

# Démarrer avec BatchReactor®

## Cas 1 : Simulation de la chloration du chlorotoluène

Software & Services In Process Simulation

*We guide You to efficiency*



ProSim

# Introduction

Ce document présente les différentes étapes à suivre pour simuler une synthèse effectuée dans un réacteur batch à l'aide du logiciel BatchReactor.

Cette présentation s'appuie sur un exemple : simulation d'un réacteur de chloration. Cet exemple est disponible sur le site internet de ProSim ([www.prosim.net](http://www.prosim.net)) ou dans le répertoire d'exemples de BatchReactor.

Cette présentation contient trois parties :

1<sup>ère</sup> partie - Description de l'exemple

2<sup>ème</sup> partie - Généralités sur l'utilisation du logiciel

3<sup>ème</sup> partie - Description des différentes étapes de la simulation

# Partie 1 - description de l'exemple

## Description de l'exemple :

- Constituants et modèle thermodynamique
- Description du système réactionnel
- Description des équipements
- Mode opératoire

# Constituants et modèle thermodynamique

Les constituants considérés dans cette synthèse sont les suivants :

Nom	Formule	Numéro CAS(*)
o-Chlorotoluene	$C_7H_7Cl$	95-49-8
Chlorine	$Cl_2$	7782-50-5
Benzyl dichloride	$C_7H_6Cl_2$	98-87-3
Hydrogen chloride	HCl	7647-01-0
Benzotrichloride	$C_7H_5Cl_3$	98-07-7
Nitrogen	$N_2$	7727-37-9

(\*) 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

# Constituants et modèle thermodynamique

Le profil thermodynamique retenu est « NRTL », dont les paramètres d'interaction binaire sont renseignés comme suit (des paramètres disponibles seraient automatiquement chargées) :

- Fournis pour les binaires suivants :

Constituants		$C_{ij0}$	$C_{ji0}$	$A_{ij0}$	$C_{ijT}$	$C_{jiT}$	$a_{jiT}$
o-Chlorotoluene	Benzyl dichloride	-707,3	775,31	0,1939	0	0	0
o-Chlorotoluene	Benzotrichloride	-1246	1463,5	0,1584	0	0	0
Benzyl dichloride	Benzotrichloride	64,339	-79,04	0,4097	0	0	0

- Egaux à 0 pour les autres binaires (revenant à considérer un comportement idéal pour les autres binaires)

# Description du système réactionnel

Du chlore gazeux alimente une charge de chlorotoluene liquide. Deux réactions chimiques sont considérées. Pour chaque réaction :

- La réaction a lieu en phase liquide
- La chaleur de réaction est calculée à partir des enthalpies standard de formation
- La réaction est contrôlée par la cinétique
- La constante de vitesse est calculée par la loi d'Arrhenius :

$$k(T) = k^0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

Avec :

$k^0$	Facteur pré-exponentiel → <u>Fourni par l'utilisateur</u>
$E_a$	Energie d'activation → <u>Fournie par l'utilisateur</u>
$R$	Constante des gaz parfaits
$T$	Température absolue

# Description du système réactionnel

La réaction principale est la suivante :



- Modèle exprimé en concentrations molaires
- Ordres partiels de 1 pour les réactifs et 0 pour les produits :

Constituant	Stœchiométrie	Ordre
Chlorine	-1	1
o-Chlorotoluene	-1	1
Benzyl dichloride	1	0
Hydrogen chloride	1	0

- Paramètres cinétiques :

Facteur pré-exponentiel (k <sup>0</sup> )	2,7203.10 <sup>17</sup> s <sup>-1</sup> (mol/l) <sup>-1</sup>
Energie d'activation (Ea)	130320 J/mol

# Description du système réactionnel

La réaction secondaire suivante est prise en compte :



- Modèle exprimé en concentrations molaires
- Ordres partiels de 1 pour les réactifs et 0 pour les produits

Constituant	Stœchiométrie	Ordre
Benzyl dichloride	-1	1
Chlorine	-1	1
Benzotrichloride	1	0
Hydrogen chloride	1	0

- Paramètres cinétiques :

Facteur pré-exponentiel ( $k^0$ )	$580 \text{ s}^{-1}(\text{mol/l})^{-1}$
Energie d'activation ( $E_a$ )	$42200 \text{ J/mol}$



# Description des équipements

Deux courants alimentent le réacteur : le premier est composé de chlore et le deuxième est composé d'azote permettant l'inertage du réacteur

Les caractéristiques du réacteur sont les suivantes :

- **Cuve** : cuve torisphérique de 3m<sup>3</sup> de volume et 1400 mm de diamètre.
- **Agitateur** : impeller monobloc à 3 pales de 700 mm de diamètre, situé à 450 mm du fond et tournant à 90 tours par minute
- **Echangeur par la paroi** : double enveloppe (latérale et fond joint) de 50 mm d'épaisseur et de 1700 mm de hauteur
- **Matériaux de la paroi** : 17 mm d'acier inox 316

# Description des équipements

- **Fluide de service :**
  - Utilité chaude : 200 kg/h de vapeur à 6 bar
  - Utilité froide : 4 000 kg/h d'eau de refroidissement à 25°C
- **Inertie thermique :** le réacteur est constitué d'un matériau de 800 kg, dont la chaleur spécifique est de 500 J/kg/K
- **Perte thermiques :** Négligeables

# Description des équipements

- Le réacteur est fermé et équipé de deux étages de condensation. Un courant de gaz incondensables quitte le deuxième étage
- Les condensats sont collectés et envoyés vers un stockage
- Les caractéristiques du premier étage de condensation sont les suivantes :
  - Aire d'échange :  $15 \text{ m}^2$
  - Coefficient de transfert thermique global :  $300 \text{ kcal/h.m}^2.^\circ\text{C}$
  - Utilité :  $3000 \text{ kg/h}$  d'eau à  $20^\circ\text{C}$
- Les caractéristiques du deuxième étage de condensation sont les suivantes :
  - Aire d'échange :  $0,5 \text{ m}^2$
  - Coefficient de transfert thermique global :  $300 \text{ kcal/h.m}^2.^\circ\text{C}$
  - Utilité :  $100 \text{ kg/h}$  d'un fluide thermique assimilé à de l'éthylène glycol 40%, disponible à  $-15^\circ\text{C}$
- Les pertes de charge dans les deux étages sont négligées

# Mode opératoire

La charge initiale du réacteur est de 2400 kg de chlorotoluene à 25 °C et pression atmosphérique.

- **Première étape : chauffe**

Le réacteur est chauffé jusqu'à 58 °C en maintenant un reflux total. L'inertage est assuré par un flux de 1 kg/h d'azote à 25 °C et pression atmosphérique. La pression du réacteur est maintenue à pression atmosphérique.

# Mode opératoire

- **Deuxième étape : réaction**

Le réacteur est alimenté pendant 13 heures par un flux de 60 kg/h de chlore disponible à 3 bar et 25°C. L'inertage à l'azote est conservé. La température du réacteur est maintenue à 62°C par action sur le débit d'eau de refroidissement.

Une régulation PID est utilisée, dont les paramètres sont les suivants :

- Températures minimum / maximum : 59°C / 65°C
- Type de contrôle : feedback
- Paramètres PID : Gain = -5,  $T_i = 500$  s,  $T_d = 0$  s
- Temps d'échantillonnage : 10 s
- Vanne de régulation : l'équation de vanne est de type « exponentielle » et le  $C_v$  est égal à 30

# Partie 2 - Généralités

## Généralités sur l'utilisation du logiciel :

- Fenêtre de démarrage
- Fenêtre principale
- Utilisation de la barre de tâches
- Création d'un nouveau fichier de simulation
- Sélection du système d'unités

# Fenêtre de démarrage

The screenshot shows the BatchReactor software interface. The menu bar includes: Fichier, Edition, Affichage, Configuration, Simulation, Eléments, Formes, Outils, Aide. The toolbar contains various icons for file operations and simulation. The main content area is divided into several sections:

- Derniers Projets** (Last Projects): A list of recent projects with names like BATCHREA\_EX\_FR-Reacteur-de-chloration.pb, FII-Rouge\_BatchReactor\_Thermo.pbpr, etc.
- Exemples** (Examples): A list of example documents, including BATCHREA\_EX\_FR-Acide-gluconique.pbpr, BATCHREA\_EX\_FR-Biere-Essai-E1.pbpr, etc.
- Nouveautés...** (New...): A section for news and updates, including ProSim announcements, a plan for digital transformation, and COVID-19 updates.
- Getting Started**: A section for getting started with the software, including a document for simulation of chlorination and a document for simulation of bioreactions.
- Vidéos YouTube**: A section for YouTube videos, including a video for drawing diagrams of a process with the ProSimPlus software and a webinar for integrated gasification combined cycle (IGCC) power plant simulation.
- Recherche sur site internet** (Search on website): A search bar for finding information on the website.
- Sites Internet** (Websites): A section for websites, including ProSim and support@prosim.net.
- Nouveautés du site Release Notes** (New site Release Notes): A section for release notes, including a plan for digital transformation and COVID-19 updates.
- Réseaux Sociaux** (Social Networks): A section for social media, including LinkedIn, Twitter, and YouTube.



# Fenêtre principale

Sélection de l'écran de saisie des paramètres

Menu

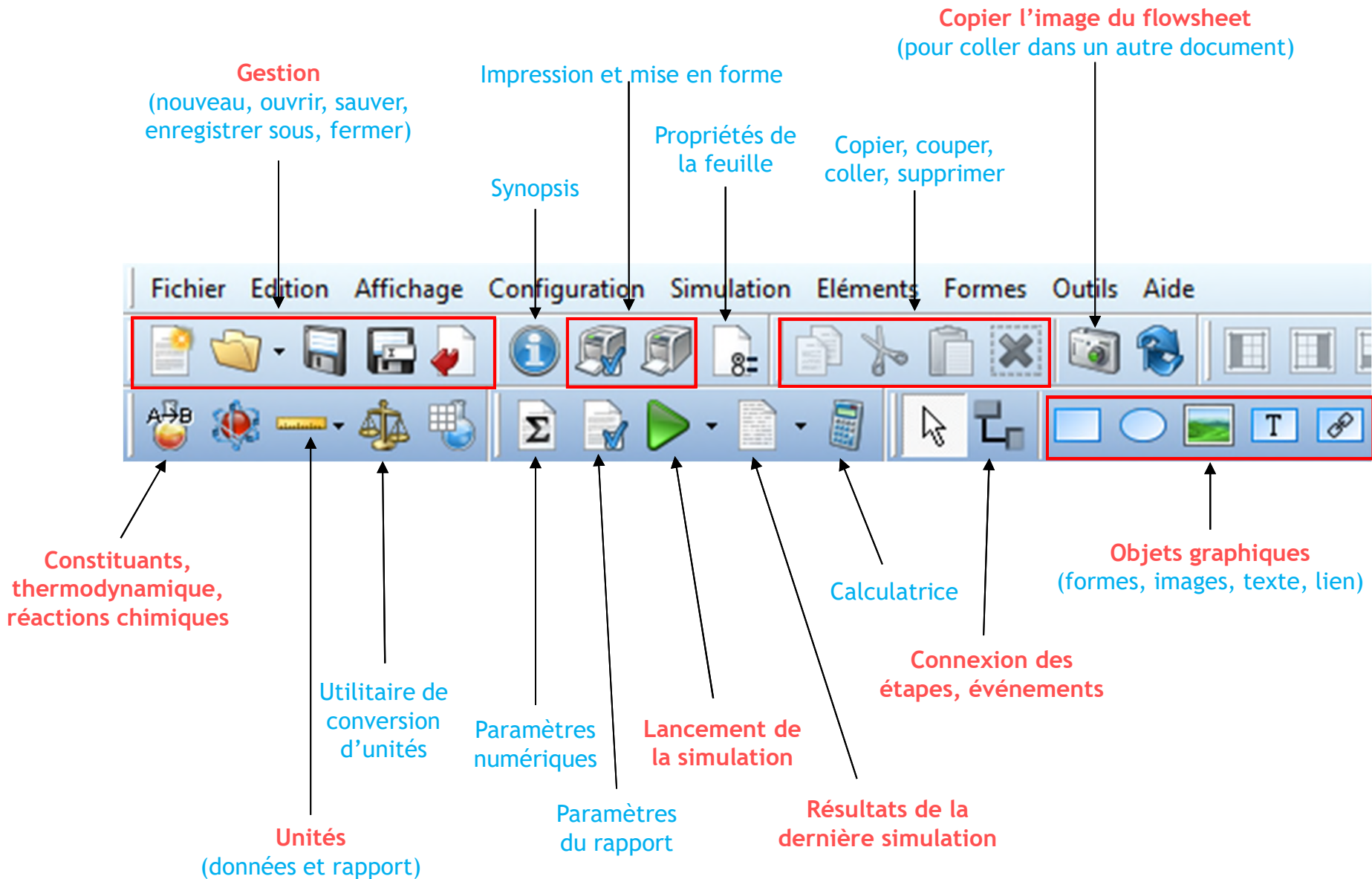
The screenshot displays the ProSim S.A. software interface. At the top is a menu bar with options: Fichier, Edition, Configuration, Simulation, Eléments, Formes, Outils, Aide. Below the menu bar is a toolbar with various icons for file operations, simulation, and element management. A label 'Menu' points to the 'Fichier' menu.

The main window is divided into three panels:

- Fenêtre de description du scénario** (Scenario Description Window): Located on the left, it shows a vertical flowchart with two main steps: 'Chauffe' (Heating) and 'Reaction'. A label 'Fenêtre de description du scénario' points to this panel.
- Fenêtre de saisie des paramètres** (Parameter Input Window): Located in the center, it contains a 'Procédé' (Process) tab. This tab is selected, as indicated by a label 'Sélection de l'écran de saisie des paramètres'. The 'Procédé' panel includes settings for:
  - Mode de calcul: ☐ Monophasique liquide, ☒ Diphasique liquide-vapeur, ☐ Monophasique vapeur
  - Type de réacteur diphasique: ☐ Ouvert, ☒ Fermé
  - Options: ☐ Avec modèle de transfert, ☐ Présence d'un soutirage liquide, ☒ Présence d'un condenseur, ☐ Présence d'un décanteur, ☒ La géométrie de la cuve est connue (Torisphérique)
  - Présence d'un agitateur: ☒ Impeller monobloc à 3 pales, ☐ Chaleur dissipée incluse
  - Présence d'un échangeur externe: ☐ Présence d'un serpentín
  - Présence d'un échangeur par la paroi: ☐ Présence d'un inducteur
  - Double enveloppe: ☐ Joint
- Panneau de contrôle** (Control Panel): Located on the right, it shows a schematic diagram of a reactor vessel. The vessel is labeled 'Réacteur' and has two input streams: 'Reactif' (Reactive) and 'Inerte' (Inert). A label 'Panneau de contrôle' points to this panel.



# Utilisation de la barre de menu et de la barre d'outils

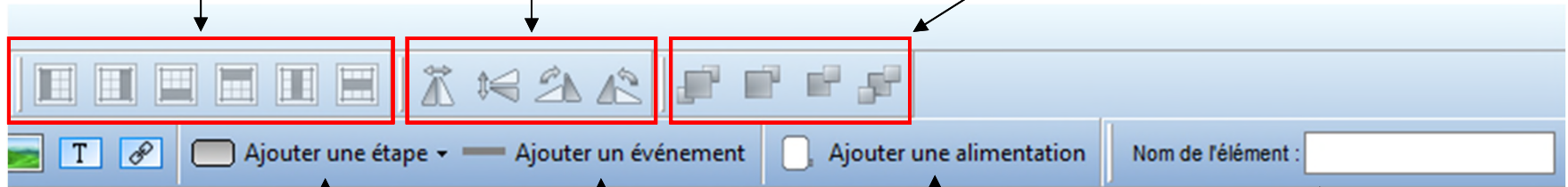


# Utilisation de la barre de menu et de la barre d'outils

Position des éléments (retourner, inverser...)

Position des éléments du flowsheet  
(aligner, centrer...)

Ordre des éléments (arrière plan, premier plan)



Choix et ajout d'une étape opératoire

Ajout d'un alimentation

Renommer un élément

Ajout d'un événement de fin d'étape

# Création d'un nouveau fichier de simulation



1- Cliquer sur l'icône "créer un nouveau document"



2 - Enregistrer le fichier

3 - Remplir les différents champs du synopsis (facultatif)

Synopsis

Titre :

Sujet :

Auteur :

Manager :

Société :

Catégorie :

Mot-clés :

Commentaires :

OK Annuler

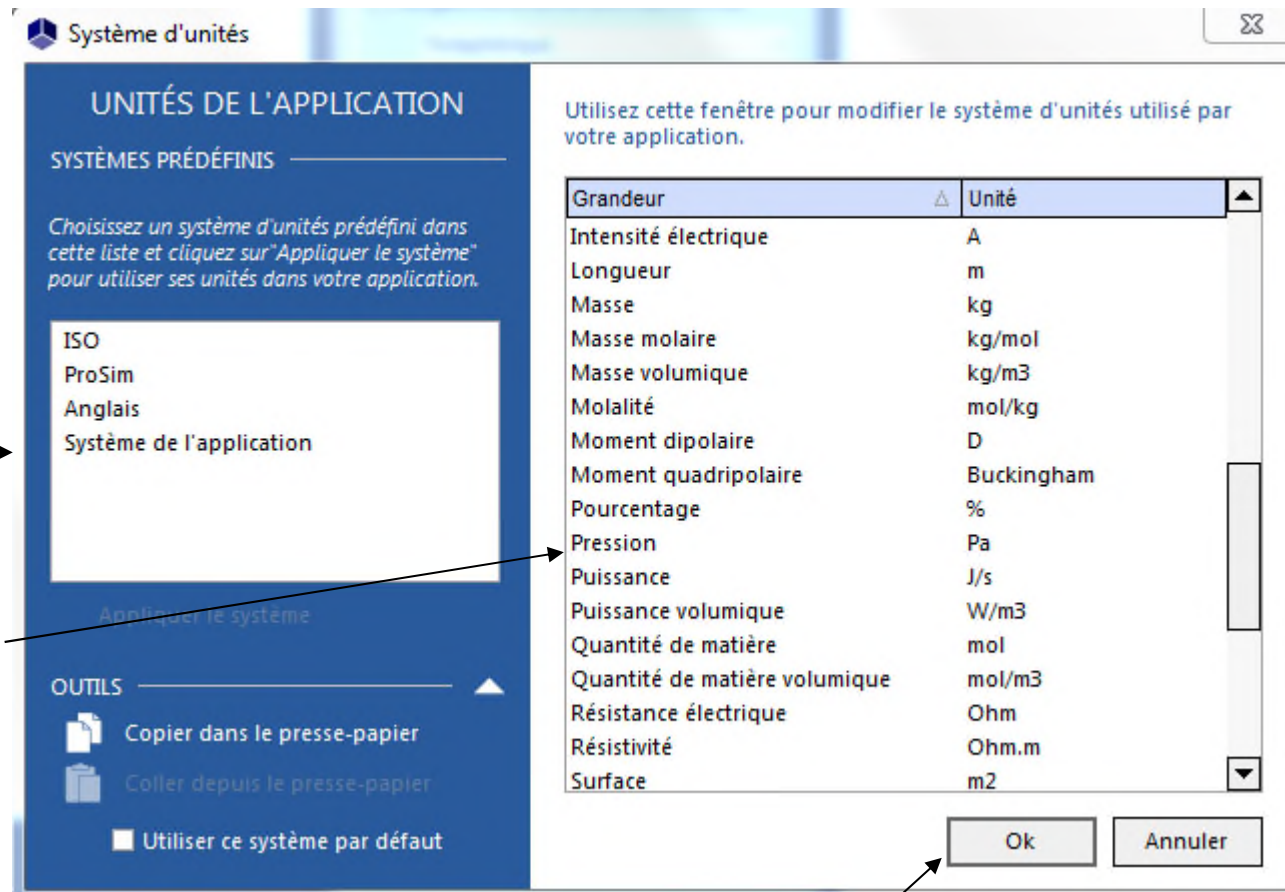
# Sélection du système d'unités



Cliquer sur l'icone  afin de configurer le système d'unités

1- Sélectionner un système d'unités prédéfini puis cliquer sur « appliquer le système »

2- Vous pouvez ensuite personnaliser votre choix en changeant les unités des différentes grandeurs



