

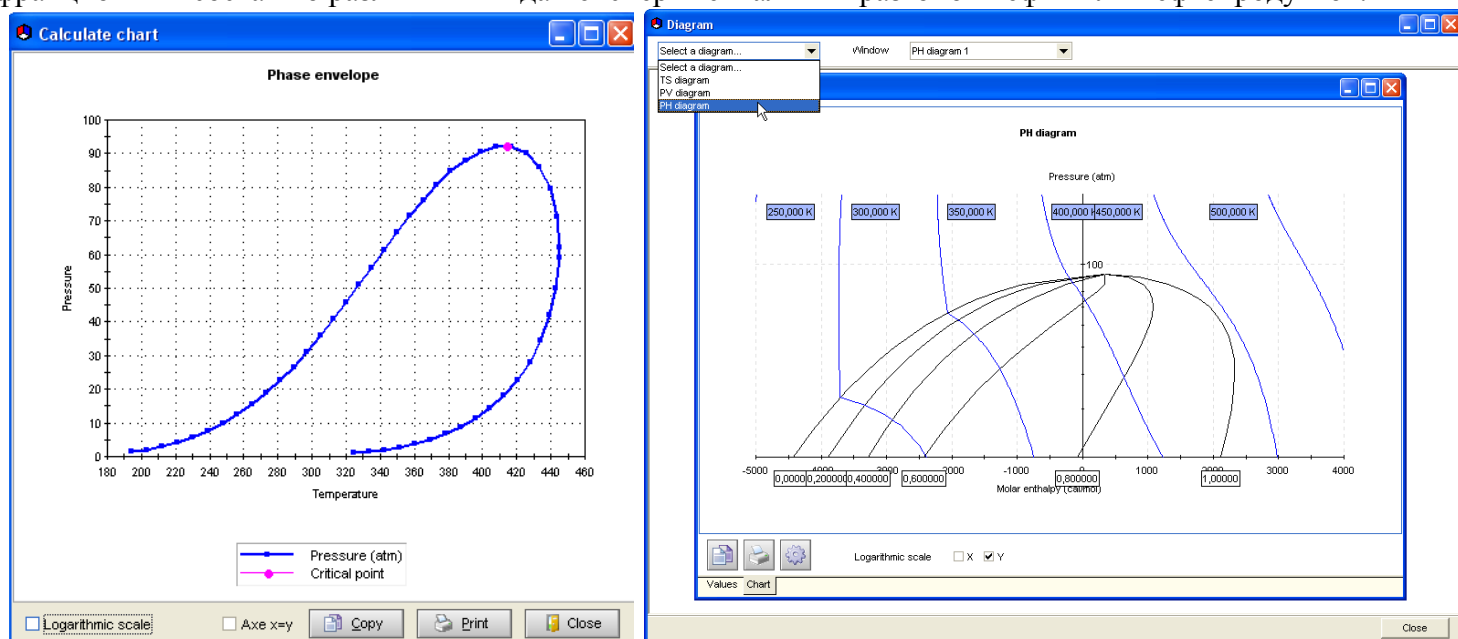


SIMULIS THERMODYNAMICS СИСТЕМА РАСЧЕТА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ

Правильное определение теплофизических свойств продукта и его агрегатного состояния (свойств и состава фаз) является краеугольным камнем любых технологических расчетов – будь то тепловые и гидравлические расчеты трубопроводов, расчеты систем аварийного сброса, моделирование сложных технологических процессов или расчет и выбор различных видов оборудования. Simulis Thermodynamics французской компании ProSim – это мощная современная программная система расчета теплофизических свойств и фазовых равновесий (ТФС и ФР), рассчитывающая широкий круг продуктов на современной методической основе.

Simulis Thermodynamics обеспечивает возможность рассчитать большой набор термодинамических и транспортных свойств продуктов по их мольному или массовому составу: плотность, коэффициент сжимаемости, изобарную и изохорную теплоемкость, внутреннюю энергию, энтальпию, энтропию, скорость звука, коэффициент Джоуля-Томпсона, динамическую и кинематическую вязкость, теплопроводность, коэффициент поверхностного натяжения. При этом одновременно может быть определена и производная рассчитываемого свойства по давлению, температуре или содержанию одного из компонентов. В случае необходимости можно сразу выполнить расчет фазового равновесия, найти составы фаз и определить величину искомого свойства каждой из фаз.

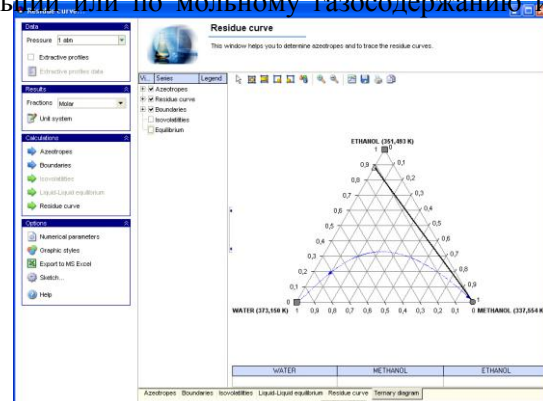
В составе продукта можно задавать нефтяные фракции (так называемые «псевдокомпоненты») по температуре их кипения, относительной плотности (либо плотности в градусах API), молекулярной массе, а также характеристическому фактору Ватсона. При этом программа позволяет автоматически рассчитать фракционный состав по различным видам экспериментальных разгонок нефти или нефтепродуктов.



Simulis Thermodynamics предоставляет пользователю широчайшие возможности решения задач фазового равновесия. Для равновесия пара (или газа) и жидкости система позволяет рассчитать содержание и состав фаз по любым парам термодинамических параметров давления, температуры, мольного объема, энтальпии, энтропии и внутренней энергии продукта, а также по мольной доле отгона и давлению или температуре. Можно рассчитать также давление точки кипения или точки росы по температуре и наоборот. Возможен расчет и вывод таких вспомогательных характеристик, как фугитивность (летучесть) и коэффициенты активности компонентов смеси, коэффициенты равновесия, в том числе и их производных по давлению, температуре или содержанию одного из компонентов. По результатам расчета Simulis Thermodynamics способна самостоятельно строить фазовую диаграмму (границу двухфазной области – так называемый «Envelope») в координатах давления и температуры, а также фазовые диаграммы в координатах температура – энтропия, давление – мольный объем и давление – энтальпия.

Кроме того, система позволяет проводить расчет фазового равновесия двух несмешивающихся жидкостей, определяя по температуре и давлению составы и содержание фаз. Рассчитываются также коэффициенты фазового равновесия и их производные по давлению, температуре или содержанию одного из компонентов. Предусмотрен и расчет фазового равновесия трехфазных систем с одной газовой фазой и двумя несмешивающимися жидкими фазами, весьма распространенных при добыче и транспортировке нефти и газа. Рассчитываются содержание и состав фаз по температуре и давлению, а также по давлению и энтальпии или по мольному газосодержанию и давлению или температуре.

