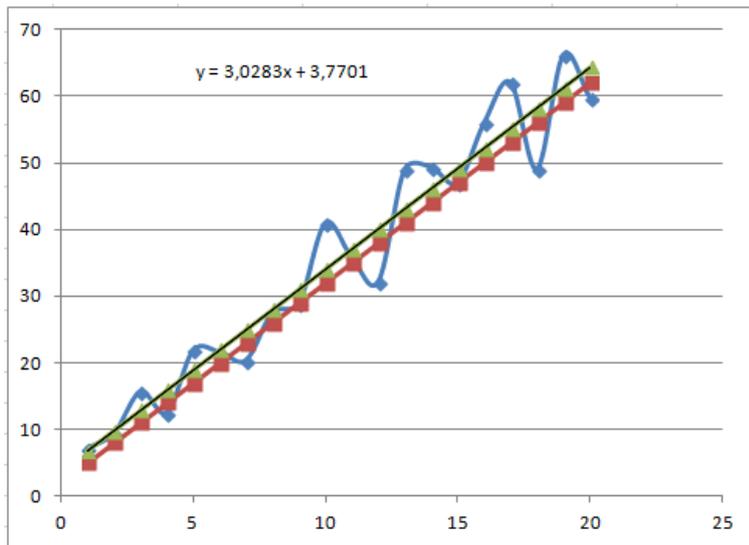
gilt für die Summe der Fehlerquadrate, also der Abweichung der Meßdaten von der linearen Näherung

$$S = \sum (y_{\text{exp}} - y_{\text{sim}})^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - (a + bx_i)]^2$$

und deren Minimum

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) = 0$$

Daraus lassen sich die Koeffizienten a und b gewinnen.



Daten und wie sie von Excel durch eine Wellenlinie angenähert werden und die sich daraus ergebende Gerade.

Eine davon wurde von Excel generiert, die andere aus der o.g. Funktion.

3 Anwendungen in Chemie und Verfahrenstechnik

3.1 Maßeinheiten und deren Umrechnung

Mit Hilfe der Menütechnik in Excel lassen sich einer Zahl Maßeinheiten zuordnen und daraus normierte Werte automatisch berechnen und weiter verwenden. In Excel wird dabei die neue Menütechnik „Daten, Datentools, Datenüberprüfung, Zulassen: Liste,“ an Zellen genutzt.

In diesem Beispiel wird die Reynoldszahl berechnet

	A	B	C	D	E	F
1	Masseinheiten umrechnen am Beispiel der Reynoldsgleichung					
2						
3	Variable	Wert	Maßeinheit	Umrechnun	Wert in SI	SI-Einheiten
4	Dichte	1000	kg/m³	1,00000	1000	kg/m³
5	Geschwindigkeit	10	m/s	1,00000	10	m/s
6	Durchmesser	100	mm	0,00100	0,1	m
7	Dyn. Viskosität	1	Pa.s	1,00000	1	kg/m.s
8	Reynold	1000				
9						
10						
11						
12						

In dieser Tabelle wird die Viskosität in Pa.s gewählt. Diese Menütechnik benötigt kein VBA. In E4:E7 befinden sich die in SI-Grundeinheiten umgerechneten Eingangsdaten.

3.2 Massenbilanz eines Gemisches

Ein Gemisch wird aus mehreren Stoffen gebildet. Excel berechnet ohne VBA das Ergebnis.

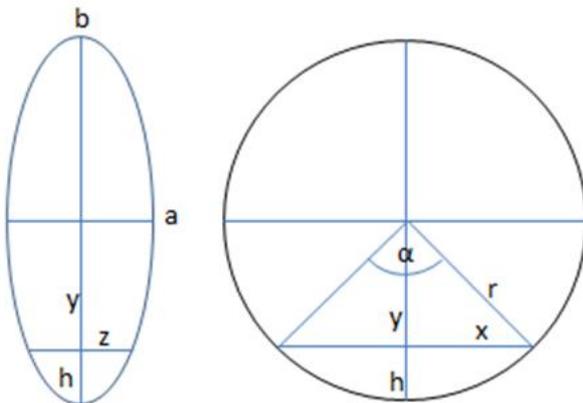
3.3 Molgewicht eines Moleküls aus der Summenformel

Eine Formel wird Buchstabe für Buchstabe analysiert und daraus das Molgewicht berechnet.

3.4 Füllstandsberechnung von Behältern

Für Kugelbehälter sowie horizontale und vertikale Behälter mit elliptischen Böden ergibt sich die Beziehungen des Volumens und der Füllhöhe aus geometrischen Ableitungen. Während die Füllhöhe in einem Zylinder einfach zu berechnen ist, ist dies bei den Böden nicht so. Für den horizontalen Behälter ergibt sich z.B. das Volumen der beiden elliptischen Bodenhälften zu

$$dV = \pi a \left(\int_{r-h}^r r dy - \frac{1}{r} \int_{r-h}^r y^2 dy \right)$$



Betrachtung des horizontalen elliptischen Bodens seitlich und in Draufsicht.

Das Ergebnis der Integration lautet

$$V = \frac{a\pi}{r} \left[hr^2 - \frac{1}{3}(r^3 - (r-h)^3) \right]$$

Auf ähnliche Weise ergeben sich die Füllvolumen des vertikalen Behälters und des Kugelbehälters.

