

Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 4 : Calculez des propriétés thermodynamiques sur
un corps pur ou un mélange

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency



ProSim

Les calculs de propriétés et d'équilibres entre phases peuvent être aisément effectués à partir des interfaces spécifiques de Simulis Thermodynamics. L'utilisateur peut en outre éditer des tableaux et des graphiques puis les exporter dans d'autres applications.

Ce document présente de manière détaillée les différentes étapes à suivre pour effectuer ces types de calcul.

Les étapes décrites sont les suivantes :

-  Étape 1 : Sélectionnez les constituants
-  Étape 2 : Calculez les propriétés d'un corps pur
-  Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange
-  Étape 4 : Calculez un équilibre entre phases

L'exemple présenté s'appuie sur un mélange Benzene, Toluene, O-xylene.

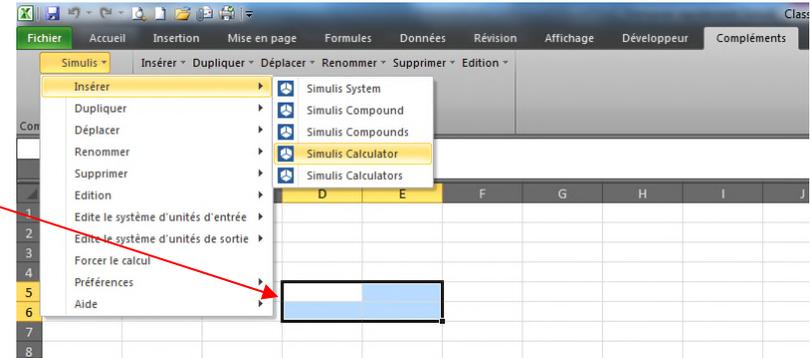
Avant d'aborder ce chapitre il est fortement recommandé de consulter le « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1 » qui couvre notamment les procédures de sélection de constituants et la définition du profil thermodynamique.

Étape 1 : Sélectionnez les constituants

ACCÉDEZ À L'ÉDITEUR DE CALCULATOR THERMODYNAMIQUE :

- Si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans Excel :

Créez l'objet « Calculator » dans votre feuille Excel, puis cliquez sur « Edition »



- Si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans un logiciel de la suite ProSim (ProSimPlus, BatchReactor, BatchColumn etc...) :

Cliquez sur l'icône permettant d'accéder à Simulis Thermodynamics:

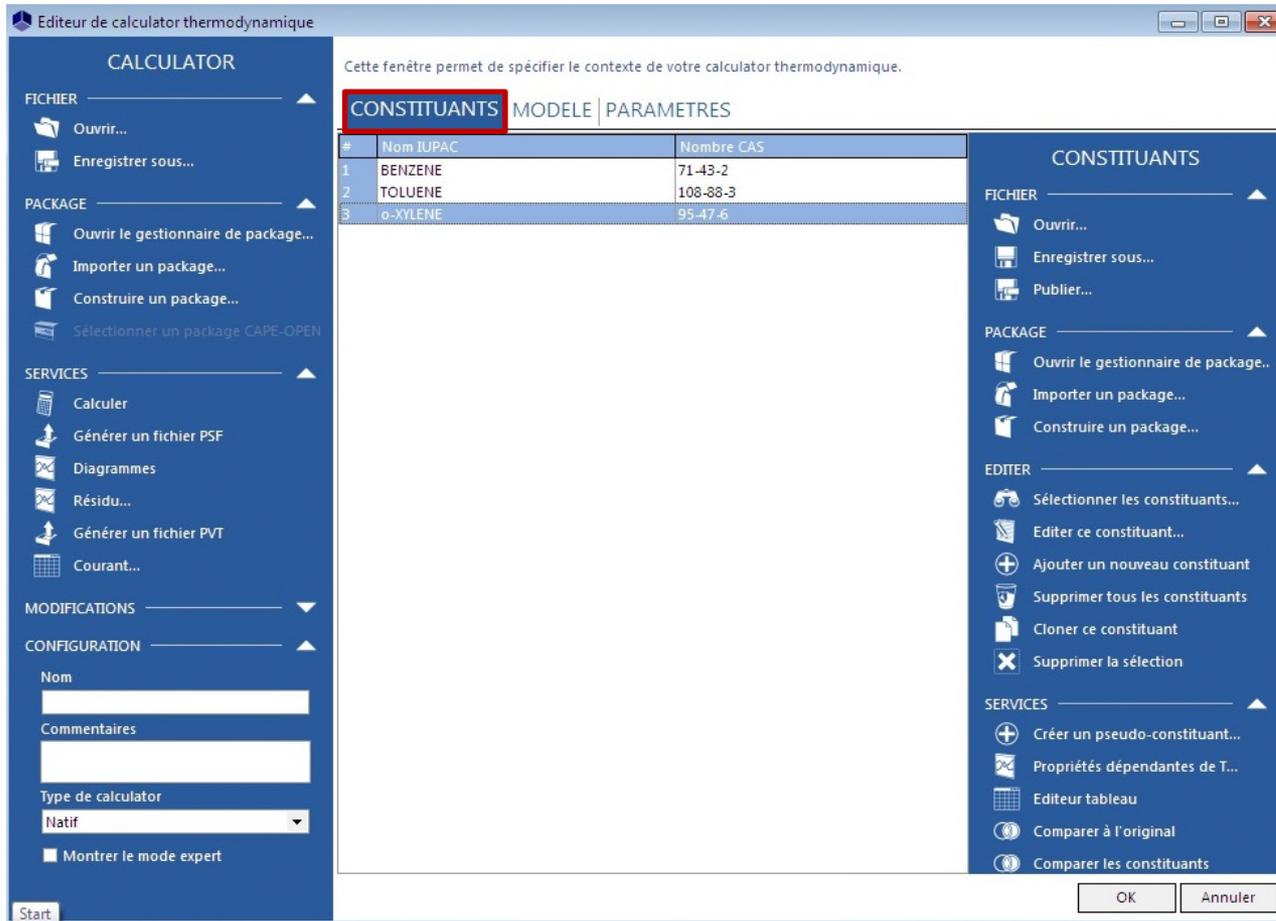


ou



Simulis Thermodynamics est un « composant logiciel », il peut donc être intégré dans différents environnements : logiciels ProSim, Excel, Matlab, ou autres...

Étape 1 : Sélectionnez les constituants

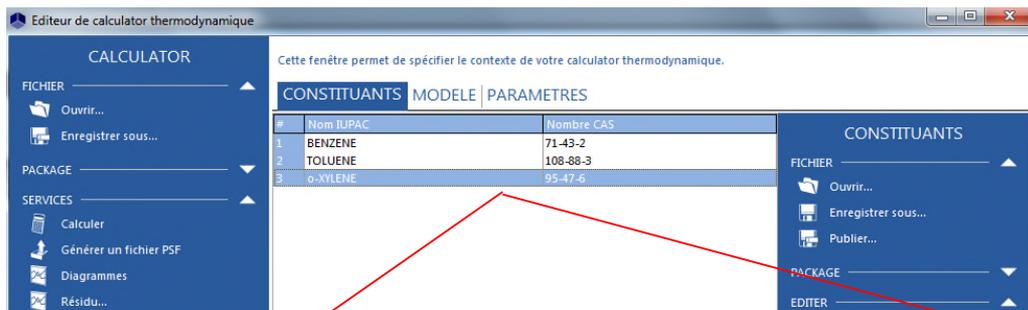


Sélectionnez les constituants suivants :

