

Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 6 : Identifiez la décomposition des corps purs permettant l'utilisation des modèles de contribution de groupe

Software & Services In Process Simulation

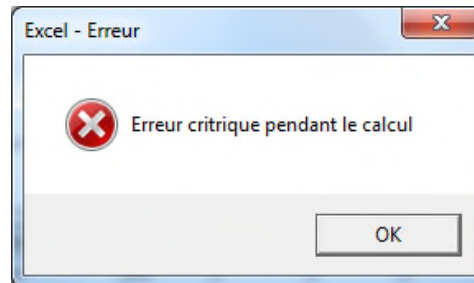
We guide You to efficiency



ProSim

Introduction

Lorsque vous utilisez un modèle prédictif tel que UNIFAC ou PPR78 pour calculer des propriétés de mélange, vous pouvez obtenir le message suivant :



Dans la plupart des cas, ce message indique que des informations sur le mélange sont manquantes, en particulier la décomposition des corps purs.

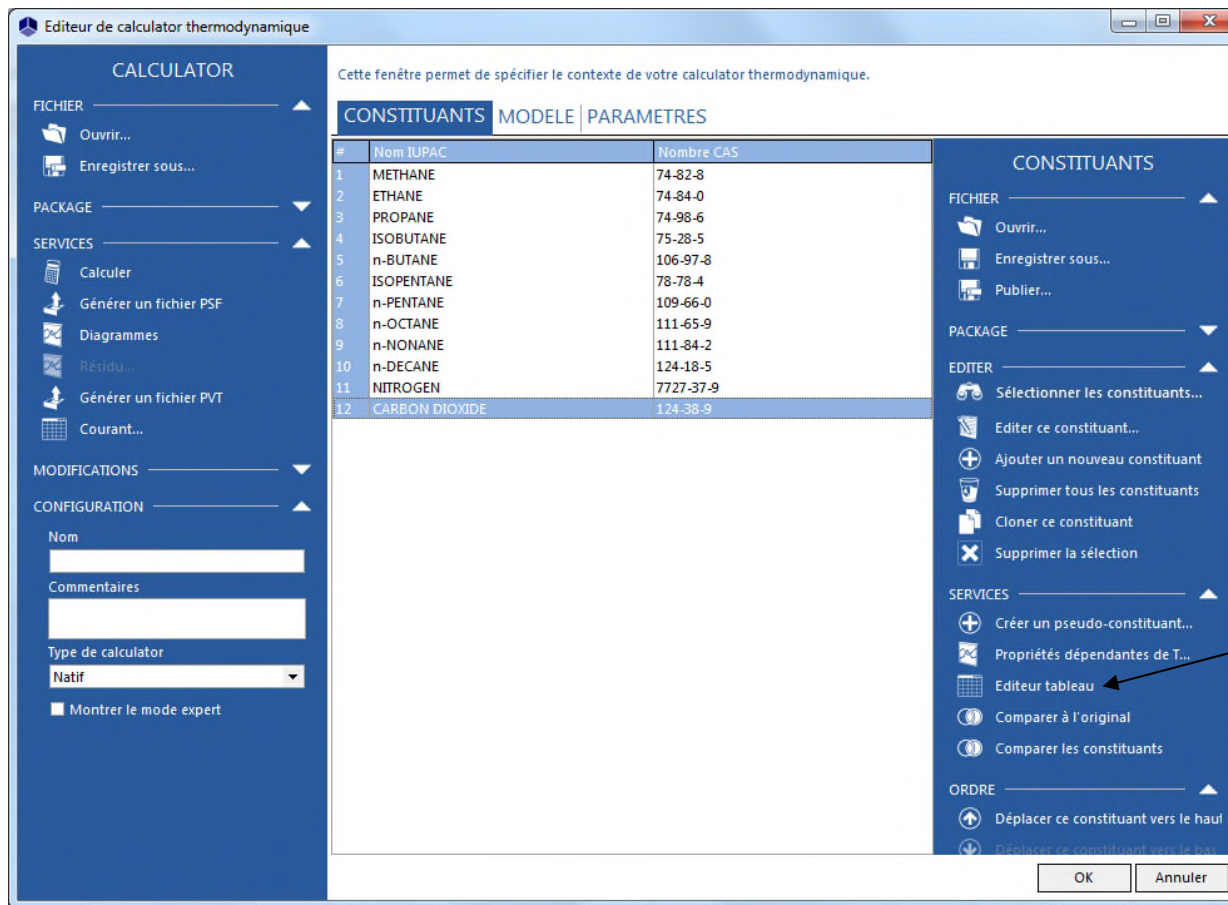
Les étapes présentées montrent comment ajouter les informations de décomposition demandées.