Наконец, вместе с системой поставляется отдельное приложение, решающую такую важную для технолога задачу, как анализ процесса дистилляции тройных (трехкомпонентных) смесей. Это приложение использует топологическую классификацию тернарных диаграмм дистилляционных линий, разработанную российской научной школой и ее последователями. Определяются все азеотропы тройной смеси и их свойства, границы областей диаграммы дистилляции, строится тернарная диаграмма и различные характеризующие ее точки и линии. При этом может учитываться и рассчитываться возможное разделение жидкой фазы на две несмешивающиеся жидкости.



Compound
 Name: PROPANE
 ID: (24265C9-2F0A-49C5-B34A-13099FE12ED4)
 Original ID: 3
 Original location: Simulis\Compounds Files\Common files\Standard 2009

Properties Value

- Identification
 - ALPAC name: PROPANE
 - Specific name: 74-98-6
 - CAS registry number: n-Alkanes
 - Chemical family: C3H8
 - Chemical formula: Set Identifier
 - Intrinsic number (Pro...): 132
 - Synonyms: DIMETHYLME...
 - Compound comments
- Standard
 - UNIFAC modified... [CH3]2 [CH2]1
 - UNIFAC original c... [CH3]2 [CH2]1
 - UNIFAC PSRK ch... [CH3]2 [CH2]1
 - UNIFAC LLE che... [CH3]2 [CH2]1
 - UNIFAC modified... [CH3]2 [CH2]1
 - UNIFAC modified... [CH3]1
 - PPR78 chemical [CH3]2 [CH2]1
 - UNIFAC VTPR ch... sublimation

Search criteria

- Name or synonym
- CAS registry number
- Chemical formula
- Exact formula
- Specific ID
- Advanced

Input field: C2H6

Расчеты по Simulis

Thermodynamics основываются на поставляемых вместе с программой базах данных, включающих в общей сложности более 2000 индивидуальных веществ. Для каждого из них в базе может храниться до 125 опорных констант и до 16 температурных зависимостей основных характеристик, таких как теплоемкость, давление насыщенных паров, теплота парообразования и др. Кроме числовых характеристик, для каждого конкретного вещества содержится его химическая формула, описание

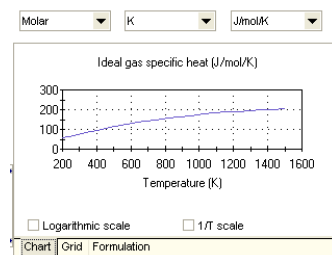
молекулярной структуры для различных групповых моделей (UNIFAC, PPR78, NRTL PR) и даже ее изображение. Базы данных индивидуальных веществ открыты для пользователя и снабжены удобным и наглядным пользовательским интерфейсом для просмотра и редактирования, а также для создания собственных пользовательских баз данных. Для свойств можно просмотреть используемую

Properties Value

- Solid specific heat
- Liquid specific heat
- Ideal gas specific heat
 - Correlation: Equation # 107
 - TMin: 200 K
 - TMax: 1500 K
 - Coef A: 51920,0
 - Coef B: 192450
 - Coef C: 1826,50
 - Coef D: 116800
 - Coef E: 723,600
 - Coef F: 0,00000
- Vapor pressure
 - Correlation: Equation # 101
 - TMin: 65,47 K
 - TMax: 369,83 K
 - Coef A: 59,0780
 - Coef B: -3492,60
 - Coef C: -6,06690
 - Coef D: 1,09190E-005

Equation: $Y = A + B \cdot \left(\frac{C}{T} \right)^2 + D \cdot \left(\frac{E}{T} \right)^2$

Chart tools: TMin: 200 K, TMax: 1500 K, Points: 20



температурно-зависимых корреляцию и графики зависимости от температуры. Более того, редактор баз