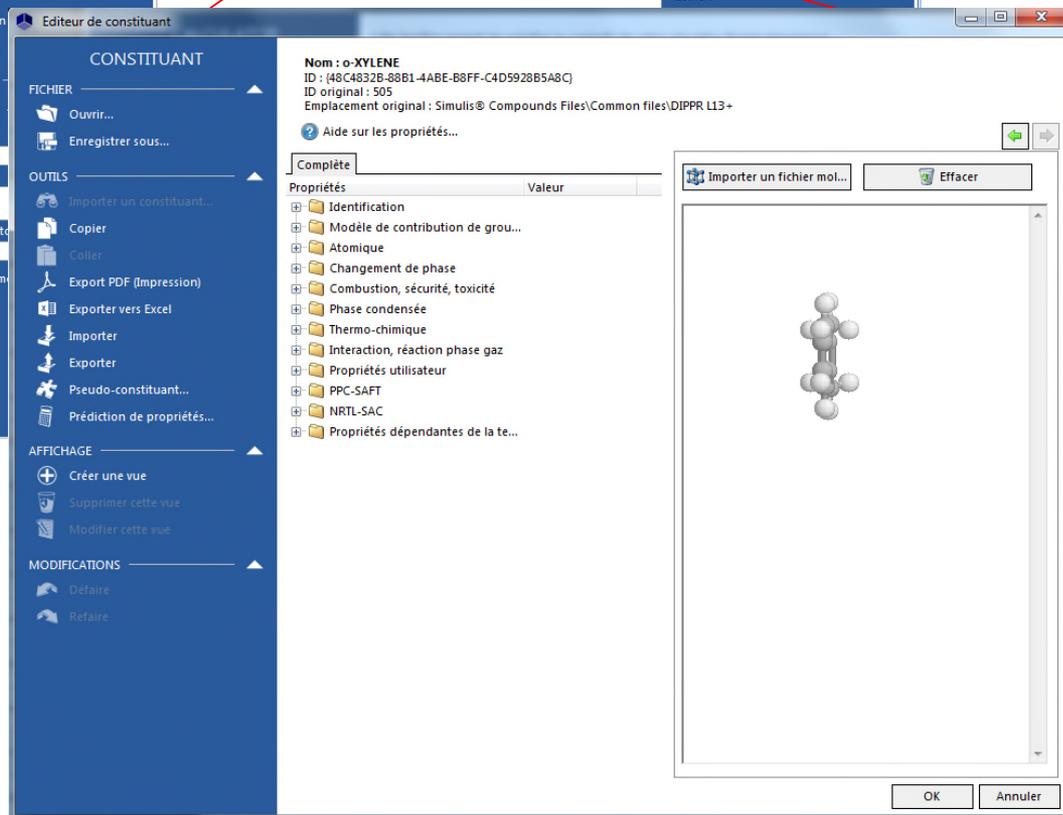
- Benzene (CAS 71-43-2)
- Toluene (CAS 108-88-3)
- O-xylene (CAS 95-47-6)

(pour la description détaillée de cette opération, référez vous au document « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1 »)

Étape 2 : Calculez les propriétés d'un corps pur



Double cliquez sur le constituant que vous souhaitez analyser (dans l'exemple, le o-Xylene).



La fenêtre de description du constituant s'ouvre. Elle présente toutes les propriétés disponibles dans la base de données pour ce constituant.
Déployez les différentes catégories pour en consulter le détail.

Étape 2 : Calculez les propriétés d'un corps pur

Déployez le groupe des « *Propriétés dépendantes de la température* ». Lorsque vous sélectionnez une propriété dépendante de la température, un graphique s'affiche sur la partie droite de la fenêtre.

Editeur de constituant

CONSTITUANT

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

OUTILS

- Importer un constituant...
- Copier
- Coller
- Export PDF (Impression)
- Exporter vers Excel
- Importer
- Exporter
- Pseudo-constituant...
- Prédiction de propriétés...

AFFICHAGE

- Créer une vue
- Supprimer cette vue
- Modifier cette vue

MODIFICATIONS

- Défaire
- Refaire

Nom : o-XYLENE
ID : {48C4832B-88B1-4ABE-B8FF-C4D5928B5A8C}
ID original : 505
Emplacement original : Simulis® Compounds Files\Common files\DIPPR L13+

Aide sur les propriétés...

Propriétés

- Propriétés dépendantes de la ...
 - Chaleur spécifique solide
 - Chaleur spécifique liquide
 - Chaleur spécifique gaz par...
 - Pression de vapeur saturat...
 - Enthalpie de vaporisation
 - Conductivité thermique so...
 - Conductivité thermique liq...
 - Conductivité thermique gaz
 - Viscosité liquide**
 - Corrélation Equation n° 101
 - TMin 247,98 K
 - TMax 418,1 K
 - Coef A -15,489
 - Coef B 1393,5
 - Coef C 0,63711
 - Coef D 0
 - Coef E 0
 - Coef F 0
 - Viscosité gaz
 - Masse volumique solide
 - Masse volumique liquide
 - Tension superficielle
 - Second coefficient du Viriel
 - Constante de la loi de Hen...
 - Chaleur spécifique liquide...
 - Pression de sublimation

Unités: K, Pa.s

Graphique Grille Formulation

Viscosité liquide (Pa.s)

Echelle logarithmique Echelle 1/T

Outils

Température Min	Température Max	Points
247,98 K	418,1 K	20

Température Propriété

247,98 K	1,73459E-003 Pa.
----------	------------------

Copier Imprimer Régression

OK Annuler

Les unités peuvent être modifiées.

La propriété peut être visualisée sous forme de graphique ou de tableau. La formulation peut également être affichée.

Les échelles peuvent être adaptées.

Les paramètres de calcul sont définis ici. Vous pouvez modifier les unités, la valeur du pas, etc...

