

# Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

## Cas 1 : Principales caractéristiques

Software & Services In Process Simulation

*We guide You to efficiency*



ProSim

# Introduction

Ce document présente les principales caractéristiques de Simulis Thermodynamics et les étapes à suivre afin de le configurer. Pour illustration, la mise en place d'un calcul d'équilibre liquide - vapeur sur un mélange Eau - Éthanol, à température et pression données, est présentée.

**Simulis Thermodynamics est un « composant logiciel » et peut être intégré dans différents environnements**



**Cas de figure 1** : vous utilisez Simulis Thermodynamics dans un logiciel de la suite ProSim (ProSimPlus, BatchReactor, etc...)



**Cas de figure 2** : vous utilisez le complément Simulis Thermodynamics (dans Excel, Matlab, etc...)

**Les étapes sont les suivantes :**

-  Étape 1 : Accédez à l'éditeur de calculator thermodynamique
-  Étape 2 : Sélectionnez les constituants
-  Étape 3 : Sélectionnez votre modèle thermodynamique
-  Étape 4 : Calcul du flash TP à l'aide du service de calculs
-  Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel (uniquement dans le cas de figure 2, cette étape nécessitant d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

# Étape 1 : Accédez à l'éditeur de calculator thermodynamique

- **Cas de figure 1** : si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans un logiciel de la suite ProSim (ProSimPlus, BatchReactor, BatchColumn etc...)

Cliquez sur l'icône permettant d'accéder à l'éditeur de calculator :



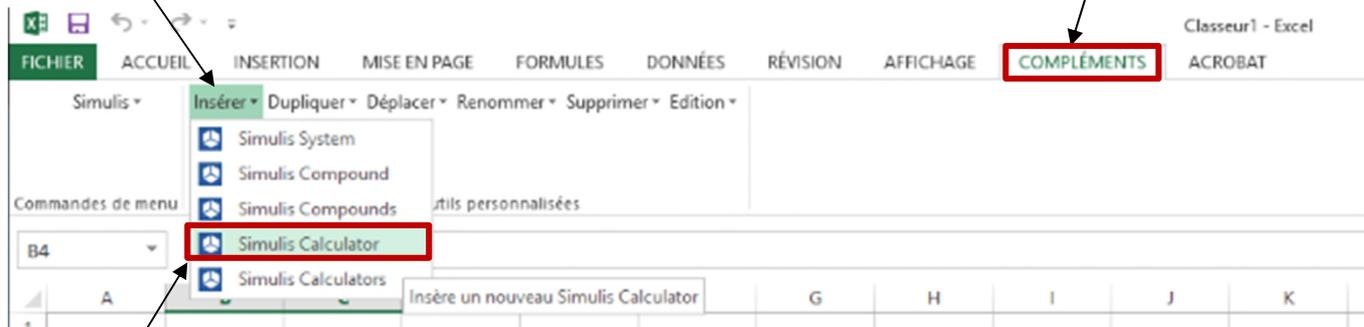
ou



- **Cas de figure 2** : si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans Excel

2. Cliquez sur le menu « *Insérer* »

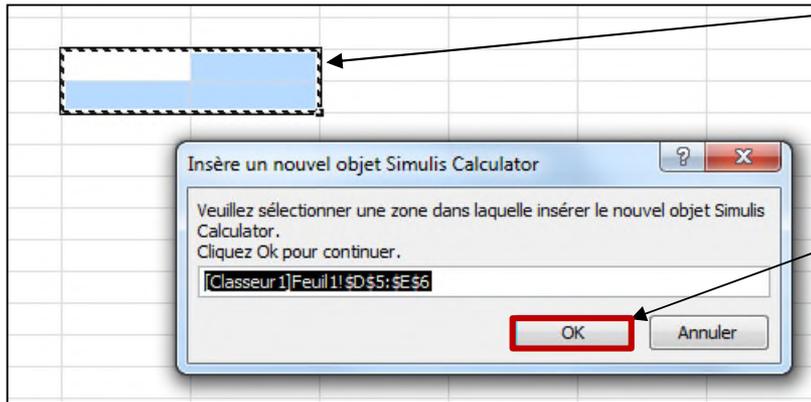
1. Sélectionnez l'onglet « *Compléments* »



3. Sélectionnez l'objet « *Simulis Calculator* »

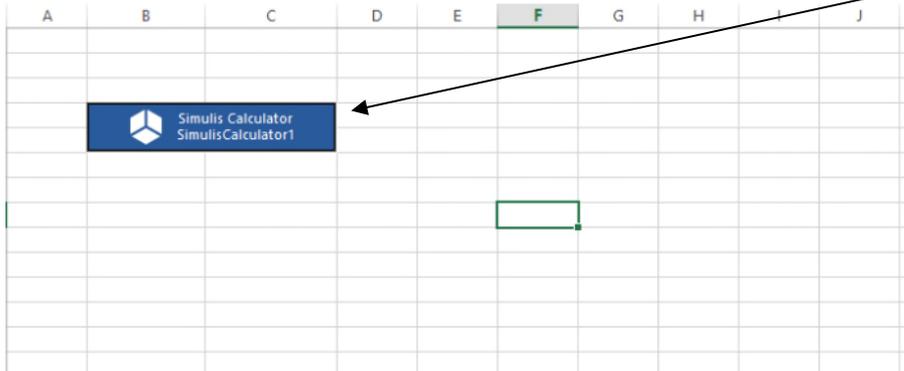
# Étape 1 : Accédez à l'éditeur de calculator thermodynamique

- Cas de figure 2 : si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans Excel



4. Sélectionnez la plage de cellules dans laquelle sera inséré l'objet *Simulis Calculator*

5. Cliquez sur « OK »



6. Un objet *Simulis Calculator* est créé. Cliquez dessus pour accéder à l'éditeur de calculator



Il est possible d'insérer plusieurs objets Simulis dans la même feuille Excel

# Étape 2 : Sélectionnez les constituants

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | PARAMETRES

#	Nom IUPAC	CAS Registry Number®
---	-----------	----------------------

CONSTITUANTS

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...
- Publier...