3.5 Reale Gasgleichung nach van der Waals und Soave-Redlich-Kwong

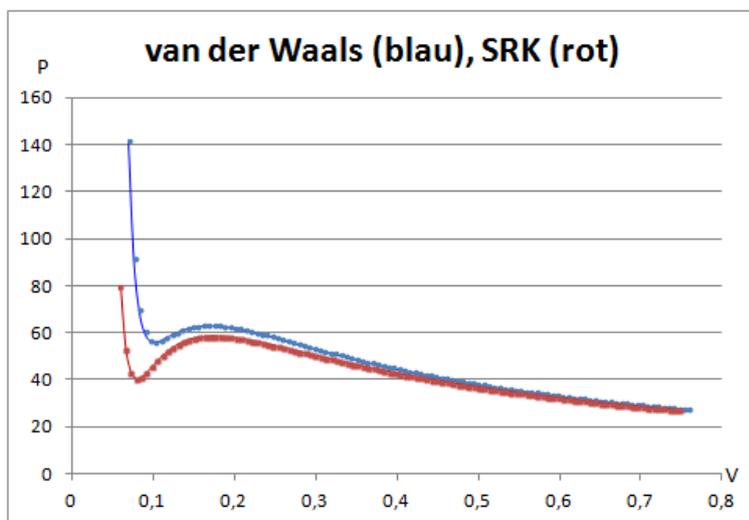
Die van der Waals Gleichung lautet

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

Die SRK-Gleichung lautet

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha(T)}{V(V+b)}$$

Daraus werden u.a. die Kompressibilitätsfaktoren z sowie das Realvolumen V_r mit Hilfe der Cardanischen Formel berechnet.



Isotherme P als Funktion von V für van der Waals und SRK

Das VBA Programm bietet eine umfangreiche Berechnung u.a. des Kompressibilitätsfaktors z , des Drucks, des Volumens sowie weiterer Daten.

3.6 Kompression und Expansion eines Gases

Die thermodynamischen Parameter sowie die Kompressionsleistung einer isentropen Gaskompression eines idealen Gases werden berechnet.

	A	B	C	D	E
1	Kompressions und Expansionsvorgänge				
2		Eingabe		Ausgabe	
3	Variable	Eingang (1)	Ausgang (2)	Eingang (1)	Ausgang (2)
4	Druck P [bar]	1,01325	4,00	1,01	4,00
5	Temperatur T [°C]	20,00	0,00	20,00	160,83
6	Volumen V [m ³]	1000	0,00	1000,00	375,01
7	Arbeit W [J]			0,00	1,2170E+08
8	kappa	1,4			
9	n (Mole)				41570,92427
10					
11				W=	1,2163E+08

Die Tabelle zeigt die Berechnung der Kompressorleistung und der thermodynamischen Daten

3.7 Kompression realer Gase

Zur Kompression eines realen, d.h. nicht idealen Gases wird ein Ansatz entwickelt.

3.7.1 Die barometrische Höhenformel der Atmosphäre

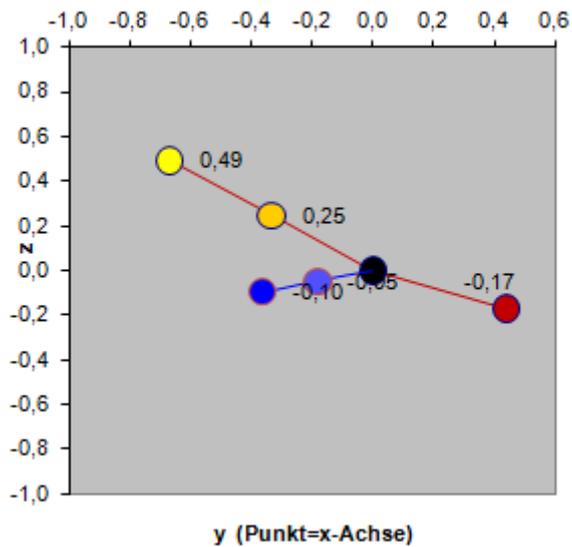
Die Abhängigkeit des Luftdrucks und der Temperatur der Atmosphäre von der Höhe wird abgeleitet. Bekannt ist die Ableitung der isothermen Höhenformel. Diese gibt aber nur die Druckabhängigkeit und nicht die Temperaturabhängigkeit wieder. Daher wird mit Hilfe des adiabatischen Ansatzes die Temperaturabhängigkeit vom Druck durch Expansion betrachtet.

3.8 Molekularpotentiale nach Coulomb

Auf der Basis des Coulombschen Gesetzes

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

werden aus dem Abstand der Elektronen- und Protonenladungen in sich gegenüberstehenden Molekülen werden die Kräfte zweier Moleküle abgeleitet und berechnet



Maßstabsgerechte 3D-Darstellung eines Wassermoleküls bestehend aus einem Sauerstoff und zwei Wasserstoffatomen, sowie deren Kernladungen und Ladungen der Elektronen.

Das Molekül kann in 3D gedreht werden. Der Abstand zweier Moleküle ist frei wählbar.

Aus den unterschiedlichsten Positionen beider Moleküle zueinander ergibt sich die mathematische Gleichung

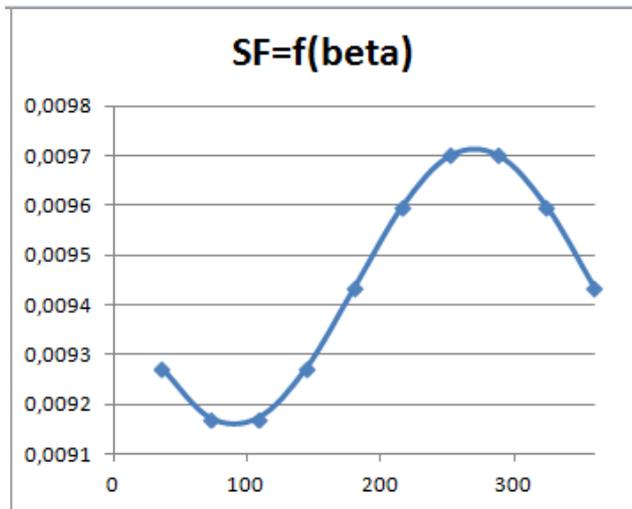
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Darin sind x' , y' und z' die transformierten Koordinaten. Diese Koordinaten gehen in die Coulomb Gleichung ein. Insgesamt werden alle daraus berechneten Kräfte vektoriell addiert. Daraus lassen sich die zwischenmolekularen Kräfte in Abhängig aller räumlichen Parameter ermitteln.