Binary interaction parameters

Binary	A	B	C
1-10	238,4	1,9	-0,2395
1-11	238,4	-1,448	0,6395

Main groups: [10] H2O, [14] H2O, [15] H2O, [16] H2O, [17] H2O, [18] H2O, [19] H2O, [20] H2O, [21] H2O, [22] H2O, [23] H2O, [24] CH3OH, [25] CH3OH, [26] CH3OH, [27] CH3OH, [28] CH3OH, [29] CH3OH, [30] CH3OH, [31] CH3OH, [32] CH3OH, [33] CH3OH, [34] CH3OH, [35] CH3OH, [36] CH3OH, [37] CH3OH, [38] CH3OH, [39] CH3OH, [40] CH3OH, [41] CH3OH, [42] CH3OH, [43] CH3OH, [44] CH3OH, [45] CH3OH, [46] CH3OH, [47] CH3OH, [48] CH3OH, [49] CH3OH, [50] CH3OH, [51] CH3OH, [52] CH3OH, [53] CH3OH, [54] CH3OH, [55] CH3OH, [56] CH3OH, [57] CH3OH, [58] CH3OH, [59] CH3OH, [60] CH3OH, [61] CH3OH, [62] CH3OH, [63] CH3OH, [64] CH3OH, [65] CH3OH, [66] CH3OH, [67] CH3OH, [68] CH3OH, [69] CH3OH, [70] CH3OH, [71] CH3OH, [72] CH3OH, [73] CH3OH, [74] CH3OH, [75] CH3OH, [76] CH3OH, [77] CH3OH, [78] CH3OH, [79] CH3OH, [80] CH3OH, [81] CH3OH, [82] CH3OH, [83] CH3OH, [84] CH3OH, [85] CH3OH, [86] CH3OH, [87] CH3OH, [88] CH3OH, [89] CH3OH, [90] CH3OH, [91] CH3OH, [92] CH3OH, [93] CH3OH, [94] CH3OH, [95] CH3OH, [96] CH3OH, [97] CH3OH, [98] CH3OH, [99] CH3OH, [100] CH3OH, [101] CH3OH, [102] CH3OH, [103] CH3OH, [104] CH3OH, [105] CH3OH, [106] CH3OH, [107] CH3OH, [108] CH3OH, [109] CH3OH, [110] CH3OH, [111] CH3OH, [112] CH3OH, [113] CH3OH, [114] CH3OH, [115] CH3OH, [116] CH3OH, [117] CH3OH, [118] CH3OH, [119] CH3OH, [120] CH3OH, [121] CH3OH, [122] CH3OH, [123] CH3OH, [124] CH3OH, [125] CH3OH, [126] CH3OH, [127] CH3OH, [128] CH3OH, [129] CH3OH, [130] CH3OH, [131] CH3OH, [132] CH3OH, [133] CH3OH, [134] CH3OH, [135] CH3OH, [136] CH3OH, [137] CH3OH, [138] CH3OH, [139] CH3OH, [140] CH3OH, [141] CH3OH, [142] CH3OH, [143] CH3OH, [144] CH3OH, [145] CH3OH, [146] CH3OH, [147] CH3OH, [148] CH3OH, [149] CH3OH, [150] CH3OH, [151] CH3OH, [152] CH3OH, [153] CH3OH, [154] CH3OH, [155] CH3OH, [156] CH3OH, [157] CH3OH, [158] CH3OH, [159] CH3OH, [160] CH3OH, [161] CH3OH, [162] CH3OH, [163] CH3OH, [164] CH3OH, [165] CH3OH, [166] CH3OH, [167] CH3OH, [168] CH3OH, [169] CH3OH, [170] CH3OH, [171] CH3OH, [172] CH3OH, [173] CH3OH, [174] CH3OH, [175] CH3OH, [176] CH3OH, [177] CH3OH, [178] CH3OH, [179] CH3OH, [180] CH3OH, [181] CH3OH, [182] CH3OH, [183] CH3OH, [184] CH3OH, [185] CH3OH, [186] CH3OH, [187] CH3OH, [188] CH3OH, [189] CH3OH, [190] CH3OH, [191] CH3OH, [192] CH3OH, [193] CH3OH, [194] CH3OH, [195] CH3OH, [196] CH3OH, [197] CH3OH, [198] CH3OH, [199] CH3OH, [200] CH3OH, [201] CH3OH, [202] CH3OH, [203] CH3OH, [204] CH3OH, [205] CH3OH, [206] CH3OH, [207] CH3OH, [208] CH3OH, [209] CH3OH, [210] CH3OH, [211] CH3OH, [212] CH3OH, [213] CH3OH, [214] CH3OH, [215] CH3OH, [216] CH3OH, [217] CH3OH, [218] CH3OH, [219] CH3OH, [220] CH3OH, [221] CH3OH, [222] CH3OH, [223] CH3OH, [224] CH3OH, [225] CH3OH, [226] CH3OH, [227] CH3OH, [228] CH3OH, [229] CH3OH, [230] CH3OH, [231] CH3OH, [232] CH3OH, [233] CH3OH, [234] CH3OH, [235] CH3OH, [236] CH3OH, [237] CH3OH, [238] CH3OH, [239] CH3OH, [240] CH3OH, [241] CH3OH, [242] CH3OH, [243] CH3OH, [244] CH3OH, [245] CH3OH, [246] CH3OH, [247] CH3OH, [248] CH3OH, [249] CH3OH, [250] CH3OH, [251] CH3OH, [252] CH3OH, [253] CH3OH, [254] CH3OH, [255] CH3OH, [256] CH3OH, [257] CH3OH, [258] CH3OH, [259] CH3OH, [260] CH3OH, [261] CH3OH, [262] CH3OH, [263] CH3OH, [264] CH3OH, [265] CH3OH, [266] CH3OH, [267] CH3OH, [268] CH3OH, [269] CH3OH, [270] CH3OH, [271] CH3OH, [272] CH3OH, [273] CH3OH, [274] CH3OH, [275] CH3OH, [276] CH3OH, [277] CH3OH, [278] CH3OH, [279] CH3OH, [280] CH3OH, [281] CH3OH, [282] CH3OH, [283] CH3OH, [284] CH3OH, [285] CH3OH, [286] CH3OH, [287] CH3OH, [288] CH3OH, [289] CH3OH, [290] CH3OH, [291] CH3OH, [292] CH3OH, [293] CH3OH, [294] CH3OH, [295] CH3OH, [296] CH3OH, [297] CH3OH, [298] CH3OH, [299] CH3OH, [300] CH3OH, [301] CH3OH, [302] CH3OH, [303] CH3OH, [304] CH3OH, [305] CH3OH, [306] CH3OH, [307] CH3OH, [308] CH3OH, [309] CH3OH, [310] CH3OH, [311] CH3OH, [312] CH3OH, [313] CH3OH, [314] CH3OH, [315] CH3OH, [316] CH3OH, [317] CH3OH, [318] CH3OH, [319] CH3OH, [320] CH3OH, [321] CH3OH, [322] CH3OH, [323] CH3OH, [324] CH3OH, [325] CH3OH, [326] CH3OH, [327] CH3OH, [328] CH3OH, [329] CH3OH, [330] CH3OH, [331] CH3OH, [332] CH3OH, [333] CH3OH, [334] CH3OH, [335] CH3OH, [336] CH3OH, [337] CH3OH, [338] CH3OH, [339] CH3OH, [340] CH3OH, [341] CH3OH, [342] CH3OH, [343] CH3OH, [344] CH3OH, [345] CH3OH, [346] CH3OH, [347] CH3OH, [348] CH3OH, [349] CH3OH, [350] CH3OH, [351] CH3OH, [352] CH3OH, [353] CH3OH, [354] CH3OH, [355] CH3OH, [356] CH3OH, [357] CH3OH, [358] CH3OH, [359] CH3OH, [360] CH3OH, [361] CH3OH, [362] CH3OH, [363] CH3OH, [364] CH3OH, [365] CH3OH, [366] CH3OH, [367] CH3OH, [368] CH3OH, [369] CH3OH, [370] CH3OH, [371] CH3OH, [372] CH3OH, [373] CH3OH, [374] CH3OH, [375] CH3OH, [376] CH3OH, [377] CH3OH, [378] CH3OH, [379] CH3OH, [380] CH3OH, [381] CH3OH, [382] CH3OH, [383] CH3OH, [384] CH3OH, [385] CH3OH, [386] CH3OH, [387] CH3