

# Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 13 : Estimation de paramètres d'interaction binaire  
à partir de modèles prédictifs

Software & Services In Process Simulation

*We guide You to efficiency*



ProSim

# Introduction

- Certains modèles thermodynamiques nécessitent d'avoir des paramètres d'interaction binaire (PIB) afin de prédire correctement les équilibres entre phases à partir des règles de mélange. Malheureusement, ces PIB ne sont pas nécessairement disponibles dans la base de données du logiciel ou dans la littérature. Dans ce cas, deux possibilités :
  1. Régression des paramètres d'interaction binaire à partir de données expérimentales : nécessité pour l'utilisateur de créer ses propres outils (par exemple en utilisant Simulis® Thermodynamics dans Excel)



Se référer à « Démarrer avec Simulis® Thermodynamics, cas 8 : Régression des paramètres d'interaction binaire à partir de données expérimentales sur Excel »

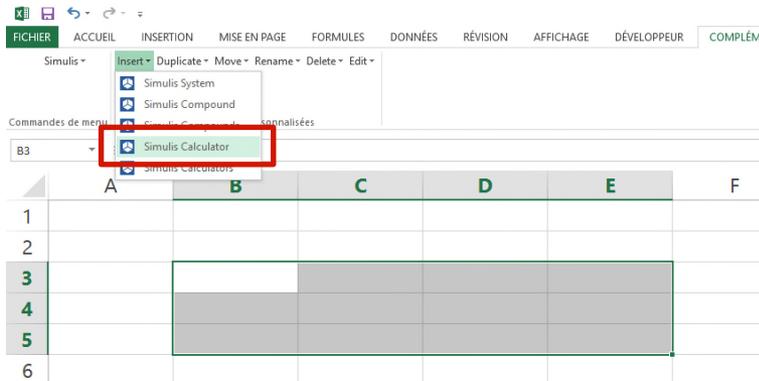
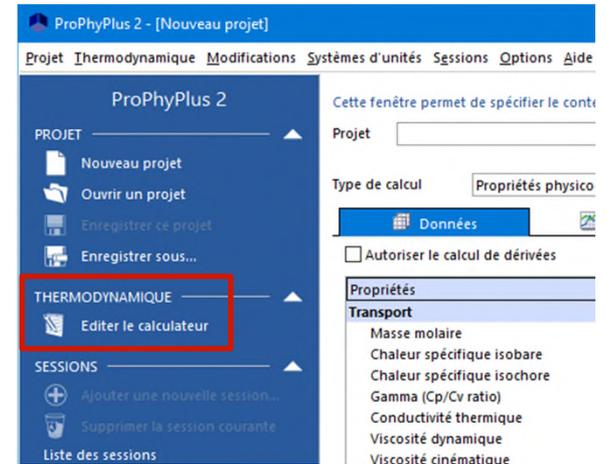
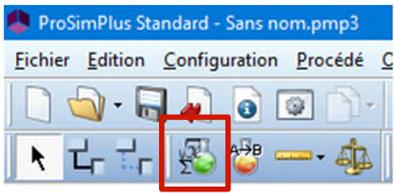
2. Pour les modèles Wilson compatible Dechema, NRTL, NRTL ProSim, UNIQUAC et UNIQUAC ProSim, il est possible d'estimer les PIB à partir de modèles prédictifs si leurs paramètres sont disponibles (décompositions en groupements de type UNIFAC ou fichiers COSMO-SAC-dsp ou paramètres NRTL-SAC).



