

# Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 9 : Créez un constituant  
non présent dans les bases de données

Software & Services In Process Simulation

*We guide You to efficiency*



ProSim

**Ce document présente les différentes étapes à suivre afin de créer un nouveau constituant non présent dans les bases de données et déterminer ses propriétés.**

**Les étapes sont les suivantes :**

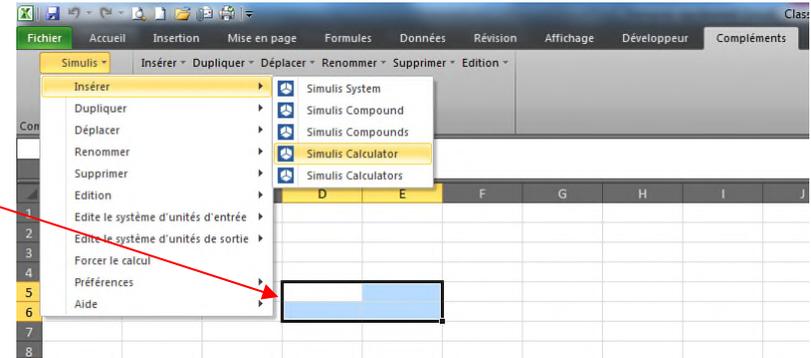
-  Étape 1 : Ajouter un nouveau constituant
-  Étape 2 : Fournir le SMILES du constituant
-  Étape 3 : Détermination des propriétés intrinsèques
-  Étape 4 : Décomposition en sous-groupes fonctionnels
-  Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

# Étape 1 : Ajouter un nouveau constituant

## 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 : Ajouter un nouveau constituant

Editeur de calculator thermodynamique

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

**CONSTITUANTS** | MODELE | PARAMETRES

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

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

Ajouter un nouveau constituant puis éditer ce constituant (Double-clic ou clic droit sur le [Nouveau constituant] ainsi ajouté)



# Étape 2 : Fournir le SMILES du constituant

SMILES : **S**implified **M**olecular **I**nput **L**ine **E**ntry **S**pecification

Weininger, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 28 (1988)

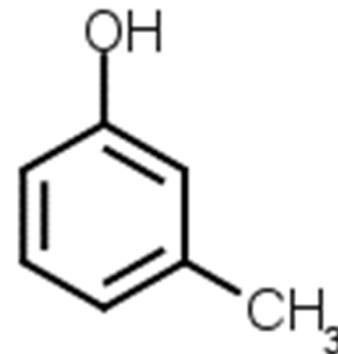
*Langage symbolique de description de la structure d'une molécule sous la forme d'une chaîne de caractères*

[http://fr.wikipedia.org/wiki/Simplified\\_Molecular\\_Input\\_Line\\_Entry\\_Specification](http://fr.wikipedia.org/wiki/Simplified_Molecular_Input_Line_Entry_Specification)

The screenshot shows the 'Editeur de constituant' window. The 'Propriétés' table is as follows:

Propriétés	Valeur
Complète	
Identification	
Nom IUPAC	
Nom spécifique	[Nouveau constitua...]
Nombre CAS	<inconnu>
Famille chimique	<inconnue>
Formule chimique	<inconnue>
Smiles	c1(O)cc(C)ccc1
Identifiant de jeu	
N° intrinsèque (Spécifique ProSim)	0
Synonymes	
Commentaires sur le constituant	
Fichier Cosmo	<inconnu>

Exemple :



**c1(O)cc(C)ccc1**

# Étape 3 : Détermination des propriétés intrinsèques

**Editeur de constituant**

**CONSTITUANT**

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

OUTILS

- Importer/Charger un constituant...
- Copier
- Coller
- Export PDF (Impression)
- Exporter vers Excel
- Importer
- Exporter
- Revenir au constituant
- Prédiction de propriétés...**
- Prédiction de modèles de groupes
- Prédiction de propriétés polymères.