OH, [388] CH3OH, [389] CH3OH, [390] CH3OH, [391] CH3OH, [392] CH3OH, [393] CH3OH, [394] CH3OH, [395] CH3OH, [396] CH3OH, [397] CH3OH, [398] CH3OH, [399] CH3OH, [400] CH3OH, [401] CH3OH, [402] CH3OH, [403] CH3OH, [404] CH3OH, [405] CH3OH, [406] CH3OH, [407] CH3OH, [408] CH3OH, [409] CH3OH, [410] CH3OH, [411] CH3OH, [412] CH3OH, [413] CH3OH, [414] CH3OH, [415] CH3OH, [416] CH3OH, [417] CH3OH, [418] CH3OH, [419] CH3OH, [420] CH3OH, [421] CH3OH, [422] CH3OH, [423] CH3OH, [424] CH3OH, [425] CH3OH, [426] CH3OH, [427] CH3OH, [428] CH3OH, [429] CH3OH, [430] CH3OH, [431] CH3OH, [432] CH3OH, [433] CH3OH, [434] CH3OH, [435] CH3OH, [436] CH3OH, [437] CH3OH, [438] CH3OH, [439] CH3OH, [440] CH3OH, [441] CH3OH, [442] CH3OH, [443] CH3OH, [444] CH3OH, [445] CH3OH, [446] CH3OH, [447] CH3OH, [448] CH3OH, [449] CH3OH, [450] CH3OH, [451] CH3OH, [452] CH3OH, [453] CH3OH, [454] CH3OH, [455] CH3OH, [456] CH3OH, [457] CH3OH, [458] CH3OH, [459] CH3OH, [460] CH3OH, [461] CH3OH, [462] CH3OH, [463] CH3OH, [464] CH3OH, [465] CH3OH, [466] CH3OH, [467] CH3OH, [468] CH3OH, [469] CH3OH, [470] CH3OH, [471] CH3OH, [472] CH3OH, [473] CH3OH, [474] CH3OH, [475] CH3OH, [476] CH3OH, [477] CH3OH, [478] CH3OH, [479] CH3OH, [480] CH3OH, [481] CH3OH, [482] CH3OH, [483] CH3OH, [484] CH3OH, [485] CH3OH, [486] CH3OH, [487] CH3OH, [488] CH3OH, [489] CH3OH, [490] CH3OH, [491] CH3OH, [492] CH3OH, [493] CH3OH, [494] CH3OH, [495] CH3OH, [496] CH3OH, [497] CH3OH, [498] CH3OH, [499] CH3OH, [500] CH3OH, [501] CH3OH, [502] CH3OH, [503] CH3OH, [504] CH3OH, [505] CH3OH, [506] CH3OH, [507] CH3OH, [508] CH3OH, [509] CH3OH, [510] CH3OH, [511] CH3OH, [512] CH3OH, [513] CH3OH, [514] CH3OH, [515] CH3OH, [516] CH3OH, [517] CH3OH, [518] CH3OH, [519] CH3OH, [520] CH3OH, [521] CH3OH, [522] CH3OH, [523] CH3OH, [524] CH3OH, [525] CH3OH, [526] CH3OH, [527] CH3OH, [528] CH3OH, [529] CH3OH, [530] CH3OH, [531] CH3OH, [532] CH3OH, [533] CH3OH, [534] CH3OH, [535] CH3OH, [536] CH3OH, [537] CH3OH, [538] CH3OH, [539] CH3OH, [540] CH3OH, [541] CH3OH, [542] CH3OH, [543] CH3OH, [544] CH3OH, [545] CH3OH, [546] CH3OH, [547] CH3OH, [548] CH3OH, [549] CH3OH, [550] CH3OH, [551] CH3OH, [552] CH3OH, [553] CH3OH, [554] CH3OH, [555] CH3OH, [556] CH3OH, [557] CH3OH, [558] CH3OH, [559] CH3OH, [560] CH3OH, [561] CH3OH, [562] CH3OH, [563] CH3OH, [564] CH3OH, [565] CH3OH, [566] CH3OH, [567] CH3OH, [568] CH3OH, [569] CH3OH, [570] CH3OH, [571] CH3OH, [572] CH3OH, [573] CH3OH, [574] CH3OH, [575] CH3OH, [576] CH3OH, [577] CH3OH, [578] CH3OH, [579] CH3OH, [580] CH3OH, [581] CH3OH, [582] CH3OH, [583] CH3OH, [584] CH3OH, [585] CH3OH, [586] CH3OH, [587] CH3OH, [588] CH3OH, [589] CH3OH, [590] CH3OH, [591] CH3OH, [592] CH3OH, [593] CH3OH, [594] CH3OH, [595] CH3OH, [596] CH3OH, [597] CH3OH, [598] CH3OH, [599] CH3OH, [600] CH3OH, [601] CH3OH, [602] CH3OH, [603] CH3OH, [604] CH3OH, [605] CH3OH, [606] CH3OH, [607] CH3OH, [608] CH3OH, [609] CH3OH, [610] CH3OH, [611] CH3OH, [612] CH3OH, [613] CH3OH, [614] CH3OH, [615] CH3OH, [616] CH3OH, [617] CH3OH, [618] CH3OH, [619] CH3OH, [620] CH3OH, [621] CH3OH, [622] CH3OH, [623] CH3OH, [624] CH3OH, [625] CH3OH, [626] CH3OH, [627] CH3OH, [628] CH3OH, [629] CH3OH, [630] CH3OH, [631] CH3OH, [632] CH3OH, [633] CH3OH, [634] CH3OH, [635] CH3OH, [636] CH3OH, [637] CH3OH, [638] CH3OH, [639] CH3OH, [640] CH3OH, [641] CH3OH, [642] CH3OH, [643] CH3OH, [644] CH3OH, [645] CH3OH, [646] CH3OH, [647] CH3OH, [648] CH3OH, [649] CH3OH, [650] CH3OH, [651] CH3OH, [652] CH3OH, [653] CH3OH, [654] CH3OH, [655] CH3OH, [656] CH3OH, [657] CH3OH, [658] CH3OH, [659] CH3OH, [660] CH3OH, [661] CH3OH, [662] CH3OH, [663] CH3OH, [664] CH3OH, [665] CH3OH, [666] CH3OH, [667] CH3OH, [668] CH3OH, [669] CH3OH, [670] CH3OH, [671] CH3OH, [672] CH3OH, [673] CH3OH, [674] CH3OH, [675] CH3OH, [676] CH3OH, [677] CH3OH, [678] CH3OH, [679] CH3OH, [680] CH3OH, [681] CH3OH, [682] CH3OH, [683] CH3OH, [684] CH3OH, [685] CH3OH, [686] CH3OH, [687] CH3OH, [688] CH3OH, [689] CH3OH, [690] CH3OH, [691] CH3OH, [692] CH3OH, [693] CH3OH, [694] CH3OH, [695] CH3OH, [696] CH3OH, [697] CH3OH, [698] CH3OH, [699] CH3OH, [700] CH3OH, [701] CH3OH, [702] CH3OH, [703] CH3OH, [704] CH3OH, [705] CH3OH, [706] CH3OH, [707] CH3OH, [708] CH3OH, [709] CH3OH, [710] CH3OH, [711] CH3OH, [712] CH3OH, [713] CH3OH, [714] CH3OH, [715] CH3OH, [716] CH3OH, [717] CH3OH, [718] CH3OH, [719] CH3OH, [720] CH3OH, [721] CH3OH, [722] CH3OH, [723] CH3OH, [724] CH3OH, [725] CH3OH, [726] CH3OH, [727] CH3OH, [728] CH3OH, [729] CH3OH, [730] CH3OH, [731] CH3OH, [732] CH3OH, [733] CH3OH, [734] CH3OH, [735] CH3OH, [736] CH3OH, [737] CH3OH, [738] CH3OH, [739] CH3OH, [740] CH3OH, [741] CH3OH, [742] CH3OH, [743] CH3OH, [744] CH3OH, [745] CH3OH, [746] CH3OH, [747] CH3OH, [748] CH3OH, [749] CH3OH, [750] CH3OH, [751] CH3OH, [752] CH3OH, [753] CH3OH, [754] CH3OH, [755] CH3OH, [756] CH3OH, [757] CH3OH, [758] CH3OH, [759] CH3OH, [760] CH3OH, [761] CH3OH, [762