

Format des Stoffdatensatzes - .dat-Datei

Christian Redepenning, Jürgen Bausa

01.12.2015

Dieses Dokument beschreibt den Aufbau des Stoffdatensatzes auf dem alle hier entwickelten Routinen aufbauen. Mit der hier beschriebenen Vorgehensweise, kann der Stoffdatensatz hndisch erstellt werden. Ein Parser ist verfügbar, der automatisiert die Parameter zu den thermodynamischen Parametern aus einer Report-Datei (.rep) von AspenPlusTM ausliest und in das geforderte Format des Stoffdatensatzes schreibt.

Die Thermodynamischen Modellgleichungen sind der Dokumentation von AspenPlusTM entnommen. Alle für die Modellgleichungen notwendigen Konstanten werden einer speziellen Datei, dem Stoffdatensatz, entnommen. Diese Dokumentation beschreibt den Aufbau dieses Stoffdatensatzes.

Hufig besteht der Name dieser Datei aus den Anfangsbuchstaben der Komponenten mit der Dateierdung .dat bestehen (für das Gemisch Ethanol/Wasser/Glykol also **ewg.dat**). Die Komponenten werden mit Hilfe von Indizes bezeichnet und sind von 0 bis $C - 1$ nummeriert (für ein Gemisch aus C Komponenten). Diese Indizes werden beim erstellen des Stoffdatensatzes zugeordnet und sollten in der Reihenfolge der Siedetemperaturen der reinen Komponenten vergeben werden (Leichtsieder ist 0 und Schwersieder ist $C - 1$).

Der Aufbau eines Datensatzes ist folgendermaßen: Jede Datei beginnt mit dem Kommentarfeld, das Erläuterungen zum Datensatz, Dokumentation von Änderungen oder Korrekturen und Ähnliches enthalten kann. In der ersten Zeile sollte der Name des Datensatzes mit Versionsnummer und dem Datum der letzten Änderung stehen, denn diese Zeile wird im Programm gespeichert und kann jederzeit ausgegeben werden.

Das Kommentarfeld wird beendet mit einer Zeile, die mit dem Wort **BEGIN** anfängt. An dieser Stelle beginnt der Datenteil der Datei und alle nachfolgenden Zeilen werden vom Programm interpretiert. Befindet sich in einer Zeile ein Semikolon, so wird der gesamte Rest der Zeile als Kommentar angesehen. Fortsetzungszeilen werden mit . . . am Ende der vorherigen Zeile gekennzeichnet.

Datenzeilen müssen mit dem jeweiligen Schlüsselwort für die betreffende Konstante beginnen. Zwischen diesen Zeilen können sich beliebig viele Leerzeilen oder Kommentarzeilen befinden. Das Schlüsselwort muß sich immer

am Anfang einer Zeile befinden und wird durch ein Leerzeichen von darauf folgenden Zahlenwerten getrennt.

Wenn sich eine Konstante auf eine bestimmte Komponente bezieht, so folgt dem Schlüsselwort der Index der betreffenden Komponente. Alternativ kann auch der Name der Komponente angegeben werden. In der Beschreibung der Schlüsselwörter weiter unten werden hierfür immer der Buchstabe *i* bzw. *i* und *j* verwendet.

Falls spezielle Konstanten nicht bekannt sind, so können sie, wenn sie sich am Ende der Zeile befinden, einfach weggelassen werden, wenn danach noch weitere Zahlenwerte folgen, kann stattdessen das Wort **MISSING** eingefügt werden.

Hier folgt eine Liste aller verwendeten Schlüsselwörter und ihrer Bedeutung.

NSTOFF n Mit diesem Befehl wird die Anzahl der Komponenten auf den Wert *n* festgelegt. Nach der Festlegung der Komponentenzahl werden alle bisher eingelesenen Parameter gelöscht. Daher sollte dieser Befehl immer am Anfang eines Satzes stehen.

STNAME i Name Hiermit wird der Name der Komponente *i* mit 'Name' belegt. Der Name muß aus einem zusammenhängenden Wort bestehen, ansonsten wird nur der erste Teil eingelesen.