PACKAGE

SERVICES

- Calculer
- Générer un fichier PSF
- Diagrammes
- Résidu...
- Générer un fichier PVT
- Courant...
- Sigma profiles

MODIFICATIONS

CONFIGURATION

Nom  
[New calculator]

Commentaires

Type de calculator  
Natif

Montrer le mode expert

Commentaires :

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 inexacts.

OK Annuler

CONSTITUANTS

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...
- Publier...

PACKAGE

EDITER

- Importer/Charger des constituants...**
- Editer ce constituant...
- Créer un nouveau constituant
- Supprimer tous les constituants
- Cloner ce constituant
- Mettre à jour les constituants
- Supprimer la sélection

SERVICES

- Créer un pseudo-constituant...
- Propriétés dépendantes de T...
- Editeur tableau
- Comparer à l'original
- Comparer les constituants

ORDRE

- Déplacer ce constituant vers le haut

1. Cliquez sur « *Importer/Charger des constituants* » pour importer les constituants depuis les bases de données disponibles



Pour créer un nouveau constituant, consultez « *Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas 9* »



Pour créer un pseudo-constituant, consultez « *Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas 5* »

# Étape 2 : Sélectionnez les constituants

3. Appuyez sur la touche « *Entrée* » ou cliquez sur le bouton « *Recherche* » pour obtenir la liste des constituants trouvés

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

1. Sélectionnez les serveurs de constituants dans lesquels vous souhaitez effectuer la recherche (par défaut, sélectionnez le serveur le plus récent)

The screenshot shows the 'Résultats de recherche' window. On the left, the 'CONSTITUANTS' sidebar is visible. The 'Critères de recherche' section has 'Recherche' selected. The search criteria are set to 'Nom ou synonyme' with the text 'water' entered. The 'Nom exact' checkbox is checked. Under 'OPTIONS', 'Effacer les résultats précédents' is checked. The 'RECHERCHER DANS' section shows a tree view of servers, with 'Standard 2021' selected. The main area displays 'Sélectionner un constituant pour avoir sa description' and a table of search results. The table has columns for 'Nom IUPAC (ou nom d...)', 'Formule chimi...', 'CAS Regi...', 'Masse molaire ...', 'Température d...', and 'Famille chin...'. Below the table, it says 'Sélectionner vos critères de recherche pour démarrer'. On the right, there is a 'Constituants sélectionnés:' section with a table header 'Nom'. At the bottom, there is a 'Fermer' button and a disclaimer about CAS Registry Numbers.

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



Vous pouvez effectuer plusieurs recherches successives sans fermer cette fenêtre

# Étape 2 : Sélectionnez les 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

**Nom : ETHANOL**  
Emplacement : Standard 2021 (Simulis® SQLite Databases/Common databases)  
CAS Registry Number® : 64-17-5  
ID spécifique : {615B2F0C-4783-463E-B0E2-5DDC614CB4FA}

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 inexacts.