Dans cet exemple, le mélange contient les constituants suivants : méthane, éthane, propane, isobutane, n-butane, isopentane, n-pentane, n-heptane, n-octane, n-nonane, n-décane, azote et dioxyde de carbone.

Le modèle UNIFAC VTPR est sélectionné.

A ce stade, il est supposé que les composants et le modèle thermodynamique ont déjà été sélectionnés. Pour les détails sur la procédure de configuration de ces éléments, nous vous invitons à consulter le document « *Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1* ».

Etape 1 : Editez le Calculator



Ouvrez l'Editeur de calculator thermodynamique incluant les constituants et le modèle, puis cliquez sur "Editeur tableau".

Etape 1 : Editez le Calculator

Editeur de constituant

Cette fenêtre vous aide à visualiser les propriétés des constituants.

Complète

Propriétés

	METHANE	ETHANE	PROPANE	ISOBUTANE	n-BUTANE	ISOPENTANE	n-PENTANE	n-OCTANE	n-NONANE	n-DECANE	NITROGEN	CARBON DIOXIDE
Identification												
Modèle de contribution de groupe												
Standard												
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund) 1993	[CH4] 1	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[NITROGEN] 1	[CARBON D] 1
Décomposition UNIFAC original	<inconnu>	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC PSRK	[CH4] 1	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition UNIFAC LLE	<inconnu>	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund)	<inconnu>	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (Larsen)	[CH4] 1	[C2H6] 1	[C3H8] 1	[C4H10] 1	[C4H10] 1	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition PPR 78	[CH4] 1	[C2H6] 1	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition UNIFAC VTPR	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC UMRPRU	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition NRTL PR	[CH4] 1	[C2H6] 1	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition GC-PPC-SAFT	[METHANE](0, 0) 1	[ETHANE](0, 0) 1	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](2, 0) 3 [CH]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](2, 0) 3 [CH]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[NITROGEN](0, 0) 1	<inconnu>
Utilisateur												
Atomique												
Changement de phase												
Combustion, sécurité, toxicité												
Phase condensée												
Thermo-chimique												
Interaction, réaction phase gaz												
Propriétés utilisateur												
PPC-SAFT												
NRTL-SAC												
Propriétés dépendantes de la température												