Ce document présente cette seconde possibilité pour représenter les équilibres liquide-vapeur à pression atmosphérique du système quaternaire isopropanol, dichlorométhane, tétrahydrofurane, chlorure de méthyle

# Etape 1 : Définir la thermodynamique

- Suivant votre logiciel ajouter, éditer ou ouvrir un calculator



Se référer au cas 1 du « Démarrer avec » de votre logiciel pour réaliser les opérations de l'étape 1 de ce document

# Etape 1 : Définir la thermodynamique

- Sélectionner les constituants isopropanol, dichlorométhane, tétrahydrofurane et chlorure de méthyle à partir de la dernière base de données en date

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS
  MODELE
  PARAMETRES

#	Nom IUPAC	CAS Registry Number®
4	METHYL CHLORIDE	74-87-3

Rechercher

Nom ou synonyme

Nom exact

CAS Registry Number®

Formule chimique

ID spécifique

Avancé

Effacer les résultats précédents

Tous les serveurs
 

- Simulis® SQLite Databases
- Common databases
  - Standard 2019
  - User databases

**Nom : METHYL CHLORIDE**  
 Emplacement : Standard 2019 (Simulis® SQLite Databases/Common databases)  
 CAS Registry Number® : 74-87-3  
 ID spécifique : {4806BE8A-10E6-4F93-A32D-2A1B88BE8D5A}

Résultats de recherche    Favoris    Historique

#	Nom IUPAC (ou nom d...)	Formule chimi...	CAS Regi...	Masse molaire ...
4	METHYL CHLORIDE	CH3Cl	74-87-3	50,4875

Constituants sélectionnés :

Nom
ISOPROPANOL
DICHLOROMETHANE
TETRAHYDROFURAN
METHYL CHLORIDE

Sélectionner les constituants...



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 inexactes.

Fermer

# Etape 1 : Définir la thermodynamique

- Sélectionner le profil thermodynamique NRTL
  - Noter que l'onglet « Binaires » n'apparaît que lorsque le modèle thermodynamique sélectionné nécessite des PIB et qu'au moins 2 constituants sont présents

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | **MODELE** | PARAMETRES

#	Nom IUPAC	CAS Registry Number®
1	ISOPROPANOL	67-63-0
2	DICHLOROMETHANE	75-09-2
3	TETRAHYDROFURAN	109-99-9
4	METHYL CHLORIDE	74-87-3

CONSTITUANTS

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | **MODELE** | BINAIRES | PARAMETRES

Nom: NRTL

Catégorie: Tous les profils

**Profil: NRTL**

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

Equation d'état: Gaz parfait

Fonction alpha: Non défini

Règles de mélange: Non défini

Modèle des coefficients d'activité: NRTL

Fugacité liquide pur état standard: Pression de vapeur

Volume molaire liquide: Mélange idéal

Propriétés de transport: Méthodes classiques

Calcul enthalpique:  $H^*=0$ , gaz parfait, 25°C, 1 atm

Modèle thermodynamique utilisateur: Aucun

Index du modèle: 1

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 productif...

Modèle en espèces vraies

Paramètres du modèle réactif...

OK Annuler

# Etape 2 : Choisir les modèles prédictifs

- Utiliser le service « Editeur tableau » pour visualiser les modèles prédictifs pouvant être utilisés

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | BINAIRES | PARAMETRES

#	Nom IUPAC	CAS Registry Number®
1	ISOPROPANOL	67-63-0
2	DICHLOROMETHANE	75-09-2
3	TETRAHYDROFURAN	109-99-9
4	METHYL CHLORIDE	74-87-3

CONSTITUANTS

FICHER

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

PACKAGE

SERVICES

- Sélectionner les constituants...
- Editer ce constituant...
- Ajouter un nouveau constituant
- Supprimer tous les constituants
- Cloner ce constituant
- Mettre à jour les constituants
- Supprimer la sélection

SERVICES

- Créer un pseudo-constituant...
- Propriétés dépendantes de T...
- Editeur tableau**
- Comparer à l'original
- Comparer les constituants

