

# Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 11 : Gestion des systèmes électrolytiques avec  
l'éditeur de modèles réactifs

Software & Services In Process Simulation

*We guide You to efficiency*



ProSim

# Introduction

Ce document présente le fonctionnement des modèles thermodynamiques électrolytiques et l'outil de configuration de ces modèles réactifs

- Quelques définitions
- Utilisation au sein de Simulis Thermodynamics et visualisation des paramètres
- Présentation de l'éditeur de modèles réactifs

# Quelques définitions

- Electrolyte :

- molécule ou espèce atomique (gazeuse, liquide ou solide) ayant une certaine solubilité dans le solvant et réagissant avec ce dernier pour former une ou plusieurs espèces ioniques (chargées)

Ex. :  $\text{CO}_2$  (g),  $\text{NaCl}$  (s)

- Equilibre électrolytique :

- équilibre thermodynamique impliquant des espèces étant toutes présentes dans le solvant

Ex. :  $\text{CO}_2$  (aq) +  $\text{H}_2\text{O}$  (aq)  $\rightleftharpoons$   $\text{H}^+$  (aq) +  $\text{HCO}_3^-$  (aq)

# Quelques définitions

- Espèce apparente :

- molécule ou espèce atomique définie par l'utilisateur

Ex. :  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NaCl}$

- Espèces vraies :

- toutes les espèces existantes dans la solution, des espèces supplémentaires par rapport aux espèces dites apparentes étant créées par les réactions électrolytiques (incluent les espèces apparentes)

Ex. :  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{NaOH}$ ,  $\text{NaHCO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3, \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3, 7\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3, 10\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$

# Quelques définitions

- Problématique globale des systèmes électrolytiques multiphasiques
  - Systèmes contenant :
    - De l'eau :  $H_2O$
    - Des sels :  $NaCl$ ,  $KCl$ ,  $Na_2SO_4$  ...
    - Des gaz :  $CO_2$ ,  $NH_3$ ,  $CH_4$  ...
  - Réactions de dissociations :
    - Autoprotolyse de l'eau :  $H_2O \rightleftharpoons H^+ + HO^-$
    - Des sels :  $NaCl \rightleftharpoons Na^+ + Cl^-$
    - Des gaz :  $CO_2 + H_2O \rightleftharpoons H^+ + HCO_3^- \dots$
- Solutions électrolytiques : solutions fortement non idéales (particules chargées électriquement, interactions de nature électrostatique)
- Utilisation d'une thermodynamique spécifique pour la description de la phase aqueuse
- Equilibres solide-liquide, liquide-vapeur, solide-liquide-vapeur

} Espèces apparentes

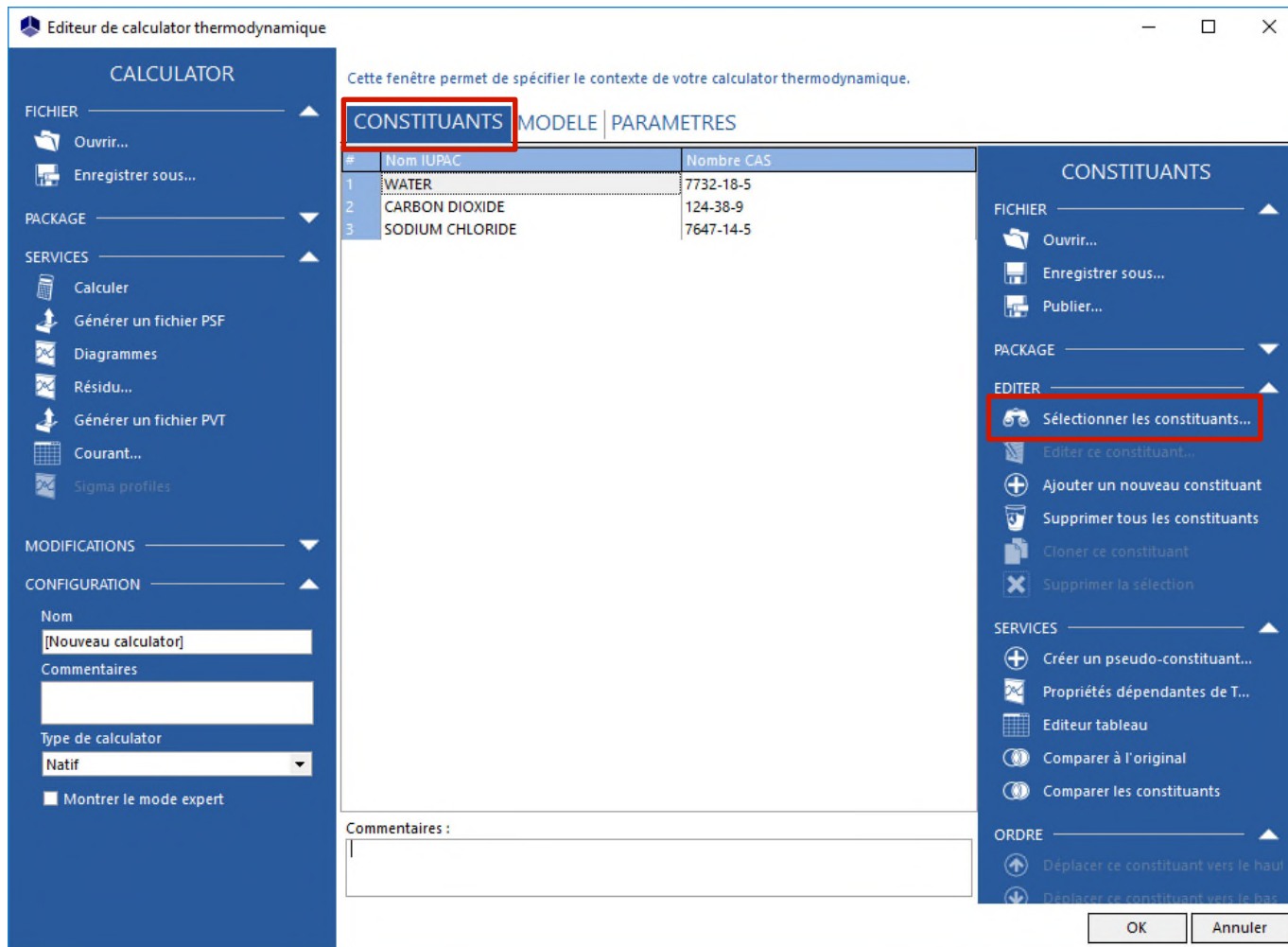
} Espèces vraies



# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

6

- Etape 1 : dans le calculator, définir les espèces apparentes du système



# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

7

- Etape 2 : choisir un modèle thermodynamique électrolytique  
(dans la catégorie « Approche hétérogène - Electrolytes »)

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS **MODELE** PARAMETRES

**Nom** Sour water

**Catégorie** Approche hétérogène - Electrolytes

**Profil** Sour water

**Type d'approche** A partir des coefficients d'activité

**Equation d'état** Nakamura

**Fonction alpha** Non défini

**Règles de mélange** Non défini

**Modèle des coefficients d'activité** Edwards

**Fugacité liquide pur état standard** Loi de Henry avec correction de Poynt

**Volume molaire liquide** Helgeson

**Propriétés de transport** Mixtes

**Calcul enthalpique**  $H^* = DH_0^f$ , gaz parfait, 25°C, 1 atm

**Modèle thermodynamique utilisateur** Aucun

**Index du modèle** 1

**Commentaires :**

**MODELE THERMODYNAMIQUE**

**CONFIGURATION**

Paramètres

Assistant thermodynamique

Aide thermodynamique

☐ Utiliser un modèle spécifique eau pure

**Avancé**

☒ Modèle eau-hydrocarbures

Sol A 6,25043

Sol B 4015.3

☐ Prise en compte de la démixtion

Paramètres du modèle prédictif...