A chaque modification, cliquez sur « *Rafraîchir* » pour mettre à jour les valeurs et le graphique.

Cliquez sur « *OK* » ou « *Annuler* » si vous souhaitez retourner à l'éditeur de Calculator.

Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange

Afin de calculer les propriétés du mélange, il est nécessaire au préalable de configurer le profil thermodynamique

1- Pour le mélange analysé dans cet exemple, le profil thermodynamique SRK-MHV2-UNIFAC est retenu. Sélectionnez-le dans le menu déroulant.

2- Cliquez ensuite sur « Calculer », pour ouvrir la fenêtre *Service de calculs*.

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS **MODELE** PARAMETRES

Nom: SRK-MHV2-UNIFAC

Catégorie: Tous les profils

Profil: SRK-MHV2-UNIFAC

Type d'approche: SRK-MHV2-UNIFAC

Equation d'état: PSRK

Fonction alpha: PSRK

Règles de mélange: NRTL-PR

Modèle des coefficients d'activité: VTPR

Fugacité liquide pur état standard: Chao-Seader

Volume molaire liquide: Grayson-Streed

Propriétés de transport: Wilson

Calcul enthalpique: Wilson compatible Dechema

Modèle thermodynamique utilisateur: NRTL

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 réactif...

OK Annuler

Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange

- 1- Vous pouvez choisir le type de calcul à effectuer (calculs de propriétés de mélange ou d'équilibres entre phases).
Sélectionnez « *Propriétés Physico-chimiques* ».

Service de calculs

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: Propriétés physico-chimiques

Nom de la session: Nouvelle session

Données: Déterminé automatiquement

Phase: Liquide - Vapeur

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

Valeurs: Fractions (selected), Grandeurs

Type: Molaire (selected), Massique

Total: 0 kmol

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	BENZENE	0	0	0	1
<input type="checkbox"/>	TOLUENE	0	0	0	1
<input checked="" type="checkbox"/>	o-XYLENE	Auto	Auto	Auto	Auto

Type de résultats: Molaire (selected), Massique

Afficher les messages d'erreur:

Compositions identiques quelque soit le type de calcul:

Pour calculer:

Quitter

- 2- Cochez les propriétés devant être calculées (dans l'exemple, la viscosité dynamique).

Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange

1- Entrez les conditions opératoires :

- Pression : 1 atm.
- Température : entre 20°C et 80°C avec un pas de 1°C.
- Composition du mélange : 50% mol en benzène, 10% mol en toluène, « auto » (afin d'avoir une composition globale de 100%) pour le o-xylène.

2 - Vous pouvez changer les systèmes d'unités utilisés pour la présentation des résultats.

3 - Sélectionnez l'option « Tracer automatiquement les résultats ».

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: Propriétés physico-chimiques

Nom de la session: Nouvelle session

Etat physique: Déterminé automatiquement

Système: Liquide - Vapeur

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Pression	atm	1	1	0	1
Température	°C	20	80	1	61

Valeurs: Fractions Grandeurs

Type: Molaire Massique

Total: 0 kmol

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	BENZENE	0.5	0.5	0	1
<input type="checkbox"/>	TOLUENE	0.1	0.1	0	1
<input checked="" type="checkbox"/>	o-XYLENE	Auto	Auto	Auto	Auto

Type de résultats: Molaire Massique

Afficher les messages d'erreur

Compositions identiques quelque soit le type de calcul

Pour calculer: [] [Calculer]

Quitter

Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange

Cliquez sur « *Calculer la session courante* ».

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	°C	20	80	1	61

Valeurs: Fractions Grandeurs

Type: Molaire Massique

Total: 0 kmol

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	BENZENE	0.5	0.5	0	1
<input type="checkbox"/>	TOLUENE	0.1	0.1	0	1
<input checked="" type="checkbox"/>	p-XYLENE	Auto	Auto	Auto	Auto

