

Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 10 : Utilisez l'éditeur de modèles prédictifs

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency



ProSim

Ce document présente l'outil de configuration des modèles thermodynamiques prédictifs par une méthode de contribution de groupes.

- Présentation de l'éditeur
- Utilisation au sein de Simulis Thermodynamics
- Installation des matrices « privées » du consortium UNIFAC

Présentation : les modèles

- Simulis Thermodynamics (serveur thermodynamique de ProSim) propose plusieurs modèles prédictifs basés sur des contributions de groupes.
 - UNIFACs (Original, Modifié, Larsen, PSRK, VTPR, NIST, ...)
 - PPR78
 - GC-PPC-SAFT
 - NRTL-PR
 - ...

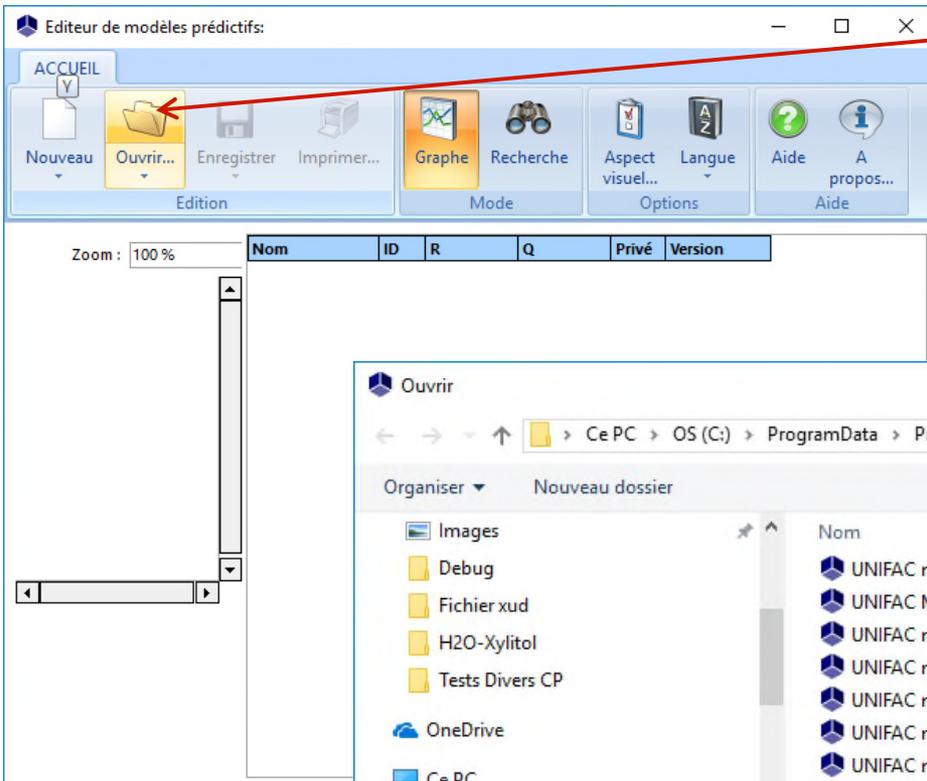
Présentation : groupes et sous-groupes

- Un groupe peut rassembler plusieurs sous-groupes fonctionnels
- Chaque sous-groupe dispose de paramètres spécifiques qui dépendent du modèle
- Des coefficients d'interaction entre groupes permettent de décrire l'influence des groupes entre eux
- Pour fonctionner, chaque molécule du système étudié doit être décomposable en sous-groupes

Présentation : le logiciel

- Accessible depuis le menu démarrer, dans le répertoire ProSim sous le nom : « Editeur de modèles prédictifs »
- Ouvrez les fichiers de stockage des informations sur les groupes et sous-groupes et leurs paramètres d'interaction (.xud) situés dans le répertoire par défaut :
 - « C:\ProgramData\ProSim\StarDust\UNIFAC Models »

