

Fiche logiciel n° 3

Adep-Junior

Auteurs et/ou diffuseurs : **LMCTS**

RESSOURCES

Adep-Junior est opérationnel sur IBM-PC, modèle 486 DX, système MS DOS, mémoire 640 Ko, disque 5 Mo, écran VGA.

RÉALISATION

Auteurs : B. Pateyron, G. Delluc, M.F. Elchinger (Laboratoire de matériaux céramiques et traitements de surface)

Langage utilisé : langage C

Volume des instructions : 140 Ko + bibliothèque de données

Date de début du projet : 1986

Date de la dernière version : décembre 1992

Investissement humain : 3 hommes * année

Etat du logiciel : produit diffusable

Version de démonstration disponible : version duplicable avec bibliothèque limitée + démonstration automatique

Développements prévus : version en langue anglaise, équation d'état type viriel, propriété de transport

DIFFUSION

Contactez Bernard Pateyron au LMCTS CNRS URA 320 (tél. : 55.45.74.39)

Nature de la diffusion : commerciale

Format : binaire

Support de diffusion : disquette type 3" 1/2 ou 5" 1/4

Suivi du produit : assistance

Conditions financières : prix public 3000 F HT, conditions particulières pour les enseignants et leurs établissements

Particularités techniques d'installation : installation automatique sur disque dur

DOCUMENTATION

Vidéo de démonstration

Références bibliographiques :

- B. Pateyron, M.F. Elchinger, G. Delluc, J. Aubreton, Logiciel de calculs d'équilibres chimiques complexes : TEM, Dossier de valorisation Anvar n° 52, 356, 1986.

- B. Pateyron, J. Aubreton, M.F. Elchinger, G. Delluc, Thermodynamic and transport properties at high temperatures : hydrogen plasma and water plasma, The first Codata Symposium thermodynamic and thermophysical properties Data base, 3 to 10 september 1985, Paris.

- M. Tellat, G. Delluc, M.F. Elchinger, B. Pateyron, Calculs d'équilibres thermodynamiques, JEEP, 1986, Bordeaux.

- M.F. Elchinger, B. Pateyron, G. Delluc, P. Fauchais, Propriétés de transport et de rayonnement en fond continu de quelques mélanges azote-oxygéné, réunion : Modélisation des plasma, Cepat univ. de Toulouse, juin 1989.

- B. Pateyron, M.F. Elchinger, G. Delluc, J. Aubreton, Adep : banque de données de l'université et du CNRS, Direction des bibliothèques et des musées et de l'Information scientifique et technique, 1986, 87, 88, 89.

ADRESSES

LMCTS : Faculté des sciences, 123 avenue Albert Thomas, 87060 Limoges Cedex. Tél. : 55.45.72.00

Fiche logiciel n° 3 - suite

Adep-Junior

MOTS CLÉS

Génie chimique
Thermodynamique
Physique des gaz

DÉFINITION

Base de calculs et de données thermodynamiques (et de transports)

Adep-Junior recherche la composition qui minimise l'enthalpie libre du système polyphasé (phase solide, phase liquide et phase gazeuse) proposé par l'utilisateur, à la pression et à la température choisies. Pour une composition déterminée, toutes les autres fonctions ou potentiels thermodynamiques (et propriétés de transports dans la version suivante) sont alors calculées.

La détermination des coefficients de transport de la phase gazeuse est fondée sur l'équation intégral-différentielle de Boltzmann résolue par la méthode de perturbation de Chapman-Enskog

DESCRIPTION

Domaine couvert : les calculs de composition, de propriétés thermodynamiques (et de propriétés de transport dans une version ultérieure)

Entrées : définir le système

- 1) Entrer les symboles élémentaires du système chimique à étudier - exemple : H (hydrogène), O (oxygène), etc.
- 2) Entrer les quantités de matière, en moles, du système dans le catalogue de composés possibles présentés
- 3) Choisir l'intervalle de températures sur lequel l'étude est demandée, ainsi que le pas de température entre 2 calculs successifs
- 4) Choisir les différentes pressions pour lesquelles le calcul sera effectué

Limites d'utilisation :

En température, 300 K-30 000 K au maximum, dans le cas général le domaine de température est borné par la limite de validité des données thermodynamiques des composés (qui est affichée)

En pression, domaine s'étendant de 10E-30 atm, 100 atm

Systèmes chimiques limités aux composés de la bibliothèque interne.

Sorties : exploitation graphique, en outre les fichiers numériques sont importables directement par tableurs, etc.

A l'équilibre thermodynamique :

- fonctions et potentiels thermodynamiques du système : entropie, enthalpie libre de Gibbs, chaleur spécifique, masse volumique de la phase gazeuse,

- composition molaire du système pour les phases gazeuses, liquides et solides

Méthode :

Adep-Junior gère non seulement sa banque intégrée de propriétés thermodynamiques, mais également les outils de traitement de ces informations

Adep-Junior recherche la composition qui minimise l'enthalpie libre du système polyphasé (phase solide, phase liquide et phase gazeuse) proposé par l'utilisateur, à la pression et à la température choisies. Pour une composition déterminée, toutes les autres fonctions ou potentiels thermodynamiques et propriétés de transports sont alors calculés.

La détermination des coefficients de transport de la phase gazeuse est fondée sur l'équation intégral-différentielle de Boltzmann résolue par la méthode de perturbation de Chapman-Enskog, (cette fonction n'est pas encore disponible).

Convivialité

Les seules entrées sont la définition du système

Exploitation graphique

Résultats en unités MKSA (à l'exception des pressions en atmosphères).

Catalogue ANL (Agence Nationale du Logiciel), BP 239, 54506 Vandœuvre Cedex.

Tél. : 83.91.21.58 (télécopie : 83.27.76.43).