

5. Chemische Reaktionen
  - 5.1 Berechnung von Reaktionsenthalpien
  - 5.2 Berechnung chem. Gleichgewichte
6. Demonstration Dortmund Datenbank (DDB)

**Teil 2: Einführung in die Benutzung der DETHERM-Datenbank (0,5 Tage)**

1. Aufbau der Datenbank DETHERM
2. Praktische Übungen zum Recherchieren

**Teil 3: Das Prozesssimulationssystem ASPEN PLUS (1 Tag)**

1. Thermodynamik und Prozesssimulation
  - 1.1 Implementierung thermodynamischer Berechnungsvorschriften in das Programm
  - 1.2 Berechnung und Vertafelung von Stoffdaten, Phasendiagramme
  - 1.3 Anforderungen an Parameter und Stoffdaten nach dem Verwendungszweck
2. Kombinierte Phasen- und Reaktionsgleichgewichte
  - 2.1 apparent and true components
  - 2.2 Reaktionsgleichgewichtskonstanten
  - 2.3 Beisp. für Interaktionen versch. Parameter
3. Beschaffung von Stoffdaten und Parametern
  - 3.1 Welche Parameter für welchen Zweck
  - 3.2 Datenbanken
  - 3.3 Stoffdatenabschätzung: Genauigkeit, Anwendung
  - 3.4 Datenregression
    - Welche Informationen für welche Parameter, Extrapolierbarkeit, Fehlerquellen und Gefahren
4. Durchgängiges Beispiel (Kolonnensimulation):
  - 4.1 Welche Stoffdaten und Parameter fehlen oder benötigen eine Verbesserung?
  - 4.2 Welche experimentelle Information ist vorhanden (Reinstoffdaten, Gemischdaten)?
  - 4.3 Welche Daten schätze ich ab?
  - 4.4 Welche Daten für die Regression?
  - 4.5 Simulation der Kolonne

## HINWEISE FÜR TEILNEHMER

Der Kurs findet an der C.v.O.-Universität in Oldenburg (Oldb.) am Standort Wechloy statt.

### Kursablauf

Beginn: Di., 28.09.2010 9:30 Uhr  
 Ende: Do., 30.09.2010 17:30 Uhr

### Teilnahme

Sie können sich online, mit dem Anmeldeformular oder formlos per E-Mail anmelden:

DECHEMA e.V.

Weiterbildung

Postfach 150104

D-60061 Frankfurt am Main

Tel.: +49 69 7564-253/202

Fax: +49 69 7564-414

E-Mail: [gruss@dechema.de](mailto:gruss@dechema.de)

E-Mail: [weber-heun@dechema.de](mailto:weber-heun@dechema.de)

Internet: <http://kwi.dechema.de/kurse>

### Kursgebühr

915,- €

900,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder)

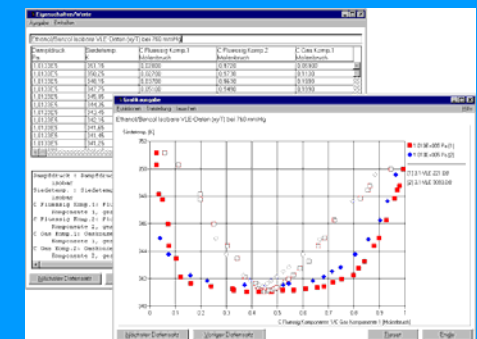
(inkl. Kursunterlagen und Pausengetränke)



## WEITERBILDUNGSKURS

28. – 30. September 2010  
 Oldenburg

# Thermodynamische Stoffdaten für die Synthese, Auslegung und Simulation chemischer Prozesse



# THERMODYNAMISCHE STOFFDATEN FÜR DIE SYNTHESE, AUSLEGUNG UND SIMULATION CHEMISCHER PROZESSE

Für die Auslegung von Anlagen, die Berechnung des Prozessverhaltens und die Lösung von damit verknüpften Optimierungsproblemen sind Simulationsprogramme zu einem unverzichtbaren Hilfsmittel geworden. Die Qualität der Berechnungsergebnisse hängt entscheidend von den verwendeten Stoffdaten ab. Häufig stehen diese Daten nicht oder nur unvollständig zur Verfügung. Da Messungen einen hohen experimentellen und zeitlichen Aufwand erfordern, ist man bestrebt, solche Daten auf rechnerischem Wege zu ermitteln oder abzuschätzen.

