Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 8 : Régression des paramètres d'interaction binaire à partir de données expérimentales sur Excel

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency

ProSim

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Introduction

Certains modèles thermodynamiques nécessitent d'avoir des paramètres d'interaction binaire (PIB) afin de prédire correctement les équilibres entre phases à partir des règles de mélange.

Malheureusement, ces PIB ne sont pas nécessairement disponibles dans la base de données du logiciel ou dans la littérature.

Ce document présente la façon d'estimer les PIB d'un mélange Ethanol – Acetate d'éthyle, en se basant sur un jeu réduit de données expérimentales (fournies dans le fichier Excel en pièce jointe), en utilisant Simulis Thermodynamics dans Excel.

Il est important de noter que la précision et la pertinence des valeurs estimées dépendent fortement des données expérimentales. Il est conseillé d'utiliser ces valeurs dans la même plage de température que celle correspondant aux données expérimentales. En dehors de cette plage les capacités prédictives du modèle ne sont pas garanties. Plus les plages de pression et température sont larges plus le modèle est fiable.

Pour traiter cet exemple, il est nécessaire d'avoir accès à l'option « composant logiciel » de Simulis Thermodynamics, afin de pouvoir l'utiliser dans l'environnement Excel.
Avant de traiter ce cas, il est conseillé de consulter "Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas n°1" expliquant comment insérer un objet Simulis dans Excel, sélectionner des constituants et définir un système thermodynamique.

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 1 : Créez la feuille de calcul

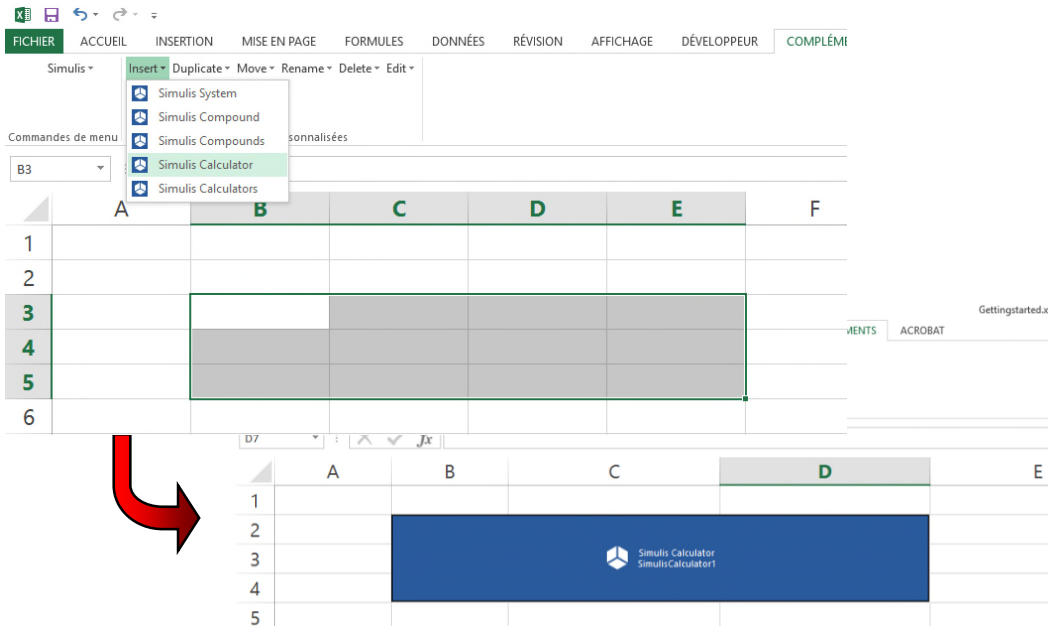
- Dans Excel, créez la feuille de calcul avec les données expérimentales correspondant aux compositions liquide et vapeur du mélange.

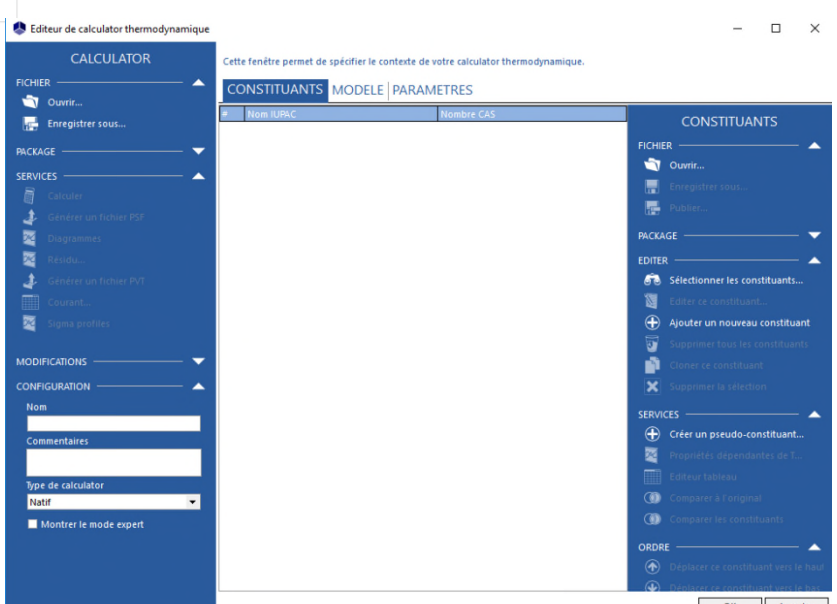
Données expérimentales				
Reference	F. Mato et al.,An. Quim. Ser. A. 1984. Vol. 80, p.338			
P	760	mmHg		
T (°C)	Fraction phase liquide (x)		Fraction phase vapeur (y)	
	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL
78,30	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000
78,30	0,0130	0,9870	0,0300	0,9700
78,00	0,0220	0,9780	0,0500	0,9500
77,80	0,0300	0,9700	0,0660	0,9340
76,70	0,0710	0,9290	0,1340	0,8660
76,10	0,0950	0,9050	0,1760	0,8240
76,00	0,0970	0,9030	0,1750	0,8250
75,20	0,1350	0,8650	0,2300	0,7700
75,10	0,1360	0,8640	0,2320	0,7680
74,40	0,1500	0,8500	0,2490	0,7510
73,40	0,2570	0,7430	0,3510	0,6490
72,70	0,3310	0,6690	0,4100	0,5900
72,80	0,3320	0,6680	0,4040	0,5960
72,60	0,3600	0,6400	0,4220	0,5780
72,20	0,4620	0,5380	0,4950	0,5050
72,10	0,5450	0,4550	0,5450	0,4550
72,20	0,6280	0,3720	0,5920	0,4080
72,40	0,6810	0,3190	0,6350	0,3650
72,70	0,7740	0,2260	0,6810	0,3190
73,40	0,8270	0,1730	0,7280	0,2720
73,60	0,8320	0,1680	0,7630	0,2370
74,40	0,8900	0,1100	0,8380	0,1620
74,60	0,9170	0,0830	0,8650	0,1350
75,30	0,9360	0,0640	0,9000	0,1000
77,10	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000

Le jeu de données peut être soit à température constante (isotherme) soit à pression constante (isobare). Nous sommes ici à pression constante, cependant la température ne varie que de 1,20 °C ce qui rend difficile l'estimation des paramètres dépendant de la température. Cela reste possible mais il est vivement conseillé de refaire l'estimation en utilisant des jeux additionnels de données.

