

EXEMPLE D'APPLICATION BATCHREACTOR

REACTEUR DE SYNTHÈSE DU THYMOL

INTERET DE L'EXEMPLE

L'intérêt principal de cet exemple est d'utiliser un calculateur réactif généré par Simulis Kinetics à l'issue de l'identification du schéma réactionnel de la synthèse du thymol. Ainsi, les constituants, le modèle thermodynamique et les réactions chimiques sont renseignés automatiquement dans la simulation BatchReactor. Le dispositif de refroidissement du réacteur est spécifié.

DIFFUSION	☒ Libre Internet	☐ Réservée clients	☐ Restreinte	☐ Confidentielle
------------------	--	---	-------------------------------------	---

FICHIER BATCHREACTOR CORRESPONDANT

BATCHREA_EX_FR - Thymol.pbpr

Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. Fives ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.

Energy

Fives ProSim

Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE

Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30

S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487

www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

TABLE DES MATIERES

1. INTRODUCTION 3

2. MECANISME REACTIONNEL 4

3. CONSTITUANTS, MODELE THERMODYNAMIQUE, MODELE CINETIQUE 5

4. SIMULATION 7

4.1. Description du procédé 7

4.1.1. Réacteur 7

4.1.2. Dispositif de refroidissement 9

4.1.3. Agitateur 10

4.1.4. Alimentations 10

4.1.5. Mode opératoire 11

4.2. Résultats 12

1. INTRODUCTION

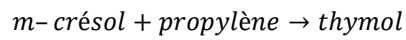
Le thymol est un phénol contenu dans l'huile de thym et dans les huiles essentielles (volatiles) de plusieurs autres plantes. Il se présente sous forme de cristaux incolores avec une odeur aromatique caractéristique. Il est soluble dans les alcools, le gras et l'huile et peu soluble dans l'eau. On l'utilise notamment pour ses propriétés antiseptiques, antibactériennes et antifongiques ainsi que pour stabiliser les préparations pharmaceutiques.

Cet exemple traite de la synthèse du thymol. Le mode opératoire comprend deux étapes. Durant la première étape l'un des réactifs est alimenté. Dans la seconde étape, la réaction est poursuivie sans alimentation.

Il est le second d'une série de trois exemples traitants de la synthèse et de la purification du thymol. Le premier exemple « SIMKIN_EX_FR - Thymol » permet d'identifier les paramètres des réactions chimiques. Le troisième exemple « BATCHCOL_EX_FR - Thymol » traite de la purification du thymol à l'issue de sa synthèse.

2. MECANISME REACTIONNEL

La réaction de synthèse du thymol à partir du m-crésol est la suivante :

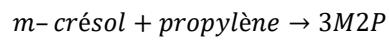


Soit :



Trois réactions concurrentes sont considérées :

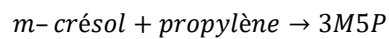
- ✓ Synthèse du 3M2P :



Soit :



- ✓ Synthèse du 3M5P :



Soit :



- ✓ Synthèse du 3M4P :

