

Stoff3 Benutzerhandbuch



GUI zur zur Erstellung des Stffdatensatzes
des
Lehrstuhls für Prozesstechnik

Autor:

Christian Redepenning

Deutsche Version 1.0

Aachen, den 01.12.2015

I. Inhaltsverzeichnis

1.	STOFF 3	2
1.1.	IMPORT REP-FILE	2
1.2.	ADJUST DATA	3
1.3.	OPTIONS	3
1.3.1.	<i>BASIC OPTIONS</i>	3
1.3.2.	<i>GE-MODEL</i>	4
1.3.3.	<i>EOS-MODEL</i>	4
1.3.4.	<i>DHVL-MODEL</i>	4
1.3.5.	<i>CPIG-MODEL</i>	4
1.4.	WRITE TO REP-FILE.....	5
1.5.	TUTORIAL ZUR ERSTELLUNG EINES .DAT-FILES.....	5
2.	TUTORIAL ZUR ERSTELLUNG EINES .REP-FILES	8
I.	ABBILDUNGSVERZEICHNIS.....	1

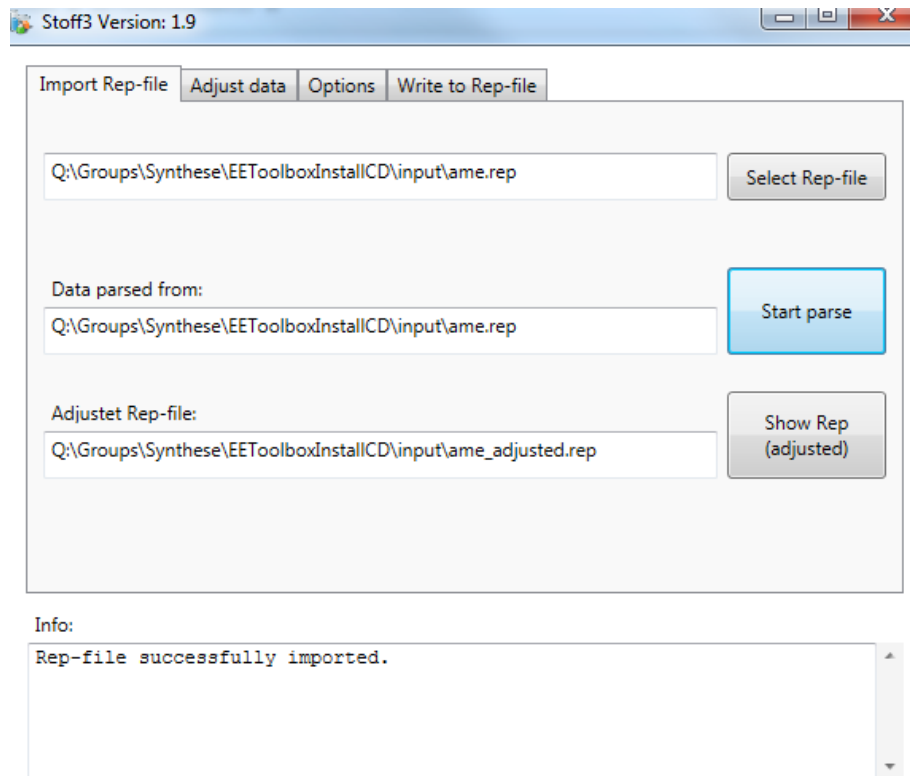


Abb. 1: Reiter zu Stoff3 Import Rep-file

1. STOFF 3

Bei Stoff3 handelt es sich um ein Programm, welches Parameter für die thermodynamischen Modellgleichungen aus einer Report-File (.rep) von AspenPlus einliest und in ein Format zurückschreibt, auf das alle Routinen zugreifen.