Type de résultats: Molaire Massique

Afficher les messages d'erreur

Compositions identiques quelque soit le type de calcul

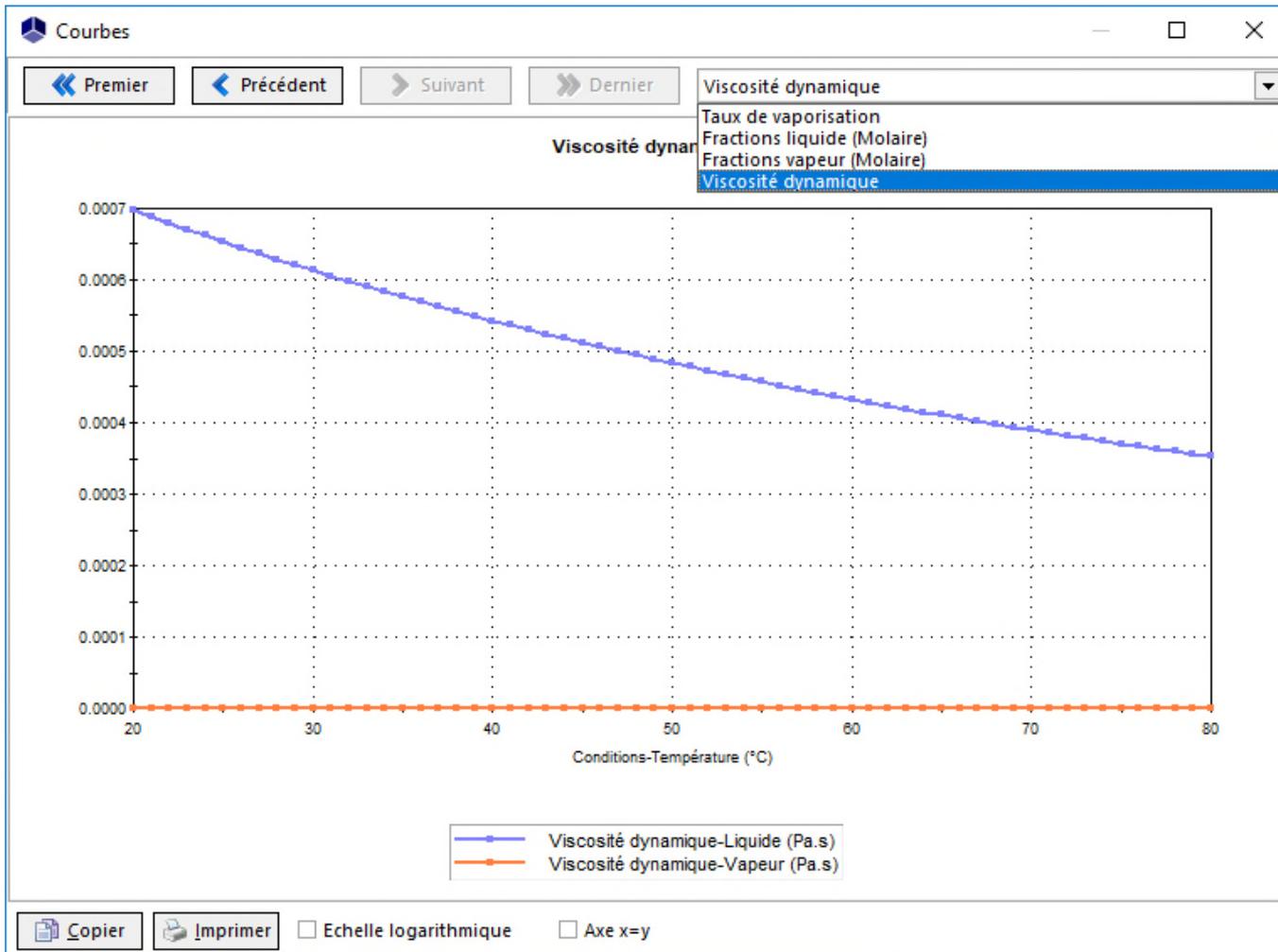
Pour calculer: _____

Quitter



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

Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange



Si l'option « *Tracer automatiquement les résultats* » a été cochée, cette fenêtre apparaît. Plusieurs graphiques sont disponibles, sélectionnez « *Viscosité dynamique* ».

Le graphique peut être copié dans un autre document ou imprimé.

Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange



Le bouton « *Exporter vers Excel* » est actif si vous utilisez Simulis depuis une autre application qu'Excel.

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

Les valeurs des viscosités dynamiques liquide et vapeur du mélange, pour la gamme de température définie (entre 20°C et 80°C), sont affichées dans cette colonne.

Il est possible de tracer les résultats manuellement en cliquant sur « *Tracer les résultats* ».

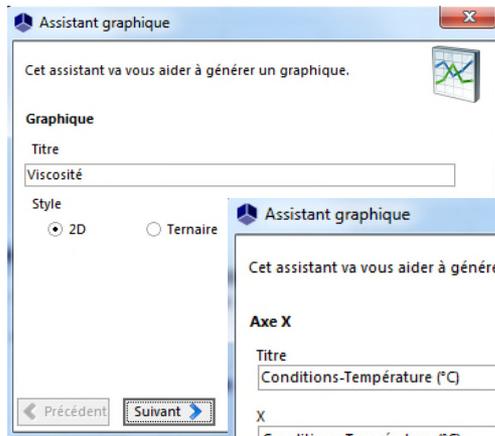
Vous pouvez copier les résultats dans d'autres applications.