ALPHA i alpha Hiermit kann die relative Flüchtigkeit α_i der Komponente *i* angegeben werden.

IDEAL ideal_hvap ideal_p ideal_t ideal_vv ideal_vl Es können die Verdampfungsenthalpie, der default-Druck, die default-Temperatur, das molare Dampf- und das molare Flüssigkeitsvolumen angegeben werden, die bei einer Berechnung mit konstanten relativen Flüchtigkeiten verwendet werden. Wurden keine α -Werte angegeben, so werden sie mit Hilfe der *K*-Werte (Raoult'sches Gesetz) bei dem hier angegebenen Druck und Temperatur bestimmt.

ANTA i ant0 antpas antbasis c1 c2 c3 Mit diesem Befehl wird die erste Hälfte der Konstanten, die für die Antoine Gleichung notwendig sind, für den Stoff *i* festgelegt.

ANTB i c4 c5 c6 c7 c8 c9 Hiermit wird der zweite Teil der für das Antoine Modell notwendigen Konstanten angegeben.

WILSRGAS R Gibt den Wert der allgemeinen Gaskonstanten *R* an, der im Wilson Modell verwendet werden soll.

WILSL i j lambda lambdat Hier können die Werte für die Biparameter der Wilson Gleichung λ_{ij} und $\lambda_{T,ij}$ angegeben werden. Sind für $\lambda_{T,ij}$ keine Werte vorhanden, so kann dieses Feld freigelassen werden.

- WILSVL i vl** Gibt den Parameter v_i^{0L} an, der im Wilson Modell verwendet wird.
- QUACRGAS R** Gibt den Wert der allgemeinen Gaskonstante R in der Einheit der UNIQUAC Biparameter an.
- QUACU i j uij utij** Mit dieser Option können die Biparameter der UNIQUAC Gleichung angegeben werden.
- QUACQR i qi ri q1i** Die Parameter q_i , r_i und q'_i für die UNIQUAC Gleichung (wird q'_i nicht angegeben, so wird $q'_i = q_i$ gesetzt).
- NRTLARGAS R** Gibt den Wert der allgemeinen Gaskonstante R in der Einheit der NRTL Biparameter g_{ij} und $g_{T,ij}$ an.
- NRTL G i j gij gtij** Hier können die Werte für die Biparameter g_{ij} und $g_{T,ij}$ der NRTL Gleichung angegeben werden. Sind für $g_{T,ij}$ keine Werte vorhanden, so kann dieses Feld freigelassen werden.
- NRTLA i j alphaij** Die Werte für die Biparameter α_{ij} der NRTL Gleichung.
- CPIGA i c1 c2 c3 c4 c5** Gibt die erste Hälfte der Parameter für die Berechnung der spezifischen Wärmekapazität für die Komponente i an.
- CPIGB i c6 c7 c8 c9 c11** Die restlichen Parameter zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazität.
- CPIGDP i c1 c2 c3 c4 c5 c6 c7** Parameter zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazität mit dem DIPPR-Modell.
- KRIT i tc pc vc zc** Zustand am kritischen Punkt: T_c , p_c , v_c und z_c .
- RKTZRA i zra** Die Konstante Z_{RA} , die für die Rackett Gleichung benötigt wird.
- VCRKT i verkt** Die Konstante v_c^{RKT} , die für die Rackett Gleichung benötigt wird.
- RKTK i j k** Die Konstante $k_{i,j}$, die für die Rackett Gleichung benötigt wird.
- DHVLWT i dh1vap t1 a b tmin** Konstanten die in der Watson Gleichung zur Berechnung der Verdampfungsenthalpie benötigt werden: Δh_1^{0VAP} , T_1 , a , b und T_{min} .
- DHVLDP i c1 c2 c3 c4 c5 c6 c7** Konstanten, die in der DIPPR-Gleichung zur Berechnung der Verdampfungsenthalpie benötigt werden.

DNLDIP i c1 c2 c3 c4 c5 c6 c7 Konstanten, die in der DIPPR-Gleichung zur Berechnung der Dichte der reinen Flüssigkeit benötigt werden.