AFFICHAGE

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

MODIFICATIONS

- Défaire
- Refaire

**Nom : [Nouveau constituant]**  
ID : {E135FBFA-D59E-408E-B793-265440408501}  
ID original :  
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

Propriétés	Valeur
Identification	
Nom IUPAC	
Nom spécifique	[Nouveau constit...
CAS Registry Number®	<inconnu>
Famille chimique	<inconnu>
Formule chimique	<inconnu>
Smiles	c1(O)cc(C)ccc1
Identifiant de jeu	
N° intrinsèque (Spécifique Pr...	0
Synonymes	
Commentaires sur le constitu...	
Fichier Cosmo	<inconnu>
Modèles de contribution de grou...	
Atomique	
Changement de phase	
Combustion, sécurité, toxicité	
Phase condensée	
Thermo-chimique	
Interaction, réaction phase gaz	
Propriétés utilisateur	
PPC-SAFT	
NRTL-SAC	
CPA	
Polymères-Segments	
Sanchez-Larriba	

Importer un fichier mol... Effacer

OK Annuler

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.

Cliquer sur  
« Prédiction de propriétés... »

# Étape 3 : Détermination des propriétés intrinsèques

1. Tout sélectionner  
(ou seulement les propriétés à estimer)

2. Sélectionner les modèles  
prédictifs ou conserver la  
sélection automatique

5. Tout sélectionner  
(ou seulement les propriétés à utiliser)

Prediction de propriétés constantes

Utilise un système de prédiction pour calculer les propriétés d'un constituant

Tout sélectionner

Propriété	Modèle	Valeur actuelle	Ecraser	Valeur prédite
<input checked="" type="checkbox"/> Masse molaire	Automatique	108.140 g/mol	<input checked="" type="checkbox"/>	108.140 g/mol
<input checked="" type="checkbox"/> Température normale d'ébullition	Automatique	468.921 K	<input checked="" type="checkbox"/>	468.921 K
<input checked="" type="checkbox"/> Température critique	Automatique	695.009 K	<input checked="" type="checkbox"/>	695.009 K
<input checked="" type="checkbox"/> Pression critique	Automatique	49.5058 bar	<input checked="" type="checkbox"/>	49.5058 bar
<input checked="" type="checkbox"/> Volume critique	Automatique	352.050 cm <sup>3</sup> /mol	<input checked="" type="checkbox"/>	352.050 cm <sup>3</sup> /mol
<input checked="" type="checkbox"/> Enthalpie de fusion	Automatique	13.7280 kJ/mol	<input checked="" type="checkbox"/>	13.7280 kJ/mol
<input checked="" type="checkbox"/> Température normale de fusion	Automatique	302.838 K	<input checked="" type="checkbox"/>	302.838 K
<input checked="" type="checkbox"/> Facteur acentrique	Automatique	0.490502	<input checked="" type="checkbox"/>	0.490502
<input checked="" type="checkbox"/> Enthalpie de vaporisation (Tb)	Automatique	46.7646 kJ/mol	<input checked="" type="checkbox"/>	46.7646 kJ/mol
<input checked="" type="checkbox"/> Point éclair	Automatique	366.668 K	<input checked="" type="checkbox"/>	366.668 K
<input checked="" type="checkbox"/> Enthalpie de formation état standard à 25°C	Automatique	-127.850 kJ/mol	<input checked="" type="checkbox"/>	-127.850 kJ/mol
<input checked="" type="checkbox"/> Energie de Gibbs de formation état standard à 25°C	Automatique	-36.4073 kJ/mol	<input checked="" type="checkbox"/>	-36.4073 kJ/mol
<input checked="" type="checkbox"/> Coefficient de partition Octanol-Eau	Automatique	2.12490	<input checked="" type="checkbox"/>	2.12490
<input checked="" type="checkbox"/> Température d'inflammabilité	Automatique	1229.20 K	<input checked="" type="checkbox"/>	1229.20 K
<input checked="" type="checkbox"/> Paramètre de translation - équation d'état cubique	Automatique	18.6838 cm <sup>3</sup> /mol	<input checked="" type="checkbox"/>	18.6838 cm <sup>3</sup> /mol
<input checked="" type="checkbox"/> Nombre de solvation ULPDHS à dilution infinie	Automatique	0.00000	<input checked="" type="checkbox"/>	0.00000
<input checked="" type="checkbox"/> Interaction secondaire hydrocarbure-eau (Kabadi-Danner)	Automatique	4.51981E+007 atm.	<input checked="" type="checkbox"/>	4.90970E+007 atm.(cm <sup>3</sup> /mol) <sup>2</sup>