The screenshot shows the 'Service de calculs' window. The 'Type de calcul' is set to 'Propriétés physico-chimiques' and the 'Nom de la session' is 'Nouvelle session'. The 'Résultats' tab is active, displaying a table of results. The table has columns for 'Conditions' (Pression, Température), 'stances d'équilibre Liquide-Vapeur' (ZENE, TOLUENE, o-XYLENE), and 'Viscosité dynamique' (Liquide, Vapeur). The 'Viscosité dynamique' column is highlighted with a red box. Below the table, there are buttons for 'Copier les résultats', 'Exporter vers Excel...', and 'Tracer les résultats'. The 'Exporter vers Excel...' button is highlighted with a red box. The 'Tracer les résultats' button is also highlighted with a red box. The 'Copier les résultats' button is highlighted with a red box. The 'Résultats affichés...' button is highlighted with a red box. The 'Afficher les messages d'erreur' and 'Compositions identiques quelque soit le type de calcul' checkboxes are unchecked. The 'Pour calculer:' field is empty. The 'Quitter' button is at the bottom right.

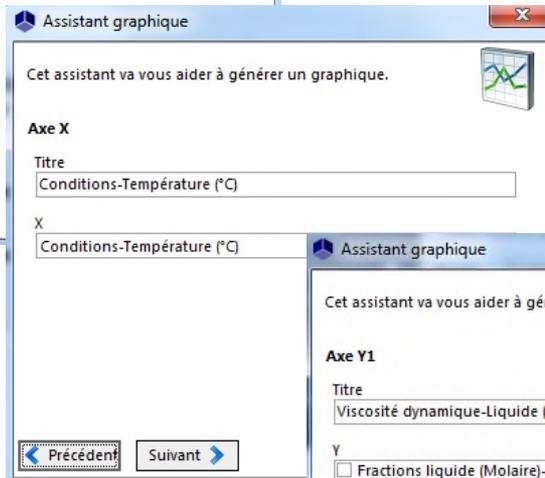
Pression	Température	stances d'équilibre Liquide-Vapeur			Viscosité dynamique	
		ZENE	TOLUENE	o-XYLENE	Liquide	Vapeur
1 atm	20 °C	000	0.00000	0.00000	0.000697605 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	21 °C	000	0.00000	0.00000	0.000688419 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	22 °C	000	0.00000	0.00000	0.000679408 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	23 °C	000	0.00000	0.00000	0.000670566 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	24 °C	000	0.00000	0.00000	0.000661891 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	25 °C	000	0.00000	0.00000	0.000653377 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	26 °C	000	0.00000	0.00000	0.000645021 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	27 °C	000	0.00000	0.00000	0.00063682 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	28 °C	000	0.00000	0.00000	0.000628769 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	29 °C	000	0.00000	0.00000	0.000620864 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	30 °C	000	0.00000	0.00000	0.000613104 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	31 °C	000	0.00000	0.00000	0.000605483 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	32 °C	000	0.00000	0.00000	0.000597999 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	33 °C	000	0.00000	0.00000	0.000590648 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	34 °C	000	0.00000	0.00000	0.000583428 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	35 °C	000	0.00000	0.00000	0.000576336 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	36 °C	000	0.00000	0.00000	0.000569367 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	37 °C	000	0.00000	0.00000	0.000562521 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	38 °C	000	0.00000	0.00000	0.000555793 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	39 °C	000	0.00000	0.00000	0.000549182 Pa.s	0.000000 Pa.s
1 atm	40 °C	000	0.00000	0.00000	0.000542684 Pa.s	0.000000 Pa.s

Étape 3 : Calculez les propriétés d'un mélange

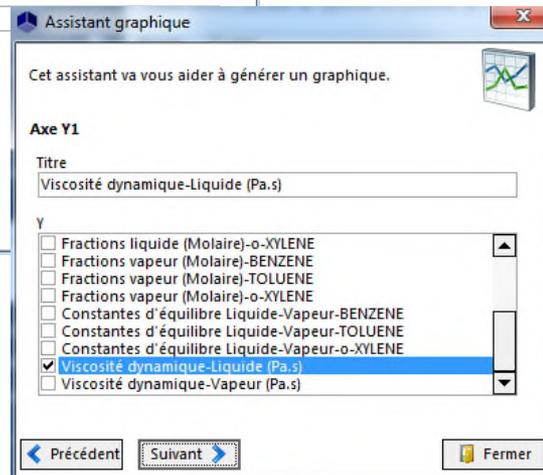
Si vous souhaitez tracer des graphiques manuellement (après avoir cliqué sur « *Tracer les résultats* »), suivez les instructions de l'assistant graphique:



1- Indiquez le titre du graphique.