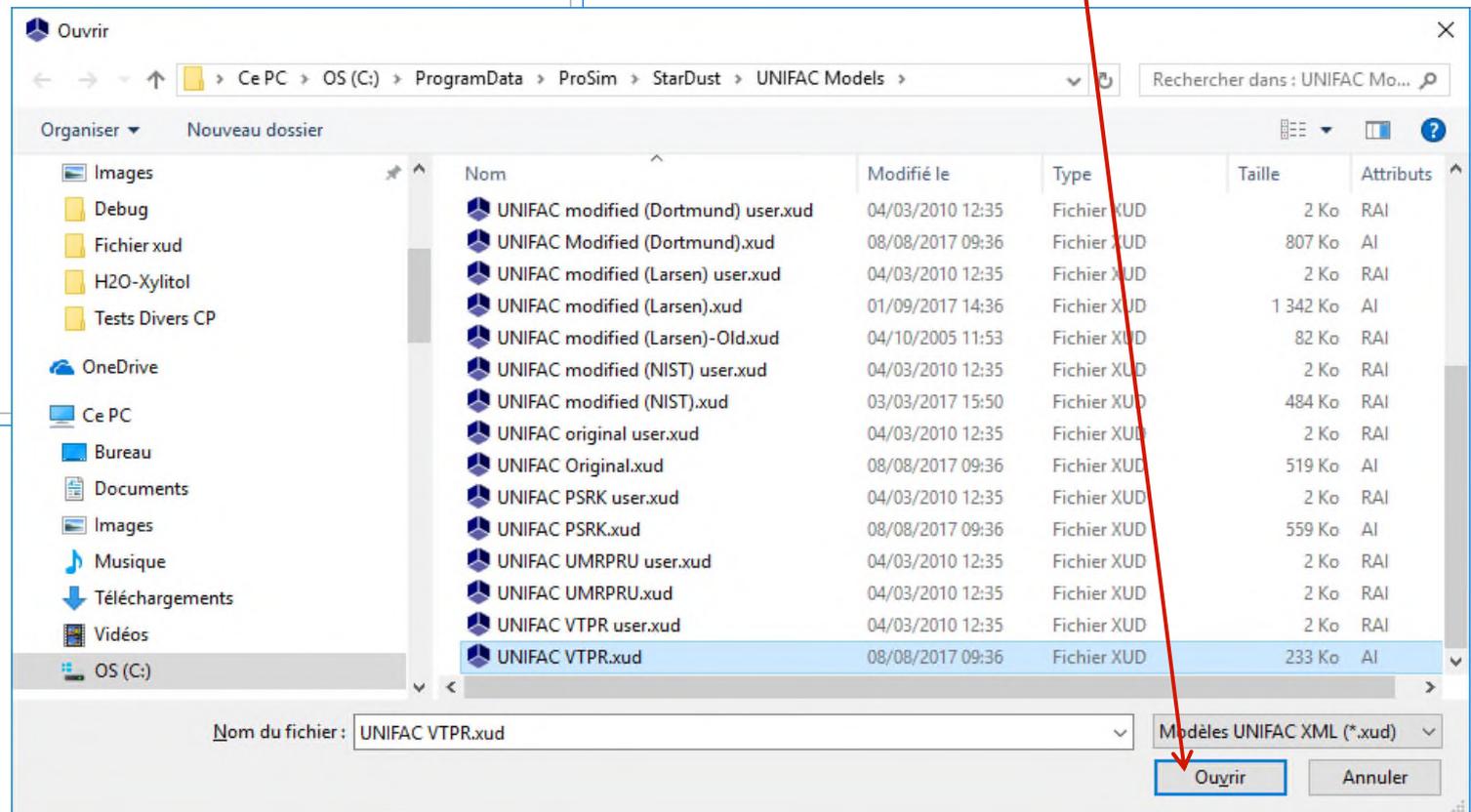
Editeur : ouverture d'un fichier "xud"



1. Appuyer sur « ouvrir »

2. Choisir par exemple « UNIFAC VTPR.xud » et cliquer sur « Ouvrir ».

NB : le répertoire est par défaut le répertoire de stockage des fichiers « xud »



Editeur : modes de fonctionnement

Mode Graphe

Editeur de modèles prédictifs: UNIFAC VTTPR - Public.xud

ACCUEIL

Nouveau Ouvrir... Enregistrer Imprimer... Graphe Recherche Aspect visuel... Langue Aide A propos...

Edition Mode Options Aide

Zoom : 100 %

No parameter
 1 parameter
 2 parameters
 3 parameters
 Delivery 2017

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3	1	0	1.2958	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2	2	0	0.9471	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH	3	0	0.2629	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	2			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=CH	5	0	1.1507	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=CH	6	0	1.3221	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=C	7	0	0.988	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=C	8	0	0.676	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	70	0	0.485	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ALLENE	97	0	1.1287	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CHCH=	98	0	1.7345	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CCH=	99	0	3.5331	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
H2C=CH2	250	0	0.6758	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	3			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	9	0	0.4972	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
AC	10	0	0.1885	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	4			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH3	11	0	1.4843	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	12	0	1.1356	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH	13	0	0.4514	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH	5			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017

Editeur de modèles prédictifs: UNIFAC VTTPR - Public.xud

ACCUEIL

Nouveau Ouvrir... Enregistrer Imprimer... Graphe Recherche Aspect visuel... Langue

Edition Mode Options

Rechercher des sous-groupes par ID ou nom: Afficher les résultats

Sous-groupes				Groupes principaux				Paramètres	
Nom 1	ID 1	Version 1	Pri...	Nom 1	ID 1	Version 1	Pri...	A 1-2	B 1-2
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
CH2=CH	5	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
CH=CH	6	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
CH2=C	7	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
CH=C	8	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
C=C	70	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
ALLENE	97	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
=CHCH=	98	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
=CCH=	99	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH3	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222
H2C=CH2	250	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	C=C	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	-87.61	-0.054411
CH2	2	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	CH2	1	Delivery 20	<input type="checkbox"/>	171.47	-0.043222

Mode Recherche

Editeur : visualisation

Matrice des interactions entre groupes :

- Le code couleur indique le nombre de paramètres disponibles pour chaque interaction
 - En l'absence de paramètre, la qualité du modèle prédictif est sujette à caution.