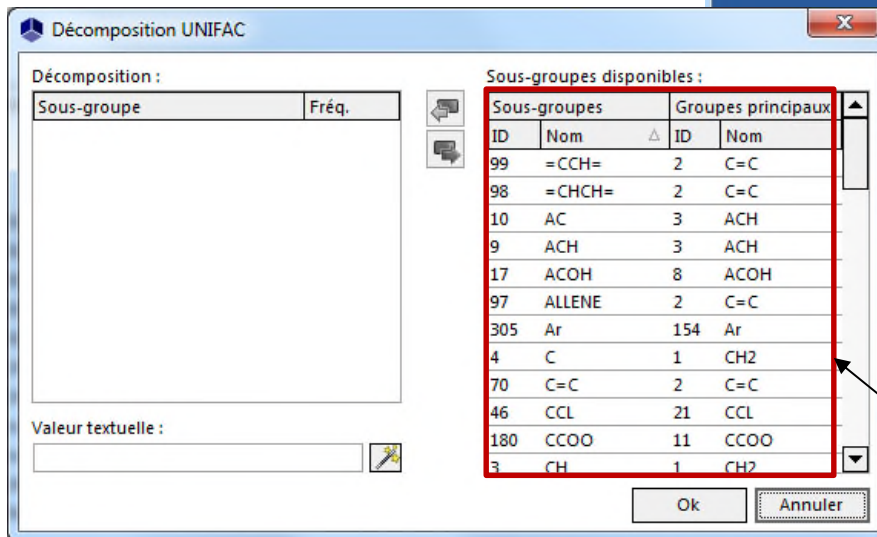
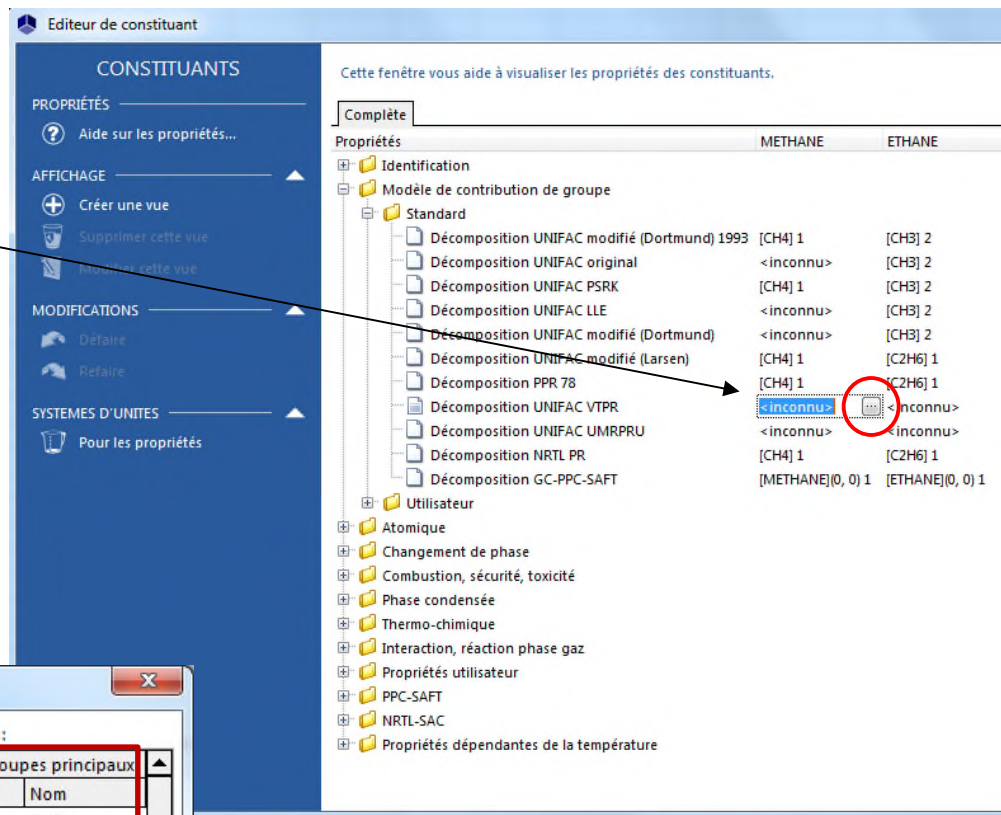
Ok Annuler

Les décompositions disponibles, pour les différents modèles thermodynamiques, sont présentées dans l'onglet « *Modèle de contribution de groupe* ».

Dans cet exemple, les décompositions du modèle UNIFAC VTPR sont manquantes pour tous les constituants (marquées comme « *inconnu* »).

Etape 2 : Ajoutez les informations

Cliquez sur le champs
« *inconnu* », puis sur les 3
points qui apparaissent.



La fenêtre de décomposition s'ouvre.
Les sous-groupes disponibles, pour le
modèle thermodynamique sélectionné,
sont présentés dans la partie droite.