2- Sélectionnez l'axe des X (ici, la température).



3- Sélectionnez l'axe des Y, (ici, la viscosité dynamique liquide).



Vous pouvez tracer plusieurs courbes sur le même graphique. Il suffit de cocher les différentes propriétés que vous souhaitez analyser.

Étape 4 : Calculez un équilibre entre phases

L'objectif est de faire un calcul d'équilibre sur le mélange. Revenez à la fenêtre *Service de calculs*.

1- Sélectionnez « *Equilibres* » dans le menu déroulant.

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: **Equilibres** (Menu déroulant)
Nom de la session: Nouvelle session

Propriétés critiques
Equilibres
Constantes d'équilibre et tension superficielle
Enveloppe de phase
Déviation d'enveloppe de phase
Propriétés physico-chimiques
Pression de vapeur Reid
Exergie

Liquide - Vapeur
Températures de bulle
Pressions de bulle
wP - Flash à température et pression données
WT - Flash à taux de vaporisation et température donnée
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
Liquide - Liquide - Vapeur

Valeurs: Fractions (Sélectionné), Molaire, Grandeurs, Massique
Type: Molaire (Sélectionné), Massique
Total: 0 kmol

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	BENZENE	0	0	0	1
<input type="checkbox"/>	TOLUENE	0	0	0	1
<input checked="" type="checkbox"/>	<i>o</i> -XYLENE	Auto	Auto	Auto	Auto

Type de résultats: Molaire (Sélectionné), Massique
Initialisation automatique:
Constituant: [Sélectionner]

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

Pour calculer: [Champ de saisie]

Quitter

2- La fenêtre affiche les différents types de flash pouvant être calculés, choisissez « *Flash à température et pression données* ».

Étape 4 : Calculez un équilibre entre phases

1- Entrez les conditions de calcul du flash :

- Pression : 1 atm.
- Température : entre 115°C et 130°C avec un pas de 1°C.
- Composition : 10% mol de benzène, 50% mol de toluène, « auto » pour le o-xylène.

2- Cliquez sur « Calculer la session courante ».

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Projet : C:\dde

Type de calcul : Equilibres

Nom de la session : Nouvelle session

Propriété

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Température	°C	115	130	1	16
Pression	atm	1	1	0	1

Valeurs

Type : Fractions Grandeur Total Molaire Massique

Composition du mélange

Auto	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	BENZENE	0,1	0,1	0	1
<input type="checkbox"/>	TOLUENE	0,5	0,5	0	1
<input checked="" type="checkbox"/>	o-XYLENE	Auto	Auto	Auto	Auto

Type de résultats : Molaire Massique

Initialisation automatique

Constituant :

