

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 »

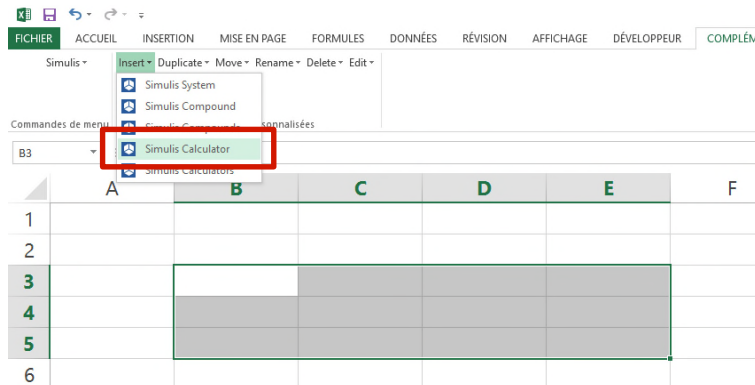
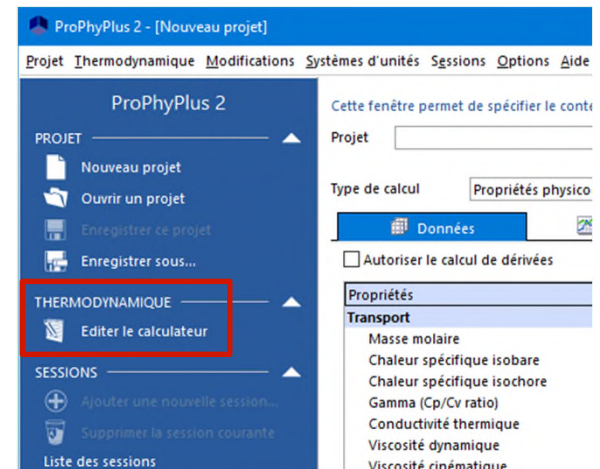
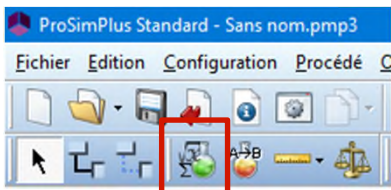
2. Pour les modèles Wilson compatible Dechema, NRTL, NRTL ProSim, UNIQUAC et UNIQUAC ProSim, il est possible d'estimer les PIB à partir de modèles prédictifs si leurs paramètres sont disponibles (décompositions en groupements de type UNIFAC ou fichiers COSMO-SAC-dsp ou paramètres NRTL-SAC).



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

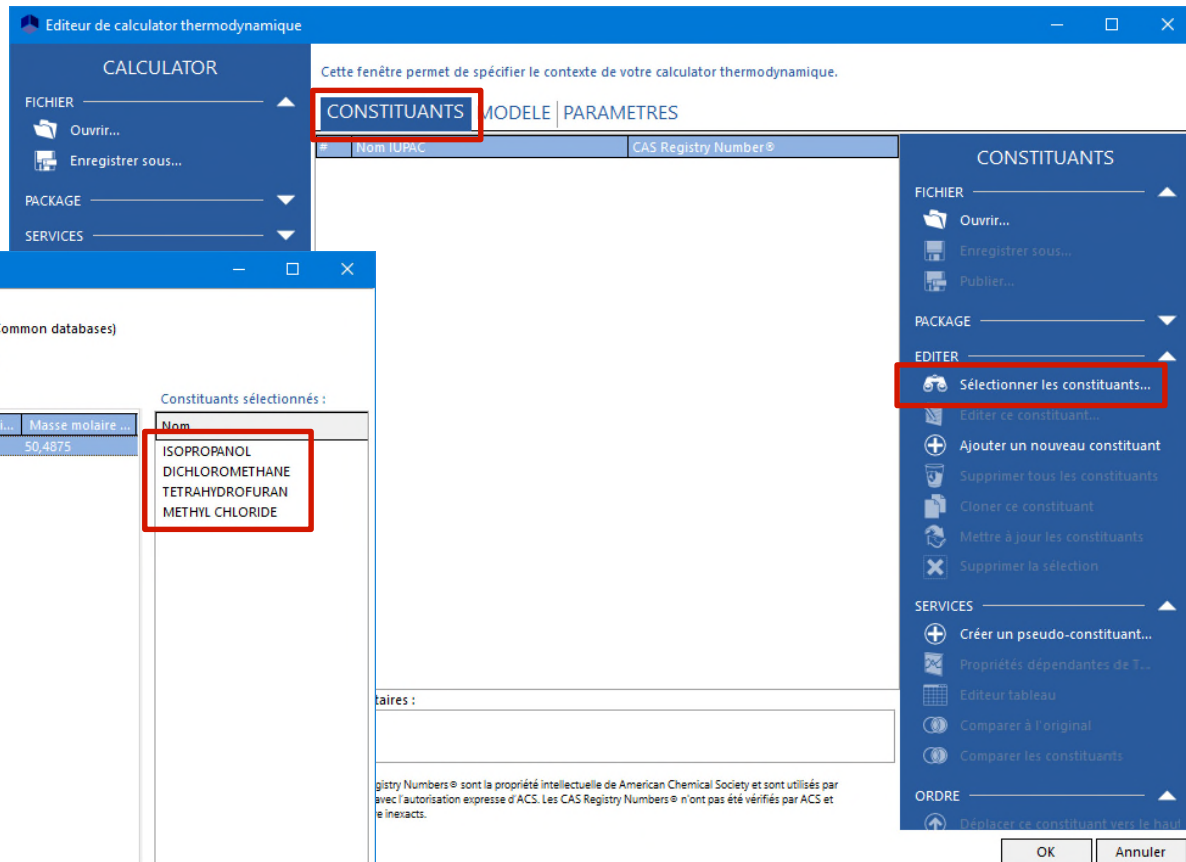
- Suivant votre logiciel ajouter, éditer ou ouvrir un calculator