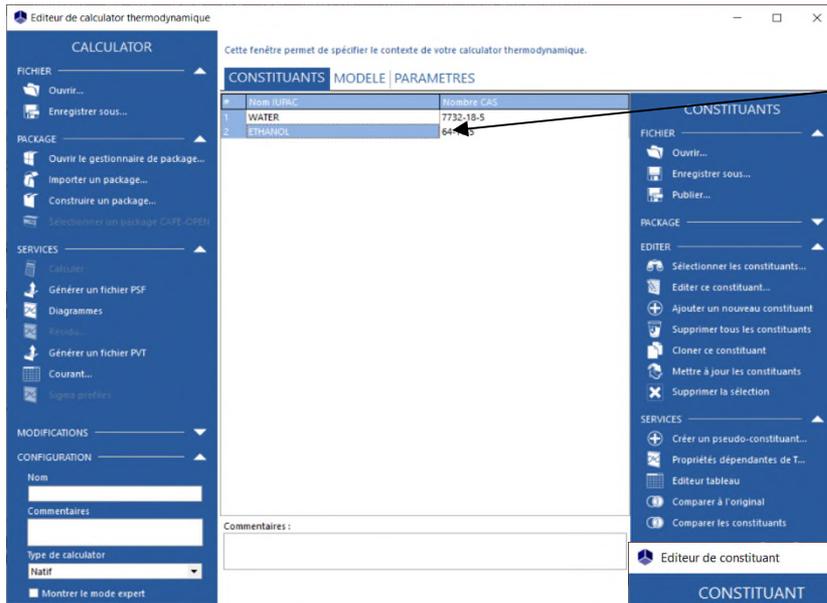
Fermer

3. Les constituants sélectionnés sont affichés ici

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

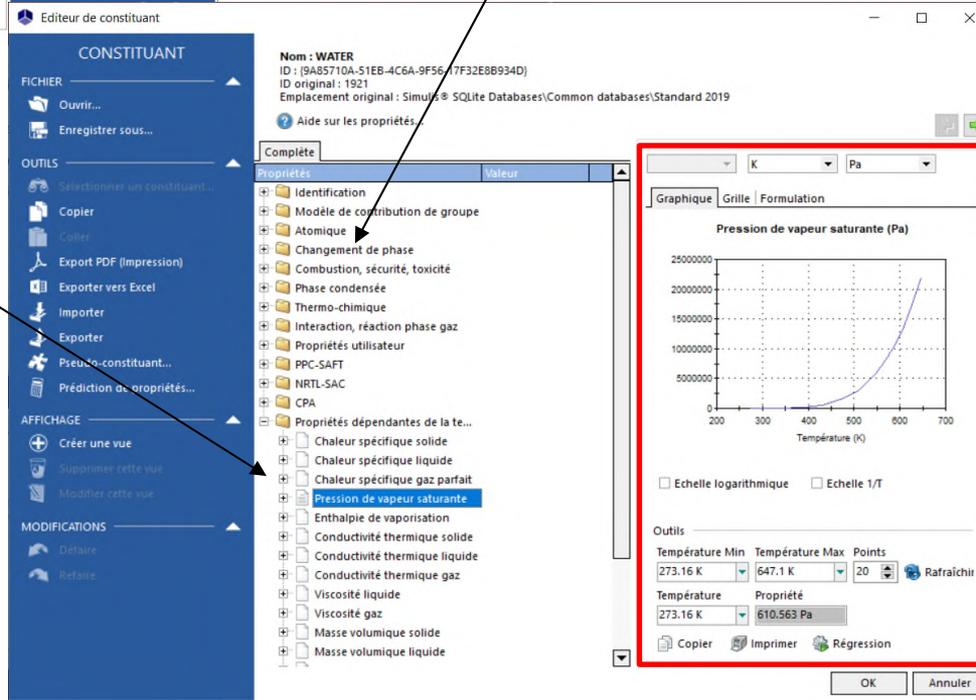
4. Cliquez sur « Fermer » pour terminer la sélection des constituants

# Étape 2 : Sélectionnez les 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 »

# Étape 3 : Sélectionnez votre 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

DOCUMENTATION

- Assistant thermodynamique
- Aide thermodynamique

PARAMETRES ADDITIONNELS

INFORMATIONS SUR LE MODELE

EAU-HYDROCARBURE

EAU PURE

OK Annuler

2. Sélectionnez le profil thermodynamique (Dans cet exemple, sélectionnez « **NRTL** »)

# Étape 3 : Sélectionnez votre 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 :  $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij0} + C_{ijT}(T - 273.15)$ ,  $a_{ij} = a_{ij0} + a_{ijT}(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	C <sub>ij0</sub>	C <sub>ijT</sub>	a <sub>ij0</sub>	C <sub>ijT</sub>
WATER	ETHANOL	1616,81	-635,56	0,1448	2,0177

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

# Étape 3 : Sélectionnez votre 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

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | **BINAIRE** | 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 :  $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij0} + C_{ijT}(T - 273.15)$ ,  $a_{ij} = a_{ij0} + a_{ijT}(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	Cij0	aij0	CijT
WATER	ETHANOL				

**BINAIRE**

ACTIONS

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

OPTIONS

Unité

cal/mole

les paramètres seront ignorés

chargement automatique

Non fourni Fournis Importés Estimés Erreur

Commentaires :

OK Annuler

Chargement automatique désactivé

# Étape 3 : Sélectionnez votre modèle thermodynamique

2. Cliquez sur « Rechercher »

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

Recherche de binaires

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

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

Résultats de recherche Binaires actualisés

<input checked="" type="checkbox"/>	Case de données	Constituant	Constituant	Cj0	Cj0	aj0	CjT	CjT
<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 les serveurs de paramètres d'interaction binaire dans lesquels vous souhaitez effectuer la recherche

# Étape 3 : Sélectionnez votre modèle thermodynamique

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

Éditeur de calculer thermodynamique

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de votre calculer 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	C <sub>ij</sub> 0	C <sub>ji</sub> 0	a <sub>ij</sub> 0	C <sub>ij</sub> T
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

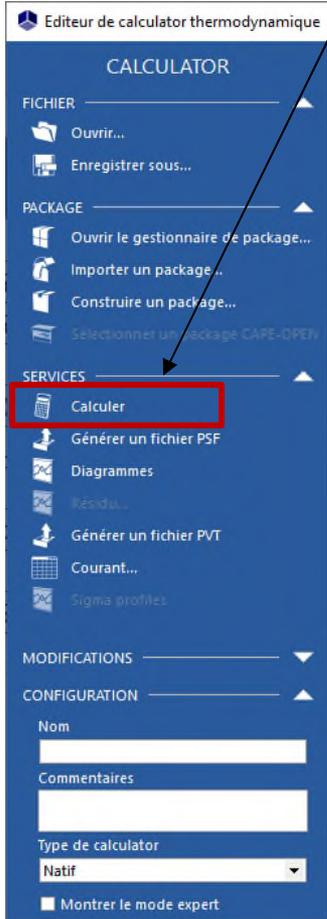
- les paramètres seront ignorés
- chargement automatique

OK Annuler

**Cliquez sur « OK » pour valider vos données et retourner à l'environnement principal (logiciel ProSim, Excel, etc...)**

# Étape 4 : Calcul du flash TP à l'aide du service de calculs

Afin d'accéder au service de calculs, ouvrez l'éditeur de calculator thermodynamique, puis cliquez sur « Calculer »



Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: **Propriétés physico-chimiques**    Nom de la session: **Nouvelle session**

Autoriser le calcul de dérivées

Etat physique: **Déterminé automatiquement**  
Système: **Liquide - Vapeur**

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Pression	atm	1	1	0	1
Température	K	298.15	298.15	0	1

