

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 :

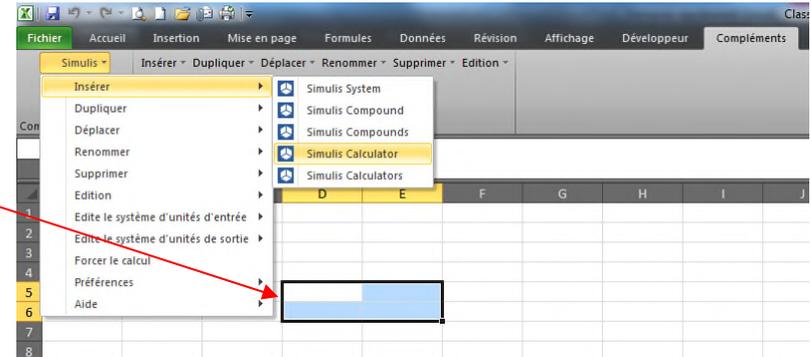
- « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 1 » qui couvre notamment les procédures de sélection de constituants et la définition du profil thermodynamique,
- « Démarrer avec Simulis Thermodynamics, Cas 4 » qui explique en partie comment calculer des propriétés thermodynamiques de corps purs et de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

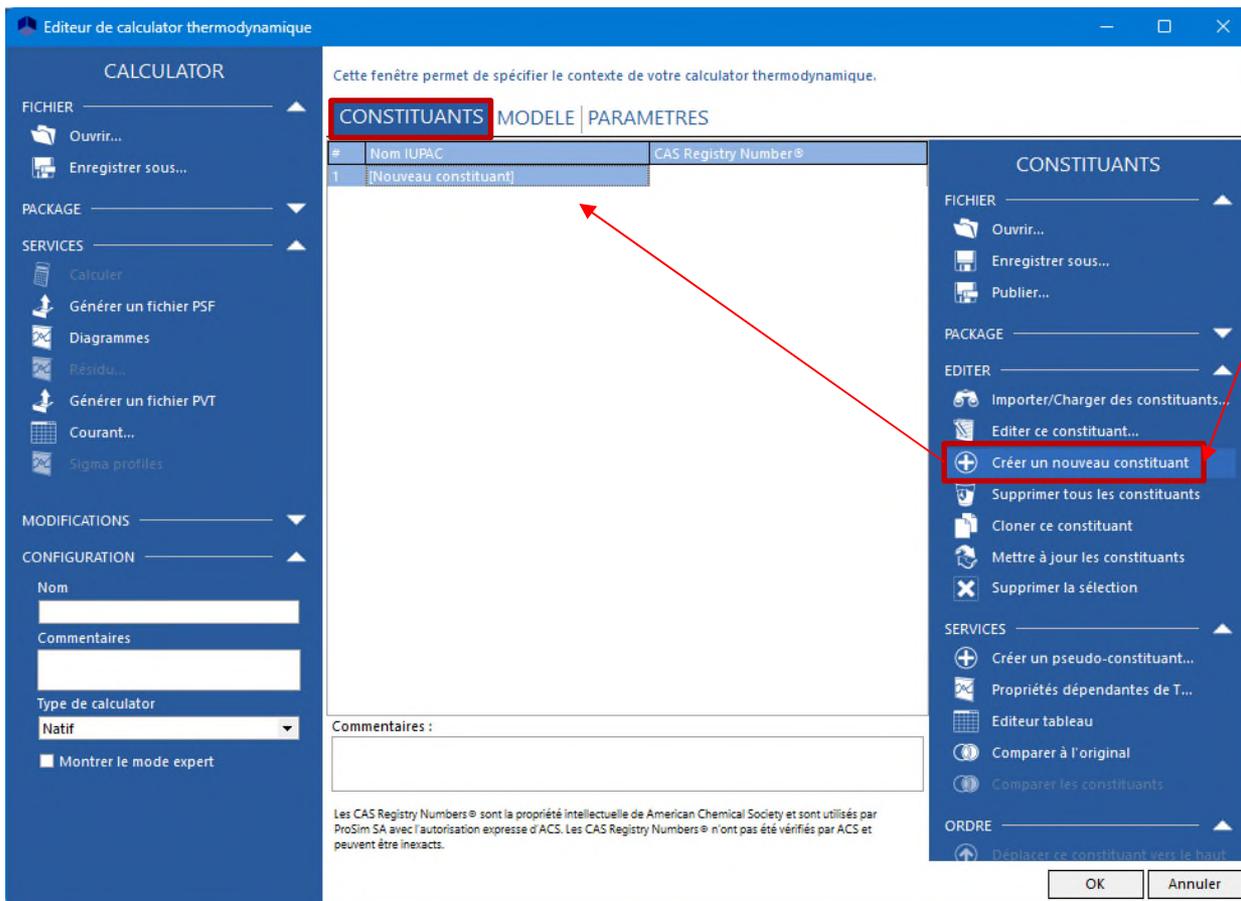


ou



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

The screenshot shows two windows from the ProSim 5A software. The top window, 'Editeur de calculateur thermodynamique', has a 'CONSTITUANTS' tab with a table containing one entry: '1 [Nouveau constituant]'. A red arrow points from this entry to the 'Editeur de constituant' window below. In this second window, the 'Identification' folder in the left sidebar is highlighted with a red box. The 'Nom IUPAC' field in the main area is also highlighted with a red box and contains the text 'SBR'. Other fields in the 'Identification' section show '<inconnu>' for 'Nom spécifique', 'CAS Registry Number', 'Famille chimique', 'Formule chimique', and 'Fichier Cosmo'.

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 Styène-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

Éditeur de constituant

CONSTITUANT

FICHIER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

OUTILS

- Sélectionner un constituant...
- Copier
- Coller
- Export PDF (Impression)
- Exporter vers Excel
- Importer
- Exporter
- Pseudo-constituant...
- Prediction de propriétés...
- Prediction de modèles de groupes
- Prediction de propriétés polymères.

AFFICHAGE

- Créer une vue
- Supprimer cette vue
- Modifier cette vue

MODIFICATIONS

