

Démarrer avec ProPhyPlus®

Cas 1 : Principales caractéristiques

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency








ProSim

Introduction

ProPhyPlus est une structure d'accueil du composant logiciel Simulis Thermodynamics et permet d'effectuer des calculs de propriétés de mélange et d'équilibres entre phases sans la moindre programmation. Ce document présente les principales caractéristiques de ProPhyPlus en se basant sur un exemple pratique : le calcul des températures de bulle et de rosée pour un mélange composé d'eau et d'éthanol.

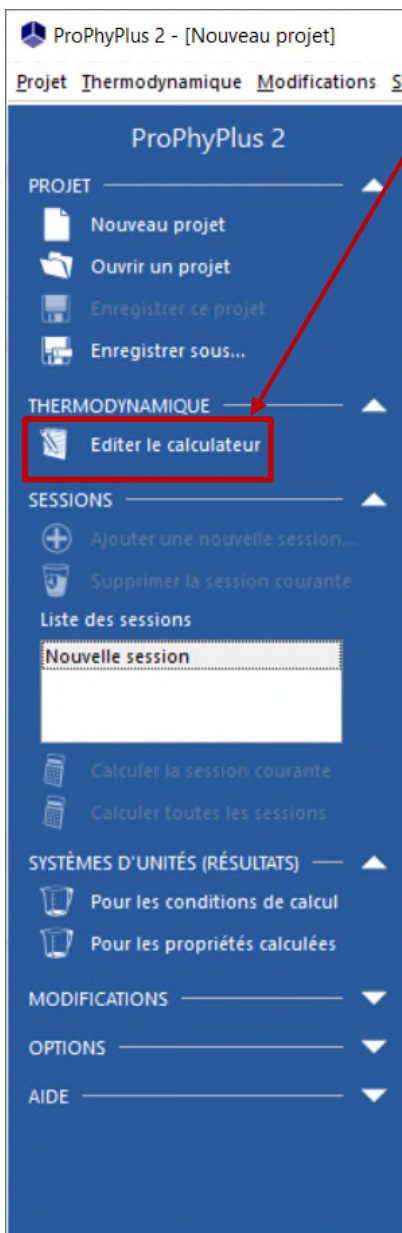
Les étapes à suivre sont les suivantes :

-  **Etape 1 : sélection des constituants**
-  **Etape 2 : sélection du modèle thermodynamique**
-  **Etape 3 : gestion du système d'unités**
-  **Etape 4 : définition des conditions de calcul**
-  **Etape 5 : exploitation des résultats**

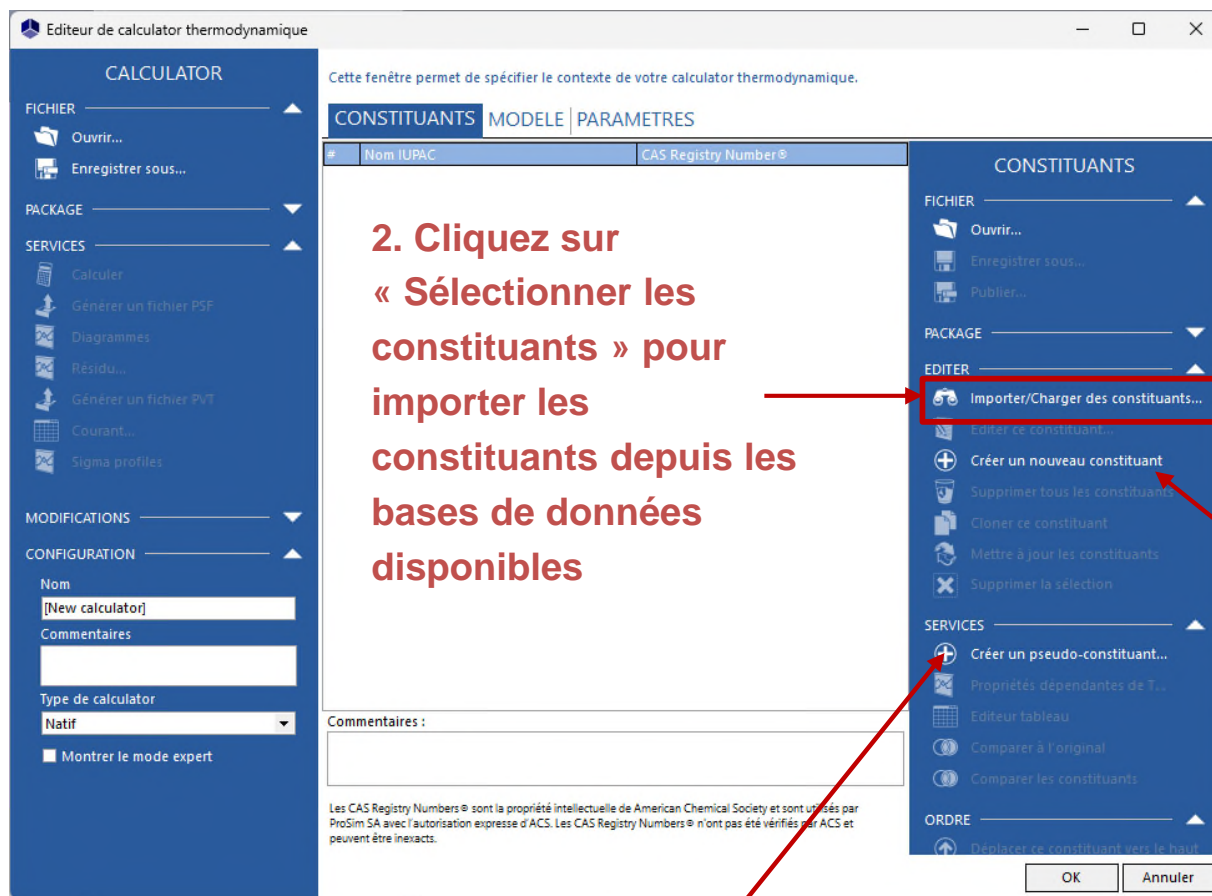


Pour plus de tutoriels, consulter les documents « Démarrer avec Simulis Thermodynamics »