] CH3OH, [763] CH3OH, [764] CH3OH, [765] CH3OH, [766] CH3OH, [767] CH3OH, [768] CH3OH, [769] CH3OH, [770] CH3OH, [771] CH3OH, [772] CH3OH, [773] CH3OH, [774] CH3OH, [775] CH3OH, [776] CH3OH, [777] CH3OH, [778] CH3OH, [779] CH3OH, [780] CH3OH, [781] CH3OH, [782] CH3OH, [783] CH3OH, [784] CH3OH, [785] CH3OH, [786] CH3OH, [787] CH3OH, [788] CH3OH, [789] CH3OH, [790] CH3OH, [791] CH3OH, [792] CH3OH, [793] CH3OH, [794] CH3OH, [795] CH3OH, [796] CH3OH, [797] CH3OH, [798] CH3OH, [799] CH3OH, [800] CH3OH, [801] CH3OH, [802] CH3OH, [803] CH3OH, [804] CH3OH, [805] CH3OH, [806] CH3OH, [807] CH3OH, [808] CH3OH, [809] CH3OH, [810] CH3OH, [811] CH3OH, [812] CH3OH, [813] CH3OH, [814] CH3OH, [815] CH3OH, [816] CH3OH, [817] CH3OH, [818] CH3OH, [819] CH3OH, [820] CH3OH, [821] CH3OH, [822] CH3OH, [823] CH3OH, [824] CH3OH, [825] CH3OH, [826] CH3OH, [827] CH3OH, [828] CH3OH, [829] CH3OH, [830] CH3OH, [831] CH3OH, [832] CH3OH, [833] CH3OH, [834] CH3OH, [835] CH3OH, [836] CH3OH, [837] CH3OH, [838] CH3OH, [839] CH3OH, [840] CH3OH, [841] CH3OH, [842] CH3OH, [843] CH3OH, [844] CH3OH, [845] CH3OH, [846] CH3OH, [847] CH3OH, [848] CH3OH, [849] CH3OH, [850] CH3OH, [851] CH3OH, [852] CH3OH, [853] CH3OH, [854] CH3OH, [855] CH3OH, [856] CH3OH, [857] CH3OH, [858] CH3OH, [859] CH3OH, [860] CH3OH, [861] CH3OH, [862] CH3OH, [863] CH3OH, [864] CH3OH, [865] CH3OH, [866] CH3OH, [867] CH3OH, [868] CH3OH, [869] CH3OH, [870] CH3OH, [871] CH3OH, [872] CH3OH, [873] CH3OH, [874] CH3OH, [875] CH3OH, [876] CH3OH, [877] CH3OH, [878] CH3OH, [879] CH3OH, [880] CH3OH, [881] CH3OH, [882] CH3OH, [883] CH3OH, [884] CH3OH, [885] CH3OH, [886] CH3OH, [887] CH3OH, [888] CH3OH, [889] CH3OH, [890] CH3OH, [891] CH3OH, [892] CH3OH, [893] CH3OH, [894] CH3OH, [895] CH3OH, [896] CH3OH, [897] CH3OH, [898] CH3OH, [899] CH3OH, [900] CH3OH, [901] CH3OH, [902] CH3OH, [903] CH3OH, [904] CH3OH, [905] CH3OH, [906] CH3OH, [907] CH3OH, [908] CH3OH, [909] CH3OH, [910] CH3OH, [911] CH3OH, [912] CH3OH, [913] CH3OH, [914] CH3OH, [915] CH3OH, [916] CH3OH, [917] CH3OH, [918] CH3OH, [919] CH3OH, [920] CH3OH, [921] CH3OH, [922] CH3OH, [923] CH3OH, [924] CH3OH, [925] CH3OH, [926] CH3OH, [927] CH3OH, [928] CH3OH, [929] CH3OH, [930] CH3OH, [931] CH3OH, [932] CH3OH, [933] CH3OH, [934] CH3OH, [935] CH3OH, [936] CH3OH, [937] CH3OH, [938] CH3OH, [939] CH3OH, [940] CH3OH, [941] CH3OH, [942] CH3OH, [943] CH3OH, [944] CH3OH, [945] CH3OH, [946] CH3OH, [947] CH3OH, [948] CH3OH, [949] CH3OH, [950] CH3OH, [951] CH3OH, [952] CH3OH, [953] CH3OH, [954] CH3OH, [955] CH3OH, [956] CH3OH, [957] CH3OH, [958] CH3OH, [959] CH3OH, [960] CH3OH, [961] CH3OH, [962] CH3OH, [963] CH3OH, [964] CH3OH, [965] CH3OH, [966] CH3OH, [967] CH3OH, [968] CH3OH, [969] CH3OH, [970] CH3OH, [971] CH3OH, [972] CH3OH, [973] CH3OH, [974] CH3OH, [975] CH3OH, [976] CH3OH, [977] CH3OH, [978] CH3OH, [979] CH3OH, [980] CH3OH, [981] CH3OH, [982] CH3OH, [983] CH3OH, [984] CH3OH, [985] CH3OH, [986] CH3OH, [987] CH3OH, [988] CH3OH, [989] CH3OH, [990] CH3OH, [991] CH3OH, [992] CH3OH, [993] CH3OH, [994] CH3OH, [995] CH3OH, [996] CH3OH, [997] CH3OH, [998] CH3OH, [999] CH3OH, [1000] CH3OH, [1001] CH3OH, [1002] CH3OH, [1003] CH3OH, [1004] CH3OH, [1005] CH3OH, [1006] CH3OH, [1007] CH3OH, [1008] CH3OH, [1009] CH3OH, [1010] CH3OH, [1011] CH3OH, [1012] CH3OH, [1013] CH3OH, [1014] CH3OH, [1015] CH3OH, [1016] CH3OH, [1017] CH3OH, [1018] CH3OH, [1019] CH3OH, [1020] CH3OH, [1021] CH3OH, [1022] CH3OH, [1023] CH3OH, [1024] CH3OH, [1025] CH3OH, [1026] CH3OH, [1027] CH3OH, [1028] CH3OH, [1029] CH3OH, [1030] CH3OH, [1031] CH3OH, [1032] CH3OH, [1033] CH3OH, [1034] CH3OH, [1035] CH3OH, [1036] CH3OH, [1037] CH3OH, [1038] CH3OH, [1039] CH3OH, [1040] CH3OH, [1041] CH3OH, [1042] CH3OH, [1043] CH3OH, [1044] CH3OH, [1045] CH3OH, [1046] CH3OH, [1047] CH3OH, [1048] CH3OH, [1049] CH3OH, [1050] CH3OH, [1051] CH3OH, [1052] CH3OH, [1053] CH3OH, [1054] CH3OH, [1055] CH3OH, [1056] CH3OH, [1057] CH3OH, [1058] CH3OH, [1059] CH3OH, [1060] CH3OH, [1061] CH3OH, [1062] CH3OH, [1063] CH3OH, [1064] CH3OH, [1065] CH3OH, [1066] CH3OH, [1067] CH3OH, [1068] CH3OH, [1069] CH3OH, [1070] CH3OH, [1071] CH3OH, [1072] CH3OH, [1073] CH3OH, [1074] CH3OH, [1075] CH3OH, [1076] CH3OH, [1077] CH3OH, [1078] CH3OH, [1079] CH3OH, [1080] CH3OH, [1081] CH3OH, [1082] CH3OH, [1083] CH3OH, [1084] CH3OH, [1085] CH3OH, [1086] CH3OH, [1087] CH3OH, [1088] CH3OH, [1089] CH3OH, [1090] CH3OH, [1091] CH3OH, [1092] CH3OH, [1093] CH3OH, [1094] CH3OH, [1095] CH3OH, [1096] CH3OH, [1097] CH3OH, [1098] CH3OH, [1099] CH3OH, [1100] CH3OH, [1101] CH3OH, [1102] CH3OH, [1103] CH3OH, [1104] CH3OH, [1105] CH3OH, [1106] CH3OH, [1107] CH3OH, [1108] CH3OH, [1109] CH3OH, [1110] CH3OH, [1111] CH3OH, [1112] CH3OH, [1113] CH3OH, [1114] CH3OH, [1115] CH3OH, [1116] CH3OH, [1117] CH3OH, [1118] CH3OH, [1119] CH3OH, [1120] CH3OH, [1121] CH3OH, [1122] CH3OH, [1123] CH3OH, [1124] CH3OH, [1125] CH3OH, [1126] CH3