- Défaire
- Refaire

Nom : SBR
ID : {28B4F506-F03D-4E17-A31B-899D1E6E7728}
ID original :
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

| Propriétés | Valeur |
|--------------------------------------|-----------|
| Identification | |
| Modèles de contribution de groupes | |
| Atomique | |
| Changement de phase | |
| Combustion, sécurité, toxicité | |
| Phase condensée | |
| Thermo-chimique | |
| Interaction, réaction phase gaz | |
| Propriétés utilisateur | |
| PPC-SAFT | |
| NRTL-SAC | |
| CPA | |
| Polymères-Segments | |
| Segments | <inconnu> |
| Masse molaire moyenne en nom... | <inconnu> |
| Degré de polymérisation | <inconnu> |
| Fraction de cristallinité (kg/kg) | 0 |
| Viscosité de Van Krevelen (gam... | 5,1 |
| Sanchez-Lacombe | |
| Propriétés dépendantes de la temp... | |

Importer un fichier mol... Effacer

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

Segments polymère

| Segment | Fraction |
|-----------|-----------|
| <inconnu> | <inconnu> |

SOMME 0

Segments disponibles

| Nom |
|-------------------------------------|
| Segment éthylène linéaire |
| Segment éthylène ramifié |
| Segment méthacrylate de butyle |
| Segment méthacrylate de cyclohexyle |
| Segment isobutylène |
| Segment méthacrylate de méthyle |
| Segment o-méthylstyrène |
| Segment styrène |
| Segment acétate de vinyle |
| Segment propylène linéaire |
| Segment propylène ramifié |
| Segment méthyl vinyl éther |
| Segment chlorure de vinyle |
| Segment 1,2-butadiène |
| Segment cis-1,4-butadiène |
| Segment trans-1,4-butadiène |

OK Annuler

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

Segments polymère

| Segment | Fraction |
|-----------------------------|--------------|
| Segment styrène | 5,00000E-002 |
| Segment trans-1,4-butadiène | 0,950000 |