Etape 2 : Ajoutez les informations

2 méthodes sont possibles pour obtenir la décomposition d'un constituant :

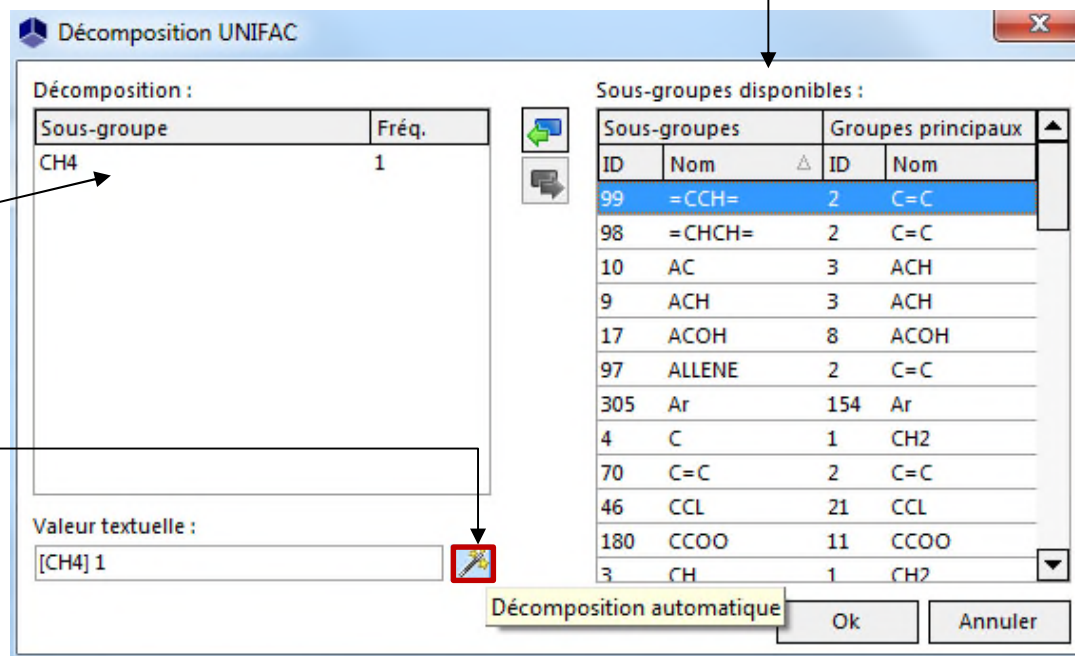
Méthode manuelle :

Double-cliquez sur les différents sous-groupes correspondant à la structure chimique du constituant.

Les sous-groupes sélectionnés, ainsi que leur fréquence dans la molécule, sont affichés dans la partie gauche de la fenêtre.

Méthode automatique :

Cliquez sur l'icône représentant une baguette magique. Dans ce cas Simulis décompose automatiquement la molécule à partir du SMILES.



La méthode automatique fonctionne à condition que le SMILES du constituant ait été renseigné et que les sous-groupes impliqués soient disponibles pour le modèle choisi.

Etape 3 : Achevez l'opération et validez

7

Répétez l'opération jusqu'à ce que l'ensemble des champs du modèle soit renseigné.

Editeur de constituant

CONSTITUANTS

PROPRIÉTÉS

Aide sur les propriétés...

AFFICHAGE

Créer une vue

Supprimer cette vue

Modifier cette vue

MODIFICATIONS

Defaire

Retour

SYSTEMES D'UNITES

Pour les propriétés

Cette fenêtre vous aide à visualiser les propriétés des constituants.

Complète

Propriétés	METHANE	ETHANE	PROPANE	ISOBUTANE	n-BUTANE	ISOPENTANE	n-PENTANE	n-OCTANE	n-NONANE	n-DECANE	NITROGEN	CARBON DIOXIDE
Identification												
Modèle de contribution de groupe												
Standard												
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund) 1993	[CH4] 1	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[NITROGEN] 1	[CARBON D] 1
Décomposition UNIFAC original	<inconnu>	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC PSRK	[CH4] 1	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition UNIFAC LLE	<inconnu>	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund)	<inconnu>	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (Larsen)	[CH4] 1	[C2H6] 1	[C3H8] 1	[C4H10] 1	[C4H10] 1	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition PPR 78	[CH4] 1	[C2H6] 1	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition UNIFAC VTPR	[CH4] 1	[CH3] 2	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition UNIFAC UMRPRU	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition NRTL PR	[CH4] 1	[C2H6] 1	[CH3] 2 [CH2] 1	[CH3] 3 [CH] 1	[CH3] 2 [CH2] 2	[CH3] 3 [CH2] 1 [...]	[CH3] 2 [CH2] 3	[CH3] 2 [CH2] 6	[CH3] 2 [CH2] 7	[CH3] 2 [CH2] 8	[N2] 1	[CO2] 1
Décomposition GC-PPC-SAFT	[METHANE](0, 0) 1	[ETHANE](0, 0) 1	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](2, 0) 3 [CH]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](2, 0) 2 [CH]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[CH3](1, 0) 2 [CH2]...	[NITROGEN](0, 0) 1	<inconnu>
Utilisateur												
Atomique												
Changement de phase												
Combustion, sécurité, toxicité												
Phase condensée												
Thermo-chimique												
Interaction, réaction phase gaz												
Propriétés utilisateur												
PPC-SAFT												
NRTL-SAC												
Propriétés dépendantes de la température												