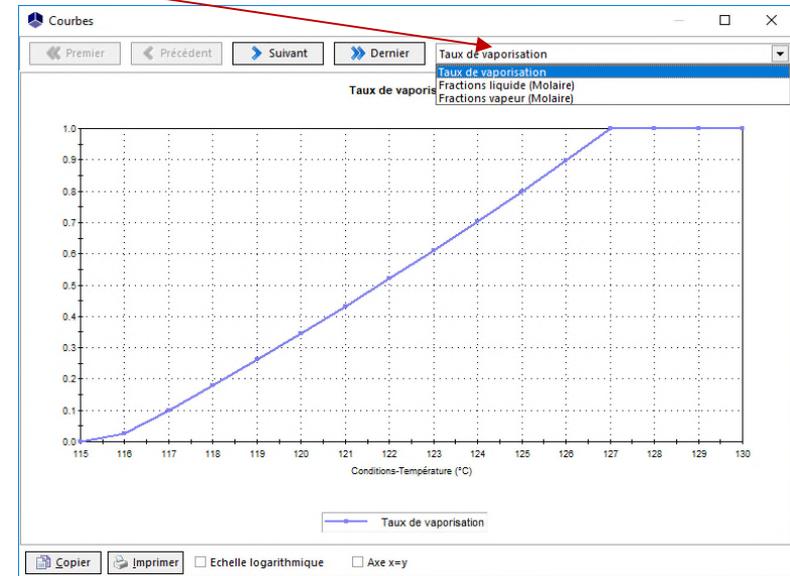
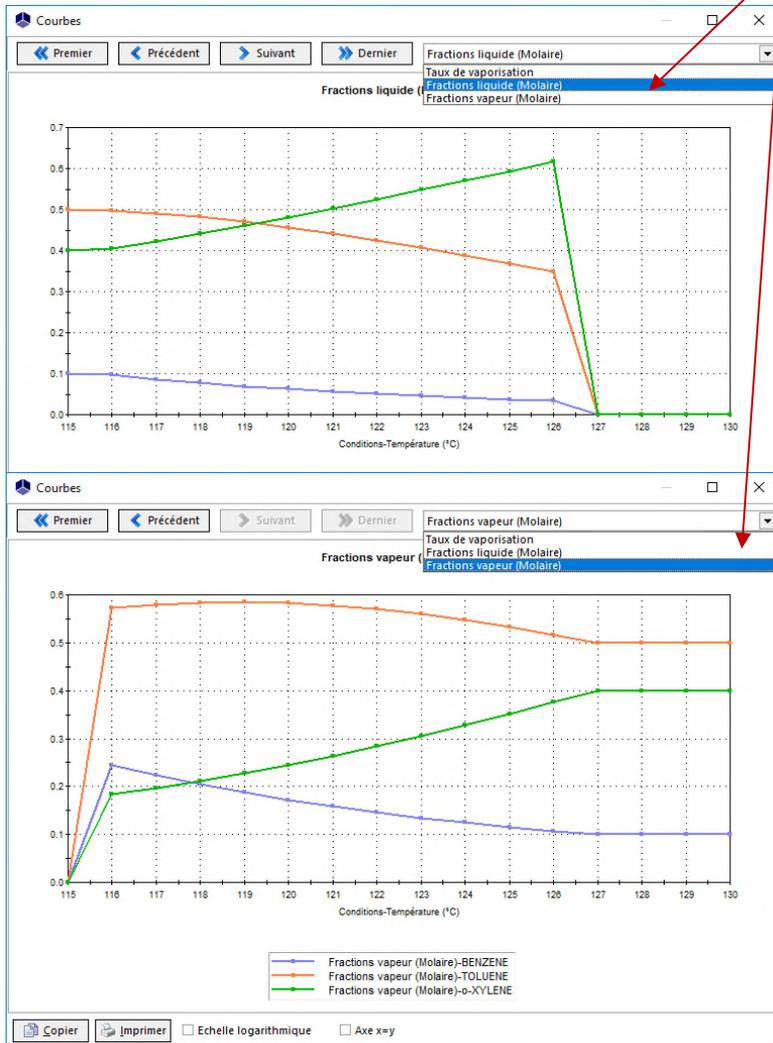
Afficher les messages d'erreur

Pour calculer:

Quitter

Étape 4 : Calculez un équilibre entre phases

Si l'option « *Tracer automatiquement les résultats* » a été cochée, vous pouvez sélectionner le graphique que vous souhaitez visualiser à partir du menu déroulant.



Étape 4 : Calculez un équilibre entre phases

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

Service de calculs

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Projet C:\dde

Type de calcul Equilibres

Nom de la session Nouvelle session

Données Résultats

Résultats

Conditions		Composition du mélange (Molaire)			Résultats	Fractions liquide (M)
Température	Pression	BENZENE	TOLUENE	o-XYLENE	Taux de vaporis...	BENZENE
115 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,00000	0,100000
116 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	2,43816E-002	9,64100E-002
117 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,100055	8,63177E-002
118 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,178923	7,72915E-002
119 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,260624	6,92882E-002
120 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,344765	6,22334E-002
121 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,431041	5,60315E-002
122 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,519323	5,05768E-002
123 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,609727	4,57643E-002
124 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,702629	4,14964E-002
125 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,798665	3,76869E-002
126 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	0,898740	3,42622E-002
127 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	1,00000	0,00000
128 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	1,00000	0,00000
129 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	1,00000	0,00000
130 °C	1 atm	0,100000	0,500000	0,400000	1,00000	0,00000

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

Afficher les messages d'erreur

Pour calculer: []

Quitter

Il est possible de copier les résultats et de tracer les graphiques manuellement.



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
info@prosim.net



ProSim, Inc.

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

☎: +1 215 600 3759