BEZUG t0 p0 Bezugstemperatur T_{bez} und Bezugsdruck p_{bez} für Enthalpien bzw. Entropien.

DHFORM i h0 Enthalpie der dampfförmigen Komponente i im Bezugszustand: $h^{0IG}(T_{bez})$.

DGFORM i g0 Freie Enthalpie der dampfförmigen Komponente i im Bezugszustand: $g^{0IG}(T_{bez}, p_{bez})$.

MM i mm Molmasse der Komponente i in kg/kmol.

PLBCLAUS i t0 p0 Integrationskonstante für die Bestimmung des Dampfdrucks mit der Clausius-Clapeyron Beziehung. Wird p_0 nicht angegeben, so wird die Antoine-Gleichung an der Stelle T_0 ausgewertet. Wird auch T_0 nicht angegeben, so wird ein default-Wert verwendet.

MARGULA i j A Parameter A_{ij} für die Margules-Gleichung.

VANLAAR i j A B C D Parameter a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} und d_{ij} für die Margules-Gleichung.

KREAC name E0 E1 E2 E3 Parameter zur Modellierung der Gleichgewichtsreaktion *name*.

STOECH name i Stoechiometrischer Koeffizient der Komponente i in der Reaktion *name*.

ASOG_GROUP g1 g2 m n Biparameter $m_{k,l}$ und $n_{k,l}$ für die Gruppenbeitragsmethode ASOG. Die Gruppen k und l können mit ihren Namen (g1, g2) bezeichnet werden.

ASOG_NY i g ny Parameter $\nu_{k,i}$ der Komponente i für die Gruppenbeitragsmethode ASOG. Die Gruppe k kann mit ihren Namen (g) bezeichnet werden.

ASOG_NYFH i nyfh Parameter ν_i^{FH} der Komponente i für die Gruppenbeitragsmethode ASOG.

UNIFAC_GROUP g1 g2 b Biparameter $b_{k,l}$ für die Gruppenbeitragsmethode UNIFAC. Die Gruppen k und l können mit ihren Namen (g1, g2) bezeichnet werden.

UNIFAC_QR g Q R Parameter Q_k und R_k der Gruppe k (durch den Namen g definiert) für die Gruppenbeitragsmethode UNIFAC.

UNIFAC_NY i g ny Parameter $\nu_{k,i}$ der Komponente i für die Gruppenbeitragsmethode UNIFAC. Die Gruppe k kann mit ihren Namen (g) bezeichnet werden.

VDW_B i b Parameter b_i für die van der Waals Zustandsgleichung. Wird ansonsten aus kritischen Daten berechnet.

VDW_A i j b Parameter $a_{i,j}$ für die van der Waals Zustandsgleichung. Wird ansonsten aus kritischen Daten bzw. Mischungsregeln berechnet.

VDW_K i j k Parameter $k_{i,j}$ für die van der Waals Zustandsgleichung. Wird verwendet, um die Biparameter $a_{i,j}$ zu bestimmen.

USRPAR i a Es können beliebige Parameter eingelesen werden, die dann unter `ld->usrpar[i]` in `plib.c` und den dazugelinkten Programmen zur Verfügung stehen.

MESSAGE text ... Gibt den Rest der Zeile am Bildschirm aus.

OPTION text ... Interpretiert den Rest der Zeile als Option (siehe Funktion `props_options`).

INPUT file Liest die angegebene Datei mit Stoffdaten ein. Es ist darauf zu achten, daß mit der neuen Datei möglicherweise bereits eingelesene Daten gelöscht (z.B. wenn der Befehl `NSTOFF` vorkommt) oder überschrieben werden (wenn die Komponenten mit ihrem Index und nicht mit ihrem Namen bezeichnet werden).

KILL i Löscht die Komponente i aus den eingelesenen Daten. i kann entweder über ihren Namen oder über ihren Index angesprochen werden. Sollen mehrere Komponenten gelöscht werden, so ist darauf zu achten, daß sich nach dem Löschen der ersten Komponente möglicherweise der Index der übrigen Komponenten ändert.