Tout sélectionner

Prédire  Utiliser les valeurs prédites dans les calculs

4. Prédire

3. Permet d'utiliser les valeurs prédites  
par défaut dans la corrélation au lieu  
des valeurs courantes

6. Utiliser



Accès à l'aide : description des  
différentes méthodes d'estimation

# Étape 3 : Détermination des propriétés intrinsèques

Les propriétés constantes ont été estimées par des méthodes prédictives à partir du SMILES de la molécule

The screenshot shows the 'Editeur de constituant' (Constituent Editor) window. The main area displays a table of properties for a new constituent. The table has two columns: 'Propriétés' and 'Valeur'. A red arrow points to the 'Propriétés' column header. The table lists various physical and chemical properties, with some values being predicted (indicated by '<inconnu>').

Propriétés	Valeur
Changement de phase	
Température normale de fusion	302.838435110524 K
Température normale d'ébullition	468.92078230197 K
Enthalpie de fusion	13.728 kJ/mol
Température du point triple	
Pression du point triple	
Etat physique à 25°C	<inconnu>
Etat physique en solution aqueuse à 25°C	<inconnu>
Coefficient de diffusion	
Enthalpie de vaporisation	46.7646 kJ/mol
Coefficient de partition Octanol-Eau	2.1249
Coefficient d'infiltration dans le sol (Koc@20°C)	
Type de calcul Liquide-Vapeur	<inconnu>
Facteur acentrique	0.49050183415645
Facteur acentrique modifié	<inconnu>
Température critique	695.008879515091 K
Pression critique	49.5058297081625 bar
Volume critique	352.0495 cm <sup>3</sup> /mol
Facteur de compressibilité critique	<inconnu>
Densité critique	
Chaleur de sublimation au point triple	
Combustion, sécurité, toxicité	
Phase condensée	
Thermo-chimique	
Interaction, réaction phase gaz	

# Étape 4 : Décomposition en sous-groupes fonctionnels

L'utilisation d'un modèle thermodynamique prédictif par contribution de groupes (UNIFACs, PPR78...) nécessite la connaissance des décompositions des molécules en sous-groupes fonctionnels

The screenshot shows the 'Editeur de constituant' (Constituent Editor) window. The main interface has a left sidebar with a menu where 'Prédiction de modèles de groupes' is highlighted in red. The main area shows a tree view of properties for a new constituent, with the 'Modèles de contribution de grou...' folder expanded. A dialog box titled 'Prédiction de modèles de contribution de groupes' is open, displaying a list of models for selection.

Les propriétés du constituant :

Propriétés	Valeur
Nom IUPAC	[Nouveau constit...]
Nom spécifique	<inconnu>
CAS Registry Number®	<inconnu>
Famille chimique	<inconnue>
Formule chimique	<inconnu>
Smiles	c1(O)cc(C)ccc1
Identifiant de jeu	
N° intrinsèque (Spécifique Pr...)	0
Synonymes	
Commentaires sur le constitu...	
Fichier Cosmo	<inconnu>

Modèles de contribution de grou...