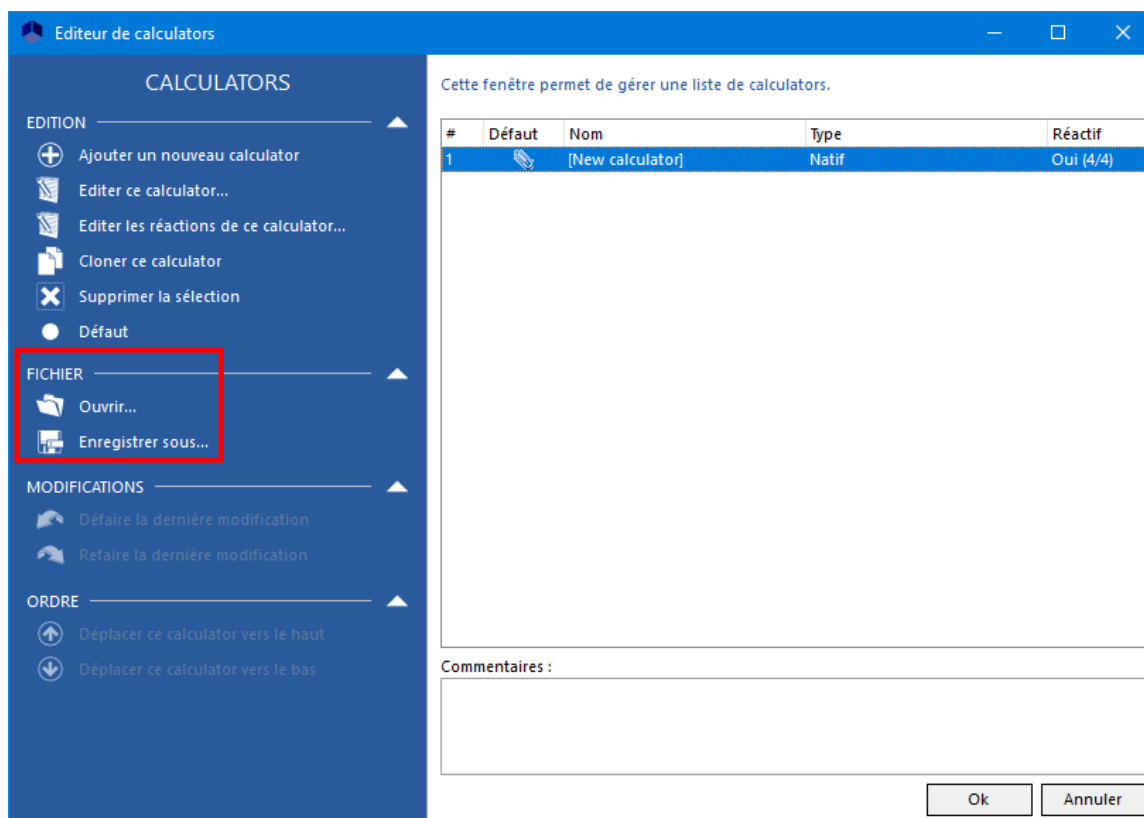


Soit :

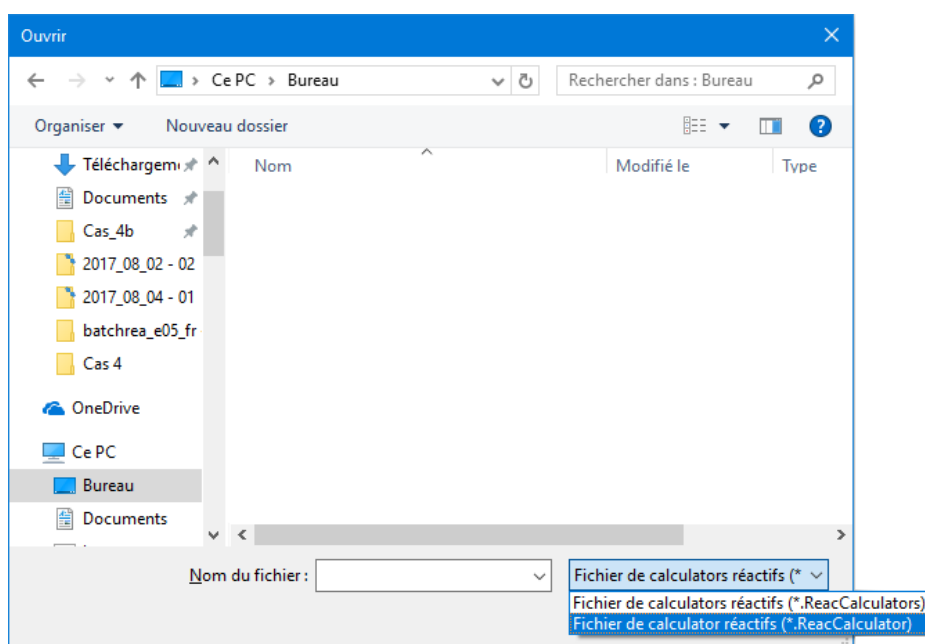


3. CONSTITUANTS, MODELE THERMODYNAMIQUE, MODELE CINETIQUE

Les constituants, le modèle thermodynamique ainsi que le modèle cinétique (schéma réactionnel et paramètres des réactions) vont être chargés directement à partir du fichier « .ReacCalculator » généré à la fin de l'exemple « SIMKIN_EX_FR - Thymol ». Pour cela, dans l'éditeur de calculators, supprimez le calculator créé par défaut puis utilisez le menu « Fichier/Ouvrir... »



Dans la fenêtre « Ouvrir », sélectionnez « Fichier de calculators réactifs (.ReacCalculator) » comme type de fichier.