Editeur de modèles prédictifs: UNIFAC VTPR - Public.xud

ACCUEIL

Nouveau Ouvrir... Enregistrer Imprimer... Graphe Recherche Aspect visuel... Langue Aide A propos... Aide

Edition Mode Options Aide

Zoom : 100 %

No parameter
 1 parameter
 2 parameters
 3 parameters
 Delivery 2017

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3	1	0	1.2958	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2	2	0	0.9471	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH	3	0	0.2629	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	2			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=CH	5	0	1.1507	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=CH	6	0	1.3221	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=C	7	0	0.988	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=C	8	0	0.676	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	70	0	0.485	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ALLENE	97	0	1.1287	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CHCH=	98	0	1.7345	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CCH=	99	0	3.5331	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
H2C=CH2	250	0	0.6758	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	3			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	9	0	0.4972	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
AC	10	0	0.1885	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	4			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH3	11	0	1.4843	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	12	0	1.1356	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH	13	0	0.4514	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH	5			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH	14	0	1.0180	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017

Editeur : visualisation

En survolant à la souris une case colorée :

- Affichage des paramètres disponibles pour le couple de groupes correspondant et donc pour les sous-groupes associés.

Editeur de modèles prédictifs: UNIFAC VTPR - Public.xud

ACCUEIL

Nouveau Ouvrir... Enregistrer Imprimer... Graphe Recherche Aspect visuel... Langue Aide A propos...

Edition Mode Options Aide

Zoom : 100 %

No parameter
 1 parameter
 2 parameters
 3 parameters
 Delivery 2017

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3	1	0	1.2958	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2	2	0	0.9471	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH	3	0	0.2629	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	2			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=CH	5	0	1.1507	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=CH	6	0	1.3221	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=C	7	0	0.988	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=C	8	0	0.676	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	70	0	0.485	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ALLENE	97	0	1.1287	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CHCH=	98	0	1.7345	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CCH=	99	0	3.5331	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
H2C=CH2	250	0	0.6758	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	3			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	9	0	0.4972	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
AC	10	0	0.1885	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	4			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH3	11	0	1.4843	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	12	0	1.1356	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH	13	0	0.4514	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH	5			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (P)	14	0	1.0189	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (S)	81	0	0.9326	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (T)	82	0	0.8727	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3OH	6			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3OH	15	0	0.8779	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017

1 CH2
 2 C=C
 3 ACH
 4 ACCH2
 5 OH
 6 CH3OH
 7 H2O
 8 ACOH
 9 CH2CO
 10 CHO
 11 CCOO
 12 HCOO
 13 CH2O
 14 CH2NH2
 15 CH2NH
 16 (C)3N
 17 ACNH2
 19 CH2CN
 20 COOH
 21 CCL
 22 CCL2

Groupes principaux	Sous-groupes	Paramètres		
[6] CH3OH	[15] CH3OH	6→13	-35.988	-0.62428 0
[13] CH2O	[24] CH3O, [25] CH2O, [26] CHO	13→6	322.09	0.29426 0

Editeur : visualisation

Description des groupes et sous-groupes :

- Numéro des groupes et sous-groupes
- Paramètres des sous-groupes

Editeur de modèles prédictifs: UNIFAC VTPR - Public.xud

ACCUEIL

Nouveau Ouvrir... Enregistrer Imprimer... Graphe Recherche Aspect visuel... Langue Aide A propos...

Edition Mode Options Aide

Zoom : 100 %

No parameter
 1 parameter
 2 parameters
 3 parameters
 Delivery 2017

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3	1	0	1.2958	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2	2	0	0.9471	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH	3	0	0.2629	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	2			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=CH	5	0	1.1507	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=CH	6	0	1.3221	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH2=C	7	0	0.988	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH=C	8	0	0.676	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
C=C	70	0	0.485	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ALLENE	97	0	1.1287	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CHCH=	98	0	1.7345	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
=CCH=	99	0	3.5331	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
H2C=CH2	250	0	0.6758	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	3			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACH	9	0	0.4972	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
AC	10	0	0.1885	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	4			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH3	11	0	1.4843	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	12	0	1.1356	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH	13	0	0.4514	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH	5			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (P)	14	0	1.0189	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (S)	81	0	0.9326	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (T)	82	0	0.8727	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3OH	6			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3OH	15	0	0.8779	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
H2O	7			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017