1.1. IMPORT REP-FILE

- **SELECT REP-FILE** Die mit AspenPlus generierte Report File (.rep) auswählen (Tutorial siehe Abschnitt 2)
- **START PARSE** Parameter aus der Report File einlesen
- **SHOW REP** Bei Bedarf kann die Report File angesehen werden
- **INFO** Hier wird Rückmeldung zum Einlese Vorgang gegeben. Sofern die übrigen Reiter aktiviert sind, kann weitergearbeitet werden. Wenn ein Fehler vorliegt sind im weiteren Verlauf eventuell nicht alle thermodynamischen Funktionen verfügbar

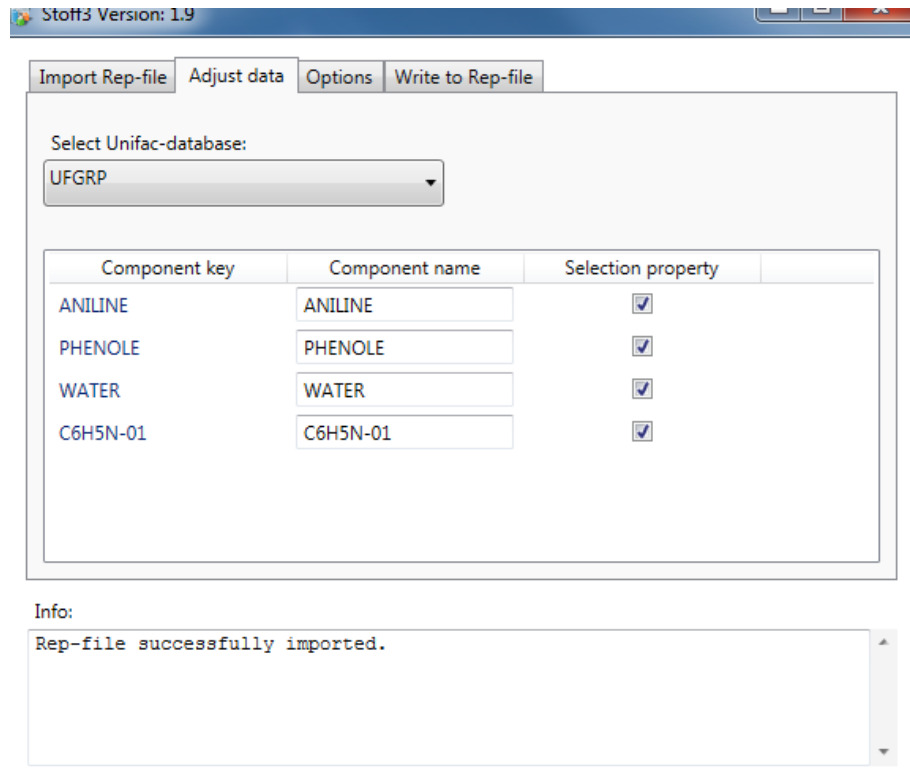


Abb. 2: Screenshot zum ADJUST DATA-Reiter

1.2. ADJUST DATA

- **SELECT UNIFAC-DATABASE** Gegebenenfalls können verschiedene Unifac Datenbanken ausgewählt werden
- **COMPONENT NAME** Die Komponentennamen können angepasst werden
- **SELECTION PROPERTY** Diese Komponente wird ignoriert

1.3. OPTIONS

1.3.1. BASIC OPTIONS

- **USE POYNTING CORRECTION** Poynting Korrektur wird ausgeführt
- **FIND GAPS** Aktiviert Algorithmus zur Bestimmung von Mischungslücken.
- **NO LIQUID-LIQUID** Ignoriert heterogene Lösungen (VLE und LLE)
- **HENRY** Berücksichtigt Henry Komponenten
- **SET AZEO METHOD** 2 Methoden zur Bestimmung von Azeotropen stehen zur Auswahl. **PROPS** ist eine Berechnungs-Methode des Lehrstuhls; **CAZEO** sollte der Berechnungs-Methode von AspenPlus entsprechen

