

# **Simulis<sup>®</sup> Thermodynamics**

**Serveur de calcul de propriétés physico-chimiques des fluides**

**LMCS'2009**  
**Logiciels pour la Modélisation et le Calcul Scientifique**  
**3 Décembre 2009**  
**La Défense (Pôle Léonard de Vinci)**

---

**Stéphane Déchelotte, Olivier Baudouin, Alain Vacher**

**ProSim SA - Stratège Bâtiment A, BP 27210, F-31672 LABEGE Cedex, France**

**[www.prosim.net](http://www.prosim.net)**

**[Stephane.Dechelotte@prosim.net](mailto:Stephane.Dechelotte@prosim.net), [Olivier.Baudouin@prosim.net](mailto:Olivier.Baudouin@prosim.net), [Alain.Vacher@prosim.net](mailto:Alain.Vacher@prosim.net)**

---

## **Résumé**

Simulis Thermodynamics est le nom du package thermodynamique récemment proposé par ProSim. Reposant sur une architecture orientée composant et s'appuyant sur le middleware COM/DCOM de Microsoft<sup>®</sup>, Simulis Thermodynamics est un serveur thermodynamique permettant de modéliser tout type de propriétés physico-chimiques des fluides (transport, thermodynamique, compressibilité, etc...) ainsi que de calculer les équilibres entre phases (liquide-vapeur, liquide-liquide, liquide-liquide-vapeur) de corps purs ou de mélanges en fonction de leur température, pression et composition. Pour ce qui est des propriétés de corps-purs, Simulis Thermodynamics s'appuie sur la base de données DIPPR 801 (AIChE database) qui est le standard international en la matière. Basé sur la bibliothèque thermodynamique traditionnelle de ProSim, Simulis Thermodynamics hérite de l'ensemble de ses codes de calculs et profite ainsi de nombreuses années de validation aboutissant aujourd'hui à un haut niveau de maturité, fiabilité et robustesse.

Les concepts d'interopérabilité, intégration et réutilisabilité ont guidé le développement de ce composant logiciel. Simulis Thermodynamics met à la disposition de toute personne de l'industrie, de l'ingénierie ou de la recherche des calculs de propriétés physico-chimiques de qualité. Ces calculs peuvent être intégrés dans toute application de portée plus large (simulation d'équipements, modélisation de systèmes, etc.) traitant de fluides rencontrés en particulier dans les domaines de la chimie, du pétrole, du gaz ou de l'énergie.

La présentation s'attachera à montrer comment, grâce à son approche orientée composant, Simulis Thermodynamics s'intègre très facilement dans n'importe quelle application. La version standard de Simulis Thermodynamics est fournie sous forme de macro complémentaire ("add-in") dans Microsoft<sup>®</sup> Excel ou de boîte à outils ("toolbox") dans MATLAB<sup>®</sup>, permettant d'effectuer simplement des calculs thermodynamiques complets dans ces deux environnements.

Parallèlement, la possibilité d'accueillir des codes "utilisateurs" sous forme de DLL en respectant une syntaxe standardisée ou sous forme de VBScript (Visual Basic Script) directement codé à partir de l'interface de Simulis Thermodynamics, sera aussi mis en avant dans la présentation.

Enfin, un autre atout de Simulis Thermodynamics sera présenté, il s'agit de sa totale compatibilité avec le standard CAPE-OPEN ([www.colan.org](http://www.colan.org)). En effet, Simulis Thermodynamics offre une "socket thermodynamique CAPE-OPEN", c'est à dire la possibilité d'utiliser une thermodynamique externe (Property Package CAPE-OPEN). De plus, Simulis Thermodynamics offre également le "plug thermodynamique CAPE-OPEN" en permettant de générer facilement des "Property Package CAPE-OPEN" intégrables dans des applications tierces compatibles. Il est intéressant de noter à ce niveau que toute application qui intègre Simulis Thermodynamics hérite automatiquement de cette compatibilité avec le standard CAPE OPEN.