Groupe

Sous-Groupes

Groupes principaux	Sous-groupes	Paramètres		
[6] CH3OH	[15] CH3OH	6→13	-35.988	-0.62428 0
[13] CH2O	[24] CH3O, [25] CH2O, [26] CHO	13→6	322.09	0.29426 0

Editeur : modifications

En cliquant sur une case, colorée ou non :

- Ouverture d'une fenêtre d'édition des paramètres d'interaction entre groupes
 - Les paramètres ne sont pas forcément symétriques

Editeur de modèles prédictifs: UNIFAC VTPR - Public.xud

ACCUEIL

Nouveau Ouvrir... Enregistrer Imprimer... Graphe Recherche Aspect visuel... Langue Aide A propos... Aide

Zoom : 100 %

No parameter
 1 parameter
 2 parameters
 3 parameters
 Delivery 2017

1	CH2
2	C=C
3	ACH
4	ACCH2
5	OH
6	CH3OH
7	H2O
8	ACOH
9	CH2CO
10	CHO
11	CCOO
12	HCOO
13	CH2O
14	CH2NH2
15	CH2NH
16	(C)3N
17	ACNH2
19	CH2CN
20	COOH
21	CCL
22	CCL2

Paramètres d'interaction binaire

Groupe 1 : [6] CH3OH

Groupe 2 : [13] CH2O

Version: Privé

Paramètres:

	A	B	C
6->13	-35.988	-0.62428	0
13->6	322.09	0.29426	0

Ok Annuler

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
				<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			1.2958	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.9471	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.2629	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
				<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			1.1507	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			1.3221	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.988	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.676	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.485	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			1.1287	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			1.7345	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			3.5331	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.6758	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
				<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.4972	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
			0.1885	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
				<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH3	11	0	1.4843	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH2	12	0	1.1356	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
ACCH	13	0	0.4514	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH	5			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (P)	14	0	1.0189	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (S)	81	0	0.9326	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
OH (T)	82	0	0.8727	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3OH	6			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
CH3OH	15	0	0.8779	<input type="checkbox"/>	Delivery 2017
H2O	7			<input type="checkbox"/>	Delivery 2017

Groupes principaux	Sous-groupes	Paramètres
[6] CH3OH	[15] CH3OH	6→13 -35.988 -0.62428 0
[13] CH2O	[24] CH3O, [25] CH2O, [26] CHO	13→6 322.09 0.29426 0

Editeur : modifications

Tous les champs sont éditables en suivant la procédure suivante :

- Sélectionner le champ
 - Ici la propriété R (Volume de van der Waals) du sous-groupe CH3 est sélectionnée

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1			<input type="checkbox"/>	Delivery 201
CH3	1	0	1.2958	<input checked="" type="checkbox"/>	Delivery 201
CH2	2	0	0.9471	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
CH	3	0	0.2629	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 201

- Appuyer sur « Entrée » ou « F2 » pour passer en mode édition
 - Ici la propriété R (Volume de van der Waals) du sous-groupe CH3 est éditable

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1			<input type="checkbox"/>	Delivery 201
CH3	1	0	1.2958	<input checked="" type="checkbox"/>	Delivery 201
CH2	2	0	0.9471	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
CH	3	0	0.2629	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 201

- Valider la modification en appuyant sur entrée, la prochaine cellule devient éditable si nécessaire

Editeur : modifications

Ajout d'un nouveau groupe principal :

- Clic droit sur n'importe quelle cellule
- Dans le menu contextuel choisir « Ajouter un groupe principal »
 - Celui-ci est automatiquement ajouté en fin de liste

C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
C=C	2			<input type="checkbox"/>	Delivery 201
CH2=CH	5	0	1.1507	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
CH=CH	6	0	1.3221	<input checked="" type="checkbox"/>	Delivery 201
CH2=C					
CH=C					
C=C					
ALLENE					
=CHCH=					
=CCH=					
H2C=CH					
ACH					
ACH					
AC					
ACCH2					
ACCH3					
ACCH2	12	0	1.1356	<input type="checkbox"/>	Delivery 201

Ajout d'un nouveau sous-groupe :

- Clic droit sur la ligne bleutée du groupe principal désiré
- Dans le menu contextuel choisir « Ajouter un sous-groupe »

C	4	0	0	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
C=C					
CH2=					
CH=C					
CH2=					
CH=C					
C=C					
ALLEN					
=CHC					
=CCH					
H2C=					
ACH					
ACH					
AC					
ACCH2	4			<input type="checkbox"/>	Delivery 201
ACCH3	11	0	1.4843	<input type="checkbox"/>	Delivery 201
ACCH2	12	0	1.1356	<input type="checkbox"/>	Delivery 201

Editeur : modifications

Le mode « recherche » permet de visualiser l'ensemble des paramètres entre un groupe donné et les autres et de les éditer de manière plus aisée qu'en cliquant sur la bonne case de la matrice triangulaire présentée précédemment.