3- Cliquer sur « OK » pour valider

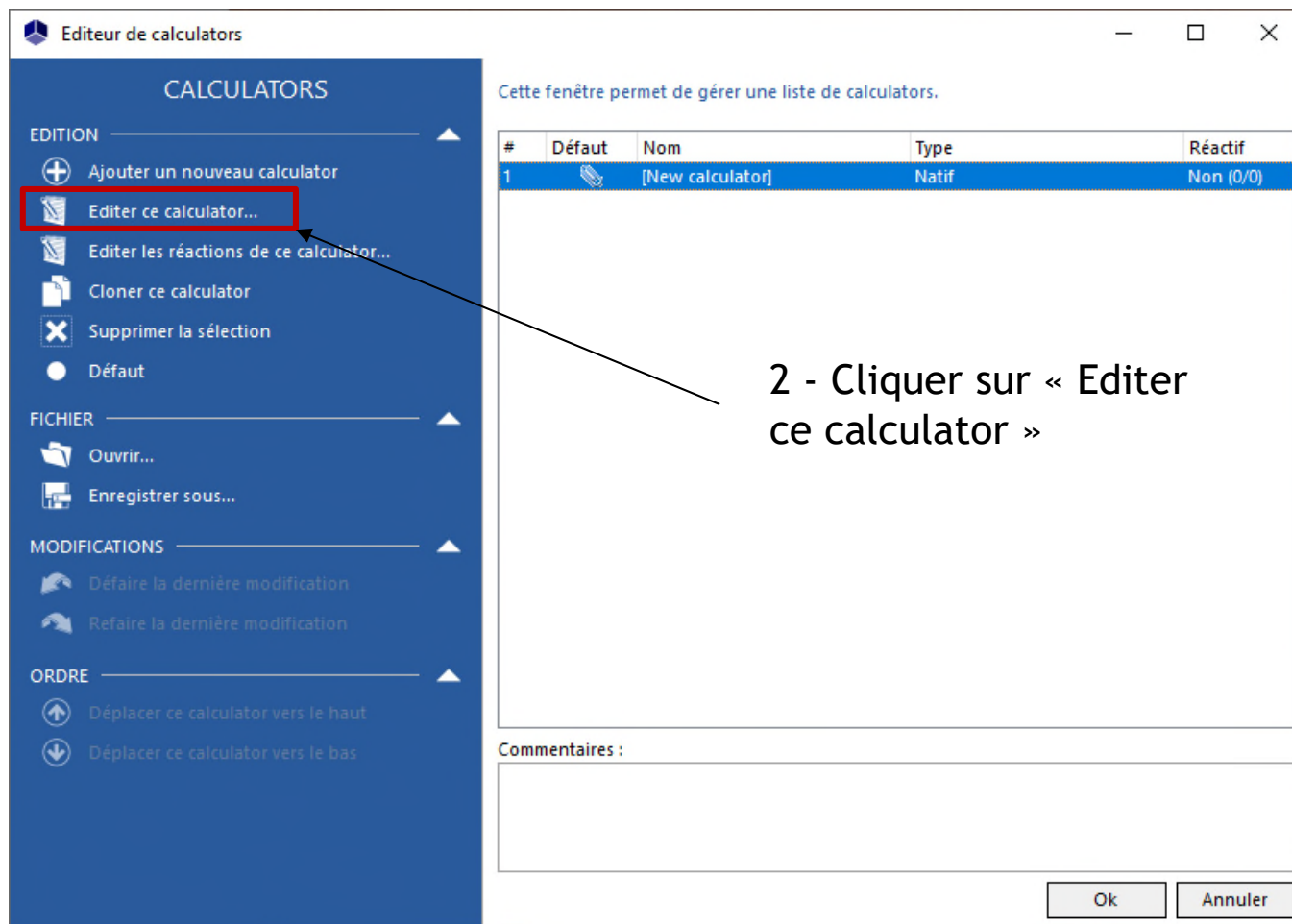
# Partie 3 - Simulation

## Description des différentes étapes de simulation de l'exemple

- Etape 1 : Sélection des constituants
- Etape 2 : Sélection du modèle thermodynamique
- Etape 3 : Description des réactions chimiques
- Etape 4 : Description des équipements
- Etape 5 : Description du mode opératoire
- Etape 6 : Lancement de la simulation
- Etape 7 : Visualisation des résultats de la simulation

# Etape 1 : Sélection des constituants

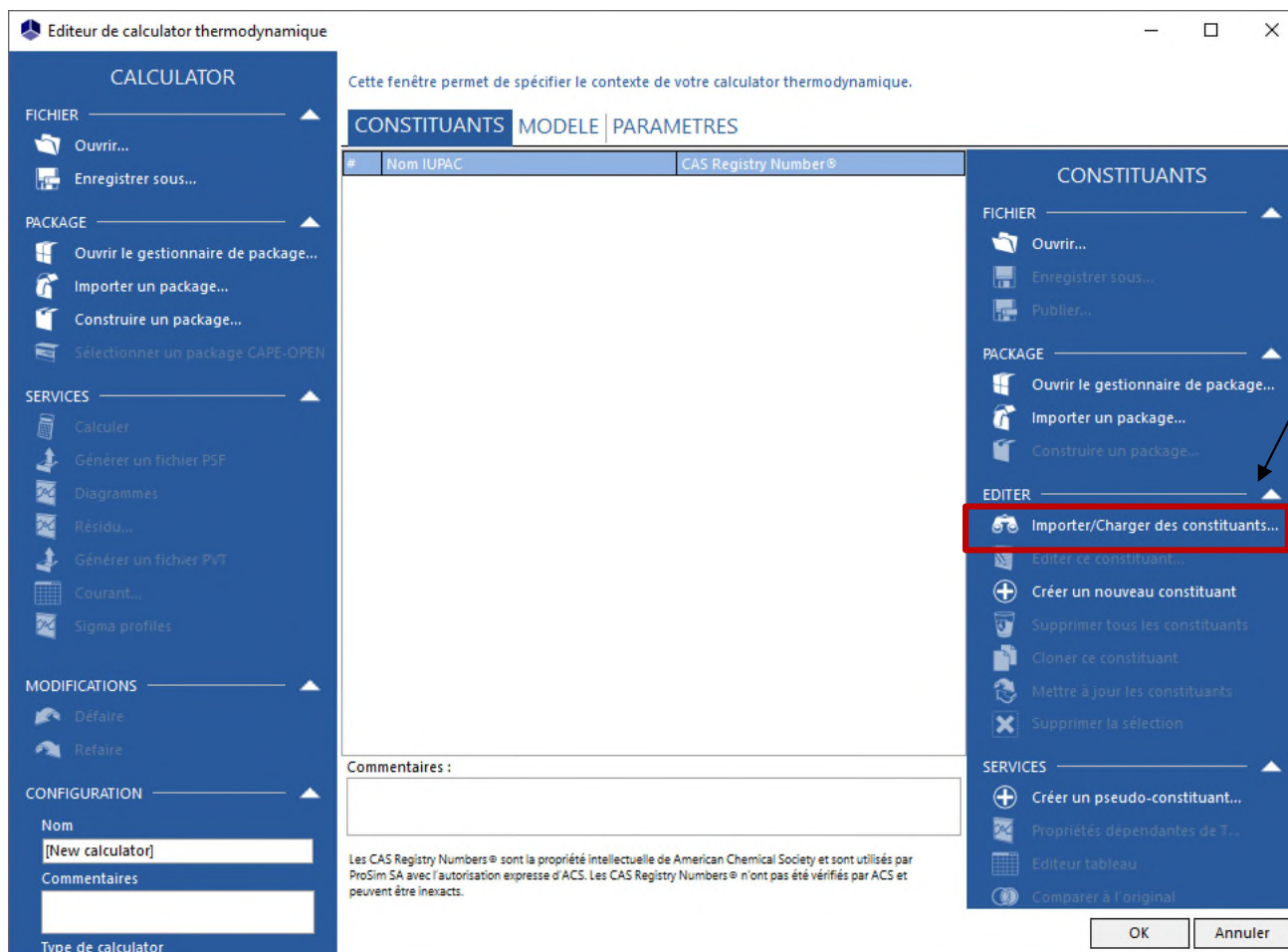
1 - Cliquer sur l'icône « Modifier la thermodynamique et les constituants »



Pour plus d'informations sur la sélection et l'édition des constituants, consultez  
« Démarrer avec Simulis Thermodynamics - Cas 1 »



# Etape 1 : Sélection des constituants



Cliquer sur cette icône pour importer les constituants depuis la base de données

# Etape 1 : Sélection des constituants

3 - Appuyer sur la touche « Entrée » ou cliquer sur le bouton « Recherche » pour obtenir la liste des constituants trouvés

2 - Il est possible d'utiliser différents critères de recherche (dans cet exemple, rechercher « o-Chlorotoluene » par son nom)

4 - Les résultats de la recherche s'affichent dans cette partie

The screenshot shows the 'Résultats de recherche' window. On the left, under 'CRITÈRES', the 'Recherche' button is highlighted with a red box. Below it, 'Nom ou synonyme' is selected, and 'o-chlorotoluene' is entered in the search field. The 'Nom exact' checkbox is checked. Under 'OPTIONS', 'Effacer les résultats précédents' is checked. In the 'RECHERCHER DANS' section, 'Standard 2021' is selected under 'Common databases'. On the right, the 'Sélectionner un constituant pour avoir sa description' panel shows a table of search results. The first result is 'o-CHLOROTOLUENE' with CAS Reg. 95-49-8, molecular weight 126.583, and boiling point 432.300. To the right of the table, a list of 'Constituants sélectionnés' includes 'o-CHLOROTOLUENE', 'CHLORINE', 'BENZYL DICHLORIDE', 'HYDROGEN CHLORIDE', 'BENZOTRICHLORIDE', and 'NITROGEN'.

	Nom IUPAC (ou nom d...)	Formule chimi...	CAS Regi...	Masse molaire ...	Températur
1	o-CHLOROTOLUENE	C7H7Cl	95-49-8	126.583	432.300

Constituants sélectionnés :

- Nom
- o-CHLOROTOLUENE
- CHLORINE
- BENZYL DICHLORIDE
- HYDROGEN CHLORIDE
- BENZOTRICHLORIDE
- NITROGEN

1 - Sélectionner les serveurs de constituants dans lesquels la recherche sera effectuée (par défaut, sélectionner le serveur le plus récent)



# Etape 1 : Sélection des constituants

1 - Double-cliquer sur le constituant pour l'ajouter à la sélection finale

Résultats de recherche

CONSTITUANTS

CRITÈRES

Recherche

Nom ou synonyme  
o-chlorotoluene

☒ Nom exact

☐ CAS Registry Number®

☐ Formule chimique

☐ ID spécifique

☐ Avancé

OPTIONS

☒ Effacer les résultats précédents

Nouvelle Aide

RECHERCHER DANS

Tous les serveurs

- Simulis® Compounds Files
- Simulis® SQLite Databases
  - Common databases
    - DIPPR L22+
    - Sponsor 05-2022
    - Sponsor 10-2021
    - ☒ Standard 2021
  - User databases

Sélectionner un constituant pour avoir sa description

Résultats de recherche Favoris Historique

#	Nom IUPAC (ou nom d...)	Formule chimi...	CAS Regi...	Masse molaire ...	Températur
1	o-CHLOROTOLUENE	C7H7Cl	95-49-8	126.583	432.300

Constituants sélectionnés :

Nom

- o-CHLOROTOLUENE
- CHLORINE
- BENZYL DICHLORIDE
- HYDROGEN CHLORIDE
- BENZOTRICHLORIDE
- NITROGEN

0 item(s) sélectionné(s)

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.

Fermer

2 - Répéter l'opération pour les autres constituants

3 - Cliquer sur « Fermer » pour terminer la sélection des constituants

# Etape 2 : Sélection du modèle thermodynamique

1 - Cliquer sur l'onglet « Modèle » pour accéder à l'éditeur de modèles thermodynamiques



L'onglet « Binaires » apparaît automatiquement dès lors que le modèle sélectionné nécessite des paramètres d'interaction binaire

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS **MODELE** BINAIRES PARAMETRES

Nom: NRTL

Catégorie: Tous les profils

Profil: NRTL

Type d'approche: A partir des coefficients d'activité

Equation d'état: Gaz parfait

Fonction alpha: Non défini

Règles de mélange: Non défini

Modèle des coefficients d'activité: NRTL

Fugacité liquide pur état standard: Pression de vapeur

Volume molaire liquide: Mélange idéal

Propriétés de transport: Méthodes classiques

Calcul enthalpique:  $H^*=0$ , gaz parfait, 25°C, 1 atm

Modèle thermodynamique utilisateur: Aucun

Index du modèle: 1

Commentaires :

OK Annuler

2 - Sélectionner le profil thermodynamique « NRTL »

# Etape 2 : Sélection du modèle thermodynamique

1 - Cliquer sur l'onglet « Binaires » puis renseigner les paramètres d'interaction binaire

Editeur de calculateur thermodynamique

Cette fenêtre permet de spécifier le contenu de votre calculateur 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 :  $g_{ij} - g_{jj} = C_{ij}0 + C_{ij}T(T - 273.15)$ ,  $a_{ij} = a_{ij}0 + a_{ij}T(T - 273.15)$

Constituant	Constituant	C <sub>ij</sub> 0	C <sub>ji</sub> 0	a <sub>ij</sub> 0	C <sub>ij</sub> T	C <sub>ji</sub> T	a <sub>ij</sub> T
o-CHLOROTOLUENE	CHLORINE	0	0	0	0	0	0
o-CHLOROTOLUENE	BENZYL DICHLORIDE	-707,3	775,31	0,1939	0	0	0
o-CHLOROTOLUENE	HYDROGEN CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
o-CHLOROTOLUENE	BENZOTRICHLORIDE	-1246	1463,5	0,1584	0	0	0
o-CHLOROTOLUENE	NITROGEN	0	0	0	0	0	0
CHLORINE	BENZYL DICHLORIDE	0	0	0	0	0	0
CHLORINE	HYDROGEN CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
CHLORINE	BENZOTRICHLORIDE	0	0	0	0	0	0
CHLORINE	NITROGEN	0	0	0	0	0	0
BENZYL DICHLORIDE	HYDROGEN CHLORIDE	0	0	0	0	0	0
BENZYL DICHLORIDE	BENZOTRICHLORIDE	64,339	-79,04	0,4097	0	0	0
BENZYL DICHLORIDE	NITROGEN	0	0	0	0	0	0
HYDROGEN CHLORIDE	BENZOTRICHLORIDE	0	0	0	0	0	0
HYDROGEN CHLORIDE	NITROGEN	0	0	0	0	0	0
BENZOTRICHLORIDE	NITROGEN	0	0	0	0	0	0

Non fourni Fournis Importés Estimés Erreur

Commentaires :

**BINAIRES**

ACTIONS

- Importer des binaires...
- Tout effacer...
- Estimer les binaires...
- Enregistrer les binaires...

OPTIONS

Unité

cal/mole

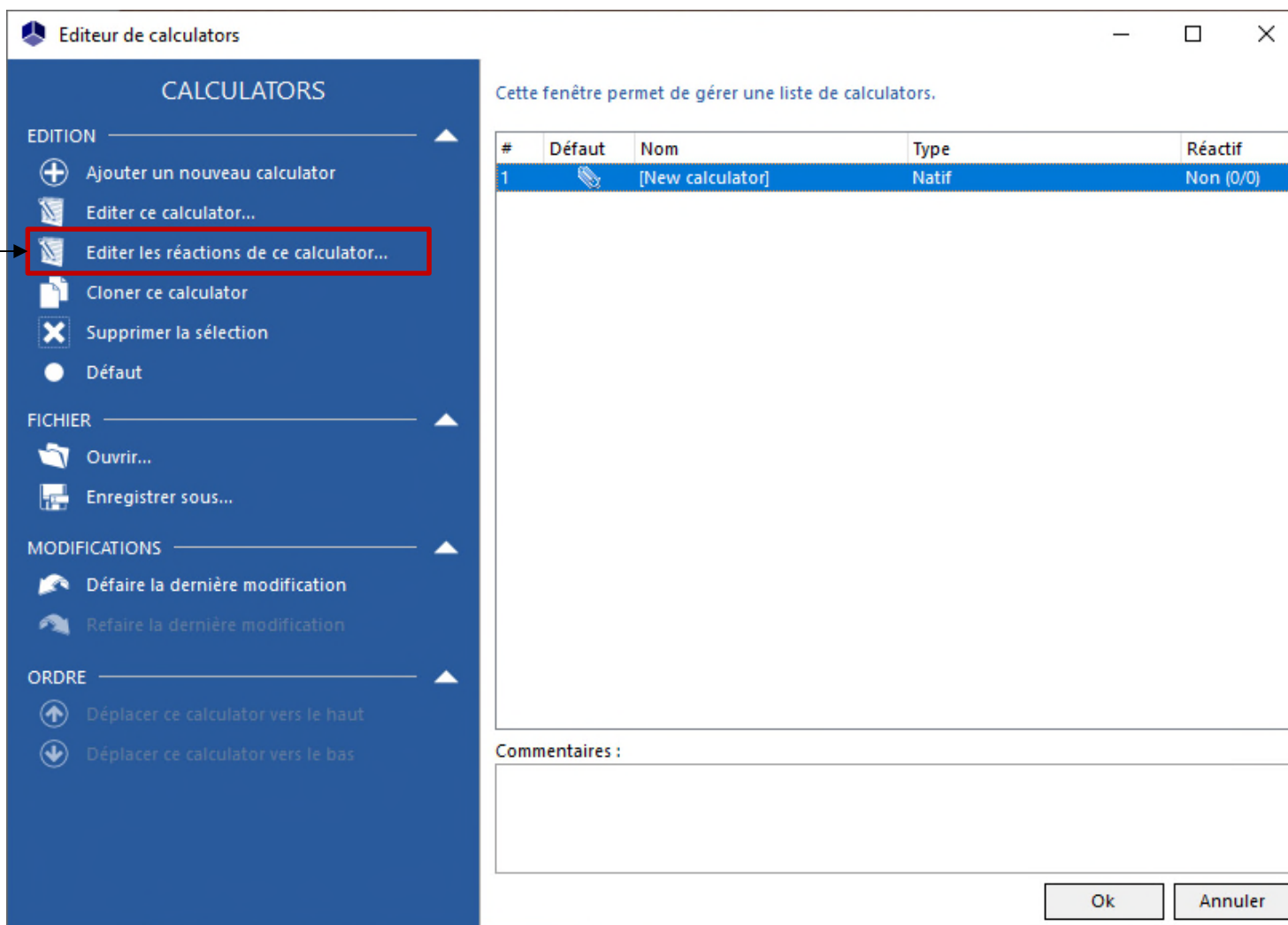
- ☐ les paramètres seront ignorés
- ☐ chargement automatique

OK Annuler

2 - Cliquer sur « OK »

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

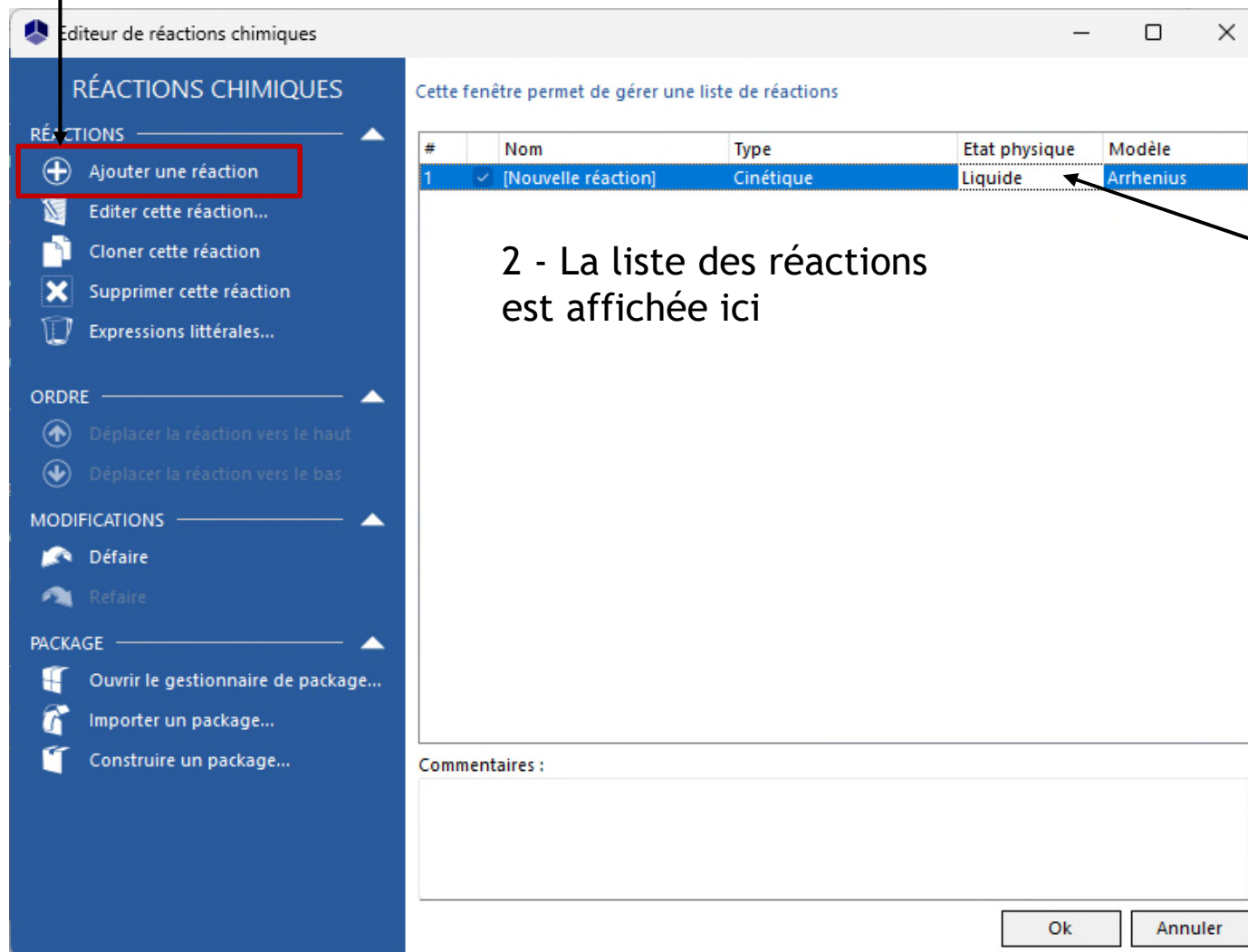
De retour à « l'éditeur de calculators », sélectionner « Editer les réactions de ce calculator » :





# Etape 3 : Description des réactions chimiques

1 - Sélectionner « Ajouter une réaction »



2 - La liste des réactions est affichée ici

3 - Double cliquer sur la nouvelle réaction afin de la configurer

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

1 - Cocher la case « Cinétique »

2 - Sélectionner l'onglet « Général »

3 - Indiquer les informations générales

Editeur de réaction chimique

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

ID: {269A0068-E608-4508-A78F-5255247CDD41}

**RÉACTION CHIMIQUE**

RÉACTION

☐ Equilibrée

☒ **Cinétique**

☐ Instantanée

OUTILS

Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS

Défaire

Refaire

AIDE

Aide technique...

