

Démarrer avec Simulis® Thermodynamics

Cas 14 : Définition et calcul de propriétés d'un mélange
polymère/solvant

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency



ProSim

Introduction

Un polymère se différencie d'un constituant classique car :




- Ses propriétés dépendent de la taille de sa chaîne (caractérisée par ses masses molaires moyennes en nombre et en poids),
- Ses propriétés dépendent des unités de répétition (segments) qui le composent,
- Il ne possède pas toutes les propriétés d'un constituant classique (pas de point critique, pas de pression de vapeur saturante...),
- Les méthodes prédictives pour le calcul des propriétés de corps pur applicables aux autres constituants ne lui sont pas adaptées.

De plus, sa grande masse molaire induit un comportement singulier des mélanges qui le contiennent. Par exemple, la phase vapeur de ce type de mélange en équilibre liquide-vapeur ne contiendra jamais de polymère.

En conséquence, traiter un mélange contenant des polymères nécessite une approche particulière dans Simulis® Thermodynamics. Ce document présente de manière détaillée les différentes étapes à suivre pour effectuer des calculs sur ce type de mélanges.

Introduction

Les étapes décrites sont les suivantes :

-  Étape 1 : Ajout d'un nouveau constituant polymère
(Quelles données sont nécessaires ? Comment les renseigner ?)
-  Étape 2 : Calcul des propriétés d'un polymère pur
(Quelles propriétés sont calculables ? Comment les calculer ?)
-  Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant
(Quels modèles utiliser ? Comment faire ces calculs ?)

L'exemple présenté s'appuie sur le mélange suivant :

Acétone / poly(Styrène5%molare-Butadiène95%molare) de masse molaire moyenne en poids de 300 kg/mol et de masse molaire moyenne en nombre de 40 kg/mol, nommé SBR par la suite

Avant d'aborder ce chapitre, il est fortement recommandé de consulter :

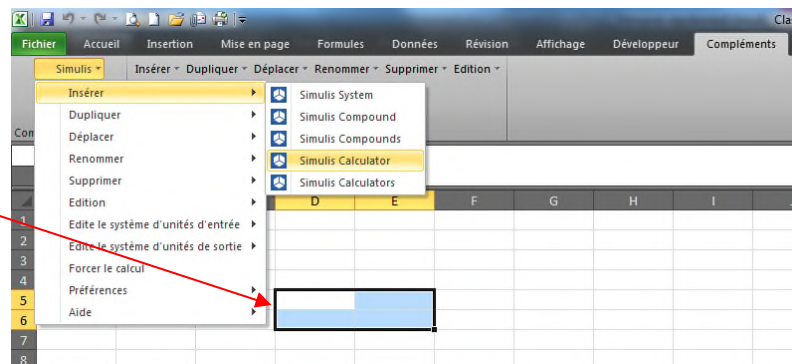
- « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1 » qui couvre notamment les procédures de sélection de constituants et la définition du profil thermodynamique,
- « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 4 » qui explique en partie comment calculer des propriétés thermodynamiques de corps purs et de mélanges dans Simulis Thermodynamics.

Étape 1 : Ajout d'un nouveau constituant polymère

ACCÉDEZ À L'ÉDITEUR DE CALCULATOR THERMODYNAMIQUE :

- Si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans Excel :

Créez l'objet « Calculator » dans votre feuille Excel, puis cliquez sur « Edition »



- Si vous utilisez Simulis Thermodynamics dans un logiciel de la suite ProSim (ProSimPlus, BatchReactor, BatchColumn etc...) :

Cliquez sur l'icône permettant d'accéder à Simulis Thermodynamics:

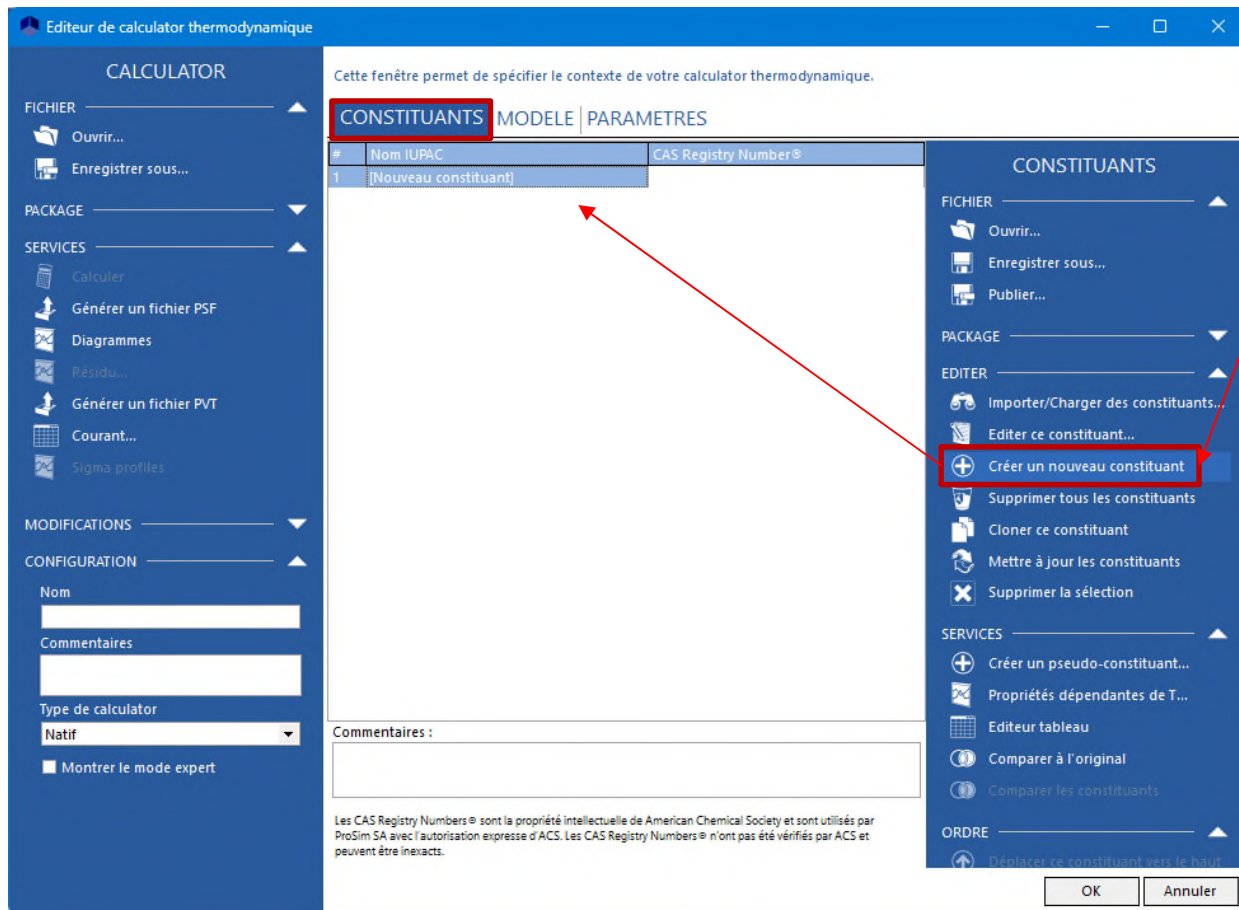


ou



Simulis Thermodynamics est un « composant logiciel », il peut donc être intégré dans différents environnements : logiciels ProSim, Excel, Matlab, ou autres...