ORDRE

- Déplacer ce constituant vers le haut

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

# Etape 2 : Choisir les modèles prédictifs

## ■ Analyse des paramètres disponibles

Propriétés	ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE
<b>Identification</b>				
Nom IUPAC				
Nom spécifique	ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE
CAS Registry Number®	67-63-0	75-09-2	109-99-9	74-87-3
Famille chimique	Autres Alcools Al...	Chlorés Aliphatiques C1/C2	Epoxydes	Chlorés Aliphatiques C1/C2
Formule chimique	C3H8O	CH2Cl2	C4H8O	CH3Cl
Smiles	CC(O)C	CICCl	C1COCC1	C[Cl]
Identifiant de jeu				
N° intrinsèque (Spécifique ProSim)	134	53	168	57
Synonymes	1-METHYLETHAN...	FREON 30	BUTYLENE OXIDE	ARTIC
Commentaires sur le constituant				
Fichier Cosmo	Connu	Connu	Connu	Connu
<b>Modèle de contribution de groupe</b>				
<b>Standard</b>				
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund) 1993	[OH(s)] 1 [CH3] 2 ... [CH2Cl2] 1		[c-CH2OCH] 1 [c-CH2] 2	<inconnu>
Décomposition UNIFAC original	[OH] 1 [CH3] 2 [C... [CH2CL2] 1		[THF] 1 [CH2] 3	<inconnu>
Décomposition UNIFAC PSRK	[OH] 1 [CH3] 2 [C... [CH2CL2] 1		[THF] 1 [CH2] 3	<inconnu>
Décomposition UNIFAC LLE	[P2] 1 [CH2Cl2] 1		[CH2] 3 [FCH2O] 1	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (Dortmund)	[OH (S)] 1 [CH3] 2... [CH2CL2] 1		[THF] 1 [CY-CH2] 2	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (Larsen)	[CH3] 2 [CH] 1 [O... [CH2Cl2] 1		[FCH2O] 1 [CH2] 3	<inconnu>
Décomposition PPR 78	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition UNIFAC VTPR	[OH (S)] 1 [CH3] 2... [CH2CL2] 1		[THF] 1 [CY-CH2] 2	[CH3Cl] 1
Décomposition UNIFAC UMRPRU	[OH] 1 [CH3] 2 [C... [CH2CL2] 1		[THF] 1 [CH2] 3	<inconnu>
Décomposition NRTL PR	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>	<inconnu>
Décomposition GC-PPC-SAFT	[OHb](2, 0) 1 [CH... <inconnu>		[-O-](3, 0) 1 [CH2c](1, 0) 4	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (NIST)	[OH (S)] 1 [CH3] 2... [CH2CL2] 1		[THF] 1 [CY-CH2] 2	<inconnu>
<b>Utilisateur</b>				
<b>Atomique</b>				
<b>Changement de phase</b>				
<b>Combustion, sécurité, toxicité</b>				
<b>Phase condensée</b>				
<b>Thermo-chimique</b>				
<b>Interaction, réaction phase gaz</b>				
<b>Propriétés utilisateur</b>				
<b>PPC-SAFT</b>				
<b>NRTL-SAC</b>				
Nombre de segments de type hydrophobique (X)	0,332	0,459	0,235	<inconnu>
Nombre de segments de type hydrophilique (Z)	0,636	0,038	0	<inconnu>
Nombre de segments de type polaire (Y-)	0	0	0,04	<inconnu>
Nombre de segments de type polaire (Y+)	0	0,427	0,32	<inconnu>

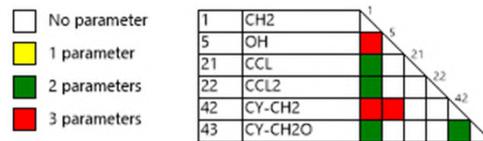
Le modèle COSMO-SAC-dsp peut être utilisé pour tous les binaires

Seul UNIFAC VTPR peut être utilisé pour tous les binaires.  
Tous les autres modèles UNIFACs peuvent être utilisés pour tous les binaires exceptés ceux avec du chlorure de méthyle.