Dans l'exemple « SIMKIN_EX_FR - Thymol », les enthalpies des réactions n'ont pas été identifiées ni fournies, il est donc nécessaire de préciser qu'elles seront calculées à l'aide des enthalpies standard de formation.

Pour cela, cliquez sur l'item « Editer les réactions chimiques de ce calculator », puis sélectionnez la première réaction et cliquez sur « Editer cette réaction ». Dans le champ « Chaleur de réaction » choisissez l'option « Calculée ». Faites cela pour chacune des réactions.

Editeur de réaction chimique

Cette fenêtre vous permet de spécifier le contexte de votre réaction chimique

ID: {35A9A51C-D9B0-4EC2-A3BF-1EF8ABC6520F}

← →

RÉACTION CHIMIQUE

RÉACTION ——— ▲

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

OUTILS ——— ▲

📄 Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS ——— ▲

↶ Défaire

↷ Refaire

AIDE ——— ▲

🔍 Aide technique...

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom m-crésol + C3H6 => Thymol ☒ Activé

ID utilisateur

Etat physique Liquide ▼

Chaleur de la réaction Calculée (= -19175,4 cal/mol)

Modèle de concentration Concentration molaire ▼

Modèle de vitesse Arrhenius ▼

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
PROPYLENE	115-07-1	-1	1
m-CRESOL	108-39-4	-1	1
THYMOL	89-83-8	1	0
3M2P	55000-01-6	0	0
3M5P	3228-03-3	0	0
3M4P	3228-02-2	0	0

Ok Annuler

4. SIMULATION

4.1. Description du procédé

4.1.1. Réacteur

Le réacteur utilisé pour la synthèse du thymol est un réacteur monophasique liquide.

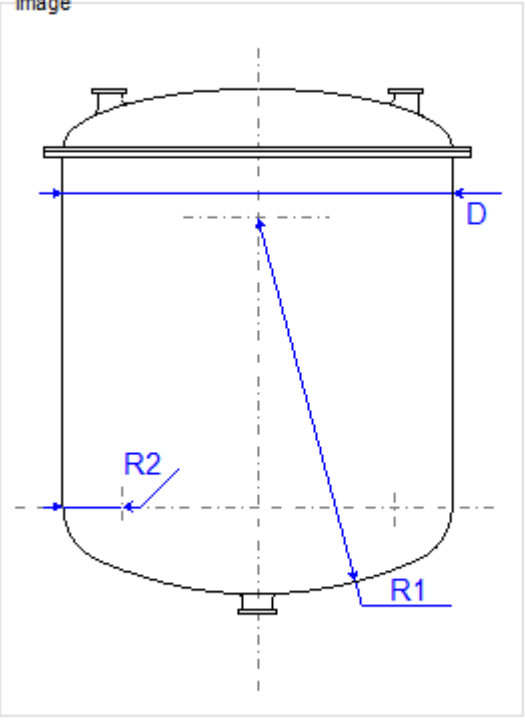
Les conditions initiales sont présentées ci-dessous :

Conditions initiales	
Température	25°C
Pression	12 atm
Charge initiale	
Charge totale	1 486 kg
Propylène	2% massique
m-crésol	98% massique

La géométrie du bas de cuve est décrite dans l'écran ci-dessous :

Géométrie du bas de cuve

Image



Type de géométrie de fond de cuve

Torisphérique

Paramètres

Nombre de chicanes

0

Diamètre de la cuve (D)

1,3 m

Hauteur du fond de la cuve (H)

0 m

Rayon de courbure n°1 (R1)

1,3 m

Rayon de courbure n°2 (R2)

0,13 m

Référence / Note

Restaurer

Technologie

OK

Annuler

Le réacteur est en acier vitrifié.