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 2 : Insérez un objet “Simulis calculator” et définissez le modèle thermodynamique



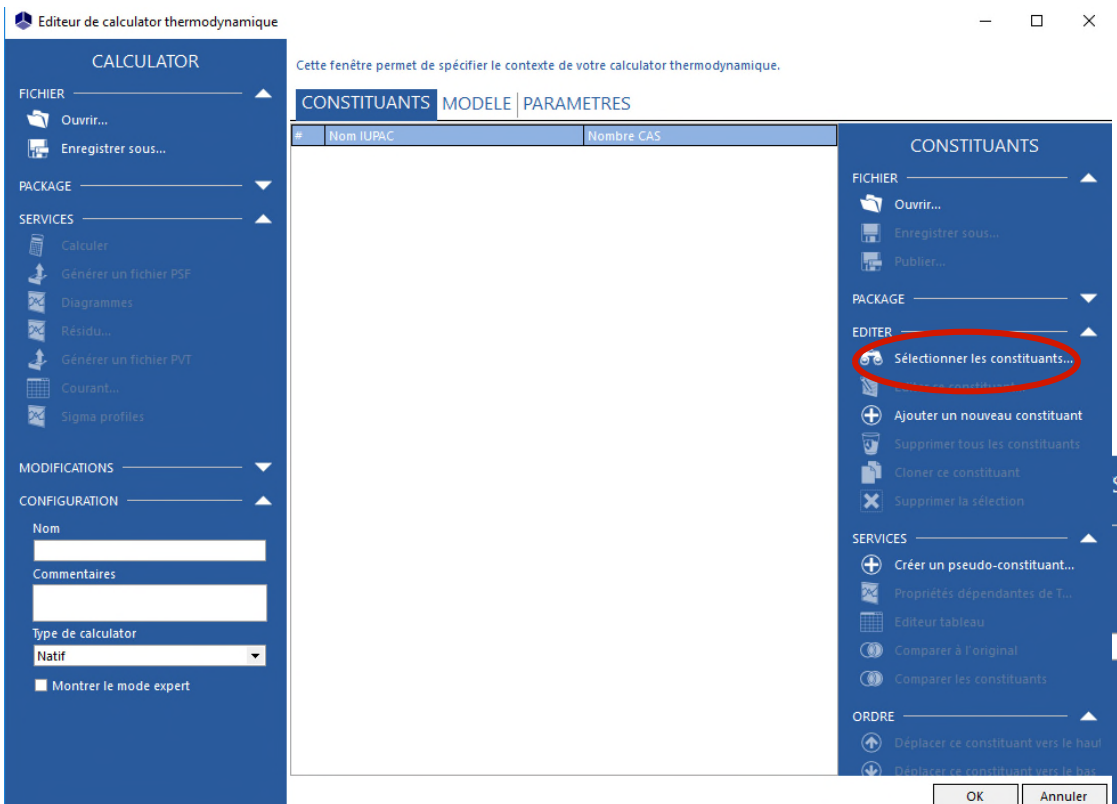


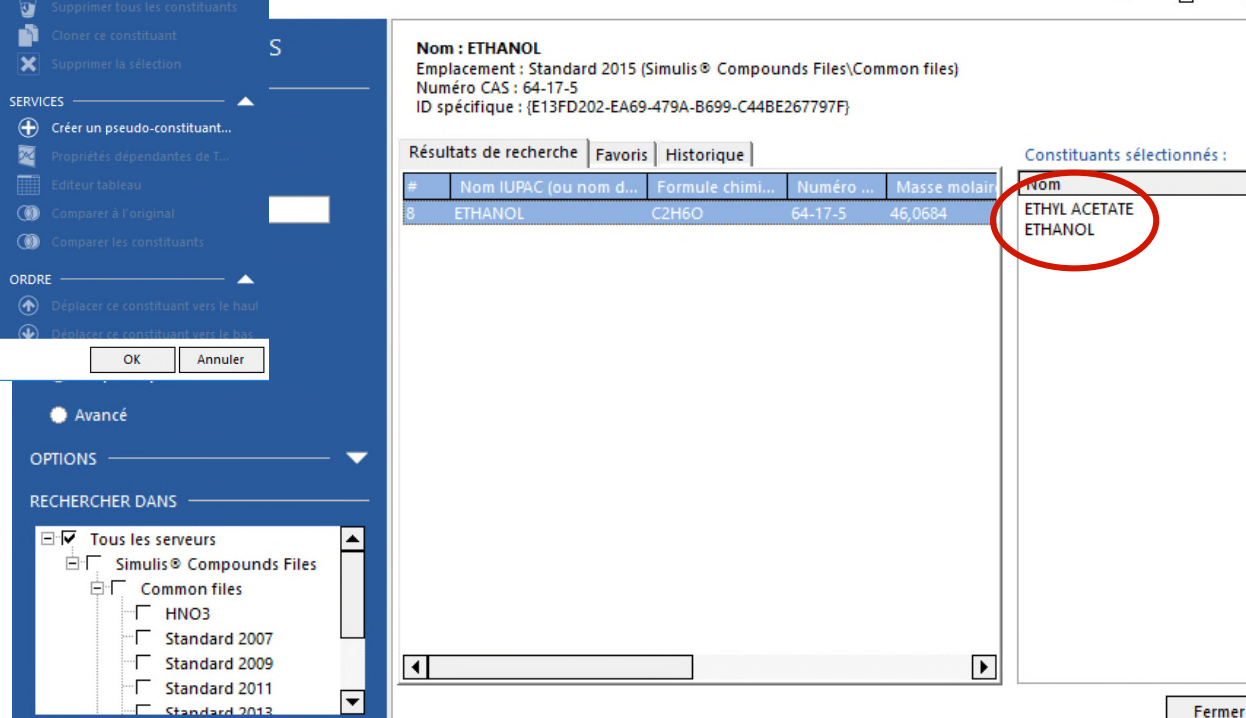
Vous pouvez vous référer à “*Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas n°1*” pour plus de détails sur ces opérations.

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 2 : Insérez un objet “Simulis calculator” et définissez le modèle thermodynamique