Editeur de modèles prédictifs: UNIFAC VTPR - Public.xud

ACCUEIL

Nouveau Ouvrir... Enregistrer Imprimer... Graphe Recherche Aspect visuel... Langue Aide A propos... Aide

Rechercher des sous-groupes par ID ou nom : Rechercher Afficher les informations additionnelles

Sous-groupes		Groupes principaux		Paramètres d'interaction binaire			Divers
Nom 1	ID 1	Nom 1	ID 1	A 1-2	B 1-2	C 1-2	Notes
Nom 2	ID 2	Nom 2	ID 2	A 2-1	B 2-1	C 2-1	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
CH2=CH	5	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
CH=CH	6	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
CH2=C	7	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
CH=C	8	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
C=C	70	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
ALLENE	97	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
=CHCH=	98	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
=CCH=	99	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	
CH3	1	CH2	1	171.47	-0.043222	0	
H2C=CH2	250	C=C	2	-87.61	-0.054411	0	

Simulis Thermodynamics

Pour qu'un modèle de contribution de groupes fonctionne, il faut que les molécules disposent d'une décomposition en sous-groupes pour ce modèle.

Dans Simulis Thermodynamics, les décompositions sont à renseigner dans l'onglet « Constituants » du calculator, dans le sous-dossier « Standard » du dossier « Modèle de contribution de groupe » de l'éditeur de constituant.

The screenshot displays the Simulis Thermodynamics software interface. The main window is titled 'Editeur de calculator thermodynamique' and features a sidebar with various options under 'CALCULATOR', 'MODIFICATIONS', and 'CONFIGURATION'. The 'CONSTITUANTS' tab is active, showing a list of compounds: ETHYLBENZENE and ETHANE.

An 'Editeur de constituant' window is open, showing the 'Propriétés' tab for 'ETHYLBENZENE'. The 'Modèle de contribution de groupe' section is expanded to the 'Standard' sub-folder. A table lists various decomposition models and their associated group contributions:

Modèle de contribution de groupe	Valeur
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund) 1993	[ACH] 5 [ACCH2] 1 [CH3] 1
Décomposition UNIFAC original	[ACH] 5 [ACCH2] 1 [CH3] 1
Décomposition UNIFAC PSRK	[ACH] 5 [ACCH2] 1 [CH3] 1
Décomposition UNIFAC LLE	[CH3] 1 [ACH] 5 [ACCH2] 1
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund)	[ACH] 5 [ACCH2] 1 [CH3] 1
Décomposition UNIFAC modifié (Larsen)	[CH3] 1 [CH2] 1 [ACH] 5 [AC] 1
Décomposition PPR 78	[ACH] 5 [AC] 1 [CH2] 1 [CH3] 1
Décomposition UNIFAC VTPR	[ACH] 5 [ACCH2] 1 [CH3] 1
Décomposition UNIFAC UMRPRU	<inconnu>
Décomposition NRTL PR	[ACH] 5 [AC] 1 [CH2] 1 [CH3] 1
Décomposition GC-PPC-SAFT	[EthylBz (G2)](1, 0) 1 [CHa](1, ...
Décomposition UNIFAC modifié (NIST)	[ACH] 5 [ACCH2] 1 [CH3] 1

The 'Utilisateur' section is also visible, showing 'Atomique', 'Changement de phase', 'Combustion, sécurité, toxicité', 'Phase condensée', 'Thermo-chimique', 'Interaction, réaction phase gaz', 'Propriétés utilisateur', 'PPC-SAFT', and 'NRTL-SAC'.

Simulis Thermodynamics

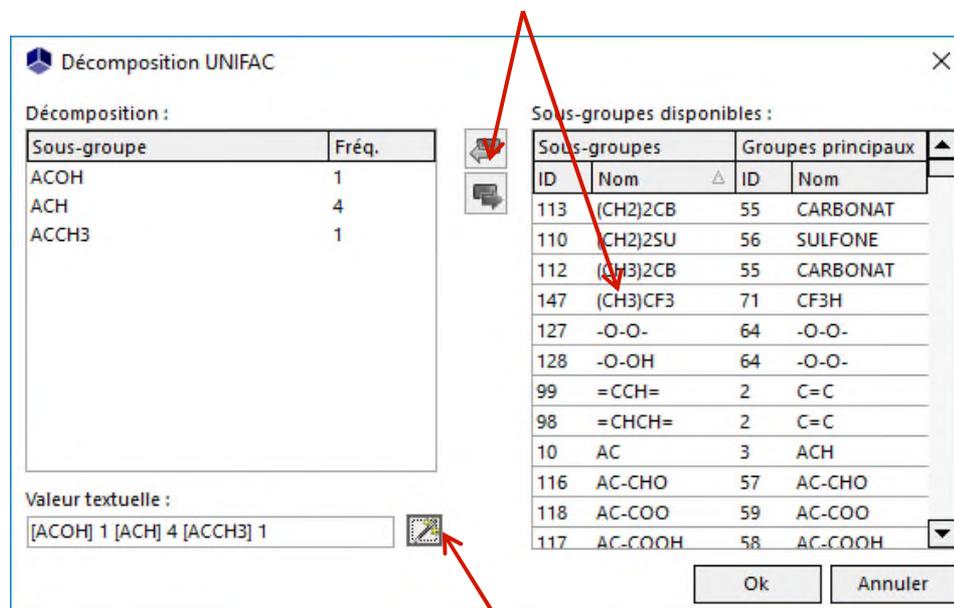
Le remplissage de la décomposition est effectué en cliquant sur les « ... » situés en bout de ligne de chaque décomposition.