Matériaux de la paroi

Nombre de matériaux de la paroi:

Matériau n° 1

Epaisseur:

Masse:

Côté PROCEDE

Côté UTILITE

Matériau n° 2

Epaisseur:

Masse:

Référence / Note

Restaurer Technologie **OK** Annuler

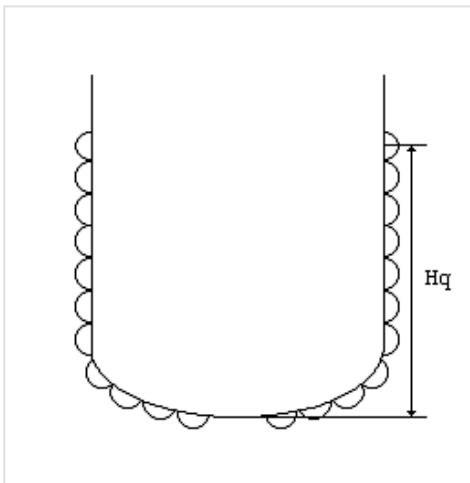
La conductivité thermique de l'acier (matériau 2) est considérée comme étant égale à $52,25 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et celle de l'émail (matériau 1) à $1,161 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Les conductivités thermiques sont spécifiées pour chaque étape.

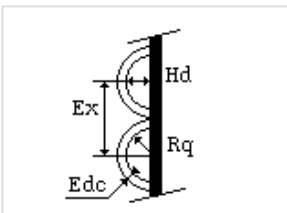
Les alarmes sont les suivantes :

	Volume	Température
Minimum	1 l	0°C
Maximum	3 m ³	40°C

4.1.2. Dispositif de refroidissement

Le réacteur est équipé d'un dispositif d'échange par la paroi (demi-coquilles) dont les caractéristiques sont données ci-dessous :