Sélectionnez les constituants : Ethyl-Acetate et Ethanol

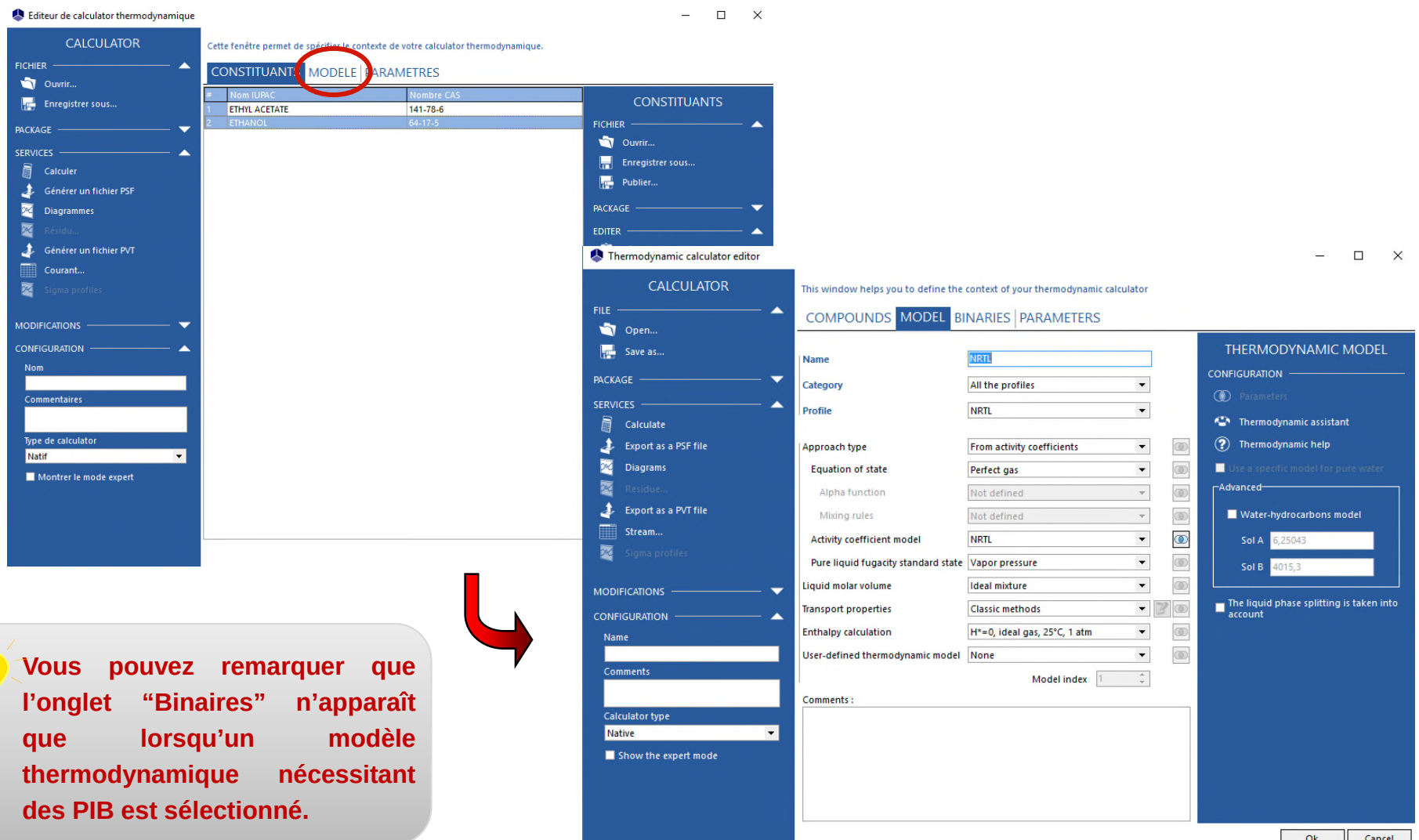




Vous pouvez vous réferer à “*Démarrer avec Simulis Thermodynamics , cas n°1*” pour plus de détails sur ces opérations.

Étape 2 : Insérez un objet “Simulis calculator” et définissez le modèle thermodynamique

Sélectionnez le modèle thermodynamique : NRTL

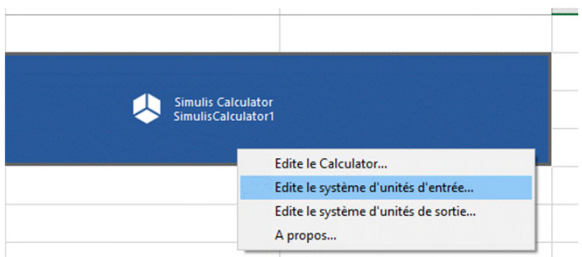


Vous pouvez remarquer que l’onglet “Binaires” n’apparaît que lorsqu’un modèle thermodynamique nécessitant des PIB est sélectionné.

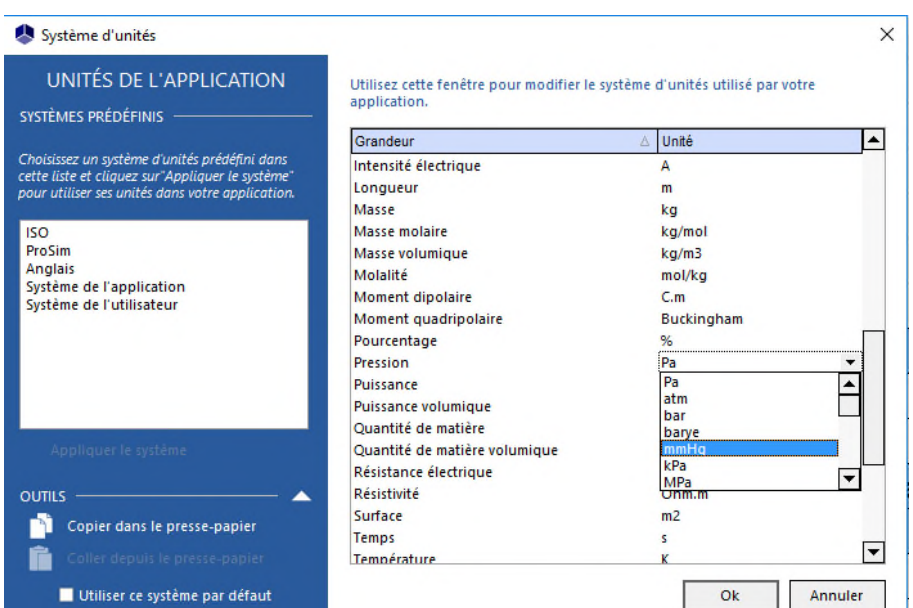
© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 3 : Changez le système d'unités

- Par défaut le système d'unités est en Pa et en K. Nos données étant fournies en mmHg et en °C, il est nécessaire d'adapter le système d'unités afin d'éviter le calcul de conversion.



Cliquez sur le Calculator avec le bouton droit et sélectionnez *"Édite le système d'unités d'entrée…"*.

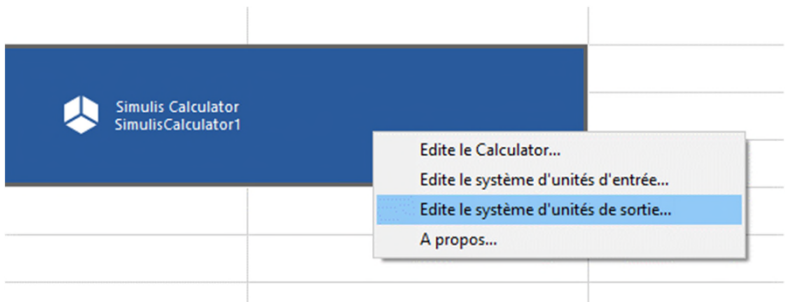


La fenêtre du système d'unités s'ouvre. Faites défiler afin de trouver la "*Pression*", puis sélectionnez "*Pa*" et changez le en "*mmHg*". Répétez l'opération pour la température puis cliquez sur "*OK*".

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

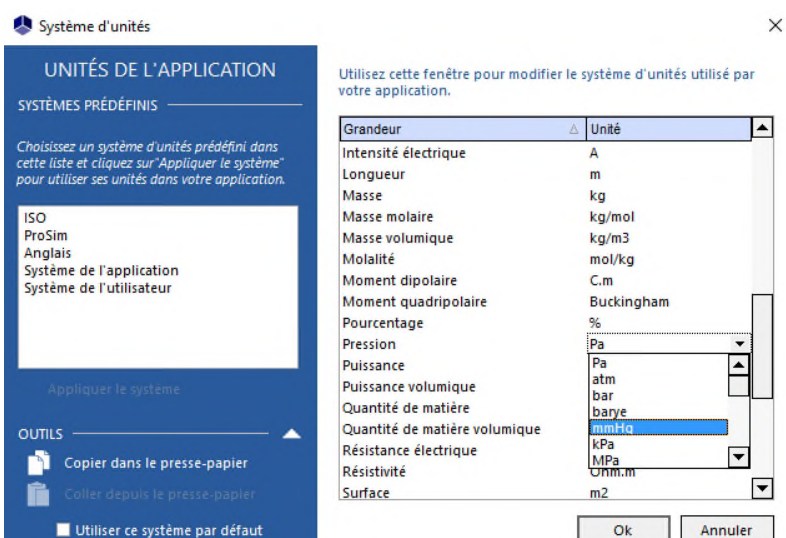
Étape 3 : Changez le système d'unités

- Répetez l'opération pour le système d'unités de sortie.