☒ Modèle en espèces vraies

Paramètres du modèle réactif...

OK Annuler

# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

- Simulis Thermodynamics (serveur thermodynamique de ProSim) propose plusieurs modèles thermodynamiques électrolytiques ou réactifs (cf. catégorie des modèles)
  - Sour Water
  - Pitzer
  - Amines et gaz acides
  - e-NRTL
  - UNIQUAC électrolytes
  - ULPDHS
  - MSE
  - COSMO-UCAs
  - ...



# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

9

- Etape 2 : cas d'un modèle thermodynamique électrolytique prédictif par contribution de groupes, ex. ULPDHS (dans la catégorie « Approche hétérogène - Electrolytes - Modèles prédictifs »)

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS **MODELE** PARAMETRES

Nom: ULPDHS

Catégorie: Tous les profils

Profil: ULPDHS

Type d'approche: A partir des coefficients d'activité

Equation d'état: Nakamura

Fonction alpha: Non défini

Règles de mélange: Non défini

Modèle des coefficients d'activité: ULPDHS

Fugacité liquide pur état standard: Loi de Henry avec correction de Poynt

Volume molaire liquide: Helgeson

Propriétés de transport: Electrolytes

Calcul enthalpique:  $H^* = DHof$ , gaz parfait, 25°C, 1 atm

Modèle thermodynamique utilisateur: Aucun

Index du modèle: 1

Commentaires :

MODELE THERMODYNAMIQUE

DOCUMENTATION

- Assistant thermodynamique
- Aide thermodynamique

PARAMETRES ADDITIONNELS

- Paramètres
- Prise en compte de la démixtion
- Modèle en espèces vraies

INFORMATIONS SUR LE MODELE

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

EAU-HYDROCARBURE

EAU PURE

OK Annuler

Cliquer sur le bouton  
« Paramètres du  
modèle prédictif... »



Se référer à « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas n° 10 »  
pour plus de détails sur l'utilisation des modèles prédictifs par contribution de groupes

# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

- Etape 3 : visualisation des paramètres du modèle choisi pour le système sélectionné

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS **MODELE** PARAMETRES

**Nom**: Sour water  
**Catégorie**: Tous les profils  
**Profil**: Sour water

**Type d'approche**: A partir des coefficients d'activité  
**Equation d'état**: Nakamura  
**Fonction alpha**: Non défini  
**Règles de mélange**: Non défini  
**Modèle des coefficients d'activité**: Edwards  
**Fugacité liquide pur état standard**: Loi de Henry avec correction de Poynt  
**Volume molaire liquide**: Helgeson  
**Propriétés de transport**: Electrolytes  
**Calcul enthalpique**: H\*=DH0f, gaz parfait, 25°C, 1 atm  
**Modèle thermodynamique utilisateur**: Aucun  
**Index du modèle**: 1

**Commentaires**:

**MODELE THERMODYNAMIQUE**

**DOCUMENTATION**

- Assistant thermodynamique
- Aide thermodynamique

**PARAMETRES ADDITIONNELS**

**INFORMATIONS SUR LE MODELE**

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

**EAU-HYDROCARBURE**

**EAU PURE**

OK Annuler

Cliquer sur le bouton  
« Paramètres du  
modèle réactif... »  
(uniquement actif si le  
modèle sélectionné est  
un modèle électrolytique)

# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

- Etape 3a : liste des espèces vraies pouvant être présentes dans le système (espèces apparentes + espèces ioniques + sels + autres espèces pouvant être recombinaées)

Editeur de modèles réactifs (Lecture seule)

ACCUEIL

À propos Aide Paramètres du modèle prédictif... Actions

CONSTITUANTS RÉACTIONS BINAIRES TERNAIRES

CONSTITUANTS

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...
- Publier...

PACKAGE

EDITER

- Importer des constituants...
- Editer ce constituant...
- Ajouter un nouveau constituant
- Supprimer tous les constituants
- Cloner ce constituant
- Supprimer la sélection

SERVICES

- Créer un pseudo-constituant...
- Propriétés dépendantes de la temp
- Editeur tableau
- Comparer à l'original
- Comparer les constituants

ORDRE

- Déplacer ce constituant vers le haut
- Déplacer ce constituant vers le bas


N°	Nom du constituant	Formule chimique
1	WATER	H2O
2	CARBON DIOXIDE	CO2
3	SODIUM CHLORIDE	NaCl
4	HYDROGEN CHLORIDE	HCl
5	SODIUM HYDROXIDE	NaOH
6	SODIUM BICARBONATE	NaHCO3
7	SODIUM CARBONATE	Na2CO3
8	Na2CO3, 7H2O	Na2CO3.7H2O
9	Na2CO3, 10H2O	Na2CO3.10H2O
10	Na2CO3, H2O	Na2CO3.H2O
11	Cl[-]	Cl-
12	Na[+]	Na+
13	CO3[2-]	CO3^2-
14	HCO3[-]	HCO3-
15	OH[-]	OH-
16	H[+]	H+

Commentaires

Ok Annuler

Liste des espèces  
apparentes  
(définies par l'utilisateur)

Liste des espèces vraies  
(utilisées par le modèle  
électrolytique)

 Un double-clic sur un  
constituant permet  
d'accéder à ses  
propriétés



# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

- Etape 3b : liste des réactions électrolytiques prises en compte dans le modèle réactif choisi pour le système sélectionné

Editeur de modèles réactifs (Lecture seule)

ACCUEIL

À propos Aide Paramètres du modèle prédictif... Actions

CONSTITUANTS **RÉACTIONS** BINAIRES TERNAIRES

**RÉACTIONS**

RÉACTIONS

- Ajouter une réaction
- Editer cette réaction...
- Cloner cette réaction
- Supprimer cette réaction
- Supprimer toutes les réactions
- Rechercher...


ORDRE

- ↑ Déplacer la réaction vers le haut
- ↓ Déplacer la réaction vers le bas

#	Nom
1	$\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OH}^-$
2	$\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$
3	$\text{HCO}_3^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$
4	$\text{NaCl} \rightleftharpoons \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$
5	$\text{HCl} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{Cl}^-$
6	$\text{NaOH} \rightleftharpoons \text{Na}^+ + \text{OH}^-$
7	$\text{NaHCO}_3 \rightleftharpoons \text{Na}^+ + \text{HCO}_3^-$
8	$\text{Na}_2\text{CO}_3 \rightleftharpoons 2\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-}$
9	$\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons 2\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} + 7\text{H}_2\text{O}$
10	$\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons 2\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} + 10\text{H}_2\text{O}$
11	$\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons 2\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_2\text{O}$

Commentaires :

Ok Annuler

 Un double-clic sur une réaction permet d'accéder aux paramètres de l'équilibre sélectionné

# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

13

- Etape 3b : paramètres de la réaction électrolytique sélectionnée (stœchiométrie, spéciation, éventuellement précipitation)

Stœchiométrie de la réaction

Paramètres de la spéciation (ou dissociation)

Paramètres de précipitation (ou de solubilité)