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



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

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | **MODELE** | **BINAIRES** | **PARAMETRES**

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

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.

CONSTITUANTS

FICHER

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

PACKAGE

SERVICES

MODIFICATIONS

CONFIGURATION

Nom

Commentaires

Type de calculator

Natif

Montrer le mode expert

Editeur

- 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

OK Annuler

Etape 2 : Choisir les modèles prédictifs

■ Analyse des paramètres disponibles

Propriétés	ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE
Identification				
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
Modèle de contribution de groupe				
Standard				
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 [CH2d](1, 0) 4	<inconnu>
Décomposition UNIFAC modifié (NIST)	[OH (S)] 1 [CH3] 2...	[CH2CL2] 1	[THF] 1 [CY-CH2] 2	<inconnu>
Utilisateur				
Atomique				
Changement de phase				
Combustion, sécurité, toxicité				
Phase condensée				
Thermo-chimique				
Interaction, réaction phase gaz				
Propriétés utilisateur				
PPC-SAFT				
NRTL-SAC				
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>

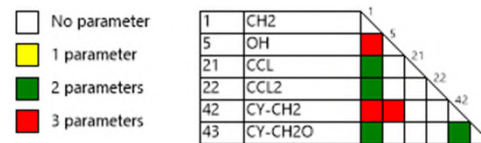
Le modèle COSMO-SAC-dsp peut être utilisé pour tous les binaires

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.

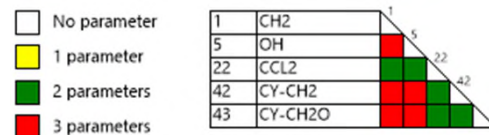
NRTL-SAC peut être utilisé pour tous les binaires exceptés ceux avec du chlorure de méthyle

Etape 2 : Choisir les modèles prédictifs

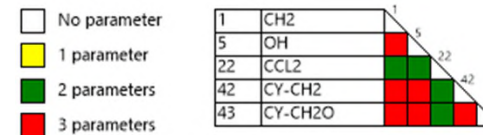
- NTRL-SAC est plus particulièrement adapté pour calculer la solubilité des solides organiques dans un solvant, ce qui n'est pas l'objectif de cet exemple. Ainsi, d'autres modèles doivent être sélectionnés.
- UNIFAC VTPR ne sera pas utilisé car des interactions entre groupes sont manquantes :



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^{ème} 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 : $g_{ij} - g_{ij}^0 = C_{ij}^0 + C_{ij}^1(T - 273.15)$, $a_{ij} = a_{ij}^0 + a_{ij}^1(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	Cij0	Cji0	aij0	CijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE				
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFUR				
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE				
DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFUR				
DICHLOROMETHANE	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^{er} 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				