Diese Methode ist einzigartig und viel genauer als die bisher verwendeten Methoden nach Lennard Jones usw.

Es ist geplant, dieses Modell zur Berechnung thermodynamischer Daten zu verwenden, indem das Modell auf eine größere Zahl von Molekülen erweitert wird. So könnte man u.a. ermitteln wie sich Wassermoleküle anordnen, so dass ein Energieminimum entsteht. Daraus ließe sich die Dichte berechnen.

Auch ließen sich daraus die Dichte bzw. die Aktivitätskoeffizienten von Gemischen berechnen.



Kraft zwischen zwei Wassermolekülen als Funktion der gegenseitigen Winkelstellung

3.9 Konzentrationsberechnung von Gemischen

Stellt man ein Gemisch mit definierter Zusammensetzung aus Reinstoffen zusammen, ist dies kein Problem. Hat man aber statt Reinstoffe verschiedene Mischungen, stellt sich die Aufgabe als erheblich schwieriger dar.

An einem Beispiel soll das Thema erläutert werden. Gegeben sind zwei Lösungen. Die Lösung 1 enthalte 5% Salz in Wasser, Lösung 2 enthalte 10% Salz in Wasser. Wir mischen $m_{L_1} = 600$ g der Lösung 1 mit $m_{L_2} = 400$ g der Lösung 2 und erhalten als Ergebnis 1000 g einer 7%igen Salzlösung.

Die Aufgabenstellung lautet jetzt umgekehrt, 1000 g einer Lösung mit 7% Salz sind herzustellen. Es stehen die o.g. Gemische aus 5% und 10% zur Verfügung. Die Frage lautet nun, wie viel m_{L_1} und wie viel m_{L_2} benötigen wir dazu. Die Bilanzgleichung liefert ein Gleichungssystem mit zwei Gleichungen und zwei Unbekannten.

$$0,05 * m_{L_1} + 0,1 * m_{L_2} = 70 \text{ [g]} \quad (\text{Salzbilanz})$$

$$0,95 * m_{L_1} + 0,9 * m_{L_2} = 930 \text{ [g]} \quad (\text{Wasserbilanz})$$

Wir erstellen daraus nach den Matrixregeln eine Matrixgleichung.

$$\begin{pmatrix} 0,05 & 0,1 \\ 0,95 & 0,9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{L_1} \\ m_{L_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 70 \\ 930 \end{pmatrix}$$

Excel liefert das Ergebnis lautet: $m_{L_1} = 600$ und $m_{L_2} = 400$ g.

In diesem Fall wird die Matrix nicht in Excel, sondern in VBA gelöst. Dadurch wird es möglich, verschiedene Matrixberechnungen mit verschiedenen Graden zu wählen, ohne dass die Matrix neu konfiguriert werden muss.

Mischen3					
Lösung	L1	L2	L3	mi [kg]	xGemisch
mi [kg]	20,00	110,00	90,00	220,00	220,00
x1,i	0,10	0,30	0,60	89,00	0,4045
x2,i	0,30	0,40	0,30	77,00	0,3500
x3,i	0,60	0,30	0,10	54,00	0,2455
				220,00	1,00

Berechnung eines Gemisches aus 3 definierten Mischungen.

3.10.1 Chemisches Gleichgewicht nach van't Hoff

Für eine chemische Reaktion des Typs $A + B = C + D$ errechnet sich die Gleichgewichtszusammensetzung nach dem van't Hoff'schen Gesetz wie folgt

$$\frac{(x_{3,0} + x)(x_{4,0} + x)}{(x_{1,0} - x)(x_{2,0} - x)} = K$$

Die temperaturabhängige Gleichgewichtskonstante K sei gegeben. Die o.g. Gleichung muss nach x aufgelöst werden. Dies ergibt in diesem Fall eine quadratische Gleichung, die bekanntlich wie folgt gelöst wird

$$x_{1,2} = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b}$$

Die Koeffizienten a und b lassen sich ableiten

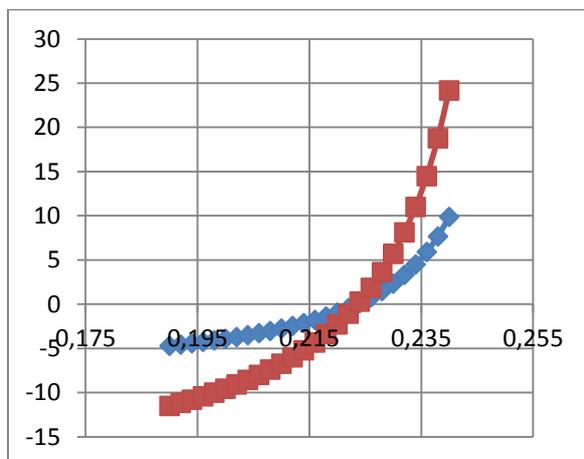
$$a = \frac{(x_{3,0} + x_{4,0} + K(x_{1,0} + x_{2,0}))}{1 - K}$$

$$b = \frac{(x_{3,0} * x_{4,0} - K(x_{1,0} * x_{2,0}))}{1 - K}$$

Komplexe Reaktionen ergeben Gleichungen höheren Grades und sind nur iterativ zu lösen, indem das nicht-lineare Gleichungssystem linearisiert wird und die Nullstelle iterativ ermittelt wird.

$$\begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{df_1}{dx_1} & \frac{df_1}{dx_2} \\ \frac{df_2}{dx_1} & \frac{df_2}{dx_2} \end{pmatrix}^{-1}$$

Dazu ist ein VBA Programm erstellt, welches zur Lösung führt. Wir lernen dabei die Problematik der Nullstellensuche kennen.