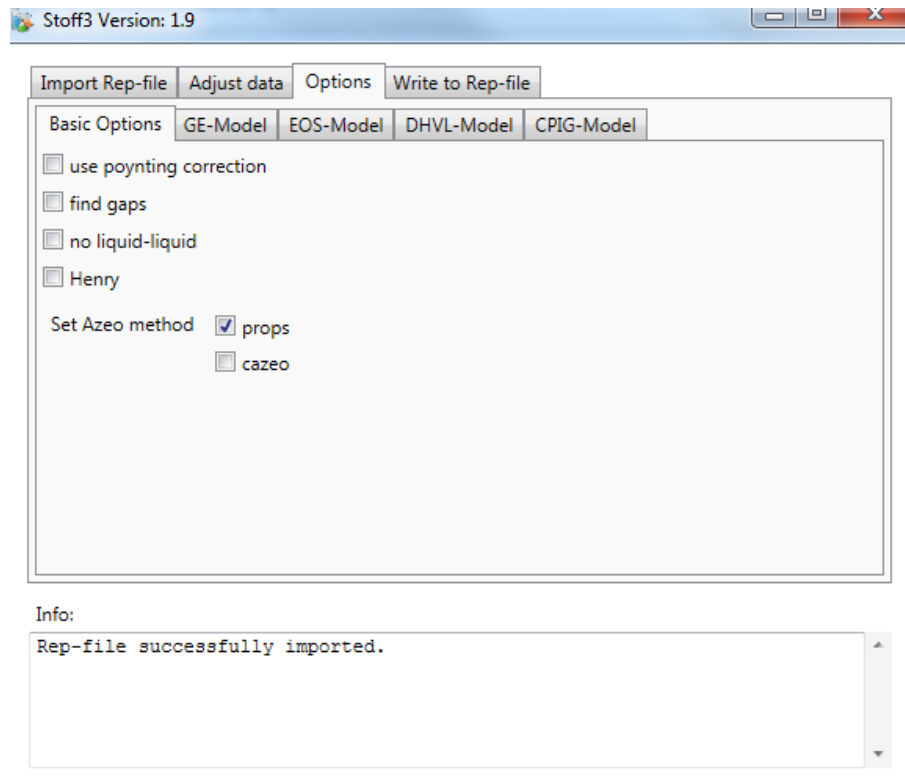


Abb. 3: Reiter zu Stoff3 Options

1.3.2. GE-MODEL

- **RAOULT** ideale Flüssigphase
- GE Modelle, die unterstützt werden und für die Parameter in der Report File gefunden wurden, sind hier gelistet. Es kann ein Modell ausgewählt werden.

1.3.3. EOS-MODEL

- **IDEAL** ideale Gasphase
- Zustandsgleichungen, die unterstützt werden und für die Parameter in dem Report-File gefunden wurden, sind hier gelistet. Es kann ein Modell ausgewählt werden
- **LIQUID PHASE** Die gewählte Zustandsgleichung wird auch für die nicht-idealität in der flüssigen Phase herangezogen

1.3.4. DHVL-MODEL

Es kann für die Verdampfungsenthalpie zwischen **DIPPR**- und **WATSON**- Ansatz gewählt werden. Wenn **ALL** deaktiviert ist, kann für jede Komponente individuell ein Modell für die Verdampfungsenthalpie festgelegt werden.

1.3.5. CPIG-MODEL

Für die Wärmekapazität kann zwischen **DIPPR**- und **POLY**- Ansatz gewählt werden. Wenn **ALL** deaktiviert ist, kann für jede Komponente individuell ein Modell für die Verdampfungsenthalpie festgelegt werden.