Предусмотрена также возможность предсказания коэффициентов бинарного взаимодействия для методов расчета коэффициентов активности NRTL, Wilson и UNIQUAC на основе групповых моделей.

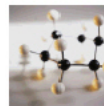
Описанные выше широкие возможности Simulis Thermodynamics по расчету ТФС и ФР опираются на надежную и современную методическую основу. Система предоставляет пользователю большой набор расчетных методов, из которых тот сам может выбрать наиболее подходящие для расчета ТФС и ФР индивидуальных продуктов и их смесей, а также нефтяных фракций. Документация и справка по системе



Calculator

This window helps you to define the context of your thermodynamic calculator

Name SRK-MHV2-UNIFAC	Thermodynamic model Using Equation of state
Profile SRK-MHV2-UNIFAC	Mixture rules MHV2 type
Thermodynamic assistant	Liquid molar volume Ideal mixture
Thermodynamic help	Equation of state Soave-Redlich-Kwong (SRK)
Use a specific model for pure water	Activity coefficient model UNIFAC modified (Dortmund) 1993
Advanced	Pure liquid fugacity standard state Standard
Water-hydrocarbons model	Transport properties Classic methods
Sol A 6,25043	User-defined thermodynamic model None
Sol B 4015,30	Enthalpy calculation H [*] =0, ideal gas, 25°C, 1 atm



Petroleum cut

Use this window to create pseudo-compounds for a petroleum cut.

Load... Save as...

Data Models

Select the models used to calculate the properties

Molecular weight :	TMU
Critical temperature :	TMU
Critical pressure :	TMU
Critical molar volume :	TMU
Pitzer acentric factor :	Edminster
Ideal gas heat capacity :	API Data Books
Heat of vaporization :	Kistiakowski

содержат соответствующие рекомендации; кроме того, консультации по выбору методов являются частью услуг технической поддержки MUTS (Maintenance, Update and Technical Support Service), предоставляемых разработчиком.

Транспортные свойства смесей (вязкость, теплопроводность, поверхностное натяжение) рассчитываются по классическим правилам смешения, а также по пользующимся признанием методикам Dien-Stiel и Ely-Hanley (TRAPP). Специальные методики используются для нефтепродуктов, а также для смесей углеводородов с водой.

Расчет термодинамических свойств и фазовых равновесий базируется на уравнениях состояния продукта, связывающих его давление, температуру и мольный объем. В качестве таковых пользователь Simulis Thermodynamics имеет возможность применить разнообразные общепризнанные уравнения, среди которых:

- кубические уравнения состояния Редлиха-Квонга RK (Redlich-Kwong), Соаве-Редлиха-Квонга SRK (Soave-Redlich-Kwong), Пенга-Робинсона PR (Peng-Robinson), модифицированное Пенга-Робинсона PR78 (Peng-Robinson 1978);
- уточненные модификации уравнений SRK, PR и PR78, предложенные Boston и Mathias (уравнения SRKBM, PRBM, PR78BM); уточненная модификация уравнения SRK, предложенная Mathias и Copeman; специальная модификация уравнения SRK, предложенная Kabadi и Danner и усовершенствованная Twu и Bluck (SRK KD88) для смесей воды и углеводородов;
- усовершенствованные уравнения состояния на основе широко известного уравнения Бенедикта-Вебба-Рубина (Benedict-Webb-Rubin) – уравнение LK (Lee-Kesler), уравнение LKP (Lee-Kesler-Plocker), уравнение BWRS (Benedict-Webb-Rubin-Starling-Nishiumi).

Для смесей применяются классические правила смешения, в которых параметры уравнений могут быть определены по данным входящих в смесь индивидуальных компонент и (для неидеальных смесей и уравнений SRK, PR, PR78, SRKBM, PRBM, PR78BM, LKP, BWRS) коэффициентам бинарного взаимодействия компонент. Последние определяются по экспериментальным данным и задаются пользователем или берутся из базы данных системы.

Для решения задач ФР смесей с сильно неидеальным поведением, содержащими полярные или взаимодействующие компоненты, Simulis Thermodynamics предлагает также хорошо зарекомендовавший себя метод, основанный на использовании при расчете термодинамических характеристик жидкой фазы так называемых коэффициентов активности компонент, характеризующих отклонение поведения смеси от идеального. Для расчета коэффициентов активности программа позволяет применять различные хорошо зарекомендовавшие себя корреляции:

- уравнение Маргулиса (Margules);
- уравнения регулярной модели Скотчарда-Гильдебранда (Scatchard-Hildebrand);
- модель Вильсона (Wilson) и ее модификация DECHEMA;
- модель двух несмешивающихся жидкостей NRTL (Non Random Two Liquids);
- модель UNIQUAC (UNIversal QUAsi Chemical).

В последние годы активное развитие получили так называемые групповые модели (или методы групповых составляющих), позволяющие рассчитать параметры бинарного взаимодействия или коэффициенты активности по характеристикам и взаимодействию различных структурных групп в молекулах индивидуальных веществ. Это позволяет рассчитывать ФР для широкого круга продуктов без необходимости привлечения дополнительных экспериментальных данных.

Стремление совместить преимущества обоих подходов на основе уравнений состояния и коэффициентов активности вызвало к жизни так называемые комплексные правила смешения, впервые предложенные Гуроном (Huron) и Видалом (Vidal) в 1979 году и в дальнейшем усовершенствованные Михельсеном (Michelsen) и другими исследователями. Данные правила, применимые для кубических уравнений состояния, позволяют рассчитывать параметры последних для смесей через их избыточную свободную энергию при нулевом или атмосферном давлении; которая, в свою очередь, определяется через модели коэффициентов активности. Тем самым обеспечивается возможность расчета ФР сильно неидеальных смесей с полярными компонентами в значительно более широком диапазоне давлений и температур.