Etape 1 : sélection des constituants



1. Cliquez sur « Editer le calculateur » pour configurer le calculateur thermodynamique



Pour créer de nouveaux constituants, cliquez sur « Importer/Charger des constituant »



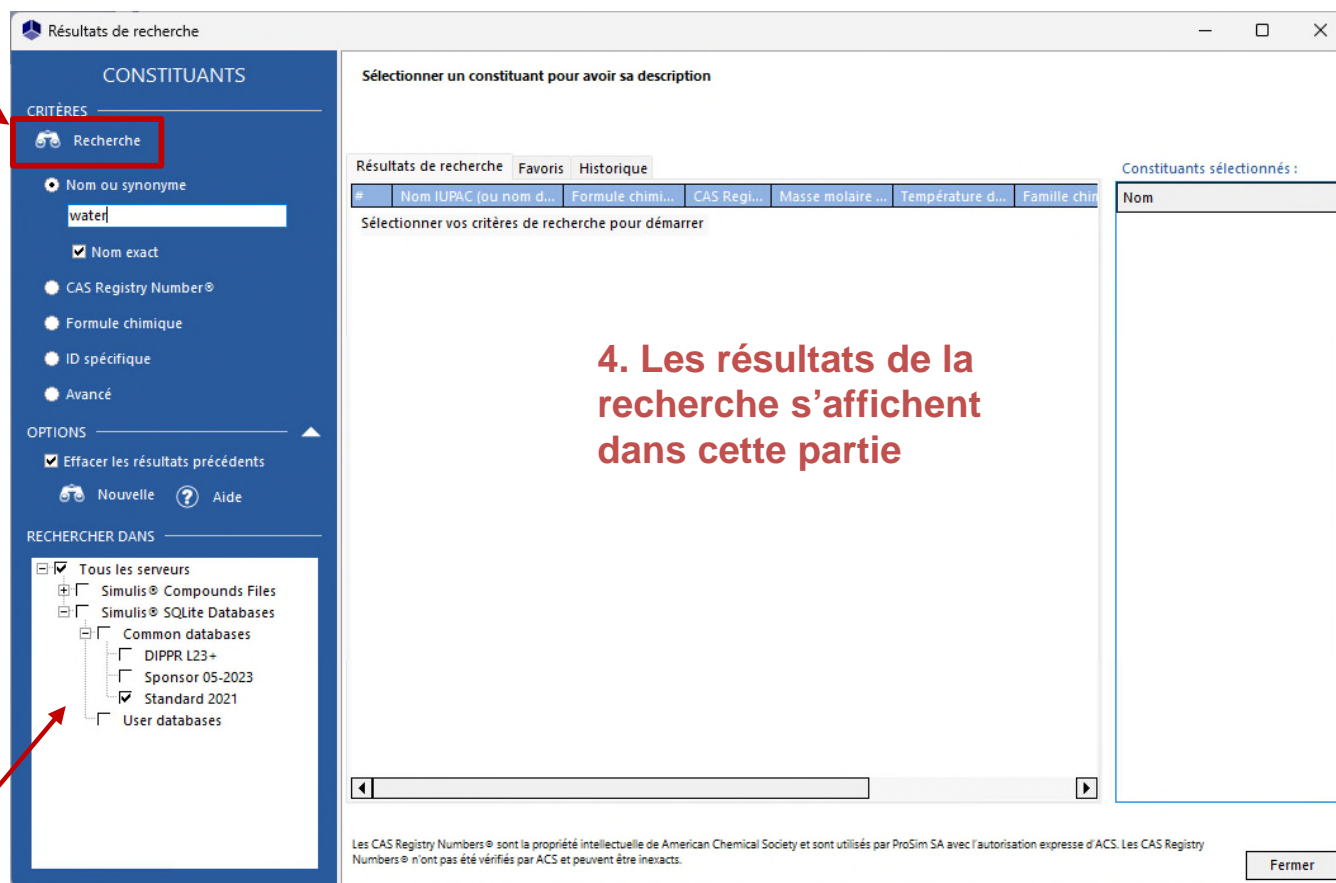
Pour créer des pseudo-constituants associés à des coupes pétrolières, cliquez sur « Créer un pseudo-constituant »

Etape 1 : sélection des constituants

3. Cliquez sur le bouton « Recherche » pour obtenir la liste des constituants trouvés

2. Vous pouvez utiliser différents critères de recherche (dans cet exemple, rechercher « Water » par son nom)

1. Sélectionnez le(s) serveur(s) de constituants dans lesquels vous souhaitez effectuer la recherche



4. Les résultats de la recherche s'affichent dans cette partie



Vous pouvez effectuer plusieurs recherches successives sans fermer cette fenêtre

Etape 1 : sélection des constituants

1. Double-cliquez sur le constituant (Water) pour l'ajouter à votre sélection finale, sur laquelle s'opèreront les calculs

Résultats de recherche

CONSTITUANTS

CRITÈRES

Recherche

Nom ou synonyme
ethanol

☒ Nom exact

☐ CAS Registry Number®

☐ Formule chimique

☐ ID spécifique

☐ Avancé

OPTIONS

☒ Effacer les résultats précédents

Nouvelle Aide

RECHERCHER DANS

☒ Tous les serveurs

- ☐ Simulis® Compounds Files
- ☐ Simulis® SQLite Databases
 - ☐ Common databases
 - ☐ DIPPR L23+
 - ☐ Sponsor 05-2023
 - ☒ Standard 2021
 - ☐ User databases

Résultats de recherche Favoris Historique

#	Nom IUPAC (ou nom d...)	Formule chimi...	CAS Regi...	Masse molaire ...	Température d...	Famille chimique
4	ETHANOL	C2H6O	64-17-5	46,0684	351,440	n-Alcools

Constituants sélectionnés :

Nom
WATER
ETHANOL

Les CAS Registry Numbers® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par ProSim SA avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexactes.