Étape 1 : Ajout d'un nouveau constituant polymère

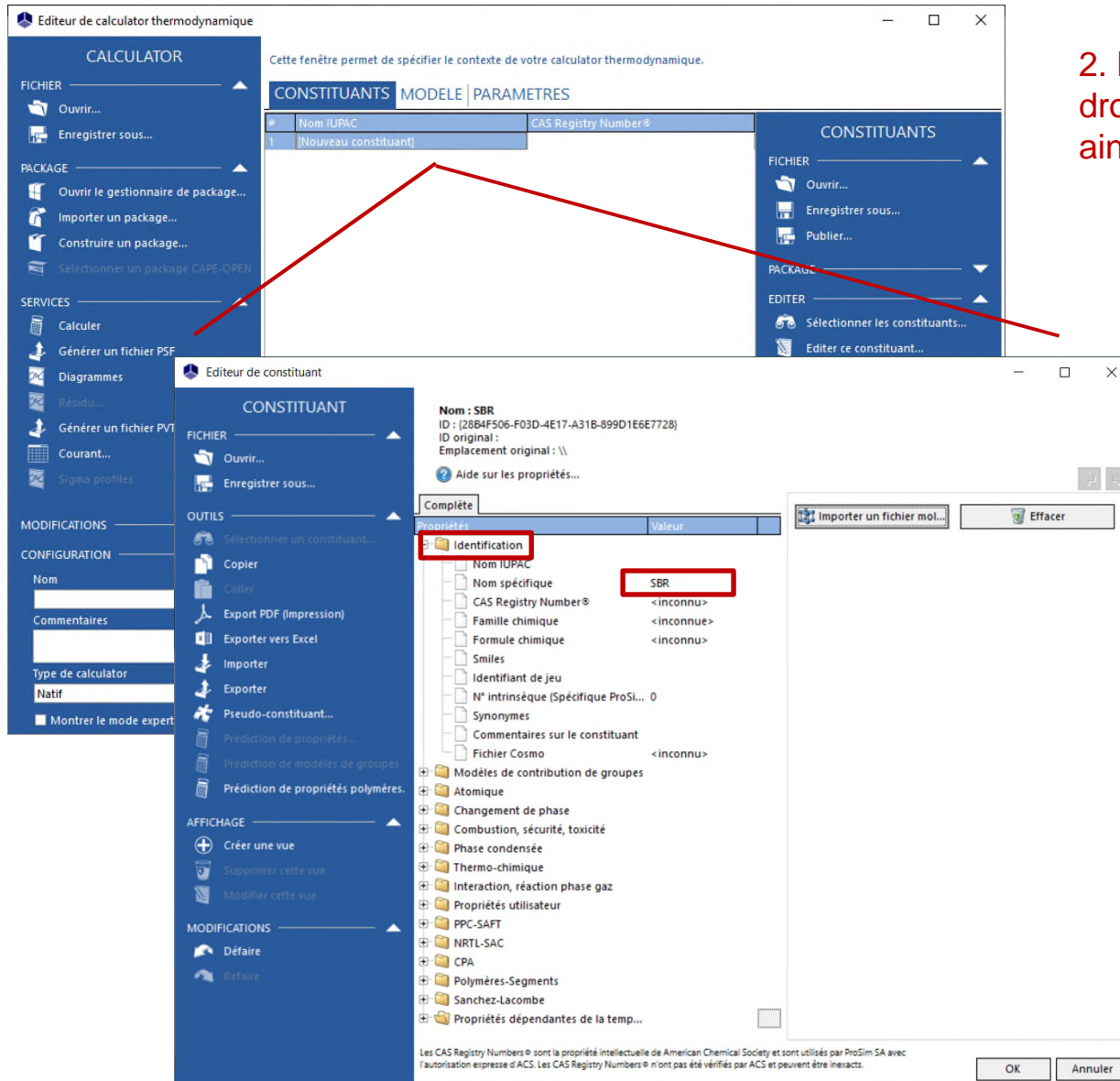


1. Dans l'onglet
« CONSTITUANTS » :
Cliquez sur « Créer un nouveau
constituant »



Pour plus de détails sur l'ajout d'un nouveau constituant,
vous pouvez consulter :
« Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas 9 »

Étape 1 : Ajout d'un nouveau constituant polymère



2. Double-cliquez ou faites un clic droit sur le [Nouveau constituant] ainsi ajouté afin de le définir

3. Dans le dossier « Identification » : Nommez le polymère (ici « SBR » pour Styrène-Butadiène-Rubber)

Étape 1 : Ajout d'un nouveau constituant polymère

Afin de pouvoir :

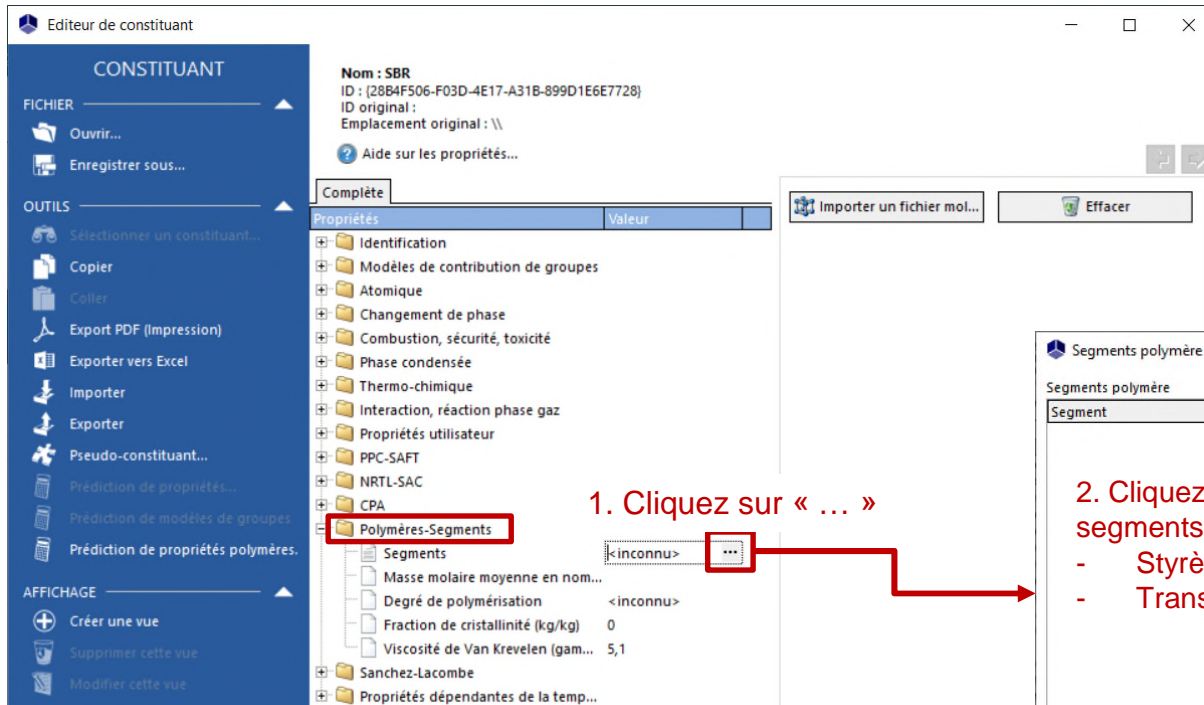
- Prédire des propriétés de polymère pur,
- Effectuer des calculs de propriétés thermodynamiques ou de transport de mélanges contenant des polymères,

les données suivantes doivent nécessairement être renseignées :

- Les segments et la fraction molaire des segments (unités de répétition) présents dans le polymère,
- La masse molaire moyenne en nombre du polymère (M_n),
- La masse molaire moyenne en poids du polymère (M_w).

Les diapositives suivantes expliquent comment renseigner ces données pour le nouveau constituant « SBR » ajouté

Étape 1 : Ajout d'un nouveau constituant polymère



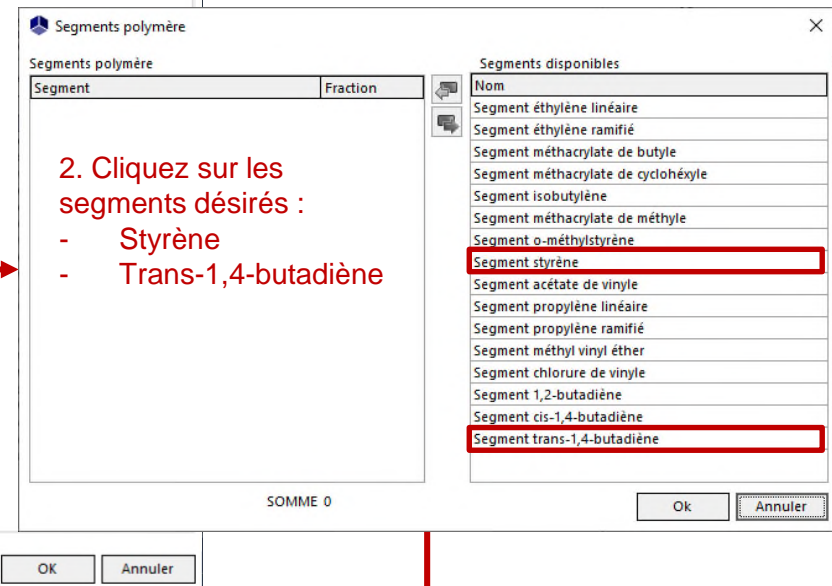
Dans le dossier « Polymères - Segments » du constituant :