Modèle	Valeur actuelle	Ecraser
<input type="checkbox"/> PPR78		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> GC-PPC-SAFT		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC original		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC modifié (Dortmund) 1993		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC modifié (Dortmund)		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC modifié (Larsen)		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC modifié (NIST)		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC LLE		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> NRTL PR		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC PSRK		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC VTPR		<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> UNIFAC UMRPRU		<input type="checkbox"/>

# Étape 4 : Décomposition en sous-groupes fonctionnels

1. Tout sélectionner  
(ou seulement certains modèles)

3. Tout sélectionner  
(ou seulement certains modèles)

Prédiction de modèles de contribution de groupes

Utilise un système de prédiction pour estimer les décompositions de modèles de contribution de groupe d'un constituant.

Tout sélectionner  Tout sélectionner

Modèle	Valeur actuelle	Ecraser	Valeur prédite
<input checked="" type="checkbox"/> PPR78		<input checked="" type="checkbox"/>	[CHa](1, 0) 4 [Ca](1, 0) 2 [a-CH3](3, 0) 1 [OHa1_mCre:
<input checked="" type="checkbox"/> GC-PPC-SAFT		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC original		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACH] 4 [ACOH] 1 [ACCH3] 1
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC modifié (Dortmund) 1993		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC modifié (Dortmund)		<input checked="" type="checkbox"/>	
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC modifié (Larsen)		<input checked="" type="checkbox"/>	
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC modifié (NIST)		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC LLE		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1
<input checked="" type="checkbox"/> NRTL PR		<input checked="" type="checkbox"/>	
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC PSRK		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC VTPR		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1
<input checked="" type="checkbox"/> UNIFAC UMRPRU		<input checked="" type="checkbox"/>	[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1

Prédire Utiliser Annuler

2. Cliquer sur le bouton permettant la décomposition automatique de la molécule à partir du SMILES

4. Utiliser



La décomposition automatique peut échouer si la molécule ne peut pas être décomposée en sous-groupes disponibles suivant le modèle de contribution de groupes choisi

# Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

Pour les propriétés dépendantes de la température, choisir une corrélation si celle-ci est connue...

Editeur de constituant

CONSTITUANT

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

OUTILS

- Sélectionner 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 : [Nouveau constituant]  
ID : {6D7A451F-5426-4C27-BDD2-46C218F0031F}  
ID original :  
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

Propriétés

- Interaction, réaction phase gaz
- Propriétés utilisateur
- PPC-SAFT
- NRTL-SAC
- Propriétés dépendantes de la température**
  - Chaleur spécifique solide
  - Chaleur spécifique liquide
  - Chaleur spécifique gaz parfait
  - Pression de vapeur saturante
    - Corrélation
    - TMin
    - TMax
  - Enthalpie de vaporisation
  - Conductivité thermique solide
  - Conductivité thermique liquide
  - Conductivité thermique gaz
  - Viscosité liquide
  - Viscosité gaz
  - Masse volumique solide
  - Masse volumique liquide
  - Tension superficielle
  - Second coefficient du Viriel
  - Constante de la loi de Henry pour les solutés
  - Chaleur spécifique liquide à dilution infinie
  - Pression de sublimation
  - Pression de fusion

Graphique | Grille | **Formulation**

L'unité de Y est :

Outils

Température Min	Température Max	Points
0 K	0 K	20

Température

Propriété

0 K

Copier Imprimer **Régression**

OK Annuler

... ou cliquer sur le bouton « Régression »

# Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

Si des données expérimentales ou issues de la littérature sont disponibles :

Utiliser cet outil d'identification de paramètres pour obtenir les coefficients intervenant dans les équations mathématiques qui représentent l'évolution de la propriété en fonction de la température.