Disposition

☐ Latéral

☐ Disjoint

☒ Joint

☐ Fond

Paramètres géométriques

Espacement des demi-coquilles (Ex) : 10 cm

Hauteur interne des demi-coquilles (Hd) : 3 cm

Rayon interne des demi-coquilles (Rq) : 4 cm

Hauteur latérale (ou totale) des demi-coquilles (Hq) : 1,7 m

Distance entre le fond de cuve et le bas des demi-coquilles (Hk) : 0 m

Epaisseur des demi-coquilles (Edc) : 0 m

Référence / Note

Restaurer Technologie

OK Annuler

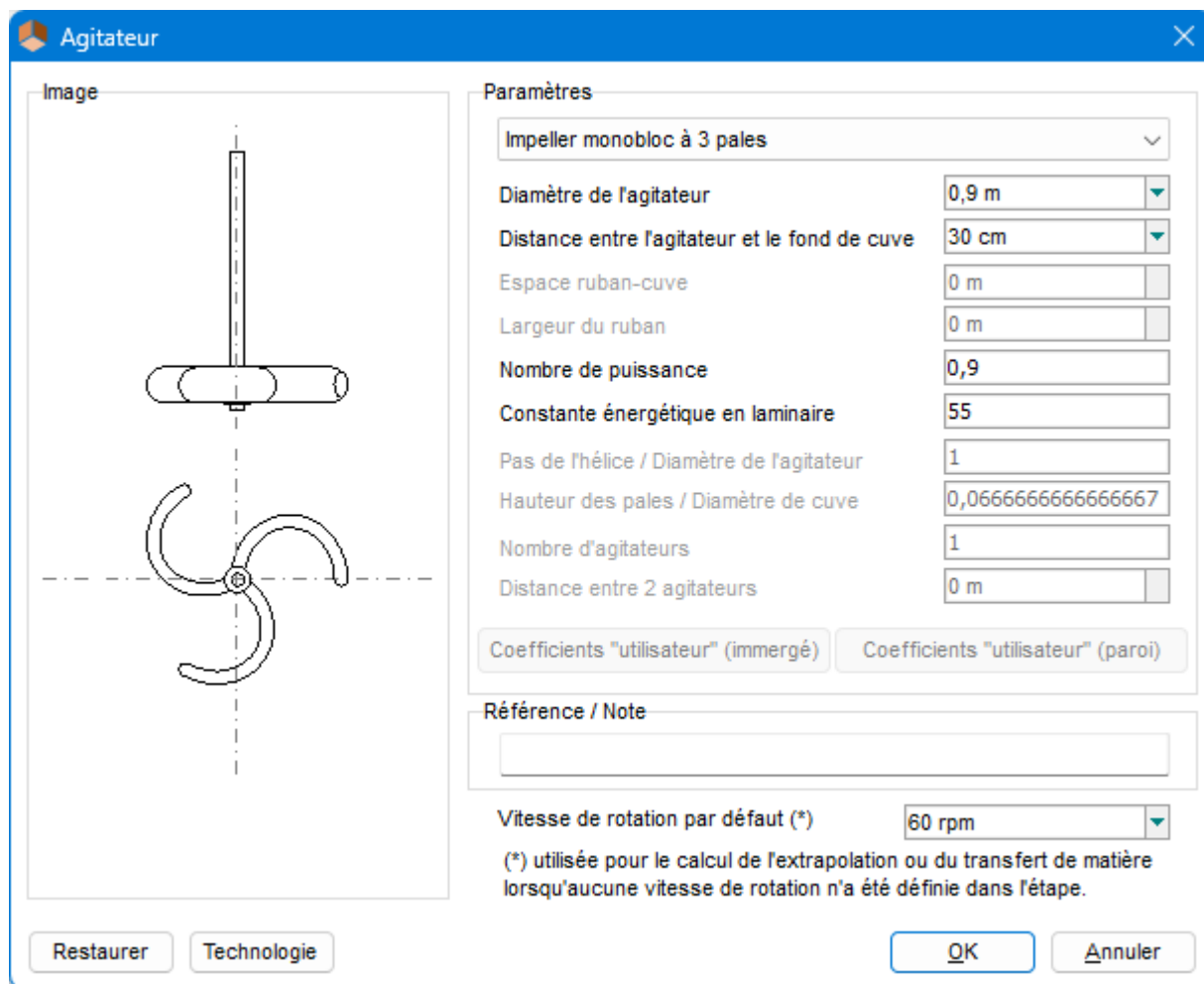
Le fluide thermique utilisé est le même pour les deux étapes :

Fluide caloporteur (identique pour les 2 étapes)	
Type	Eau
Débit massique (valeur initiale)	1 500 kg/h
Température d'entrée	14°C

Le débit massique d'eau sera ajusté automatiquement afin de maintenir constante la température du réacteur définie dans chaque étape opératoire.

4.1.3. Agitateur

Les caractéristiques de l'agitateur sont présentées dans l'écran ci-dessous.



Agitateur

Image

Paramètres

Impeller monobloc à 3 pales

Diamètre de l'agitateur: 0,9 m

Distance entre l'agitateur et le fond de cuve: 30 cm

Espace ruban-cuve: 0 m

Largeur du ruban: 0 m

Nombre de puissance: 0,9

Constante énergétique en laminaire: 55

Pas de l'hélice / Diamètre de l'agitateur: 1

Hauteur des pales / Diamètre de cuve: 0,066666666666667

Nombre d'agitateurs: 1

Distance entre 2 agitateurs: 0 m

Coefficients "utilisateur" (immergé) Coefficients "utilisateur" (paroi)

Référence / Note

Vitesse de rotation par défaut (*): 60 rpm

(*) utilisée pour le calcul de l'extrapolation ou du transfert de matière lorsqu'aucune vitesse de rotation n'a été définie dans l'étape.

Restaurer Technologie OK Annuler

La vitesse de rotation de l'agitateur, 60 rpm, est définie dans chaque étape opératoire (vitesse identique pour les deux étapes).