Cliquez sur le Calculator avec le bouton droit et sélectionnez *"Édite le système d'unités de sortie…".*

Si aucun changement n'est effectué, les résultats des calculs seront donnés dans le système d'unités par défaut.



La fenêtre du système d'unités s'ouvre. Faites défiler afin de trouver la "*Pression*", puis sélectionnez "*Pa*" et changez le en "*mmHg*". Répétez l'opération pour la température puis cliquez sur "*OK*".

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 4 : Créez un tableau permettant l'initialisation et le calcul des paramètres d'interaction binaire

- Ce tableau permet de définir les valeurs d'initialisation utilisées pour le calcul des PIB
- 6 paramètres sont nécessaires dans le modèle NRTL (Cij0, Cji0, aij0, Cij(T), Cji(T), aij(T)). Plus ou moins de paramètres sont nécessaires dans les autres modèles. Vous pouvez consulter l'onglet "*binaires*" du calculator afin de connaître le nombre exact de paramètres nécessaires.

Simulis Calculator
SimulisCalculator1

Constituants		Paramètres d'intéraction binaire					
1	2	Cij0	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ETHYL ACETATE	ETHANOL	0	0	0,2	0	0	0

Données expérimentales				
Reference	F. Mato et al.,An. Quim. Ser. A. 1984. Vol. 80, p.338			
P	760	mmHg		
T (°C)	Fraction phase liquide (x)		Fraction phase vapeur (y)	
	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL
78,30	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000
78,30	0,0130	0,9870	0,0300	0,9700
78,00	0,0220	0,9780	0,0500	0,9500
77,80	0,0300	0,9700	0,0660	0,9340
76,70	0,0710	0,9290	0,1340	0,8660
76,10	0,0950	0,9050	0,1760	0,8240
76,00	0,0970	0,9030	0,1750	0,8250
75,20	0,1350	0,8650	0,2300	0,7700
75,10	0,1360	0,8640	0,2320	0,7680
74,40	0,1500	0,8500	0,2490	0,7510
73,40	0,2570	0,7430	0,3510	0,6490
72,70	0,3310	0,6690	0,4100	0,5900
72,80	0,3320	0,6680	0,4040	0,5960
72,60	0,3600	0,6400	0,4220	0,5780

1 et 2 correspondent aux positions respectives des constituants dans le calculator.

Tous les paramètres sont fixés à 0 excepté a_{ij}^{0} qui est généralement fixé à 0,2 pour un équilibre liquide-vapeur (cas présent) et 0,3 pour une démixtion liquide-liquide.

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 5 : Calculez les valeurs des compositions des phases liquide et vapeur

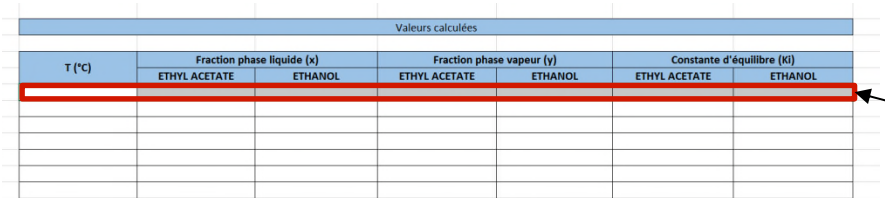
- Préparez un autre tableau qui présentera les résultats des calculs d'équilibre (température, fractions en phases liquide et vapeur et constantes d'équilibre).

aij0	CijT	CjiT	aijT
0,2	0	0	0

	Valeurs calculées						
apeur (y)	T (°C)	Fraction phase liquide (x)		Fraction phase vapeur (y)		Constante d'équilibre (Ki)	
ETHANOL		ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL
1,0000							
0,9700							
0,9500							
0,9340							
0,8660							
0,8240							
0,8250							
0,7700							
0,7680							
0,7510							
0,6490							
0,5900							
0,5960							
0,5780							
0,5050							
0,4550							
0,4080							
0,3650							
0,3190							
0,2720							
0,2370							
0,1620							
0,1350							
0,1000							
0,0000							

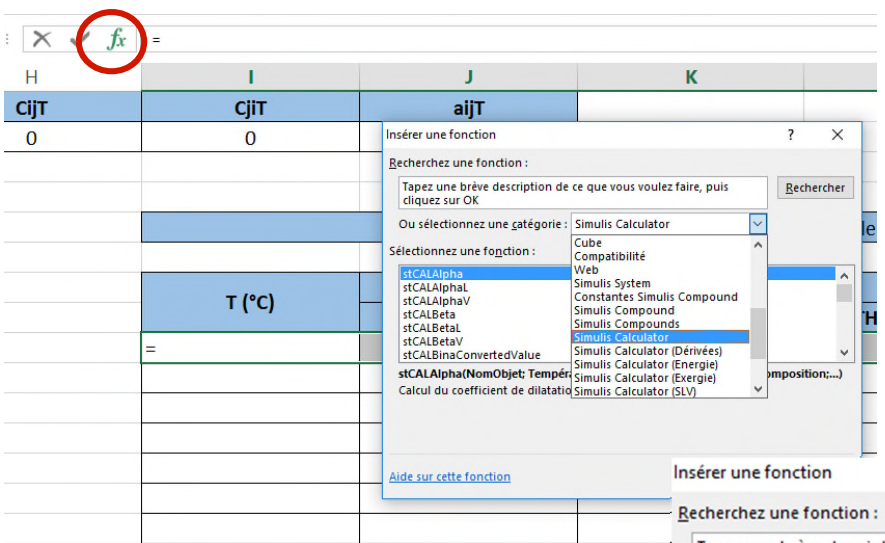
© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

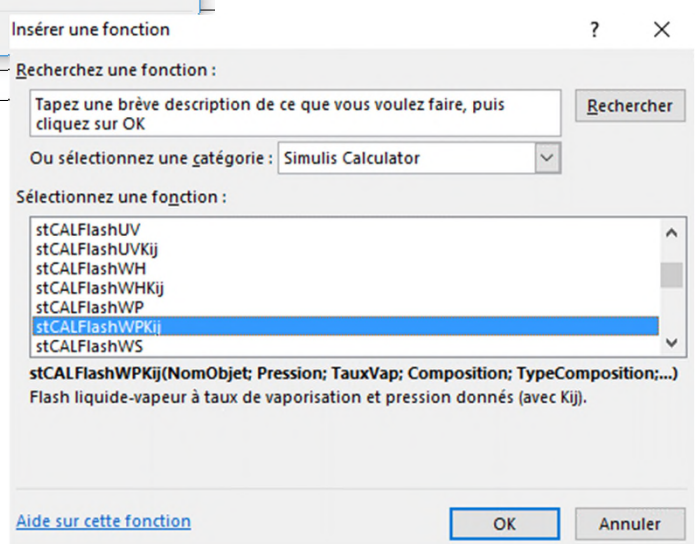
Étape 5 : Calculez les valeurs des compositions des phases liquide et vapeur



