

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

Introduction

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 :

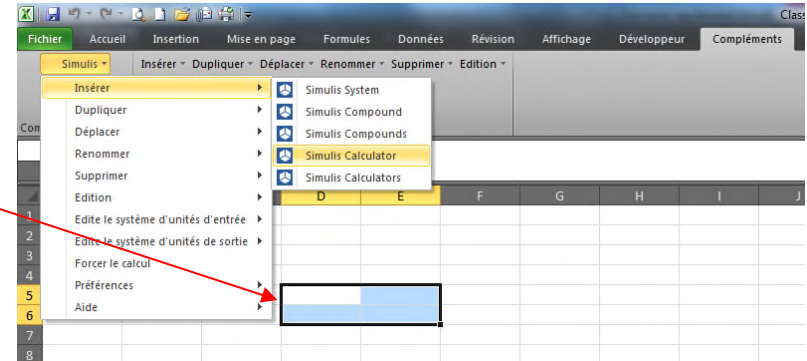
-  Étape 1 : Ajouter un nouveau constituant
-  Étape 2 : Fournir le SMILES du constituant
-  Étape 3 : Détermination des propriétés intrinsèques
-  Étape 4 : Décomposition en sous-groupes fonctionnels
-  Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

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:

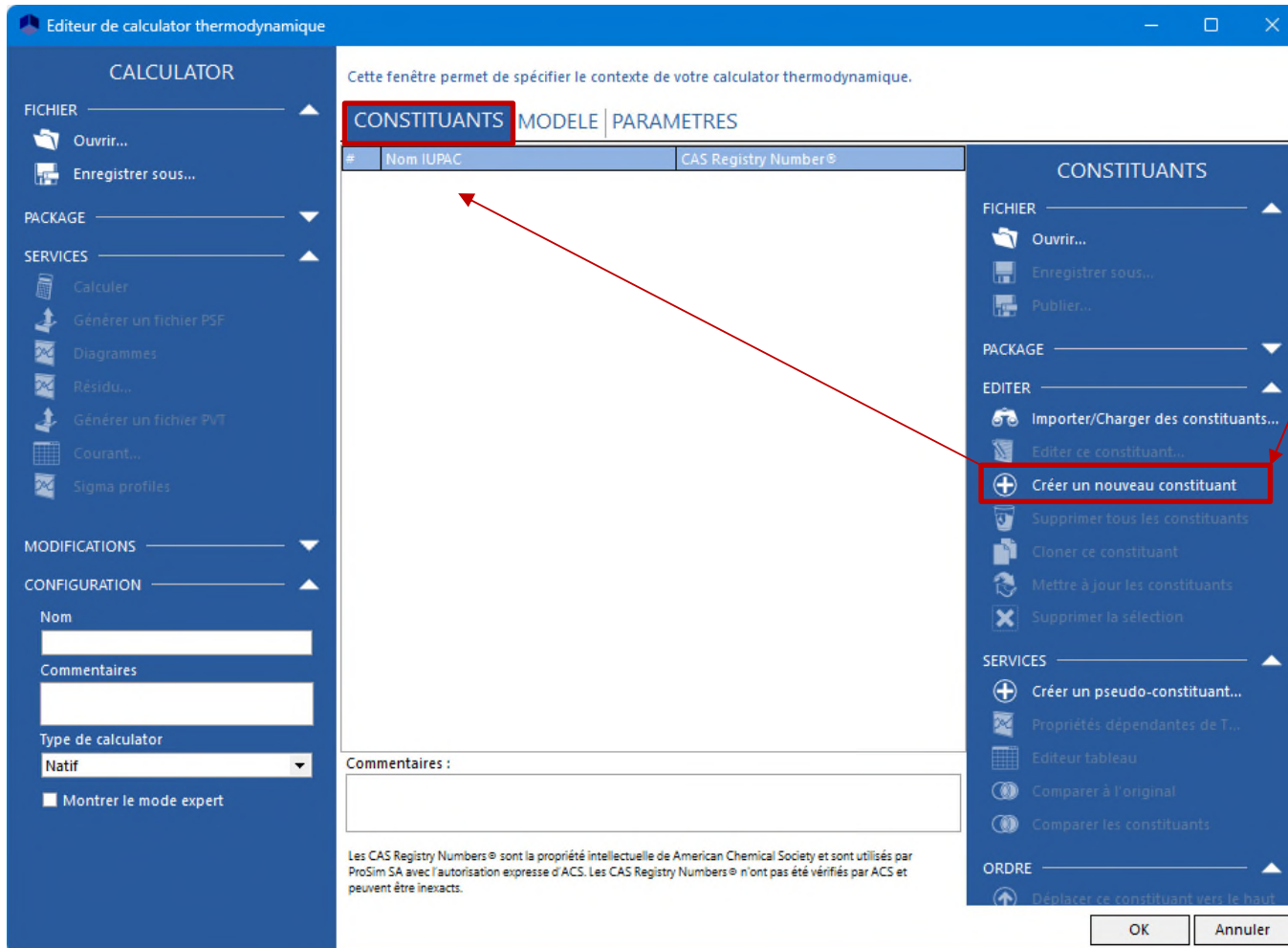


ou



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



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

Étape 1 : Ajouter un nouveau constituant

1. Fournir les informations et propriétés connues du nouveau constituant :

- Nom
- Numéro CAS
- Formule chimique
- Etc.

2. Fournir le SMILES de la molécule
Permet l'estimation de propriétés complémentaires à partir de méthodes de contribution de groupes

Editeur de constituant

CONSTITUANT

FICHIER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

OUTILS