SOMME 1

Segments disponibles

| Nom |
|-------------------------------------|
| Segment éthylène linéaire |
| Segment éthylène ramifié |
| Segment méthacrylate de butyle |
| Segment méthacrylate de cyclohexyle |
| Segment isobutylène |
| Segment méthacrylate de méthyle |
| Segment o-méthylstyrène |
| Segment acétate de vinyle |
| Segment propylène linéaire |
| Segment propylène ramifié |
| Segment méthyl vinyl éther |
| Segment chlorure de vinyle |
| Segment 1,2-butadiène |
| Segment cis-1,4-butadiène |

OK Annuler

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

Editeur de constituant

Nom : SBR
ID : {28B4F506-F03D-4E17-A31B-899D1E6E7728}
ID original :
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

| Propriétés | Valeur |
|--------------------------------------|-----------|
| Identification | |
| Modèles de contribution de groupes | |
| Atomique | |
| Changement de phase | |
| Combustion, sécurité, toxicité | |
| Phase condensée | |
| Thermo-chimique | |
| Interaction, réaction phase gaz | |
| Propriétés utilisateur | |
| PPC-SAFT | |
| NRTL-SAC | |
| CPA | |
| Polymères-Segments | |
| Segments | Fournis |
| Masse molaire moyenne en nom... | 40 kg/mol |
| Degré de polymérisation | <inconnu> |
| Fraction de cristallinité (kg/kg) | 0 |
| Viscosité de Van Krevelen (gam... | 5,1 |
| Sanchez-Lacombe | |
| Propriétés dépendantes de la temp... | |

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.

Dans le dossier « Atomique » :

III. Renseignez la masse molaire moyenne en poids du polymère

Editeur de constituant

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

Aide sur les propriétés...

Complète

| Propriétés | Valeur |
|------------------------------------|------------|
| Identification | |
| Modèles de contribution de grou... | |
| Atomique | |
| Masse molaire | 300 kg/mol |
| Moment dipolaire | |
| Volume de Van der Waals | <inconnu> |
| Aire de Van der Waals | <inconnu> |
| Aire modifiée de Van der Waals | <inconnu> |
| Aire molaire de surface de Spr... | <inconnu> |
| Rayon de Van der Waals | |
| Paramètre de solubilité en (ca... | <inconnu> |
| Rayon de giration | |
| Volume de diffusion | |
| Rayon de Born | |
| Charge | <inconnu> |
| Energie de Lennard-Jones | |
| Longueur de Lennard-Jones | |
| Rayon de Pauling | |
| Rayon de Stokes | |
| Constante de Born | <inconnu> |
| Indice de réfraction | <inconnu> |
| Constante dielectrique | <inconnu> |
| Rayon atomique | |
| Polarisabilité | |
| 1ère énergie d'ionisation | |

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.

OK Annuler

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

Editeur de constituant

CONSTITUANT

FICHIER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

OUTILS

- Sélectionner un constituant...
- Copier
- Coller
- Export PDF (Impression)
- Exporter vers Excel
- Importer
- Exporter
- Pseudo-constituant...
- Prédiction de propriétés...
- Prédiction de modèles de group...
- Prédiction de propriétés polymères.**

AFFICHAGE

- Créer une vue
- Supprimer cette vue
- Modifier cette vue

MODIFICATIONS

- Défaire
- Refaire

Nom : SBR
ID : [F0DDFA29-EB3A-48AB-BFEF-046E2BA0782E]
ID original :
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

| Propriétés | Valeur |
|--------------------------------------|--------|
| Identification | |
| Modèles de contribution de groupes | |
| Atomique | |
| Changement de phase | |
| Combustion, sécurité, toxicité | |
| Phase condensée | |
| Thermo-chimique | |
| Interaction, réaction phase gaz | |
| Propriétés utilisateur | |
| PPC-SAFT | |
| NRTL-SAC | |
| CPA | |
| Polymères-Segments | |
| Sanchez-Lacombe | |
| Propriétés dépendantes de la temp... | |