**Général** Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom: o-Chlorotoluène + Cl<sub>2</sub> -> Dichloro-méthyle-benzène + HCl ☒ Activé

ID utilisateur:

Etat physique: Liquide

Chaleur de la réaction: Calculée

Modèle de concentration: Concentration molaire

Modèle de vitesse: Arrhenius

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	-1	1
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	1	0
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHLORIDE	98-07-7	0	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

Ok Annuler

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

**Editeur de réaction chimique**

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

ID: {269A0068-E608-4508-A78F-5255247CDD41}

**RÉACTION CHIMIQUE**

RÉACTION ——— ▲

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

**OUTILS** ——— ▲

Export PDF (Impression)

**MODIFICATIONS** ——— ▲

Défaire

Refaire

**AIDE** ——— ▲

Aide technique...

**Général** Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom: o-Chlorotoluène + Cl<sub>2</sub> -> Dichloro-méthyle-benzène + HCl ☒ Activé

ID utilisateur:

Etat physique: Liquide

**Chaleur de la réaction**: Calculée 0 cal/mol

Modèle de concentration: Concentration molaire

Modèle de vitesse: Arrhenius

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	-1	1
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	1	0
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHLORIDE	98-07-7	0	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

Ok Annuler

4 - Sélectionner l'option permettant le calcul automatique de la chaleur de réaction à partir des enthalpies standard de formation

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

RÉACTION ——— ▲

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

OUTILS ——— ▲

Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS ——— ▲

Défaire

Refaire

AIDE ——— ▲

Aide technique...

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

ID: {269A0068-E608-4508-A78F-5255247CDD41}

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom o-Chlorotoluène + Cl<sub>2</sub> -> Dichloro-méthyle-benzène + HCl ☒ Activé

ID utilisateur

Etat physique Liquide

Chaleur de la réaction Calculée 0 cal/mol

Modèle de concentration Concentration molaire

Modèle de vitesse Arrhenius

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	-1	1
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	1	0
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHLORIDE	98-07-7	0	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

Ok Annuler

5 - Sélectionner le modèle de concentration

6 - Sélectionner le modèle d'Arrhenius



# Etape 3 : Description des réactions chimiques

**Editeur de réaction chimique**

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

ID: {269A0068-E608-4508-A78F-5255247CDD41}

← →

**RÉACTION CHIMIQUE**

RÉACTION ——— ▲

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

**OUTILS** ——— ▲

📄 Export PDF (Impression)

**MODIFICATIONS** ——— ▲

↶ Défaire

↷ Refaire

**AIDE** ——— ▲

🔍 Aide technique...

**Général** Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom: o-Chlorotoluène + Cl<sub>2</sub> -> Dichloro-méthyle-benzène + HCl ☒ Activé

ID utilisateur:

Etat physique: Liquide ▼

Chaleur de la réaction: Calculée ▼ 0 cal/mol ▼

Modèle de concentration: Concentration molaire ▼

Modèle de vitesse: Arrhenius ▼

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	-1	1
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	1	0
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHLORIDE	98-07-7	0	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

7 - Entrer les coefficients stœchiométriques (« - » pour les réactifs et « + » pour les produits) ainsi que les ordres partiels de la réaction

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

## 1 - Sélectionner l'onglet « Paramètres cinétiques » »

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

RÉACTION ———— ▲

● Equilibrée

● **Cinétique**

● Instantanée

OUTILS ———— ▲

📄 Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS ———— ▲

🔄 Défaire

🔄 Refaire

AIDE ———— ▲

🔍 Aide technique...

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

ID: {269A0068-E608-4508-A78F-5255247CDD41}

Général **Paramètres cinétiques** Equation Notes

Energie d'activation 130320 J/mol

Facteur pré-exponentiel 2,7203E17

Unité du facteur pré-exponentiel

Grandeur	Unité
Temps	seconde
Concentration	mol/l
Molalité	mol/kg
Pression	atm

Ok Annuler

## 2 - Renseigner les paramètres cinétiques :

- $k^0 = 2,7203E17 \text{ s}^{-1}(\text{mol/l})^{-1}$
- $E_a = 130320 \text{ J/mol}$

Attention à sélectionner les bonnes unités !

## 3 - Cliquer sur « OK »

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

Reproduire ces étapes pour la deuxième réaction :

Editeur de réactions chimiques

RÉACTIONS CHIMIQUES

RÉACTIONS

- + Ajouter une réaction
- ✎ Editer cette réaction...
- 📄 Cloner cette réaction
- ✕ Supprimer cette réaction
- 📄 Expressions littérales...

ORDRE

- ⬆ Déplacer la réaction vers le haut
- ⬇ Déplacer la réaction vers le bas

MODIFICATIONS

- ↶ Défaire
- ↷ Refaire

PACKAGE

- 📁 Ouvrir le gestionnaire de package...
- 📁 Importer un package...
- 📁 Construire un package...

Cette fenêtre permet de gérer une liste de réactions

#	Nom	Type	Etat physique	Modèle
1	o-Chlorotoluène + Cl <sub>2</sub> -> D	Cinétique	Liquide	Arrhenius
2	[Nouvelle réaction]	Cinétique	Liquide	Arrhenius

Commentaires :

Ok Annuler

1 - Cliquer sur « Ajouter une réaction »

2 - Double cliquer sur la nouvelle réaction afin de la configurer

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

1 - Cocher la case « Cinétique »

2 - Sélectionner l'onglet « Général »

3 - Indiquer les informations générales

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

RÉACTION ——— ▲

☐ Equilibrée  
☒ **Cinétique**  
☐ Instantanée

OUTILS ——— ▲

Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS ——— ▲

Défaire  
 Refaire

AIDE ——— ▲

Aide technique...

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

ID: {C4A9700F-FF7D-4181-8C6C-123037E5833D}

**Général** Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom  ☒ Activé

ID utilisateur

Etat physique

Chaleur de la réaction

Modèle de concentration

Modèle de vitesse

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	0	0
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	-1	1
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHORIDE	98-07-7	1	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

Ok Annuler

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

RÉACTION ——— ▲

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

OUTILS ——— ▲

Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS ——— ▲

Défaire

Refaire

AIDE ——— ▲

Aide technique...

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

ID: {C4A9700F-FF7D-4181-8C6C-123037E5833D}

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom Dichloro-méthyle-benzène + Cl<sub>2</sub> -> Benzotrichlorure + HCl ☒ Activé

ID utilisateur

Etat physique Liquide ▼

Chaleur de la réaction Calculée ▼ 0 cal/mol ▼

Modèle de concentration Concentration molaire ▼

Modèle de vitesse Arrhenius ▼

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	0	0
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	-1	1
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHORIDE	98-07-7	1	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

Ok Annuler

4 - Sélectionner l'option permettant le calcul automatique de la chaleur de réaction à partir des enthalpies standard de formation



# Etape 3 : Description des réactions chimiques

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

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

ID: {C4A9700F-FF7D-4181-8C6C-123037E5833D}

RÉACTION

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

OUTILS

Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS

Défaire

Refaire

AIDE

Aide technique...

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom Dichloro-méthyle-benzène + Cl<sub>2</sub> -> Benzotrichlorure + HCl ☒ Activé

ID utilisateur

Etat physique Liquide

Chaleur de la réaction Calculée 0 cal/mol

Modèle de concentration Concentration molaire

Modèle de vitesse Arrhenius

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	0	0
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	-1	1
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHLORIDE	98-07-7	1	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

Ok Annuler

5 - Sélectionner le modèle de concentration

6 - Sélectionner le modèle d'Arrhenius

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

**Editeur de réaction chimique**

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

ID: {C4A9700F-FF7D-4181-8C6C-123037E5833D}

← →

**RÉACTION CHIMIQUE**

RÉACTION ——— ▲

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

**OUTILS** ——— ▲

📄 Export PDF (Impression)

**MODIFICATIONS** ——— ▲

↶ Défaire

↷ Refaire

**AIDE** ——— ▲

🔍 Aide technique...

**Général** Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom: Dichloro-méthyle-benzène + Cl<sub>2</sub> -> Benzotrichlorure + HCl ☒ Activé

ID utilisateur:

Etat physique: Liquide ▼

Chaleur de la réaction: Calculée ▼ 0 cal/mol ▼

Modèle de concentration: Concentration molaire ▼

Modèle de vitesse: Arrhenius ▼

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
o-CHLOROTOLUENE	95-49-8	0	0
CHLORINE	7782-50-5	-1	1
BENZYL DICHLORIDE	98-87-3	-1	1
HYDROGEN CHLORIDE	7647-01-0	1	0
BENZOTRICHORIDE	98-07-7	1	0
NITROGEN	7727-37-9	0	0

7 - Entrer les coefficients stœchiométriques (« - » pour les réactifs et « + » pour les produits) ainsi que les ordres partiels de la réaction

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

## 1 - Sélectionner l'onglet « Paramètres cinétiques »

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

RÉACTION ——— ▲

- Equilibrée
- **Cinétique**
- Instantanée

OUTILS ——— ▲

Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS ——— ▲

Défaire

Refaire

AIDE ——— ▲

Aide technique...

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

ID: {C4A9700F-FF7D-4181-8C6C-123037E5833D}

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Energie d'activation 42200 J/mol

Facteur pré-exponentiel 580

Unité du facteur pré-exponentiel

Grandeur	Unité
Temps	seconde
Concentration	mol/l
Molalité	mol/kg
Pression	atm

Ok Annuler

## 2 - Renseigner les paramètres cinétiques :

- $k^0 = 2,7203E17 \text{ s}^{-1}(\text{mol/l})^{-1}$
- $E_a = 130320 \text{ J/mol}$

Attention à sélectionner les bonnes unités !

## 3 - Cliquer sur « OK »



# Etape 3 : Description des réactions chimiques

Les 2 réactions sont à présent configurées

Editeur de réactions chimiques

Cette fenêtre permet de gérer une liste de réactions

#	Nom	Type	Etat physique	Modèle
1	<input checked="" type="checkbox"/> o-Chlorotoluène + Cl2 -> D	Cinétique	Liquide	Arrhenius
2	<input checked="" type="checkbox"/> Dichloro-méthyle-benzène	Cinétique	Liquide	Arrhenius

RÉACTIONS CHIMIQUES  
 RÉACTIONS  
 + Ajouter une réaction  
 Editer cette réaction...  
 Cloner cette réaction  
 X Supprimer cette réaction  
 Expressions littérales...  
 ORDRE  
 ↑ Déplacer la réaction vers le haut  
 ↓ Déplacer la réaction vers le bas  
 MODIFICATIONS

Cliquer sur « Expressions littérales » afin d'afficher les équations de réaction

Expression littérale des réactions

RÉACTIONS CHIMIQUES

AFFICHAGE

☒ Formule chimique  
☐ Nom du constituant

OUTILS

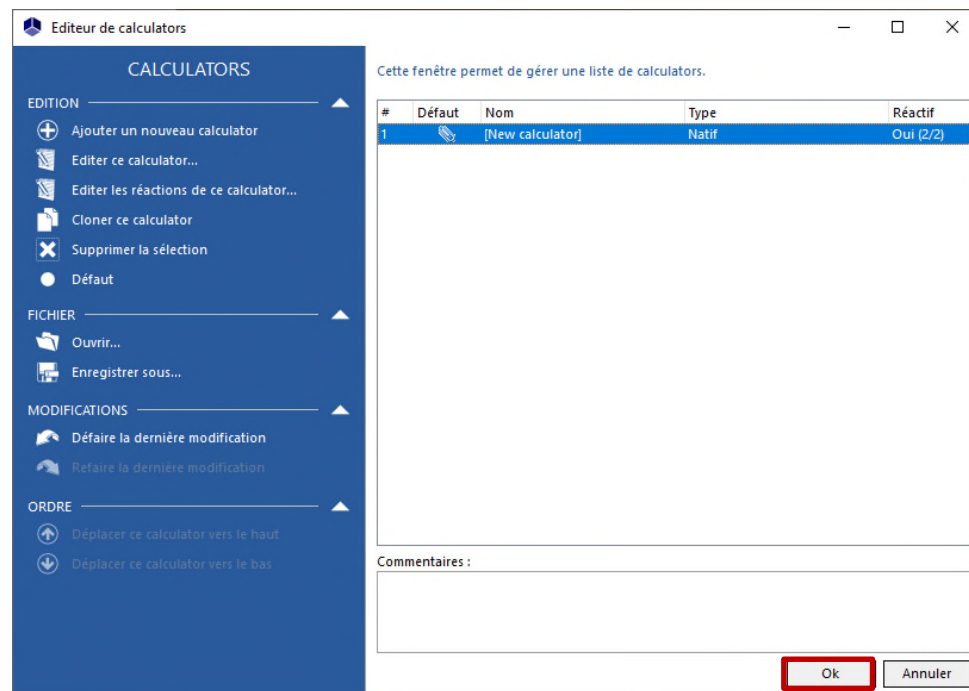
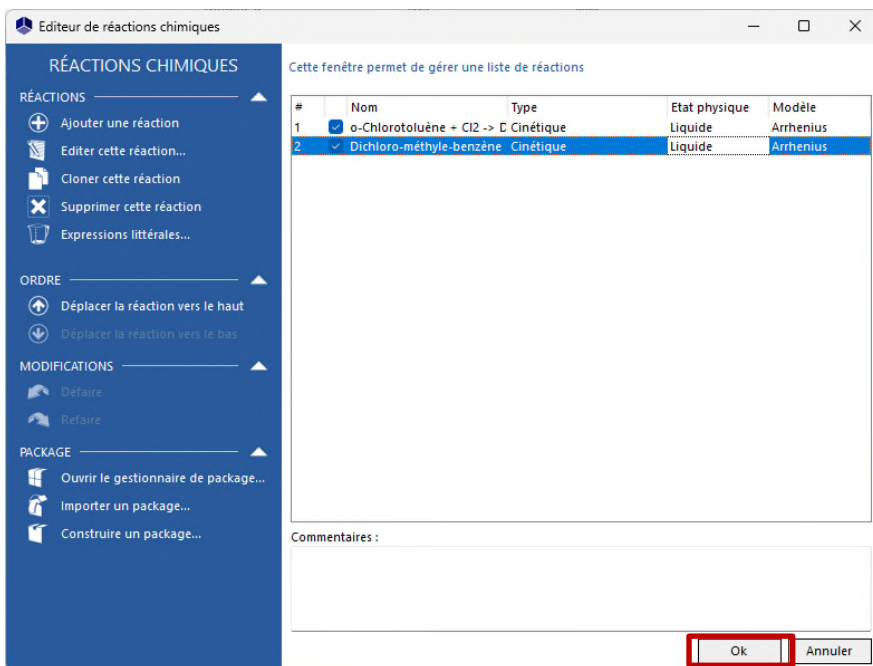
$$C_7H_7Cl + Cl_2 \rightarrow C_7H_6Cl_2 + HCl$$

$$Cl_2 + C_7H_6Cl_2 \rightarrow HCl + C_7H_5Cl_3$$

Fermer

# Etape 3 : Description des réactions chimiques

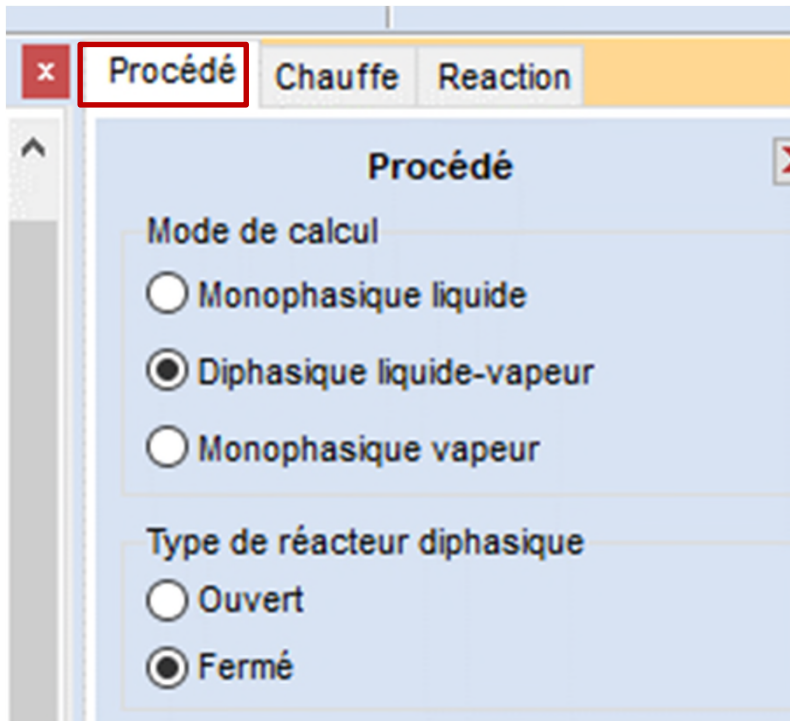
Cliquer ensuite sur « OK » afin de valider le calculator thermodynamique et retourner à la fenêtre principale :



# Etape 4 : Description des équipements

La fenêtre « Procédé » permet de décrire les éléments suivants :

- La topologie générale du réacteur
- Les conditions initiales dans le réacteur
- Les caractéristiques géométriques des équipements



# Etape 4 : Description des équipements

## Configurer le panneau de contrôle :

- 1 - Mode de calcul : « diphasique liquide-vapeur »
- 2 - Type de réacteur : « fermé »
- 3 - Présence d'un condenseur
- 4 - Cuve de type « torisphérique »
- 5 - Agitateur de type « Impeller monobloc à 3 pales »
- 6 - Echangeur à la paroi :
  - Double enveloppe
  - Joint

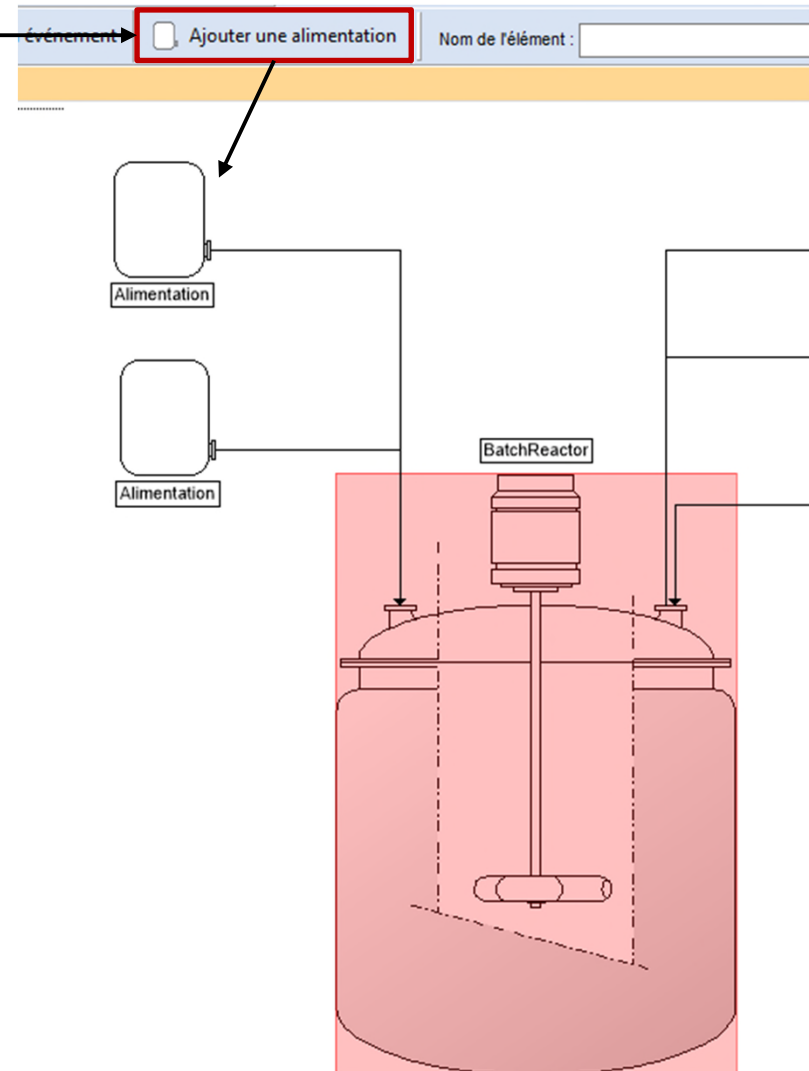
The screenshot shows a software window titled 'Procédé' with a close button (X) in the top right corner. The window has a tabbed interface with 'Procédé', 'Chauffe', and 'Reaction' tabs. The 'Procédé' tab is active, displaying the following configuration options:

- Mode de calcul** (Calculation mode):
  - ☐ Monophasique liquide
  - ☒ Diphasique liquide-vapeur
  - ☐ Monophasique vapeur
- Type de réacteur diphasique** (Diphasic reactor type):
  - ☐ Ouvert
  - ☒ Fermé
- ☐ Avec modèle de transfert
- ☐ Présence d'un soutirage liquide
- ☒ Présence d'un condenseur
- ☐ Présence d'un décanteur
- ☒ La géométrie de la cuve est connue
  - Torisphérique (dropdown menu)
- ☒ Présence d'un agitateur
  - Impeller monobloc à 3 pales (dropdown menu)
  - ☐ Chaleur dissipée incluse
- ☐ Présence d'un échangeur externe
- ☐ Présence d'un serpentin
- ☒ Présence d'un échangeur par la paroi
  - ☐ Présence d'un inducteur
  - Double enveloppe (dropdown menu)
  - Joint (dropdown menu)

# Etape 4 : Description des équipements

## Configurer les alimentations :

1 - Ajouter une alimentation supplémentaire

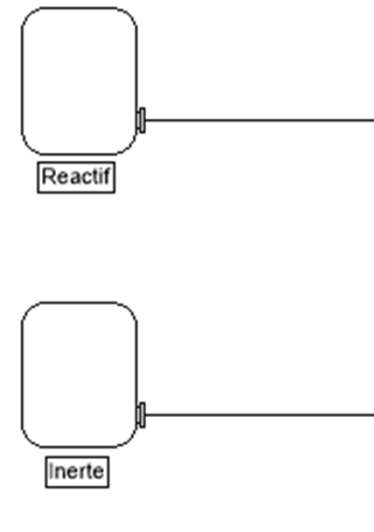
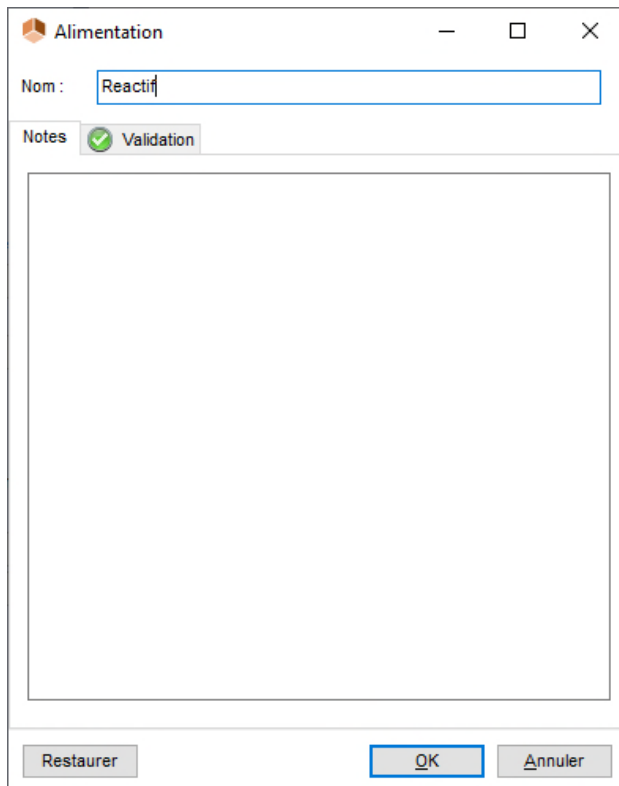


# Etape 4 : Description des équipements

## Configurer les alimentations :

2 - Double cliquer sur les alimentations pour les renommer :

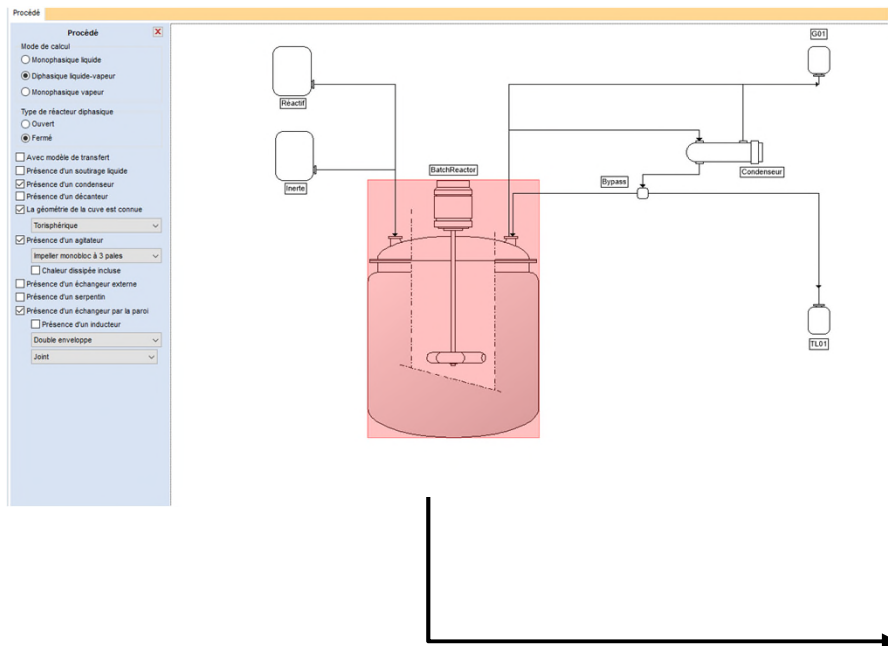
- « Réactif »
- « Inerte »



Les caractéristiques des alimentations seront à renseigner au moment de la description des étapes opératoires

# Etape 4 : Description des équipements

Double cliquer sur le réacteur afin d'ouvrir la fenêtre de configuration :

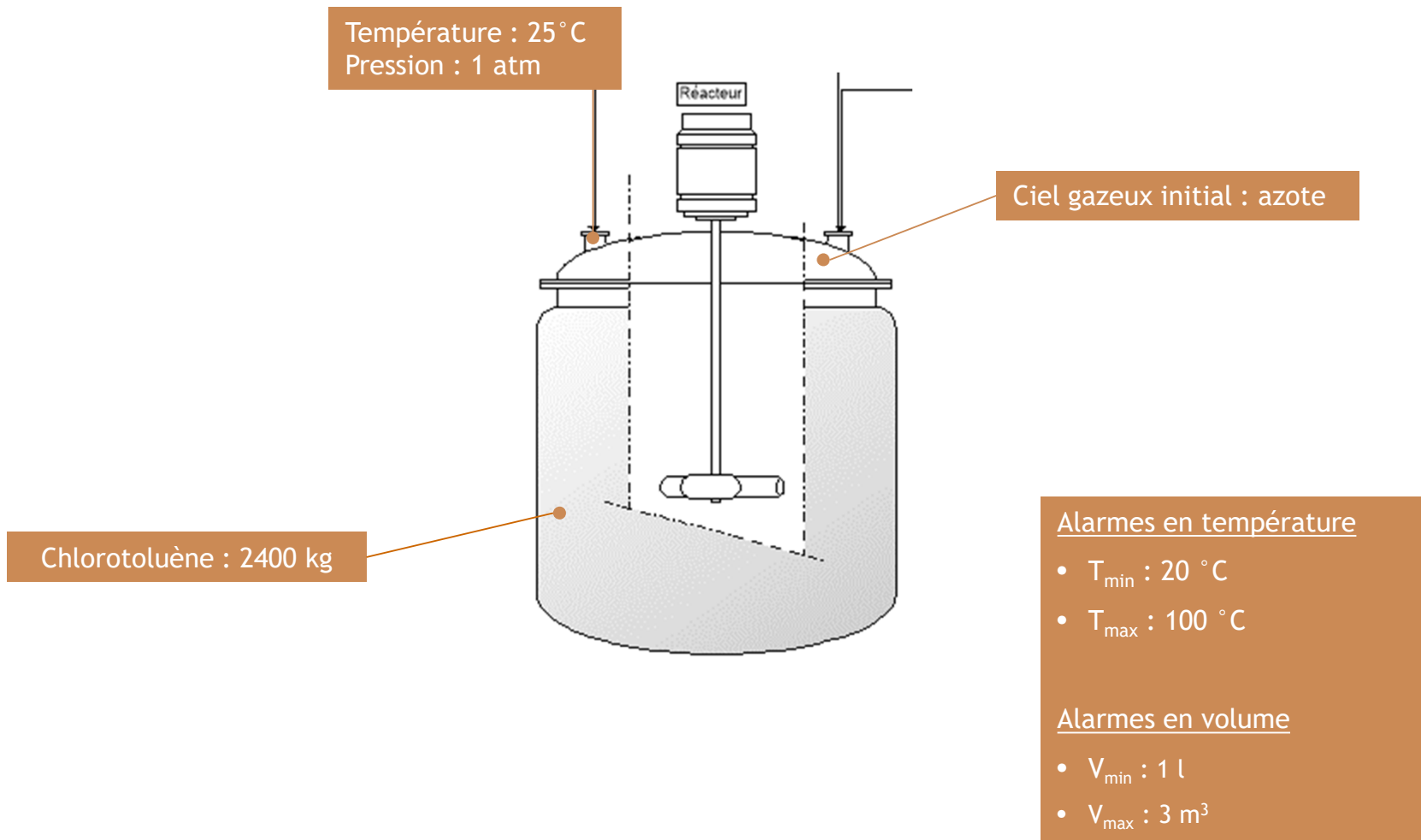


The screenshot shows the 'Réacteur' configuration window. The title bar is 'Réacteur'. The 'Nom' field contains 'Réacteur'. The 'Paramètres' tab is selected. The window displays a detailed diagram of a batch reactor with various components labeled: 'Alimentations' (Feed), 'Température [TR]' (Temperature [TR]), 'Température donnée' (Temperature given) set to 25 °C, 'Alarmer [TR]' (Alarm [TR]) with Minimum 20 °C and Maximum 100 °C, 'Pression [PR]' (Pressure [PR]), 'Pression donnée' (Pressure given) set to 1 atm, 'Productions vapeur' (Vapor production), 'Productions liquide' (Liquid production), 'Ciel' (Sky), 'Agitateur' (Agitator), 'Echangeur par la paroi' (Wall exchanger), 'Matériaux de la paroi' (Wall materials), 'Charge initiale' (Initial charge), 'Géométrie du bas de cuve' (Bottom geometry of the tank), and 'Productions liquide' (Liquid production). The 'Volume global du réacteur [GVR]' (Global volume of the reactor [GVR]) is set to 3 m3, with 'Alarmer [VR]' (Alarm [VR]) set to Minimum 1 and Maximum 3. The bottom of the window has buttons for 'Restaurer' (Restore), 'Technologie' (Technology), 'Référence / Note' (Reference / Note), 'OK', and 'Annuler' (Cancel).



# Etape 4 : Description des équipements

Commencer par indiquer les conditions initiales et les alarmes :



# Etape 4 : Description des équipements

- Conditions initiales et alarmes en température et volume :

**Réacteur**

Nom :

Paramètres Notes Paramètres avancés Validation

**Alimentations**

**Température [TR]**

Température donnée

**Alarmes [TR]**

Minimum

Maximum

**Pression [PR]**

Pression donnée

**Volume global du réacteur [GVR]**

**Alarmes [VR]**

Minimum

Maximum

**Productions vapeur**

**Productions liquide**

**Productions liquide**

**Diagramme du réacteur :**

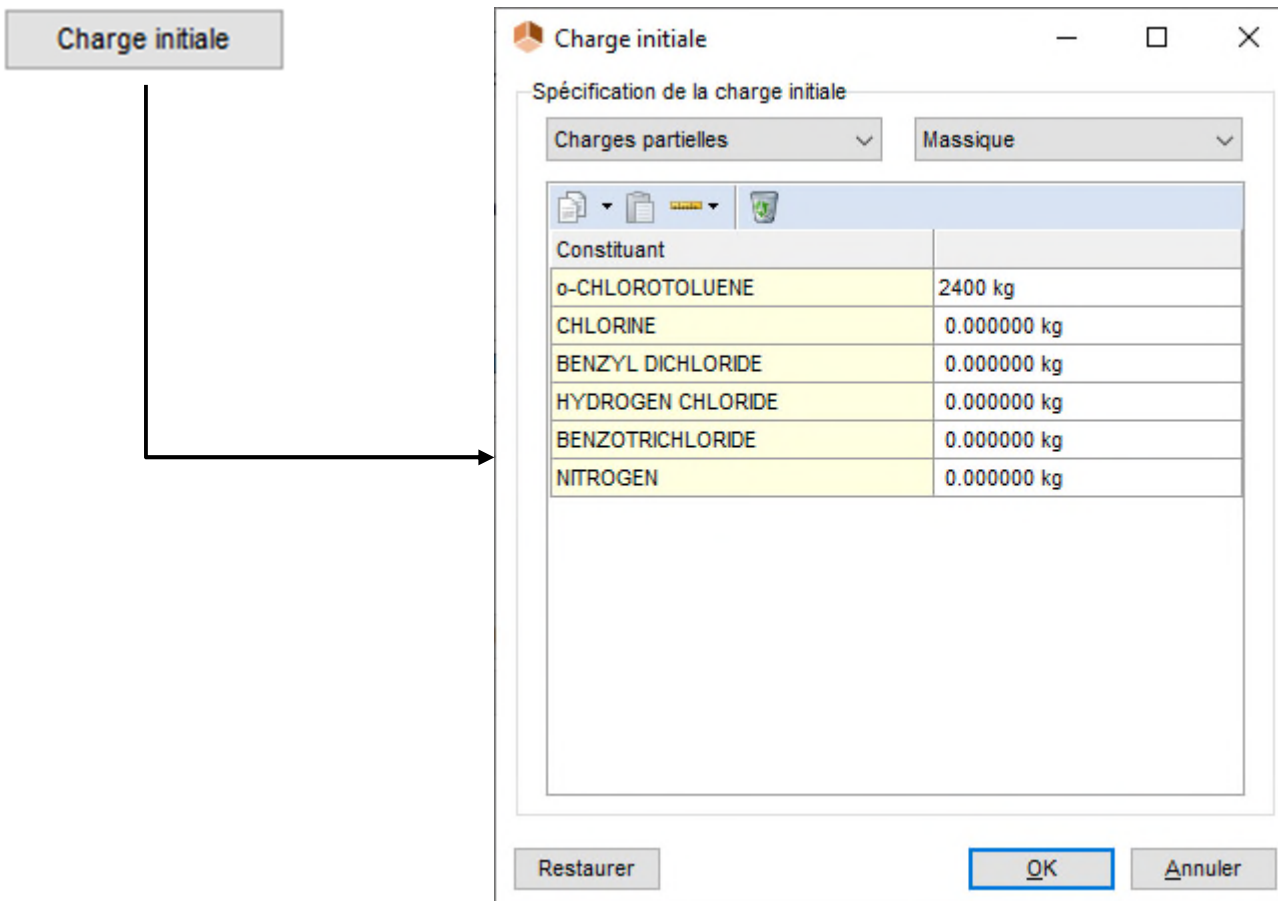
- Ciel
- Agitateur
- Echangeur par la paroi
- Matériaux de la paroi
- Charge initiale
- Géométrie du bas de cuve

Restaurer Technologie Référence / Note

OK Annuler

# Etape 4 : Description des équipements

- Charge initiale :



# Etape 4 : Description des équipements

- Ciel gazeux :

Ciel

→

**Ciel**

Type de ciel

☐ Air

☒ Azote

☐ Autre

☐ Aucun

N2  %

O2  %

=

Variable d'ajustement

☐ Pression

☒ Température

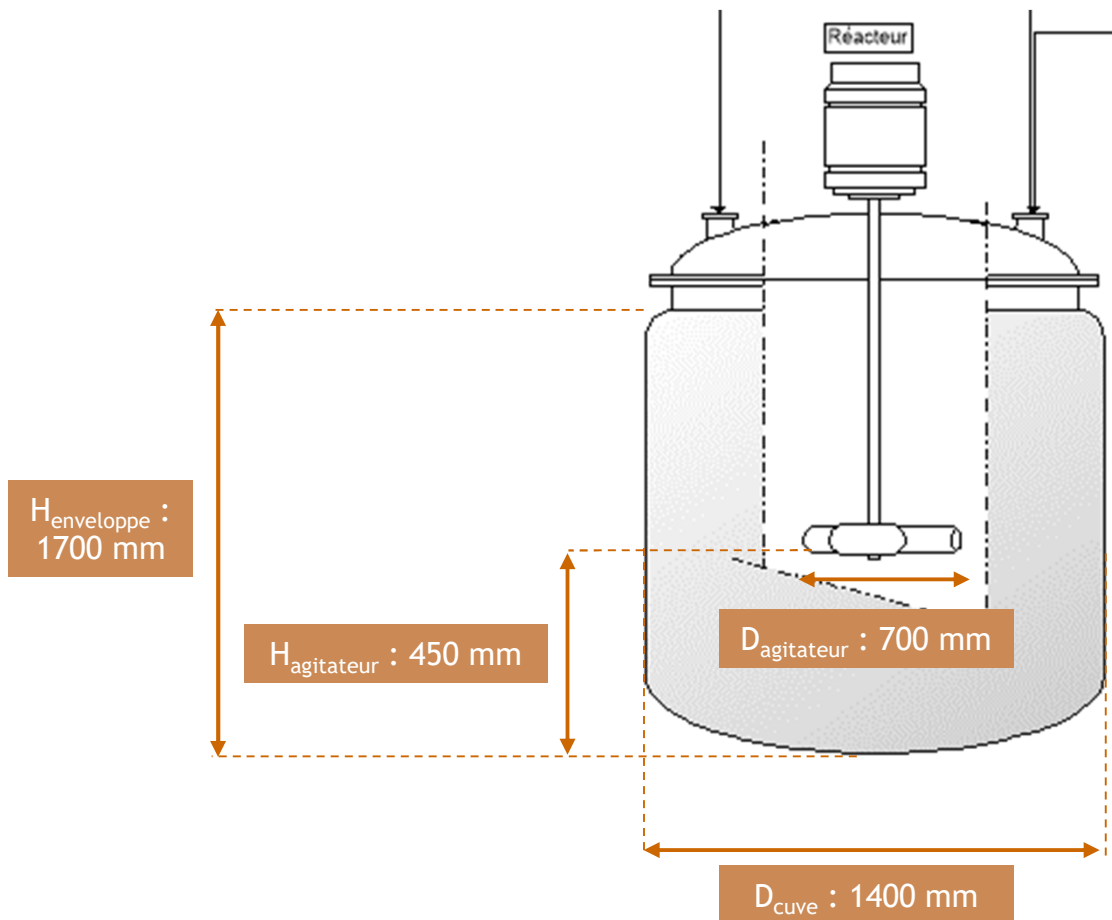
Constituant "Pressurant"

Restaurer

OK Annuler

# Etape 4 : Description des équipements

Renseigner ensuite les caractéristiques géométriques des équipements :



## Cuve :

- 4 chicanes
- Diamètre : 1400 mm
- Rayon de courbure n°1 : 1400 mm
- Rayon de courbure n°2 : 140 mm

## Agitateur :

- Diamètre : 700 mm
- Hauteur : 450 mm

## Double enveloppe :

- Hauteur : 1700 mm
- Distance entre les parois : 50 mm


## Matériaux de la paroi :

- Epaisseur : 17 mm
- Masse : 800 kg

# Etape 4 : Description des équipements

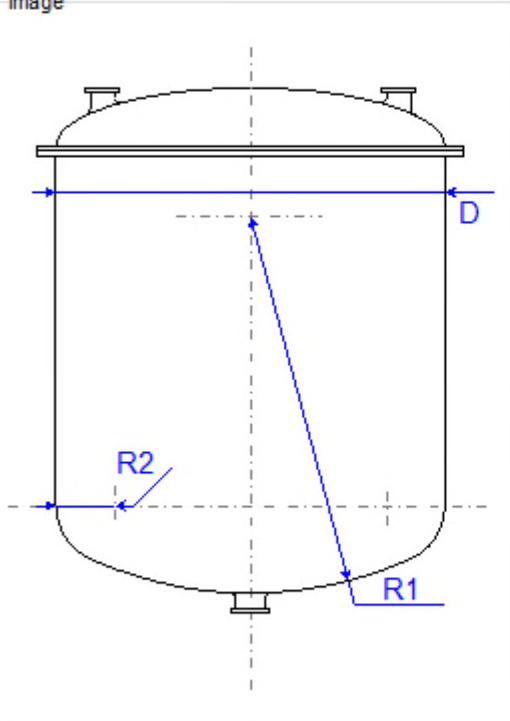
- Géométrie du bas de cuve :

Géométrie du bas de cuve

 Géométrie du bas de cuve

☒ La géométrie de la cuve est connue

Image



Type de géométrie de fond de cuve

Torisphérique

Paramètres

Nombre de chicanes	4
Diamètre de la cuve (D)	1400 mm
Hauteur du fond de la cuve (H)	0 m
Rayon de courbure n°1 (R1)	1400 mm
Rayon de courbure n°2 (R2)	140 mm

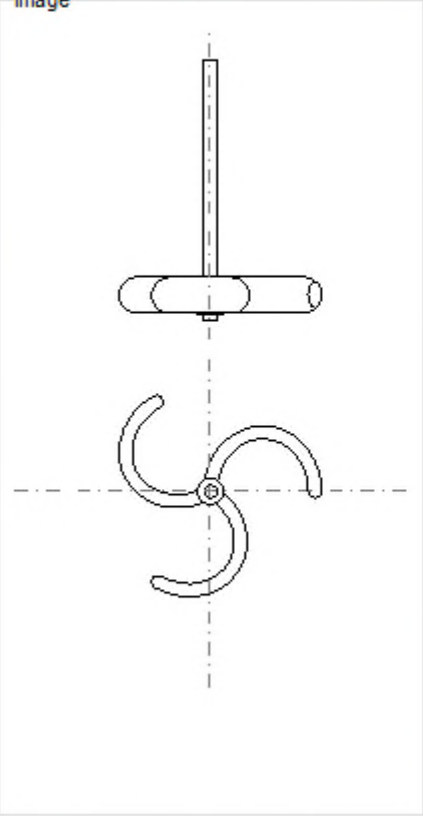
Restaurer Technologie OK Annuler



# Etape 4 : Description des équipements

- Agitateur :

Agitateur



**Agitateur**

☒ Présence d'un agitateur ☐ Chaleur dissipée incluse

Image

Paramètres

Impeller monobloc à 3 pales

Diamètre du mobile d'agitation 700 mm

Hauteur du mobile d'agitation 450 mm

Distance 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.

