

KURSPROGRAMM

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. Kombin. 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

VERANSTALTUNGSORT

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

KURSABLAUF

Beginn: Di., 25.09.2012 9:30 Uhr
 Ende: Do., 27.09.2012 17:30 Uhr

ANMELDUNG

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

DECHEMA-Forschungsinstitut
 Weiterbildung
 Postfach 170352
 D-60077 Frankfurt am Main

Tel.: +49 69 7564-253/202
 Fax: +49 69 7564-414
 E-Mail: gruss@dechema.de
 E-Mail: weber-heun@dechema.de
 Internet: www.dechema-dfi.de/kurse

Die Weiterbildungskurse werden vom DECHEMA-Forschungsinstitut, eine Stiftung bürgerlichen Rechts, in Kooperation mit der DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. angeboten.

KURSGEBÜHR

975,- €

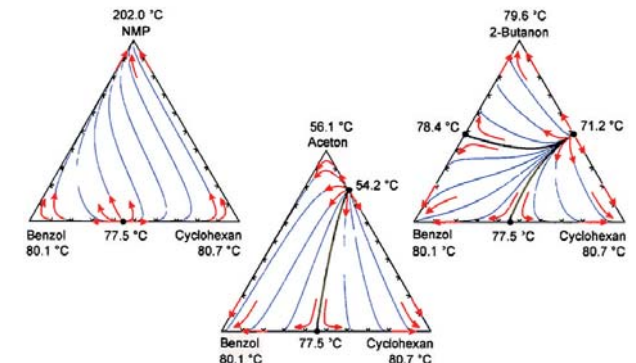
960,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder)

(inkl. Kursunterlagen und Pausengetränke)

WEITERBILDUNGSKURS

25. - 27. September 2012
 Oldenburg

Thermodynamische Stoffdaten für die Synthese, Auslegung und Simulation chemischer Prozesse



LERNZIEL

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 (mod. 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®-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 Dortmunder Datenbank (DDB) und des integrierten Softwarepakets DDBSP demonstriert.

LERNINHALT/ZIELGRUPPE

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 anhand 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. h.c. Dr. J. Rarey	Oldenburg (Kursleitung)
Dr. R. Sass	Frankfurt am Main (Kursleitung)
Dr. U. Westhaus	Frankfurt am Main
Dr. C. Möllmann	Bad Soden

THEMEN

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

- Reinstoffeigenschaften
 - PVT-Verhalten
 - Dampfdruck, Verdampfungsenthalpie
 - Kritische Daten
- Eigenschaften von Mischungen
 - Fugazitäten
 - Exzessgrößen und Aktivitätskoeffizienten
 - Zustandsgleichungen (Redlich-Kwong, Soave u.a.)
- Phasengleichgewichte (Dampf/Flüssig, Flüssig/Flüssig, Azeotropie, Fest/Flüssig, Gas/Flüssig)
 - Modelle für nichtideale Flüssigkeitsmischungen (Wilson, NRTL, UNIQUAC)
 - Vorhersage von Aktivitätskoeffizienten (UNIFAC, mod. UNIFAC)
 - Vorausberechnung von Phasengleichgewichten mit Zustandsgleichungen (PSRK, VTPR)
 - Quantenchemische Methoden (COSMO RS,...)
- Synthese von Rektifikationsprozessen
 - Berechnung azeotroper Punkte in Multikomponentensystemen
 - Destillationslinien, Rückstandskurven
 - Auswahl selektiver Zusatzstoffe
 - Softwaredemonstration
- Chemische Reaktionen
 - Berechnung von Reaktionsenthalpien
 - Berechnung chem. Gleichgewichte
- Demonstration der Dortmunder Datenbank (DDB)

I

Brief-/Fax-Antwort
(Fax-Nr.: +49 69 7564-414)

DECHEMA-Forschungsinstitut
Weiterbildung
Postfach 17 03 52
D-60077 Frankfurt am Main

Anmeldung für den DECHEMA-Kurs 3112 vom 25. – 27.09.2012

ST

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

Anmeldeschluss: 04.09.2012

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

Die Kursgebühr beträgt 975,- € / 960,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder). Erst nach Zusendung der Rechnung durch die DECHEMA (ca. 3 - 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 oder Sie können sie beim Weiterbildungssekretariat der DECHEMA anfordern.

Ort, Datum

Unterschrift und Firmenstempel