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

AFFICHAGE

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

MODIFICATIONS

- Défaire
- Réfaire

Nom : [Nouveau constituant]
ID : {40BFC56A-E812-4EC1-8F94-6449A9EB4001}
ID original :
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Propriétés	Valeur
Identification	
Nom IUPAC	[Nouveau constituant]
Nom spécifique	<inconnu>
Nombre CAS	<inconnu>
Famille chimique	<inconnu>
Formule chimique	<inconnu>
Smiles	
Identifiant de jeu	0
N° intrinsèque (Spécifique ProSim)	
Synonymes	
Commentaires sur le constituant	
Fichier Cosmo	<inconnu>
Modèle de contribution de groupe	
Atomique	
Masse molaire	
Moment dipolaire	
Volume de Van der Waals	<inconnu>
Aire de Van der Waals	<inconnu>
Aire modifiée de Van der Waals	<inconnu>
Aire molaire de surface de Sprow & Spraus...	<inconnu>
Rayon de Van der Waals	
Paramètre de solubilité en (cal/cm³)½	<inconnu>
Rayon de giration	
Volume de diffusion	
Rayon de Born	

Importer un fichier mol... Effacer

OK Annuler

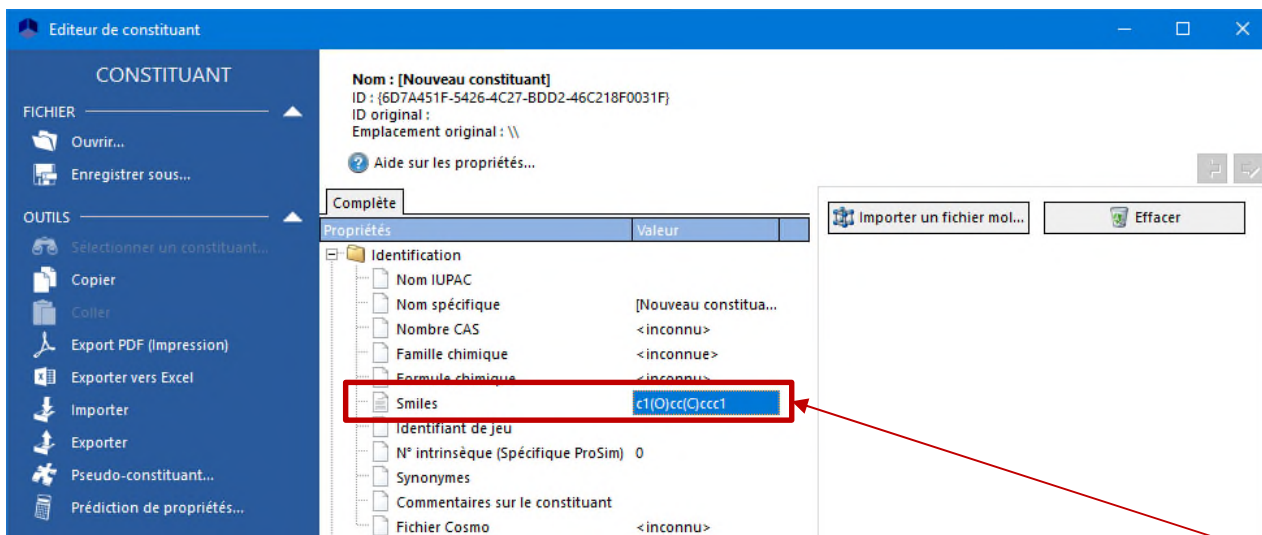
Étape 2 : Fournir le SMILES du constituant