Moderne Datenbanken und Softwarepakete ermöglichen neben dem Zugriff auf Literaturdaten und der Verwaltung eigener Messdaten auch Visualisierung und Korrelation sowie die Abschätzung fehlender Stoffdaten für reine Komponenten und Gemische. Weit verbreitet und von großer praktischer Bedeutung sind beispielsweise Gruppenbeitragsmethoden zur Vorausberechnung von Phasengleichgewichten und Exzessgrößen (UNIFAC, PSRK).

## Lernziel

Die Teilnehmer werden mit wichtigen, aktuellen Methoden der rechnerischen Ermittlung von Stoffdaten und insbesondere Phasengleichgewichten vertraut gemacht. Damit werden sie in die Lage versetzt, Berechnungsmethoden selbständig anzuwenden und die Zuverlässigkeit der Ergebnisse zu beurteilen.

Am Beispiel der DETHERM<sup>®</sup>-Stoffdatenbank werden praktische Kenntnisse im Recherchieren von Stoffdaten vermittelt.

Regression, Abschätzung und Visualisierung von Stoffdaten sowie weitergehende Anwendungen, wie die Auswahl selektiver Zusatzstoffe, werden mit Hilfe der Dortmundener Datenbank (DDB) und des integrierten Softwarepakets DDBSP demonstriert.

## Lerninhalt

Neben der Ermittlung von Eigenschaften reiner Stoffe und Gemische und von chemischen Gleichgewichten realer Systeme werden die modernen Methoden der Berechnung von Phasengleichgewichten ausführlich dargestellt. Auf theoretische Grundlagen wird insoweit eingegangen, als diese für das Verständnis der Methoden notwendig sind.

Die Auswahl der Berechnungsmethoden wurde nach Gesichtspunkten der Anwendbarkeit in der Berufspraxis und den Möglichkeiten der Programmierung getroffen, wobei eine Konzentration auf die in der chemischen Technik wichtigen Stoffeigenschaften erfolgt. Die Vorgehensweise bei der Abschätzung von Stoffdaten wird anhand geeigneter Softwaretools demonstriert.

Die Benutzung der DETHERM-Datenbank wird an Hand typischer Stoffdatenprobleme ausführlich dargestellt. Dabei liegt der Schwerpunkt auf der Recherche von Stoffdaten und ihrer Übergabe an Prozesssimulationssystemen.

Die Implementierung thermodynamischer Berechnungsmethoden in das Prozesssimulationsprogramm ASPEN PLUS wird erläutert, wobei Möglichkeiten und wichtige praktische Aspekte an Beispielen behandelt werden.

## Stoffvermittlung

Der Stoff wird durch Vorträge und Übungen vermittelt. An einem durchgängigen Beispiel werden die Sachverhalte erläutert.

## Zielgruppe

Naturwissenschaftler und Ingenieure in Forschung und Entwicklung, in der Anlagenplanung und Apparateauslegung und in der Produktion; Informationsvermittler.

## Vorkenntnisse

Grundkenntnisse in Physikalischer Chemie sind von Vorteil.