Iterationsverlauf zum Auffinden der Nullstelle an.

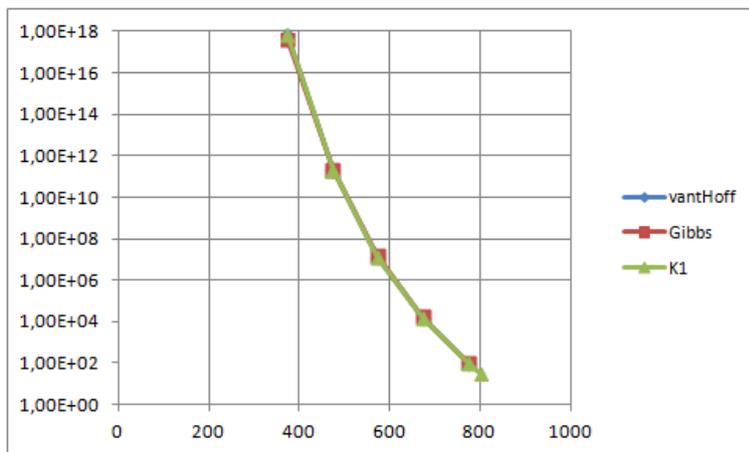
3.10.3 Reaktion nach Gibbs

Aus den Gibbschen Daten lassen sich die Parameter zur Berechnung der Gleichgewichtskonstante K berechnen. Es gilt die Gleichung

$$G = H - TS$$

Darin ist G die Gibbsche Energie, H die Enthalpie und S die Entropie

$$\ln K = \frac{\Delta G}{RT}$$



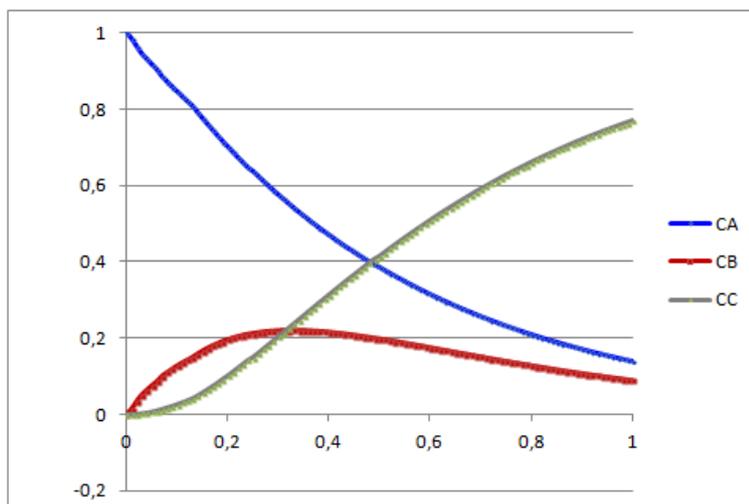
Verlauf der Gleichgewichtskonstante K als Funktion der Temperatur an

3.11 Chemische kinetische Reaktion nach Arrhenius

Auf der Basis des Ansatzes

$$dC_A = -k_A C_A dt + k_B C_B dt$$

erhält man eine Differentialgleichung, die sich in einfachen Fällen analytisch, in komplexen Fällen jedoch nur numerisch, z.B. nach Runge-Kutta lösen lässt.



Reaktionsverlauf als Konzentration der Reaktionsstoffe als Funktion der Zeit nach Runge-Kutta

3.13 Verbrennungsrechnung

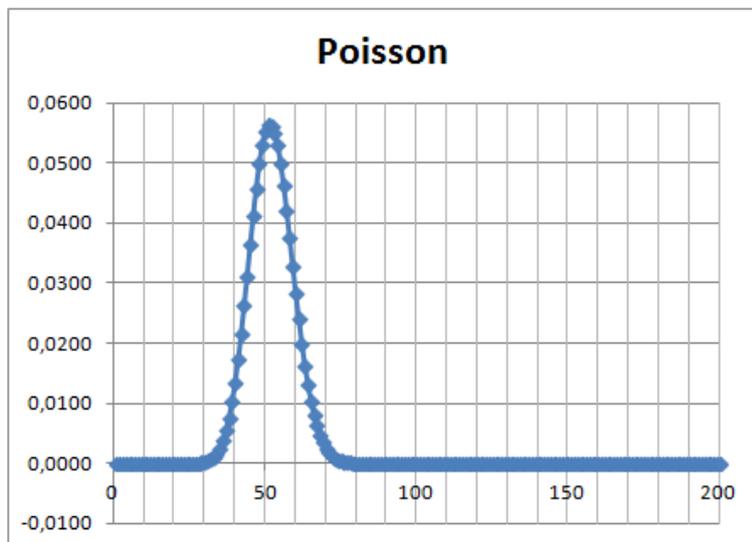
Eine Verbrennungsreaktion selbst ist denkbar einfach. In Excel wird mit VBA der Luftbedarf und die Rauchgaszusammensetzung berechnet.

	A	B	C	D	E	F
1	Verbrennungsberechnung					
2	Eingabe Brennstoff				Ergebnisse Luft	
3	Auswahl	Formel	OK			
4	Elemente	<input checked="" type="radio"/> Formel	<input type="radio"/> Gew. %	kg	O2-Bedarf [kg]	373,33
5	C	2	80	80,00	Luftbedarf [kg]	1777,78
6	H	6	20	20,00		
7	S			0,00		
8	N			0,00		
9	O			0,00		
10	Menge [kg]	100	100	100,00		
11	Bildungsenthalpie [kJ/kg]	-2788,49				
12		Rechnen				

Ausschnitt aus der entsprechenden Exceltabelle

3.14 Polymerisation

Für die näherungsweise Beschreibung einer Polymerisationsreaktion werden verschiedene Modelle dargestellt.