Importer un fichier mol... Effacer

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

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 | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Vapor pressure | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Chaleur spécifique gaz parfait | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Chaleur spécifique liquide | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Chaleur spécifique solide | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Masse volumique liquide | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Masse volumique solide | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Viscosité liquide | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Conductivité thermique liquide | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Conductivité thermique solide | | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| <input checked="" type="checkbox"/> Tension superficielle | | <input checked="" type="checkbox"/> | |

1. Prédire

3. Utiliser

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

- Sanchez-Lacombe
- GC-PPC-SAFT

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

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 »)

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | PARAMETRES

| # | Nom IUPAC | CAS Registry Number® |
|---|-----------|----------------------|
| 1 | SBR | |
| 2 | ACETONE | 67-64-1 |

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

CALCULATOR

FICHER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

PACKAGE

- Ouvrir le gestionnaire de package...
- Importer un package...
- Construire un package...
- Sélectionner un package CAPE-OPEN

SERVICES

- Calculer
- Générer un fichier PSF
- Diagrammes
- Résidu...
- Générer un fichier PVT
- Courant...
- Sigma profiles

MODIFICATIONS

CONFIGURATION

Nom

Commentaires

Type de calculator

Natif

Montrer le mode expert

CONSTITUANTS

FICHER

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

PACKAGE

EDITER

- 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

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 :

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} | AL_{ij} | BL_{ij} | CL_{ij} | DL_{ij} | EL_{ij} |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| SBR | ACETONE | 0,035 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

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

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 |

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

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

Editeur de constituant

Cette fenêtre vous aide à visualiser les propriétés des constituants.

Complète

| Propriétés | SBR | ACETONE |
|----------------------------|--------------------|--------------------|
| Identification | | |
| Modèles de contributi... | | |
| Atomique | | |
| Changement de phase | | |
| Combustion, sécurité, t... | | |
| Phase condensée | | |
| Thermo-chimique | | |
| Interaction, réaction p... | | |
| Propriétés utilisateur | | |
| PPC-SAFT | | |
| NRTL-SAC | | |
| CPA | | |
| Polymères-Segments | | |
| Sanchez-Lacombe | | |
| Paramètre T* | 618,067 K | 484 K |
| Paramètre P* | 4489,43 bar | 5330 bar |
| Paramètre rho* | 2716,03 kg/m3 | 917 kg/m3 |
| Paramètre r | 1286,6161630909 | 8,388774803243 |
| Paramètre epsilon* | 5138,88 J/mol | 4024,2 J/mol |
| Paramètre v* | 1,14466E-005 m3... | 7,55009E-006 m3... |
| Paramètre de transi... | 0,000000 cm3/g | 0,000000 cm3/g |
| Propriétés dépendante... | | |

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

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

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)

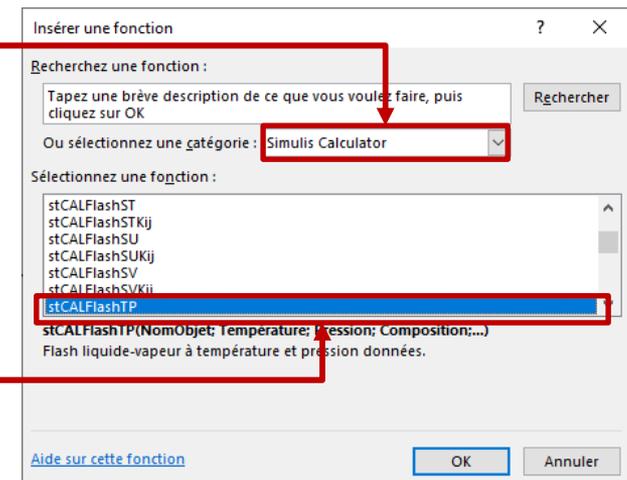
4.2. Réalisation du calcul :