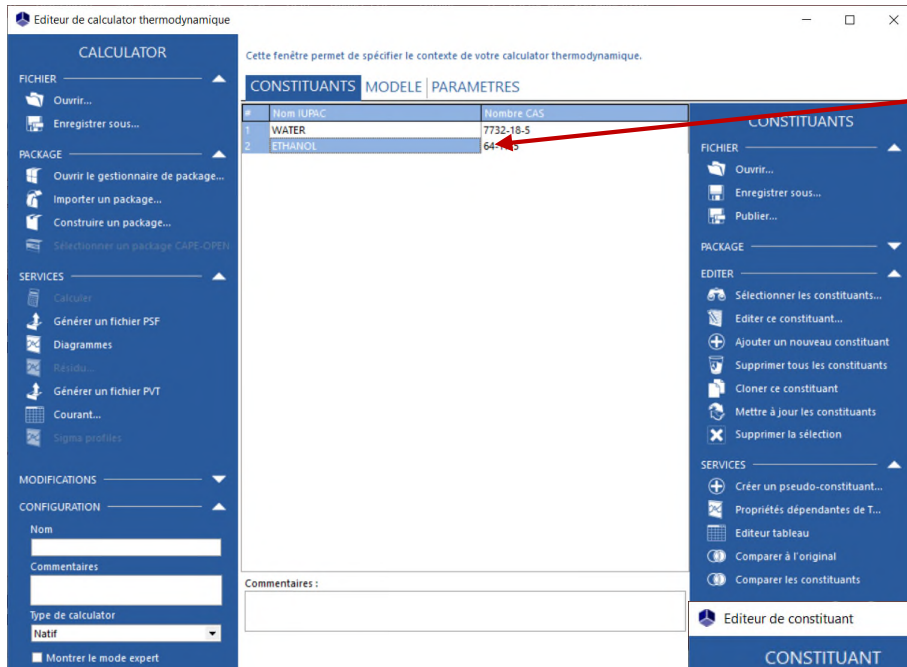
Fermer

2. Répétez l'opération pour le deuxième constituant (Ethanol)

3. Les constituants sélectionnés sont affichés ici

4. Cliquez sur « Fermer » pour terminer la sélection des constituants

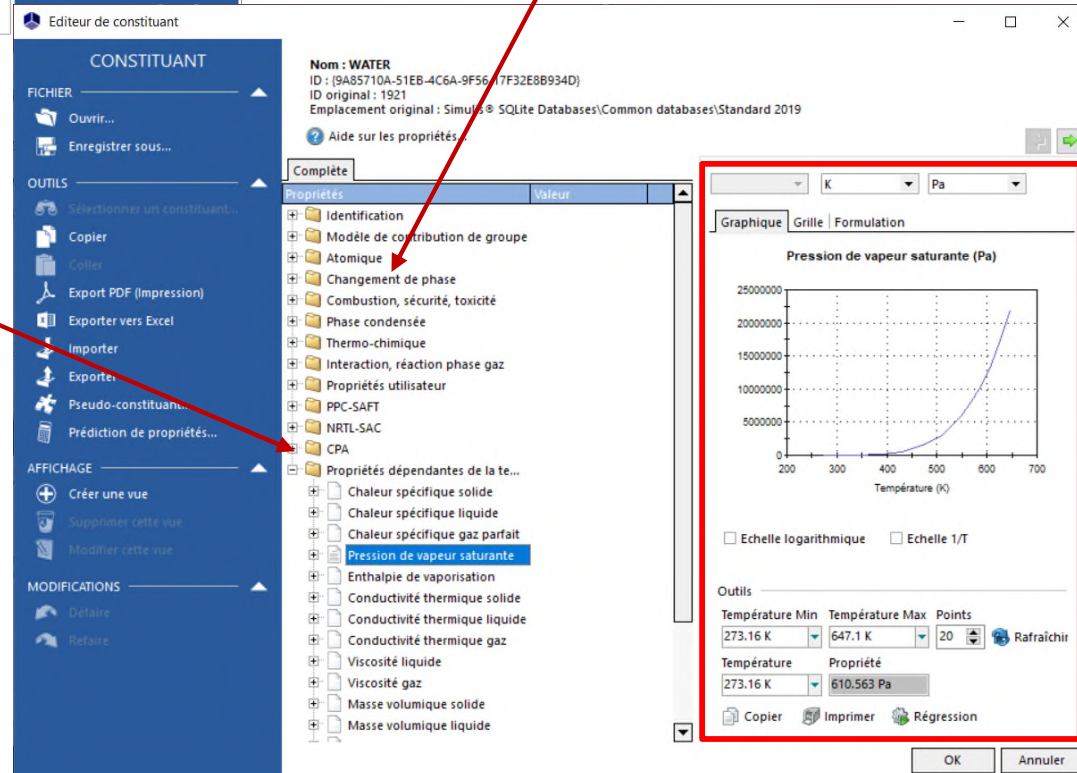
Etape 1 : sélection des constituants



1. Double-cliquez sur un constituant pour ouvrir l'éditeur de constituant

2. Toutes les propriétés du constituant sont triées par catégorie. Déployez les différentes catégories pour en consulter les détails

3. Cliquez sur une propriété dépendante de la température pour accéder à la corrélation utilisée et afficher le graphique



Pour plus de détails sur les propriétés des constituants, vous pouvez consulter « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas 4 »

Etape 2 : sélection du modèle thermodynamique

1. Cliquez sur l'onglet « **Modèle** » pour accéder à l'éditeur de modèles thermodynamiques

L'onglet « **Binaires** » apparaît automatiquement dès lors que le modèle sélectionné nécessite des paramètres d'interaction binaire

Editeur de calculator thermodynamique

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de votre calculator thermodynamique.