Simulis Thermodynamics предлагает пользователю целый набор готовых к применению групповых моделей и комплексных правил смешения, которые могут быть использованы как самостоятельно, так и (наиболее эффективно!) совместно. Прежде всего, это различные варианты групповой модели UNIFAC (The UNiversal Functional Activity Coefficient method), предложенной в 1975 году Фреденслундом (Fredenslund), Джонсом (Jones) и Праусницем (Prausnitz) и активно развиваемой многими исследователями, в том числе в рамках консорциума UNIFAC. Simulis Thermodynamics поддерживает как оригинальный вариант UNIFAC, так и его усовершенствованные модификации, более точно учитывающие зависимость коэффициентов активности от температуры – Modified Dortmund, Modified Lyngby (Larsen), PSRK, – а также вариант UNIFAC LLE, настроенный на расчет ФР жидкость-жидкость.

Групповые модели UNIFAC могут использоваться как самостоятельно, так и для предсказания коэффициентов бинарного взаимодействия методов расчета коэффициентов активности NRTL, Wilson и UNIQUAC. Опыт показывает также эффективность их применения в сочетании с комплексными правилами смешения MHV1, MHV2 и PSRK. Правило MHV2 (Modified Huron-Vidal) является усовершенствованным вариантом MHV1 и рекомендуется к совместному использованию с групповыми моделями Modified Lyngby (Larsen) или Modified Dortmund. Правило PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong) разработано для применения совместно с моделью UNIFAC PSRK; считается, что оно лучше работает при высоких давлениях и может распространяться на более широкий круг продуктов, в том числе – на смеси с компонентами при температуре выше критической. В качестве уравнения состояния используется SRK с модификацией Mathias и Copeman.

Для более точного расчета ФР водно-углеводородно-гликольных смесей в системе реализована разработанная Neau групповая модель NRTL-PR, с соответствующим комплексным правилом смешения уравнения состояния PR78.

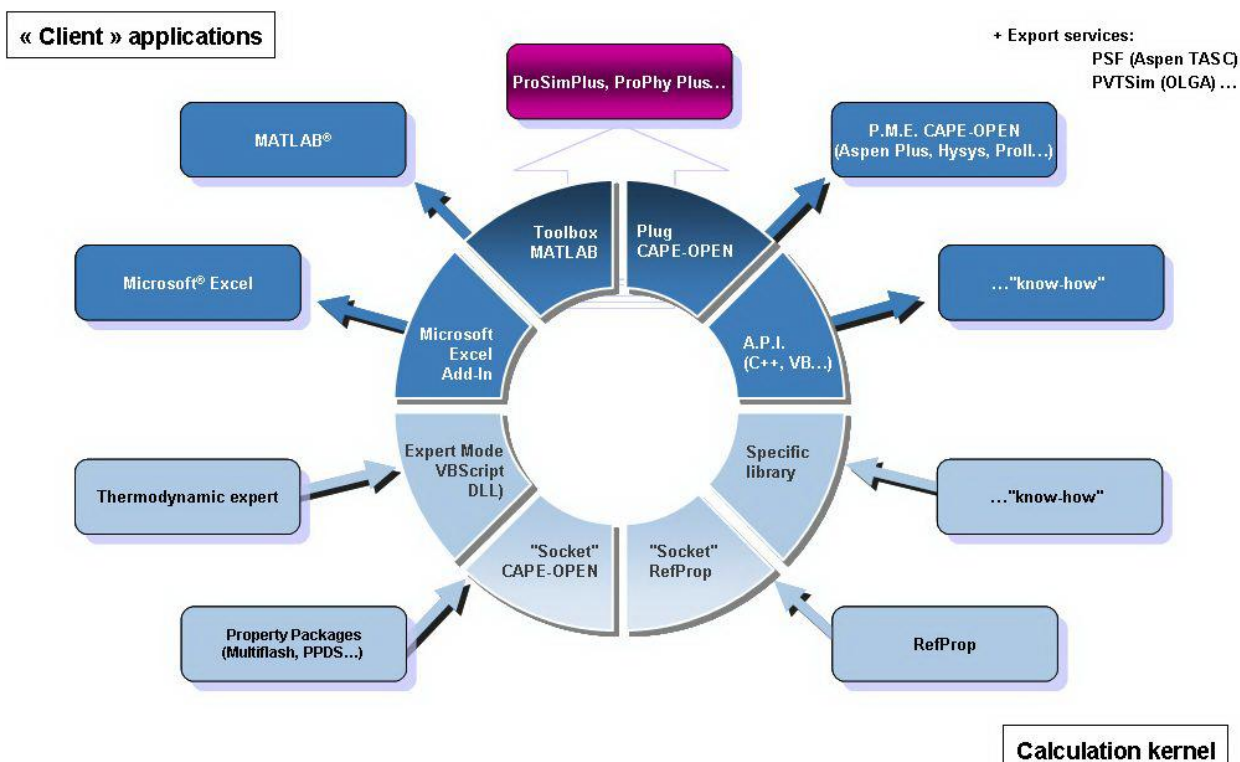
Simulis Thermodynamics включает также групповую модель PPR78 (Predictive Peng-Robinson 1978), позволяющую рассчитывать коэффициенты бинарного взаимодействия для уравнения состояния PR78. Данная модель, предложенная в 2004 и активно развиваемая в последние годы, обеспечивает возможность рассчитывать смеси предельных, ароматических и циклических углеводородов с углекислым газом, азотом и сероводородом.

Наряду с описанными выше термодинамическими моделями общего назначения Simulis Thermodynamics включает также набор моделей для более точного расчета тех или иных специальных групп продуктов, в том числе:

- воды и водяного пара;
- смесей углеводородов с водой (модели Chao-Seader и Grayson-Streed);
- растворов электролитов, в том числе водных растворов солей, кислот и щелочей;
- водных растворов сильных кислот (соляной, азотной, серной, плавиковой, бромоводородной, йодоводородной);
- смесей формальдегидов с водой и метанолом;
- криогенных продуктов (включая жидкие водород, гелий, кислород, азот и метан);
- смесей водорода, дейтерия и трития.

Таким образом, Simulis Thermodynamics базируется на надежной и современной методической базе, позволяющей с достаточной для практических целей точностью рассчитывать широчайший круг продуктов.

Богатство вычислительных возможностей и мощная методическая основа сочетаются в Simulis Thermodynamics с удивительной простотой и гибкостью применения и интеграции.