4.1.4. Alimentations

Un flux continu de propylène (réactif) est alimenté au cours de la première étape :

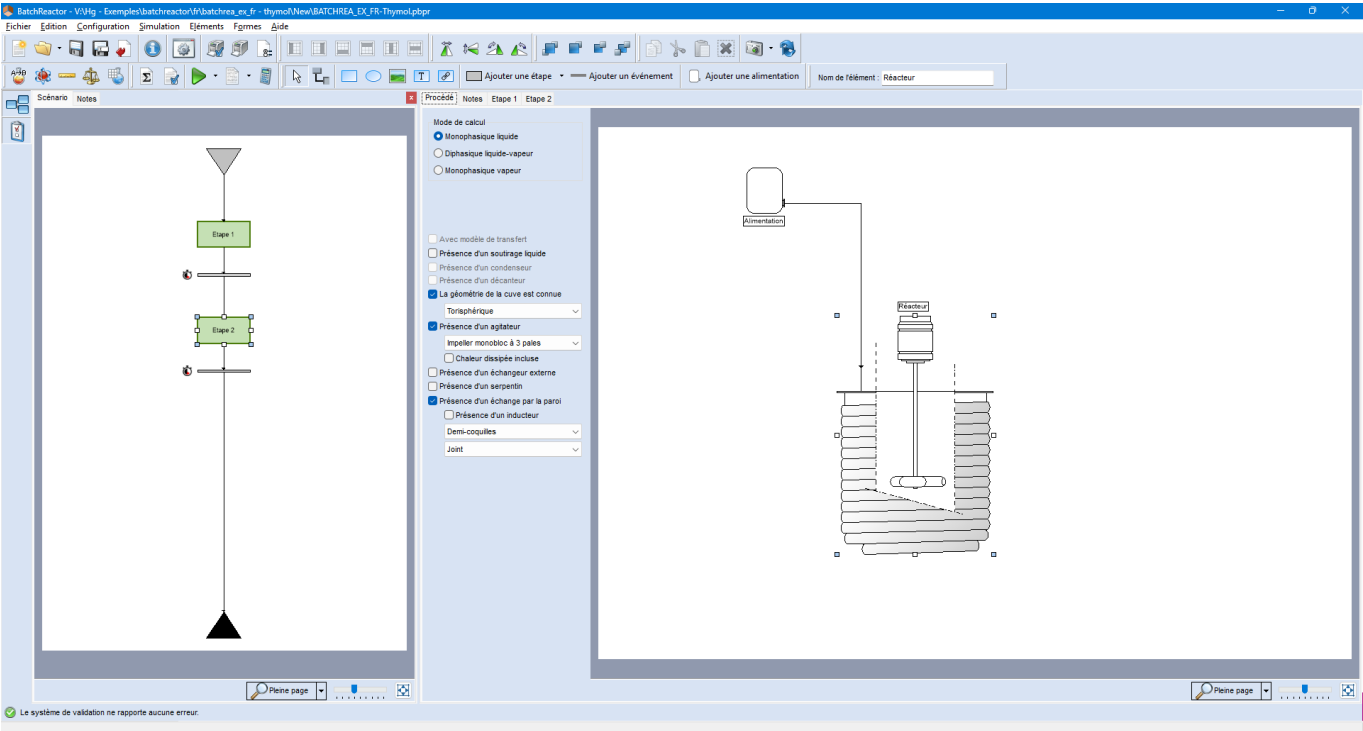
Température	25°C
Pression	12 atm
Débit de propylène	39 kg/h

4.1.5. Mode opératoire

Le mode opératoire est constitué de deux étapes. Au cours de la première étape, le second réactif (propylène) est alimenté. La réaction démarre. Durant la seconde étape, la réaction est poursuivie mais sans alimentation en propylène. Ces deux étapes sont opérées à température constante par action sur le débit de fluide utilité. Les paramètres opératoires sont donnés dans le tableau suivant :