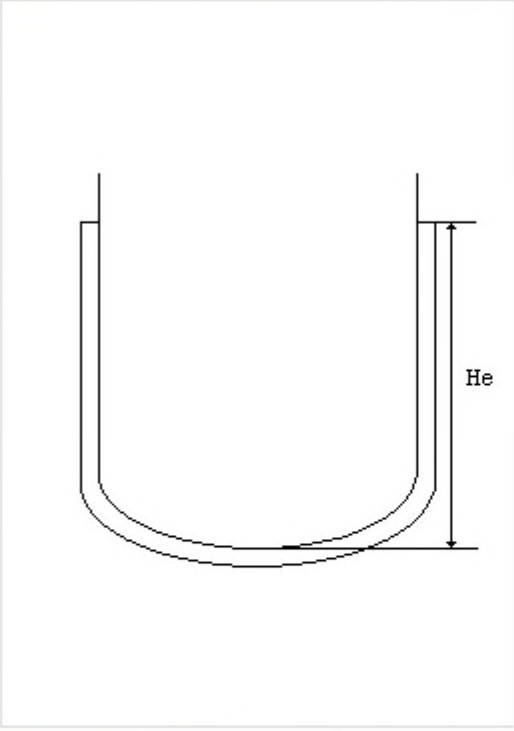
Restaurer Technologie OK Annuler

# Etape 4 : Description des équipements

- Double enveloppe :

Echangeur par la paroi

**Géométrie de la double enveloppe**



**Disposition**

☐ Latéral  
☐ Disjoint  
☒ Joint  
☐ Fond

**Caractéristique de la double enveloppe**

☒ Aucune  
☐ Buses d'injection  
☐ Faussettes  
☐ Chicanes

**Paramètres géométriques**

Espacement entre les chicanes ( $E_c$ ) : 0 m  
 Distance entre les parois de cuve et de double enveloppe ( $E_e$ ) : 50 mm  
 Hauteur latérale (ou totale) de double enveloppe ( $H_e$ ) : 1700 mm  
 Distance entre le fond de cuve et le bas de double enveloppe ( $H_j$ ) : 0 m  
 Epaisseur de la double enveloppe ( $E_{de}$ ) : 0 m  
 Nombre de buses d'injection : 3  
 Diamètre des buses : 0.015 m  
 Rugosité moyenne dans la double enveloppe : 4.57E-5 m

**Sens de circulation du fluide utilisé**

☒ Vers le haut  
☐ Vers le bas

Restaurer Technologie

OK Annuler

# Etape 4 : Description des équipements

- Matériaux de la paroi :

Matériaux de la paroi

Matériaux de la paroi

Nombre de matériaux de la paroi: 1

Matériau n° 1

Epaisseur: 17 mm

Masse: 800 kg

Côté PROCEDE

Côté UTILITE

Matériau n° 2

Epaisseur: 0 m

Masse: 0 kg

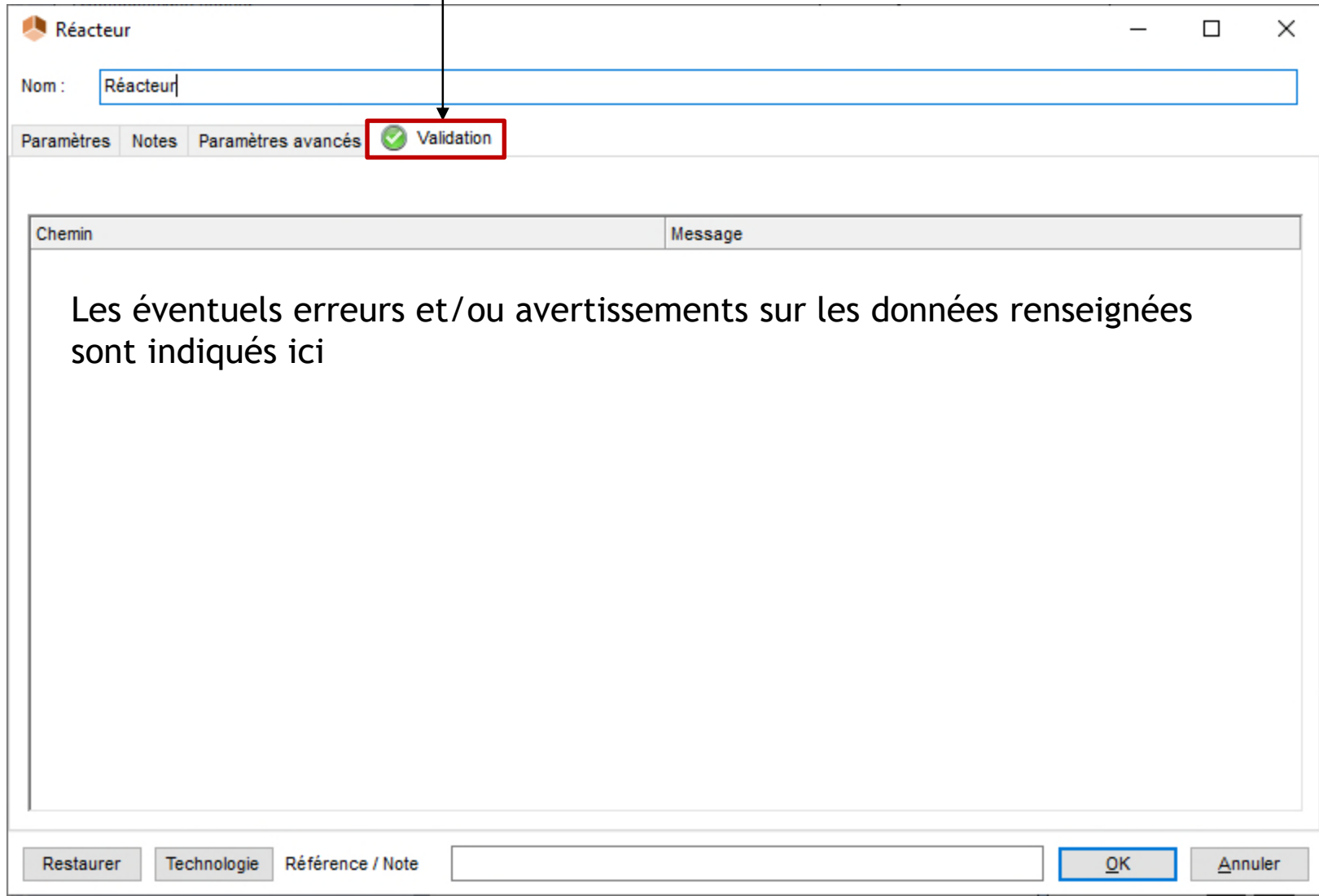
Restaurer Technologie OK Annuler



Remarque : il est possible de sauvegarder / importer des équipements en cliquant sur le bouton « technologie »

# Etape 4 : Description des équipements

Cliquer sur l'onglet « Validation »



The screenshot shows a software window titled 'Réacteur'. At the top, there is a text field labeled 'Nom :' containing the word 'Réacteur'. Below this, there is a tabbed interface with four tabs: 'Paramètres', 'Notes', 'Paramètres avancés', and 'Validation'. The 'Validation' tab is selected and highlighted with a red rectangle. An arrow points from the text 'Cliquer sur l'onglet « Validation »' to the 'Validation' tab. The main area of the window is divided into two columns: 'Chemin' and 'Message'. The 'Message' column contains the text: 'Les éventuels erreurs et/ou avertissements sur les données renseignées sont indiqués ici'. At the bottom of the window, there is a footer bar with buttons for 'Restaurer', 'Technologie', 'Référence / Note', 'OK', and 'Annuler'.

Nom : Réacteur

Paramètres Notes Paramètres avancés **Validation**

Chemin Message

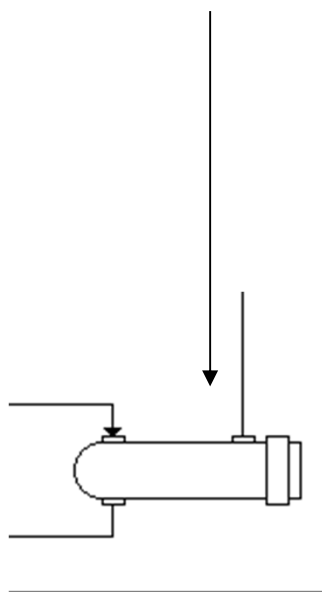
Les éventuels erreurs et/ou avertissements sur les données renseignées sont indiqués ici

Restaurer Technologie Référence / Note OK Annuler

# Etape 4 : Description des équipements

Double cliquer sur le condenseur pour accéder à sa fenêtre de configuration

Entrer le nombre d'étages : 2  
Deux condenseurs en série sont ainsi définis



Condenseur

Nom : Condenser

Paramètres Notes Validation

☐ La géométrie du condenseur est connue

Nombre d'étages: 2

Géométrie du 1er étage Géométrie du 2ème étage

Dupliquer Technologie

Nombre de chicanes: 1

Référence / Note

Nombre total de tubes: 1

Disposition des tubes: Carré

Pas des tubes (d1): 0 m

Epaisseur des tubes (d2): 0 m

Diamètre intérieur des tubes (d3): 0 m

Nombre de passes (coté tubes): 1

Diamètre intérieur de calandre (D): 0 m

Rapport d'ouverture de chicane (h/D): 0.25

Longueur de tube: 0 m

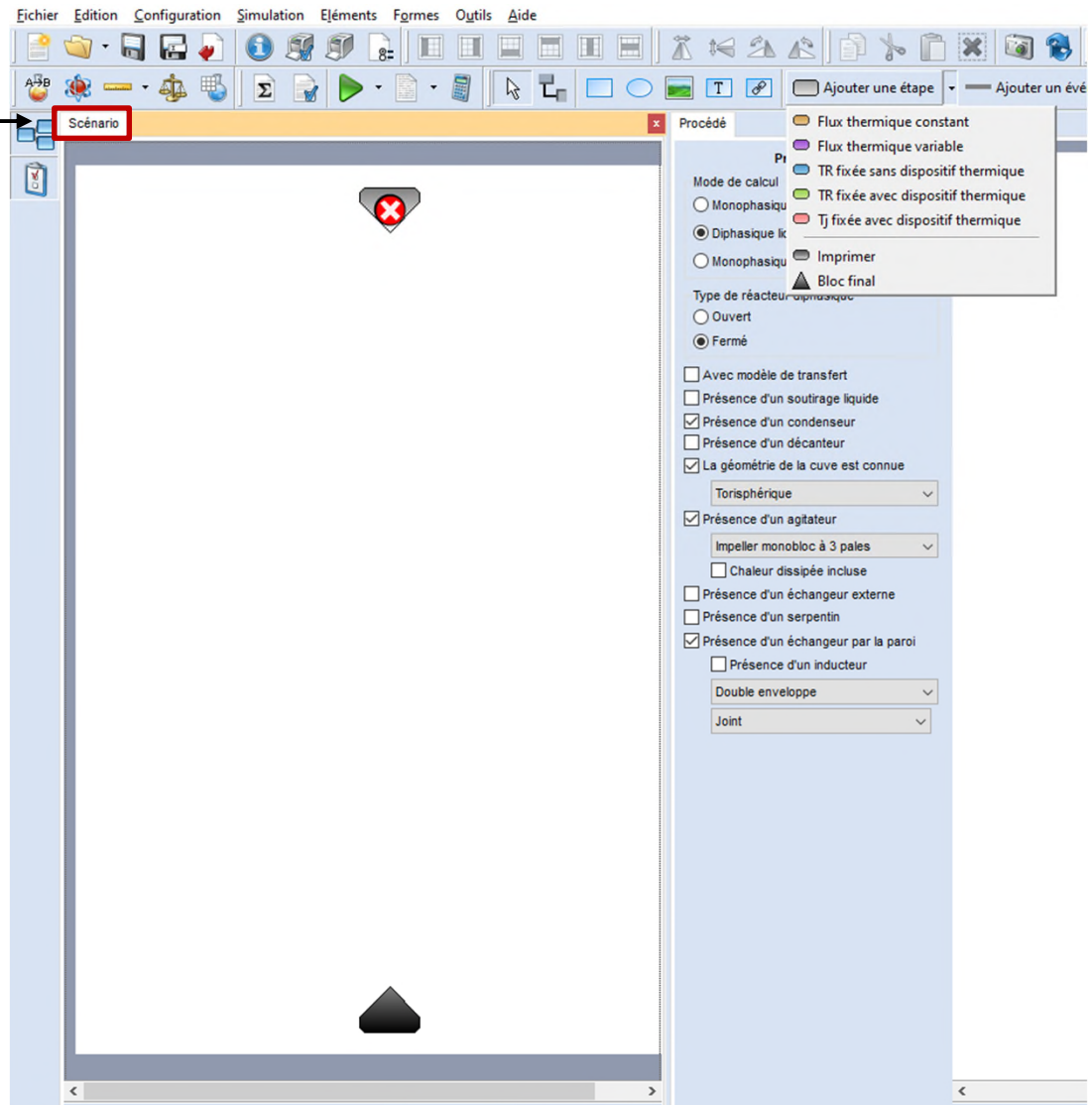
Conductivité thermique des tubes: 100 W/mK

Orientation du condenseur: Horizontal

Restaurer OK Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

Le mode opératoire est décrit dans l'onglet « scénario » et correspond à un enchainement d'étapes et d'événements

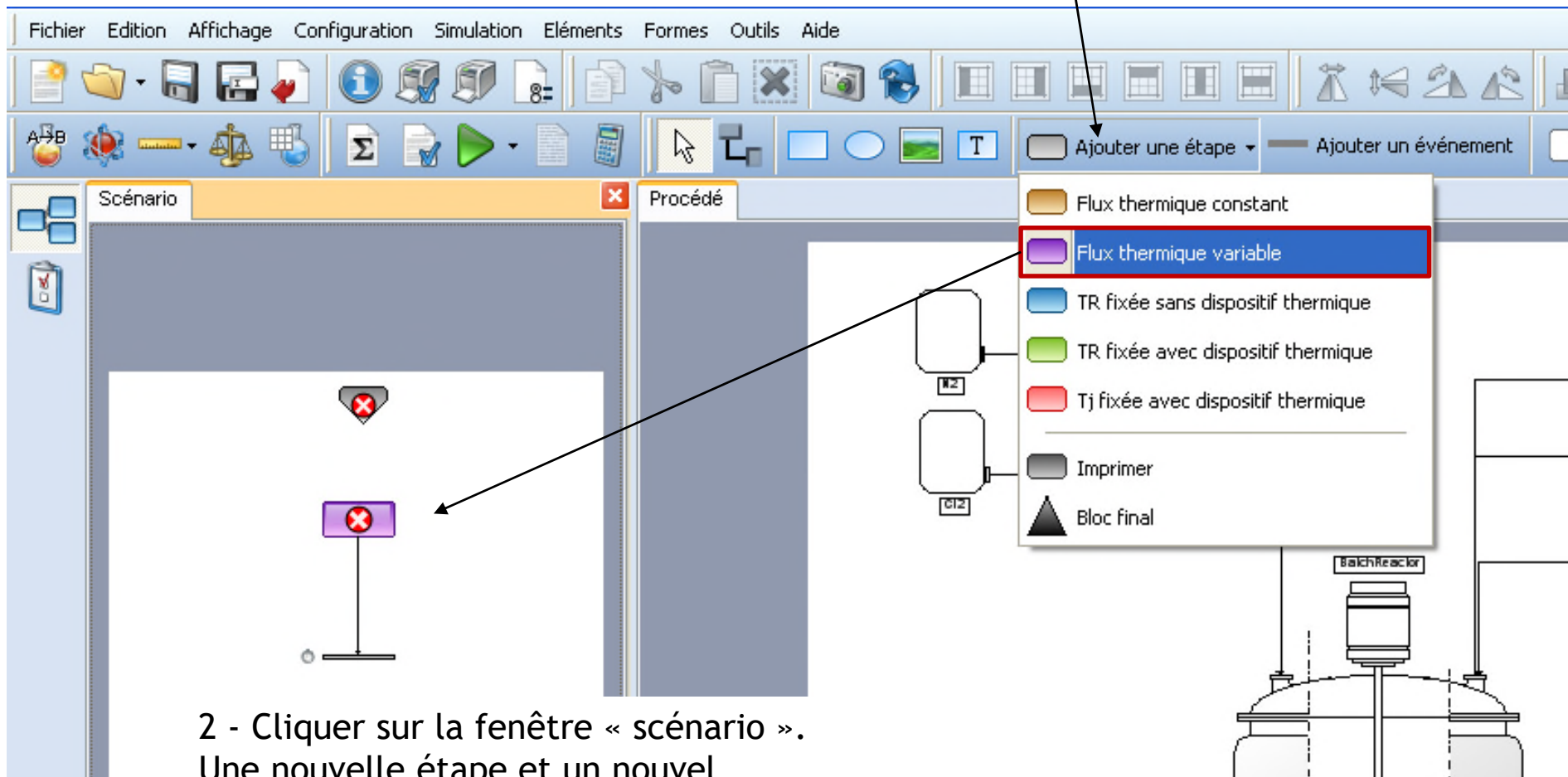




# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Ajouter l'étape de « chauffe » :

1 - Cliquer sur « Ajouter une étape » puis sur « Flux thermique variable »



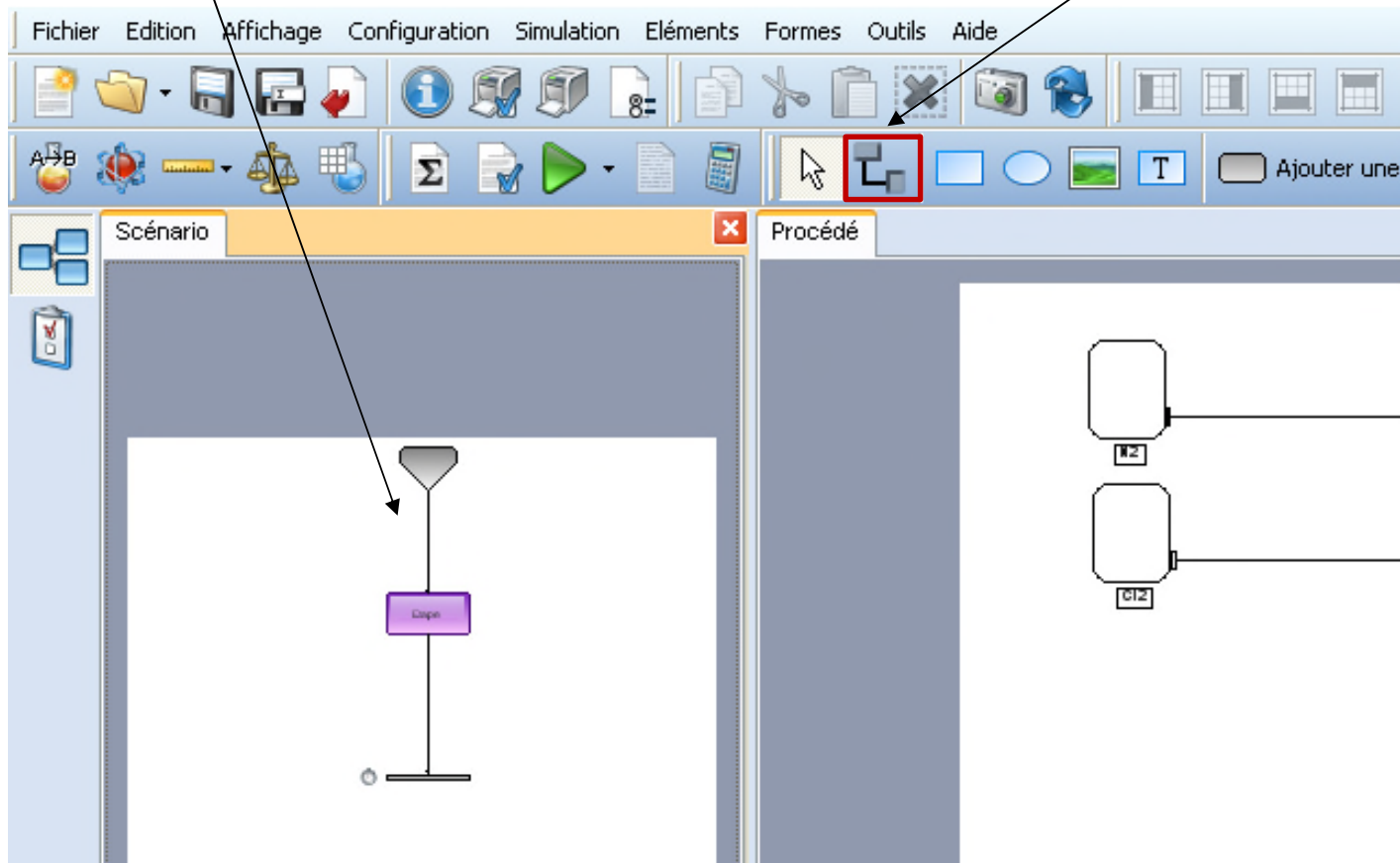
2 - Cliquer sur la fenêtre « scénario ». Une nouvelle étape et un nouvel événement de fin sont créés