Corrélation pour la constante d'équilibre de spéciation (ou de précipitation)

Paramètres

Constituant	Stœchiométrie
WATER	-1
CARBON DIOXIDE	-1
HCO3[-]	1
H[+]	1

Spéciation

Précipitation

Configurer les constantes d'équilibre

Corrélation: Logarithmique

$$\ln(K_{eq}) = \frac{p_1}{T_K} + p_2 \cdot \ln(T_K) + p_3 \cdot T_K + p_4 + p_5 \cdot T_K^2 + p_6 \cdot T_K^3$$

Commentaires :

Paramètre	Valeur
p1	-7742.6
p2	-14.506
p3	-0.028104
p4	102.28
p5	0
p6	0

Ok Annuler



# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

- Etape 3c : paramètres d'interaction du modèle choisi entre espèces vraies (binaires, éventuellement ternaires)

**Binares**      **Ternaires**

The screenshot shows the 'Editeur de modèles réactifs (Lecture seule)' window. The 'BINAIRE' tab is selected. The central table lists constituents and their interactions. The right panel shows the 'Paramètre' dropdown set to 'Beta0' and the 'Corrélation' dropdown set to 'Holmes'. The 'Valeur' field displays the equation:  $Valeur = p_1 + p_2 \cdot \ln\left(\frac{p_{H_2O}}{p_0}\right) + p_3 \cdot (p_{H_2O} - p_0) + p_4 \cdot (T_R - p_7) + p_5 \cdot (P_{sur} - p_6)$ . Below this, a table lists parameters p1 through p8 with their values.

**Liste des paramètres du modèle choisi**

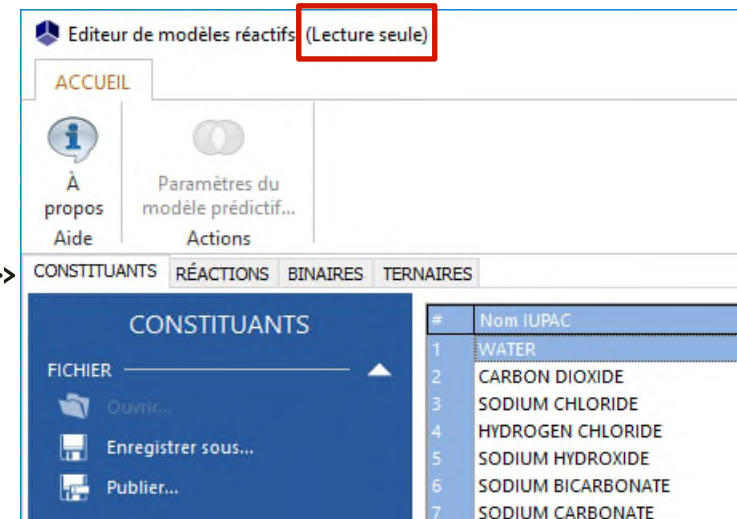
**Corrélation pour le paramètre d'interaction binaire (ou ternaire) sélectionné**

**Paramètres**

Paramètre	Valeur
p1	0.23159
p2	0.00885495
p3	0
p4	-0.0003152
p5	0.000112
p6	997
p7	298.15
p8	1

# Simulis Thermodynamics : Visualisation des paramètres

- Les paramètres du modèle choisi pour le système sélectionné, accessibles depuis le bouton « Paramètres du modèle réactif... » sont en « Lecture seule » (pas de modification possible)



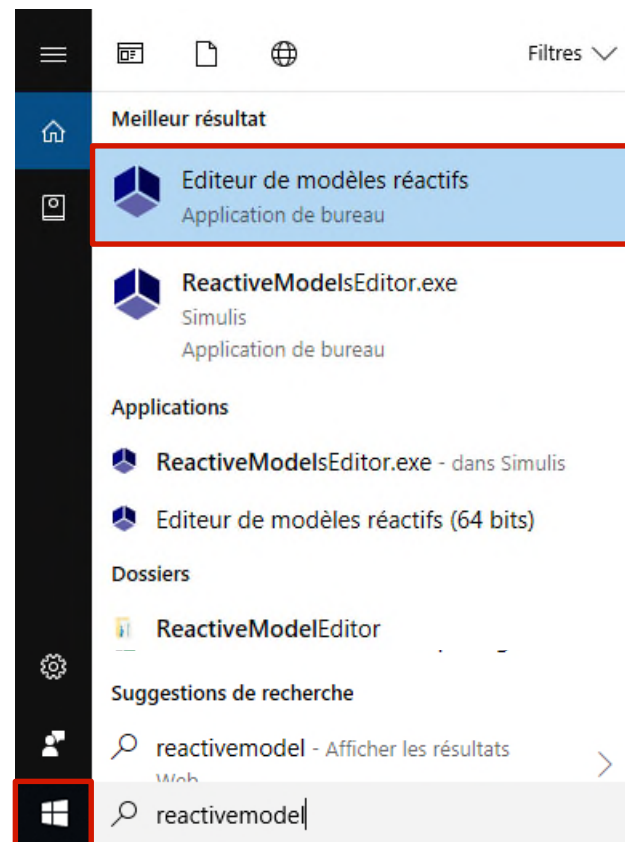
- Visualisation des espèces, des réactions d'équilibre et des interactions prises en compte par le modèle
- Possibilité d'ajouter des systèmes ou de modifier des paramètres de systèmes existants