Ok Annuler



Afin d'utiliser un modèle de contribution de groupe, il est nécessaire que la décomposition de tous les constituants soit renseignée pour ce modèle.

Cliquez sur « OK » pour valider. Vous pouvez maintenant utiliser le modèle thermodynamique UNIFAC VTPR pour ce mélange.

Etape 3 : Achevez l'opération et validez



Lorsque vous sélectionnez un modèle thermodynamique prédictif dans l'onglet « *Modèle* », il est possible d'accéder aux paramètres des groupes et sous - groupes correspondant aux constituants présents dans le calculator.

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS **MODELE** PARAMETRES

Nom: VTPR

Catégorie: Tous les profils

Profil: VTPR

Type d'approche: Par équation d'état

Equation d'état: PR Généralisée

Fonction alpha: Twu

Règles de mélange: VTPR

Modèle des coefficients d'activité: UNIFAC VTPR

Fugacité liquide pur état standard: Standard

Volume molaire liquide: Translation de Volume

Propriétés de transport: Modèle de Ely-Hanley (méthode TRAP)

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

- Paramètres du modèle réactif...
- Paramètres du modèle prédictif...
- Paramètres de modèle polymère...

EAU-HYDROCARBURE

EAU PURE

OK Annuler

Cliquez sur
« Paramètres du
modèle prédictif ».

Etape 3 : Achevez l'opération et validez

Une fenêtre s'ouvre, affichant la décomposition obtenue avec le modèle prédictif sélectionné :

Editeur de modèles prédictifs:

Zoom : 100 %

Legend:

- No parameter
- 1 parameter
- 2 parameters
- 3 parameters

Matrix visualization:

ID	Nom	Paramètres
1	CH2	
151	CO2	
152	CH4	
155	N2	

Groups and Subgroups:

Groupes principaux	Sous-groupes
[151] CO2	[306] CO2
[155] N2	[304] N2

Parameters:

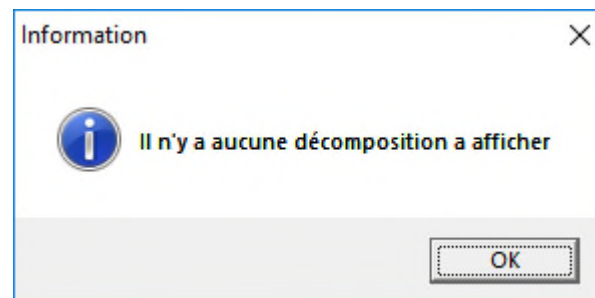
Paramètres
151→155 184.15 0 0
155→151 80.825 0 0

Table of model results:

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1				Delivery 2017
CH3	1	0	1.2958		Delivery 2017
CH2	2	0	0.9471		Delivery 2017
CH	3	0	0.2629		Delivery 2017
N2	155				Delivery 2017
N2	304	0	0.93		Delivery 2017
CO2	151				Delivery 2017
CO2	306	0	0.982		Delivery 2017
CH4	152				Delivery 2017
CH4	307	0	1.124		Delivery 2017

Placez votre curseur sur une cellule de la matrice afin d'afficher les paramètres d'interaction de groupes

Si la décomposition, pour le modèle sélectionné, n'a pas été renseignée pour l'ensemble des constituants, l'erreur suivante est affichée :





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

☎: +33 (0) 5 62 88 24 30



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