Valeurs:  Fractions    Type:  Molaire  
 Grandeurs     Massique    Total: 0 kmol

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

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

Pour calculer: **Vous devez sélectionner au moins une propriété**

Quitter

# Étape 4 : Calcul du flash TP à l'aide du service de calculs

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

Service de calculs

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: Equilibres

Nom de la session: Nouvelle session

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Température	K	298,15	298,15	0	1
Pression	atm	1	1	0	1

Valeurs

Fractions

Molaire

Grandeurs

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: [dropdown]

Afficher les messages d'erreur

Compositions identiques quelque soit le type de calcul

Pour calculer: [input]

Quitter

2. Sélectionnez la propriété à calculer (dans cet exemple, « Flash à température et pression données »)

# Étape 4 : Calcul du flash TP à l'aide du service de calculs

## 1. Définissez les conditions opératoires :

Pression : 1 bar

Température : 80°C

Composition du mélange :

- 50% mol en Ethanol
- "Auto" pour l'eau (afin d'obtenir une composition globale de 100%)

## 2. Cliquez sur « Calculer la session courante »

Service de calculs

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: Equilibres    Nom de la session: Nouvelle 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 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

**Liquide - Liquide - Vapeur**

Propriété    Unité    Initial    Final    Pas    Points

Température	°C	80	80	0	1
Pression	bar	1	1	0	1

Valeurs    Type

Fractions     Molaire  
 Grandeurs     Massique    Total: 0 kmol

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	WATER	0.5	0.5	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: \_\_\_\_\_

Quitter

# Étape 4 : Calcul du flash TP à l'aide du service de calculs

Les résultats sont affichés sous forme de tableau dans l'onglet « Résultats »



Pour plus de détails sur le calcul des propriétés thermodynamiques, vous pouvez consulter « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas 4 »

Service de calculs

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: **Equilibres** Nom de la session: Nouvelle session

Données Résultats

Résultats

Conditions		Composition du mélange (Molaire)		Résultats	Fractions liquide (Molaire)	
Température	Pression	WATER	ETHANOL	Taux de vaporisation	WATER	ETHANOL
353.15 K	0.986923 atm	0.500000	0.500000	0.444200	0.599955	0.400045

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:

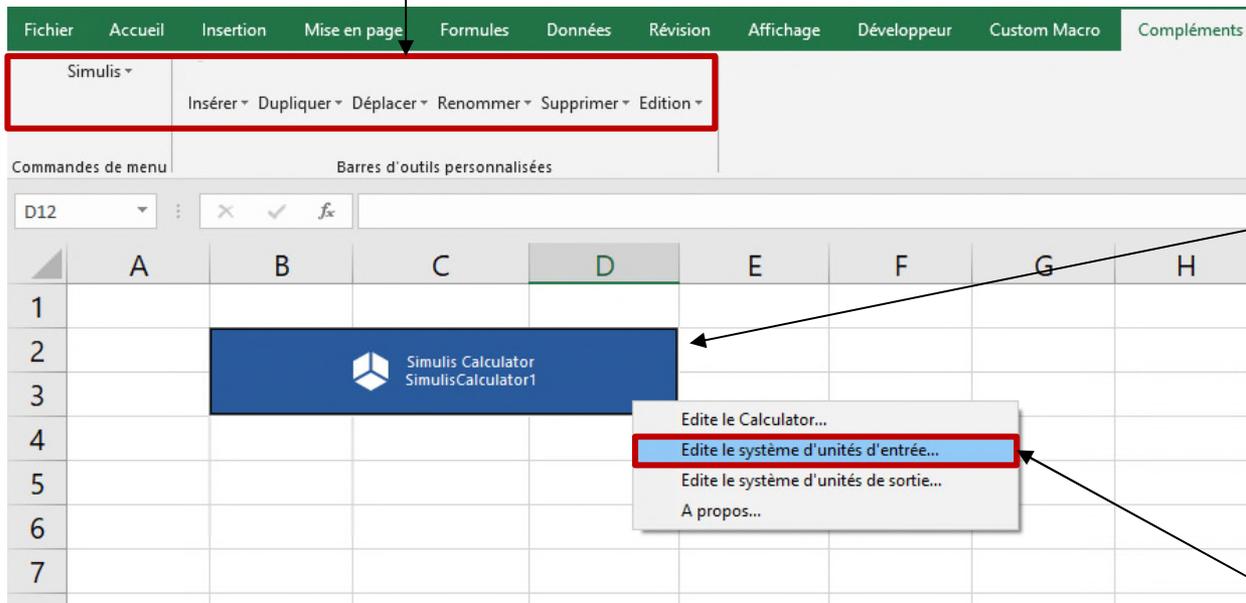
Quitter

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

**Uniquement dans le cas de figure 2 :** si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans Excel

Les fonctionnalités du complément Excel de Simulis Thermodynamics sont accessibles depuis la barre d'outils principale



1. Faites un clic droit sur l'objet *Simulis Calculator*

2. Sélectionnez « *Edite le système d'unités d'entrée* »

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

Le système d'unités par défaut est en « Pa » et « K » tandis que les données d'entrée de l'exemple présenté dans ce document sont en « bar » et « °C ». Il est donc nécessaire d'adapter le système d'unités afin d'éviter les calculs de conversion.

Système d'unités

UNITÉS DE L'APPLICATION

SYSTÈMES PRÉDÉFINIS

Choisissez un système d'unités prédéfini dans cette liste et cliquez sur "Appliquer le système" pour utiliser ses unités dans votre application.