Insérez une fonction Simulis Calculator :

1. **Sélectionnez la première ligne du tableau et cliquez sur le bouton permettant d'insérer une fonction dans Excel**
2. **Dans la fenêtre *"Insérer une fonction"*, sélectionnez *Simulis Calculator***
3. **Dans la liste des fonctions, sélectionnez "*stCALFlashWPKij*" permettant de calculer la température, les fractions des phases liquide et vapeur et les constantes d'équilibre à pression et taux de vaporisation imposés.**

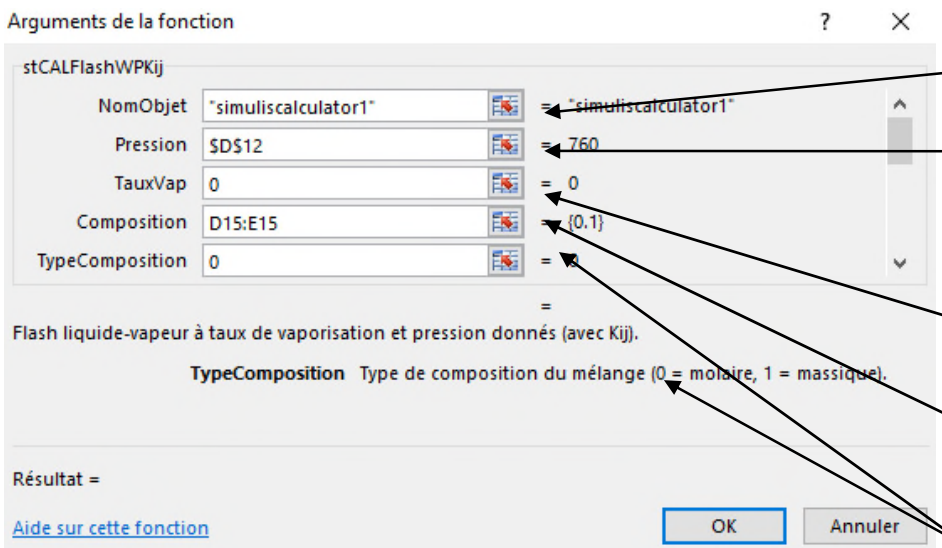


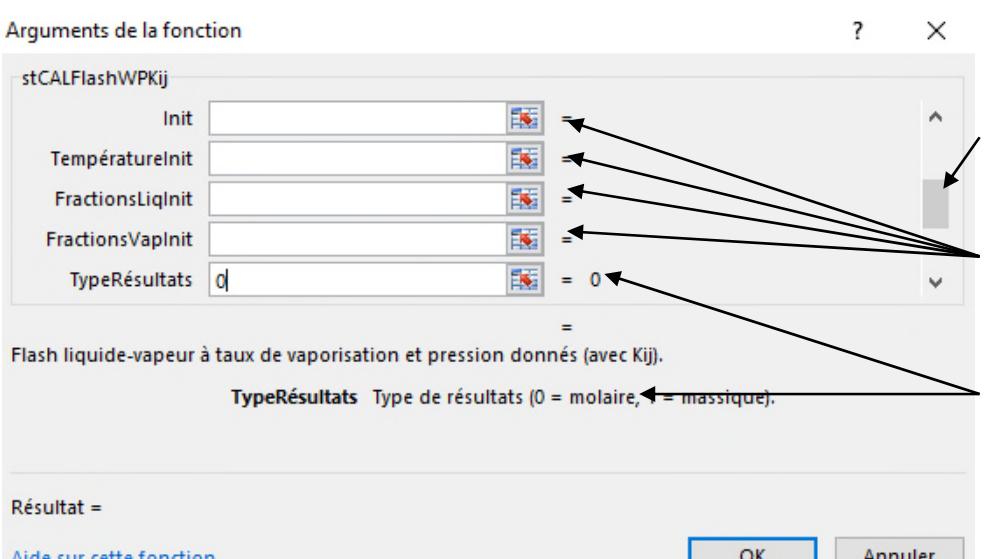


4. **Renseignez les arguments de la fonction (voir page suivante)**

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 5 : Calculez les valeurs des compositions des phases liquide et vapeur





Entrez le nom du calculator utilisé.

Sélectionnez la cellule dans laquelle est définie la pression. Ajoutez le signe "$" afin de garder la sélection constante lorsque vous étendrez la fonction sur l'ensemble du tableau.

Le taux de vaporisation est fixé à 0 car nous voulons faire varier la composition liquide (cellule suivante).

Sélectionnez les cellules dans lesquelles la composition liquide est définie.

Définissez le type de composition comme molaire.

Faites défiler afin de renseigner les autres arguments

Il n'y a pas d'initialisation, par conséquent les cellules "Init" sont vides

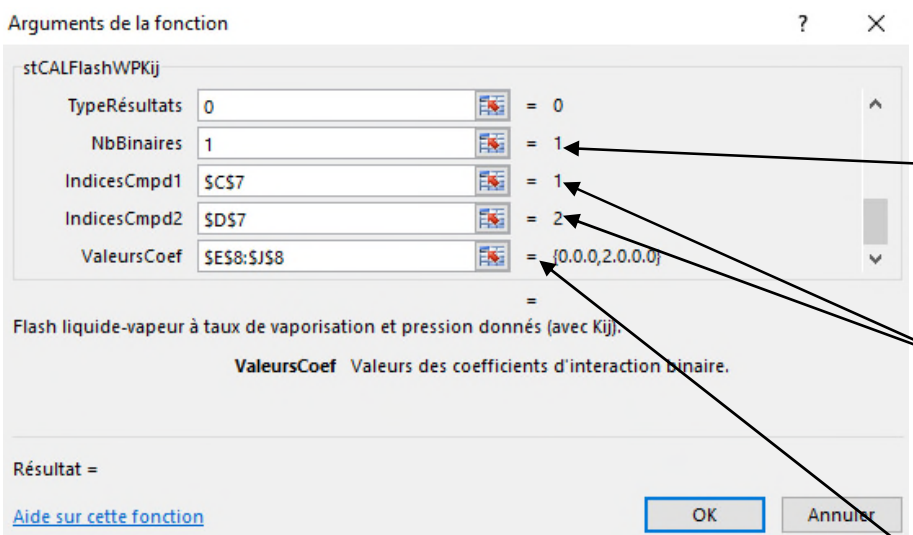
Le type de résultat est fixé à 0 car nous avons des données expérimentales molaires

Faites défiler afin d'avoir les autres arguments de la fonction (voir page suivante)…

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 5 : Calculez les valeurs des compositions des phases liquide et vapeur

Constituants		Paramètres d'intéraction binaire					
1	2	Cij0	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ETHYL ACETATE	ETHANOL	0	0	0,2	0	0	0



Fixez le nombre de binaires à 1 étant donné que nous n'étudions qu'un binaire.

Ces champs définissent les positions du premier et du deuxième constituant dans le Calculator (1 et 2). Insérez le signe "*$*" afin de maintenir la sélection constante.

Ce champ définit les cellules dans lesquelles les PIB seront renseignés. Sélectionnez les cellules correspondant aux valeurs des PIB. Insérez le signe "*$*" afin de maintenir la sélection constante.

Une fois terminé, cliquez sur "*CRTL + MAJ + ENTREE*" afin de bien insérer la fonction dans toutes les cellules sélectionnées. Si vous cliquez directement sur "*OK*", seule la première cellule sera correctement configurée.