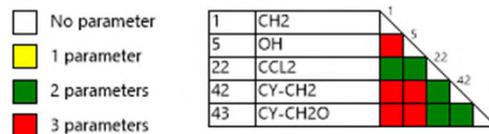
NRTL-SAC peut être utilisé pour tous les binaires exceptés ceux avec du chlorure de méthyle

# Etape 2 : Choisir les modèles prédictifs

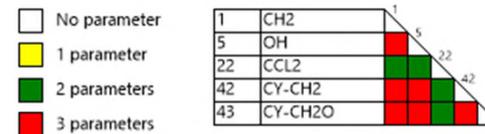
- NTRL-SAC est plus particulièrement adapté pour calculer la solubilité des solides organiques dans un solvant, ce qui n'est pas l'objectif de cet exemple. Ainsi, d'autres modèles doivent être sélectionnés.
- UNIFAC VTPR ne sera pas utilisé car des interactions entre groupes sont manquantes :



UNIFAC modifié (Dortmund) ou UNIFAC modifié (NIST) peuvent être utilisés pour prédire les sous-systèmes du ternaire isopropanol - dichlorométhane - tétrahydrofurane car les interactions entre groupes sont connues :



UNIFAC modifié (Dortmund)



UNIFAC modifié (NIST)

- Par contre, COSMO-SAC-dsp devra être utilisé pour prédire les binaires impliquant le chlorure de méthyle.

# Etape 2 : Choisir les modèles prédictifs

- Les binaires suivants sont reportés comme étant zéotropiques
  - Isopropanol - Dichlorométhane
  - Isopropanol - Tetrahydrofurane
  - Dichlorométhane - Tetrahydrofurane

Gmehling J., Menke J., Krafczyk J., Fischer K., "Azeotropic Data", 2<sup>ème</sup> édition, Wiley-VCH (2004)

- Le modèle UNIFAC modifié (Dortmund) prédit un comportement zéotropique pour deux des trois binaires : Isopropanol - Dichlorométhane et Dichlorométhane - Tetrahydrofurane. Mais il prédit un comportement azéotropique pour le binaire Isopropanol - Tetrahydrofurane. Ainsi il ne peut pas être utilisé pour ce binaire.
- Le modèle UNIFAC modifié (NIST) prédit un comportement zéotropique pour les deux binaires avec l'isopropanol mais un comportement azéotropique pour le binaire Dichlorométhane - Tetrahydrofurane. Il n'est donc pas utilisable pour ce binaire.



Si aucune donnée expérimentale n'est disponible, il est intéressant de comparer les prédictions faites par les différents modèles prédictifs utilisables pour vérifier qu'ils sont cohérents entre eux. Se référer à « Démarrer avec ProPhyPlus®, cas 1 : Principales caractéristiques » pour tracer une courbe d'équilibre liquide-vapeur.

# Etape 2 : Choisir les modèles prédictifs

- Résumé des modèles utilisés pour chaque binaire
  - Tous les binaires avec du chlorure de méthyle : COSMO-SAC-dsp
  - Isopropanol - Dichlorométhane : UNIFAC modifié (Dortmund)
  - Isopropanol - Tétrahydrofurane : UNIFAC modifié (NIST)
  - Dichlorométhane - Tétrahydrofurane : UNIFAC modifié (Dortmund)

# Etape 3 : Prédiction des PIB

- Aller dans l'onglet « Binaires » et cliquer sur « Estimation de binaires »

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODEL | **BINAIRES** | PARAMETRES

Ces paramètres correspondent aux valeurs générales et sont utilisées si l'utilisateur n'a pas fourni de paramètres spécifiques (boutons à droite des options du profil thermodynamique)

Affichage :  Grille  Matrice

Formulation :  $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij0} + C_{ijT}(T - 273.15)$ ,  $a_{ij} = a_{ij0} + a_{ijT}(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHA				
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFUR				
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE				
DICHLOROMETHA	TETRAHYDROFUR				
DICHLOROMETHA	METHYL CHLORIDE				
TETRAHYDROFUR	METHYL CHLORIDE				

Non fourni Fournis Importés Estimés

Commentaires :

**BINAIRES**

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimation de binaires...**
- Enregistrer les binaires...