Utilisation de l'éditeur de modèle réactif

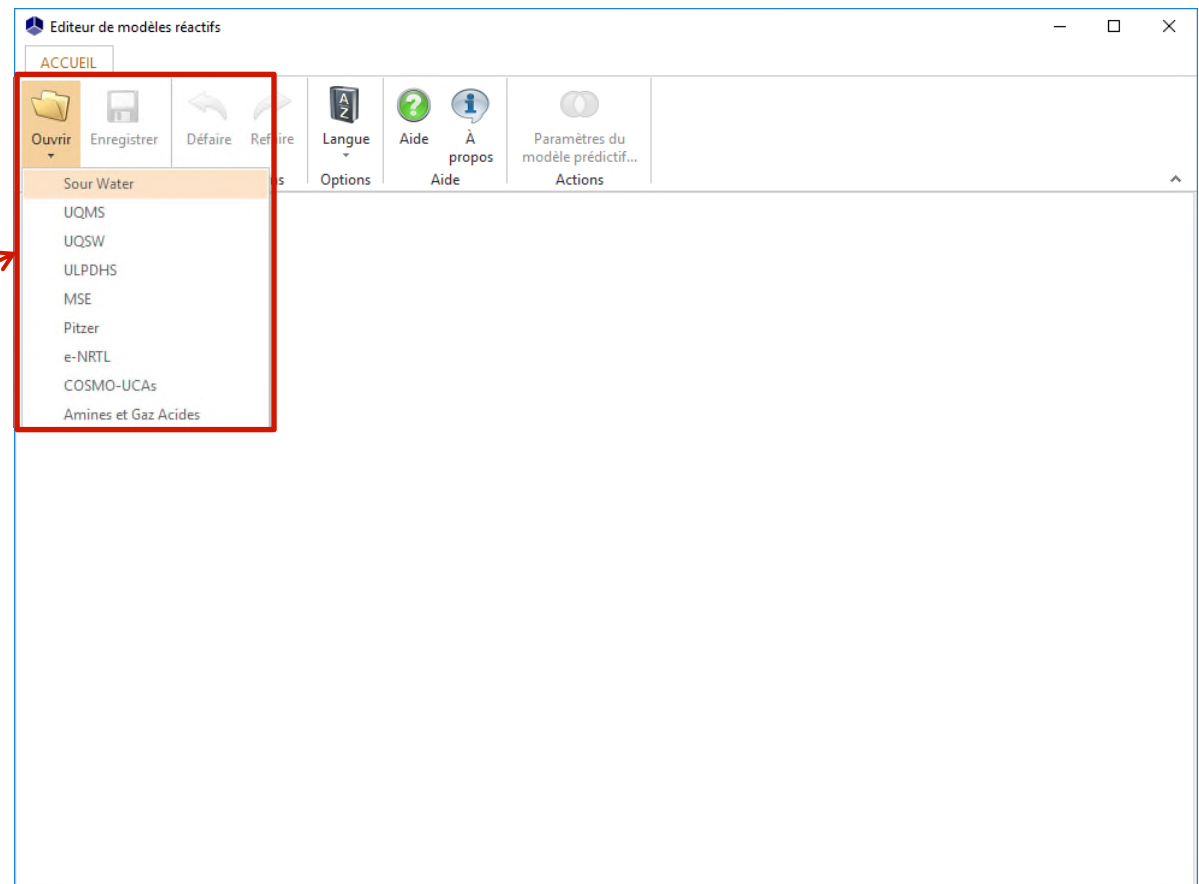
# Editeur de Modèles Réactifs

- Editeur de modèles réactifs : « **ReactiveModelsEditor.exe** »
  - Accessible depuis le menu « Démarrer » de WINDOWS
  - Ou dans : C:\Program Files (x86)\Simulis
  - Ou dans : C:\Program Files\Simulis



# Editeur de Modèles Réactifs

- Editeur de modèles réactifs : « **ReactiveModelsEditor.exe** »
  - Ouvrir une base de données associée à un modèle



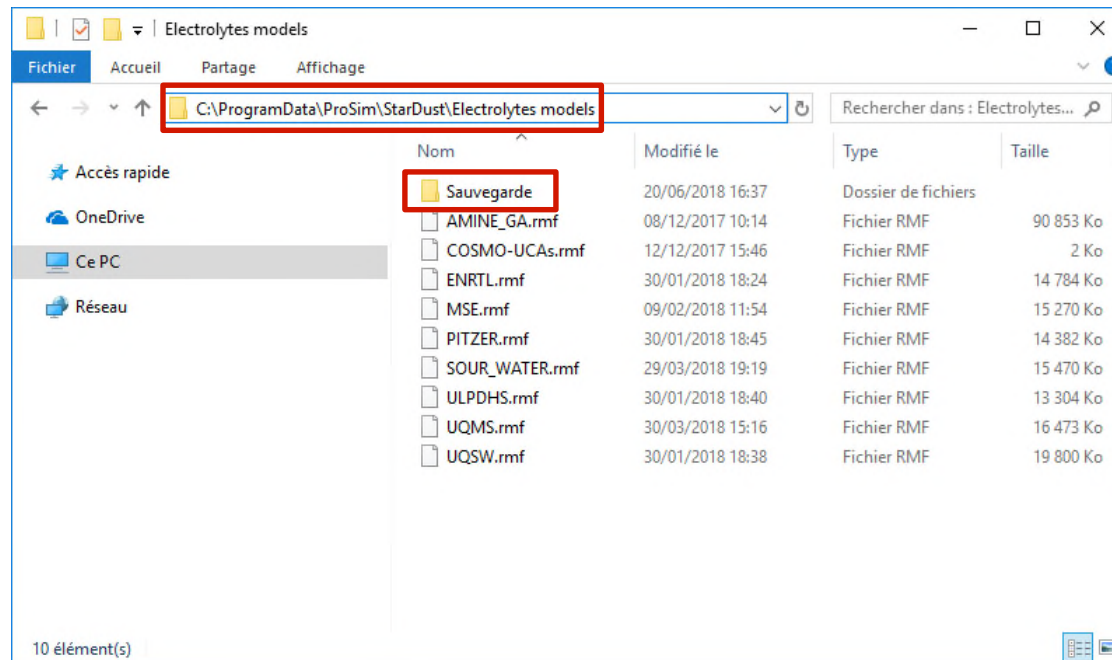
Accès aux bases de données des paramètres des modèles réactifs

# Editeur de Modèles Réactifs

- Fichiers de données des paramètres des modèles réactifs (rmf)
  - Dans C:\ProgramData\Prosim\Stardust\Electrolytes models
  - 1 fichier rmf par modèle électrolytique



Il est fortement recommandé de sauvegarder les fichiers rmf originaux ainsi que les différentes versions créées par l'utilisateur





# Editeur de Modèles Réactifs

Liste des constituants pris en compte pour le modèle sélectionné (espèces vraies)

Liste des réactions prises en compte pour le modèle sélectionné (accès aux constantes de spéciation et de précipitation)

Accès aux paramètres d'interaction binaire (éventuellement ternaire) disponibles pour le modèle sélectionné

Editeur de modèles réactifs : Sour Water

ACCUEIL

Ouvrir Enregistrer Défaire Refaire Langue Aide À propos Paramètres du modèle prédictif...

Editer Modifications Options Aide Actions

CONSTITUANTS RÉACTIONS BINAIRES TERNAIRES

**CONSTITUANTS**

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...
- Publier...

PACKAGE

EDITER

- Importer des constituants...
- Editer ce constituant...
- Ajouter un nouveau constituant
- Supprimer tous les constituants
- Cloner ce constituant
- Supprimer la sélection

SERVICES

- Créer un pseudo-constituant...
- Propriétés dépendantes de la temp
- Editeur tableau
- Comparer à l'original
- Comparer les constituants