ISO  
ProSim  
Anglais  
Simulis  
Système de l'application  
Système de l'utilisateur

Appliquer le système

OUTILS

Copier dans le presse-papier  
Coller depuis le presse-papier  
 Utiliser ce système par défaut

Utilisez cette fenêtre pour modifier le système d'unités utilisé par votre application.

Grandeur	Unité
Moment dipolaire	D
Moment quadripolaire	Buckingham
Pourcentage	%
<b>Pression</b>	bar Pa atm <b>bar</b> barye mmHg kPa MPa Onm.m
Puissance	
Puissance volumique	
Quantité de matière	
Quantité de matière volumique	
Résistance électrique	
Résistivité	
Surface	m <sup>2</sup>
Temps	h
<b>Température</b>	<b>°C</b>
Tension superficielle	dyn/cm
Tension électrique	V
Terme attractif (CEoS)	atm.(cm <sup>3</sup> /mol) <sup>2</sup>
Viscosité cinématique	m <sup>2</sup> /s

Ok Annuler

1. A l'aide du menu déroulant, sélectionnez la pression et remplacez « Pa » par « bar »

2. Répétez l'opération pour la température (remplacez « K » par « °C »)

3. Cliquez sur « OK » pour valider



Les systèmes d'unités d'entrée et de sortie sont personnalisés indépendamment

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

Préparez votre feuille de calcul en fournissant les données d'entrée et en créant les tableaux dans lesquels les résultats seront affichés :

**1. COMPOSITION** : préparez le tableau correspondant à la composition du mélange (dans cet exemple, 50% mol en Eau et 50% mol en Ethanol)

B	C	D	E	F	G	H	I
Simulis Calculator SimulisCalculator1							
		0.5					
		0.5					
T		80					
P		1					
Taux vapeur	xl		yv		ki		

**2. CONDITIONS OPERATOIRES** : préparez le tableau correspondant aux conditions opératoires (dans cet exemple, fixez une température de 80°C et une pression de 1 bar)

**3. RESULTATS** : préparez le tableau dans lequel seront affichés les résultats :

- Taux de vaporisation : 1 cellule
- Composition liquide (xl) : plage de 2 cellules
- Composition vapeur (yv) : plage de 2 cellules
- Constantes d'équilibre (ki) : plage de 2 cellules



Les cellules vides seront remplies en utilisant les fonctions de Simulis Thermodynamics

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

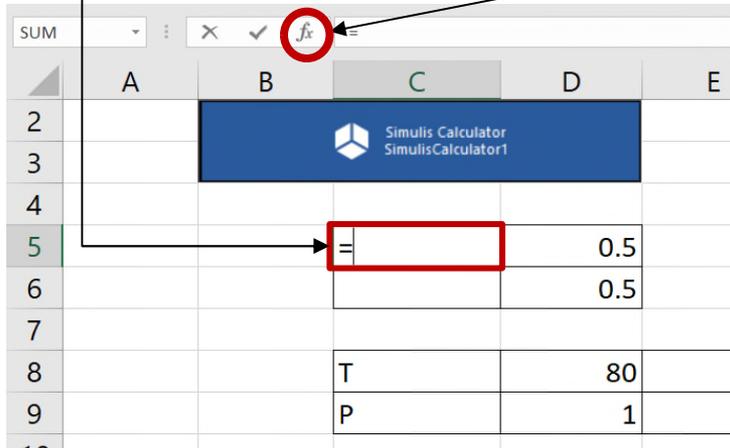
(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

Utilisez la fonction Simulis permettant d'afficher le nom des constituants dans la feuille Excel :

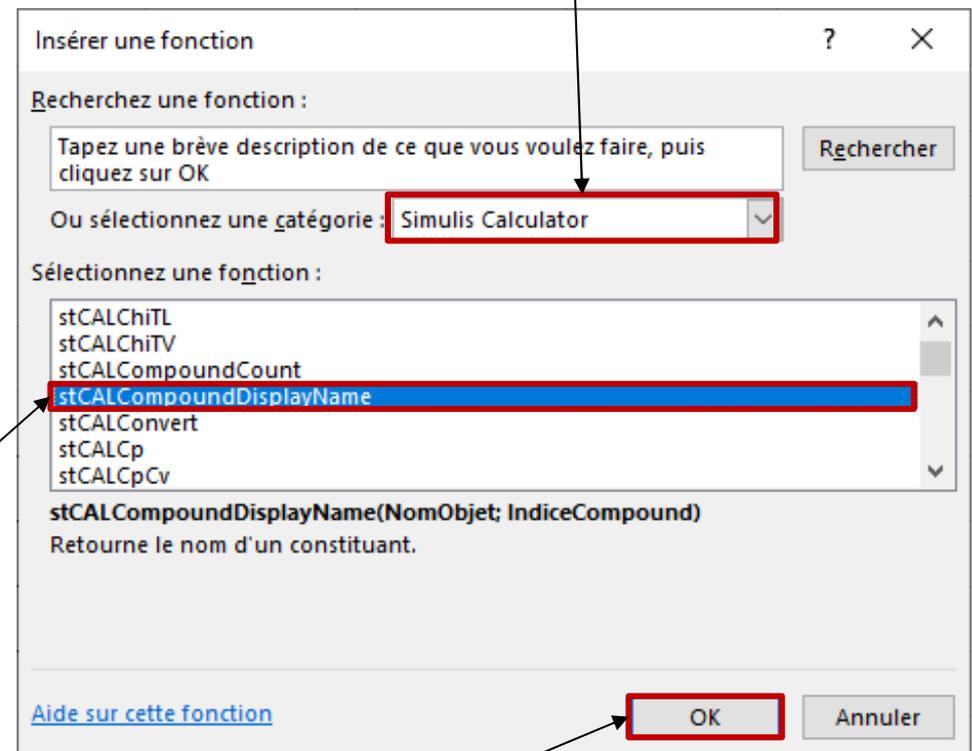
1. Sélectionnez la première cellule du tableau correspondant à la composition d'entrée