Unités par défaut :

Température	K
Pression	bar
Pourcentage	%

Formulation (cliquer pour élargir la vue)

$$\ln(Y) = A - \frac{B}{T + C}$$

Points calculés et expérimentaux :

Util...	Température	Pression de vapeur saturante (exp.)	Pression de ...	Erreur absol...	Erreur relative
<input checked="" type="checkbox"/>					

Resultats :

A		Critère	
B		Erreur relative moyenn	
C		Erreur relative max.	
		Erreur absolue moyenn	
		Erreur absolue max.	

Utiliser comme coefficients d'initialisation

Corrélation exprimée en mmHg

Utiliser Annuler

1. Sélectionner les unités de température et de la propriété concernée

2. Copier/coller le tableau de valeurs expérimentales température/propriété (par exemple depuis Excel)



Ne pas utiliser « CTRL + V » pour coller les valeurs expérimentales mais le bouton « Coller les données »

# Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

Si aucune donnée expérimentale n'est disponible :

[Nouveau constituant]

**IDENTIFICATION**

PROPRIÉTÉ

Pression de vapeur saturante

Corrélation à utiliser :

Equation n° 99

DONNEES

Coller les données

Insérer une nouvelle ligne

Supprimer la ligne courante

**Prédiction...**

IDENTIFICATION

Calculer maintenant

Copier la table

Montrer/Cacher la courbe

OPTIONS

Paramètres numériques...

Utiliser cet outil d'identification de paramètres pour obtenir les coefficients intervenant dans les équations mathématiques qui représentent l'évolution de la propriété en fonction de la température.

Unités par défaut :

Température	K
Pression	bar
Pourcentage	%

Formulation (cliquer pour élargir la vue)

$$\ln(Y) = A - \frac{B}{T + C}$$

Points calculés et expérimentaux :

Util...	Température	Pression de vapeur saturante (exp.)	Pression de ...	Erreur absol...	Erreur relative
<input checked="" type="checkbox"/>					

Resultats :

A		Critère	
B		Erreur relative moyenn	
C		Erreur relative max.	
		Erreur absolue moyen	
		Erreur absolue max.	

Utiliser comme coefficients d'initialisation

Corrélation exprimée en mmHg

Utiliser Annuler

Cliquer sur le bouton  
« Prédiction... » (accessible  
uniquement si le SMILES a  
été renseigné)

# Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

Génération de données pseudo-expérimentales estimées par des méthodes prédictives à partir du SMILES

 Accès à l'aide : description des différentes méthodes d'estimation

Prédiction de propriétés dépendantes de la température

Utilise un système de prédiction pour calculer les propriétés dépendantes de la température d'un constituant.

Modèle prédictif  

Spécifier l'intervalle de température

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Température	K	300	700	10	41

Fournir l'intervalle de température pour la propriété sélectionnée (par exemple, pour la pression de vapeur saturante, de la température normale de fusion à la température critique) ainsi que le pas de calcul afin de générer le nombre de points souhaités

# Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

2. Choisir la corrélation à utiliser pour la régression

Utiliser cet outil d'identification de paramètres pour obtenir les coefficients intervenant dans les équations mathématiques qui représentent l'évolution de la propriété en fonction de la température.

Unités par défaut :      Formulation (cliquer pour élargir la vue)

Température	K
Pression	bar
Pourcentage	%

$$\ln(Y) = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) + D \cdot T^E$$

Points calculés et expérimentaux :