ORDRE

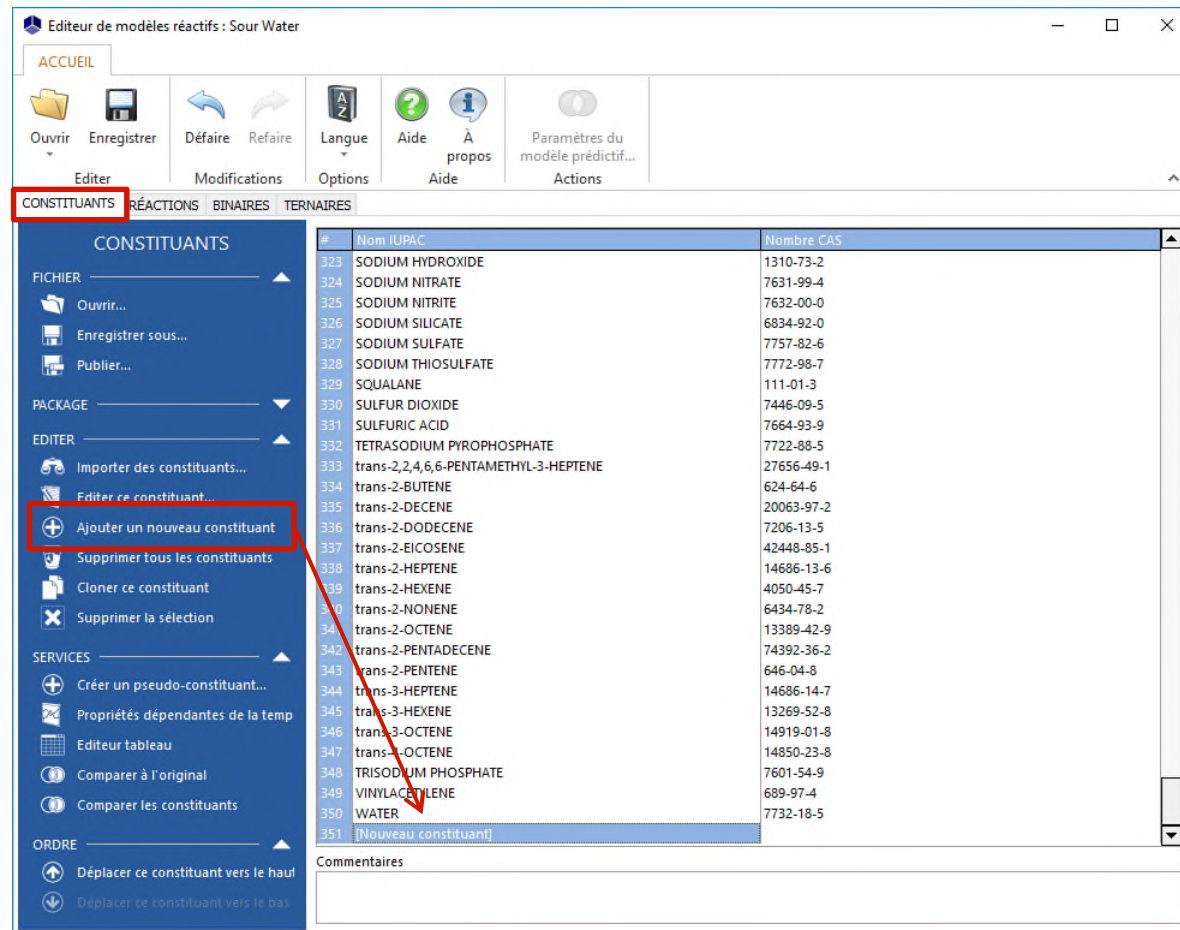
- Déplacer ce constituant vers le haut
- Déplacer ce constituant vers le bas

	Nom IUPAC	Nombre CAS
1	(NH4)2CO3	6721-33-1
2	1,3-BUTADIENE	106-99-0
3	1,4-PENTADIENE	591-93-5
4	1,5-HEXADIENE	592-42-7
5	1-BUTENE	106-98-9
6	1-DECENE	872-05-9
7	1-DODECENE	1599-67-3
8	1-DODECENE	112-41-4
9	1-EICOSENE	3452-07-1
10	1-HEPTADECENE	6765-39-5
11	1-HEPTENE	592-76-7
12	1-HEPTYNE	628-71-7
13	1-HEXACOSENE	18835-33-1
14	1-HEXADECENE	629-73-2
15	1-HEXENE	592-41-6
16	1-HEXYNE	693-02-7
17	1-NONADECENE	18435-45-5
18	1-NONENE	124-11-8
19	1-NONYNE	3452-09-3
20	1-OCTACOSENE	18835-34-2
21	1-OCTADECENE	112-88-9
22	1-OCTENE	111-66-0
23	1-OCTYNE	629-05-0
24	1-PENTADECENE	13360-61-7
25	1-PENTENE	109-67-1
26	1-PENTYNE	627-19-0
27	1-TETRACONTENE	61868-18-6
28	1-TETRACOSENE	10192-32-2
29	1-TETRADECENE	1120-36-1

Commentaires

# Editeur de Modèles Réactifs

## ■ Ajouter une espèce



# Editeur de Modèles Réactifs

- Ajouter une espèce ionique : propriétés requises
  - Nom
  - Numéro CAS ou intrinsèque (valeur négative non déjà présente < -1000)
  - Masse molaire
  - Charge
  - Constante de Born
  - Contribution de conductivité thermique (solution électrolytique)  
(uniquement si utilisation du modèle Jamieson-Thudope)
  - Coefficients d'Helgeson :  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$ ,  $A_4$ ,  $C_1$ ,  $C_2$   
(uniquement si utilisation du modèle Helgeson)
  - Entropie état standard à 25 °C - dilution infinie
  - Chaleur spécifique état standard à 25 °C - dilution infinie
  - Enthalpie de formation état standard - dilution infinie
  - Energie de Gibbs de formation état standard - dilution infinie
  - Propriétés dépendantes de la température : celles de l'eau

# Editeur de Modèles Réactifs

- Ajouter un sel : propriétés requises
  - Nom
  - Numéro CAS ou intrinsèque (valeur négative non déjà présente < -1000)
  - Formule chimique
  - Masse molaire
  - Etat physique à 25 °C : solide
  - Etat physique en solution aqueuse à 25 °C  
(doit être différent de « parfaitement soluble »)
  - Enthalpie solide de formation état standard
  - Chaleur spécifique solide (en fonction de la température)
  - Pression de vapeur saturante : non volatil (équation 101 avec A=-30)
  - Enthalpie de vaporisation : nulle (équation 100 avec A=B=C=D=E=0)
  - Autres propriétés dépendantes de la température : celles de l'eau

# Editeur de Modèles Réactifs

- Ajouter un autre constituant : propriétés requises
  - Nom
  - Numéro CAS
  - Formule chimique
  - Masse molaire
  - Etat physique à 25 °C
  - Enthalpie de formation état standard à 25 °C
  - Energie de Gibbs de formation état standard à 25 °C
  - Entropie absolue état standard à 25 °C
  - Coefficients de Nakamura (A, B, C, D, A0, A1, B0, B1)  
(uniquement si utilisation de l'équation d'état Nakamura)
  - Toutes les propriétés dépendantes de la température
  - En particulier constante de la loi de Henry pour les solutés



# Editeur de Modèles Réactifs

## ■ Propriétés des espèces



Dans le cadre d'un modèle réactif, toutes les propriétés d'un constituant issu de l'éditeur de modèles réactifs sont prioritaires par rapport aux propriétés d'un même constituant sélectionné dans le calculator