Система поставляется не в виде самостоятельного EXE-модуля, а как набор COM-компонент, легко встраиваемых в программы потенциального пользователя. В частности, конечные пользователи-технологи одним нажатием кнопки могут встроить вызов Simulis Thermodynamics в свои расчеты с использованием MS Excel или MATLAB. С системой поставляется также соответствующее API, позволяющее вызывать функции и сервисы системы из «любительских» и профессиональных

G	H	I	J	K	L	M
			ETHANE	n-HEPTANE		
		Molar fractions	0,2	0,8		
		Tc	527,4758524 K			
		Pc	3823439,46 Pa			
T_x	369,8756					
Cp	63,95982					
Cv	52,94238					
Z	0,936978					
Cp/Cv	=					
k	291,8015					
Ro	396,28	dp/ro	0,00			
	377,82		25,84			
	360,29		27,10			
	343,63		28,41			
	327,78		29,79			
	312,67		31,23			
	298,26		32,74			
	284,51		34,32			
	271,37		35,98			
	258,79		37,72			
	246,76		39,56			
	235,23		41,49			
	224,18		43,53			

Master of Functions dialog box showing search for 'Gamma (Cp/Cv) calculation' function.

Calculation service

This window helps you to define the context of your calculations

Type of calculation: ThermoPhysical properties Session name: New session

Conditions	Pressure	Temperature	n-BUTANE	n-PENTANE	Vapor ratio	Density	Molar density
1 atm	298,15 K	0,00000	1,00000	0,00000	0,00000	621,73 kg/m ³	0,00861734 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,100000	0,900000	0,00000	0,00000	617,439 kg/m ³	0,00872753 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,200000	0,800000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,300000	0,700000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,400000	0,600000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,500000	0,500000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,600000	0,400000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,700000	0,300000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,800000	0,200000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	0,900000	0,100000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
1 atm	298,15 K	1,000000	0,000000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,00000	1,000000	0,00000	0,00000	621,73 kg/m ³	0,00861734 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,100000	0,900000	0,00000	0,00000	617,439 kg/m ³	0,00872753 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,200000	0,800000	0,00000	0,00000	613,304 kg/m ³	0,00883337 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,300000	0,700000	0,00000	0,00000	608,517 kg/m ³	0,00895658 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,400000	0,600000	0,00000	0,00000	603,879 kg/m ³	0,00907568 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,500000	0,500000	0,00000	0,00000	599,115 kg/m ³	0,00919798 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,600000	0,400000	0,00000	0,00000	594,221 kg/m ³	0,00932363 mol/cm ³
2 atm	298,15 K	0,700000	0,300000	0,00000	0,00000	589,192 kg/m ³	0,00945276 mol/cm ³

программ практически на любых языках программирования, включая Visual Basic, C++, C#, Fortran, Delphi и т.д. Разумеется, Simulis полностью интегрирован с другими программными продуктами самой ProSim, такими как система моделирования технологических процессов ProSimPlus и другие.

При этом пользователь может гибко выбирать, какого уровня сервис ему нужен в каждом конкретном случае: от полного вызова калькулятора ТФС и ФР с мощным и удобным встроенным пользовательским интерфейсом, включающим выбор и настройку используемых пользователем единиц измерения, создание и просмотр результатов расчета в виде таблиц по различным значениям исходных параметров, построение графиков изменения ТФС и фазовых диаграмм, до вызова конкретной функции расчета отдельного

свойства или расчета ФР. В состав системы входит набор примеров, демонстрирующих использование Simulis Thermodynamics в процессе выполнения в среде MS Excel расчетов насосов, теплообменников, систем аварийного сброса и др.

Разработанная НТП «Трубопровод» программа гидравлических и тепловых расчетов трубопроводов «Гидросистема» интегрирована с Simulis Thermodynamics и может использовать ее возможности в процессе расчета как однофазных, так и многофазных потоков. В ближайшее время будет обеспечена аналогичная интеграция также в нашей программе расчета систем аварийного сброса «Предклапан».

Пользователь может не только вызвать Simulis из своих программ, но и дополнить его собственными специальными модулями и алгоритмами, которые будут вызываться системой в процессе расчета и обработки результатов (так называемый режим «Expert mode»). Простые функции могут быть написаны на Visual Basic во встроенном интерпретаторе, более сложные можно подключить как самостоятельные DLL-библиотеки, написанные на C++, Fortran или других языках программирования, при этом по-прежнему сохраняя возможность вызова нужных программисту функций Simulis. Примером такой интеграции может быть использование Simulis совместно с программой расчета ТФС и ФР хладагентов REFPROP (<http://www.nist.gov/srd/nist23.cfm>) Национального института стандартов и технологий США.

Simulis Thermodynamics поставляется с рядом уже встроенных возможностей экспорта таблиц результатов расчета для использования их в других программах. Поддерживается экспорт в MS Excel, в программу расчета многофазных течений в трубопроводах OLGA, а также в программу расчета и проектирования кожухотрубчатых теплообменников Aspen Shell & Tube Exchanger (Aspen TASC+).

Важным преимуществом Simulis Thermodynamics является поддержка им стандарта CAPE Open Thermo (см. <http://www.colan.org>), причем двухсторонняя – как в качестве провайдера расчетов ТФС и ФР (Thermo Plug), так и в качестве вызывающей их программы (Thermo Socket). Это означает, что Simulis Thermodynamics напрямую, без всякого дополнительного программирования, может быть вызван для

расчета ТФС и ФР из любых совместимых со стандартом CAPE Open Thermo Socket программ, и сам он может вызывать любые совместимые с CAPE Open Thermo Plug системы расчета ТФС и ФР. Такая возможность уже протестирована разработчиком для систем моделирования технологических процессов Aspen Plus, Aspen HYSYS, PRO/II, UNISIM, системы расчета и проектирования теплообменников HTRI, систем расчета ТФС и ФР Aspen Properties, Infochem Multiflash, PPDS и др. Помимо прочего, это позволяет НТП «Трубопровод», недавно ставшему ассоциированным членом CO-LaN, обеспечить доступ пользователям программ «Гидросистема» и «Предклапан» через Simulis Thermodynamics к расчетным возможностям не только самой Simulis, но и совместимых с ним по стандарту CAPE Open Thermo других систем расчета ТФС и ФР (Aspen Properties, Infochem Multiflash, PPDS и др.).

Система Simulis Thermodynamics может быть использована по весьма гибкой схеме лицензирования. Можно приобрести временные и постоянные, локальные и сетевые лицензии, в том числе с возможностью их временного изъятия из пула сетевых лицензий для работы дома и в командировке. При этом стоимость находится на уровне программного обеспечения НТП «Трубопровод», что позволяет формировать для клиентов выгодные по соотношению цены и возможностей интегрированные решения.

Разработчик системы фирма ProSim – основанная в 1989 году независимая компания со штаб-квартирой в Тулузе (Франция). Она разрабатывает самое современное программное обеспечение для моделирования и оптимизации технологических процессов. Решения ProSim применяются в химической, нефтеперерабатывающей и газовой промышленности, а также в фармацевтической, пищевой и энергетической отраслях. Специалисты ProSim имеют огромный опыт работы в широком круге областей, среди которых – термодинамика, моделирование физико-химических явлений, моделирование технологических процессов, энергетическая интеграция, методы оптимизации, численные методы, архитектура программного обеспечения и графический интерфейс пользователя. ProSim осуществляет свою деятельность в 63 странах по всему миру, сотрудничая с более чем 720 клиентами, в том числе – с крупнейшими мировыми промышленными компаниями.

