

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 veröffentliche 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.

- Component Selection -	×		📑 Reg	ress NRTL Paran	neters		×
Selected Components Component Database	1					Comp List	Cancel OK
104 Petersel				Value	Lower_Bound	Upper_Bound	
62 Natar 62 Natar			B12	-55.1681	-1000	2500	
40 Benzene			B21	670.441	-1000	2500	
			Alpha	0.3	0.2	0.4	1
		ķ	A12	0	0	0	1
			A21	0	0	0	1
Search for:							
Next							
Delete Clear Add Insert							
Cancel OK							

🚆 - Regress Para	meters - 🔀		
Max. iterations Relative error	1000 1e-005		
Absolute error	1e-005	🚆 - Bip Set -	×
Unit selection	Mole fraction	Specify which BIP set to be updated or enter 0 to ignore	
Object function	Minimize (Xcalc-Xexp)**2 🔽	the regressed results.	
		BIP Set 2	
Help	Cancel OK	Help Cancel OK	

CHEMCAD 6.3.0
All streams should be reinitialized. Proceed with reinitialization?
After making changes to your thermodynamic settings, it is usually best to reinitialize all streams, bringing them into equilibrium using the new thermodynamic settings. For simulations with many streams this may take some time.
Do you want to reinitialize all streams?
Yes No



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:

	NRTL Pa	rameters S	et 1														×
		I	J	JbTyp	Comment	Valid Temp	Source	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij D	i Alpha	r
ſ	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	
1																	
Г				-	60							Halp	Car		0	< 1	
1				-	00							Teth				<u>`</u>	1

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.

Kvalue Models	Enthalpy Models	Transport Properties
Global K Value Mor NRTL Ethane/Ethylene, F © Regular SRK/P © Special SRK/P Vapor Phase Assoc © No Vapor Phase © Vapor Phase As Vapor Fugacity/Poy © Correction © No Correction SRK/PR Alpha fun © Standard SRK/ © Boston-Mathias	del Propane/Propylene: R Bips Bips Station: Association writing Correction: Ction: PR extrapolation Gas/Physical Solvent Package	Global Phase Option: Vapor/Liquid/Solid Vapor/Liquid/Solid Water/Hydrocarbon Solubility: Miscible Vilson model salt No. of BIP sets Default BIP set Set Idear all local thermodynamics Clear all local thermodynamics Reflash input streams for local H models.
lelp	Options in gray	are not applicable for this k value option Cancel OK



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

Wählt man den Datensatz 2

	NRTL Pa	rameters Set	2													×
		I	J	SubType	Comment	Valid Temp	Source	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij Dji	Alt
Г	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
4																▶
_					- 1									1		
				<u> </u>	Go						Help		Cancel		ЭК	

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:

Select Da	tabase BIP					x
The following Water (6.3 S) To use a diffe) list shows th ystem Compo erent BIP, sel	ie availi inents E lect it ar	able BIPs for the component pair:)atabase) and Ethanol (6.3 System Components Da nd then click OK.	atabase)		
Туре	Subtype	Pr	Description	Valid Temp Range	Source	
NRTL	VLE	52	Imported from CHEMCAD 5 Unifac Regression 2011	20 - 90 (C)	6.3 System Co Simulation	
<u>H</u> elp			View	Can	cel OK	

In der Zeile "Simulation" befinden sich die soeben erstellten Daten.



Nun sollen diese gespeichert werden.



🗾 Sele	ct Components										×
Availab	le Components:							Selected Compone	ints:		
ID	Name	CAS	Formula	Last Modifi	Source		Top	Name	CAS	Last Modifi	
62	Water	7732	H20	02/27/08	System			Ethanol	64-17-5	02/27/08	_
63	Ammonia	7664	H3N	02/27/08	System		Un	Water	7732-1	02/27/08	
63	HBN	7664	H3N	02/27/08	System						
63	NH3	7664	НЗN	02/27/08	System						
64	Carbon	7440	С	02/27/08	System						
65	Acetylene	74-86-2	C2H2	02/27/08	System						
65	Ethyne	74-86-2	C2H2	02/27/08	System						
66	Propyne	74-99-7	C3H4	02/27/08	System		>				
66	Methyl Acetyle	74-99-7	C3H4	02/27/08	System						
67	1-Butyne	107-0	C4H6	02/27/08	System						
67	Ethylacetylene	107-0	C4H6	02/27/08	System						
68	2-Methylprope	115-1	C4H8	02/27/08	System						
69	Cyclopentene	142-2	C5H8	02/27/08	System		Down				
70	N-Propylbenze	103-6	C9H12	02/27/08	System						
71	2-Propylbenze	98-82-8	C9H12	02/27/08	System	-	Bottom				
Search								Delete		Clear	
					March	1					
P					Next						
Opt	ions							[Cancel	ОК	
											11.