OPTIONS

Unité

cal/mole

les paramètres seront ignorés

OK Annuler

# Etape 3 : Prédiction des PIB

## Prédiction du 1<sup>er</sup> jeu de PIB

5. Générer

1. Sélectionner le modèle prédictif UNIFAC modifié (Dortmund)

2.  $a_{ij}^0$  est généralement mis à 0,3 pour les équilibres liquide-vapeur (cas de cet exemple) et à 0,2 en cas de démixtion liquide-liquide

3. Si le procédé est globalement isobare, spécifier la pression correspondante (cas de cet exemple). Si le procédé travaille à deux (ou plus) pressions, spécifier les températures de travail correspondantes à ces deux pressions (ou aux deux extrêmes)

4. Sélectionner les binaires à estimer. En gris, ceux qui ne peuvent pas être estimés avec le modèle prédictif sélectionné

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

Cette fenêtre permet d'estimer les paramètres d'interaction binaire depuis un modèle prédictif

Données Binaires

Modèle d'identification UNIFAC modifié (Dortmund)

$a_{ij}^0$  0,3

Estimer les coefficients d'activité à dilution infinie à :

La température de bulle de chaque constituant à la pression 101325 Pa

Températures fixées

Température 1 293,15 K

Température 2 298,15 K

Avertissements 10

BIP à calculer	ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE
ISOPROPANOL		<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
DICHLOROMETHANE			<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
TETRAHYDROFURAN				<input type="checkbox"/>
METHYL CHLORIDE				<input type="checkbox"/>

Tout sélectionner

Ok Annuler

# Etape 3 : Prédiction des PIB

- Prédiction du 1<sup>er</sup> jeu de PIB
  - Visualisation des PIB prédits

Cliquer pour continuer et prédire le 2<sup>ème</sup> jeu de PIB

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

ESTIMATION DES PARAMÈTRES D'INTERACTION BINAIRE

Données Binaires

Cette fenêtre permet d'estimer les paramètres d'interaction binaire depuis un modèle prédictif.

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CjT	CjT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHA	-429,916	1880	0,3	2,21423	-9,33757	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFURA	0	0	0	0	0	0
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
DICHLOROMETHA	TETRAHYDROFURA	-685,591	573,552	0,3	-2,26141	1,94737	0
DICHLOROMETHA	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
TETRAHYDROFURA	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0

Ok Annuler

# Etape 3 : Prédiction des PIB

## ■ Prédiction du 2<sup>ème</sup> jeu de PIB

5. Générer

1. Sélectionner le modèle prédictif UNIFAC modifié (NIST)

2.  $a_{ij}^0$  mis à 0,3

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

Cette fenêtre permet d'estimer les paramètres d'interaction binaire depuis un modèle prédictif.

Données Binaires

Modèle d'identification **UNIFAC modifié (NIST)**

$a_{ij}^0$  0,3

Estimer les coefficients d'activité à dilution infinie à :

La température de bulle de chaque constituant à la pression 101325 Pa

Températures fixées

Température 1 293,15 K

Température 2 298,15 K

Avertissements 10

BIP à calculer	ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE
ISOPROPANOL		<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
DICHLOROMETHANE			<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
TETRAHYDROFURAN				<input type="checkbox"/>
METHYL CHLORIDE				

Tout sélectionner

Ok Annuler

3. Estimation à pression atmosphérique

4. Sélectionner le binaire à estimer

# Etape 3 : Prédiction des PIB

- Prédiction du 2<sup>ème</sup> jeu de PIB
  - Visualisation des PIB prédits

Cliquer pour continuer et prédire le 3<sup>ème</sup> jeu de PIB

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

ESTIMATION DES PARAMÈTRES D'INTERACTION BINAIRE

Données Binaires

Cette fenêtre permet d'estimer les paramètres d'interaction binaire depuis un modèle prédictif.