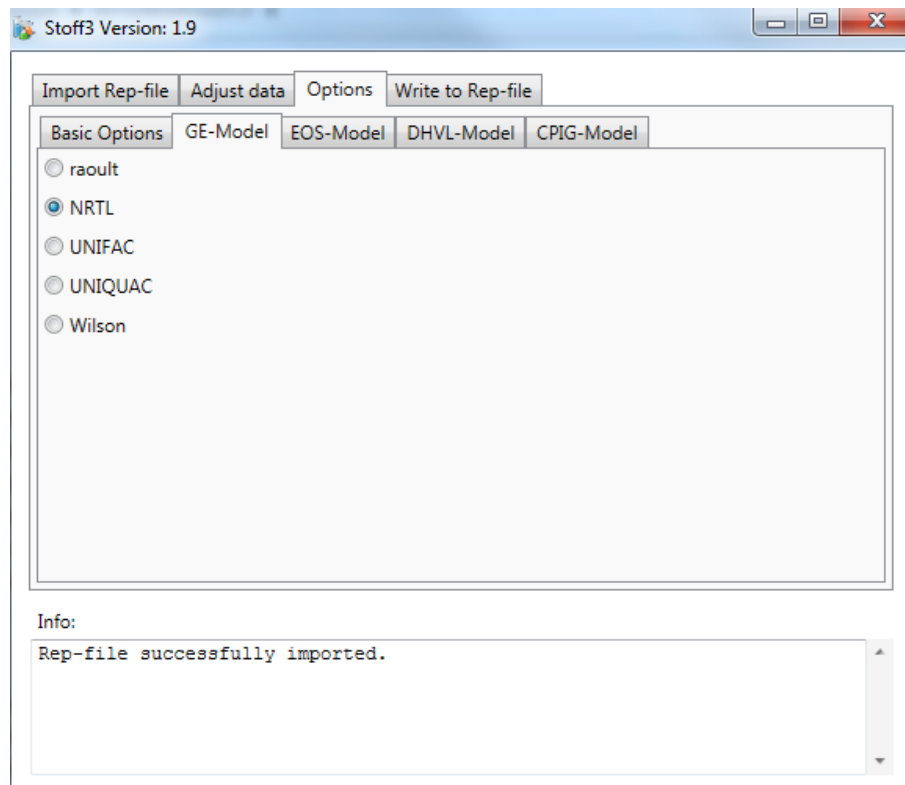


Abb. 4: Reiter zu Stoff3 GE-Model

1.4. WRITE TO REP-FILE

- **SELECT DAT-PATH** Zielort für die Datei mit den Stoffparametern
- **START WRITING** Datei wird geschrieben
- **SHOW** Inhalt der Datei wird im **INFO** Fenster angezeigt

1.5. Tutorial zur Erstellung eines .dat-Files

- Starte Stoff3.exe über der Button **GENERATE .DAT FILE** der EEToolbox.exe oder direkt aus dem Ordner „tools“
- Öffne die .rep-File, z. Bsp. „ame.rep“ aus dem Ordner „input“ wie in Abb. 1
- Drücke **START PARSE**
- Unter „Info:“ sind Informationen zum einlesen zu finden. Bei der Rückmeldung „Rep-file successfully imported“ ist alles in Ordnung. Bei anderen Fehlermeldungen sind eventuell nicht alle Optionen bzw. Stoffparameter erfolgreich eingelesen. Wenn nicht weitergearbeitet werden kann beinhaltet die .rep-File wahrscheinlich nicht die erforderlichen Informationen: Überprüfe ob in AspenPlus die Check Box „All physical property parameters (in SI units)“ (siehe Abb. 8: Screenshot zur Einstellung der Report-Optionen in AspenPlus) aktiviert war.
- Wechsel zum Reiter **ADJUST DATA**: Hier könnten die Namen der Komponenten geändert werden.
- Wechsel zum Reiter **OPTIONS**: Für dieses Beispiel ist hier alles in Ordnung. (siehe Abb. 3)

