



Simulis® Thermodynamics

Composant logiciel pour le calcul de propriétés physico-chimiques

Interopérabilité, intégration, réutilisabilité. Simulis Thermodynamics met à la disposition de toute personne de l'industrie, de l'ingénierie ou de la recherche, des calculs de propriétés physico-chimiques de qualité. Ces calculs peuvent être intégrés dans tout logiciel de portée plus large (calculs d'équipement, modélisations de systèmes, etc) et sont valables pour tout type de fluides.

Simulis Thermodynamics est un serveur de calculs de propriétés physico-chimiques et d'équilibres entre phases sur les corps-purs et les mélanges.

Il se présente sous forme d'une macro complémentaire dans MS-Excel®, d'une toolbox dans MATLAB® ou d'un module "pluggable" dans tout autre programme nécessitant des propriétés thermodynamiques de qualité.

- ◆ **Des propriétés thermodynamiques fiables et précises.**
- ◆ **Un ensemble complet de fonctionnalités** (flash, régression de données, enveloppes de phases, etc.).
- ◆ **De vastes bases de propriétés de corps-purs et de coefficients d'interaction binaires.**
- ◆ **Une intégration facile dans les applications classiques** (MS-Excel®, MATLAB®, etc.).
- ◆ **Un logiciel compatible CAPE-OPEN.**

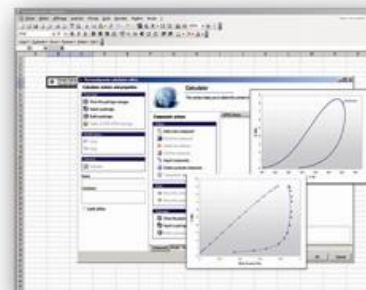


SimuLis

Composants pour la Simulation des Procédés

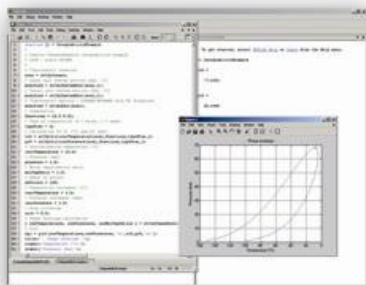
Plus de 300 fonctions de calcul, robustes et validées

- Calculs de propriétés thermodynamiques : propriétés de transfert (C_p , viscosité...), thermodynamiques (enthalpie, entropie, facteur de compressibilité...), d'écart à l'idéalité, (fugacité...)
 - Calculs d'équilibres entre phases : équilibres liquide-vapeur, liquide-liquide, liquide-liquide-vapeur (température de bulle et de rosée, pression de bulle et de rosée, flash isentropique, etc...)
- Simulis Thermodynamics fournit également les dérivées des propriétés par rapport à la température, la pression et la composition.
Notamment pour le calcul des flashes, des méthodes de résolution spécifiques ont été mises au point et validées pendant plusieurs années afin de garantir une convergence sûre et rapide.



Calculs de propriétés dans MS-Excel

Une des bibliothèques thermodynamiques les plus riches du marché



Calculs de propriétés dans MATLAB®

De nombreux modèles thermodynamiques sélectionnés pour leur fiabilité et leur robustesse :

- Équations d'état : Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson, Lee-Kesler-Plöcker, Benedict Webb Rubin Starling, etc.
- Modèles de coefficient d'activité : NRTL, UNIQUAC, UNIFAC, etc.
- Modèles combinés : MHV2, PSRK, etc.
- Électrolytes : Edwards, UNIQUAC Électrolytes, ULPDHS, etc.
- Systèmes spécifiques : Amines, Sour-Water, Eau pure, etc.

Une base de données de plus de 1700 constituants, issue de la base DIPPR® et enrichie de données provenant de projets de recherche conduits par les experts en thermodynamique de ProSim.

Simulis Thermodynamics permet la configuration d'un modèle adapté à chaque problème en combinant les différentes méthodes disponibles.

L'architecture ouverte de Simulis Thermodynamics permet d'intégrer des bases privées de constituants, de coefficients d'interaction binaire ou de nouveaux modèles thermodynamiques. Un outil spécifique pour la gestion des paramètres des différents modèles UNIFAC (Dortmund, Larsen,...) en fonction des groupes et sous-groupes de décomposition est également fourni.

Une intégration facile dans vos applications

L'architecture orientée composants permet une intégration directe dans toute application supportant la technologie COM/DCOM (MS-Excel®, MATLAB®, C++, Delphi, etc). L'automatisation des appels aux routines s'effectue simplement, en ajustant l'API en langages Visual Basic, C++, Fortran, etc.

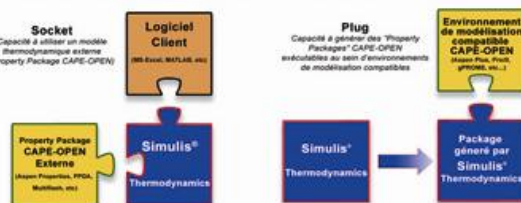
Simulis Thermodynamics permet d'utiliser toute la puissance d'un serveur thermodynamique largement éprouvé dans une simple feuille de calcul.



La compatibilité CAPE-OPEN vous permet de continuer à utiliser vos outils

Simulis Thermodynamics implémente les interfaces standardisées CAPE-OPEN, permettant d'utiliser une thermodynamique extérieure dans Simulis Thermodynamics (Socket) ou d'utiliser les modèles de Simulis Thermodynamics dans des environnements de modélisation tiers (Plug).

Toute application qui intègre Simulis Thermodynamics bénéficie automatiquement de sa compatibilité avec le standard CAPE-OPEN.



La génération et le déploiement automatique des Property Packages permet aux spécialistes thermodynamiques des sociétés de valoriser leur expertise en garantissant l'utilisation par tous de propriétés adaptées à chaque système particulier.

Une gamme complète de services

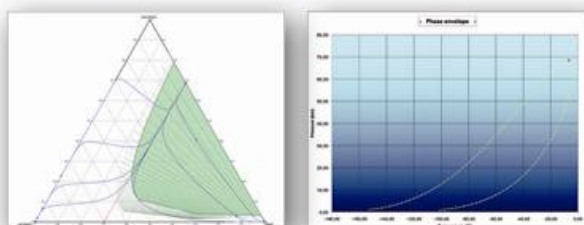


Diagramme ternaire

Courbe d'enveloppe de phase

- Visualisation graphique des différentes propriétés sur des plages de température, de pression ou de composition
- Génération de tableaux de propriétés
- Régression de propriétés expérimentales
- Estimation de propriétés de corps purs
- Tracé d'enveloppes de phases
- Calcul de courbes de résidu et tracé de diagrammes ternaires
- Génération de propriétés des coupes pétrolières
- Conversion d'unités, etc.

Ces services deviennent automatiquement disponibles dans votre logiciel dès lors qu'il intègre Simulis Thermodynamics.

Autres composants fournis avec Simulis Thermodynamics

- **Simulis® Properties** : serveur de propriétés intrinsèques de corps purs (constantes ou dépendantes de la température). Ce composant peut être "pluggé" dans toute application qui a besoin de calculer les propriétés de corps purs uniquement.
- **Simulis® Conversions** : environnement de gestion de grandeurs physiques et de conversion d'unités. Ce composant logiciel peut être "pluggé" dans toute application qui manipule des grandeurs physiques afin de gérer automatiquement les unités qui s'y rattachent.



Téléchargez la version d'évaluation sur www.prosim.net