Util...	Température	Pression de vapeur saturante (exp.)	Pression de ...	Erreur absol...	Erreur relative
<input checked="" type="checkbox"/>	300 K	0.000429074 bar	0.000429059 bar	1,47365E-008 bar	0.0034345 %
<input checked="" type="checkbox"/>	310 K	0.000900784 bar	0.000900758 bar	2,5492E-008 bar	0.00282998 %
<input checked="" type="checkbox"/>	320 K	0.001793 bar	0.00179296 bar	4,13853E-008 bar	0.00230816 %
<input checked="" type="checkbox"/>	330 K	0.00340107 bar	0.00340101 bar	6,32513E-008 bar	0.00185975 %
<input checked="" type="checkbox"/>	340 K	0.00617538 bar	0.00617529 bar	9,11866E-008 bar	0.00147661 %
<input checked="" type="checkbox"/>	350 K	0.0107756 bar	0.0107755 bar	1,2409E-007 bar	0.00115158 %
<input checked="" type="checkbox"/>	360 K	0.0181328 bar	0.0181327 bar	1,59258E-007 bar	0.000878282 %
<input checked="" type="checkbox"/>	370 K	0.0295184 bar	0.0295182 bar	1,9218E-007 bar	0.00065105 %
<input checked="" type="checkbox"/>	380 K	0.0466156 bar	0.0466154 bar	2,16673E-007 bar	0.000464808 %
<input checked="" type="checkbox"/>	390 K	0.071592 bar	0.0715917 bar	2,2551E-007 bar	0.000314993 %
<input checked="" type="checkbox"/>	400 K	0.107168 bar	0.107168 bar	2,11633E-007 bar	0.000197477 %
<input checked="" type="checkbox"/>	410 K	0.15668 bar	0.15668 bar	1,70016E-007 bar	0.000108512 %
<input checked="" type="checkbox"/>	420 K	0.22413 bar	0.22413 bar	1,00119E-007 bar	4,46702E-005 %
<input checked="" type="checkbox"/>	430 K	0.314229 bar	0.314229 bar	8,81533E-009 bar	2,80539E-006 %
<input checked="" type="checkbox"/>	440 K	0.43242 bar	0.43242 bar	-8,64392E-008 bar	-1,99896E-005 %
<input checked="" type="checkbox"/>	450 K	0.58489 bar	0.58489 bar	-1,54505E-007 bar	-2,6416E-005 %

Calculer maintenant

Resultats :

A	73.4914	Critère
B	-9014.65	Erreur relative moyenn
C	-6.95778	Erreur relative max.
D	2.96263E-018	Erreur absolue moyenr
E	6.00000	Erreur absolue max.