I. Renseignez les segments présents dans le polymère

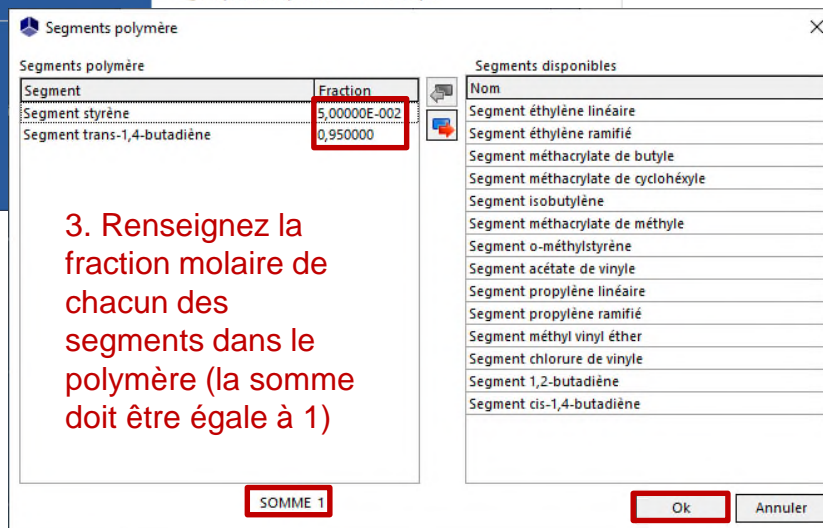
1. Cliquez sur « ... »

2. Cliquez sur les segments désirés :

- Styène
- Trans-1,4-butadiène



3. Renseignez la fraction molaire de chacun des segments dans le polymère (la somme doit être égale à 1)

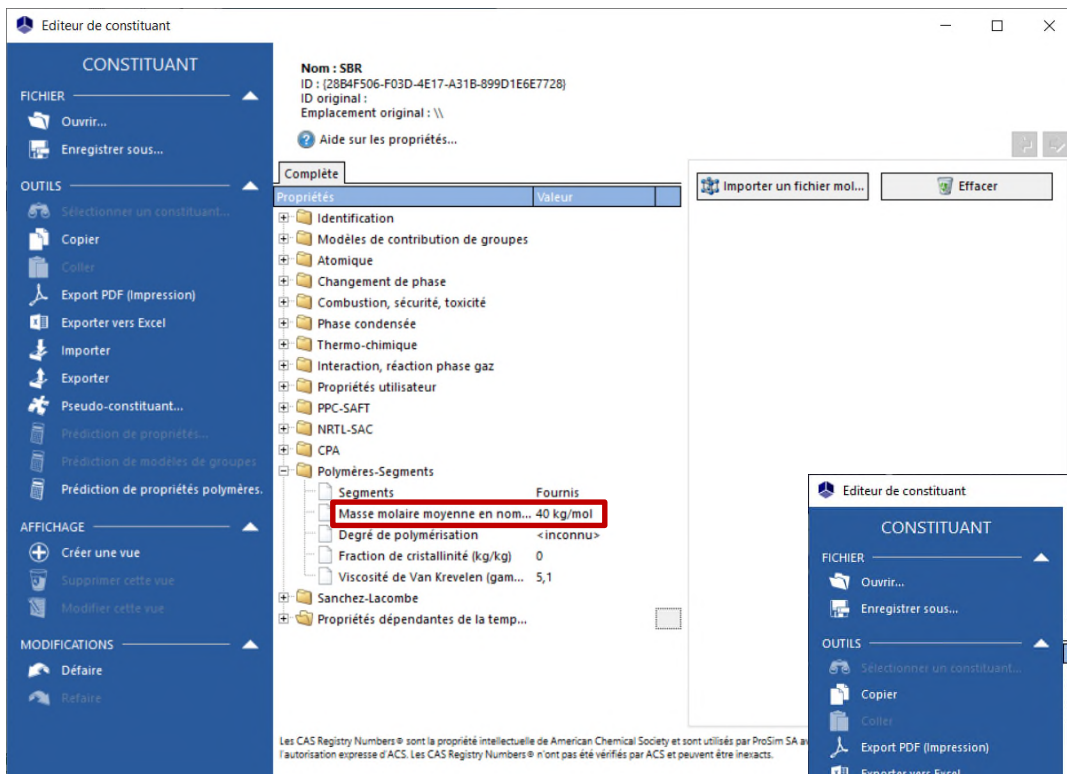


4. Cliquez sur OK

Étape 1 : Ajout d'un nouveau constituant polymère

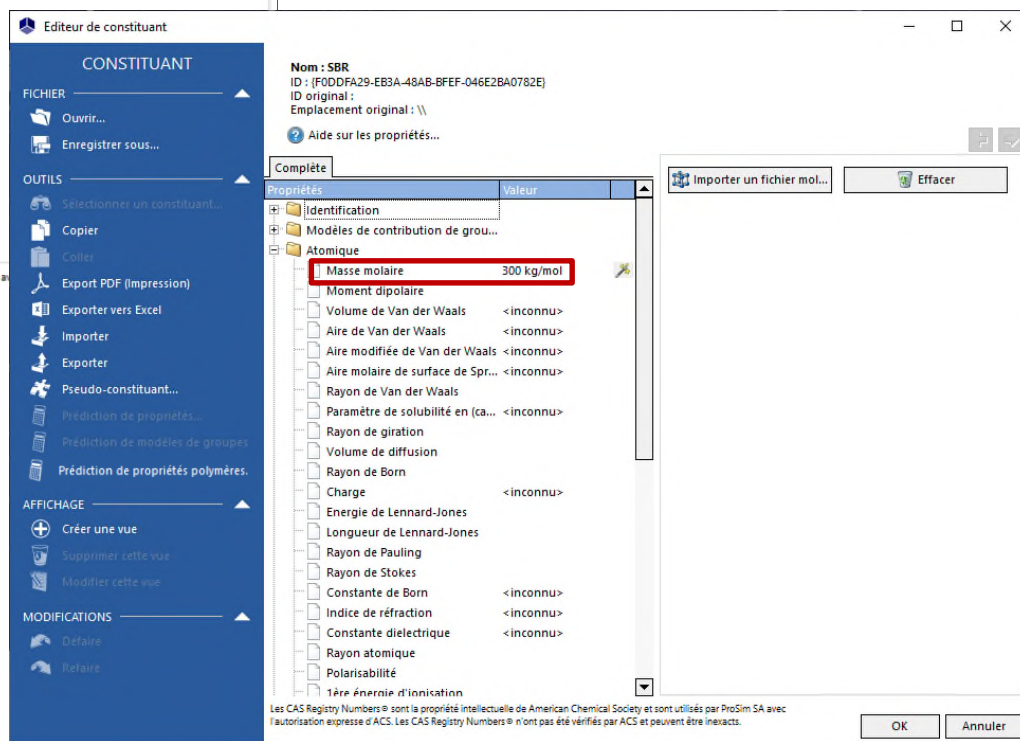
Dans le dossier « Polymères - Segments » :

II. Renseignez la masse molaire moyenne en nombre du polymère



Dans le dossier « Atomique » :

III. Renseignez la masse molaire moyenne en poids du polymère



Étape 2 : Calcul des propriétés d'un polymère pur

Les propriétés ne dépendant pas de la température ainsi que les corrélations des propriétés dépendantes de la température d'un polymère pur peuvent être soit :

- Directement renseignées par l'utilisateur
- Prédites à partir des données renseignées à l'étape 1

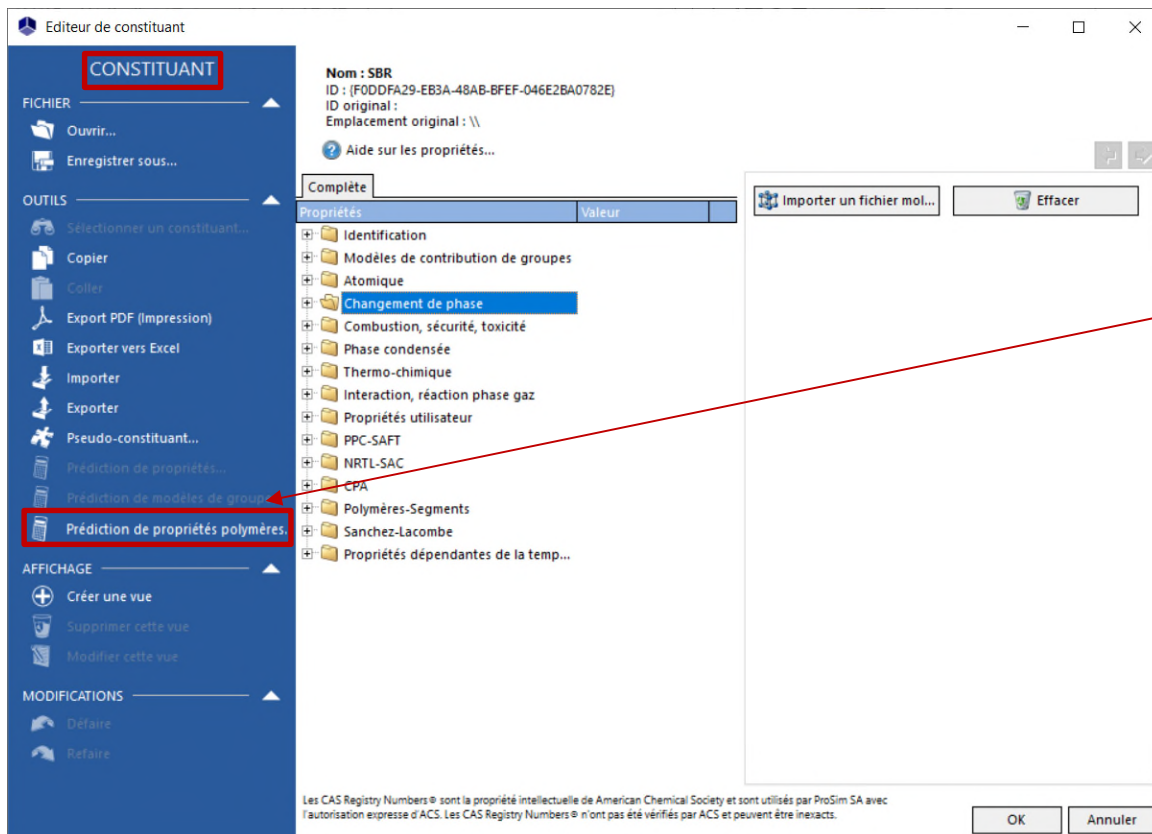
Les **propriétés d'intérêt ne dépendant pas de la température** pour un polymère sont :