Chemstations Deutschland GmbH • Augustastr. 12 • 46483 Wesel • Tel. +49-281-33991-0 • Fax +49-281-33991-33 E-Mail: info@chemstations.de • www.chemstations.de • Geschäftsführer: Nathan D. Massey, Wolfgang Schmidt



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 NRTL VLE 5 Imported from CHEMCAD 5 UNIQUAC VLE 5 Imported from CHEMCAD 5 UNIQUAC VLE 5 Imported from CHEMCAD 5 UNIQUAC VLE 5 Imported from CHEMCAD 5 SAFT S	Temp Range Source 6.3 System Co 6.3 System Co 6.3 System Co 6.3 System Co 6.3 System Co 6.3 System Co			
		Select Thermo	Method	×
		Thermo Me	thod of new BIP	Subtype of new BIP
		NRTL	•	VLE 💌
Hale View/Edit Nam Datata Com	Close	<u>H</u> elp		Cancel OK
Tieh Assacrat Mean Coha				
- NRTL BIPS -		<u> </u>		
Component I Ethanol				
Component J Water				
Priority	Subtype			
2	DALE.			
2	IVEE	<u> </u>		
Unirac Regression 2011				
U DIT.	P			
Valid Lemperat	ure Range			
Min 20 C	Max 90	С		
I, J	J, I			
p: 18.4931	pr: 670.67			
Bij 10.4531	Bli Tovorov			
Alpha ij 0.39677				
Aij	Aji			
Cij	Cji			
Dii	Dii			
	. ,			
Help	Cancel	ОК		
	<u></u>			

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.

Chemstations Deutschland GmbH • Augustastr. 12 • 46483 Wesel • Tel. +49-281-33991-0 • Fax +49-281-33991-33 E-Mail: info@chemstations.de • www.chemstations.de • Geschäftsführer: Nathan D. Massey, Wolfgang Schmidt



Select BIPs Database
😲 Select destination database for edited BIPs
The modified BIPs may be stored directly in the simulation or copied to a user database.
To store the BIPs in the simulation click 'Simulation', otherwise click 'User' to select an available user database.
[Simulation] User

Speichern in "Simulation":

View\Edit Database BIPs X The following list shows the available BIPs for the component pair: Ethanol (6.3 System Components Database) and Water (6.3 System Components Database) Subtype Pr.. Valid Temp Range Туре Description Source 6.3 System Co... Simulation Imported from CHEMCAD 5 NRTL VLE 5 NRTL VLE 2 Unifac Regression 2011 20 - 90 (C) Wilson VLE 5 Imported from CHEMCAD 5 6.3 System Co... 5 Imported from CHEMCAD 5 UNIQUAC VLE 6.3 System Co... 5 Imported from CHEMCAD 5 ESD VLE 6.3 System Co... 5 SAFT VLE Imported from CHEMCAD 5 6.3 System Co... View\Edit New Delete Close <u>H</u>elp Сору

Chemstations Deutschland GmbH • Augustastr. 12 • 46483 Wesel • Tel. +49-281-33991-0 • Fax +49-281-33991-33 E-Mail: info@chemstations.de • www.chemstations.de • Geschäftsführer: Nathan D. Massey, Wolfgang Schmidt



Mit "Edit BIPs"

Т	hei	mophysical Specifications	<u>R</u> un Re	C	NRTL Parameters	Set 2													×
					I	J	SubType	Comment	Valid Temp	Source	Bij	Biji	Alpha	Aij	Aji	Cj	Cji	Dij Dij	Alpt
		Component <u>D</u> atabase	· · ·		1 Ethanol	Water	VLE			Simulation	18.4928	670.6735	0.396768	0	0	0	0	0 0	0
	Δ.	Coloret Conservation			2 Ethanol	Benzene	YLE	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Components Database	99.6264	638.678	0.2899	0	0	0	0	0 0	<u> </u>
2	0	Select Components			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
		Electrolytes	- + I																
		Pseudocomponent <u>C</u> urves																	
		Solids	- - -																
		Thermodynamics Wizard																	
	Y,	Thermodynamic Settings																	
		Edit <u>B</u> IPs																	
		<u>R</u> egress BIPs																	
		Import CAPE-OPEN			•		_							_					
		View CAPE-OPEN					*	Go						H	elp .	Cancel		OK	

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:

Select Database BIP	×	🔛 - NRTL 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) To use a different BIP, select it and then click OK.		Component I Ethanol Component J Water
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		Priority Subtype P VLE V Unifac Regression 2011 Valid Temperature Range Min 20 C Max 90 C I,J J,I J,I <t< td=""></t<>
Help View\Edit Cancel DK		Help Cancel OK

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.