| 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 | \$C\$6 <input type="button" value="↑"/> = "SimulisCalculator1" |
| Température | I15 <input type="button" value="↑"/> = 323,15 |
| Pression | H15 <input type="button" value="↑"/> = 0,01 |
| Composition | \$H\$13:\$I\$13 <input type="button" value="↑"/> = {0,8,0,2} |
| TypeComposition | 1 <input type="button" value="↑"/> ← 1 |
| Init | FAUX <input type="button" value="↑"/> ← FAUX |
| TauxVaplnit | <input type="button" value="↑"/> = |
| FractionsLiqlnit | <input type="button" value="↑"/> = |
| FractionsVaplnit | <input type="button" value="↑"/> = |
| TypeRésultats | 1 <input type="button" value="↑"/> ← 1 |

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 | 1 | 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 | | | | | | |

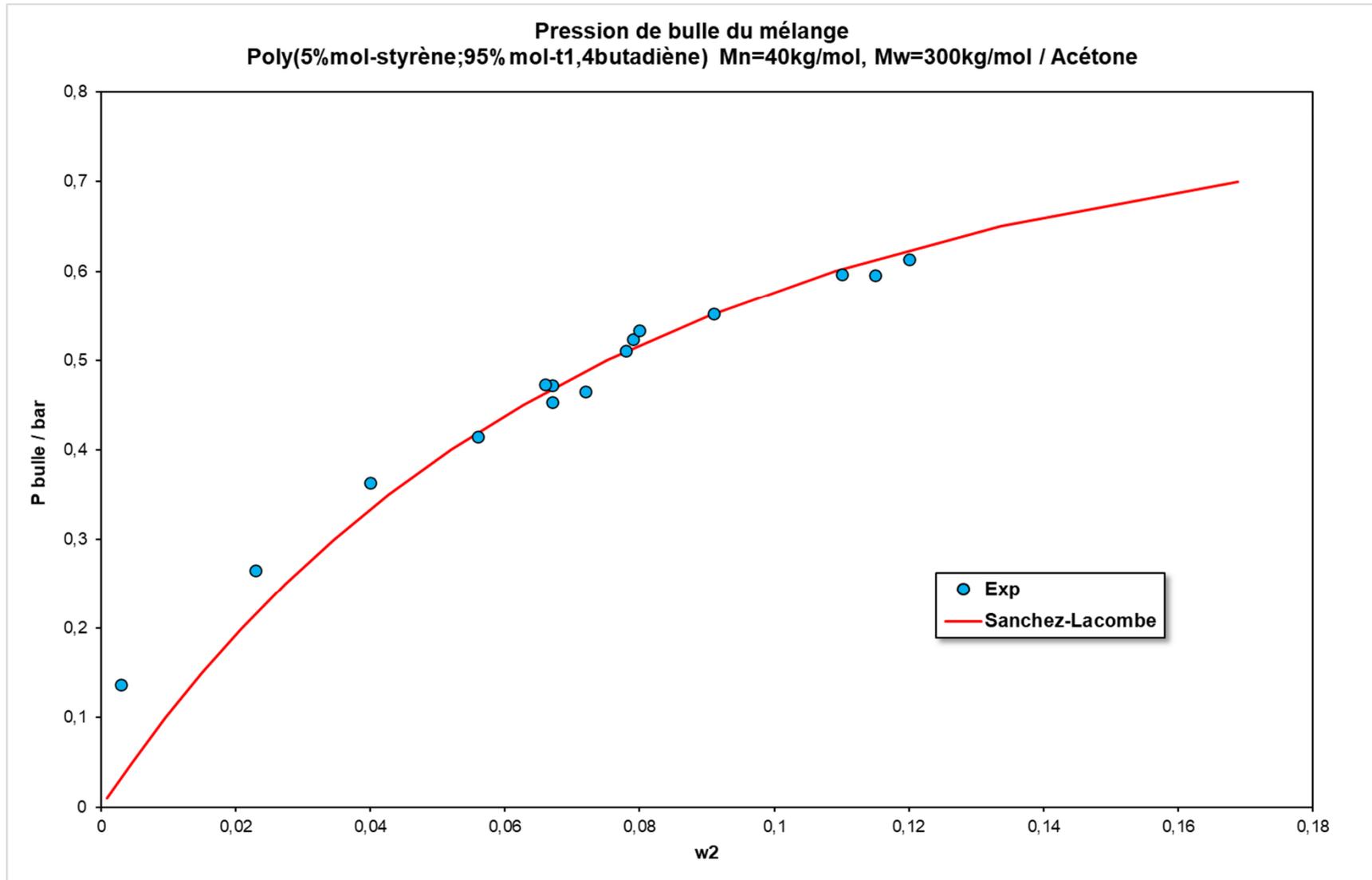
6. Etendre verticalement le calcul sur tout le tableau