- La température de transition vitreuse (dossier « Changement de phase »)
- La température normale de fusion (dossier « Changement de phase »)
- Le volume de van der Waals (dossier « Atomique »)
- L'enthalpie et l'énergie de Gibbs de formation gaz parfait à 25°C (dossier « Thermo-Chimie »)
- Les enthalpies de vaporisation et de fusion (dossier « Changement de phase »)
- Le parachor (dossier « Phase condensée »)
- Le degré de polymérisation (dossier « Polymères-Segments »)
- La température critique *hypothétique* (dossier « Changement de phase »)
- La pression critique *hypothétique* (dossier « Changement de phase »)
- La température d'ébullition *hypothétique* (dossier « Changement de phase »)
- Le facteur acentrique *hypothétique* (dossier « Changement de phase »)

De même **pour les propriétés dépendantes de la température**, des corrélations nommées « Polymères », spécifiques aux polymères, sont prévues pour le calcul de :

- La pression de vapeur saturante (fixée afin de ne jamais avoir le polymère en phase vapeur)
- La chaleur spécifique gaz parfait
- La chaleur spécifique liquide
- La chaleur spécifique solide
- La masse volumique liquide
- La masse volumique solide
- La viscosité liquide
- La conductivité thermique liquide
- La conductivité thermique solide
- La tension superficielle

Étape 2 : Calcul des propriétés d'un polymère pur



Afin de prédire les propriétés d'un polymère pur :

- Au niveau du constituant, cliquez sur « Prédiction de propriétés polymères »



La prédiction des propriétés d'un polymère pur ne peut se faire correctement que si l'étape 1 a bien été effectuée

Étape 2 : Calcul des propriétés d'un polymère pur

2. Sélectionnez les propriétés désirées

Prédiction de propriétés de polymères

Utilise un système de prédiction pour calculer les propriétés d'un constituant

☐ Tout développer ☒ Tout sélectionner

Propriété	Valeur actuelle	Ecraser	Valeur prédite
Propriétés constantes			
Degré de polymérisation	<inconnu>	<input checked="" type="checkbox"/>	706,714
Température critique		<input checked="" type="checkbox"/>	1143,80 K
Pression critique		<input checked="" type="checkbox"/>	8,31019 atm
Facteur acentrique	<inconnu>	<input checked="" type="checkbox"/>	17,4487
Volume de Van der Waals	<inconnu>	<input checked="" type="checkbox"/>	3,88400E-005
Enthalpie de formation gaz parfait à 25°C		<input checked="" type="checkbox"/>	6,64794 kcal/mol
Energie de Gibbs de formation gaz parfait à 25°C		<input checked="" type="checkbox"/>	20821,6 kcal/mol
Enthalpie de vaporisation		<input checked="" type="checkbox"/>	5,90433 kcal/mol
Enthalpie de fusion		<input checked="" type="checkbox"/>	1,82242 kcal/mol
Parachor	<inconnu>	<input checked="" type="checkbox"/>	150,295
Température de transition vitreuse		<input checked="" type="checkbox"/>	206,829 K
Température normale de fusion		<input checked="" type="checkbox"/>	424,306 K
Température normale d'ébullition		<input checked="" type="checkbox"/>	1013,40 K
Paramètre T*		<input checked="" type="checkbox"/>	618,067 K
Paramètre P*		<input checked="" type="checkbox"/>	4489,43 bar
Paramètre rho*		<input checked="" type="checkbox"/>	2716,03 kg/m3
Paramètre r	<inconnu>	<input checked="" type="checkbox"/>	1286,62
Paramètre epsilon*		<input checked="" type="checkbox"/>	5138,88 J/mol
Paramètre v*		<input checked="" type="checkbox"/>	1,14466E-005 m3/mol
Paramètre de translation volumique c		<input checked="" type="checkbox"/>	0,00000 cm3/g
Nombre de segments (m)	<inconnu>	<input checked="" type="checkbox"/>	5899,10
Diamètre du segment (sigma)		<input checked="" type="checkbox"/>	3,83944 angstrom
Energie d'interaction entre segments (eps/k)		<input checked="" type="checkbox"/>	311,309 K
Propriétés dépendantes de la température			
+ Vapor pressure		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Chaleur spécifique gaz parfait		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Chaleur spécifique liquide		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Chaleur spécifique solide		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Masse volumique liquide		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Masse volumique solide		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Viscosité liquide		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Conductivité thermique liquide		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Conductivité thermique solide		<input checked="" type="checkbox"/>	
+ Tension superficielle		<input checked="" type="checkbox"/>	

1. Prédire

3. Utiliser

Prédire ? Utiliser Annuler

Il est également possible de prédire les paramètres d'un polymère pur des équations d'état :



- Sanchez-Lacombe
- GC-PPC-SAFT

Étape 2 : Calcul des propriétés d'un polymère pur

Les propriétés prédites sont ensuite visualisables au niveau du constituant

Editeur de constituant

Nom : SBR
ID : {F0DDFA29-EB3A-48AB-BFEF-046E2BA0782E}
ID original :
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

Propriétés

Atomique

Changement de phase

Température normale de fusion 424,30646643109...

Température normale d'ébulli...

Enthalpie de fusion 1,8224187380497...

Température du point triple

Pression du point triple

Etat physique à 25°C <inconnu>

Etat physique en solution aq... <inconnu>

Coefficient de diffusion

Enthalpie de vaporisation 5,9043260038240...

Coefficient de partition Octa... <inconnu>

Coefficient d'infiltration dans... <inconnu>

Type de calcul Liquide-Vapeur <inconnu>

Facteur acentrique <inconnu>

Facteur acentrique modifié <inconnu>

Température critique

Pression critique

Volume critique

Facteur de compressibilité crit... <inconnu>

Densité critique

Chaleur de sublimation au po... <inconnu>

Température de transition vitr... 206,82888692579...

Combustion, sécurité, toxicité

Phase condensée

Les CAS Registry Numbers® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers® n'ont pas été vérifiés par ACS et peu...

Editeur de constituant

Nom : SBR
ID : {F0DDFA29-EB3A-48AB-BFEF-046E2BA0782E}
ID original :
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

Propriétés

Thermo-chimique

Interaction, réaction phase gaz

Propriétés utilisateur

PPC-SAFT

NRTL-SAC

CPA

Polymères-Segments

Sanchez-Lacombe

Propriétés dépendantes de la te...

Chaleur spécifique solide

Chaleur spécifique liquide

Chaleur spécifique gaz parfait

Pression de vapeur saturante

Enthalpie de vaporisation

Conductivité thermique solide

Conductivité thermique liquide

Corrélation Polymères

TMin 206,82888692579...

TMax 1000 K

Coef A 0,15819422598003

Conductivité thermique gaz

Viscosité liquide

Viscosité gaz

Masses volumique solide

Masses volumique liquide

Graphique Grille Formulation

Conductivité thermique liquide (W/m/K)

0.18

0.16

0.14

0.12

0.10

0.08

0.06

0.04

200 300 400 500 600 700 800 900 1000

Température (K)

Echelle logarithmique Echelle 1/T

Outils

Température Min Température Max Points

206,828886925 1000 K 20

Température Propriété

206,828886925 0,173489 W/m/K

Rafraîchir

Copier Imprimer Régression

OK Annuler

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 inactifs.