Utiliser comme coefficients d'initialisation

Corrélation exprimée en Pa

Utiliser      Annuler

1. Données générées par l'outil de prédiction

3. Cliquer sur « Calculer »

4. Vérifier les résultats de la régression, puis cliquer sur « Utiliser »

# Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

Résultats de la régression d'une propriété dépendante de la température

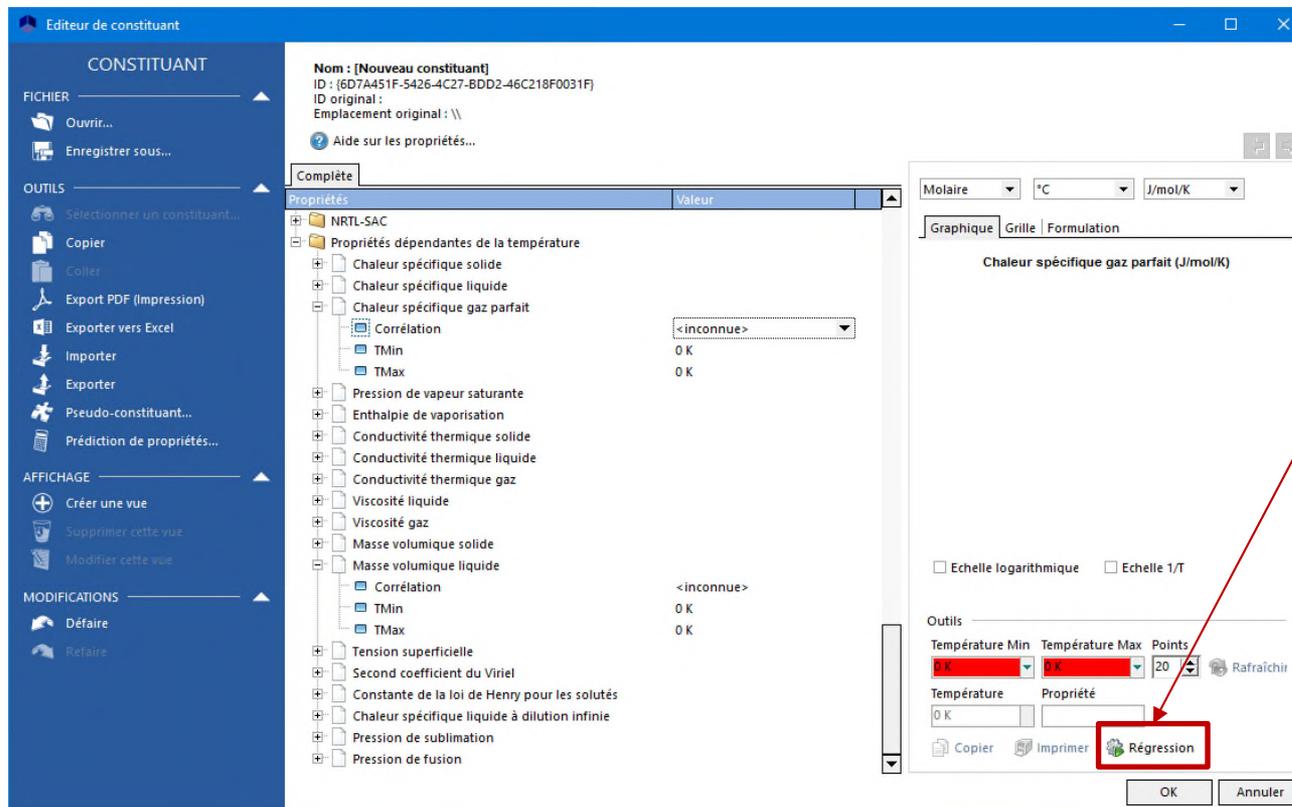
The screenshot shows the 'Editeur de constituant' (Constituent Editor) window. The main panel displays a tree view of properties under 'Propriétés dépendantes de la température'. The 'Corrélation' property is selected, showing its regression equation and coefficients. The 'Formulation' tab is active, displaying the equation  $\ln(Y) = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) + D \cdot T^E$ . The units for temperature are in Kelvin (K) and pressure in bar. The regression results are as follows:

Paramètre	Valeur
Equation n°	101
TMin	300 K
TMax	700 K
Coef A	73.491385515002
Coef B	-9014.6548525658
Coef C	-6.9577840475961
Coef D	2.962630543296E-018
Coef E	6

The 'Formulation' tab also shows the unit of Y as Pa and provides options for copying, printing, and regression.

# Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

Renouveler l'opération de définition d'une propriété dépendante de la température pour les autres propriétés (par corrélation, par régression à partir de données expérimentales ou estimées via la connaissance du SMILES)



Pour la propriété sélectionnée, cliquer sur « Régression ». La génération de données pseudo-expérimentales à partir du SMILES est disponible pour les propriétés :

- Pression de vapeur saturante
- Chaleur spécifique gaz parfait
- Masse volumique liquide
- Viscosité liquide
- Tension superficielle

# Conclusion

Les propriétés d'un constituant non présent dans les bases de données :

- Intrinsèques (ou constantes)
- Décompositions en sous-groupes fonctionnels
- Dépendantes de la température

peuvent être fournies par l'utilisateur ou estimées via des méthodes prédictives à partir de la connaissance du SMILES de la molécule.

Les propriétés nécessaires à la création d'un constituant dépendent du type de calcul thermodynamique effectué (équilibre, propriétés de transport...) et du choix du modèle thermodynamique pour représenter le système étudié (cf. notice des modèles thermodynamiques pour connaître les propriétés de corps pur nécessaires suivant les modèles choisis).



### 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