☒ Tout sélectionner

Ok Annuler

Etape 3 : Prédiction des PIB

- Prédiction du 1^{er} jeu de PIB
 - Visualisation des PIB prédits

Cliquer pour continuer et prédire le 2^{ème} jeu de PIB

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

ESTIMATION DES PARAMÈTRES D'INTERACTION 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	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	-429,916	1880	0,3	2,21423	-9,33757	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFUR	0	0	0	0	0	0
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFUR	-685,591	573,552	0,3	-2,26141	1,94737	0
DICHLOROMETHANE	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
TETRAHYDROFUR	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0

Ok Annuler

Etape 3 : Prédiction des PIB

■ Prédiction du 2^{ème} 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^{ème} jeu de PIB
 - Visualisation des PIB prédits

Cliquer pour continuer et prédire le 3^{ème} jeu de PIB

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

ESTIMATION DES PARAMÈTRES D'INTERACTION 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	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	429,916	1880	0,3	2,21423	0,33757	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFUR	666,054	-84,6405	0,3	-4,96081	2,25479	0
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFUR	-685,591	573,552	0,3	-2,26141	1,94737	0
DICHLOROMETHANE	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
TETRAHYDROFUR	METHYL CHLORIDE	0	0	0	0	0	0

Ok Annuler

Etape 3 : Prédiction des PIB

■ Prédiction du 3^{ème} 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^{ème} jeu de PIB
 - Visualisation des PIB prédits

Estimation des paramètres d'interaction binaire (BIP)

ESTIMATION DES PARAMÈTRES D'INTERACTION 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	Cij0	aij0	CijT	CijT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	429,816	1880	0,3	2,21423	0,33757	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFUR	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
DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFUR	-685,591	573,552	0,3	-2,26141	1,94737	0
DICHLOROMETHANE	METHYL CHLORIDE	-331,795	256,504	0,3	-1,20235	2,29365	0
TETRAHYDROFUR	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.

CALCULATOR

FICHIER

Ouvrir...

Enregistrer sous...

PACKAGE

SERVICES

MODIFICATIONS

CONFIGURATION

Nom

Commentaires

Type de calculator

Natif

☐ Montrer le mode expert

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	Cji0	aij0	CijT	CjiT	aijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	-429,9163092	1879,9956505	0,3	2,2142341885	-9,337568368	0
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFUR	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
DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFUR	-685,5905644	573,55211238	0,3	-2,261412793	1,9473662408	0
DICHLOROMETHANE	METHYL CHLORIDE	-331,7953045	256,50426794	0,3	-1,202354559	2,2936540960	0
TETRAHYDROFUR	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 : $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij}0 + C_{ji}T(T - 273.15)$, $a_{ij} = a_{ij}0 + a_{ji}T(T - 273.15)$

Zoom: 100 %

☐ Non fourni
☒ Fournis
☐ Importés
☐ Estimés

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

BINAIRES

ACTIONS

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

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 fourni 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 calculateur thermodynamique

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de votre calculateur 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	Cij0	aij0	CijT
ISOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	-429,9163092	1879,9956505	0,3	2,214234
ISOPROPANOL	TETRAHYDROFUR	666,05388238	-84,64048228	0,3	-4,960814
ISOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	-299,9953334	1974,7938063	0,3	-2,005937
DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFUR	-685,5905644	573,55211238	0,3	-2,261412
DICHLOROMETHANE	METHYL CHLORIDE	-331,7953045	256,50426794	0,3	-1,202354
TETRAHYDROFUR	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'une 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

Export de binaires

Saisir le nom de la base de données ou sélectionner une existante

Ma_Base_Privée

Sélectionner les binaires à sauvegarder

	Compound	Compound	Cij0	Cji0	aij0	CijT	CjiT
<input checked="" type="checkbox"/>	SOPROPANOL	DICHLOROMETHANE	-429,916	1880	0,3	2,21423	-9,33757
<input checked="" type="checkbox"/>	SOPROPANOL	TETRAHYDROFURAN	666,054	-84,6405	0,3	-4,96081	2,25479
<input checked="" type="checkbox"/>	SOPROPANOL	METHYL CHLORIDE	-299,995	1974,79	0,3	-2,00594	-0,218641
<input checked="" type="checkbox"/>	DICHLOROMETHANE	TETRAHYDROFURAN	-685,591	573,552	0,3	-2,26141	1,94737
<input checked="" type="checkbox"/>	DICHLOROMETHANE	METHYL CHLORIDE	-331,795	256,504	0,3	-1,20235	2,29365
<input checked="" type="checkbox"/>	TETRAHYDROFURAN	METHYL CHLORIDE	-5,58433	-169,151	0,3	-2,59393	3,09703