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Connecter l'étape de démarrage à l'étape de « chauffe » :

2 - Cliquer sur le premier triangle (début de la simulation) puis cliquer sur la première étape

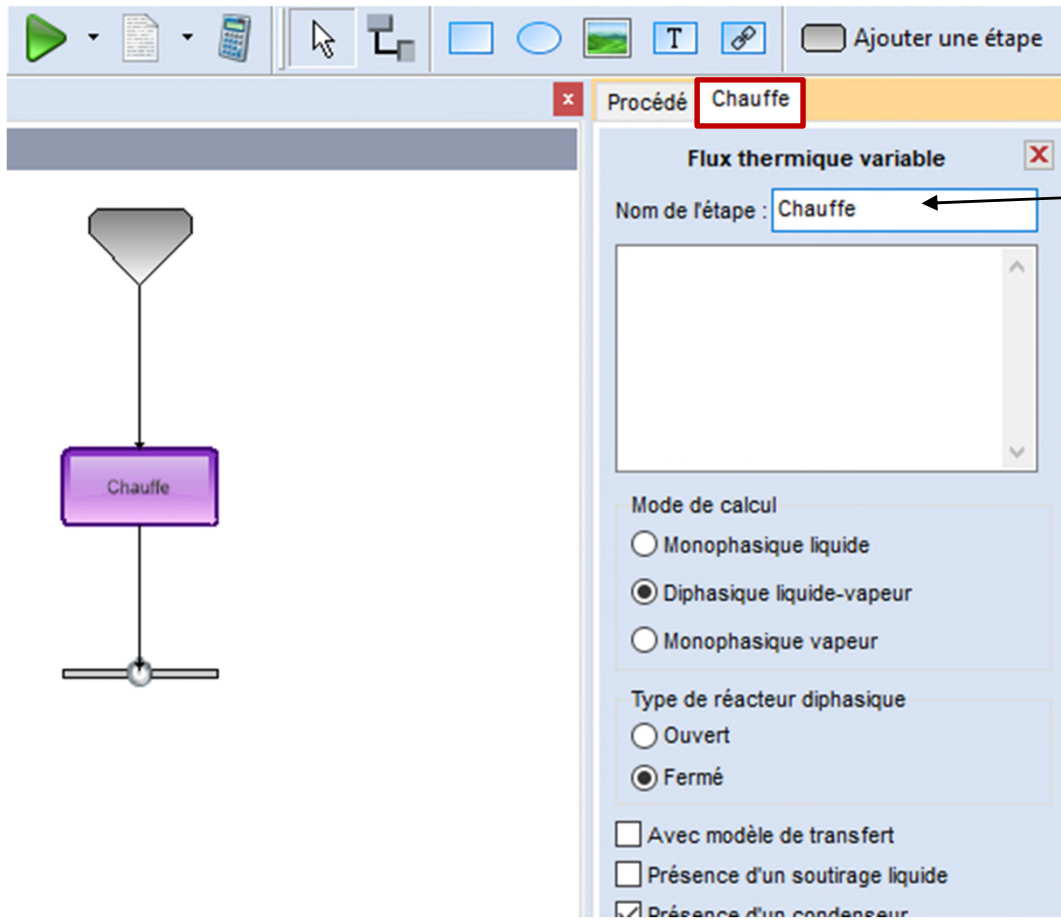
1 - Cliquer sur « connexion »



- Double cliquer sur l'étape pour accéder à la fenêtre de configuration

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :



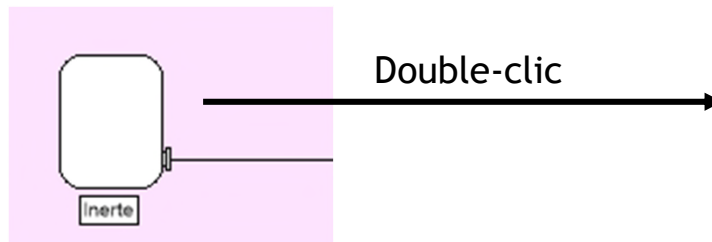
Renommer l'étape  
« Chauffe »

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :

Double cliquer sur l'alimentation « inerte » pour en renseigner les caractéristiques :

- Cocher « Alimentation ouverte »
- Température : 25°C
- Pression : 1 atm
- Débit d'azote : 1 kg/h



Alimentation

Nom : Inerte

Paramètres Notes Validation

☒ Alimentation ouverte

Spécification de la température

Température donnée 25 °C

Spécification de la pression

Pression donnée 1 atm

Spécification initiale de débit Variation du débit

Débits partiels Massique

Constituant	Débit
o-CHLOROTOLUENE	0.000000 kg/s
CHLORINE	0.000000 kg/s
BENZYL DICHLORIDE	0.000000 kg/s
HYDROGEN CHLORIDE	0.000000 kg/s
BENZOTRICHLORIDE	0.000000 kg/s
NITROGEN	1 kg/h

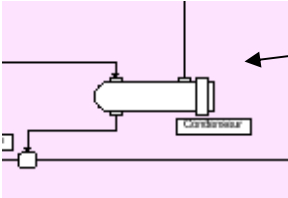
Calculateur Calculateur par défaut

Restaurer OK Annuler



# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :



1 - Double cliquer sur le condenseur pour en renseigner les caractéristiques

2 - Cocher  
« condenseur ouvert »

3 - Type de condenseur :  
calculé

4 - Nombre d'étages  
utilisés : 2

**Condenseur**

Nom : Condenseur

Paramètres Notes Validation

**Paramètres de l'étape**

☒ Condenseur ouvert

Type de condenseur : Condenseur calculé

Nombre d'étages utilisés : 2

1er étage utilisé 2ème étage utilisé

Type de calcul : A surface et coefficient d'échange fixés

Coef. d'échange : 0 W/m<sup>2</sup>/K

Aire d'échange : 0 m<sup>2</sup>

Perte de charge : 0 Pa

Fluide utilisé : Eau

Température d'entrée : 25 °C

Point n° 1

Température de référence : 25 °C

Chaleur spécifique massique : 0 J/kg/K

Masse volumique : 0 kg/m<sup>3</sup>

Viscosité dynamique : 0 Pa.s

Conductivité thermique : 0 W/m/K

Point n° 2

Température de référence : 25 °C

Chaleur spécifique massique : 0 J/kg/K

Masse volumique : 0 kg/m<sup>3</sup>

Viscosité dynamique : 0 Pa.s

Conductivité thermique : 0 W/m/K

Technologie Référence / Note

Calculateur Calculateur par défaut

Restaurer OK Annuler



# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :

## Renseigner les caractéristiques du 1<sup>er</sup> étage :

- Type de calcul : à surface et coefficient d'échange fixés
- Coefficient d'échange : 300 kcal/h/m<sup>2</sup>/K
- Aire d'échange : 15 m<sup>2</sup>
- Fluide utilisé :
  - Eau
  - Température d'entrée : 20°C
  - Débit : 3000 kg/h

The screenshot shows the 'Condenseur' software window with the following configuration:

- Nom :** Condenseur
- Paramètres** (selected), Notes, Validation
- Paramètres de l'étape**
  - ☒ Condenseur ouvert
  - Type de condenseur: Condenseur calculé
  - Nombre d'étages utilisés: 2
  - 1er étage utilisé** (highlighted), 2ème étage utilisé
- Type de calcul:** A surface et coefficient d'échange fixés (selected), Dupliquer
  - Coefficient d'échange: 300 kcal/h/m<sup>2</sup>/K
  - Aire d'échange: 15 m<sup>2</sup>
  - Perte de charge: 0 Pa
  - Nombre de pas de calcul: 10
  - Coef. d'encrassement (TUBES): 0 W/m<sup>2</sup>/K
  - Coef. d'encrassement (CALANDRE): 0 W/m<sup>2</sup>/K
- Fluide utilisé**
  - Type de fluide: Eau
  - Température d'entrée: 20°C
  - Nombre de points: 2
  - Débit massique: 3000 kg/h
- Point n° 1**
  - Température de référence: 25 °C
  - Chaleur spécifique massique: 0 J/kg/K
  - Masse volumique: 0 kg/m<sup>3</sup>
  - Viscosité dynamique: 0 Pa.s
  - Conductivité thermique: 0 W/m/K
- Point n° 2**
  - Température de référence: 25 °C
  - Chaleur spécifique massique: 0 J/kg/K
  - Masse volumique: 0 kg/m<sup>3</sup>
  - Viscosité dynamique: 0 Pa.s
  - Conductivité thermique: 0 W/m/K
- Technologie** | **Référence / Note**
- Calculateur** | Calculateur par défaut
- Buttons: Restaurer, OK, Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :

## Renseigner les caractéristiques du 2<sup>ème</sup> étage :

- Type de calcul : à surface et coefficient d'échange fixés
- Coefficient d'échange : 300 kcal/h/m<sup>2</sup>/K
- Aire d'échange : 0,5 m<sup>2</sup>
- Fluide utilisé :
  - Cliquer sur « Technologie » et importer le fluide « Ethylène glycol 40% » depuis la base de données
  - Température d'entrée : -15 °C
  - Débit : 100 kg/h

Condenseur

Nom : Condenseur

Paramètres Notes Validation

Paramètres de l'étape

☒ Condenseur ouvert

Type de condenseur : Condenseur calculé

Nombre d'étages utilisés : 2

1er étage utilisé 2ème étage utilisé

Type de calcul : A surface et coefficient d'échange fixés

Coef. d'échange : 300 kcal/h/m<sup>2</sup>/K

Aire d'échange : 0.5 m<sup>2</sup>

Perte de charge : 0 Pa

Fluide utilisé

Type de fluide : Autre

Température d'entrée : -15 °C

Point n° 1

Température de référence : -20 °C

Chaleur spécifique massique : 3280 J/kg/K

Masse volumique : 1069 kg/m<sup>3</sup>

Viscosité dynamique : 0.0165 Pa.s

Conductivité thermique : 0.436 W/m/K

Point n° 2

Température de référence : 100 °C

Chaleur spécifique massique : 3790 J/kg/K

Masse volumique : 1001 kg/m<sup>3</sup>

Viscosité dynamique : 0.00056 Pa.s

Conductivité thermique : 0.455 W/m/K

Technologie Référence / Note

Ethylene glycol 40% (-20 100)

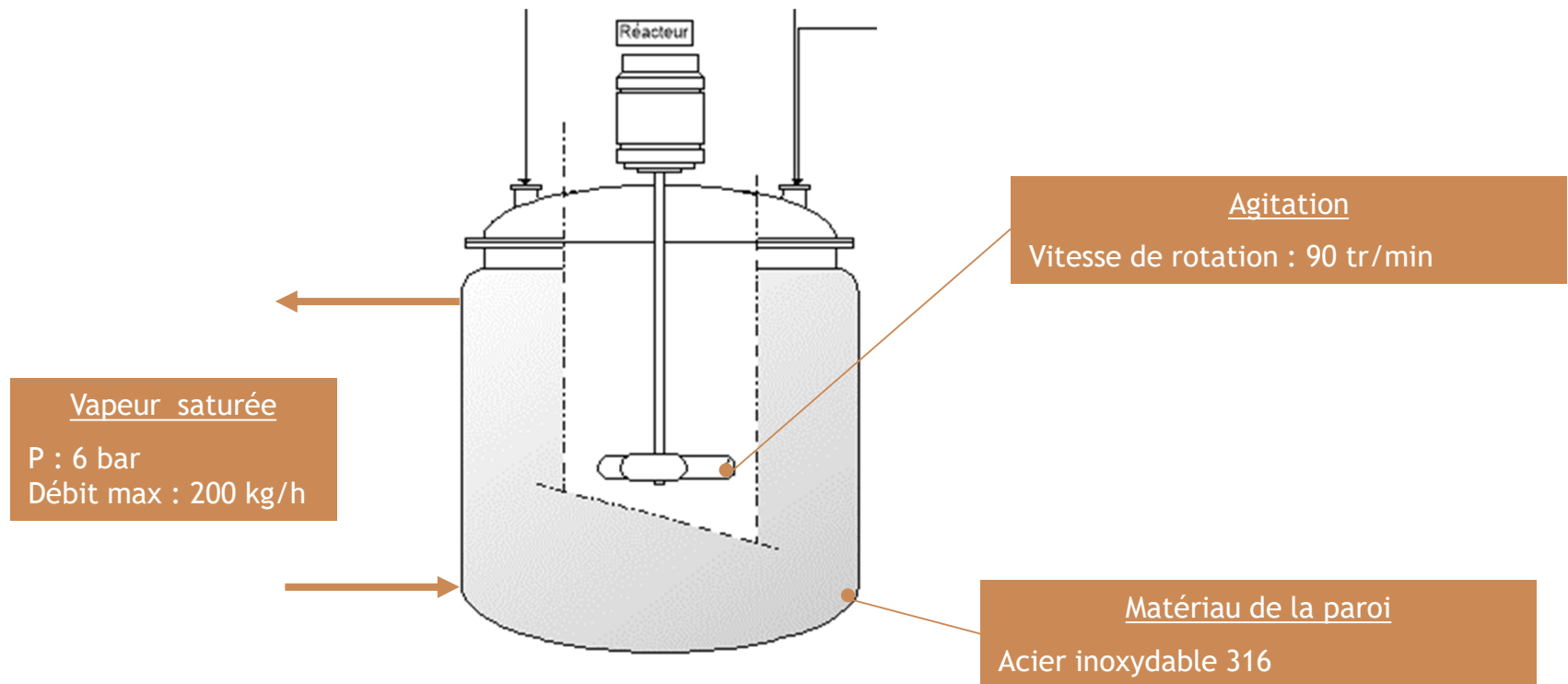
Calculateur Calculateur par défaut

Restaurer OK Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :

Les caractéristiques du système de chauffe sont les suivantes :



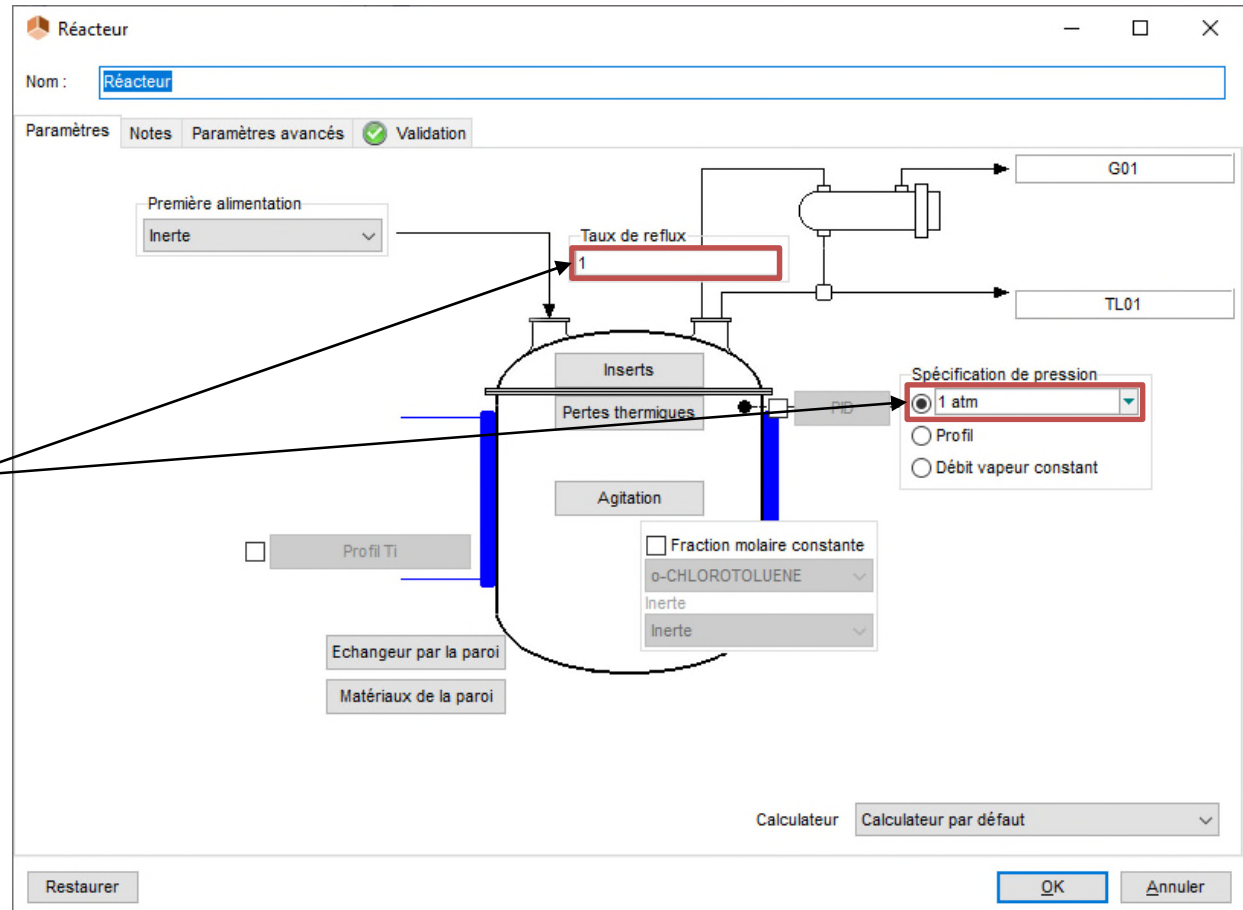
# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :

1 - Double cliquer sur l'icône du réacteur afin d'accéder à la fenêtre de configuration

2 - Entrer les paramètres opératoires :

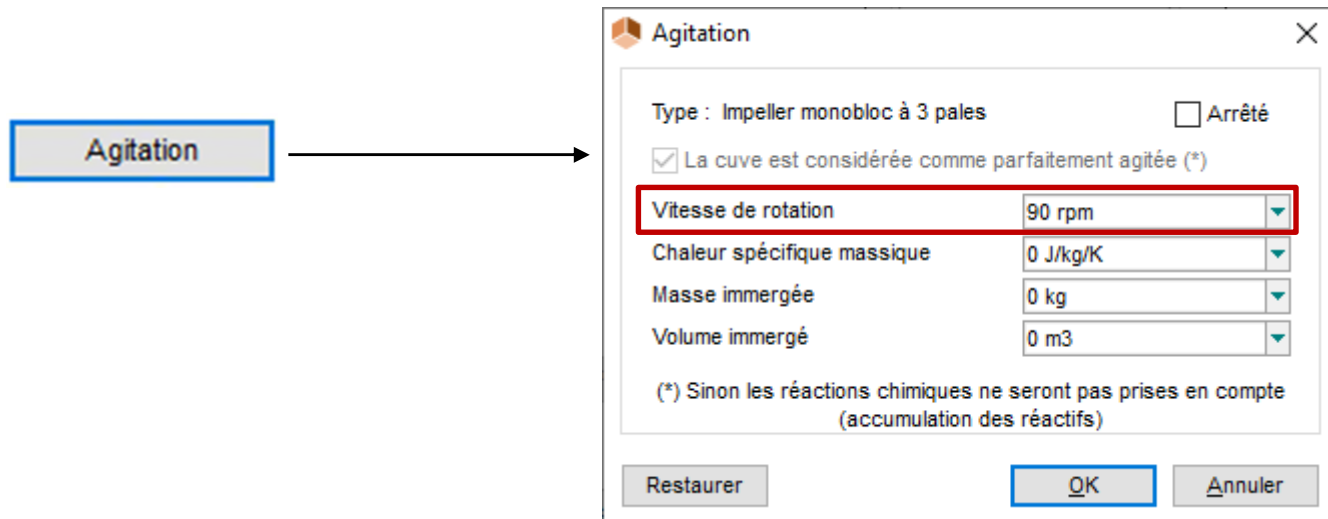
- Taux de reflux (1 pour 100% de reflux)
- Spécification de pression



# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :

Renseigner les caractéristiques d'agitation :



The diagram illustrates the configuration of the 'Agitation' step. A box labeled 'Agitation' is shown on the left, with an arrow pointing to a configuration window titled 'Agitation' on the right. The window contains the following settings:

- Type : Impeller monobloc à 3 pales ☐ Arrêté
- ☒ La cuve est considérée comme parfaitement agitée (\*)
- Vitesse de rotation : 90 rpm
- Chaleur spécifique massique : 0 J/kg/K
- Masse immergée : 0 kg
- Volume immergé : 0 m3

(\*) Sinon les réactions chimiques ne seront pas prises en compte (accumulation des réactifs)


Buttons: Restaurer, OK, Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :

Renseigner les caractéristiques du dispositif thermique :

Echangeur par la paroi



**Paramètres de l'échangeur par la paroi**

☒ L'échangeur par la paroi est actif

☐ Différence de température maximum procédé/utilité

☐ Coefficient global d'échange donné

☐ Coefficient d'échange donné (coté PROCEDE)

☐ Coefficient d'échange donné (coté UTILITE)

Coefficient d'encrassement

**Fluide utilisé**

Type de fluide :

Température d'entrée :

Nombre de points :