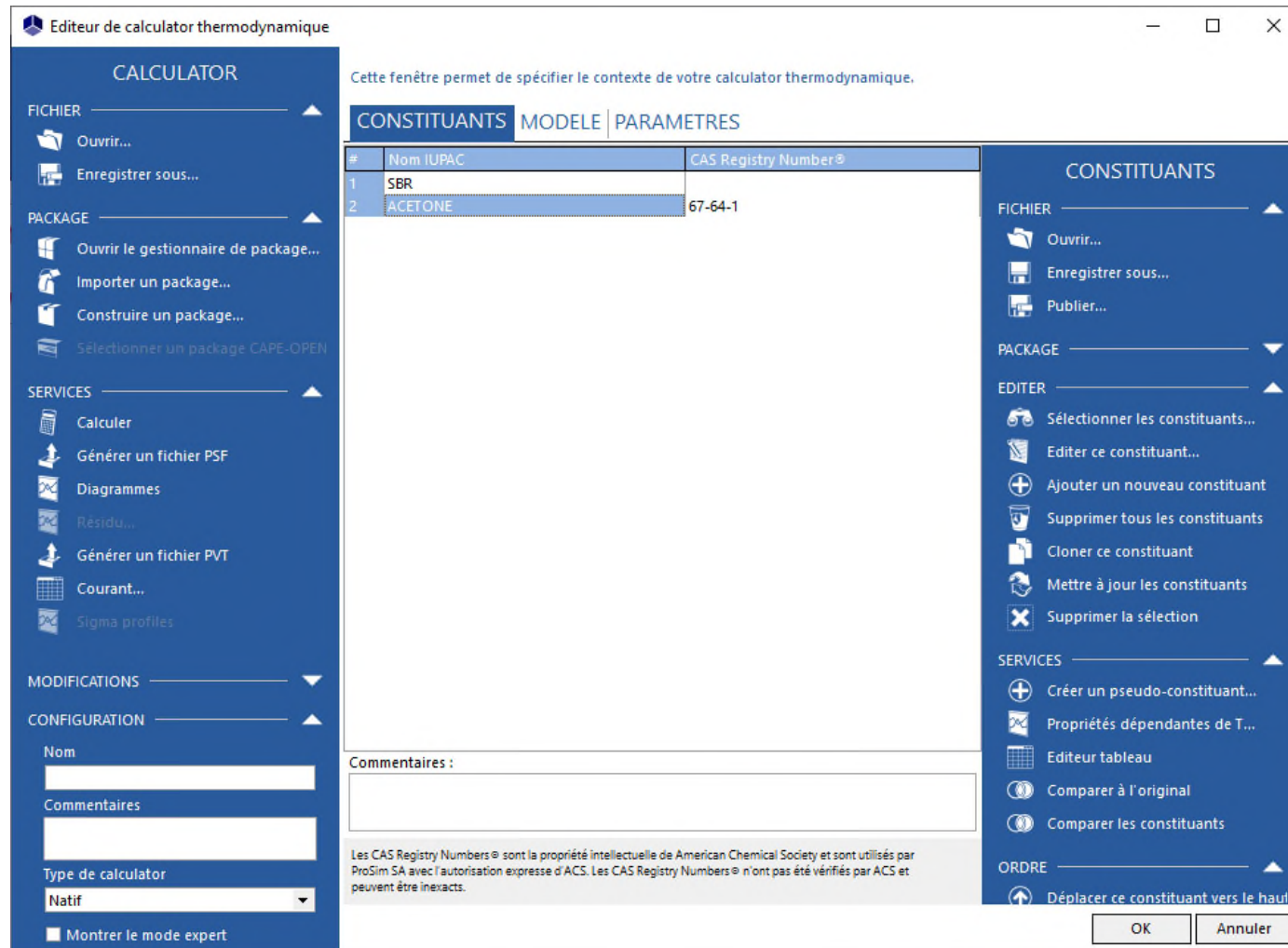
Pour plus de détails sur les propriétés des constituants, vous pouvez consulter « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas 4 »

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

14

Ajoutez le constituant solvant (acétone dans cet exemple)

(pour la description détaillée de cette opération, référez vous au document « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1 »)



Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

Dans l'onglet « MODELE »

1. Sélectionnez un modèle thermodynamique adapté aux mélanges contenant des polymères
2. Sélectionnez des méthodes particulièrement adaptées aux calculs des propriétés de transport des mélanges contenant des polymères

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

Nom: Sanchez-Lacombe

Catégorie: Tous les profils

Profil: Sanchez-Lacombe

Type d'approche: Par équation d'état

Equation d'état: Sanchez-Lacombe

Fonction alpha: Non défini

Règles de mélange: Non défini

Modèle des coefficients d'activité: Non défini

Fugacité liquide pur état standard: Standard

Volume molaire liquide: Equation d'état

Propriétés de transport: Polymères

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

Modèle thermodynamique utilisateur: Aucun

Index du modèle: 1

Commentaires :

Nom:

Commentaires:

Type de calculator: Natif

Montrer le mode expert

OK Annuler

Les modèles thermodynamiques particulièrement recommandés pour ce type de mélanges sont :

- L'équation d'état de Sanchez-Lacombe (retenue dans cet exemple)
- L'équation d'état GC-PPC-SAFT
- Le modèle de coefficients d'activité UNIFAC-FV
- Le modèle de coefficients d'activité Flory-Huggins

Le jeu de propriétés « Polymères » est particulièrement adapté au calcul des propriétés de transport de ce type de mélanges

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

Dans l'onglet « BINAIRES »

- Renseignez un coefficient d'interaction binaire de l'équation d'état en rentrant une valeur pour le coefficient A_{kij} (ici, $A_{kij} = 0,035$)

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 : $K_{ij} = A_{kij} + B_{kij} \cdot 298.15/T + C_{kij} \cdot \ln(T/298.15) + D_{kij} \cdot T/298.15 + E_{kij} \cdot (T/298.15)^2 + L_{ij}$

Constituant	Constituant	A_{kij}	B_{kij}	C_{kij}	D_{kij}	E_{kij}	A_{Lij}	B_{Lij}	C_{Lij}	D_{Lij}	E_{Lij}
SBR	ACETONE	0.035	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Non fourni Fournis Importés Estimés

Commentaires :

BINAIRES

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimer les binaires...
- Enregistrer les binaires...