Zur Illustration folgt hier ein Beispiel für einen Stoffdatensatz:

```
Aspen Plus Version: 25.0
Generated by Stoff3 1.8.
Datensatz ewg: letzte Änderung: 18.07.2015
Erstellt am 18.07.2015

-----
BEGIN

NSTOFF 3 ; Anzahl Stoffe

STNAME 0 ETHANOL
STNAME 1 WATER
STNAME 2 GLYCOL

BEZUG 298.15 101325

ANTA 0 0.0 1.0 2.71828 7.33040e+01 -7.12230e+03 0.0
ANTA 1 0.0 1.0 2.71828 7.36490e+01 -7.25820e+03 0.0
ANTA 2 0.0 1.0 2.71828 8.40900e+01 -1.04110e+04 0.0
```

```

ANTB 0 0.0 -7.14240 2.88530e-06 2.00000 1.59050e+02 5.14000e+02
ANTB 1 0.0 -7.30370 4.16530e-06 2.00000 2.73160e+02 6.47100e+02
ANTB 2 0.0 -8.19760 1.65360e-18 6.00000 2.60150e+02 7.20000e+02

CPIGA 0 9.01418e+03 2.14071e+02 -8.39035e-02 1.37327e-06 0.0
CPIGA 1 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
CPIGA 2 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0

CPIGB 0 0.0 3.00000e+02 1.31840e+03 3.32560e+04 5.69020 1.51640
CPIGB 1 0.0 0.0 1.00000e+03 0.0 0.0 0.0
CPIGB 2 0.0 0.0 1.00000e+03 0.0 0.0 0.0

CPIGDP 0 4.92000e+04 1.45770e+05 1.66280e+03 9.39000e+04 7.44700e+02 2.73150e+02 1.50000e+03
CPIGDP 1 3.33630e+04 2.67900e+04 2.61050e+03 8.89600e+03 1.16900e+03 1.00000e+02 2.27315e+03
CPIGDP 2 6.30120e+04 1.45840e+05 1.67300e+03 9.72960e+04 7.73650e+02 3.00000e+02 1.50000e+03

KRIT 0 5.14000e+02 6.13700e+06 1.68000e-01 2.41000e-01
KRIT 1 6.47096e+02 2.20640e+07 5.59472e-02 2.29000e-01
KRIT 2 7.20000e+02 8.20000e+06 1.91000e-01 2.62000e-01

RKTZRA 0 2.46860e-01
RKTZRA 1 2.43172e-01
RKTZRA 2 2.49840e-01

RKTk 0 0 0.0
RKTk 0 1 0.0
RKTk 0 2 0.0
RKTk 1 0 0.0
RKTk 1 1 0.0
RKTk 1 2 0.0
RKTk 2 0 0.0
RKTk 2 1 0.0
RKTk 2 2 0.0

VCRKT 0 1.68000e-01
VCRKT 1 5.59472e-02
VCRKT 2 1.91000e-01

DHVLT 0 0.0 0.0 3.80000e-01 0.0 0.0
DHVLT 1 0.0 0.0 3.80000e-01 0.0 0.0
DHVLT 2 0.0 0.0 3.80000e-01 0.0 0.0

DHVLDP 0 5.57890e+07 3.12450e-01 0.0 0.0 0.0 1.59050e+02 5.14000e+02
DHVLDP 1 5.15460e+07 2.84020e-01 -1.58430e-01 2.37500e-01 0.0 2.73160e+02 6.47100e+02
DHVLDP 2 8.35180e+07 4.26250e-01 0.0 0.0 0.0 2.60150e+02 7.20000e+02

DNLDIP 0 1.62880 2.74690e-01 5.14000e+02 2.31780e-01 0.0 1.59050e+02 5.14000e+02
DNLDIP 1 1.78630e+01 5.86060e+01 -9.53960e+01 2.13890e+02 -1.41260e+02 2.73160e+02 6.47100e+02
DNLDIP 2 1.131500 2.51250e-01 7.20000e+02 2.18680e-01 0.0 2.60150e+02 7.20000e+02

DHFORM 0 -2.34950e+08
DHFORM 1 -2.41814e+08
DHFORM 2 -3.92200e+08

DGFORM 0 -1.67850e+08
DGFORM 1 -2.28590e+08
DGFORM 2 -3.01800e+08

MM 0 4.60690e+01
MM 1 1.80153e+01
MM 2 6.20684e+01

QUACRGAS -1

QUACQR 0 1.97200 2.10547 1.97200
QUACQR 1 1.40000 9.20000e-01 1.40000
QUACQR 2 2.24800 2.40870 2.24800

QUACU 0 0 0.0 0.0
QUACU 0 1 -7.28971e+02 2.00460
QUACU 0 2 2.63293e+03 -8.23080
QUACU 1 0 7.56948e+02 -2.49360
QUACU 1 1 0.0 0.0
QUACU 1 2 1.20779e+02 -6.01800e-01
QUACU 2 0 -9.59565e+02 2.68760
QUACU 2 1 -1.86714e+01 6.01800e-01
QUACU 2 2 0.0 0.0

NRTLARGAS 1

NRTLA 0 0 3.00000e-01 0.0
NRTLA 0 1 3.00000e-01 0.0
NRTLA 0 2 4.70000e-01 0.0
NRTLA 1 0 3.00000e-01 0.0