**Point n° 1**

Température de référence :

Chaleur spécifique massique :

Masse volumique :

Viscosité dynamique :

Conductivité thermique :

Coefficient d'expansion thermique :  1/K

**Point n° 2**

Température de référence :

Chaleur spécifique massique :

Masse volumique :

Viscosité dynamique :

Conductivité thermique :

Coefficient d'expansion thermique :  1/K

Technologie :

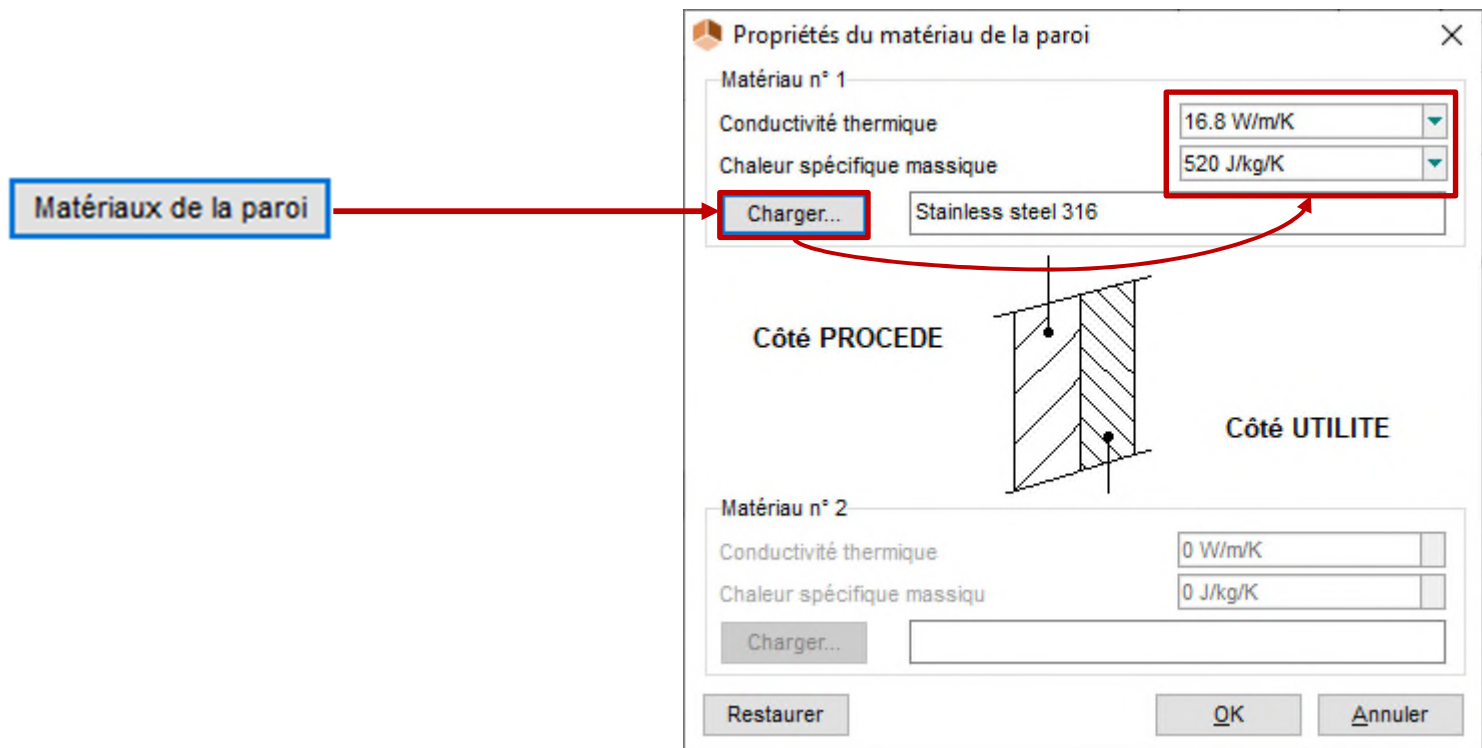
Restaurer



# Etape 5 : Description du mode opératoire

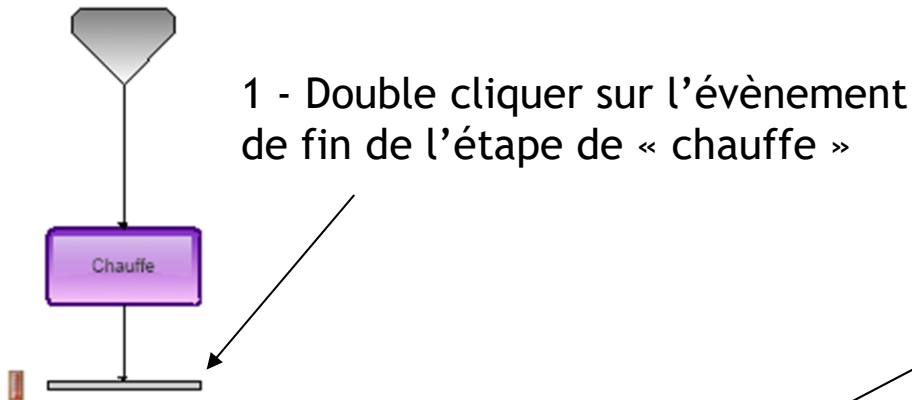
- Configurer l'étape de « chauffe » :

Matériaux de la paroi : importer les caractéristiques de « l'acier inox 316 » (« stainless steel 316 ») depuis la base de données :



# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « chauffe » :



2 - Entrer le nom de l'évènement

3 - Sélectionner le type d'évènement : température de 58°C atteinte dans le réacteur

Evènement

Information

Nom : T(Réacteur) = 58°C

Paramètres Notes Validation

Type d'évènement

- ☐ Temps écoulé depuis le début de la simulation
- ☐ Temps écoulé depuis le début de l'étape
- ☒ Température dans le réacteur
- ☐ Fraction dans le réacteur
- ☐ Concentration dans le réacteur
- ☐ Charge partielle
- ☐ Charge totale
- ☐ Pression dans le réacteur

Paramètre(s) de l'évènement

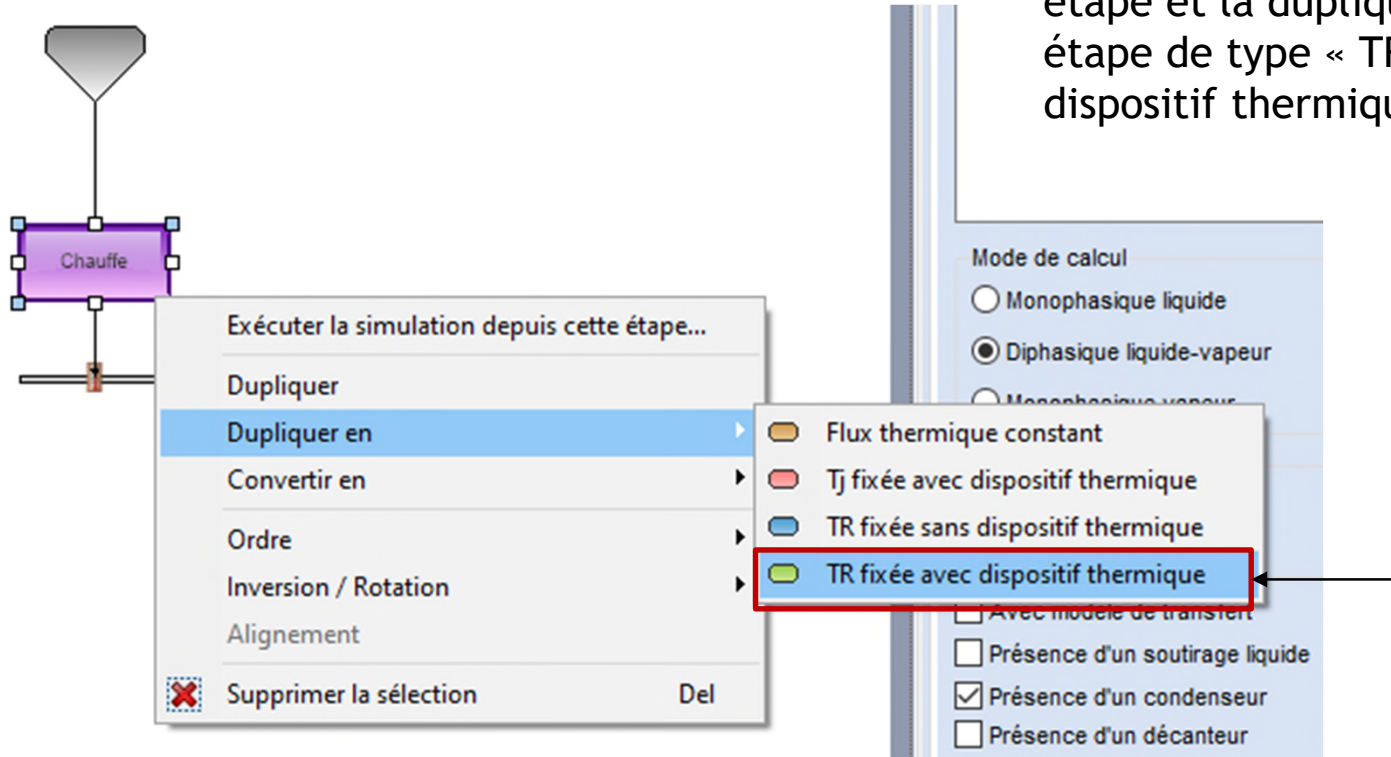
Température

= 58 °C

OK Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

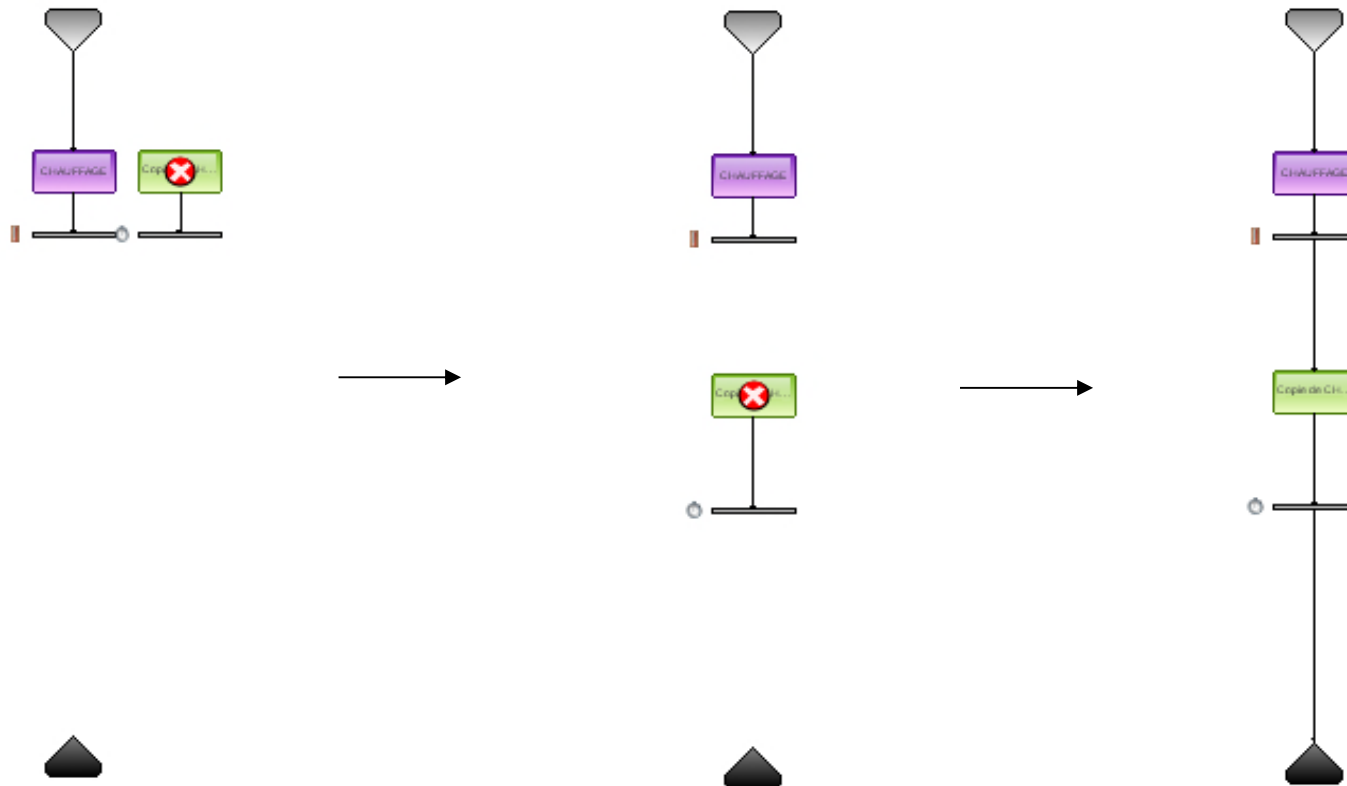


Dupliquer une étape permet d'éviter de devoir configurer une nouvelle fois la plupart des informations de la nouvelle étape

# Etape 5 : Description du mode opératoire

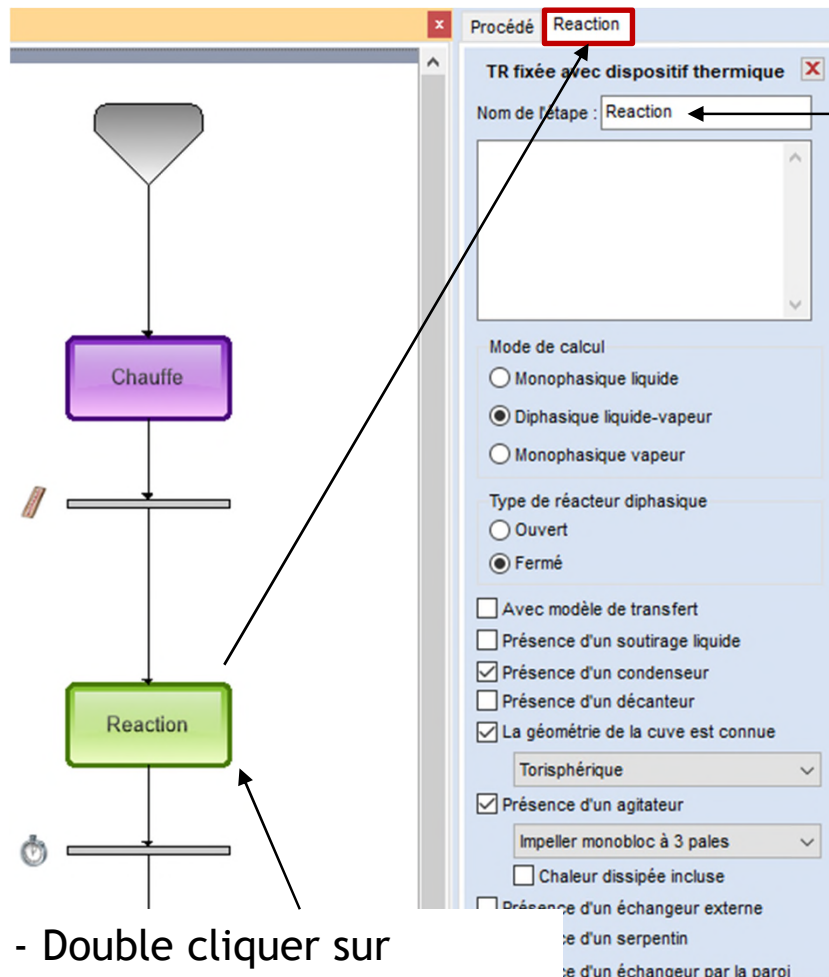
- Configurer l'étape de « réaction » :

Connecter comme précédemment la nouvelle étape à l'évènement de fin de l'étape de « chauffe » et à l'évènement de fin de la simulation :



# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :



2 - Renommer l'étape « Réaction »

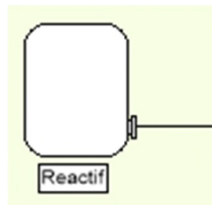
1 - Double cliquer sur l'étape pour accéder à sa fenêtre de configuration

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

Double cliquer sur l'alimentation « Réactif » pour en renseigner les caractéristiques :

- Cocher « Alimentation ouverte »
- Température : 25°C
- Pression : 3 bar
- Débit de chlore : 60 kg/h



Alimentation

Nom :

Paramètres Notes Validation

☒ Alimentation ouverte

Spécification de la température

Température donnée 25 °C

Spécification de la pression

Pression donnée 3 bar

Spécification initiale de débit Variation du débit

Débits partiels Massique

Constituant	Débit
o-CHLOROTOLUENE	0.000000 kg/s
CHLORINE	60 kg/h
BENZYL DICHLORIDE	0.000000 kg/s
HYDROGEN CHLORIDE	0.000000 kg/s
BENZOTRICHLORIDE	0.000000 kg/s
NITROGEN	0.000000 kg/s

Calculateur Calculateur par défaut

Restaurer OK Annuler



# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

1 - Double cliquer sur l'icône du réacteur afin d'accéder à la fenêtre de configuration

2 - Sélectionner « PID »

**Réacteur**

Nom : Réacteur

Paramètres Notes Paramètres avancés Validation

Première alimentation  
Inerte

Spécification de température  
☒ PID  
 Minimum 59 °C  
 Consigne 62 °C  
 Maximum 65 °C

Variable de régulation  
 Débit du fluide utilisé  
 Minimum 1 kg/h  
 Maximum 10000 kg/h

Taux de reflux  
1

Inserts  
Pertes thermiques  
Agitation

Spécification de pression  
☒ 1 atm  
☐ Profil  
☐ Débit vapeur constant

☐ Fraction molaire constante  
 o-CHLOROTOLUENE  
 Inerte  
 Inerte

Echangeur par la paroi  
Matériaux de la paroi

Calculateur Calculateur par défaut

Restaurer OK Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

## 3 - Renseigner les paramètres du PID :

### Consignes de températures :

- Température de consigne : 62°C
- Température minimum : 59°C
- Température maximum : 65°C

### Variable de régulation :

- Variable d'action :  
Débit du fluide utilité
- Débit minimum : 1 kg/h
- Débit maximum : 10 t/h

**Réacteur**

Nom : Réacteur

Paramètres Notes Paramètres avancés Validation

Première alimentation  
Inerte

Spécification de température

Minimum	59 °C
Consigne	62 °C
Maximum	65 °C

Variable de régulation  
Débit du fluide utilité

Minimum	1 kg/h
Maximum	10000 kg/h

Taux de reflux  
1

Spécification de pression  
☒ 1 atm  
☐ Profil  
☐ Débit vapeur constant

Inserts  
Pertes thermiques  
Agitation

☐ Fraction molaire constante  
 o-CHLOROTOLUENE  
 Inerte  
 Inerte

Echangeur par la paroi  
Matériaux de la paroi

Calculateur  
Calculateur par défaut

Restaurer OK Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

4 - Cliquer sur le bouton « PID » afin de renseigner les paramètres suivants :

## Contrôleur :

- Type de contrôle : Feedback
- Gain : -5
- $T_i$  : 500 s
- $T_d$  : 0 s
- Temps d'échantillonnage : 10 s

## Vanne :

- Type d'équation : exponentielle
- $C_v$  : 30

☒ PID

**Paramètres PID**

Contrôleur

Type de contrôle: Feedback

Gain: -5

$T_i$ : 500 s

$T_d$ : 0 s

Temps d'échantillonnage: 10 s

Note : les valeurs à zéro seront ignorées

Vanne

Type d'équation: Exponentielle

$C_v$ : 30

Restaurer OK Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

Renseigner les caractéristiques du système de refroidissement :

- Eau froide
- Température : 25°C
- Débit nominal : 4000 kg/h

Echangeur par la paroi

Paramètres de l'échangeur par la paroi

☒ L'échangeur par la paroi est actif

☐ Différence de température maximum procédé/utilité 0 K

☐ Coefficient global d'échange donné 0 W/m<sup>2</sup>/K

☐ Coefficient d'échange donné (coté PROCEDE) 0 W/m<sup>2</sup>/K

☐ Coefficient d'échange donné (coté UTILITE) 0 W/m<sup>2</sup>/K

Coefficient d'encrassement 0 W/m<sup>2</sup>/K

Coefficient d'encrassement 0 W/m<sup>2</sup>/K

Fluide utilisé

Type de fluide Eau

Température d'entrée 25 °C

Nombre de points 2

Point n° 1

Température de référence 298.15 K

Chaleur spécifique massique 0 J/kg/K

Masse volumique 0 kg/m<sup>3</sup>

Viscosité dynamique 0 Pa.s

Conductivité thermique 0 W/m/K

Coefficient d'expansion thermique 0 1/K

Point n° 2

Température de référence 298.15 K

Chaleur spécifique massique 0 J/kg/K

Masse volumique 0 kg/m<sup>3</sup>

Viscosité dynamique 0 Pa.s

Conductivité thermique 0 W/m/K

Coefficient d'expansion thermique 0 1/K

Débit massique 4000 kg/h

Pression 6 bar

Technologie Référence / Note

Restaurer

OK Annuler

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

Il n'est pas nécessaire de configurer les éléments suivants qui sont identiques à l'étape de « chauffe » :

- Agitation
- Matériaux à la paroi
- Reflux
- Spécification de pression
- Caractéristiques du condenseur

# Etape 5 : Description du mode opératoire

- Configurer l'étape de « réaction » :

The diagram illustrates the configuration of a reaction step in a simulation. On the left, a vertical process flow is shown with a hopper at the top, a purple 'Chauffe' (Heater) block, a green 'Reaction' block, and a tank at the bottom. Arrows indicate the flow between these components. On the right, the 'Evènement' (Event) configuration dialog box is displayed. The dialog has tabs for 'Paramètres', 'Notes', and 'Validation' (which is active). The 'Information' section shows 'Nom : t = 13 h'. The 'Type d'évènement' section has several radio button options, with 'Temps écoulé depuis le début de l'étape' selected. The 'Paramètre(s) de l'évènement' section shows 'Temps d'étape' set to '13 h'. At the bottom are 'OK' and 'Annuler' buttons. Five numbered instructions with arrows point to specific elements: 1 points to the end of the 'Reaction' block, 2 points to the 'Nom' field, 3 points to the selected radio button, 4 points to the 'Temps d'étape' dropdown, and 5 points to the 'OK' button.