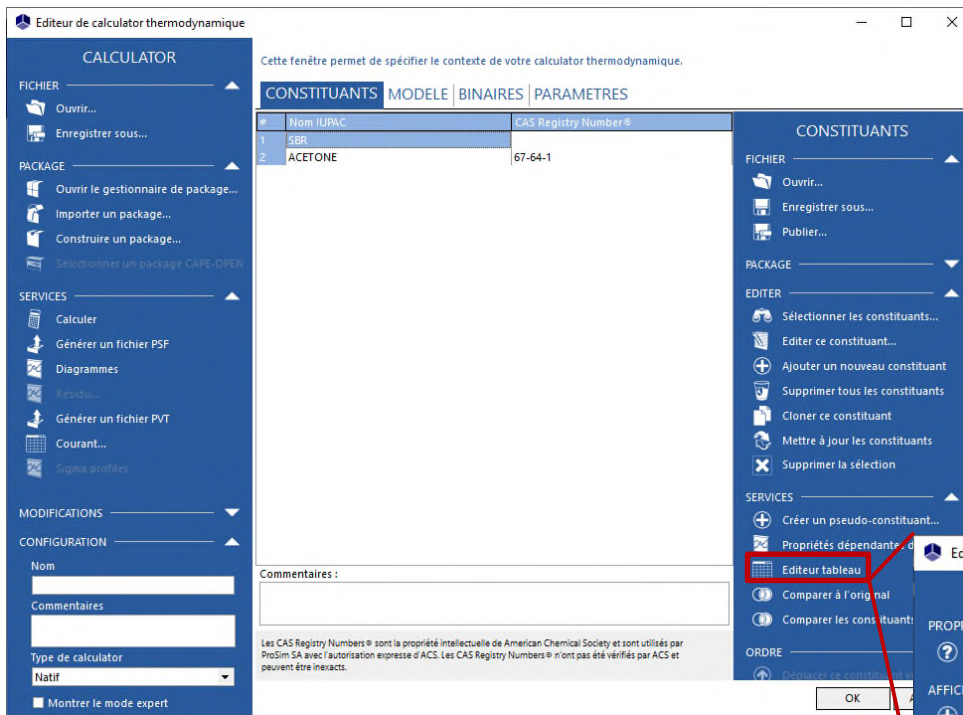
OPTIONS

Unité

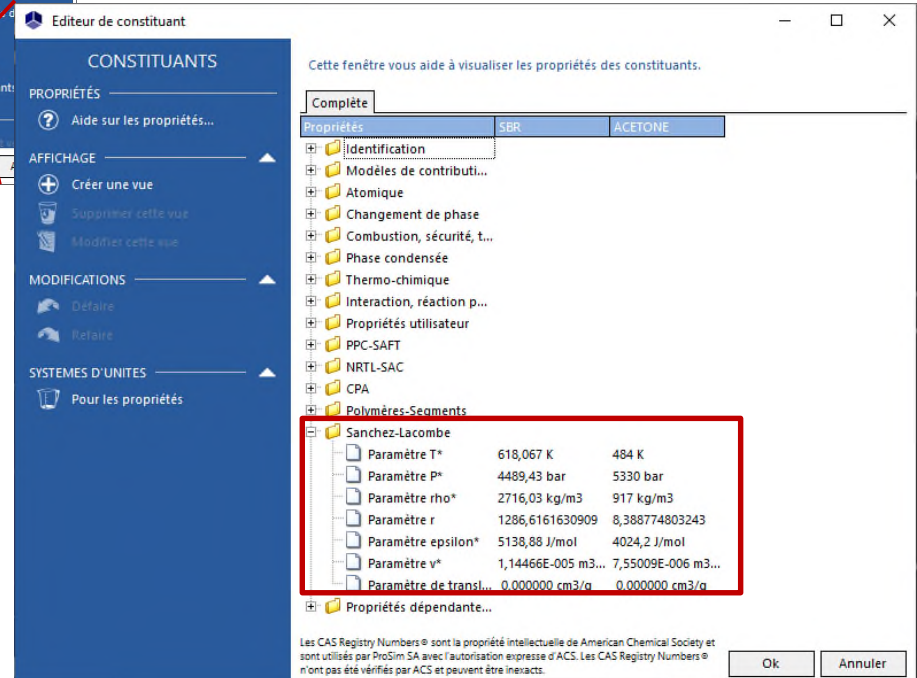
☒ Les paramètres seront ignorés

OK Annuler

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant



Il est important de vérifier que les paramètres permettant d'utiliser le modèle thermodynamique (Sanchez-Lacombe dans cet exemple) sont bien renseignés pour chacun des constituants



Si ces paramètres sont manquants :

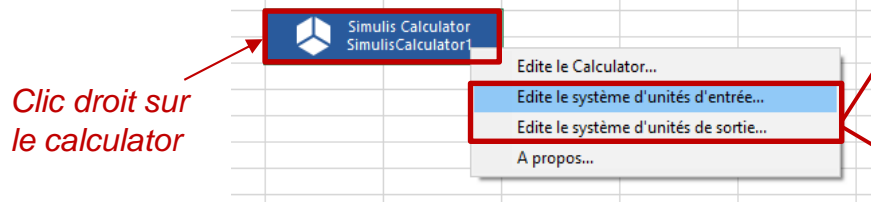
- Pour un polymère, ils peuvent être prédits à partir du service « Polymer prediction » (voir étape 2)
- Pour un solvant, ils sont estimés directement lors du calcul d'une propriété à partir d'autres données (pour plus d'informations, se reporter au paragraphe relatif à l'équation de Sanchez-Lacombe du manuel de présentation des modèles thermodynamiques, accessible depuis l'onglet « MODELE » du calculator)



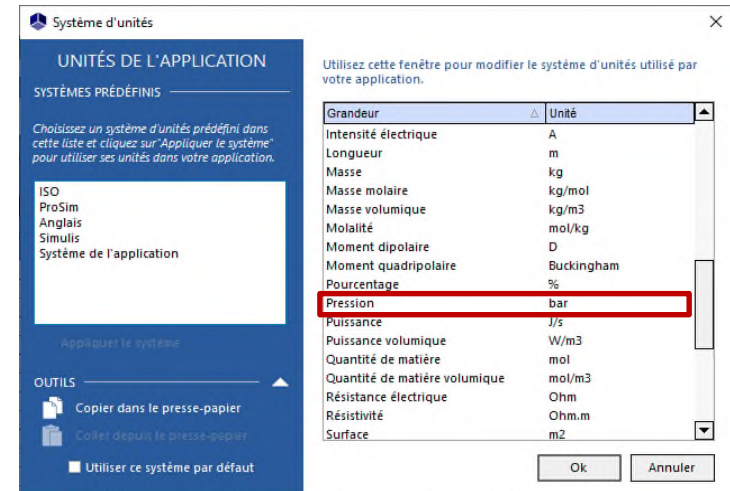
Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

Dans la feuille Excel où se trouve votre calculator :

1. Sélectionnez l'unité « bar » pour la pression et « K » pour la température dans les systèmes d'unités d'entrée et de sortie



Pour plus de détails sur la modification des systèmes d'unités, vous pouvez consulter :
« Démarrer avec Simulis Thermodynamics, cas 1 »



2. Faites afficher le nom des constituants et les unités utilisées dans le calculator

entrée	sortie
1	2
Température K	K
Pressure bar	=stCALGetUnitNameInSystem("G\$7;\$E9")

Nom calculator	SimulisCalculator1
Indice constituant	nom constituant
1	SBR
2	=stCALCompoundDisplayName(SC\$5;B9)

Remarques :

- L'indice du polymère est 1, l'indice du solvant est 2
- Dans cet exemple, on travaille en fraction massique. Du fait de la grande masse molaire du polymère, sa fraction massique est élevée même si sa fraction molaire est très faible.

3. Renseignez les données expérimentales (ici, des données de pression de bulle)

EXP		
GUPTA R.B., PRAUSNITZ J.M. "Vapor-Liquid Equilibria of Copolymer + Solvent and Homopolymer + Solvent Binaries: New Experimental Data and Their Correlation", J. Chem. Eng. Data40, 784-791 (1995)		
T / K	323,15	
w2 / kg/kg	P Bulle / bar	
0,003	0,137	
0,023	0,265	
0,04	0,363	
0,056	0,415	
0,067	0,453	
0,072	0,465	
0,067	0,472	
0,066	0,473	
0,078	0,511	
0,079	0,523	
0,08	0,533	
0,091	0,552	
0,115	0,596	
0,11	0,597	
0,12	0,613	

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

4. Faire un calcul de Flash TP avec le modèle de Sanchez-Lacombe (calcul du taux de vaporisation et des compositions des phases liquide et vapeur à température, pression et composition globale données)

4.1. Préparation du calcul dans Excel : créez le tableau suivant

Calcul de flash TP						
w1 / kg/kg	w2 / kg/kg					
0,8	0,2					
P / bar	T / K	tvap	w1	w2	y1	y2
0,01	323,15					
0,02	323,15					
0,03	323,15					
0,04	323,15					
0,05	323,15					
0,1	323,15					
0,15	323,15					
0,2	323,15					
0,25	323,15					
0,3	323,15					
0,35	323,15					
0,4	323,15					
0,45	323,15					
0,5	323,15					
0,55	323,15					
0,6	323,15					
0,65	323,15					
0,7	323,15					

Renseignez la composition massique globale du mélange, la température et la pression à laquelle faire le calcul

Prévoir un tableau pour afficher les résultats

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

4. Faire un calcul de Flash TP avec le modèle de Sanchez-Lacombe (calcul du taux de vaporisation et des compositions des phases liquide et vapeur à température, pression et composition globale données)

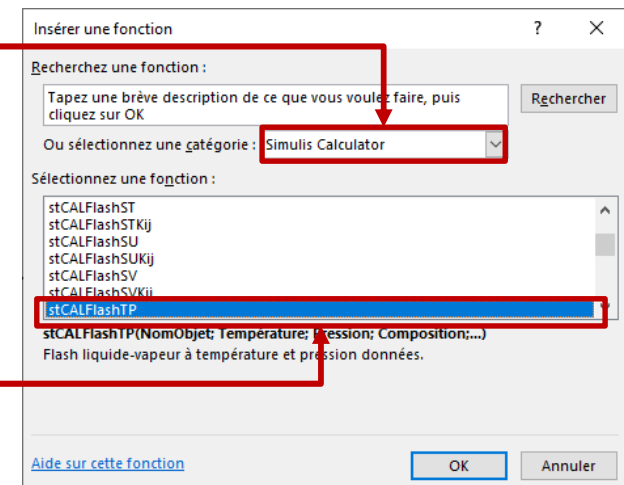
4.2. Réalisation du calcul :

Calcul de flash TP						
w1 / kg/kg	w2 / kg/kg					
0,8	0,2					
P / bar	T / K	tvap	w1	w2	y1	y2
0,01	323,15					
0,02	323,15					
0,03	323,15					
0,04	323,15					
0,05	323,15					
0,1	323,15					
0,15	323,15					
0,2	323,15					
0,25	323,15					
0,3	323,15					
0,35	323,15					
0,4	323,15					
0,45	323,15					
0,5	323,15					
0,55	323,15					
0,6	323,15					
0,65	323,15					
0,7	323,15					

1. Sélectionnez la première ligne du tableau et cliquez sur le bouton permettant d'insérer une fonction dans Excel

2. Dans la fenêtre « Insérer une fonction », sélectionnez « Simulis Calculator »

3. Dans la liste des fonctions, sélectionnez « stCALFlashTP »



Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

4. Faire un calcul de Flash TP avec le modèle de Sanchez-Lacombe (calcul du taux de vaporisation et des compositions des phases liquide et vapeur à température, pression et composition globale données)

4.2. Réalisation du calcul :

4. Renseignez les arguments de la fonction :

Arguments de la fonction

stCALFlashTP

NomObjet	SC\$6	↑	= "SimulisCalculator1"
Température	I15	↑	= 323,15
Pression	H15	↑	= 0,01
Composition	\$H\$13:\$I\$13	↑	= {0,8,0,2}
TypeComposition	1	↑	= 1
Init	FAUX	↑	= FAUX
TauxVapInit		↑	=
FractionsLiqInit		↑	=
FractionsVapInit		↑	=
TypeRésultats	1	↑	= 1

= {0,199284983452978;0,999106982955083;0,000}

Flash liquide-vapeur à température et pression données.