SMILES : Simplified Molecular Input Line Entry Specification

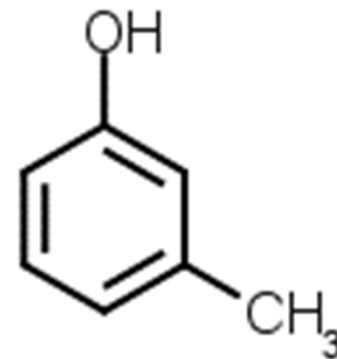
Weininger, J. Chem. Inf. Comput. Sci., 28 (1988)

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



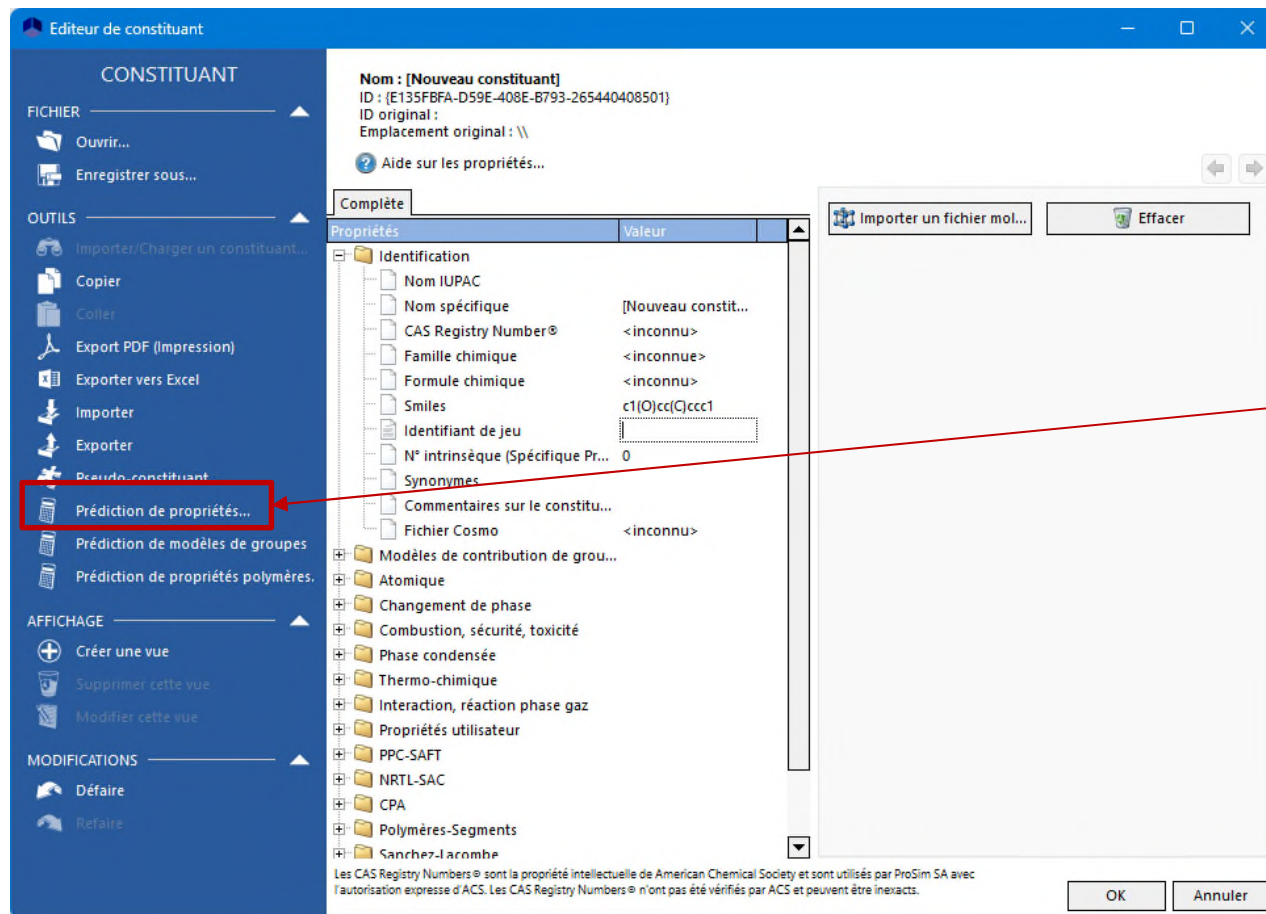
Exemple :



c1(O)cc(C)ccc1

Étape 3 : Détermination des propriétés intrinsèques

7



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 ³ /mol	<input checked="" type="checkbox"/>	352.050 cm ³ /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 (T _b)	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 ³ /mol	<input checked="" type="checkbox"/>	18.6838 cm ³ /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 ³ /mol) ²