CONSTITUANTS **MODELE** BINAIRES PARAMETRES

Nom : NRTL

Catégorie : Tous les profils

Profil : NRTL

Type d'approche : A partir des coefficients d'activité

Equation d'état : Gaz parfait

Fonction alpha : Non défini

Règles de mélange : Non défini

Modèle des coefficients d'activité : NRTL

Fugacité liquide pur état standard : Pression de vapeur

Volume molaire liquide : Mélange idéal

Propriétés de transport : Méthodes classiques

Calcul enthalpique : $H^*=0$, gaz parfait, 25°C, 1 atm

Modèle thermodynamique utilisateur : Aucun

Index du modèle : 1

Commentaires :

MODELE THERMODYNAMIQUE

CONFIGURATION

Paramètres

Assistant thermodynamique

Aide thermodynamique

Utiliser un modèle spécifique eau pure

Avancé

Modèle eau-hydrocarbures

Sol A : 6.25043

Sol B : 4015.3

Prise en compte de la démixtion

Paramètres du modèle prédictif...

Modèle en espèces vraies

Paramètres du modèle réadif...

OK Annuler

2. Sélectionnez le profil thermodynamique « **NRTL** »

3. Adaptez le profil thermodynamique si nécessaire

Etape 2 : sélection du modèle thermodynamique

1. Cliquez sur l'onglet « Binaires » pour accéder à la recherche de binaires (si c'est nécessaire pour le modèle choisi)

2. Chargement automatique si les binaires sont disponibles dans la base de données Standard

Editeur de calculator thermodynamique

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de votre calculator thermodynamique.

CONSTITUANTS | **MODELE** | BINAIRES | PARAMETRES

Ces paramètres correspondent aux valeurs générales et sont utilisées si l'utilisateur n'a pas fourni de paramètres spécifiques (boutons à droite des options du profil thermodynamique)

Affichage : ☒ Grille ☐ Matrice

Formulation : $g_{ij} - g_{ij} = C_{ij0} + C_{ijT}(T - 273.15)$, $a_{ij} = a_{ij0} + a_{ijT}(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CijT
WATER	ETHANOL	1616,81	-635,56	0,1448	2,0177

Non fourni Fournis Importés Estimés Erreur

Commentaires :

BINAIRES

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimer les binaires...
- Enregistrer les binaires...