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHA	429,916	1880	0,3	2,21423	0,33757	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFURA	666,054	-84,6405	0,3	-4,96081	2,25479	0
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
DICHLOROMETHA	TETRAHYDROFURA	-685,591	573,552	0,3	-2,26141	1,94737	0
DICHLOROMETHA	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
TETRAHYDROFURA	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0

Ok Annuler

# Etape 3 : Prédiction des PIB

## ■ Prédiction du 3<sup>ème</sup> jeu de PIB

5. Générer

1. Sélectionner le modèle prédictif  
COSMO-SAC-dsp

2.  $a_{ij}^0$  mis à 0,3

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

Cette fenêtre permet d'estimer les paramètres d'interaction binaire depuis un modèle prédictif.

Données Binaires

Modèle d'identification COSMO-SAC-dsp

$a_{ij}^0$  0,3

Estimer les coefficients d'activité à dilution infinie à :

La température de bulle de chaque constituant à la pression 101325 Pa

Températures fixées

Température 1 293,15 K

Température 2 298,15 K

Avertissements 10

BIP à calculer	ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE
ISOPROPANOL		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
DICHLOROMETHANE			<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
TETRAHYDROFURAN				<input checked="" type="checkbox"/>
METHYL CHLORIDE				

Tout sélectionner

Ok Annuler

3. Estimation à pression atmosphérique

4. Sélectionner les binaires à estimer

# Etape 3 : Prédiction des PIB

- Prédiction du 3<sup>ème</sup> jeu de PIB
  - Visualisation des PIB prédits

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

ESTIMATION DES PARAMÈTRES D'INTÉRACTION BINAIRE

ACTIONS

- Générer
- Enregistrer les binaires

Cette fenêtre permet d'estimer les paramètres d'interaction binaire depuis un modèle prédictif.

Données Binaires

Constituant	Constituant	Cij0	Cj0	aij0	CjT	CjT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHA	429,816	1880	0,3	2,21423	0,33757	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFURA	666,054	-84,6405	0,3	-4,96081	2,25479	0
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	-299,995	1974,79	0,3	-2,00594	-0,218641	0
DICHLOROMETHA	TETRAHYDROFURA	-685,591	573,552	0,3	-2,26141	1,94737	0
DICHLOROMETHA	METHYL CHLORIDE	-331,795	256,504	0,3	-1,20235	2,29365	0
TETRAHYDROFURA	METHYL CHLORIDE	-5,58433	-169,151	0,3	-2,59393	3,09703	0

Ok Annuler

Cliquer pour valider

# Etape 3 : Prédiction des PIB

- Le model est prêt à être utilisé

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | **BINAIRES** | PARAMETRES

Ces paramètres correspondent aux valeurs générales et sont utilisées si l'utilisateur n'a pas fourni de paramètres spécifiques (boutons à droite des options du profil thermodynamique)

Affichage :  Grille  Matrice

Formulation :  $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij}0 + C_{ij}T*(T - 273.15)$ ,  $a_{ij} = a_{ij}0 + a_{ij}T*(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	Cj0	aij0	CijT	CjT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHA	-429,9163092	1879,9956505	0,3	2,2142341885	-9,337568368	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFURA	666,05388238	-84,64048228	0,3	-4,960814644	2,2547891770	0
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	-299,9953334	1974,7938063	0,3	-2,005937041	-0,218641268	0
DICHLOROMETHA	TETRAHYDROFURA	-685,5905644	573,55211238	0,3	-2,261412793	1,9473662408	0
DICHLOROMETHA	METHYL CHLORIDE	-331,7953045	256,50426794	0,3	-1,202354559	2,2936540960	0
TETRAHYDROFURA	METHYL CHLORIDE	-5,584329769	-169,1513138	0,3	-2,593929905	3,0970325231	0

Non fourni Fournis Importés Estimés

Commentaires :

BINAIRES

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimation de binaires...
- Enregistrer les binaires...

OPTIONS

Unité

cal/mole

les paramètres seront ignorés

OK Annuler

Il est intéressant de vérifier que le modèle avec les PIB prédits donne pour chaque binaire le même comportement que le modèle prédictif utilisé pour eux. Se référer à « Démarrer avec ProPhyPlus®, cas 1 : Principales caractéristiques » pour tracer une courbe d'équilibre liquide-vapeur.