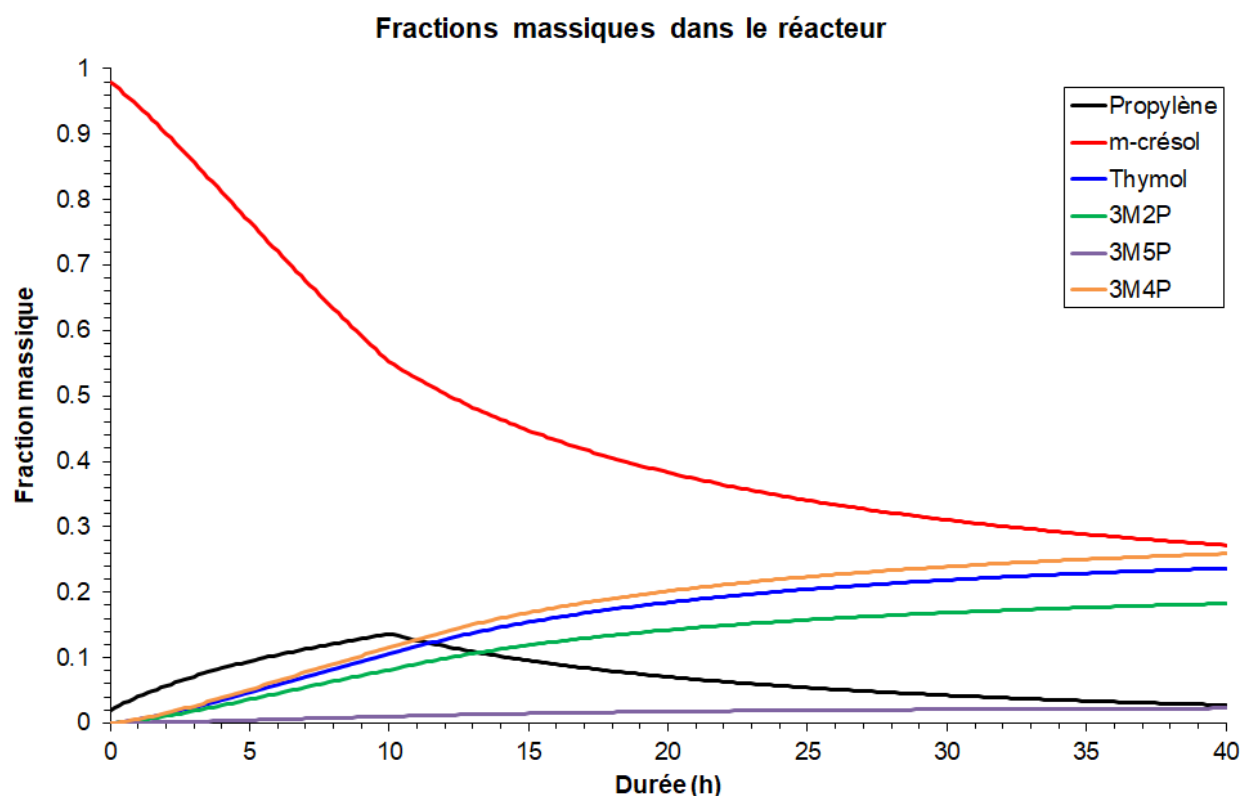
Paramètre	Première étape	Deuxième étape
Type d'étape	Contrôle de la température du réacteur	
Température du réacteur	25°C	
Pression du réacteur	12 atm	
Alimentation en propylène	Ouverte	Fermée
Evènement d'arrêt	Temps écoulé depuis le début de l'étape : 10 h	Temps écoulé depuis le début de l'étape : 30 h

Le scénario est présenté à gauche de l'écran, et le schéma procédé sur la droite.



4.2. Résultats

La fraction massique en m-crésol diminue tout au long de l'opération car ce réactif n'est présent que dans la charge initiale. La fraction massique en Propylène augmente durant la première étape (10 h) car ce réactif étant alimenté avec un débit supérieur à la quantité consommée, il s'accumule durant cette période. Par la suite, c'est-à-dire après arrêt de l'alimentation, il est consommé et s'épuise. Les produits de réaction (thymol, 3M2P, 3M5P, 3M4P) voient leurs fractions massiques augmenter tout au long des deux étapes.



La figure suivante montre l'évolution du débit d'eau nécessaire pour maintenir le réacteur isotherme à 25°C. Durant 7 h le débit d'utilité nécessaire augmente car la réaction débute fortement suite à l'alimentation en propylène. Ensuite, le débit diminue car la quantité de m-crésol diminue et la réaction ralentit. Au-delà de 10 h, cette diminution est plus rapide car il n'y a plus d'alimentation en propylène.