OPTIONS

Unité

cal/mole

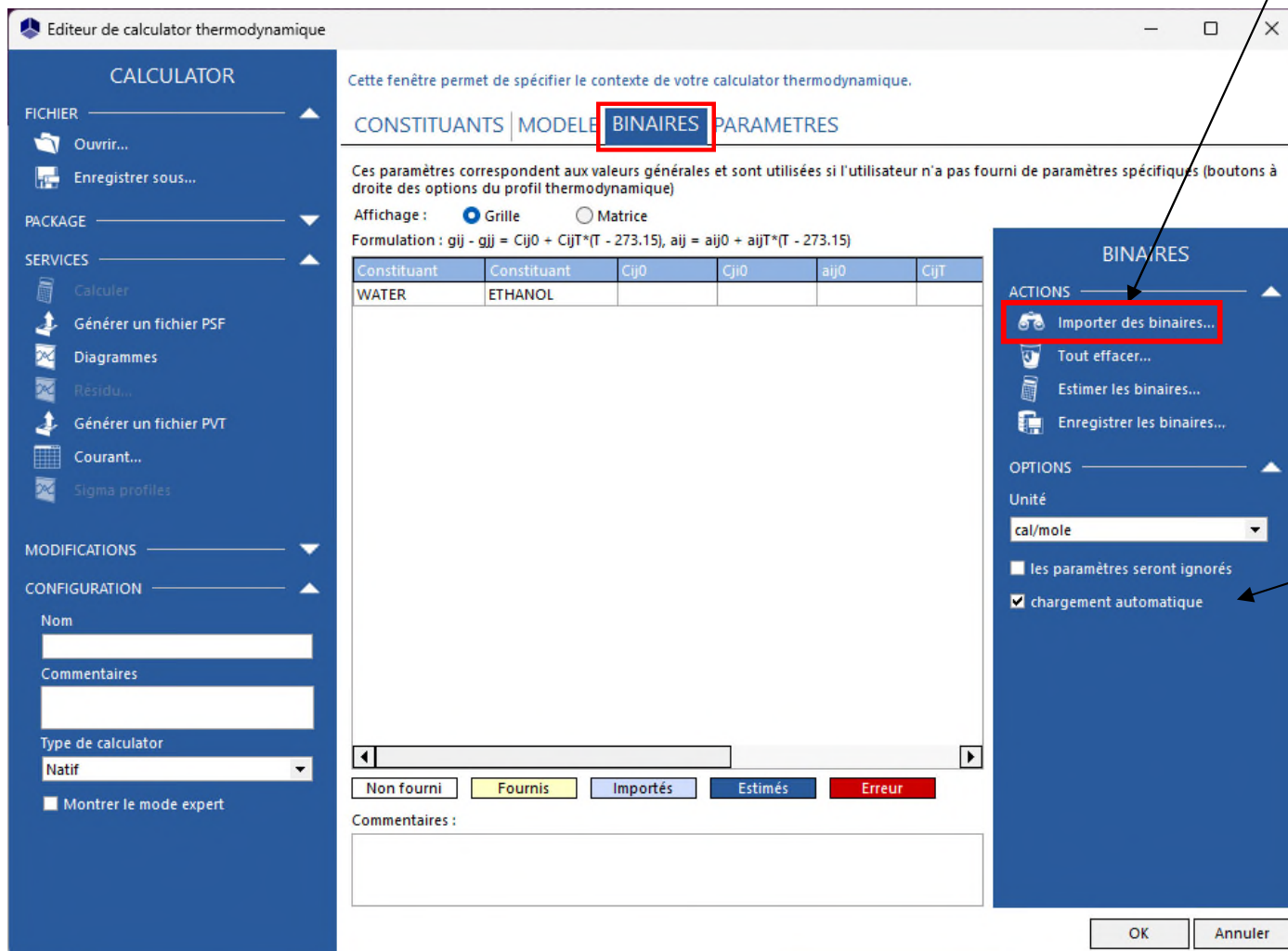
☐ les paramètres seront ignorés

☒ chargement automatique

OK Annuler

Etape 2 : sélection du modèle thermodynamique

**Pour les calculateurs déjà dans la simulation, si des paramètres sont manquants, si le chargement automatique est désactivé :
Importer des binaires
Possibilité d'importer des binaires depuis une base privée**



Chargement automatique désactivé

Etape 2 : sélection du modèle thermodynamique

2. Indiquez les paramètres d'interaction binaire souhaités et cliquez sur « Rechercher »

4. Sélectionnez les paramètres d'interaction binaire à importer et cliquez sur « OK »

Recherche de binaires

Cette fenêtre permet de sélectionner les binaires à prendre en compte lors des calculs thermodynamiques.

BINAIRES

CRITÈRES

Recherche par

☐ Nom ☐ Numéro CAS

Constituant
(Tout afficher)

Constituant
(Tout afficher)

Rechercher

OPTIONS

RECHERCHER DANS

- ☒ Tous les serveurs
 - ☒ Simulis® Binaries Files
 - ☒ Common files
 - ☒ Standard
 - ☒ User files

Résultats de recherche

Binaires actualisés

<input checked="" type="checkbox"/> Base de données	Constituant	Constituant	C _{ij} 0	C _{ji} 0	a _{ij} 0	C _{ij} T	C _{ji} T
<input checked="" type="checkbox"/> Standard	WATER	ETHANOL	1616.81	-635.56	0.1448	2.0177	0.9907

3. Les résultats de la recherche s'affichent dans cette partie

Ok

1. Sélectionnez le(s) serveur(s) de paramètres d'interaction binaire dans lesquels vous souhaitez effectuer la recherche

Etape 2 : sélection du modèle thermodynamique

Vous pouvez afficher les paramètres sous forme de grille ou de matrice

Vous pouvez enregistrer des nouveaux binaires dans des bases de données « utilisateur »

Editeur de calculator thermodynamique

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de votre calculator thermodynamique.


CONSTITUANTS | MODELE | **BINAIRES** | PARAMETRES

Ces paramètres correspondent aux valeurs générales et sont utilisées si l'utilisateur n'a pas fourni de paramètres spécifiques (boutons à droite des options du profil thermodynamique)

Affichage : ☒ Grille ☐ Matrice

Formulation : $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij}0 + C_{ij}T^*(T - 273.15)$, $a_{ij} = a_{ij}0 + a_{ij}T^*(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CijT
WATER	ETHANOL	1616,81	-635,56	0,1448	2,0177

 Vous pouvez compléter ou remplacer les valeurs de la base en cliquant directement dans les cases du tableau

Non fourni Fournis Importés Estimés Erreur

Commentaires :

BINAIRES

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimer les binaires...
- Enregistrer les binaires...

OPTIONS

Unité

cal/mole

☐ les paramètres seront ignorés

☒ chargement automatique

OK Annuler

Cliquez sur « OK » pour valider vos données et retourner à la fenêtre principale

Etape 3 : gestion du système d'unités

Différents systèmes d'unités peuvent être utilisés pour :