☒ Tout sélectionner

Prédire ☐ Utiliser les valeurs prédites dans les calculs ? Utiliser Annuler

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

9

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

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	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 ³ /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	

Importer un fichier mol... Effacer

OK Annuler

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 displays the 'Editeur de constituant' (Constituent Editor) window. The left sidebar contains a menu with options like 'Fichier', 'Outils', 'Affichage', and 'Modifications'. The 'Outils' menu is expanded, and 'Prédiction de modèles de groupes' is highlighted. The main window shows the 'Propriétés' (Properties) tab for a new constituent, with fields for 'Nom IUPAC', 'Nom spécifique', 'CAS Registry Number', 'Formule chimique', 'Smiles', and 'Identifiant de jeu'. The 'Smiles' field contains the string c1(O)cc(C)ccc1. A dialog box titled 'Prédiction de modèles de contribution de groupes' is open, showing a list of models for selection. The dialog includes a checkbox for 'Tout sélectionner' (Select all) and a table with columns 'Modèle', 'Valeur actuelle', and 'Effacer'.

Modèle	Valeur actuelle	Effacer
<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"/>

Buttons at the bottom of the dialog: 'Prédire', '?', 'Utiliser', and 'Annuler'.

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

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

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

Aide sur les propriétés...

Complète

Propriétés Valeur

- 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**
 - <inconnue>
 - Equation n° 99
 - Equation n° 100
 - Equation n° 101
 - Equation n° 115
 - Equation n° 118
 - Lee-Kesler
 - Riedel-Plank-Miller
 - 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 :

[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

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 moyenr	
		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: Riedel, 1954

Spécifier l'intervalle de température

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

OK Annuler

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

3. Cliquer sur « Calculer »

[Nouveau constituant]

IDENTIFICATION

PROPRIÉTÉ

Pression de vapeur saturante

Corrélation à utiliser : Equation n° 101

DONNÉES

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)

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

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	0.0034345 %
<input checked="" type="checkbox"/>	310 K	0.000900784 bar	0.000900758 bar	2.5492E-008	0.00282998 %
<input checked="" type="checkbox"/>	320 K	0.001793 bar	0.00179296 bar	4.13853E-008	0.00230816 %
<input checked="" type="checkbox"/>	330 K	0.00340107 bar	0.00340101 bar	6.32513E-008	0.00185975 %
<input checked="" type="checkbox"/>	340 K	0.00617538 bar	0.00617529 bar	9.11866E-008	0.00147661 %
<input checked="" type="checkbox"/>	350 K	0.0107756 bar	0.0107755 bar	1.2409E-007	0.00115158 %
<input checked="" type="checkbox"/>	360 K	0.0181328 bar	0.0181327 bar	1.59258E-007	0.000878282 %
<input checked="" type="checkbox"/>	370 K	0.0295184 bar	0.0295182 bar	1.9218E-007	0.00065105 %
<input checked="" type="checkbox"/>	380 K	0.0466156 bar	0.0466154 bar	2.16673E-007	0.000464808 %
<input checked="" type="checkbox"/>	390 K	0.071592 bar	0.0715917 bar	2.2551E-007	0.000314993 %
<input checked="" type="checkbox"/>	400 K	0.107168 bar	0.107168 bar	2.11633E-007	0.000197477 %
<input checked="" type="checkbox"/>	410 K	0.15668 bar	0.15668 bar	1.70016E-007	0.000108512 %
<input checked="" type="checkbox"/>	420 K	0.22413 bar	0.22413 bar	1.00119E-007	4.46702E-005 %
<input checked="" type="checkbox"/>	430 K	0.314229 bar	0.314229 bar	8.81533E-009	2.80539E-006 %
<input checked="" type="checkbox"/>	440 K	0.43242 bar	0.43242 bar	-8.64392E-008	-1.99896E-005 %
<input checked="" type="checkbox"/>	450 K	0.58489 bar	0.58489 bar	-1.54505E-007	-2.6416E-005 %

Résultats :

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

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

Étape 5 : Propriétés dépendantes de la température

17

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

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
- Réfaire

Propriétés

Nom : [Nouveau constituant]
ID : {6D7A451F-5426-4C27-BDD2-46C218F0031F}
ID original :
Emplacement original : \\
Aide sur les propriétés...