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 5 : Calculez les valeurs des compositions des phases liquide et vapeur

Valeurs calculées						
T (°C)	Fraction phase liquide (x)		Fraction phase vapeur (y)		Constante d'équilibre (Ki)	
	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL
78,31	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000	1,0371	1,0000

Sélectionnez la première ligne et étendez la verticalement sur tout le tableau (ou faites un copier-coller sur toutes les lignes)

Valeurs calculées						
T (°C)	Fraction phase liquide (x)		Fraction phase vapeur (y)		Constante d'équilibre (Ki)	
	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL
78,31	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000	1,0371	1,0000
78,30	0,0130	0,9870	0,0135	0,9865	1,0367	0,9995
78,29	0,0220	0,9780	0,0228	0,9772	1,0364	0,9992
78,28	0,0300	0,9700	0,0311	0,9689	1,0361	0,9989
78,24	0,0710	0,9290	0,0735	0,9265	1,0348	0,9973
78,22	0,0950	0,9050	0,0982	0,9018	1,0340	0,9964
78,22	0,0970	0,9030	0,1003	0,8997	1,0339	0,9964
78,18	0,1350	0,8650	0,1394	0,8606	1,0327	0,9949
78,18	0,1360	0,8640	0,1404	0,8596	1,0327	0,9949
78,17	0,1500	0,8500	0,1548	0,8452	1,0322	0,9943
78,06	0,2570	0,7430	0,2643	0,7357	1,0286	0,9901
77,98	0,3310	0,6690	0,3396	0,6604	1,0260	0,9871
77,98	0,3320	0,6680	0,3406	0,6594	1,0260	0,9871
77,95	0,3600	0,6400	0,3690	0,6310	1,0250	0,9860
77,84	0,4620	0,5380	0,4718	0,5282	1,0213	0,9817
77,75	0,5450	0,4550	0,5549	0,4451	1,0182	0,9782
77,66	0,6280	0,3720	0,6375	0,3625	1,0151	0,9745
77,60	0,6810	0,3190	0,6899	0,3101	1,0130	0,9722
77,49	0,7740	0,2260	0,7812	0,2188	1,0094	0,9679
77,42	0,8270	0,1730	0,8330	0,1670	1,0072	0,9655
77,41	0,8320	0,1680	0,8378	0,1622	1,0070	0,9653
77,34	0,8900	0,1100	0,8941	0,1059	1,0046	0,9625
77,31	0,9170	0,0830	0,9202	0,0798	1,0035	0,9612
77,28	0,9360	0,0640	0,9385	0,0615	1,0027	0,9603
77,20	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000	0,9572

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 6 : Calculez les écarts entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées

- **Créez un troisième tableau permettant de présenter la différence entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées pour la température et la fraction vapeur de chaque constituant. La fonction est la suivante :**

Valeur absolue de (valeur expérimentale – valeur calculée) / valeur expérimentale

Déviation		
Sur T	Sur y1	Sur y2
0,00013196		0
2,48008E-05	0,550773122	0,01703422
0,003711947	0,543989321	0,028631017
0,006194515	0,52903184	0,037383406
0,02011339	0,451711093	0,06989525
0,027851503	0,441868313	0,09437964
0,029178401	0,426898162	0,090554156
0,03963369	0,393855982	0,117645293
0,041004942	0,394649607	0,119217069
0,050614066	0,378198817	0,125394814
0,063464989	0,246893493	0,133527914
0,072654147	0,171703299	0,119319241
0,071166377	0,156891196	0,106349066
0,073712646	0,125624233	0,091718731
0,078148245	0,04679454	0,045867915
0,078373899	0,018222931	0,021827467
0,075578095	0,076806704	0,111445022
0,071759223	0,086415753	0,150339734
0,065819614	0,147200598	0,314243284
0,054778175	0,144191076	0,385923173
0,051828634	0,098083752	0,315771742
0,039552805	0,066974037	0,346445945
0,036311044	0,063837286	0,409031501
0,026357877	0,042823267	0,385409407
0,00133061	0	

y_1 est la fraction vapeur de l'Acétate d'éthyle, y_2 est la fraction vapeur de l'Ethanol.

Dans chaque cellule, entrez la formule définie ci-dessus. Pour la première cellule, cela correspond à "=*ABS(F21-L21)/F21*". F21 et L21 étant les cellules correspondant respectivement aux valeurs expérimentales et calculées pour une température donnée (flèches violettes ci-dessous). Insérez la fonction correspondante pour y_1 et y_2 (flèches rouges ci-dessous).

Données expérimentales				
Reference	F. Mato et al., An. Quim. Ser. A, 1984, Vol. 80, p.338			
P	760	mmHg		
T (°C)	Fraction phase liquide (x)		Fraction phase vapeur (y)	
	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL
78,30	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]
76,30	0,0130	0,9870	0,0300	0,9700
78,00	0,0220	0,9780	0,0500	0,9500
77,80	0,0300	0,9700	0,0660	0,9340
76,70	0,0710	0,9290	0,1340	[illegible]
76,10	0,0950	0,9050	0,1760	0,8240
76,00	0,0970	0,9030	0,1750	0,8250
75,20	0,1350	0,8650	0,2300	0,7700
75,10	0,1360	0,8640	0,2320	0,7680
74,40	0,1500	0,8500	0,2490	0,7510
73,40	0,2570	0,7430	0,3510	0,6490
72,70	0,3310	0,6690	0,4100	0,5900
72,80	0,3320	0,6680	0,4040	0,5960
72,60	0,3600	0,6400	0,4220	0,5780
72,20	0,4620	0,5380	0,4950	0,5050
72,10	0,5450	0,4550	0,5450	0,4550
72,20	0,6280	0,3720	0,5920	0,4080
72,40	0,6810	0,3190	0,6350	0,3650
72,70	0,7740	0,2260	0,6810	0,3190
73,40	0,8270	0,1730	0,7280	0,2720
73,60	0,8320	0,1680	0,7630	0,2370
74,40	0,8900	0,1100	0,8380	0,1620
74,60	0,9170	0,0830	0,8650	0,1350
75,30	0,9360	0,0640	0,9000	0,1000
77,10	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000

Valeurs calculées						
T (°C)	Fraction phase liquide (x)		Fraction phase vapeur (y)		Constante d'équilibre (Ki)	
	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL	ETHYL ACETATE	ETHANOL
78,31	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]
77,89	0,0130	0,9870	0,0294	0,9706	2,2628	0,9834
77,60	0,0220	0,9780	0,0487	0,9513	2,2123	0,9727
77,35	0,0300	0,9700	0,0651	0,9349	2,1689	0,9638
[illegible]	[illegible]	[illegible]	0,1336	[illegible]	[illegible]	[illegible]
75,68	0,0950	0,9050	0,1768	0,8232	1,8614	0,9096
75,64	0,0970	0,9030	0,1798	0,8202	1,8531	0,9084
74,89	0,1350	0,8650	0,2305	0,7695	1,7076	0,8896
74,88	0,1360	0,8640	0,2318	0,7682	1,7041	0,8892
74,64	0,1500	0,8500	0,2484	0,7516	1,6559	0,8842
73,23	0,2570	0,7430	0,3504	0,6496	1,3634	0,8743
72,73	0,3310	0,6690	0,4042	0,5958	1,2211	0,8906
72,72	0,3320	0,6680	0,4049	0,5951	1,2195	0,8909
72,57	0,3600	0,6400	0,4232	0,5768	1,1754	0,9013
72,24	0,4620	0,5380	0,4851	0,5149	1,0499	0,9571
72,21	0,5450	0,4550	0,5344	0,4656	0,9806	1,0232
72,38	0,6280	0,3720	0,5873	0,4127	0,9352	1,1093
72,63	0,6810	0,3190	0,6249	0,3751	0,9176	1,1760
73,35	0,7740	0,2260	0,7022	0,2978	0,9072	1,3177
73,96	0,8270	0,1730	0,7554	0,2446	0,9134	1,4141
74,02	0,8320	0,1680	0,7608	0,2392	0,9144	1,4238
74,91	0,8900	0,1100	0,8301	0,1699	0,9327	1,5445
75,39	0,9170	0,0830	0,8667	0,1333	0,9452	1,6057
75,77	0,9360	0,0640	0,8944	0,1056	0,9555	1,6506
77,20	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000	1,8134