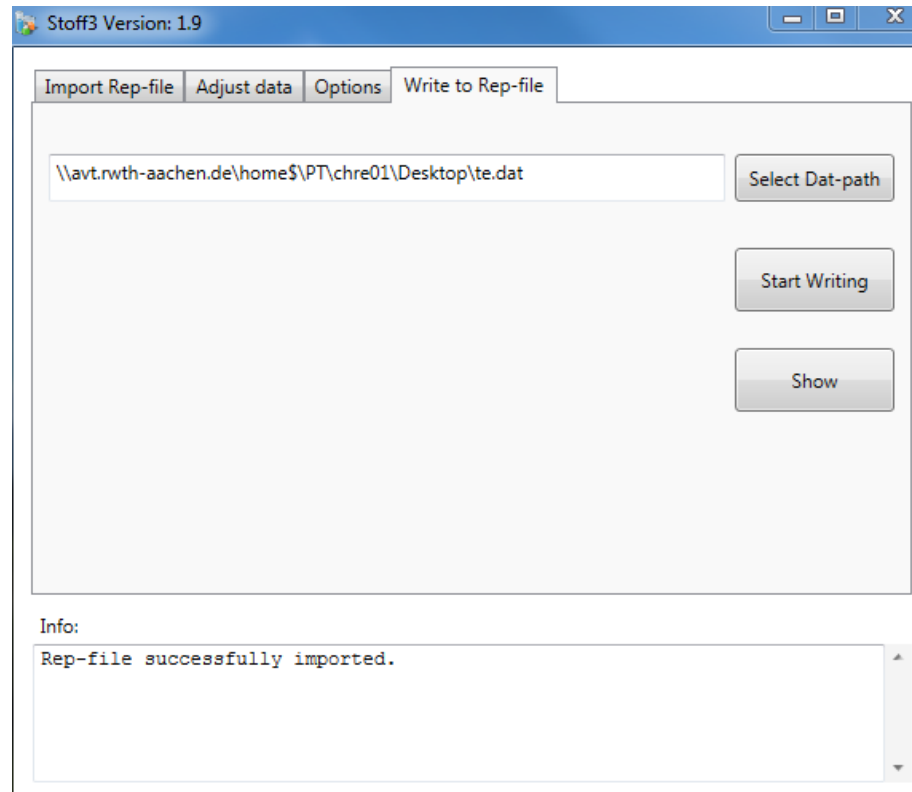


Abb. 5: Screenshot zum WRITE TO REP-FILE-Reiter

- Wechsel zum Reiter **GE-MODEL: NRTL** ist hier eine gute Wahl (siehe Abb. 4)
- Wechsel zum Reiter **EOS MODEL: IDEAL** (ideales Gas) ist eine gute Wahl. Ist bereits ausgewählt.
- Wechsel zum Reiter **DHVL-MODEL: DIPPR** Parameter für alle Komponenten ist eine gute Wahl. Ist bereits ausgewählt.
- Wechsel zum Reiter **CPIG-MODEL: DIPPR** Parameter für alle Komponenten ist eine gute Wahl. Ist bereits ausgewählt.
- Wechsel zum Reiter **WRITE TO REP-FILE:**
 - Pfad auswählen mit **SELECT DAT-PATH** (siehe Abb. 6)
 - **START WRITING** betätigen
 - Wenn **SHOW** betätigt wird, wird die .dat-File im Fenster „Info:“ angezeigt. Es werden alle Parameter in die .dat-File geschrieben. Mit diesem Tool werden nur Optionen gesetzt. Diese sind zu sehen, wenn man im Fenster nach unten scrollt. In diesem Beispiel wurde keine Poynting Korrektur gewählt (**NO_POYNTING**), heterogene Berechnungen werden berücksichtigt (**LL**), Azeotrope werden mit der Methode PROPS berechnet (**SET_AZEOMETHOD PROPS**), für die Enthalpiemodelle wurde DIPPR-Modell gewählt für alle Komponenten (**SET_DHVL_MODEL ALL DIPPR** bzw. **SET_CPIG_MODEL ALL DIPPR**), die Gasphase wird ideal betrachtet (**SET_EOS_MODEL IDEAL**) und die Flüssigphase mit dem GE-Modell NRTL beschrieben (**SET_GE_MODEL NRTL**).