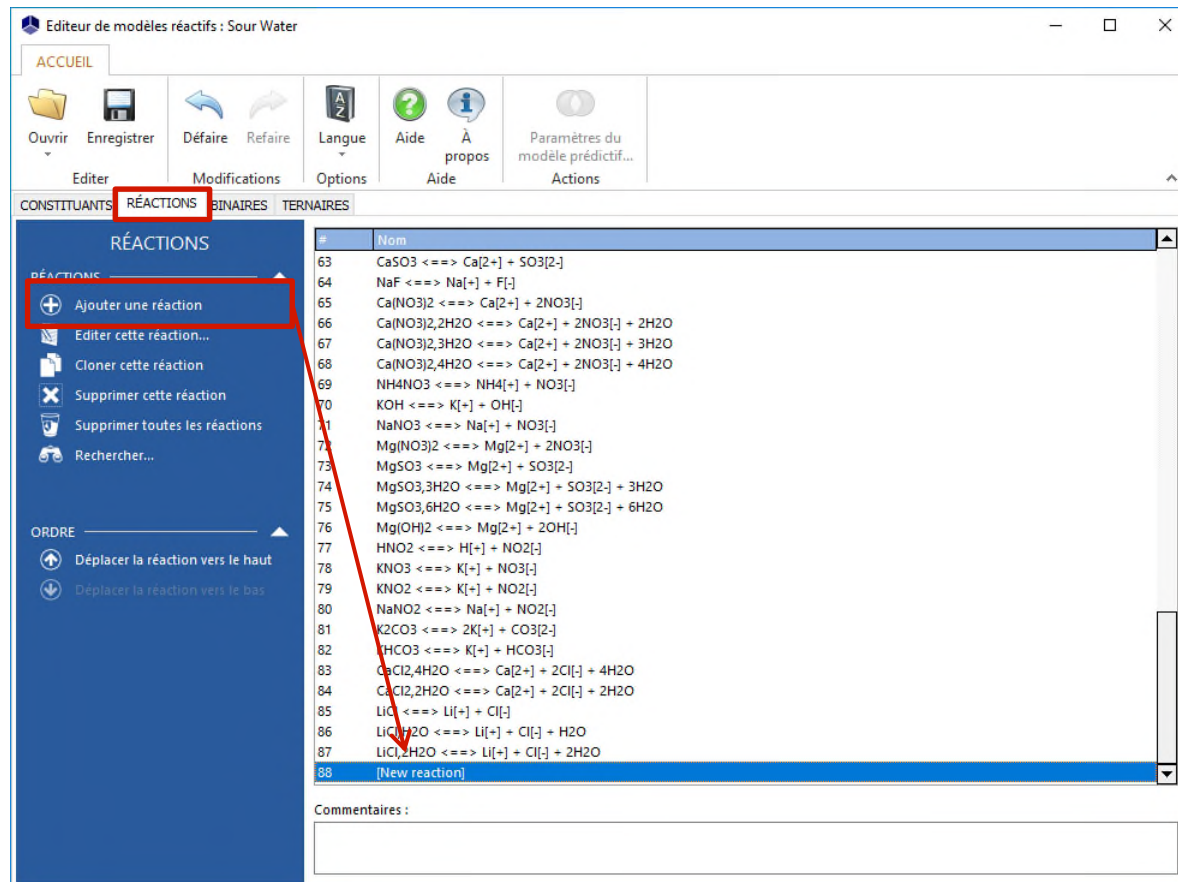
### ○ Sauf pour les propriétés :

- Etat physique à 25 °C
- Etat physique en solution aqueuse à 25 °C

(permet d'imposer ou non, directement dans les constituants du calculator, une possible précipitation pour des systèmes avec de nombreux sels)

# Editeur de Modèles Réactifs

- Ajouter une réaction électrolytique



# Editeur de Modèles Réactifs

## ■ Ajouter une réaction électrolytique

1. Nom de la réaction  
(ex.  $A + B \rightleftharpoons C + D$ )
2. Ajouter les constituants de la réaction
3. Sélectionner chaque constituant concerné par la réaction depuis la liste déroulante des espèces
4. Entrer les coefficients stœchiométriques de la réaction

The screenshot shows the 'Réaction' editor window. On the left is a blue sidebar with sections: 'CONSTITUANTS' (containing 'Ajouter', 'Cloner', 'Supprimer', 'Effacer'), 'ORDRE' (containing 'Monter', 'Descendre'), and 'MODIFICATIONS' (containing 'Défaire', 'Refaire'). The 'Ajouter' button is highlighted with a red box. The main area has a title bar 'Réaction' and a subtitle 'ID unique : {72E80A61-F903-4CAC-B736-2F3639E8136B}'. Below this is a text field 'Nom de la réaction' with the value '[New reaction]'. A red arrow points from instruction 1 to this field. Below the text field is a table with two columns: 'Constituant' and 'Stœchiométrie'. The 'Stœchiométrie' column has a dropdown menu and the value '0' is entered in the first row. A red arrow points from instruction 3 to the dropdown. Below the table is a text area 'Commentaires :'. To the right of the table is a section with tabs 'Spéciation' and 'Précipitation', and a checkbox 'Configurer les constantes d'équilibre'. A red arrow points from instruction 4 to the 'Stœchiométrie' column. At the bottom right are 'Ok' and 'Annuler' buttons.

# Editeur de Modèles Réactifs

- Ajouter une réaction électrolytique (constante de spéciation)

1. Configurer la constante d'équilibre

2. Choix de la corrélation

3. Paramètres de la corrélation

Réaction

ID unique : {72E80A68-F905-4C4C-B736-2F3639E8138B}

Nom de la réaction [New reaction]

Constituant	Stoechiométrie
	0
	0
	0
	0

Spéciation

☒ Configurer les constantes d'équilibre

Corrélation Logarithmique

$$\ln(K_{eq}) = \frac{p_1}{T_K} + p_2 \cdot \ln(T_K) + p_3 \cdot T_K + p_4 + p_5 \cdot T_K^2 + p_6 \cdot T_K^3$$

Commentaires :

Paramètres

Paramètre	Valeur
p1	0
p2	0
p3	0
p4	0
p5	0
p6	0

Commentaires :

Ok Annuler



Pour une dissociation totale

$$\ln(K_{eq}) = 35$$

(i. e.  $p_4 = 35$ )

# Editeur de Modèles Réactifs

- Ajouter une réaction électrolytique  
(constante de précipitation, si nécessaire)

1. Configurer la  
constante d'équilibre

2. Choix de la corrélation

3. Paramètres  
de la corrélation

Réaction

ID unique : {72E80A68-F905-4C4C-B736-2F3639E8138B}

Nom de la réaction [New reaction]

Constituant	Stoechiométrie
	0
	0
	0
	0

Spéciation **Précipitation**

☒ Configurer les constantes d'équilibre

Corrélation Logarithmique

$$\ln(K_{eq}) = \frac{p_1}{T_K} + p_2 \cdot \ln(T_K) + p_3 \cdot T_K + p_4 + p_5 \cdot T_K^2 + p_6 \cdot T_K^3$$

Commentaires :

Paramètre	Valeur
p1	0
p2	0
p3	0
p4	0
p5	0
p6	0

Commentaires :

Ok Annuler



# Editeur de Modèles Réactifs

## ■ Ajouter des paramètres d'interaction binaire ou ternaire

1. Sélectionner les espèces concernées depuis la liste déroulante des espèces

2. Sélectionner le paramètre d'interaction du modèle

3. Choix de la corrélation

4. Paramètres de la corrélation

Editeur de modèles réactifs : Sour Water

ACCUEIL

Ouvrir Enregistrer Défaire Refaire Langue Aide À propos Paramètres du modèle prédictif...

Editer Modifications Options Aide Actions

CONSTITUANTS RÉACTIONS BINAIRES TERNAIRES

INTERACTIONS

Ajouter Supprimer Tout supprimer Rechercher...