- Les conditions de calcul
- Les propriétés calculées

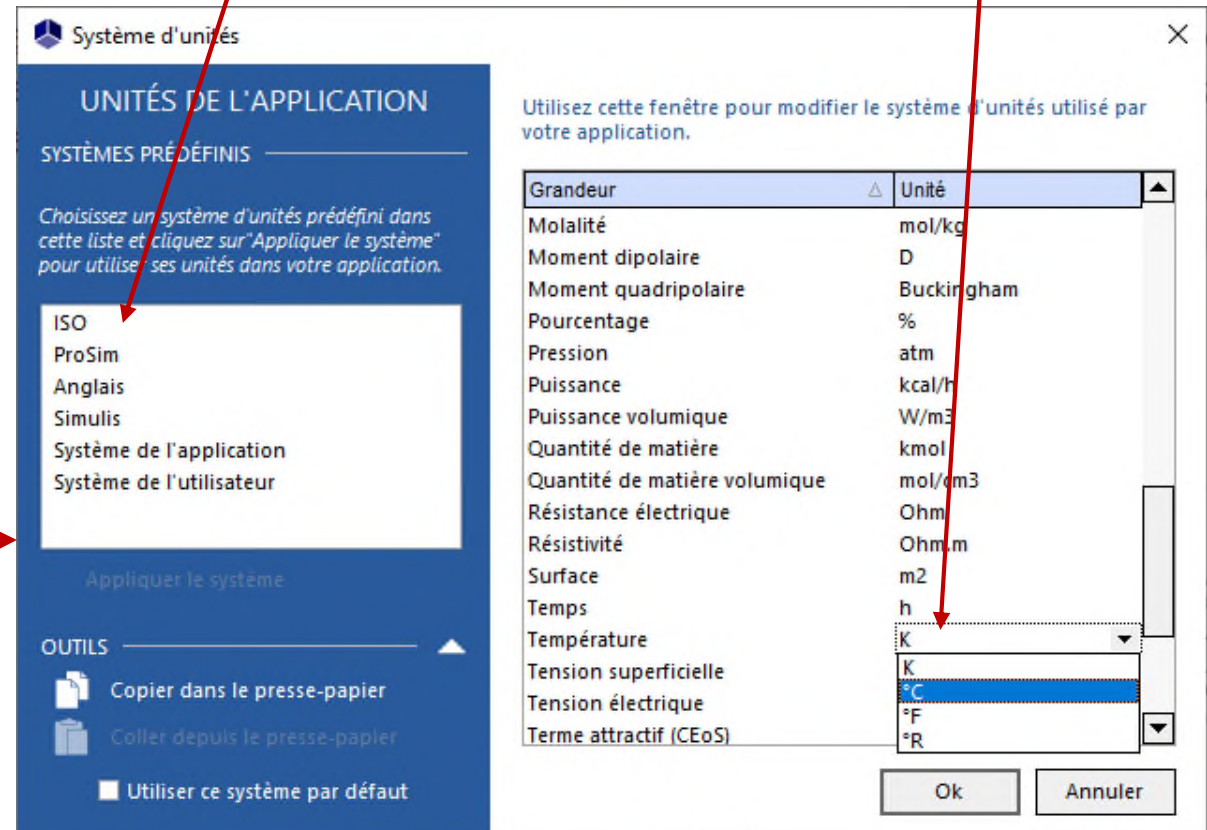
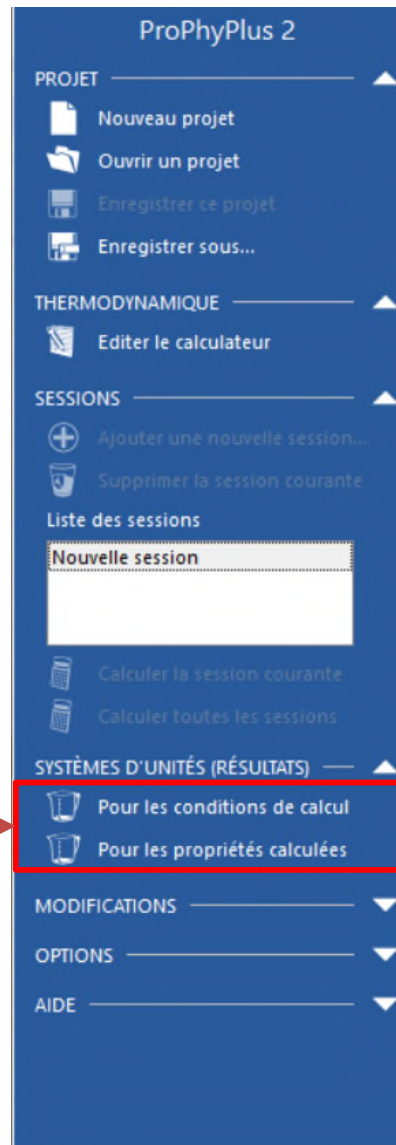


- Il est possible de personnaliser le système d'unités d'entrée et de sortie
- Les systèmes d'unités d'entrée et de sortie peuvent être différents

Vous pouvez sélectionner des systèmes d'unités prédéfinis...

...ou personnaliser votre système, unité par unité, en utilisant le menu déroulant

Cliquez



Etape 4 : définition des conditions de calcul

13

1. Vous pouvez choisir le type de calcul à effectuer (calcul de propriétés de mélange ou d'équilibres entre phases). Sélectionnez « Equilibres ».

2. Sélectionnez la propriété à calculer (dans cet exemple, « Températures de bulle et de rosée »)

ProPhyPlus 2 - V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc (Modifié)

Projet Thermodynamique Modifications Systèmes d'unités Sessions Options Aide

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Projet V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc

Type de calcul **Equilibres** Nom de la session New session

Donnée

Liquide - Vapeur

Températures de bulle et de rosée

Pressions de bulle et de rosée

wP - Flash à température et pression données

wT - Flash à température et pression données

TP - Flash à température et pression données

TV - Flash à température et volume données

PV - Flash à pression et volume données

HT - Flash à enthalpie et température données

HP - Flash à enthalpie et pression données

HV - Flash à enthalpie et volume données

HU - Flash à enthalpie et énergie données

HS - Flash à enthalpie et entropie données

ST - Flash à entropie et température données

SP - Flash à entropie et pression données

SV - Flash à entropie et volume données

SU - Flash à entropie et énergie données

UT - Flash à énergie et température données

UP - Flash à énergie et pression données

UV - Flash à énergie et volume données

Constante de Henry

wH - Flash à taux de vaporisation et enthalpie données

wS - Flash à taux de vaporisation et entropie données

wU - Flash à taux de vaporisation et énergie données

wV - Flash à taux de vaporisation et volume données

Liquide - Liquide

TP - Flash à température et pression données

Valeurs

☒ Fractions

☐ Grandeurs

Type

☒ Molaire

☐ Massique

Total 0 kmol

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	WATER	0	0	0	1
<input checked="" type="checkbox"/>	ETHANOL	Auto	Auto	Auto	Auto

Type de résultats

☒ Molaire

☐ Massique

☐ Initialisation automatique

Constituant

☐ Afficher les messages d'erreur

☐ Compositions identiques quelque soit le type de calcul

Pour calculer:

Etape 4 : définition des conditions de calcul

1. Définissez les conditions opératoires :

Pression : 1 atm

Composition du mélange :

- De 0% mol à 100% mol en Ethanol
- “Auto” pour l’eau (afin d’obtenir une composition globale de 100%)
- Définissez un pas de 0,01 (correspondant à 101 points)

2. Sélectionnez l’option « Tracer automatiquement les résultats »

ProPhyPlus 2 - V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc (Modifié)