```

```

NRTLA 1 1 3.00000e-01 0.0
NRTLA 1 2 3.00000e-01 0.0
NRTLA 2 0 4.70000e-01 0.0
NRTLA 2 1 3.00000e-01 0.0
NRTLA 2 2 3.00000e-01 0.0

NRTLG 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0
NRTLG 0 1 2.46180e+02 -8.00900e-01 0.0 0.0
NRTLG 0 2 -4.66441e+03 1.48422e+01 0.0 0.0
NRTLG 1 0 -5.86081e+02 3.45780 0.0 0.0
NRTLG 1 1 0.0 0.0 0.0 0.0
NRTLG 1 2 3.48234e+01 3.47900e-01 0.0 0.0
NRTLG 2 0 1.57594e+02 -1.11500e-01 0.0 0.0
NRTLG 2 1 -1.47137e+02 -5.67000e-02 0.0 0.0
NRTLG 2 2 0.0 0.0 0.0 0.0

WILSL 0 0 0.0 0.0
WILSL 0 1 -2.50350 3.46151e+02
WILSL 0 2 1.61060 -6.43621e+02
WILSL 1 0 -5.03000e-02 -6.96372e+01
WILSL 1 1 0.0 0.0
WILSL 1 2 6.06000e-02 1.25455e+02
WILSL 2 0 -2.18624e+01 6.93309e+03
WILSL 2 1 -3.67200e-01 -1.50465e+01
WILSL 2 2 0.0 0.0

OPTION NO_POYNTING
OPTION LL
OPTION SET_AZEMETHOD PROPS
OPTION SET_DHVL_MODEL ALL DIPPR
OPTION SET_CFG_MODEL ALL DIPPR
OPTION SET_EGS_MODEL IDEAL
OPTION SET_GE_MODEL NRTL

```

Alle Schlüsselworte sind optional, d. h. wenn eine bestimmte Angabe nicht benötigt wird, so kann die betreffende Zeile weggelassen werden. So können z. B. die Konstanten zum Wilson Modell fehlen, falls dieses nicht benutzt werden soll. Wenn allerdings notwendige Angaben fehlen, so kann eine Berechnung mit nicht gesetzten Werten zu falschen Ergebnissen oder zu einer Fehlermeldung während der Programmausführung führen.

Da die verwendeten Modelle größtenteils den vom Programm Aspen+ verwendeten entsprechen, können fast alle Werte aus einer Aspen+ Datenbank beschafft werden. Ausnahme hiervon bilden die Biparameter sowie der Parameter v_i^{0L} , die nicht immer in den Datenbanken vorhanden sind. Sie müssen an anderer Stelle gesucht werden (z. B. Gmeling-Onken).

Grundsätzlich sollten alle Zahlenwerte in SI Einheiten angegeben werden (J, Pa, kmol, K).