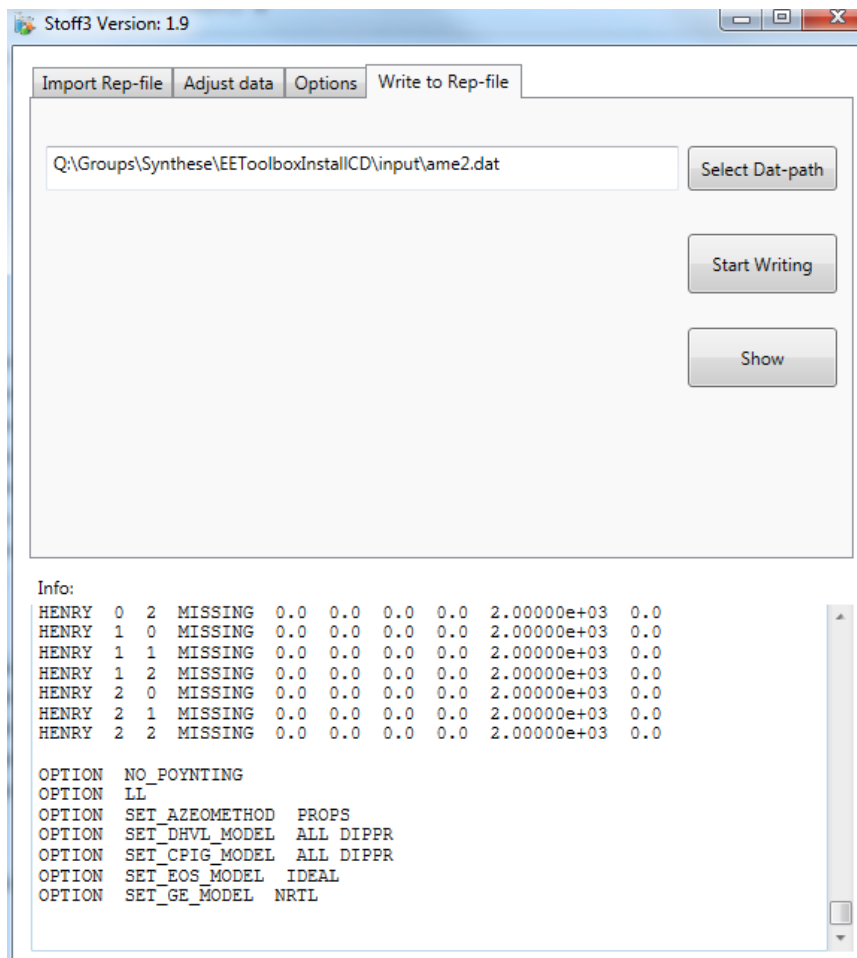


Abb. 6: Reiter zu Stoff3 Write to Rep-File

2. Tutorial zur Erstellung eines .rep-Files

- Starte AspenPlus User Interface
- Beginne eine neue Simulation mit **BLANK SIMULATION**
- Füge in der Simulation einen Trennapparat hinzu, z. Bsp. Einen Flash (Separators → Flash 2).
- Ergänze die Eingangs- und Ausgangsströme (siehe Abb. 7)

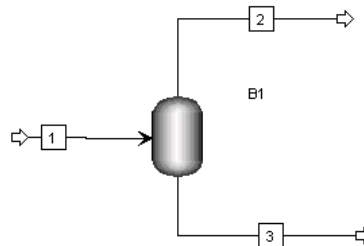


Abb. 7: Flash in AspenPlus mit Eingangs- und Ausgangsströmen

- Betätige den **NEXT BUTTON**
- Navigierte zu **SETUP → REPORT OPTIONS**
 - Aktiviere **LIST OF COMPONENT IDS** (siehe Abb. 8)
 - Aktiviere **ALL PHYSICAL PARAMETER (IN SI UNITS)** (siehe Abb. 8)