Projet Thermodynamique Modifications Systèmes d'unités Sessions Options Aide

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Projet V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc

Type de calcul Equilibres Nom de la session New session

Données Résultats

Liquide - Vapeur

Températures de bulle et de rosée

Pressions de bulle et de rosée

wP - Flash à taux de vaporisation et pression donnée

TP - Flash à température et pression données

TV - Flash à température et volume donnés

PV - Flash à pression et volume donnés

HT - Flash à enthalpie et température données

HP - Flash à enthalpie et pression données

HV - Flash à enthalpie et volume donnés

HU - Flash à enthalpie et énergie données

HS - Flash à enthalpie et entropie données

ST - Flash à entropie et température données

SP - Flash à entropie et pression données

SV - Flash à entropie et volume donnés

SU - Flash à entropie et énergie données

UT - Flash à énergie et température données

UP - Flash à énergie et pression données

UV - Flash à énergie et volume donnés

Constante de Henry

wH - Flash à taux de vaporisation et enthalpie donnée

wS - Flash à taux de vaporisation et entropie donnée

wU - Flash à taux de vaporisation et énergie donnée

wV - Flash à taux de vaporisation et volume donné

Liquide - Liquide

TP - Flash à température et pression données

Propriété

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Pression	atm	1	1	0	1

Valeurs ☒ Fractions ☐ Grandeurs Type ☒ Molaire ☐ Massique Total 0 kmol

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input checked="" type="checkbox"/>	WATER	Auto	Auto	Auto	Auto
<input type="checkbox"/>	ETHANOL	0	1	0.01	101

Type de résultats ☒ Molaire ☐ Massique ☐ Initialisation automatique Constituant

☐ Afficher les messages d'erreur ☐ Compositions identiques quelque soit le type de calcul

Pour calculer:

Etape 4 : définition des conditions de calcul

15



Cliquez sur « Ajouter une nouvelle session » si vous souhaitez avoir plusieurs sessions de calculs en parallèle

ProPhyPlus 2 - V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc (Modifié)

Projet Thermodynamique Modifications Systèmes d'unités Sessions Options Aide

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Projet V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc

Type de calcul Equilibres Nom de la session New session

Données Résultats

Liquide - Vapeur

Températures de bulle et de rosée
Pressions de bulle et de rosée
wP - Flash à taux de vaporisation et pression donnée
TP - Flash à température et pression données
TV - Flash à température et volume donnés
PV - Flash à pression et volume donnés
HT - Flash à enthalpie et température données
HP - Flash à enthalpie et pression données
HV - Flash à enthalpie et volume donnés
HU - Flash à enthalpie et énergie données
HS - Flash à enthalpie et entropie données
ST - Flash à entropie et température données
SP - Flash à entropie et pression données
SV - Flash à entropie et volume donnés
SU - Flash à entropie et énergie données
UT - Flash à énergie et température données
UP - Flash à énergie et pression données
UV - Flash à énergie et volume donnés
Constante de Henry
wH - Flash à taux de vaporisation et enthalpie donnée
wS - Flash à taux de vaporisation et entropie donnée
wU - Flash à taux de vaporisation et énergie donnée
wV - Flash à taux de vaporisation et volume donné

Liquide - Liquide

TP - Flash à température et pression données

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Pression	atm	1	1	0	1

Valeurs ☒ Fractions ☐ Grandeurs Type ☒ Molaire ☐ Massique Total 0 kmol

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input checked="" type="checkbox"/>	WATER	Auto	Auto	Auto	Auto
<input type="checkbox"/>	ETHANOL	0	1	0.01	101

Type de résultats ☒ Molaire ☐ Massique ☐ Initialisation automatique Constituant

☐ Afficher les messages d'erreur ☐ Compositions identiques quelque soit le type de calcul

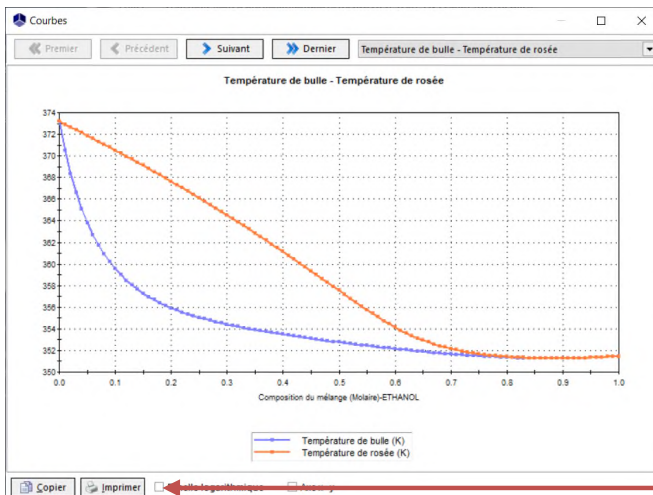
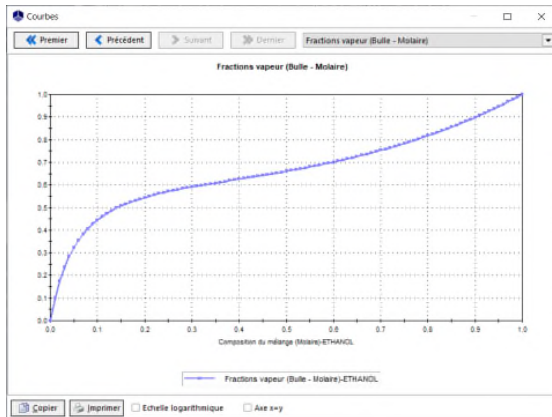
Pour calculer:

Cliquez sur « Calculer la session courante »

Etape 5 : exploitation des résultats

Les résultats sont affichés dans un tableau...