2. Cliquez sur "fx" pour insérer une fonction

3. Sélectionnez la catégorie « Simulis Calculator »



	A	B	C	D	E
2					
3					
4					
5				0.5	
6				0.5	
7					
8			T	80	
9			P	1	
10					



4. Sélectionnez la fonction « *stCALCompoundDisplayName* »

5. Cliquez sur « OK » pour confirmer et accéder à la fenêtre d'édition des arguments de la fonction

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

The screenshot shows an Excel spreadsheet with the formula `=stCALCompoundDisplayName("SimulisCalculator1";1)` entered in cell C1. A blue Simulis Calculator object is visible in the background. A dialog box titled "Arguments de la fonction" is open, showing the function arguments: **NomObjet** = "SimulisCalculator1" and **IndiceCompound** = 1. The result of the function is "WATER". The "OK" button is highlighted with a red box.

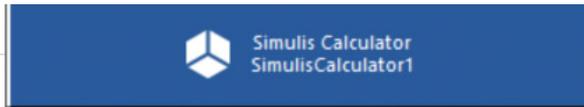
1. Entrez le nom de l'objet Simulis que vous souhaitez utiliser (dans cet exemple, « *SimulisCalculator1* »)

2. Entrez l'indice correspondant au numéro du constituant dans la liste de constituants importés dans le calculator (dans cet exemple, indiquez « 1 » correspondant au premier constituant de la liste)

3. Cliquez sur « OK »

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)



WATER	0.5
	0.5

1. Le nom du premier constituant (Water) est maintenant affiché dans le tableau

2. Répétez l'opération pour le second constituant (Ethanol). Dans ce cas, l'indice du constituant est « 2 »

Arguments de la fonction

stCALCompoundDisplayName

NomObjet "SimulisCalculator1" = "SimulisCalculator1"

IndiceCompound 2 = 2

= "ETHANOL"

Retourne le nom d'un constituant.

IndiceCompound Index de constituant.

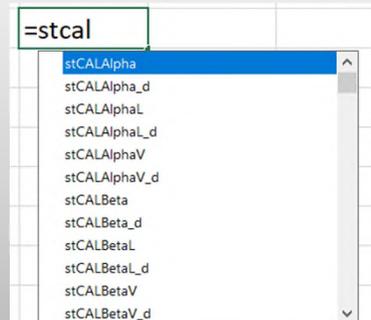
Résultat = ETHANOL

[Aide sur cette fonction](#)

OK Annuler



Plutôt que de sélectionner « fx », vous pouvez directement entrer « =stcal » dans une cellule, ce qui affichera la liste des fonctions disponibles dans la catégorie *Simulis Calculator*. Utilisez la liste déroulante afin d'identifier la fonction que vous souhaitez utiliser, puis double-cliquez dessus et ensuite sur « fx » afin d'ouvrir la fenêtre d'édition des arguments.



# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

Utilisez la fonction Simulis permettant d'afficher le système d'unités d'entrée pour la température et la pression :

B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
Simulis Calculator SimulisCalculator1									
	WATER	0.5							
	ETHANOL	0.5							
	T	80	=stCALGetUnitNameInSystem("SimulisCalculator1";1;temperature)						
	P	1							

1. Sélectionnez la fonction « *stCALGetUnitNameInSystem* »

Arguments de la fonction

stCALGetUnitNameInSystem

NomObjet: "SimulisCalculator1" ↑ SimulisCalculator1

IndiceSystem: 1 ↑ 1

IDGrandeur: temperature ↑

=

Fournit le nom de l'unité par défaut d'une grandeur d'un système.

IDGrandeur Identifiant de la grandeur.

Résultat =

[Aide sur cette fonction](#)

OK Annuler

2. Entrez le nom de l'objet Simulis (dans cet exemple, « *SimulisCalculator1* »)

3. Entrez l'indice du système, c-à-d « 1 » pour le système d'unités d'entrée et « 2 » pour le système d'unités de sortie (dans cet exemple, entrez « 1 »)

4. Entrez l'identifiant de la grandeur (dans cet exemple, « *temperature* »)

5. Cliquez sur « OK »

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

B	C	D	E
Simulis Calculator SimulisCalculator1			
	WATER	0.5	
	ETHANOL	0.5	
	T	80 °C	
	P	1	

L'unité utilisée en entrée pour la température est maintenant affichée

Répétez l'opération afin d'afficher l'unité utilisée en entrée pour la pression. Dans ce cas, l'identifiant de la grandeur est « *pressure* »

Arguments de la fonction

stCALGetUnitNameInSystem

NomObjet	"SimulisCalculator1"	= "SimulisCalculator1"
IndiceSystem	1	= 1
IDGrandeur	"pressure"	= "pressure"

Fournit le nom de l'unité par défaut d'une grandeur d'un système.

IDGrandeur Identifiant de la grandeur.