Das Bild zeigt die Polymerisationsverteilung nach Poisson

3.15 Elektrochemische Reaktion, Brennstoffzelle

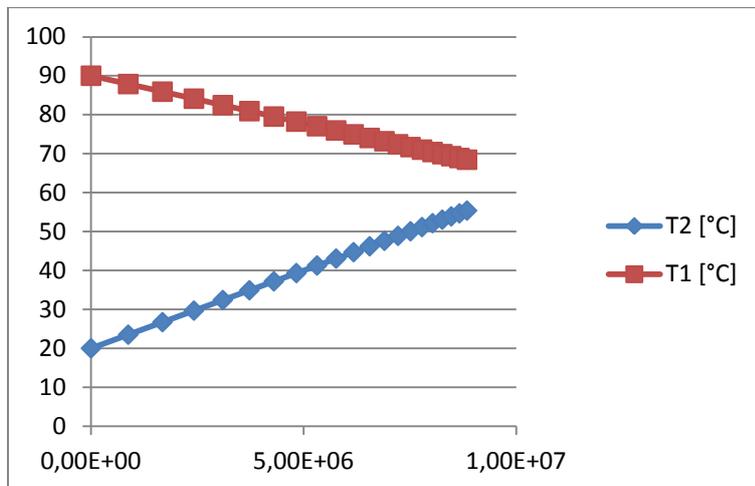
Die Brennstoffzelle arbeitet standardmäßig mit Wasserstoff und Sauerstoff. Alle wesentlichen Eigenschaften werden abgeleitet berechnet.

		Ausgabe:	
Pa	50000,00 W	Ia	500,00 A
Ua	100,00 V	Ra	0,20 Ω
Ri	0,01 Ω	Rges	0,21 Ω
Zellenspann	1,24 V	Ui	5,00 V
		Pi	2500,00 W
		U0	105,00 V
		P0	52500,00 W
		Zellen	84,6774194 85
		H2	4,3886E-01 mol/s
		O2	2,1943E-01 mol/s
		H2	3,1598E+00 kg/h
		O2	2,5278E+01 kg/h

Ein- und Ausgabedaten der Brennstoffzellenberechnung

3.16 Wärmeaustausch

Es werden die Bilanzgleichungen des Gleich- und Gegenstroms numerisch berechnet.

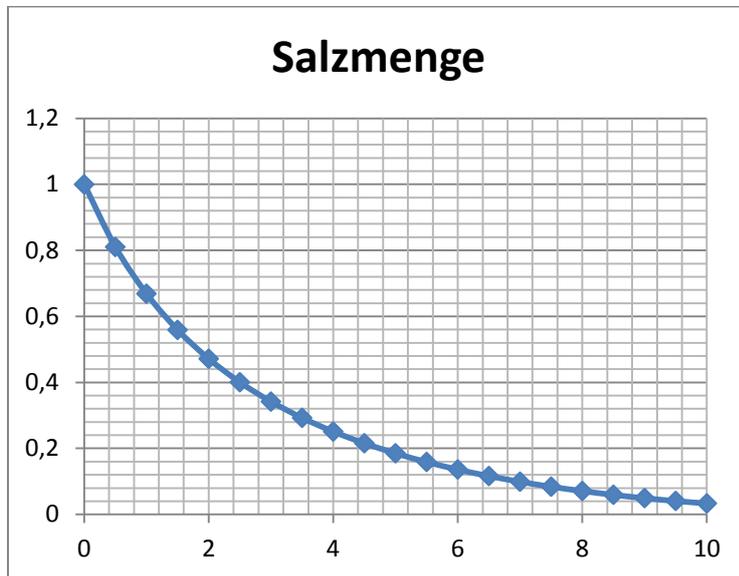


Temperaturverlauf als Funktion der Fläche eines Gleichstromwärmeaustauschers.

Über die Bedienungsfläche kann auf Gegenstrom umgeschaltet werden. Dazu dient ein spezielles VBA Programm. Dabei wird die infinitesimale Temperaturdifferenz iterativ berechnet, ohne die mittlere logarithmische Temperaturdifferenz zu verwenden. Dadurch lassen sich auch Temperaturverhältnisse berechnen, für die mittlere logarithmische Temperaturdifferenz nicht gilt.

3.17 Stoffaustausch

Am Beispiel eines Würfels wird der Stoffaustausch zur Auflösung in einer Flüssigkeit simuliert.



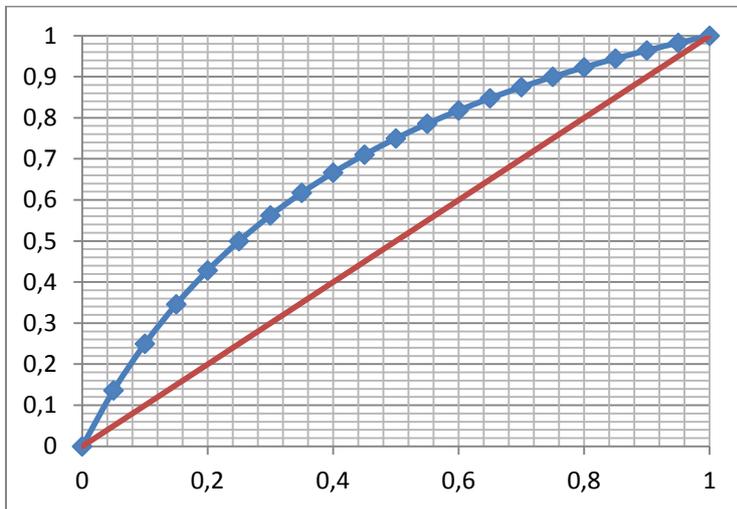
Das Bild zeigt den Verlauf der Salzmenge als Funktion der Zeit

Ein Würfel wird in eine Flüssigkeit getaucht. Es wird davon ausgegangen, dass unmittelbar auf der Oberfläche des Würfels die Sättigungskonzentration herrscht. Durch Diffusion gelangt ein kleiner Teil davon in Lösung und erhöht damit die Konzentration des Salzes in Wasser. Damit nimmt der Konzentrationsunterschied ab, gleichzeitig wird der Würfel kleiner und damit die Stoffaustauschfläche.

