

# Simulis<sup>®</sup> Thermodynamics

## Calculs de propriétés de mélanges et d'équilibres entre phases

*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'équipements, modélisations de systèmes, ...) et sont valables pour tous types 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 la forme d'une macro complémentaire dans Microsoft Excel<sup>®</sup>, d'une boîte à outils dans MATLAB<sup>®</sup> 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 phase, etc.).
- ▀ De vastes bases de propriétés de corps purs et de coefficients d'interaction binaire.
- ▀ Une intégration facile dans les applications classiques (Microsoft Excel<sup>®</sup>, MATLAB<sup>®</sup>, etc.).
- ▀ Une solution ouverte et compatible CAPE-OPEN.

## Des fonctions de calcul robustes et validées

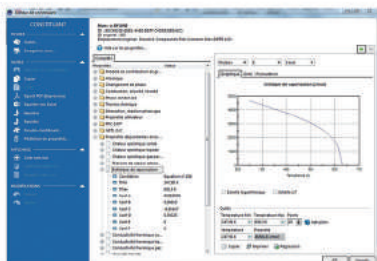
- Calculs de propriétés thermodynamiques : propriétés de transfert ( $C_p$ , viscosité...), thermodynamiques (enthalpie, entropie, facteur de compressibilité...), d'écart à l'idéalité, (fugacité...)
- Calculs d'équilibres entre phases : équilibres liquide-vapeur, liquide-liquide, liquide-liquide-vapeur (température de bulle et de rosée, pression de bulle et de rosée, flash isentropique...)

Simulis Thermodynamics fournit également les dérivées des propriétés par rapport à la température, à la pression et au nombre de moles.

Notamment pour le calcul des flashes, des méthodes de résolution spécifiques sont mises au point et validées depuis plusieurs années afin de garantir une convergence sûre et rapide.



## Une des bibliothèques thermodynamiques les plus riches du marché



Edition du profil du constituant

- Une **base de données de propriétés** pour plus de 2000 constituants, issue de la base de données DIPPR® de l'AIChE, et enrichie par les experts thermodynamiques de ProSim.
- Une base de données de **paramètres d'interaction binaire** pour les modèles qui en nécessitent.
- De nombreux modèles prédictifs basés sur la structure des molécules (contribution de groupes).
- Une bibliothèque étendue de **modèles thermodynamiques** sélectionnés pour leur fiabilité et leur robustesse et validés industriellement. Les algorithmes employés permettent de prendre en compte les systèmes fortement non-idéaux, diphasiques liquide-liquide, électrolytiques ou pétroliers.
  - o Equations d'état : SRK, PR, LKP, BWRS, PPR78, PPC-SAFT...
  - o Modèles de coefficient d'activité : NRTL, UNIQUAC, UNIFAC...
  - o Modèles d'approches combinées : MHV2, PSRK, NRTL-PR...
  - o Electrolytes : Edwards, UNIQUAC électrolytes, ULPDHS...
  - o Systèmes spécifiques : Amines, Sour-Water, Eau Pure...

De plus, la combinaison de différentes méthodes permet d'adapter un modèle précisément à chaque problème.

## Une intégration facile dans les applications

L'architecture orientée composant permet une intégration directe dans toute application en 32 et 64 bits supportant la technologie COM/DCOM (Microsoft Excel®, MATLAB®, C++, Delphi,...). L'automatisation des appels aux routines s'effectue simplement grâce à l'API en langages Visual Basic, C++, etc.

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



## Une gamme complète de services

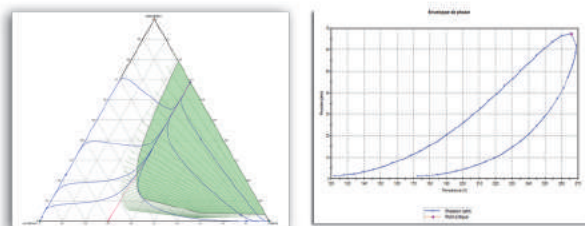


Diagramme ternaire

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 à partir de données expérimentales
- Prédiction de propriétés de corps purs
- Tracé d'enveloppes de phase
- Calcul de courbes de résidu et tracé de diagrammes ternaires
- Génération de propriétés de coupes pétrolières
- Conversion d'unités, etc.

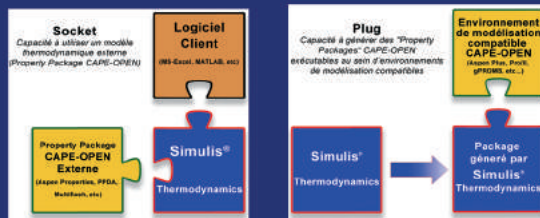
**Ces services, et bien d'autres, deviennent automatiquement disponibles dans le logiciel dès lors qu'il intègre Simulis Thermodynamics.**

## Une solution ouverte et compatible CAPE-OPEN

L'architecture ouverte de Simulis Thermodynamics permet d'intégrer facilement des bases privées de constituants 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.

Simulis Thermodynamics implémente les interfaces standardisées CAPE-OPEN, permettant d'utiliser une thermodynamique extérieure (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.**

## Autres composants fournis avec Simulis Thermodynamics

- **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.
- **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 propriétés de corps purs.

## Option ProPhyPlus

ProPhyPlus est une structure d'accueil du composant logiciel Simulis Thermodynamics mise au point pour permettre de réaliser tous les calculs sans la moindre programmation. Le logiciel ProPhyPlus permet ainsi l'obtention rapide, de façon interactive, des équilibres entre phases et des propriétés des fluides dans un environnement adapté.



[www.prosim.net](http://www.prosim.net) | [info@prosim.net](mailto:info@prosim.net)

Immeuble Stratège A - 51, rue Ampère - 31670 LABEGE - FRANCE - Tel: +33 (0)5 62 88 24 30  
Science Center - 3711 Market Street, 8<sup>th</sup> Floor - Philadelphia, PA 19104 - USA - Tel: +1 215 600 3760