Décomposition UNIFAC VTPR

[ACOH] 1 [ACH] 4 [ACCH3] 1 ...

La fenêtre d'édition ci-dessous est alors ouverte :

- Les groupements peuvent être ajoutés en double cliquant sur la liste de droite ou en utilisant les flèches situées au milieu



- La baguette magique permet une prédiction automatique de la décomposition si celle-ci est possible et que le SMILES de la molécule a été fourni (propriété disponible dans le dossier « identification » du constituant).

Simulis Thermodynamics

Dans un « calculator » Simulis Thermodynamics, si un modèle prédictif basé sur des contributions de groupe est sélectionné (ex. : VTPR), un bouton permet de visualiser la matrice réduite aux seuls groupements utilisés par les constituants du calculator.

The screenshot displays the 'Editeur de calculateur thermodynamique' window. The 'MODELE' tab is active, showing various configuration options for the VTPR model. A red box highlights the 'Paramètres du modèle prédictif...' button in the 'MODELE THERMODYNAMIQUE' panel. A red arrow points from this button to the 'Editeur de modèles prédictifs' window, which is open in the foreground.

The 'Editeur de modèles prédictifs' window shows a zoomed-in view of the reduced matrix. It includes a legend for the number of parameters per group and a table of the matrix data.

Legend:

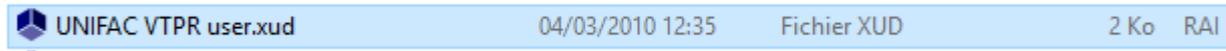
- No parameter (White)
- 1 parameter (Yellow)
- 2 parameters (Green)
- 3 parameters (Red)

Matrix Data Table:

Nom	ID	R	Q	Privé	Version
CH2	1			✓	Delivery 20
CH3	1	0	1.2958	✓	Delivery 20
CH2	2	0	0.9471	✓	Delivery 20
ACH	3			✓	Delivery 20
ACH	9	0	0.4972	✓	Delivery 20
ACCH2	4			✓	Delivery 20
ACCH3	11	0	1.4843	✓	Delivery 20
OH	5			✓	Delivery 20
OH (P)	14	0	1.0189	✓	Delivery 20

Simulis Thermodynamics

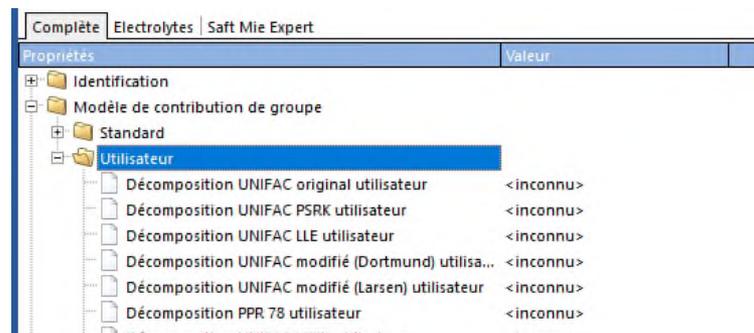
Dans le cas où l'utilisateur souhaite utiliser une matrice personnalisée tout en gardant les données fournies par ProSim, il est possible d'utiliser des modèles « Utilisateur ». Dans le dossier « C:\ProgramData\ProSim\StarDust\UNIFAC Models », des fichiers « xud » vides avec l'indication « User » dédiés à chaque modèle sont présents.



Ces fichiers sont donc à définir complètement par l'utilisateur. Le modèle thermodynamique à choisir est celui avec l'extension « (Utilisateur) ».



Les décompositions des molécules sont à définir dans le sous-dossier « Utilisateur ». Pour ces modèles, la décomposition automatique peut ne pas être cohérente. Celle-ci reste basée sur les groupes des modèles d'origine.



Matrices Privées

Si l'utilisateur est membre du consortium UNIFAC, des fichiers .xud privés sont fournis par le consortium à l'ensemble des membres.