TypeRésultats Type de résultats (0 = molaire, 1 = massique).

Résultat = 0,1993

[Aide sur cette fonction](#)

OK Annuler

Renseignez le nom du calculator

Renseignez la température à laquelle faire le calcul de flash TP

Renseignez la pression à laquelle faire le calcul de flash TP

Renseignez la composition globale du mélange à laquelle faire le calcul de flash TP

Renseignez le type de composition en entrée (1 = composition massique)

Renseignez si des valeurs doivent être prises en compte pour initialiser le calcul (ici FAUX)

Renseignez le type de composition en sortie (1 = composition massique)

5. Validez avec
Ctrl+Alt+Entrée

Ne pas oublier de fixer certaines données du calcul en ajoutant le signe « \$ ». Cela permettra d'étendre directement la fonction sur l'ensemble du tableau

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

4. Faire un calcul de Flash TP avec le modèle de Sanchez-Lacombe (calcul du taux de vaporisation et des compositions des phases liquide et vapeur à température, pression et composition globale données)

4.2. Réalisation du calcul :

Calcul de flash TP							
w1 / kg/kg	w2 / kg/kg						
0,8	0,2						
P / bar	T / K	tvap	w1	w2	y1	y2	
0,01	323,15	0,1993	0,9991	0,0009	0	0	1
0,02	323,15						
0,03	323,15						
0,04	323,15						
0,05	323,15						
0,1	323,15						
0,15	323,15						
0,2	323,15						
0,25	323,15						
0,3	323,15						
0,35	323,15						
0,4	323,15						
0,45	323,15						
0,5	323,15						
0,55	323,15						
0,6	323,15						
0,65	323,15						
0,7	323,15						

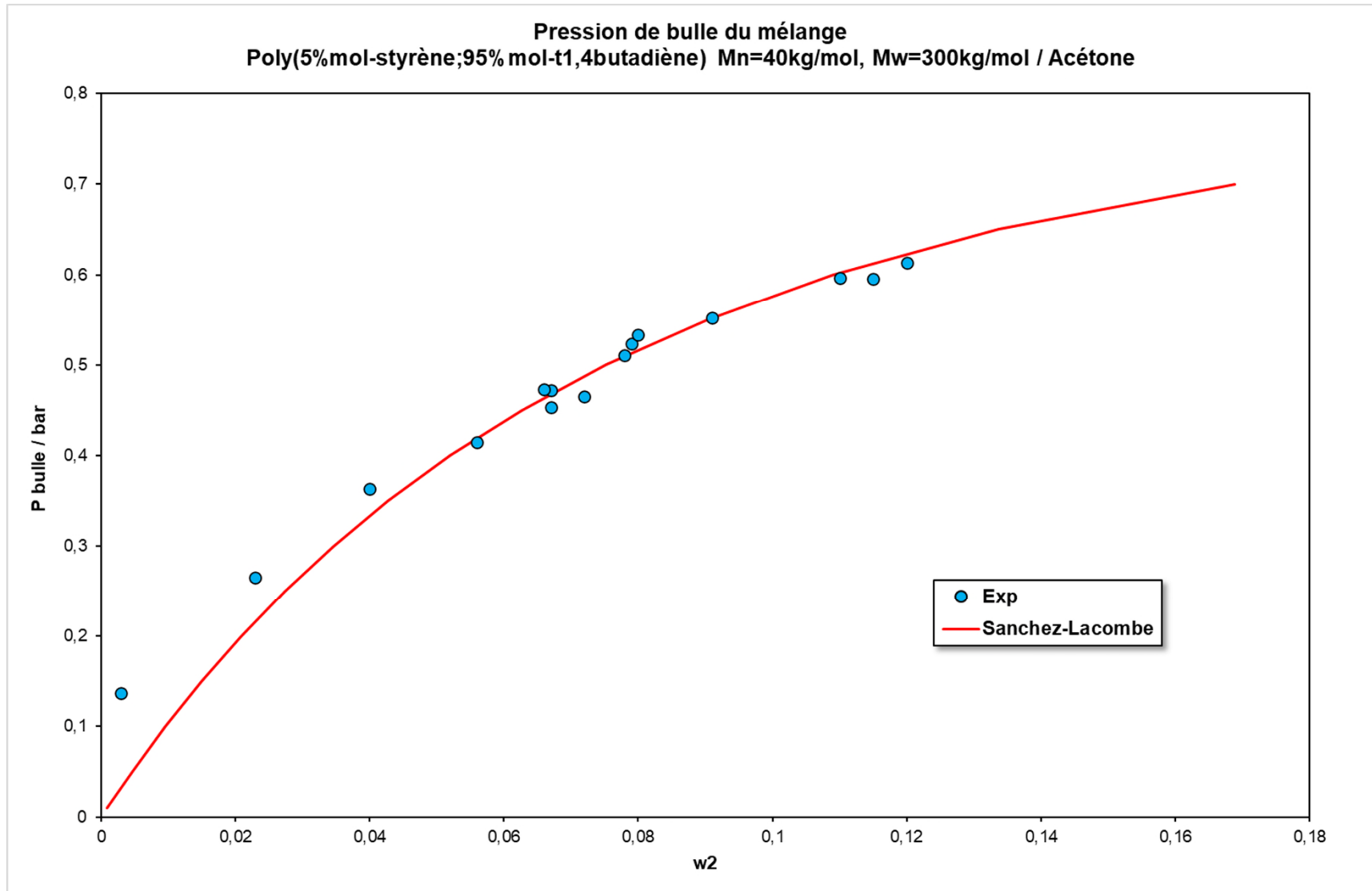
6. Etendre verticalement le calcul sur tout le tableau

On trouve bien que le polymère n'est pas présent en phase vapeur

Calcul de flash TP							
w1 / kg/kg	w2 / kg/kg						
0,8	0,2						
P / bar	T / K	tvap	w1	w2	y1	y2	
0,01	323,15	0,1993	0,9991	0,0009	0	0	1
0,02	323,15	0,1986	0,9982	0,0018	0	0	1
0,03	323,15	0,1978	0,9973	0,0027	0	0	1
0,04	323,15	0,1971	0,9963	0,0037	0	0	1
0,05	323,15	0,1963	0,9954	0,0046	0	0	1
0,1	323,15	0,1923	0,9904	0,0096	0	0	1
0,15	323,15	0,1878	0,9850	0,0150	0	0	1
0,2	323,15	0,1829	0,9791	0,0209	0	0	1
0,25	323,15	0,1774	0,9726	0,0274	0	0	1
0,3	323,15	0,1713	0,9653	0,0347	0	0	1
0,35	323,15	0,1642	0,9572	0,0428	0	0	1
0,4	323,15	0,1561	0,9480	0,0520	0	0	1
0,45	323,15	0,1465	0,9373	0,0627	0	0	1
0,5	323,15	0,1350	0,9248	0,0752	0	0	1
0,55	323,15	0,1206	0,9097	0,0903	0	0	1
0,6	323,15	0,1020	0,8909	0,1091	0	0	1
0,65	323,15	0,0765	0,8662	0,1338	0	0	1
0,7	323,15	0,0374	0,8311	0,1689	0	0	1

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

Les résultats obtenus sont présentés sur le graphique suivant.