# Etape 3 : Prédiction des PIB

- Il est possible de visualiser les PIB sous la forme d'une matrice au lieu d'une grille.
  - Placer la souris sur le binaire voulu ou cliquer sur lui pour voir les valeurs des PIB

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | **BINAIRES** | PARAMETRES

Ces paramètres correspondent aux valeurs générales et sont utilisées si l'utilisateur n'a pas fourni de paramètres spécifiques (boutons à droite des options du profil thermodynamique)

Affichage :  Grille  **Matrice**

Formulation :  $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij}0 + C_{ji}T(T - 273.15)$ ,  $a_{ij} = a_{ij}0 + a_{ij}T(T - 273.15)$

Zoom : 100 %

Non fournis  
 Fournis  
 Importés  
 Estimés

	1	2	3	4
1	ISOPROPANOL			
2	DICHLOROMET			
3	TETRAHYDROF			
4	METHYL CHLO			

Valeurs des binaires

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	99533342362	1974,7938063	0,3	-2,005937041	-0,218641268	0

Non fournis Fournis Importés Estimés OK Annuler

Binaire		Cij0	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	-299,995	1974,79	0,300000	-2,00594	-0,218641	0,00000

Commentaires :

OK Annuler

© 2021 ProSim S.A. - All rights reserved.

# Etape 4 : Sauvegarde des binaires

- Il est possible d'enregistrer les PIB dans votre base de données personnelle de PIB pour les réutiliser dans un autre projet. Plusieurs bases de données utilisateurs peuvent être créées et gérées.

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | BINAIRES | PARAMETRES

Ces paramètres correspondent aux valeurs générales et sont utilisées si l'utilisateur n'a pas fourni de paramètres spécifiques (boutons à droite des options du profil thermodynamique)

Affichage :  Grille  Matrice

Formulation :  $g_{ij} - g_{ij} = C_{ij0} + C_{ijT}(T - 273.15)$ ,  $a_{ij} = a_{ij0} + a_{ijT}(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	CijT	aij0	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	-429,9163092	1879,9956505	0,3	2,214234
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFURAN	666,05388238	-84,64048228	0,3	-4,960814
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	-299,9953334	1974,7938063	0,3	-2,005937
DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	-685,5905644	573,55211238	0,3	-2,261412
DICHLOROMETHANE	METHYL CHLORIDE	-331,7953045	256,50426794	0,3	-1,202354
TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE	-5,584329769	-169,1513138	0,3	-2,593929

Non fourni Fournis Importés Estimés

Commentaires :

**BINAIRES**

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimation des binaires...
- Enregistrer les binaires...**