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 | 1 | 1 |
| 0,02 | 323,15 | 0,1986 | 0,9982 | 0,0018 | 0 | 1 | 1 |
| 0,03 | 323,15 | 0,1978 | 0,9973 | 0,0027 | 0 | 1 | 1 |
| 0,04 | 323,15 | 0,1971 | 0,9963 | 0,0037 | 0 | 1 | 1 |
| 0,05 | 323,15 | 0,1963 | 0,9954 | 0,0046 | 0 | 1 | 1 |
| 0,1 | 323,15 | 0,1923 | 0,9904 | 0,0096 | 0 | 1 | 1 |
| 0,15 | 323,15 | 0,1878 | 0,9850 | 0,0150 | 0 | 1 | 1 |
| 0,2 | 323,15 | 0,1829 | 0,9791 | 0,0209 | 0 | 1 | 1 |
| 0,25 | 323,15 | 0,1774 | 0,9726 | 0,0274 | 0 | 1 | 1 |
| 0,3 | 323,15 | 0,1713 | 0,9653 | 0,0347 | 0 | 1 | 1 |
| 0,35 | 323,15 | 0,1642 | 0,9572 | 0,0428 | 0 | 1 | 1 |
| 0,4 | 323,15 | 0,1561 | 0,9480 | 0,0520 | 0 | 1 | 1 |
| 0,45 | 323,15 | 0,1465 | 0,9373 | 0,0627 | 0 | 1 | 1 |
| 0,5 | 323,15 | 0,1350 | 0,9248 | 0,0752 | 0 | 1 | 1 |
| 0,55 | 323,15 | 0,1206 | 0,9097 | 0,0903 | 0 | 1 | 1 |
| 0,6 | 323,15 | 0,1020 | 0,8909 | 0,1091 | 0 | 1 | 1 |
| 0,65 | 323,15 | 0,0765 | 0,8662 | 0,1338 | 0 | 1 | 1 |
| 0,7 | 323,15 | 0,0374 | 0,8311 | 0,1689 | 0 | 1 | 1 |

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

Les résultats obtenus sont présentés sur le graphique suivant.



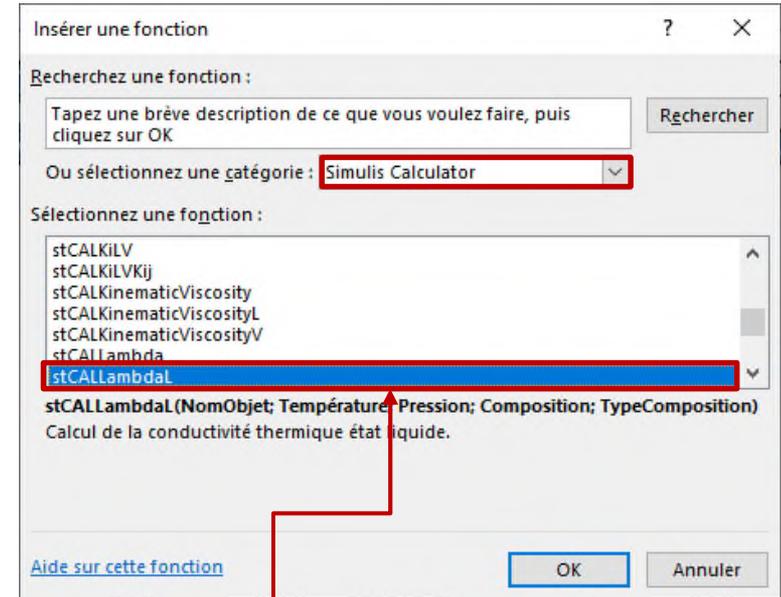
Étape 3 : Calcul des propriétés d'un mélange polymère/solvant