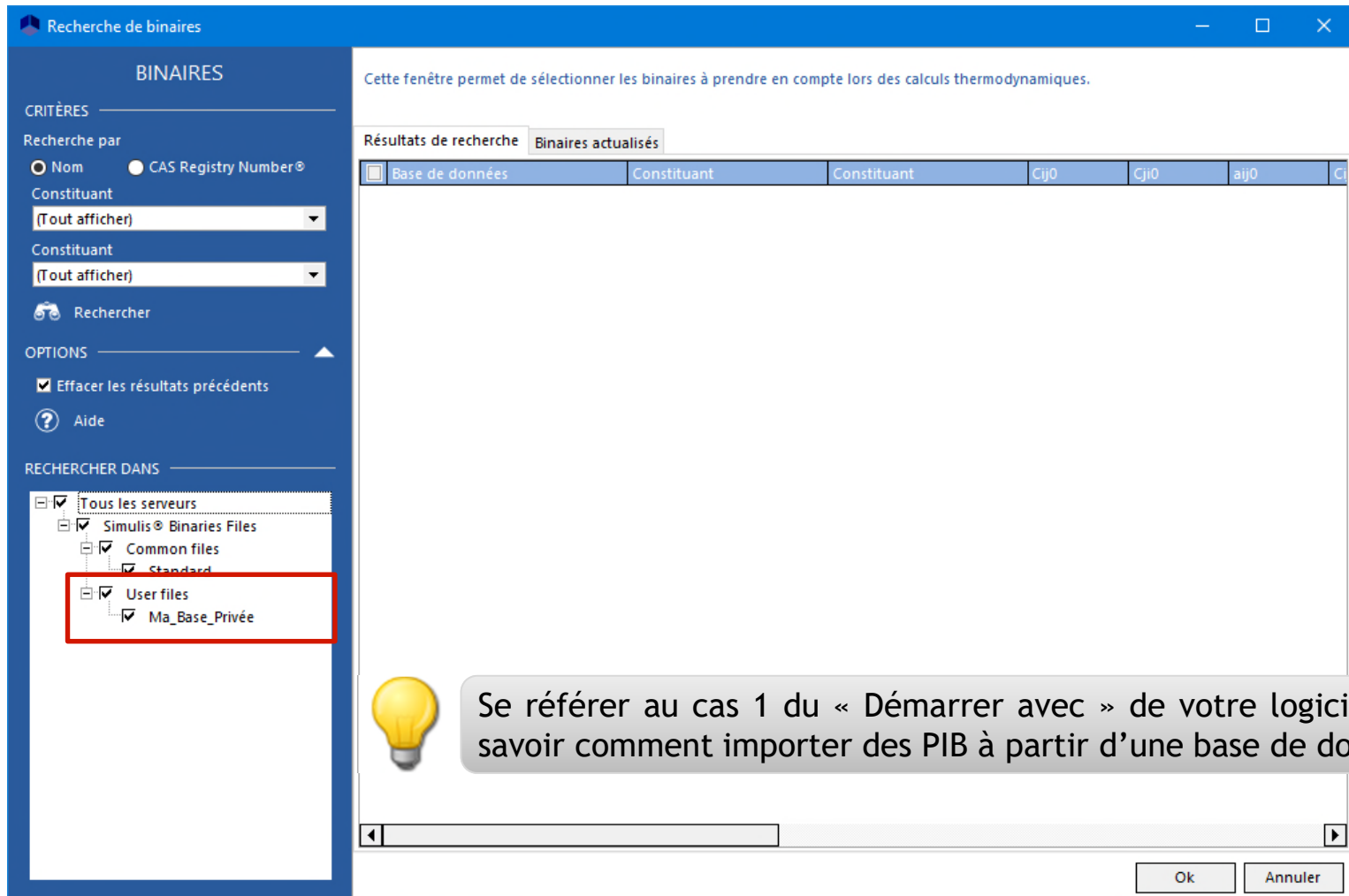
OK Annuler

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 »



**ProSim SA**

51, rue Ampère
Immeuble Stratège A
F-31670 Labège
France

☎: +33 (0) 5 62 88 24 30



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