L'utilitaire d'installation fourni en supplément de Simulis Thermodynamics permet une installation des bases privées en lieu et place des bases publiques fournies par ProSim.

« UNIFAC Private [year] for Simulis Setup.exe »

Pour une comparaison de résultats, les bases publiques sont conservées dans un dossier « Public » du répertoire contenant les fichiers xud.

ATTENTION : l'utilisation d'une base privée implique de nouveaux paramètres mais surtout de nouveaux groupements. Les décompositions des molécules sont donc à refaire pour tenir compte du caractère privé des bases disponibles.

L'outil de décomposition automatique tient compte du type (public/privé) des bases pour fournir une décomposition cohérente.

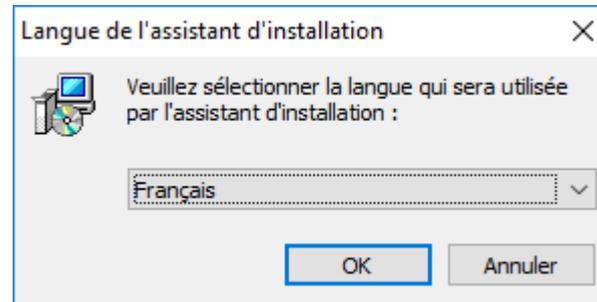
Valeur textuelle :



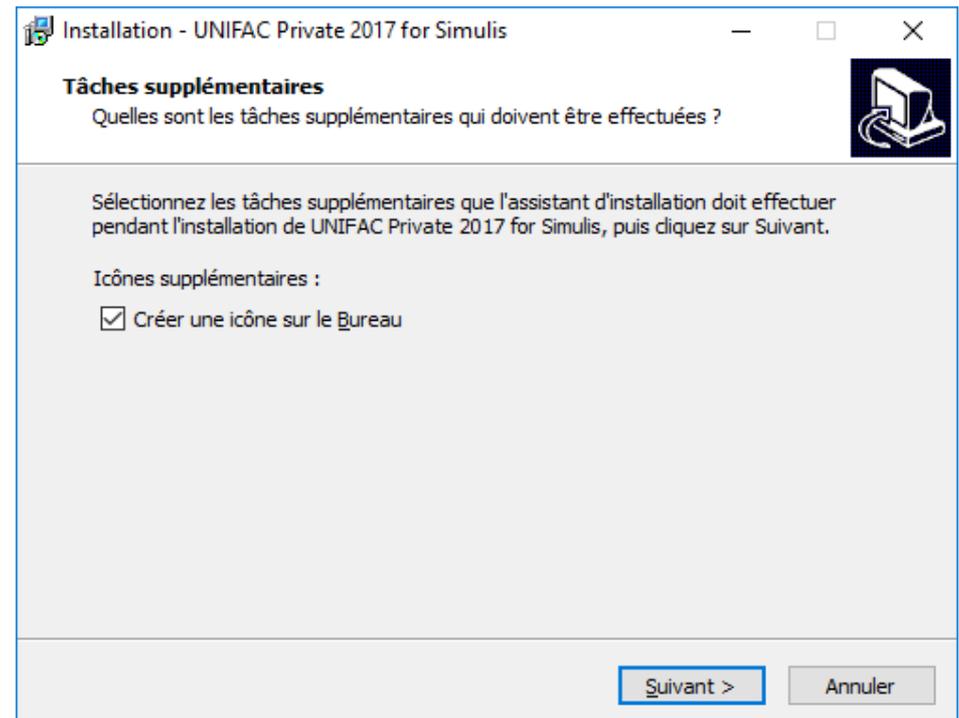
La base couramment utilisée est la base privée

Matrices Privées

- Sélectionner la langue d'installation et appuyer sur « OK »