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 | |

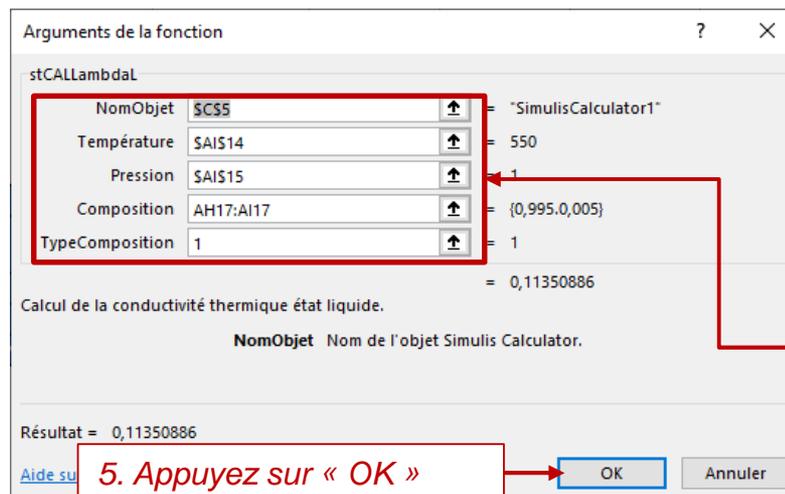
2. Sélectionnez la première ligne du tableau et cliquez sur le bouton permettant d'insérer une fonction dans excel



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



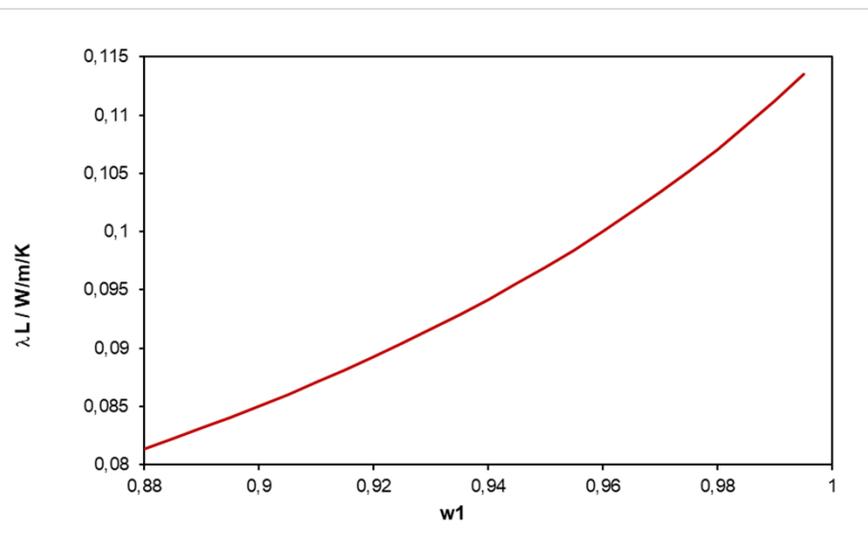
5. Appuyez sur « OK »

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 |

CONSTITUANTS

FICHER

Ouvrir...

Enregistrer sous...

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

Etat physique: **Liquide**

Système: []

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

Valeurs: Fractions Molaire Grandeurs Massique Total: 0 kg

| 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 |

Composition du mélange

Type de résultats: Molaire Massique

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

Calculer toutes les sessions

SYSTÈMES D'UNITÉS (RÉSULTATS)

Pour les conditions de calcul

Pour les propriétés calculées

MODIFICATIONS

Options

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