ORDRE Monter Descendre

Les interactions sont symétriques

#	Constituant	Constituant
60	F[-]	HF2[-]
61	HYDROGEN FLUORIDE	H[+]
62	HYDROGEN FLUORIDE	F[-]
63	HYDROGEN FLUORIDE	HF2[-]
64	H[+]	Br[-]
65	Ca[2+]	HSO3[-]
66	Ca[2+]	SO3[2-]
67	Na[+]	F[-]
68	Ca[2+]	NO3[-]
69	NH4[+]	NO3[-]
70	OH[-]	K[+]
71	Na[+]	NO3[-]
72	Mg[2+]	NO3[-]
73	SO3[2-]	Mg[2+]
74	HSO3[-]	Mg[2+]
75	K[+]	NO3[-]
76	K[+]	NO2[-]
77	Na[+]	NO2[-]
78	K[+]	CO3[2-]
79	K[+]	HCO3[-]
80	HYDROGEN SULFIDE	HYDROGEN SULFIDE
81	HYDROGEN SULFIDE	HS[-]
82	HYDROGEN SULFIDE	Na[+]
83	K[+]	SO4[2-]
84	Li[+]	Cl[-]
85		

Commentaires :

Paramètre: Beta0

Corrélation: Pitzer, de Lima et Moller

Valeur: 
$$\frac{p_1}{T_2} + p_2 + p_3 \cdot \frac{p_{Na+}}{T_2} + p_4 \cdot \frac{p_{Na+}^2}{T_2} + p_5 \cdot \ln(T_2) + (p_6 + p_7 \cdot \frac{p_{Na+}}{T_2} + p_8 \cdot \frac{p_{Na+}^2}{T_2}) \cdot T_2 + (p_9 + p_{10} \cdot \frac{p_{Na+}}{T_2}) \cdot T_2^2 + \frac{(p_{11} + p_{12} \cdot \frac{p_{Na+}}{T_2} + p_{13} \cdot \frac{p_{Na+}^2}{T_2} + p_{14} \cdot \frac{p_{Na+}^3}{T_2})}{T_2 - T_2^*}$$

Paramètres

Paramètre	Valeur
p1	0
p2	0
p3	0
p4	0
p5	0
p6	0
p7	0
p8	0
p9	0
p10	0

Commentaires :

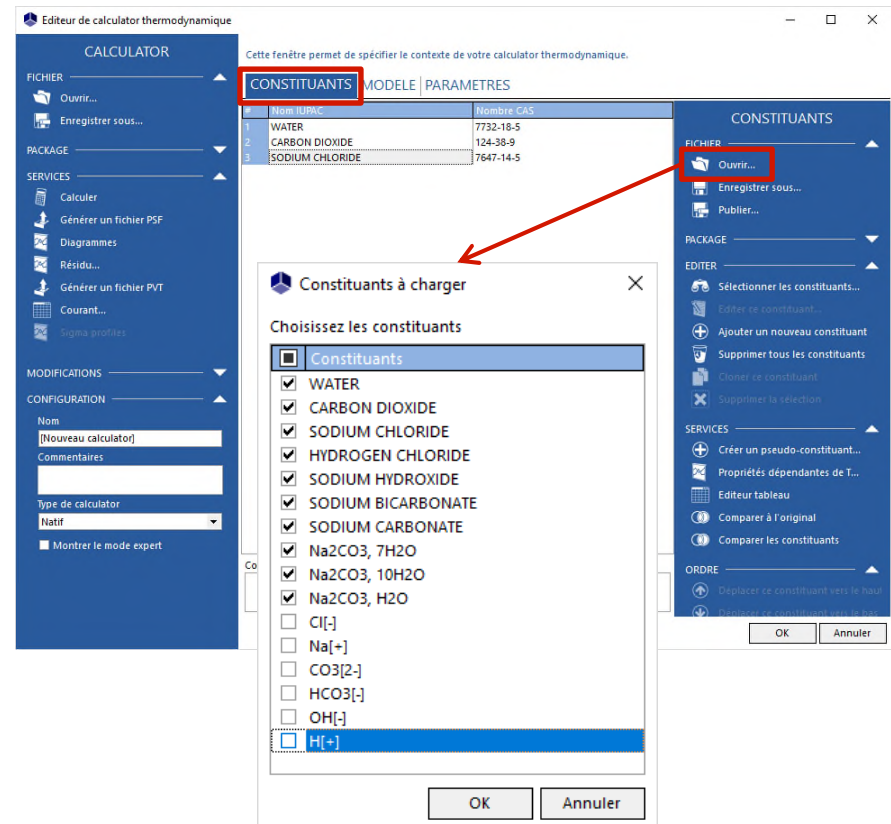
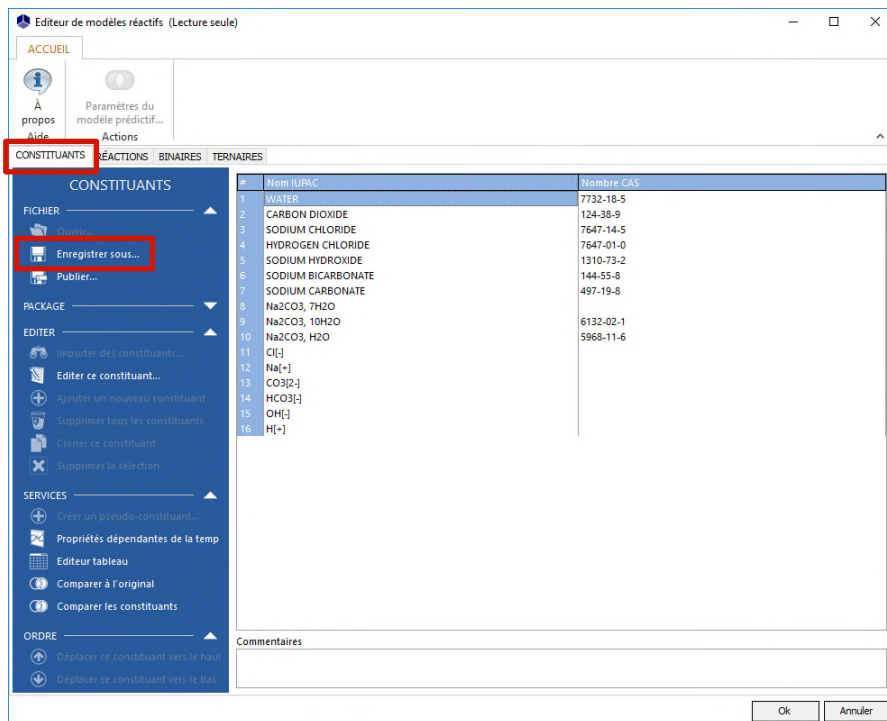
# Editeur de Modèles Réactifs vs Calculator

- Ajouter au calculator toutes les espèces pouvant précipiter ou se recombinaison

Visualisation des paramètres :  
Enregistrer toutes les espèces  
vraies du système sous forme  
d'un fichier \*.compounds

Calculator :