OPTIONS

Unité

cal/mole

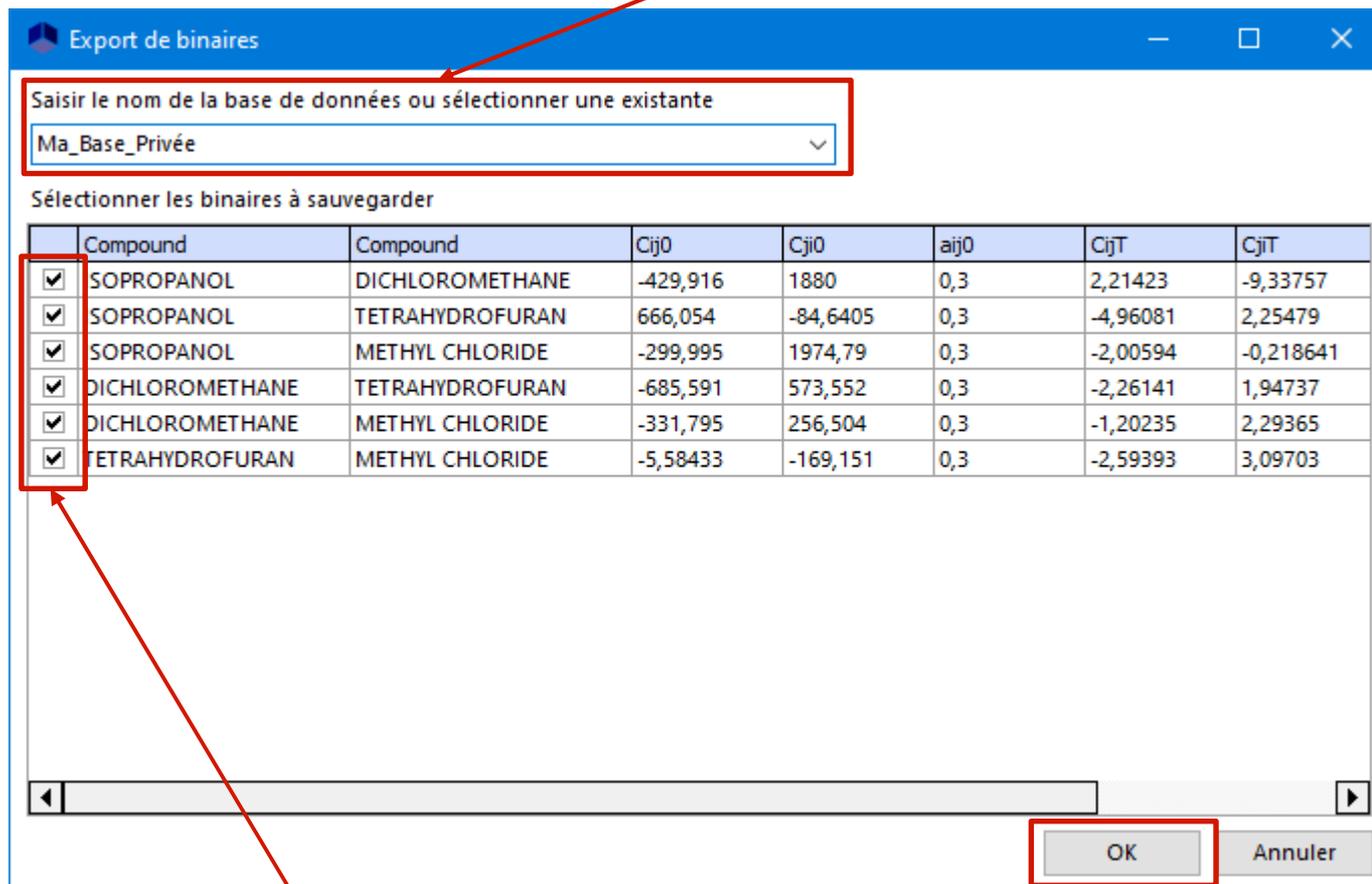
les paramètres seront ignorés

1. "Enregistrer les binaires"

Les bases de données utilisateurs sont stockées dans :  
 C:\Utilisateurs\[utilisateur courant]\AppData\Roaming\Prosim\Stardust\Binaries\Databases

# Etape 4 : Sauvegarde des binaires

2. Entrer un nom pour créer une nouvelle base de données utilisateur ou sélectionner une base de données utilisateur existante. Dans le cas d'un base de données utilisateur existante vous pouvez :
- \* Ajouter les PIB sélectionnés à la base de données utilisateur
  - \* Remplacer les valeurs de la base de données utilisateur par celles sélectionnées



3. Sélectionner les binaires à sauvegarder

4. "OK" pour valider

# Etape 4 : Sauvegarde des binaires

- Pour effectuer une recherche dans votre base de données privée, sélectionner cette base de données dans la fenêtre « Recherche de binaires »

Cette fenêtre permet de sélectionner les binaires à prendre en compte lors des calculs thermodynamiques.

Résultats de recherche **Binaires actualisés**

Base de données	Constituant	Constituant	Cj0	Cj0	aj0	Cj
-----------------	-------------	-------------	-----	-----	-----	----

Se référer au cas 1 du « Démarrer avec » de votre logiciel pour savoir comment importer des PIB à partir d'une base de données

Ok Annuler



### 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