Déviation		
Sur T	Sur y1	Sur y2
0,00013196		0
0,005339742	0,019463137	0,000601953
0,005718837	0,026569184	0,001398378
0,005735506	[illegible]	0,000998634
[illegible]	0,041676405	0,006448774
0,005459888	0,004723988	0,001009007
0,00472336	0,027149545	0,005758994
0,004083607	0,002301825	0,000687558
0,002994503	0,001054127	0,000318434
0,003162767	0,002441661	0,000809552
0,001544336	0,001691346	0,000914734
0,0003394725	0,014151806	0,009834306
0,001061033	0,002146392	0,001454337
0,000390137	0,002732683	0,001995143
0,000591025	0,020052086	0,019655015
0,001472822	0,019364188	0,023194467
0,002546755	0,007878264	0,011431206
0,003120621	0,015950094	0,027748794
0,008891443	0,031118841	0,06643452
0,007602054	0,037577747	0,100575733
0,005763217	0,002889101	0,009301199
0,006815163	0,009417957	0,048717582
0,010637392	0,001938398	0,012808392
0,006185751	0,006267947	0,056411521
0,00133061	0	

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 7 : Déterminez les paramètres d'interaction binaire

- **Le calcul va faire appel au solveur d'Excel afin de déterminer les paramètres permettant de minimiser le critère de déviation global. Ce critère est défini dans cet exemple comme étant la somme des carrés des écarts.**

Déviation		
Sur T	**Sur y1**	**Sur y2**
0,00013196		0
2,48008E-05	0,550773122	0,01703422
0,003711947	0,543989321	0,028631017
0,006194515	0,52903184	0,037383406
0,02011339	0,451711093	0,06989525
0,027851503	0,441868313	0,09437964
0,029178401	0,426898162	0,090554156
0,03963369	0,393855982	0,117645293
0,041004942	0,394649607	0,119217069
0,050614066	0,378198817	0,125394814
0,063464989	0,246893493	0,133527914
0,072654147	0,171703299	0,119319241
0,071166377	0,156891196	0,106349066
0,073712646	0,125624233	0,091718731
0,078148245	0,04679454	0,045867915
0,078373899	0,018222931	0,021827467
0,075578095	0,076806704	0,111445022
0,071759223	0,086415753	0,150339734
0,065819614	0,147200598	0,314243284
0,054778175	0,144191076	0,385923173
0,051828634	0,098083752	0,315771742
0,039552805	0,066974037	0,346445945
0,036311044	0,063837286	0,409031501
0,026357877	0,042823267	0,385409407
0,00133061	0	
	Critère global	3,129135581

Entrez la formule suivante sous le tableau:

"= SOMME.CARRES(T21:V45)".

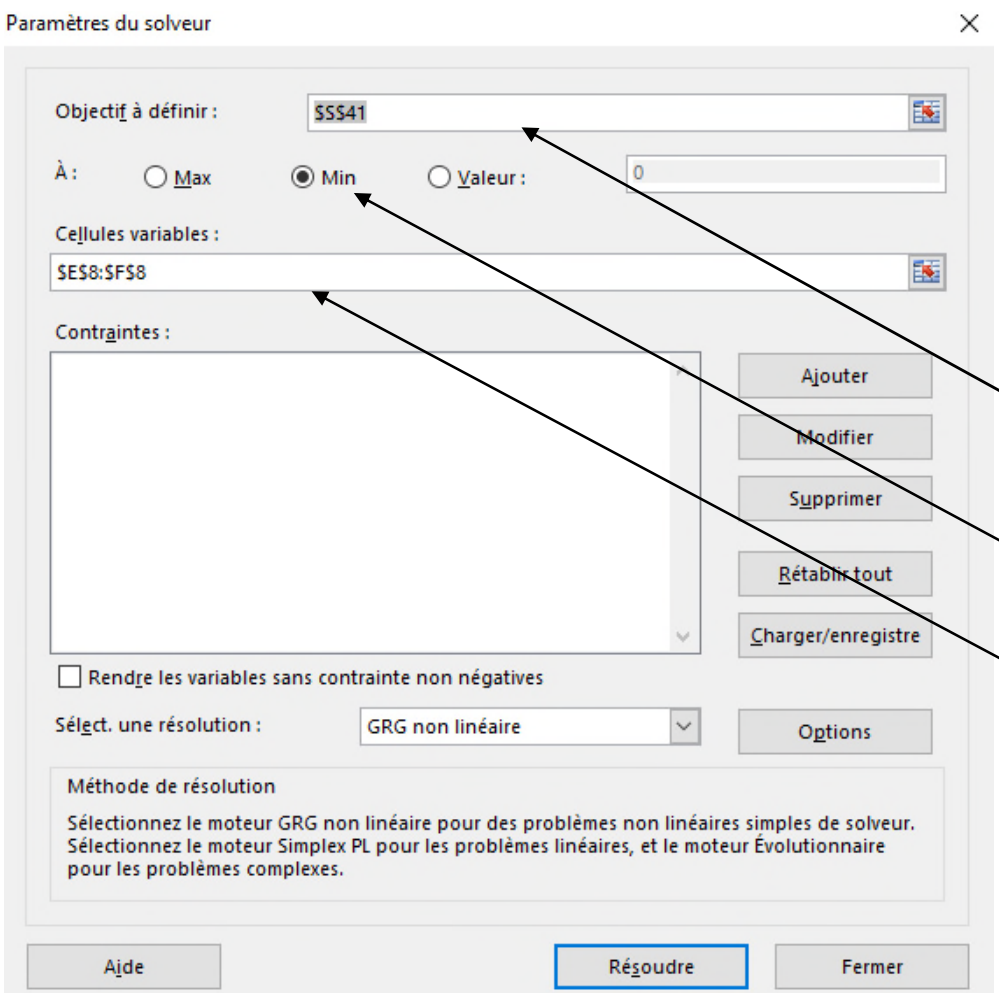
T21:V45 représente l'ensemble des cellules du tableau et va déprendre de la façon dont vous avez organisé votre feuille de calcul

Pressez "*Entrée*" afin d'obtenir la valeur suivante: 3,129135581

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 7 : Déterminez les paramètres d'interaction binaire

Ouvrez le solveur et minimisez le critère.



Afin d'ouvrir la fenêtre du solveur, sélectionnez "*Données / Solveur*" dans le menu Excel (s'il n'est pas activé, sélectionnez "*Compléments*" et vérifiez les options du solveur).