Résultat = bar

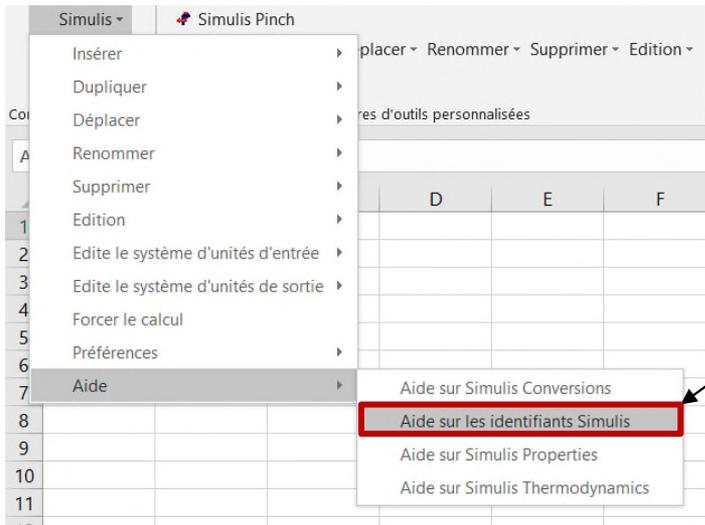
[Aide sur cette fonction](#)



Afin de pouvoir facilement adapter une feuille Excel à différents types de calcul : il est recommandé d'indiquer les arguments d'entrée dans les cellules de la feuille, et ensuite de sélectionner ces cellules depuis la fenêtre d'édition des arguments. Ainsi, les résultats seront automatiquement mis à jour si l'on modifie les données des cellules.

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

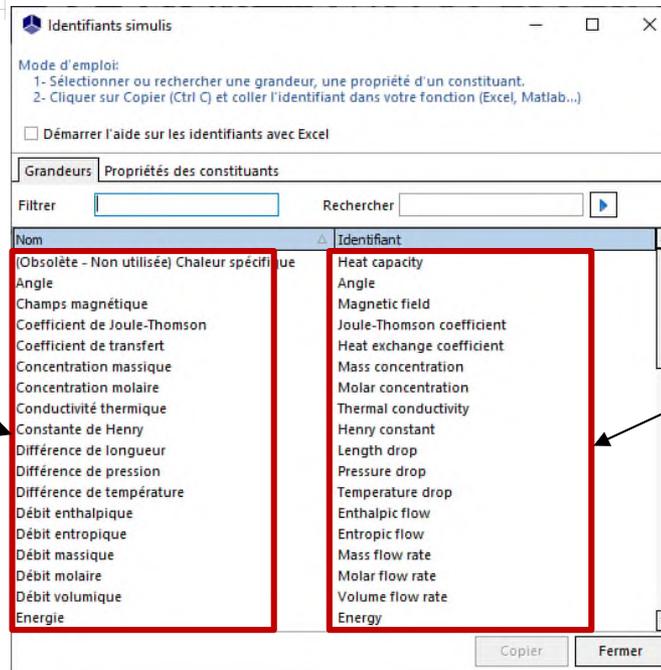
(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)



Afin de connaître les identifiants des grandeurs, cliquez sur « Aide sur les identifiants Simulis », disponible dans l'onglet « Aide » du menu « Simulis »



Noms des grandeurs



Identifiants des grandeurs

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

Utilisez la fonction Simulis permettant d'effectuer un flash liquide – vapeur à température et pression données

B	C	D	E	F	G	H	I
Simulis Calculator SimulisCalculator1							
	WATER	0.5					
	ETHANOL	0.5					
	T	80 °C					
	P	1 bar					
	Taux vapeur	xl	yv	ki			
		WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL
	=						

1. Copiez et collez dans le tableau les fonctions utilisées précédemment, permettant d'afficher les noms des constituants

2. Sélectionnez l'ensemble des cellules où les résultats seront affichés (dans cet exemple, cela correspond au taux de vaporisation, à la composition liquide, à la composition vapeur et aux constantes d'équilibre)

3. Entrez le nom de la fonction : « *stCALFlashTP* » afin d'accéder à la fenêtre d'édition des arguments



De nombreuses fonctions Simulis renvoient plusieurs résultats (correspondant à un vecteur). Dans ce cas, il est nécessaire de sélectionner une plage de cellule dans Excel, de dimension équivalente au nombre de résultats devant être affichés.

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

B	C	D	E	F	G	H	I
Simulis Calculator SimulisCalculator1							
	WATER	0.5					
	ETHANOL	0.5					
	T	80 °C					
	P	1 bar					
	Taux vapeur						
		xl		yv		ki	
		WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL

Arguments de la fonction ? X

stCALFlashTP

NomObjet "SimulisCalculator1" = "SimulisCalculator1"

Température D8 = 80

Pression D9 = 1

Composition D5:D6 = {0.5;0.5}

TypeComposition 0 = 0

= {0.444200147124902\0.59995515436

Flash liquide-vapeur à température et pression données.

TypeComposition Type de composition du mélange (0 = molaire, 1 = massique).

Résultat = 0.444200147

[Aide sur cette fonction](#) OK Annuler

1. Entrez le nom de l'objet Simulis (dans cet exemple, « *SimulisCalculator1* »)
2. Sélectionnez la cellule contenant la température d'entrée
3. Sélectionnez la cellule contenant la pression d'entrée
4. Sélectionnez la plage de cellules contenant la composition d'entrée
5. Sélectionnez le type de composition (« 0 » pour molaire, « 1 » pour massique)

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

B	C	D	E	F	G	H	I
Simulis Calculator SimulisCalculator1							
	WATER	0.5					
	ETHANOL	0.5					
	T	80 °C					
	P	1 bar					
	<b>Taux vapeur</b>	<b>xl</b>	<b>yv</b>	<b>ki</b>			
		WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL

Arguments de la fonction

stCALFlashTP

Init  ↑ =

TauxVapInit  ↑ =

FractionsLiqInit  ↑ =

FractionsVapInit  ↑ =

TypeRésultats 0 ↑ = 0

= {0.444200147124902\0.59995515436

Flash liquide-vapeur à température et pression données.