Ouvrir le fichier \*.compounds et  
choisir les espèces non ioniques

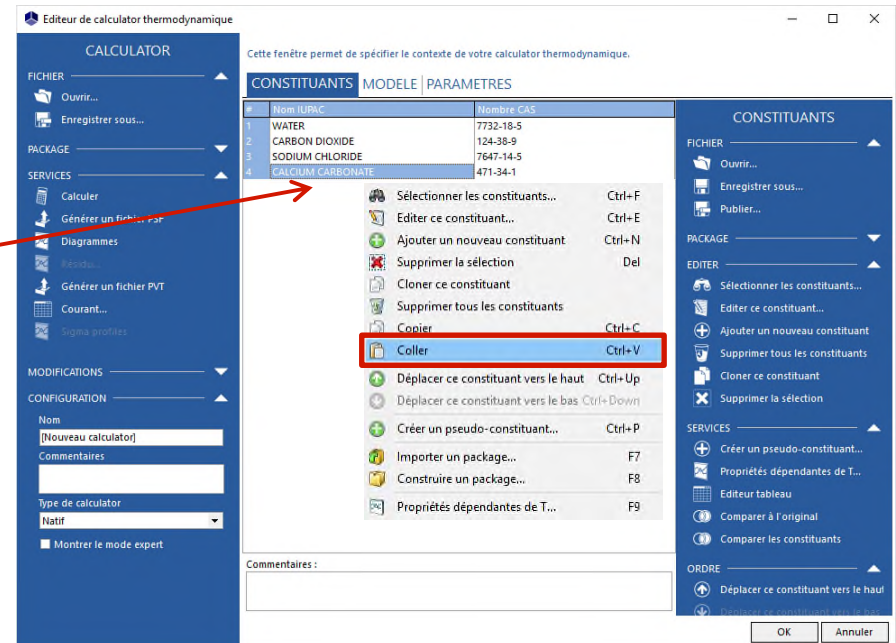
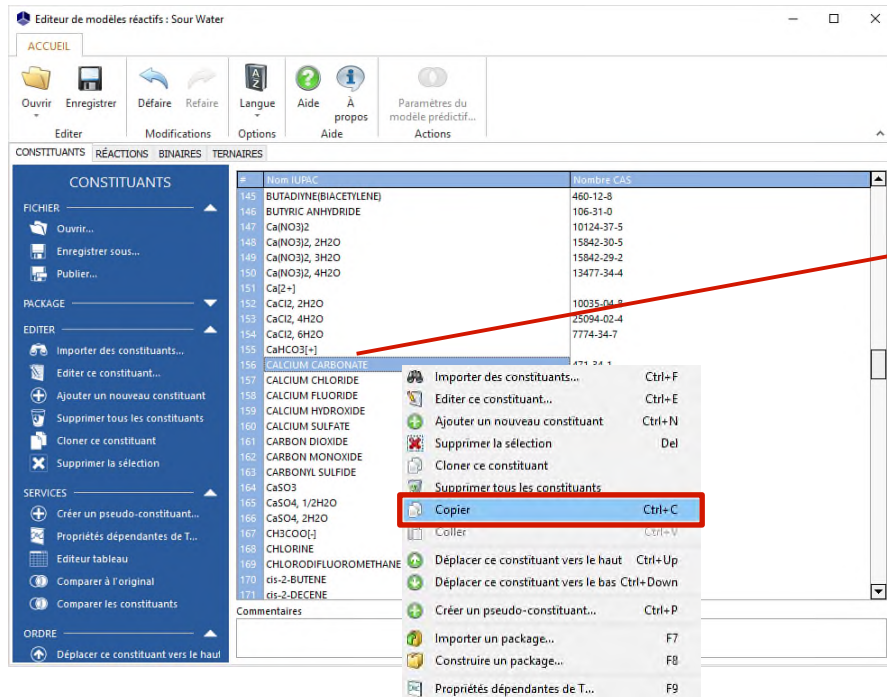


# Editeur de Modèles Réactifs vs Calculator

- Ajouter des espèces de l'éditeur de modèles réactifs dans le calculator

Editeur de modèles réactifs :  
Clic droit sur une espèce,  
**Copier** (ou CTRL + C)

Calculator :  
Clic droit dans la liste de constituants,  
**Coller** (ou CTRL + V)



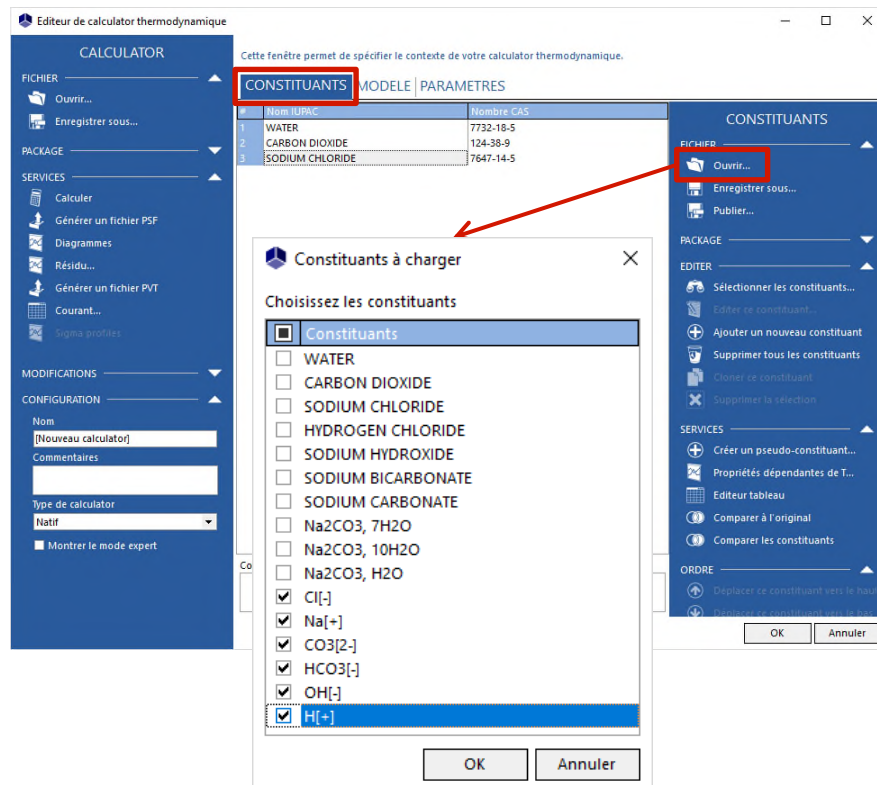


# Editeur de Modèles Réactifs vs Calculator

## ■ Travailler directement en espèces vraies

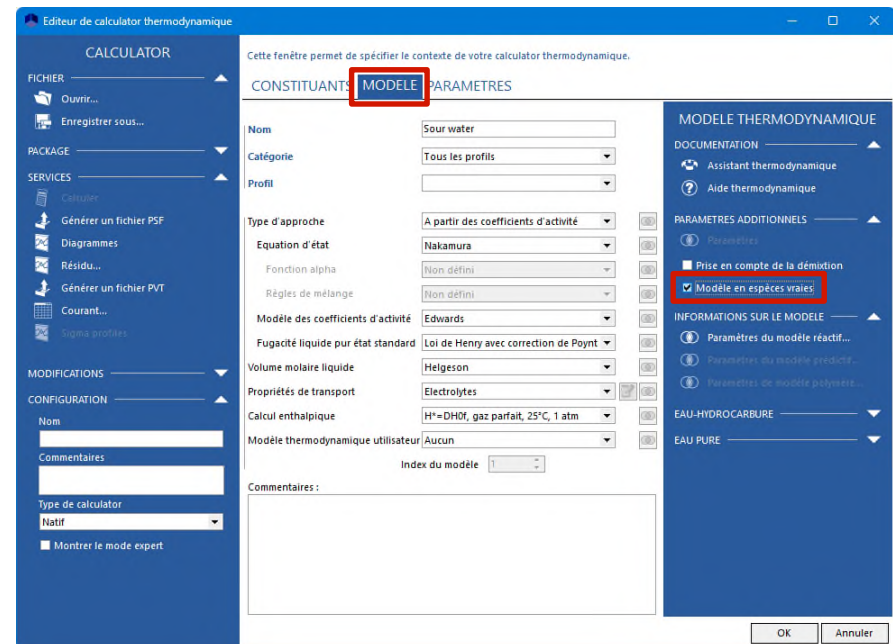
### Calculator - Constituants :

Ouvrir le fichier \*.compounds et choisir les espèces ioniques en plus des espèces apparentes définies par l'utilisateur



### Calculator - Modèle :

Sélectionner un fonctionnement en espèces vraies (pas de réaction prise en compte)



Permet la description de réactions par cinétiques contrôlées gérées en externe (ex. ProSimPlus, Excel, Matlab...)



### 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