In diesem Beispiel wurde die Berechnung nach dem Euler Prinzip durchgeführt, d.h. in linearen kleinen Schritten. Bei komplexen Zusammenhängen ist die Runge-Kutta Methode vorzuziehen.

3.18 Dampf-Flüssiggleichgewicht, McCabe-Thiele- Diagramm

Es wird einerseits ein Flash für 10 Inhaltsstoffe und andererseits ein binäres McCabeThiele Diagramm berechnet.



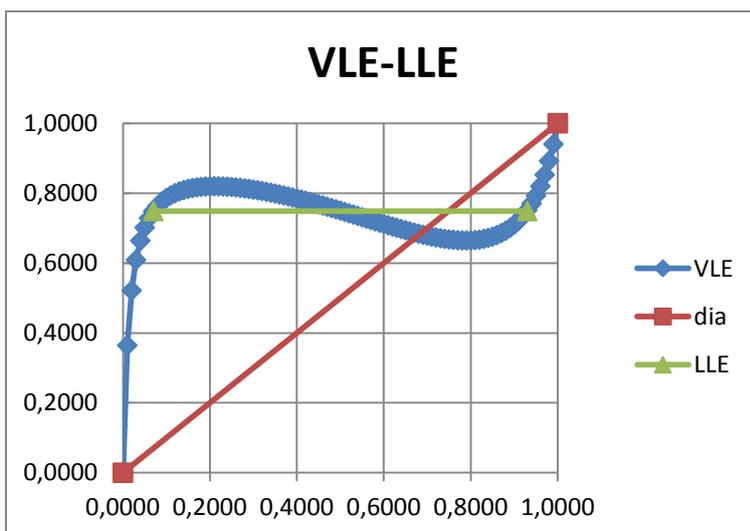
Dampf-Flüssig-Gleichgewicht eines idealen binären Gemisches.

3.19 Flüssig-Flüssiggleichgewicht

Zur Berechnung dieses Gleichgewichts ist die Einbeziehung der Aktivitätskoeffizienten notwendig. Dies geschieht auf Basis der einfachen Porter-Gleichung,

$$\ln \gamma_1 = Ax_2^2$$

die vollständig thermodynamisch abgeleitet wird.



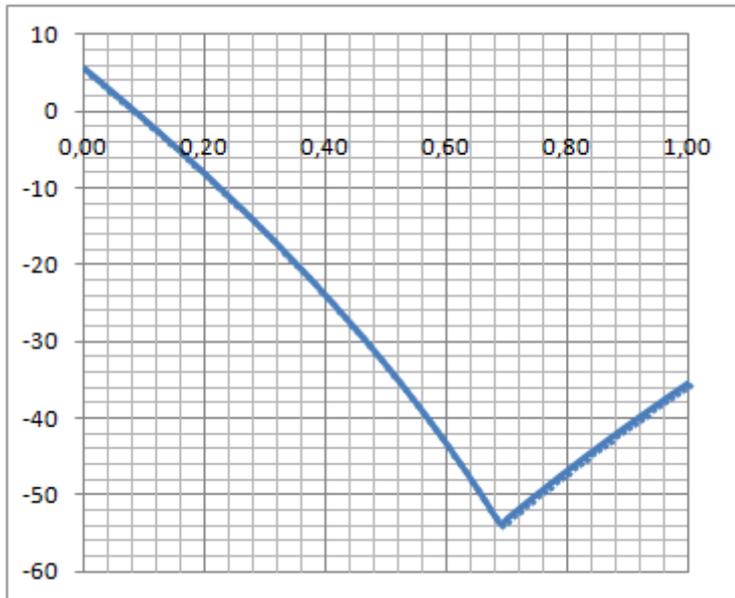
xy-Gleichgewicht eines heterogenen binären Gemisches. Die Horizontale kennzeichnet die Mischungslücke.

3.20 Fest-Flüssiggleichgewicht

Dieses Gleichgewicht wird nach der Gleichung berechnet

$$\ln x_i \gamma_i = -\frac{\Delta h_{m,i}}{RT} \left(1 - \frac{T}{T_{m,i}} \right)$$

Daraus ergeben sich je nach Daten auch Eutektika.

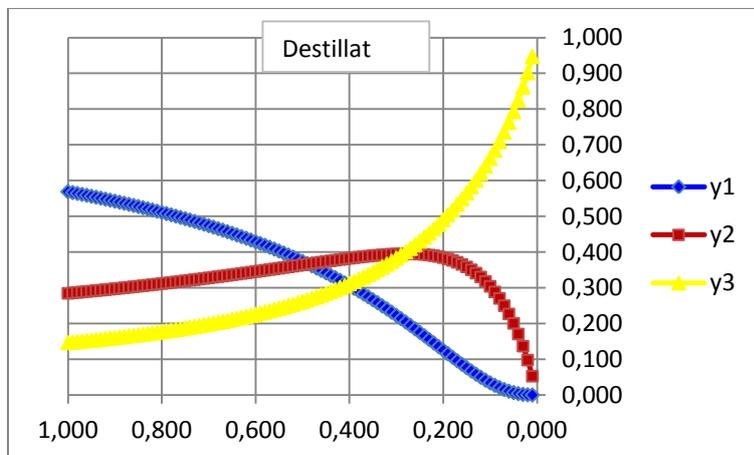


Das Diagramm zeigt das Eutektikum des Systems 1,2-Dichlorethan - Benzol

3.21 Batchdestillation nach Rayleigh und Schlünder

Die Batchdestillation ist eine diskontinuierliche Verdampfung eines Flüssiggemisches ohne Trennstufen, auch offene Destillation genannt. Die Ableitung ist nach Rayleigh bekannt.