**TypeRésultats** Type de résultats (0 = molaire, 1 = massique).

Résultat = 0.444200147

[Aide sur cette fonction](#)

OK Annuler

6. Utilisez le menu déroulant pour accéder aux autres arguments de la fonction

7. Vous avez la possibilité de fournir des valeurs d'initialisation. Ce n'est pas nécessaire dans cet exemple

8. Une fois que les arguments sont renseignés, appuyez simultanément sur « CTRL + MAJ + ENTREE » afin d'afficher le vecteur de résultats (si vous appuyez sur « OK », seul le premier résultat du vecteur est affiché)

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)

Les résultats du flash liquide – vapeur sont affichés dans la feuille de calcul

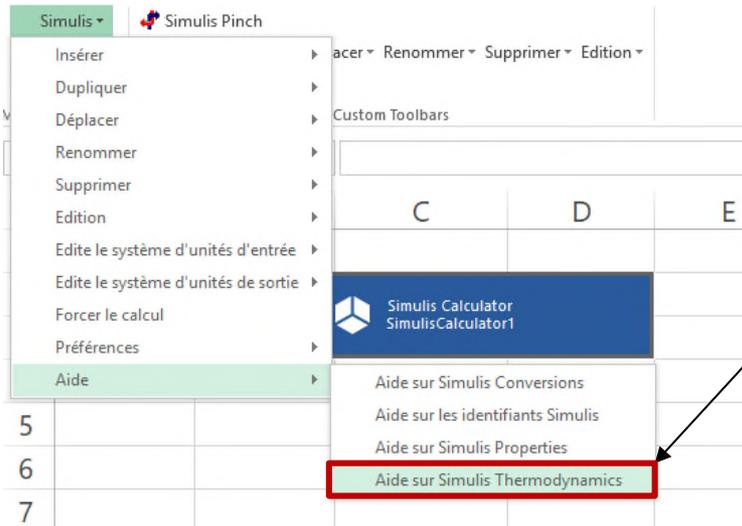
B	C	D	E	F	G	H	I
 Simulis Calculator SimulisCalculator1							
	WATER	0.5					
	ETHANOL	0.5					
	T	80 °C					
	P	1 bar					
	<b>Taux vapeur</b>	<b>xl</b>		<b>yv</b>		<b>ki</b>	
		WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL	WATER	ETHANOL
		0.4442001	0.59996	0.40004	0.37493	0.62507	0.62493
							1.56249



Si vous changez les conditions opératoires (composition, pression, température), les résultats sont automatiquement mis à jour.

# Étape 5 : Calcul du flash TP dans Excel

(Cette étape nécessite d'avoir le complément Excel de Simulis Thermodynamics)



Afin de connaître les arguments à fournir et les résultats renvoyés par une fonction, accédez à l'aide en cliquant sur « Aide sur Simulis Thermodynamics », dans l'onglet « Aide » du menu « Simulis »

**Données d'entrée**

**Résultats**

**Syntaxe :**

```
stCALIntegral(Md1(NomObjet; IndiceCompound; IDPropriété; Température1; Température2; UnitéTempérature; UnitéIntégraleT))
```

**Description :**

Calcule, sur un intervalle de température donnée, la valeur de l'intégrale sur la température d'une propriété dépendante de la température d'un corps pur.

**Paramètre(s) :**

Nom	Type	Désignation
NomObjet	Chaîne	Nom de l'objet Simulis Calculator
IndiceCompound	Entier	Indice du corps pur (de 1 à stCALCompoundCount)
IDPropriété	Entier	Identifiant de la propriété (cf. CHAPITRE 10). Attention, cette fonction n'est active que pour les chaleurs spécifiques.
Température1	Double	Valeur de la température 1 de l'intervalle de calcul
Température2	Double	Valeur de la température 2 de l'intervalle de calcul
UnitéTempérature	Chaîne	Unité dans laquelle sont exprimées les températures. OPTIONNEL : si ce paramètre est égal à une chaîne vide, la valeur des températures sera considérée dans l'unité courante du système d'entrée.
UnitéIntégraleT	Chaîne	Unité dans laquelle sera exprimée la valeur de l'intégrale sur T de la propriété. OPTIONNEL : si ce paramètre est égal à une chaîne vide, la valeur de l'intégrale sur T de la propriété sera exprimée dans l'unité courante du système de sortie. La grandeur est homogène à une entropie molaire.

**Valeur(s) d'entrée :**

Nom	Type	Désignation
ValeurIntégraleT	Double	Valeur de l'intégrale sur T de la propriété
UnitéIntégraleT	Chaîne	Nom de l'unité dans laquelle est exprimée la valeur de l'intégrale sur T
QuantitéIntégraleT	Chaîne	Identifiant de la grandeur associée à la valeur de l'intégrale sur T ("Molar entropy")

**Remarque(s) :**

Attention, cette fonction retourne un vecteur de 3 éléments et peut donc être utilisée sur une plage de cellules.

**Exemple(s) :**

```
stCALIntegral(Md1("SimulisCalculator1"; 1; pdLiquidSpecificHeat); 25.0; 50.0; "C"; "J/molK")
```

Pour chaque fonction



### 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

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



### ProSim, Inc.

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

☎: +1 215 600 3759