1 - Pour finir, double cliquer sur l'évènement de fin de la deuxième étape

2 - Entrer le nom de l'évènement

3 - Sélectionner « temps écoulé depuis le début de l'étape »

4 - Entrer la durée de l'étape

5 - Cliquer sur « OK »

**Evènement**

Information

Nom : t = 13 h

Paramètres Notes Validation

Type d'évènement

- ☐ Temps écoulé depuis le début de la simulation
- ☒ Temps écoulé depuis le début de l'étape
- ☐ Température dans le réacteur
- ☐ Fraction dans le réacteur
- ☐ Concentration dans le réacteur
- ☐ Charge partielle
- ☐ Charge totale
- ☐ Pression dans le réacteur

Paramètre(s) de l'évènement

Temps d'étape

13 h

OK Annuler



# Etape 6 : Lancement de la simulation

1- Cliquer sur « Paramètres du rapport »



2- Choisir les options de présentation du rapport de simulation

**Paramètres du rapport**

Impression des compositions: Massique

Impression des débits: Massique

Intervalle de temps pour l'impression: 60 s

Variables suivies:

- ☒ Fractions
- ☒ Concentrations
- ☒ Volume et débits
- ☒ Flux thermique et température

☐ Calcul d'extrapolation

Type de facteur d'extrapolation: Volumique

Facteur d'extrapolation: 3

☒ Génération du rapport (.docx)

☒ Génération des fichiers constituants et réactions

Restaurer OK Annuler

3- Changer l'intervalle de temps pour « 60 s » afin d'obtenir des courbes plus « lisses »

Possibilité de faire des calculs d'extrapolation

4- Enregistrer le fichier



5- Lancer la simulation

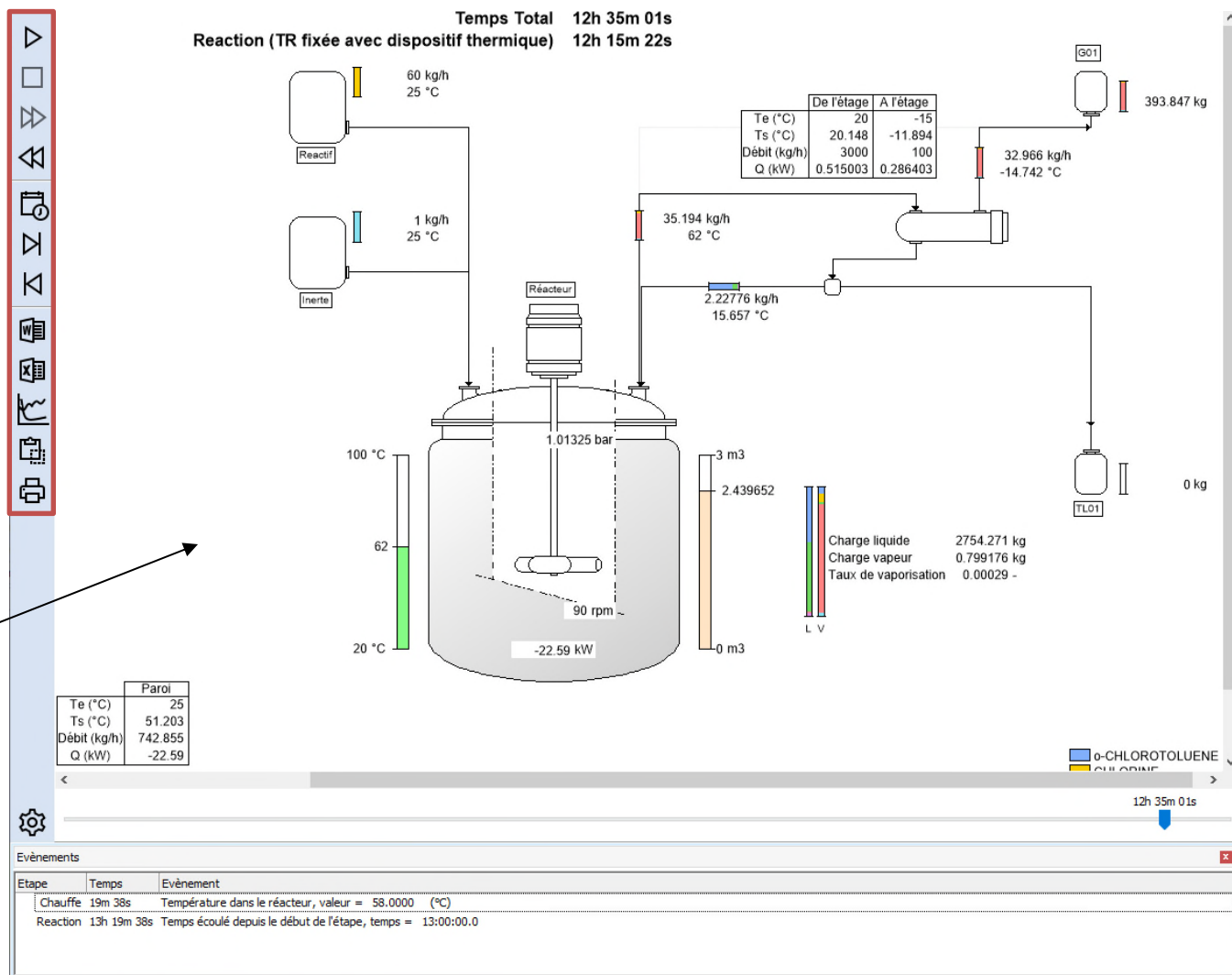


# Etape 6 : Lancement de la simulation

La fenêtre suivante permet de suivre en temps réel l'évolution du procédé :

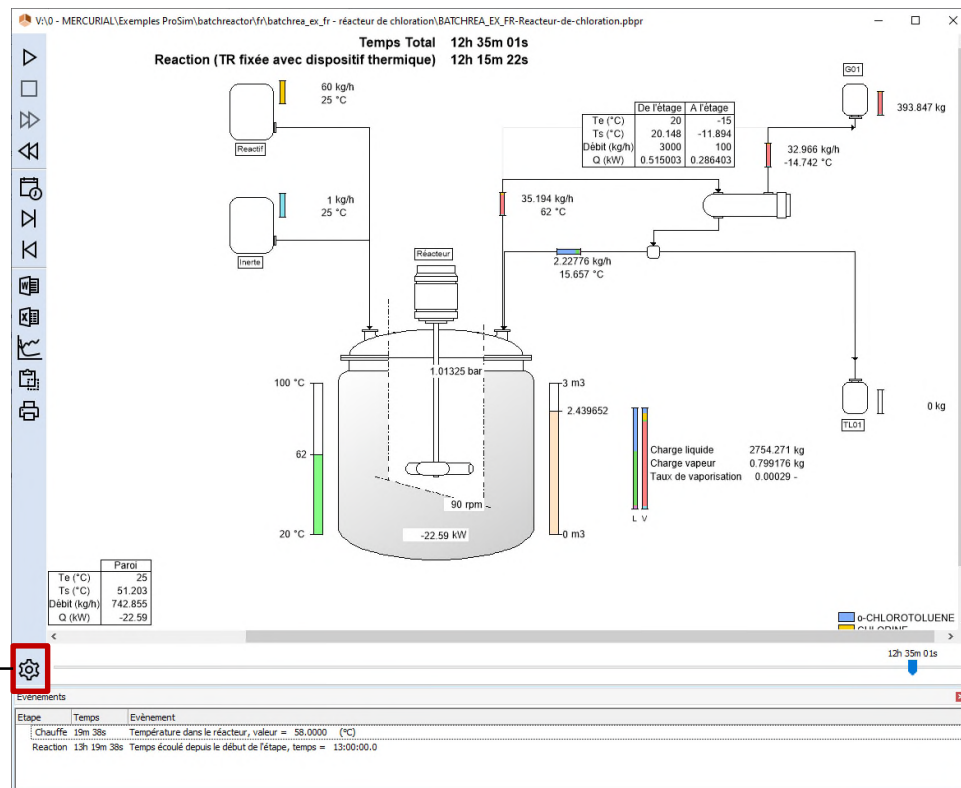
Barre d'outils permettant de faire pause, passer à l'étape suivante, accéder aux paramètres d'affichage...

Les paramètres opératoires sont affichés ici (températures, pressions, débits, compositions, etc...)



# Etape 6 : Lancement de la simulation

La fenêtre suivante permet de suivre en temps réel l'évolution du procédé :



Cliquer sur cette icône pour accéder aux options d'affichage

### Options d'affichage

- ☒ Charge du réacteur
- ☒ Vitesse de l'agitateur
- ☒ Alimentations
- ☒ Courants internes
- ☒ Productions
- ☒ Systèmes de chauffe
- ☒ Condenseur
- ☒ Légende des corps purs

Droit ▼ Bas ▼

Taille du texte Normal ▼

Couleurs

☐ Sauver comme préférences

Appliquer les préférences

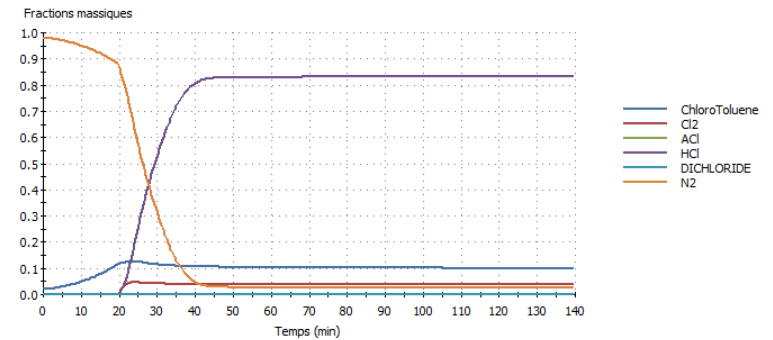
Restaurer OK Annuler

# Etape 7 : Visualisation des résultats de la simulation

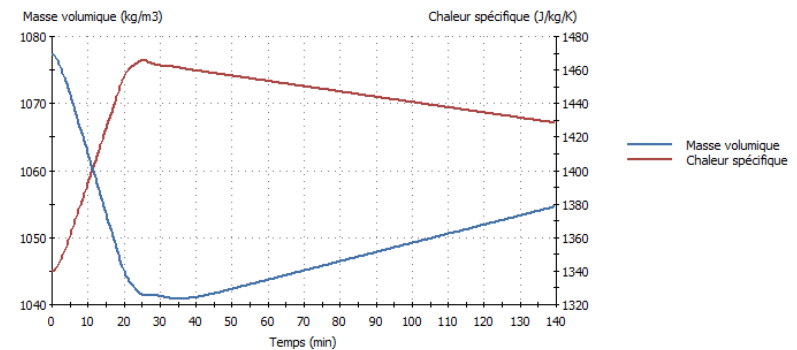
Une fois la simulation terminée, cliquer sur cette icône afin d'analyser l'évolution en fonction du temps des variables du procédé (pression, température, débits, compositions, quantités de chaleurs, propriétés physiques, etc...)



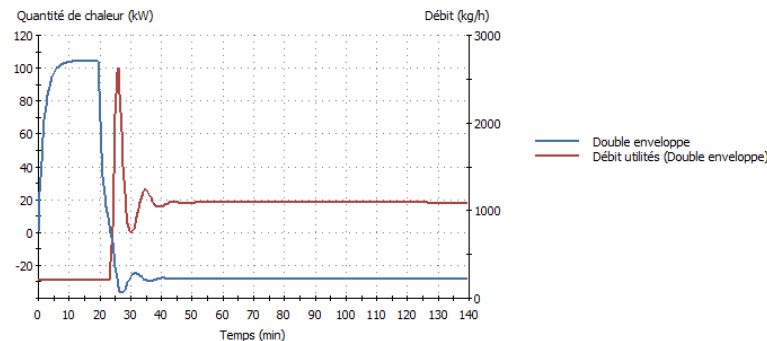
### Fractions massiques vapeur



### Propriétés physiques



### Quantité de chaleur - Débit utilisés



# Etape 7 : Visualisation des résultats de la simulation

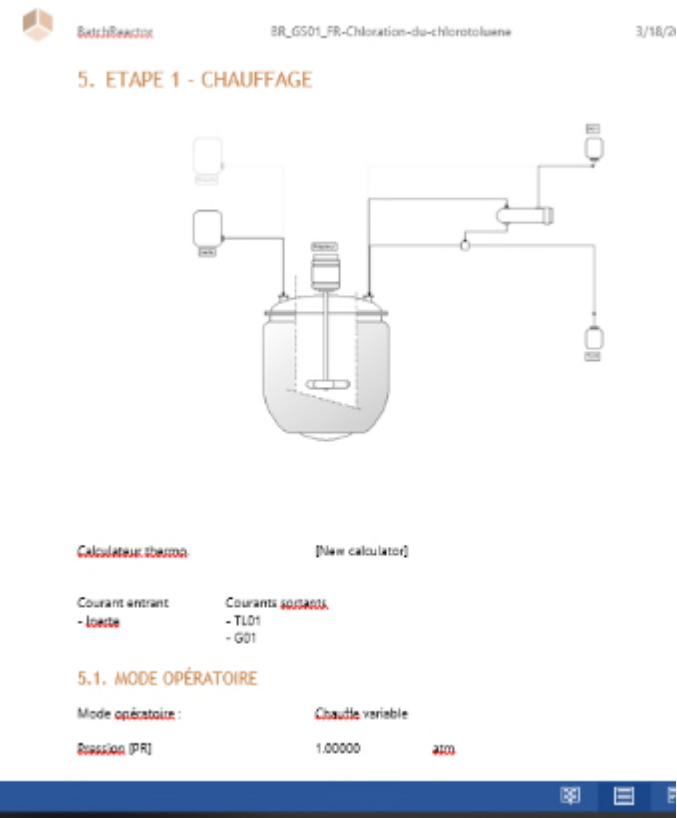
Cliquer sur cette icône afin d'ouvrir le compte rendu détaillé de la simulation au format MS-Word. Ce dernier comprend les données d'entrée (équipements utilisés et protocole opératoire) ainsi que l'ensemble des résultats numériques et graphiques



BatchReactor BR\_G501\_FR-Chloration-du-chlorotoluene 3/18/2019

Sommaire

- 1 Procédé.....
- 2 Scénario.....
- 3 Calculateur thermodynamique.....
- 3.1 Modèle.....
- 3.2 Paramètres d'interaction binaires.....
- 3.3 Constituants.....
- 3.4 Réactions.....
- 4 Alimentations.....
- 4.1 Inerte - Chauffage.....
- 4.2 Inerte - Réaction.....
- 4.3 Réactifs - Réaction.....
- 5 Etape 1 - Chauffage.....
- 5.1 Mode opératoire.....
- 5.2 Caractéristiques de la cuve.....



Un sommaire détaillé permet d'accéder facilement aux résultats



# Etape 7 : Visualisation des résultats de la simulation

Cliquer sur cette icône afin d'ouvrir le compte rendu de la simulation au format MS-Excel. Ce dernier comprend l'évolution des variables du procédé en fonction du temps













2412									
2413	Temps (h)	Volume liquide (m3)	Alimentation (kg/h)	Soutirage liquide (kg/h)	Soutirage vapeur (kg/h)	Distillat vapeur (kg/h)	Distillat liquide (kg/h)	Reflux (kg/h)	
2414	1.67E-04	2.2278891	1	0	0	1.0052927	0	2.00E-02	
2415	1.67E-02	2.2286754	1	0	0	1.3371409	0	2.73E-02	
2416	3.33E-02	2.230627	1	0	0	1.5397891	0	3.36E-02	
2417	5.00E-02	2.2332999	1	0	0	1.6559845	0	3.94E-02	
2418	6.67E-02	2.2364167	1	0	0	1.7185781	0	4.53E-02	
2419	8.33E-02	2.239802	1	0	0	1.7493801	0	5.13E-02	
2420	0.1	2.243351	1	0	0	1.7614792	0	5.76E-02	
2421	0.116667	2.2470044	1	0	0	1.7625298	0	6.43E-02	
2422	0.133333	2.2507285	1	0	0	1.757826	0	7.16E-02	
2423	0.15	2.2544892	1	0	0	1.7492106	0	7.94E-02	
2424	0.166667	2.2582715	1	0	0	1.7412496	0	8.80E-02	
2425	0.183333	2.2620693	1	0	0	1.7278169	0	9.70E-02	
2426	0.2	2.2658796	1	0	0	1.7193188	0	0.10702215	
2427	0.216667	2.2697004	1	0	0	1.7098734	0	0.11781666	
2428	0.233333	2.2735296	1	0	0	1.7007094	0	0.12949264	
2429	0.25	2.2773661	1	0	0	1.6923622	0	0.14214939	
2430	0.266667	2.2812092	1	0	0	1.6844712	0	0.15582606	



# Etape 7 : Visualisation des résultats de la simulation

Plusieurs fichiers sont automatiquement générés dans le dossier comprenant le fichier de simulation, notamment :

- Le fichier de simulation (\*.pbpr)
- Le rapport de simulation au format MS-Word (\*.docx)
- Le fichier de résultats au format MS-Excel (\*.csv)

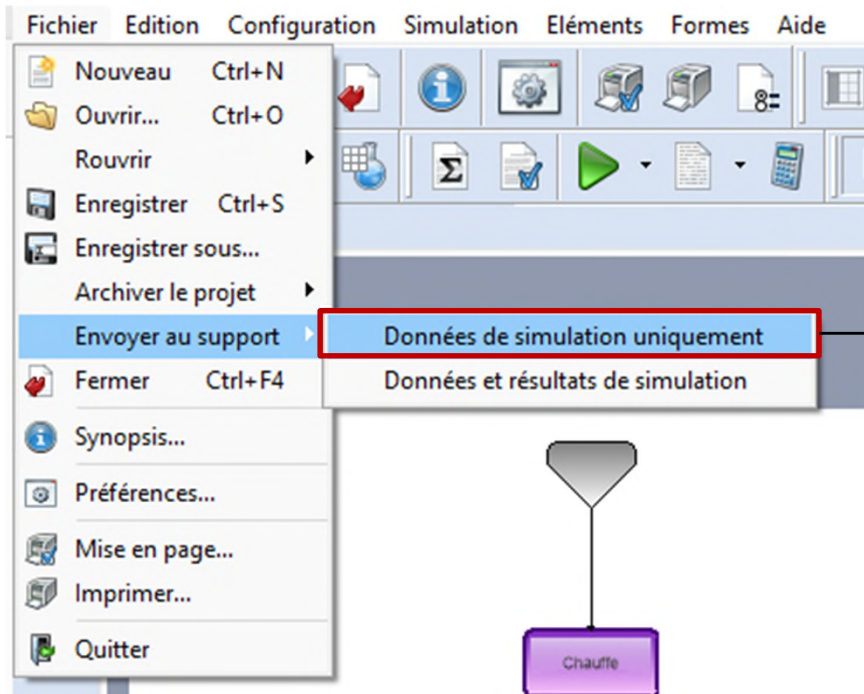
Nom	Modifié le	Type	Taille
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration_files	03/08/2022 18:41	Dossier de fichiers	
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.csv	03/08/2022 18:41	Fichier CSV Micro...	1 144 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.docx	03/08/2022 18:41	Document Micros...	779 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.don	03/08/2022 18:39	Fichier DON	6 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.his	03/08/2022 18:41	Document texte	33 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.log	03/08/2022 18:41	Document texte	1 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.pbpr	28/07/2022 11:47	Fichier PBPR	6 513 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.pdf	28/01/2022 00:24	Nuance Power PD...	2 265 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.res	03/08/2022 18:41	Compiled Resourc...	1 255 Ko
 BATCHREA_EX_FR-Reacteur-de-chloration.xyg	03/08/2022 18:41	Fichier XYG	1 155 Ko

# Etape 7 : Visualisation des résultats de la simulation

Pour toutes questions, vous pouvez contacter le support technique de ProSim, en envoyant un email à [support@prosim.net](mailto:support@prosim.net), avec :

- Le détail de votre problématique
- Votre fichier de simulation

Pour faciliter l'envoi du fichier de simulation par email, un dossier compressé peut être généré en cliquant sur « envoyer au support » :



BATCHREA\_EX\_FR-Reacteur-de-chloration\_support.pbpr  
BATCHREA\_EX\_FR-Reacteur-de-chloration\_support.zip

Un dossier « \*.zip » est généré dans le dossier dans lequel le fichier de simulation est archivé



### 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](http://www.prosim.net)  
[info@prosim.net](mailto:info@prosim.net)



### ProSim, Inc.

325 Chestnut Street, Suite 800  
Philadelphia, PA 19106  
U.S.A.

☎: +1 215 600 3759