# KURSPROGRAMM

## Vortragende

Prof. Dr. J. Gmehling, Oldenburg (Kursleitung)

Dr. R. Sass, Frankfurt am Main (Kursleitung)

Dr. U. Westhaus, Frankfurt am Main

Dr. C. Möllmann, Bad Soden

Prof. h.c. Dr. J. Rarey, Oldenburg

## Themen

### Teil 1: Thermodynamische Stoffdaten für die Synthese, Auslegung und Simulation chemischer Prozesse (1,5 Tage)

1. Reinstoffeigenschaften
  - 1.1 PVT-Verhalten
  - 1.2 Dampfdruck, Verdampfungsenthalpie
  - 1.3 Kritische Daten
2. Eigenschaften von Mischungen
  - 2.1 Fugazitäten
  - 2.2 Exzessgrößen und Aktivitätskoeffizienten
  - 2.3 Zustandsgleichungen (Redlich-Kwong, Soave u.a.)
3. Phasengleichgewichte (Dampf/Flüssig, Flüssig/Flüssig, Azeotropie, Fest/Flüssig, Gas/Flüssig)
  - 3.1 Modelle für nichtideale Flüssigkeitsmischungen (Wilson, NRTL, UNIQUAC)
  - 3.2 Vorhersage von Aktivitätskoeffizienten (UNIFAC, mod. UNIFAC)
  - 3.3 Vorausberechnung von Phasengleichgewichten mit Zustandsgleichungen (PSRK, VTPR)
  - 3.4 Quantenchemische Methoden (COSMO RS,...)
4. Synthese von Rektifikationsprozessen
  - 4.1 Berechnung azeotroper Punkte in Multikomponentensystemen
  - 4.2 Destillationslinien, Rückstandskurven
  - 4.3 Auswahl selektiver Zusatzstoffe
  - 4.4 Softwaredemonstration

|

**Brief-/Fax-Antwort**

**(Fax-Nr.: +49 69 7564-414)**

**DECHEMA e.V.**  
Weiterbildung  
Postfach 15 01 04  
**D-60061 Frankfurt am Main**

**Anmeldung** für den DECHEMA-Kurs 3112 vom 28.09. – 30.09.2010

**ST**

**“Thermodynamische Stoffdaten für die Synthese, Auslegung und Simulation chemischer Prozesse”** in Oldenburg

Anmeldeschluss: 07.09.2010

Die Anmeldungen werden entsprechend der Reihenfolge des Eingangs berücksichtigt.

---

**Veranstaltungsteilnehmer**

Frau  Herr  Titel \_\_\_\_\_

Name \_\_\_\_\_

Vorname \_\_\_\_\_

Firma \_\_\_\_\_

Abteilung \_\_\_\_\_

Straße/Postfach \_\_\_\_\_

PLZ/Ort \_\_\_\_\_

Telefon/Fax \_\_\_\_\_ E-Mail \_\_\_\_\_

**Abweichende Rechnungsanschrift**

Firma \_\_\_\_\_

Abteilung \_\_\_\_\_

Straße/Postfach \_\_\_\_\_

PLZ/Ort \_\_\_\_\_

Ich bin persönliches DECHEMA-Mitglied:  ja  nein

Hotelfinfos erwünscht:  ja  nein

Die Kursgebühr beträgt 915,- € / 900,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder). Erst nach Zusendung der Rechnung durch die DECHEMA (ca. 4 Wochen vor Kursbeginn) bitten wir um Überweisung. Wird eine Anmeldung mindestens zwei Wochen vor Kursbeginn storniert, erfolgt Erstattung der Teilnehmergebühr abzüglich 10 % für Verwaltungskosten. Bei Stornierung zu einem späteren Termin ist eine Erstattung nicht mehr möglich. Unsere auf Kostendeckung kalkulierten Teilnehmergebühren unterliegen nicht der Mehrwertsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4.22 UStG).

Mit der Anmeldung akzeptieren Sie unsere allgemeinen Geschäftsbedingungen. Diese finden Sie im Internet unter [http://kwi.dechema.de/agb\\_kurse](http://kwi.dechema.de/agb_kurse) oder Sie können sie beim Weiterbildungssekretariat der DECHEMA anfordern.

\_\_\_\_\_  
Ort, Datum

\_\_\_\_\_  
Unterschrift und Firmenstempel