$$\frac{dB}{B} = \frac{dx}{y-x}$$



Destillatkonzentration der Batchdestillation eines Dreistoffgemisches

Diese Berechnung der Batchdestillation lässt sich auf beliebige viele Inhaltsstoffe anwenden. Mit der Einführung der Fenske Gleichung kann man das Gemisch bei minimaler Stufenzahl, d.h. unendlichem Rückflussverhältnis nährungsweise trennen. Die Underwoodfunktion würde das minimale Rückflussverhältnis bei unendlicher Stufenzahl ergeben.

Die Erweiterung auf nicht-ideale Gemische ist mit der Rayleigh-Gleichung nicht möglich. Stattdessen wäre eine numerische Integration erforderlich.

4. CHEMCAD

Die Anwendungen von Excel in CHEMCAD sind vielfältig. Hier sollen lediglich die Excel-VBA Anwendungen besprochen werden

4.1 Excel Unit

Eine Excel-Unit ist eine Unit Operation ähnlich den bereits vorhandenen Unit Operations, mit mindestens 1 Inlet Strom und mindestens 1 Outlet Strom und Daten des Inlet Stroms aus einem CHEMCAD Flowsheet erhält, damit eine Berechnung durchführt und die Ergebnisse in den Outlet Strom und damit ins Flowsheet zurückgibt.

Ursprünglich, d.h. in CC5 wurde die Excel Unit nur in VBA ausgeführt. Das ist zwar auch in CC6 noch so, jedoch kann man VBA in der Excel-Unit abschalten und allein mit Mapping arbeiten. Mapping übernimmt dann den Datentransfer aus dem CHEMCAD Flowsheet. Die Berechnungen werden dann ausschließlich in der Exceltabelle der Excel Unit ausgeführt. Das Mapping selbst wird im Job definiert.

In der Excel Unit existiert bereits ein umfangreiches VBA Grundprogramm. Dieses liest Strom und Equipmentdaten. Lediglich der Berechnungsteil muss selbst ausgeführt werden. Dieser VBA Teil wird ausführlich an Beispielen besprochen.

4.2 VBA Unit

Die VBA Unit kann im Gegensatz zur Excel Unit nicht mit Mapping kombiniert werden. Der VBA Teil wird per Menü aus einer VBA Bibliothek hinzugefügt. Dieses VBA arbeitet deutlich schneller als das VBA in der Excel-Unit. Dies wird ausführlich an Beispielen besprochen.

4.3 VB-VClient

VBClient dient dazu, einen Job „außerhalb“ von CHEMCAD zu bedienen und auszuführen. VBClient.xls befindet sich im CHEMCAD Ordner und kann ohne weiteres getestet werden, nachdem der Schreibschutz abgeschaltet wird.

Es gibt einige Varianten des VBClient, von Anwendern entwickelt. Auch eine Kombination mit dem Excel-CHEMCAD Excel Menü ist bekannt.

Die Möglichkeiten sind vielseitig. Ohne CHEMCAD zu starten, lässt sich jeder CHEMCAD Job anwenden und steuern, z.B. Datenauswertungen, Grafik, Sensitivity Studien oder Kombinationen mit anderen Jobs. Letzteres ermöglicht die komfortable Simulation von Großanlagen inForm ihrer Teilanlagen.

Dies wird ausführlich an Beispielen besprochen.

4.4 Online Simulation

Mit einem permanenten Datentransfer zwischen Anlage einerseits und einer Exceltabelle andererseits lässt sich eine Online Simulation mit einem CHEMCAD Job einrichten, indem der Job zeitlich aktiviert wird und auf die Exceltabelle zugreift, ohne diese zu verändern. Damit wird die Anlage zeitnah automatisch mit deren Daten simuliert und die Ergebnisse zur Verfügung gestellt. Daraus lassen sich Maßnahmen zur Anlagensteuerung

ableiten. Diese stehen schneller zur Verfügung als dies auf Basis der herkömmlichen Mess- und Regeltechnik möglich ist. Natürlich lassen sich auch zeitlich langsame Vorgänge sicher beobachten, z.B. den Wirkungsgrad einer Kolonne oder den eines Wärmeaustauschers.

Natürlich steht keine Originalanlage zur Verfügung. Mit der Kombination eines „Anlagenjobs“ lässt sich dieses Thema jedoch realitätsnah besprechen.

5 Sonstiges

5.1 Das Biot-Savart-Gesetz, Magnetfeld einer Spule

Das Biot Savart Gesetz

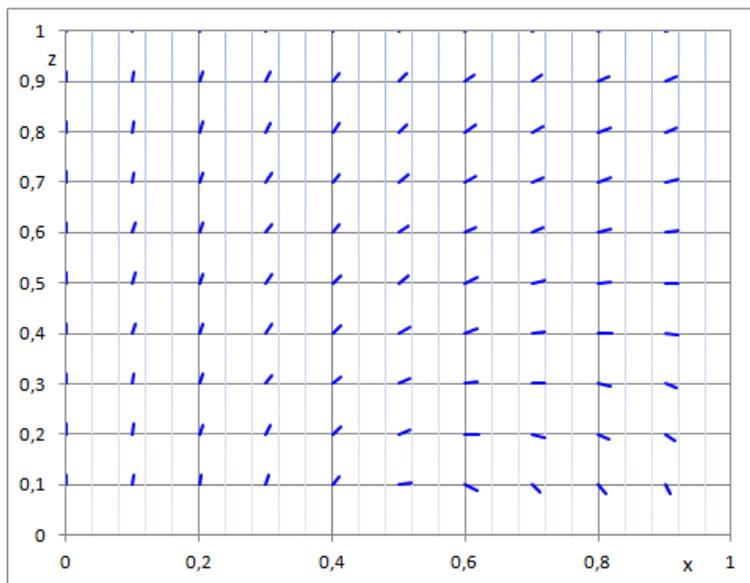
$$d\vec{B} = \frac{I\mu_0}{4\pi} \frac{d\vec{s} \times \vec{r}}{r^3}$$