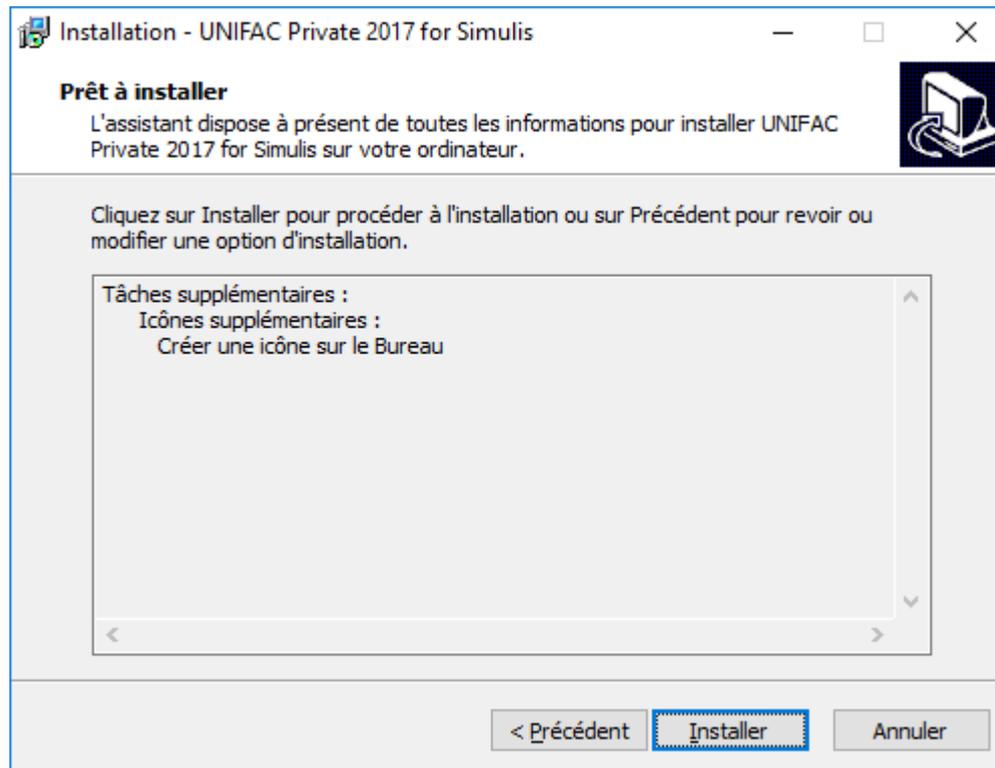


- Choisir si une icône de raccourci vers l'éditeur de modèle réactif doit être installée sur le bureau ou non et appuyer sur « Suivant > ».



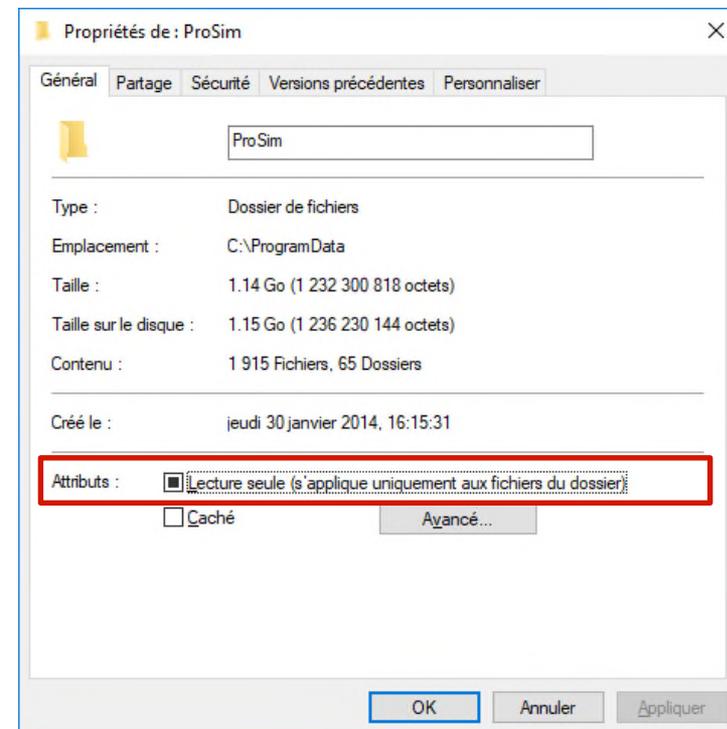
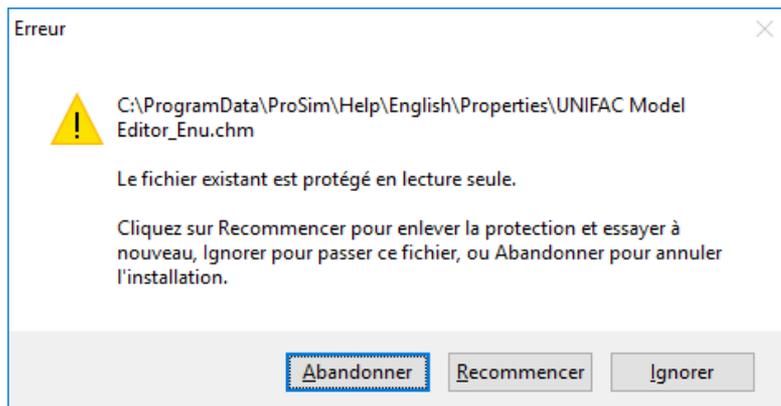
Matrices Privées

- Cliquer sur « Installer »



Matrices Privées

- Attention dans certains cas, des fichiers sont en « lecture seule », dès lors il convient de modifier l'attribut du répertoire « C:\ProgramData\ProSim »



Matrices Privées

- Une fois l'installation terminée, l'utilitaire propose d'exécuter immédiatement l'éditeur de modèle prédictif.





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