La cellule cible est celle à minimiser (correspondant au critère global)

Sélectionnez le bouton permettant de minimiser la cellule cible

Les cellules variables sont celles correspondant aux PIB. Sélectionnez uniquement C_{ij}^0 et C_{ji}^0 car a_{ij}^0 doit rester égal à 0,2 et la plage de température correspondant aux données expérimentales n'est pas suffisamment large pour estimer correctement C_{ij}^T, C_{ji}^T et a_{ij}^T

Cliquez ensuite sur "*Résoudre*"

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 7 : Déterminez les paramètres d'interaction binaire

Constituants		Paramètres d'intéraction binaire					
1	2	Cij0	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ETHYL ACETATE	ETHANOL	-48,94185093	635,4007422	0,2	0	0	0

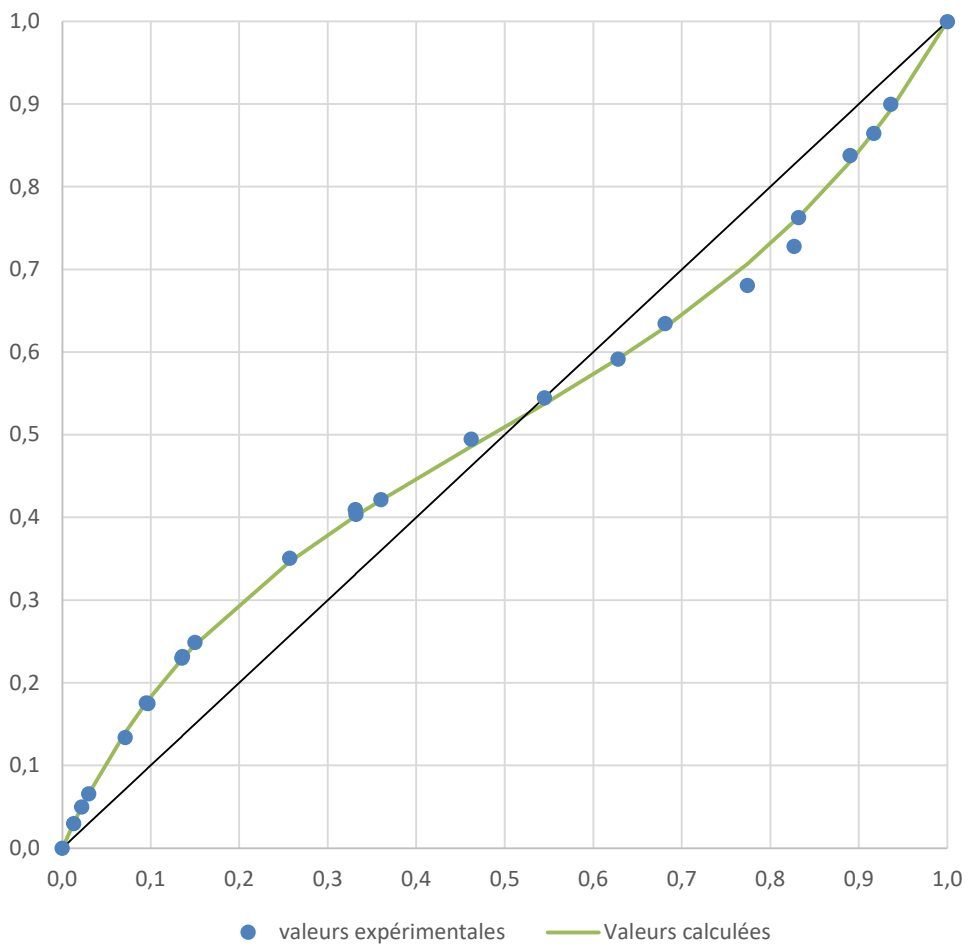
- **Les PIB sont calculés. Le nouveau critère global vaut 0,035 (cette valeur dépend des paramètres utilisés pour configurer le solveur).**

- **Afin de vérifier la pertinence de vos estimations, tracez les courbes représentant les fractions liquide / vapeur pour chaque constituant (x1-y1 et x2-y2) puis comparez les courbes estimées avec les courbes expérimentales.**

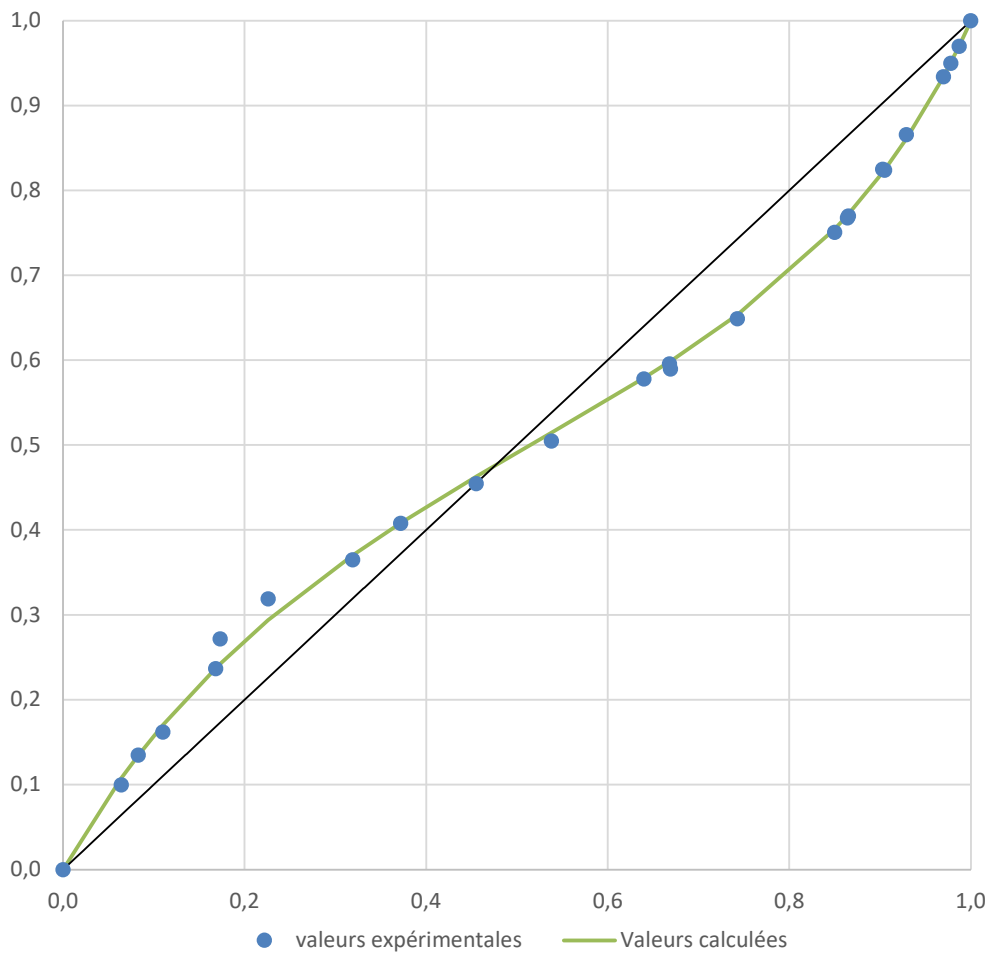
© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Étape 7 : Déterminez les paramètres d'interaction binaire

Ethyl Acetate



Ethanol



© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

Limites de la méthode

- Nombre de données expérimentales
- Nombre de PIB à régresser
- Nombre de solutions possibles
- Méthode numérique et paramètres du solveur Excel

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.

ProSim

Software & Services In Process Simulation

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

☎: +33 (0) 5 62 88 24 30

www.prosim.net
info@prosim.net

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

☎: +1 215 600 3759

© 2021 ProSim S.A. All rights reserved.