beschreibt den Magnetfeldvektor eines Leiterstücks. Für eine Leiterschleife ergibt sich das Integral

$$\vec{H} = \frac{IR}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\begin{pmatrix} z \cos \phi \\ z \sin \phi \\ R - x \cos \phi \end{pmatrix}}{\left(\sqrt{x^2 + z^2 + R^2 - 2Rx \cos \phi}\right)^3} d\phi$$

Diese Gleichung wird mit der Simpson Methode numerisch integriert.

Die Spule befindet sich bei $z = 0$ auf der xy – Ebene.



Das Bild zeigt die Magnetfeldvektoren als Funktion der x und z Achse, Spulenzradius = 0,5 m.

Bei $x = 0$ verlaufen die Magnetfeldlinien wie erwartet in Richtung der z -Achse, d.h. senkrecht zur x -Achse. Bei $x = 0,5$ und $z = 0$ befindet sich der Spulendraht. Daher verlaufen die Magnetfeldlinie horizontal und bei $x \gg 0,5$ m vertikal.

Die Stärke der Feldlinien wird hier nicht wiedergegeben. Da diese aber aus den Gleichungen hervorgehen, wäre es grundsätzlich möglich, die Feldstärke zu berechnen und grafisch darzustellen.

5.2 Simulation elektronischer Schaltungen

Elektrische und elektronische Schaltungen lassen sich relativ einfach mit VBA berechnen und damit Simulationen durchführen. In diesem Beispiel wird ein realer Schwingkreis mit der auf Resonanz eingestellten Frequenz betrieben.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Kondensator und Spule							
2								
3								
4		RCL in Serie					Spannung	
5							URL, V	31,6228014
6							UR, V	0,1
7		Kondensator					UC, V	0
8		Uc, V	31,6229099				UL, V	31,6226433
9		C, F	0,0001					
10		f, Hz	50,329				Widerstand	
11		I, A	1				UR, V	0,1
12							R, Ω	0,1
13		Spannung					I, A	1
14		URCL, V	0,10000036				f, Hz	50,329
15		UR, V	0,1				Spule	
16		UC, V	31,6229099				UL, V, j	31,6226433
17		UL, V	31,6226433				L, H	0,1
18		Io, A	1				I, A	1
19		f, Hz	50,329				f, Hz	50,329
20								
21								
22		Res. F, Hz	50,3292121				Güte	316,227975
23		C, F	0,0001					
24		L, H	0,1					
25		R, Ω	0,1					

Die Tabelle zeigt, dass die Spannung an der Spule mit 31,6 V deutlich höher liegt als die Betriebsspannung mit 0,1 V. Damit beträgt die Schwingkreisgüte 316.

Auch andere Schaltung wie z.B. Widerstandskombinationen oder Transistorverstärker lassen sich auf diese Weise erstellen und testen. In Kombination mit VBA lassen sich auch dynamische Simulationen durchführen.

6. Planung

Geplant ist die Programmierung folgender Themen

- Wasser-Dampf tabel nach Koch
- Formeln des VDI-Wärmetlas zur Berechnung von Wärmeübergangskoeffizienten
- Berechnung von Stoffdaten
- Batchreaktor für nicht- triviale Probleme.

Die Excel-VBA Geschichte, kurz erzählt.

Excel wie seine geschichtlichen Vorgänger Symphony und Lotus waren ursprünglich für kaufmännische Anwendungen erstellt worden, die ersten Computer übrigens auch. Als Borland einen eigenen C-Compiler und eine Tabellenkalkulation im Quellcode lieferte, startete Microsoft das erste Excel. Damit ließen sich tabellarische

Daten leicht horizontal und vertikal summieren, was zur Kontrolle einer Produktionsbilanz außerordentlich hilfreich war. Für häufig wiederkehrende Vorgänge wurde eine Makrosprache eingeführt, die aber schwer verständlich war. Bill Gates mochte Basic. Deshalb befand sich der Basic Interpreter auf jeder PC-Diskette. Es erschien sogar ein Basic Compiler, ein Power Basic, ein Turbo Basic und ein Quick Basic.

Als B. Gates Visual Basic 4 herausbrachte, war das Interesse groß. Kurz darauf kam VB 5 und VB 6. Viele kommerzielle Programme wurden in VB 6 erstellt. In Excel, Word, Access und Outlook findet man VBA (Visual Basic for Application) als Makro Sprache. Die Stärke von VBA in Excel besteht heute darin, dass man schnell eigene Programme erstellen und bequem anwenden kann.

Die Kombination mit CHEMCAD ist vielfältig möglich.

Es gibt sehr viele Beispiele für Excel-VBA, aber nur wenige aus dem Bereich der Chemie und Verfahrenstechnik.

1983 erschien die 1. Auflage von Ebert, Ederer „Computerberechnungen in der Chemie“. Darin wird eine große Zahl von BASIC-Programmen vorgestellt. Leider laufen diese nur in Basic unter DOS. Etliche davon wurden in Excel-VBA übertragen, sodass sie jetzt in Excel angewendet werden können.

Wolfgang Schmidt

31.03.2014