... et les graphiques sont automatiquement générés



ProPhyPlus 2 - V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc (Modifié)

Projet Thermodynamique Modifications Systèmes d'unités Sessions Options Aide

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Projet V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc

Type de calcul Equilibres Nom de la session New session

Données Résultats

Résultats

Conditions	Composition du mélange (Molaire)		Résultats		Fractions liquide (Bulle - Molaire)		Fractions vapeur (Bulle - Molaire)	
	WATER	ETHANOL	Température de ...	Température de ...	WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL
1 atm	1.00000	0.00000	373.168 K	373.168 K	1.00000	0.00000	1.00000	0.00000
1 atm	0.990000	1.00000E-002	370.512 K	372.911 K	0.990000	1.00000E-002	0.900086	9.99140E-002
1 atm	0.980000	2.00000E-002	368.347 K	372.652 K	0.980000	2.00000E-002	0.823935	0.176065
1 atm	0.970000	3.00000E-002	366.552 K	372.391 K	0.970000	3.00000E-002	0.764175	0.235825
1 atm	0.960000	4.00000E-002	365.045 K	372.128 K	0.960000	4.00000E-002	0.716168	0.283832
1 atm	0.950000	5.00000E-002	363.765 K	371.864 K	0.950000	5.00000E-002	0.676858	0.323142
1 atm	0.940000	6.00000E-002	362.668 K	371.597 K	0.940000	6.00000E-002	0.644149	0.355851
1 atm	0.930000	7.00000E-002	361.721 K	371.328 K	0.930000	7.00000E-002	0.616562	0.383438
1 atm	0.920000	8.00000E-002	360.898 K	371.058 K	0.920000	8.00000E-002	0.593021	0.406979
1 atm	0.910000	9.00000E-002	360.177 K	370.785 K	0.910000	9.00000E-002	0.572725	0.427275
1 atm	0.900000	0.100000	359.543 K	370.51 K	0.900000	0.100000	0.555067	0.444933
1 atm	0.890000	0.110000	358.982 K	370.233 K	0.890000	0.110000	0.539578	0.460422
1 atm	0.880000	0.120000	358.484 K	369.954 K	0.880000	0.120000	0.525892	0.474108
1 atm	0.870000	0.130000	358.04 K	369.672 K	0.870000	0.130000	0.513714	0.486286
1 atm	0.860000	0.140000	357.642 K	369.389 K	0.860000	0.140000	0.502810	0.497190
1 atm	0.850000	0.150000	357.284 K	369.103 K	0.850000	0.150000	0.492988	0.507012
1 atm	0.840000	0.160000	356.961 K	368.815 K	0.840000	0.160000	0.484090	0.515910
1 atm	0.830000	0.170000	356.668 K	368.524 K	0.830000	0.170000	0.475985	0.524015
1 atm	0.820000	0.180000	356.402 K	368.231 K	0.820000	0.180000	0.468564	0.531436
1 atm	0.810000	0.190000	356.158 K	367.936 K	0.810000	0.190000	0.461733	0.538267

Résultats affichés... Copier les résultats Exporter vers Excel... Tracer les résultats

☐ Afficher les messages d'erreur ☐ Compositions identiques quelque soit le type de calcul

Pour calculer:

Vous pouvez copier le tableau et les graphiques dans d'autres applications

Configuration du calcul suivant...

Vous pouvez à tout moment retourner à la fenêtre de configuration du calculateur en cliquant sur « Editer le calculateur »

Pour modifier les conditions de calcul, cliquez sur l'onglet « Données »

ProPhyPlus 2 - V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc (Modifié)

Projet Thermodynamique Modifications Systèmes d'unités Sessions Options Aide

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Projet V:\getting started prosim\prophyplus\en\PROPHYST_GS01_EN-FeaturesOverview.psc

Type de calcul Equilibres Nom de la session New session

Données Résultats

Liquide - Vapeur

Températures de bulle et de rosée

Pressions de bulle et de rosée

wP - Flash à taux de vaporisation et pression donnée

wT - Flash à taux de vaporisation et température

TP - Flash à température et pression données

TV - Flash à température et volume données

PV - Flash à pression et volume données

HT - Flash à enthalpie et température données

HP - Flash à enthalpie et pression données

HV - Flash à enthalpie et volume données

HU - Flash à enthalpie et énergie données

HS - Flash à enthalpie et entropie données

ST - Flash à entropie et température données

SP - Flash à entropie et pression données

SV - Flash à entropie et volume données

SU - Flash à entropie et énergie données

UT - Flash à énergie et température données

UP - Flash à énergie et pression données

UV - Flash à énergie et volume données

Constante de Henry

wH - Flash à taux de vaporisation et enthalpie donnée

wS - Flash à taux de vaporisation et entropie donnée

wU - Flash à taux de vaporisation et énergie donnée

wV - Flash à taux de vaporisation et volume donnée

Liquide - Liquide

TP - Flash à température et pression données

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Pression	atm	1	1	0	1

Valeurs Type

☒ Fractions ☒ Molaire

☐ Grandeurs ☐ Massique Total 0 kmol

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input checked="" type="checkbox"/>	WATER	Auto	Auto	Auto	Auto
<input type="checkbox"/>	ETHANOL	0	1	0.01	101

Type de résultats ☐ Initialisation automatique

☒ Molaire ☐ Massique Constituant

☐ Afficher les messages d'erreur ☐ Compositions identiques quelque soit le type de calcul

Pour calculer:

**ProSim SA**

51, rue Ampère
Immeuble Stratège A
F-31670 Labège
France

☎: +33 (0) 5 62 88 24 30



ProSim

Software & Services In Process Simulation

**ProSim, Inc.**

325 Chestnut Street, Suite 800
Philadelphia, PA 19106
U.S.A.

☎: +1 215 600 3759

www.prosim.net
info@prosim.net