-1		_			50	lect Components								×
The	rmophysical Specifications Run	Re	pol	rt <u>P</u> lot Sizing <u>T</u> ools <u>W</u> indow <u>H</u> elp	Avai	able Components:						Selected Compo	nents:	
	Component <u>D</u> atabase			⊻iew/Edit Database Component	ID	Name	CAS	Formula	Last Modifi	Source 🔺	Тор	Name	CAS Las	st Modifi
0	Select Components		ð	View/Edit Simulation Component	62 63	Water Ammonia	7732 7664	H2O H3N	02/27/08	System	Up	Ethanol Water	64-17-5 02/ 7732-1 02/	/27/08 /27/08
	Electrolytes	F		Create New Component	63	NH3	7664• 7664•	H3N H3N	02/27/08	System		1		
	Pseudocomponent <u>C</u> urves			<u>C</u> lone Component	64 65	Carbon Acetvlene	7440 74-86-2	C C2H2	02/27/08 02/27/08	System System				
	Solids	F		Delete Component(s)	65	Ethyne Propupe	74-86-2	C2H2	02/27/08	System		1		
	Theymodus amics Winayd			Move Component	66	Methyl Acetyle	74-99-7	C3H4	02/27/08	System				
v	Thermodynamics wizaru		~	Check for Component Updates	67	1-Butyne Ethylacetylene	107-0 107-0	C4H6 C4H6	02/27/08	System System				
<i>l</i> i	r de pro-			Manage Databases	68	2-Methylprope	115-1	C4H8	02/27/08	System		1		
	Edit BIPS			Neutral File Import	70	N-Propylbenze	103-6	C9H12	02/27/08	System	Down			
	Regress BIPs	_		List Liser Components		2-Propylbenze	98-82-8	C9H12	02/2//08	System	Bottom	1		
	Import CAPE-OPEN			Components Description								Delete		Clear
	View CAPE-OPEN			Component Property Regression	Sear	sh:						Delete		
_		-1		<u>D</u> atabase BIPs						Next				
				UNIFAC BIPs	(ptions							Cancel	ок (
				Plot Properties										



×

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)

-					•	
Туре	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	
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	VIE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 Sustem Co	
		-			0.0 0,0000 00	
Help	1	10	outEdit Now			Close
Teih				ciele copy		CIUSE

Wählt man die Zeile "Simulation" und "Copy" erscheint:

ஜ - NRTL BIPs -	1
Component I Ethanol	
Component J Water	
Priority Subtype	
₽ VLE ▼	Calash DW- Database
Unifac Begression 2011	
Valid Temperature Range Min 20 C Max 90 C	Select destination database for edited BIPs
I, J J, I Bij 18.4931 Bij 670.67	The modified BIPs may be stored directly in the simulation or copied to a user database.
Alpha ij 0.39677 Aij Aij Aij Cij Cij Cij Cij Dij Dij Dij	To store the BIPs in the simulation click 'Simulation', otherwise click 'User' to select an available user database.
Help Cancel OK	Simulation User



Hier wird "User" gewählt:

Manage Component Databases		×
User Databases:		1
\\chemstation\redir\SP\Eigene Dateien\My Simulations\User Compone		
	Move Up	
	Move Down	
Create	Disconnect	
	Disconnect	
Impart	0r [
impor		
		11.

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:

Speichern unter					? ×
Spejchern in:	🚱 My Simulation:	3	🔹 😳 🦻	•11 💙	
My Simulations Arbeitsplatz Eigene Dateien Desktop	CuniPLant.tmp Einführung Examples-6.20 Examples-6.21 Examples-6.22 Examples-6.30 Examples-old Fortgeschritten My Reports My Reports My Symbols seminar_cd process_biodies	;el.ppdb its.ppdb			
	Datei <u>n</u> ame:	User-NBTL		•	<u>S</u> peichern
	Datei <u>t</u> yp:	Component Database (*.ppd	ь)	•	Abbrechen

Die neue Datenbank soll "User-NRTL" heißen.

- 10 -



Manage Component Databases	×
User Databases:	
\\chemstation\redir\SP\Eigene Dateien\My Simulations\User Compone \\chemstation\redir\SP\Eigene Dateien\My Simulations\User-NRTL.pp	Move Up
	Move Down
Create Connect	Disconnect
Import	ОК
Select Destination Database	
You have write access to the following	
\\chemstation\redir\SP\Eigene Dateien\My Simulations\User Com \\chemstation\redir\SP\Eigene Dateien\My Simulations\User NRT	
New Cancel OK	

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.

Chemstations Deutschland GmbH • Augustastr. 12 • 46483 Wesel • Tel. +49-281-33991-0 • Fax +49-281-33991-33 E-Mail: info@chemstations.de • www.chemstations.de • Geschäftsführer: Nathan D. Massey, Wolfgang Schmidt



×

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)

Туре	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	
SAFI	VLE	5	Imported from CHEMCAD 5		6.3 System Co	
	1				1	
Help			ew\Edit New L	Jelete Copy		Liose

Autor. W. Schmidt

Chemstations Deutschland GmbH

Febr. 2011