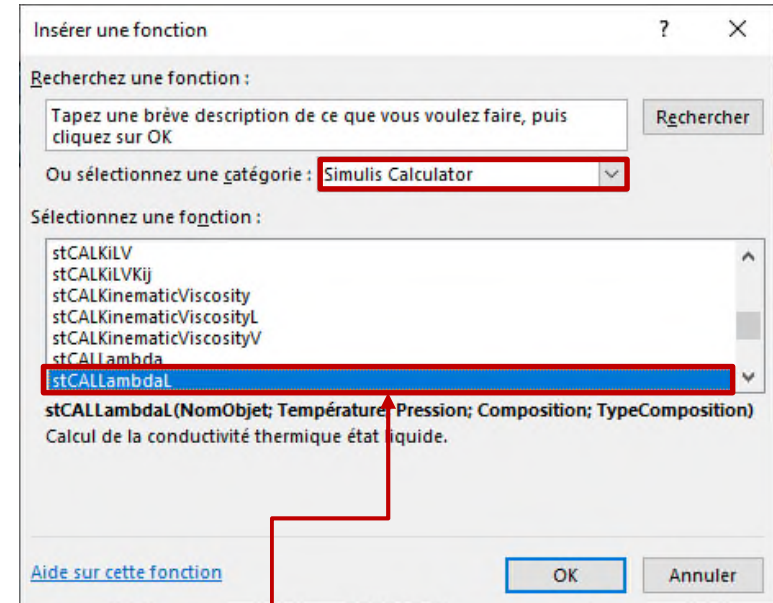
Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

Des propriétés de transport du mélange peuvent également être calculées. Un exemple est donné ici avec le calcul de la conductivité thermique liquide du mélange.

1. Préparez le tableau suivant

T / K	550	
P / bar	1	
w1 / kg/kg	w2 / kg/kg	λ_L / W/m/K
0,995	0,005	
0,99	0,01	
0,985	0,015	
0,98	0,02	
0,975	0,025	
0,97	0,03	
0,965	0,035	
0,96	0,04	
0,955	0,045	
0,95	0,05	
0,945	0,055	
0,94	0,06	
0,935	0,065	
0,93	0,07	
0,925	0,075	
0,92	0,08	
0,915	0,085	
0,91	0,09	
0,905	0,095	
0,9	0,1	
0,895	0,105	
0,89	0,11	
0,885	0,115	
0,88	0,12	

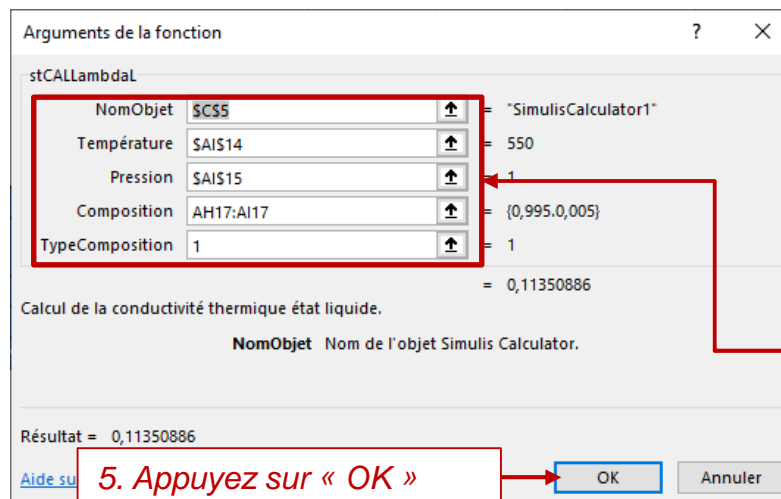
2. Sélectionnez la première ligne du tableau et cliquez sur le bouton permettant d'insérer une fonction dans excel



3. Dans la catégorie « Simulis Calculator », sélectionnez la fonction « stCALLambdaL »

4. Renseignez les arguments de la fonction :

- Nom du calculator
- Température
- Pression
- Composition
- Type de la composition



5. Appuyez sur « OK »

OK

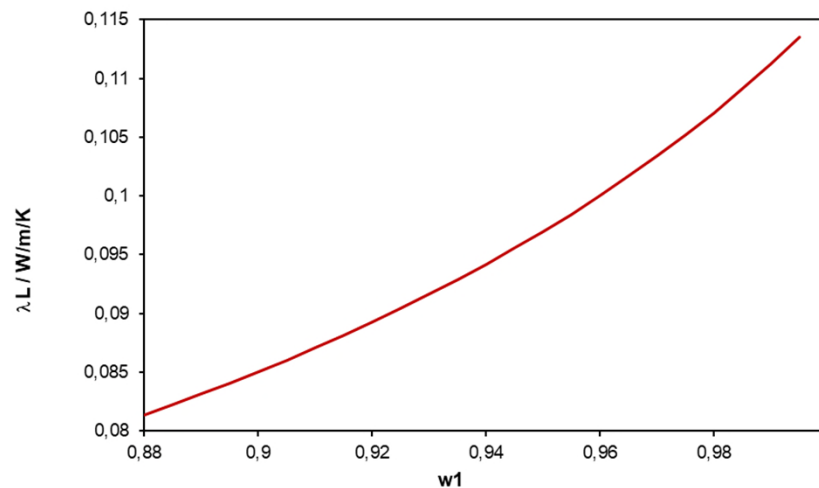
Annuler

Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

T / K	550	
P / bar	1	
w1 / kg/kg	w2 / kg/kg	λ_L / W/m/K
0,995	0,005	0,11350886
0,99	0,01	
0,985	0,015	
0,98	0,02	
0,975	0,025	
0,97	0,03	
0,965	0,035	
0,96	0,04	
0,955	0,045	
0,95	0,05	
0,945	0,055	
0,94	0,06	
0,935	0,065	
0,93	0,07	
0,925	0,075	
0,92	0,08	
0,915	0,085	
0,91	0,09	
0,905	0,095	
0,9	0,1	
0,895	0,105	
0,89	0,11	
0,885	0,115	
0,88	0,12	

6. *Etendre verticalement le calcul sur tout le tableau*

T / K	550	
P / bar	1	
w1 / kg/kg	w2 / kg/kg	λ_L / W/m/K
0,995	0,005	0,11350886
0,99	0,01	0,11124356
0,985	0,015	0,10910869
0,98	0,02	0,10709219
0,975	0,025	0,10518352
0,97	0,03	0,10337339
0,965	0,035	0,10165361
0,96	0,04	0,10001691
0,955	0,045	0,0984568
0,95	0,05	0,09696748
0,945	0,055	0,09554377
0,94	0,06	0,09418099
0,935	0,065	0,0928749
0,93	0,07	0,09162168
0,925	0,075	0,09041787
0,92	0,08	0,08926029
0,915	0,085	0,08814606
0,91	0,09	0,08707255
0,905	0,095	0,08603732
0,9	0,1	0,08503816
0,895	0,105	0,08407302
0,89	0,11	0,08314002
0,885	0,115	0,0822374
0,88	0,12	0,08136356



Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant



Ces calculs peuvent se faire directement au sein du calculator.
Pour plus d'informations sur le calcul des propriétés, vous pouvez consulter « Démarrer avec Simulis thermodynamics, cas 4 »

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	SBR	
2	ACETONE	67-64-1

Service de calculs

Cette fenêtre permet de spécifier le contexte de vos calculs.

Type de calcul: **Propriétés physico-chimiques** | Nom de la session: Nouvelle session

☐ Autoriser le calcul de dérivées

Propriétés

Transport

- Masse molaire
- Chaleur spécifique isobare
- Chaleur spécifique isochore
- Gamma (Cp/Cv ratio)
- Conductivité thermique** ☒
- Viscosité dynamique
- Viscosité cinématique
- Masse volumique
- Densité molaire
- Volume molaire
- Facteur de compressibilité
- Vitesse du son
- pH
- Coefficient osmotique
- Coefficient de Joule-Thomson
- Coefficient de dilatation isobare
- Coefficient de dilatation isochore
- Coefficient de compressibilité isotherme
- Chaleur spécifique isobare résiduelle
- Chaleur spécifique isochore résiduelle

Thermodynamique

- Entropie
- Enthalpie
- Energie interne
- Enthalpie de vaporisation

Etat physique: Liquide

Système

Propriété	Unité	Initial	Final	Pas	Points
Pression	bar	1	1	0	1
Température	K	550	550	0	1

Valeurs: Fractions (selected) | Type: Massique (selected) | Total: 0 kg

Composition du mélange

Au...	Constituant	Initial	Final	Pas	Points
<input type="checkbox"/>	SBR	0,995	0,88	-0,005	24
<input checked="" type="checkbox"/>	ACETONE	Auto	Auto	Auto	Auto

Type de résultats: Massique (selected)

☐ Compositions identiques quelque soit le type de calcul

calculer: []

Service de calculs

SESSIONS

- Ajouter une nouvelle session...
- Supprimer la session courante

Liste des sessions

- Nouvelle session

Calculer la session courante

SYSTÈMES D'UNITÉS (RÉSULTATS)

- Pour les conditions de calcul
- Pour les propriétés calculées

MODIFICATIONS

- Masquer les résultats constants
- ☒ Tracer automatiquement les résultats

AIDE

Une fois tous les champs renseignés, cliquez sur « Calculer la session courante »

Conductivité thermique

Quitter



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