Complète

Propriétés

Propriétés dépendantes de la température

- Chaleur spécifique solide
- Chaleur spécifique liquide
- Chaleur spécifique gaz parfait
- Pression de vapeur saturante
- Corrélation** (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
- 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

Graphique | Grille | **Formulation**

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

L'unité de Y est : Pa

Outils

Température Min: 300 K | Température Max: 700 K | Points: 20 | Rafraîchir

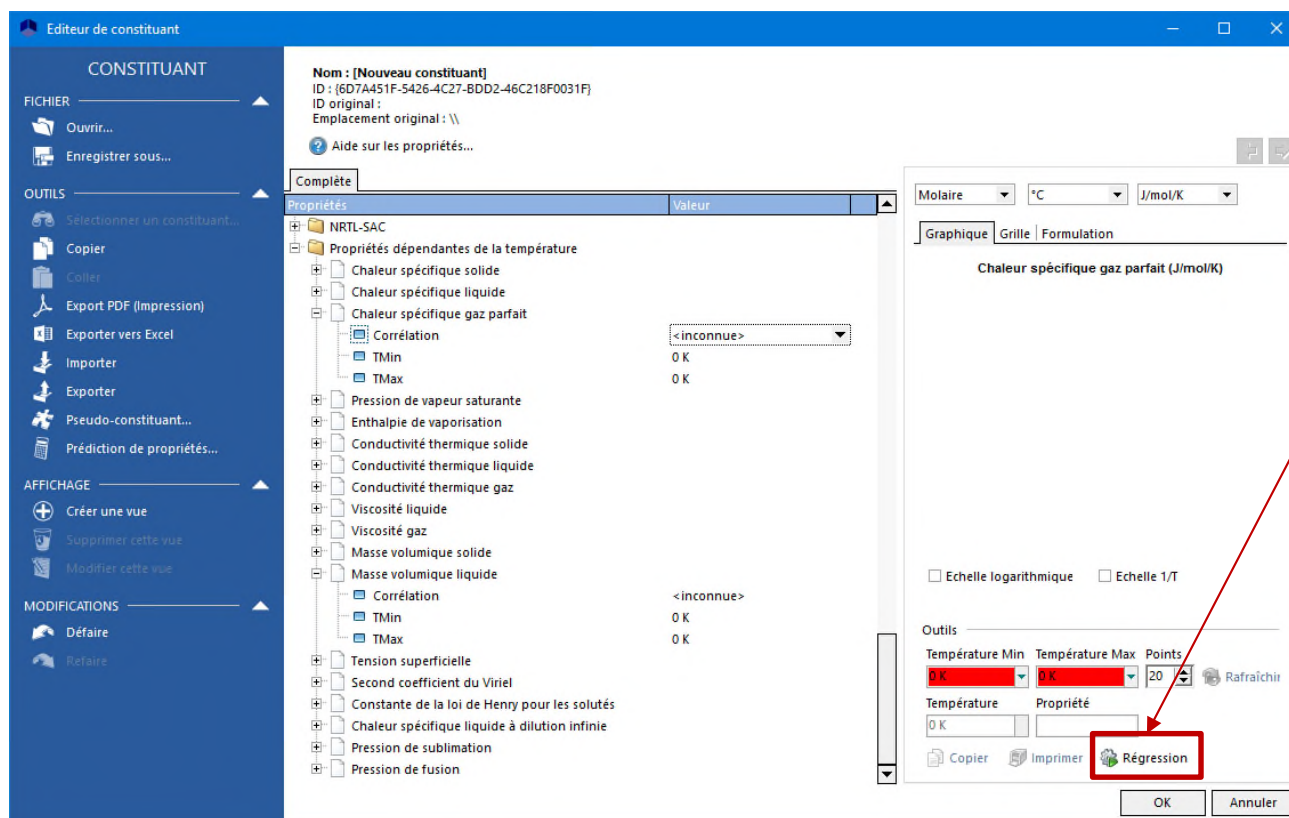
Température: 300 K | Propriété: 4,29059E-004 bar

Copier | Imprimer | Régression

OK | Annuler

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
info@prosim.net

**ProSim, Inc.**

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

☎: +1 215 600 3759