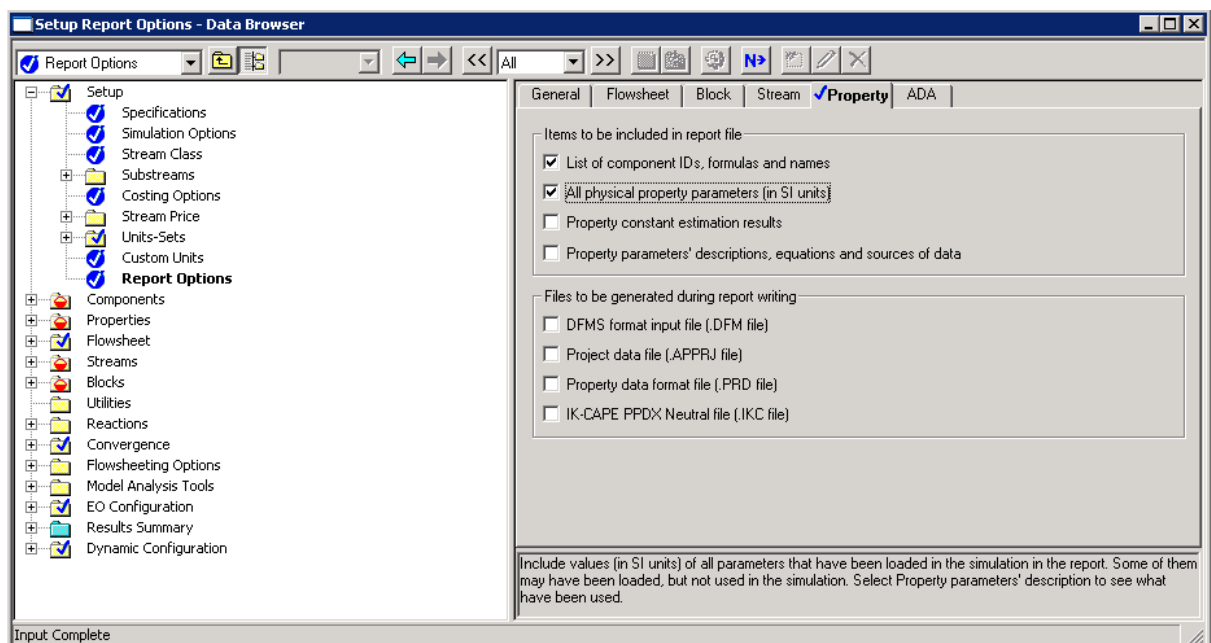


Abb. 8: Screenshot zur Einstellung der Report-Optionen in AspenPlus

- Betätige den **NEXT BUTTON**
- Wähle die gewünschten Komponenten aus (etwa wie in Abb. 9)

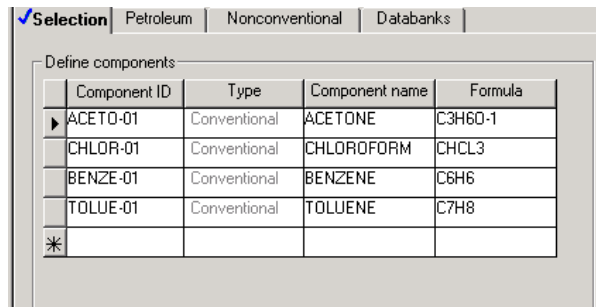


Abb. 9: Screenshot zur Auswahl von Komponenten in AspenPlus

- Betätige den **NEXT BUTTON**
 - Unter **PROPERTIES** sollten nun die gewünschten Thermodynamischen Modelle gewählt werden können. Die Parameter zu diesen Modellen werden in das Report-File geschrieben. Viele thermodynamische Modelle werden unterstützt.
- Betätige den **NEXT BUTTON**
 - Nun sollten der Flash und die Eingangsströme zu spezifizieren sein. Diese können im Prinzip beliebig spezifiziert werden. Die Spezifikationen haben keinen Einfluss auf die Parameter der Thermodynamik-Modelle.
- Betätige **RUN SIMULATION BUTTON**
 - Die Simulation muss einmal erfolgreich ausgeführt werden
- Speichere die Report-File unter **FILE** → **EXPORT** → **SAVE AS .REP**

I. Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Reiter zu Stoff3 Import Rep-file.....	2
Abb. 2: Screenshot zum ADJUST DATA-Reiter	3
Abb. 3: Reiter zu Stoff3 Options.....	4
Abb. 4: Reiter zu Stoff3 GE-Model	5
Abb. 5: Screenshot zum WRITE TO REP-FILE-Reiter.....	6
Abb. 6: Reiter zu Stoff3 Write to Rep-File.....	7
Abb. 7: Flash in AspenPlus mit Eingangs- und Ausgangsströmen.....	8
Abb. 8: Screenshot zur Einstellung der Report-Optionen in AspenPlus	8
Abb. 9: Screenshot zur Auswahl von Komponenten in AspenPlus	9