

Démarrer avec Simulis Reactions®

Cas 1 : Principales caractéristiques

Software & Services In Process Simulation

We guide You to efficiency



ProSim

Introduction

Ce document présente les principales caractéristiques de Simulis Reactions. Cet outil est associé à un calculateur thermodynamique et permet de définir des réactions chimiques. Trois types de réactions chimiques peuvent être renseignés :

- Réactions instantanées
- Réactions équilibrées
- Réactions contrôlées par la cinétique

A titre d'illustration, Simulis Reactions est utilisé pour modéliser la réaction de synthèse du thymol à partir du m-crésol. Les étapes à suivre sont les suivantes :

-  Etape 1 : sélection des constituants
-  Etape 2 : sélection du type de réaction chimique
-  Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Description du modèle réactionnel

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



Cette réaction est contrôlée par la cinétique, et peut être modélisée par la loi d'Arrhénius :

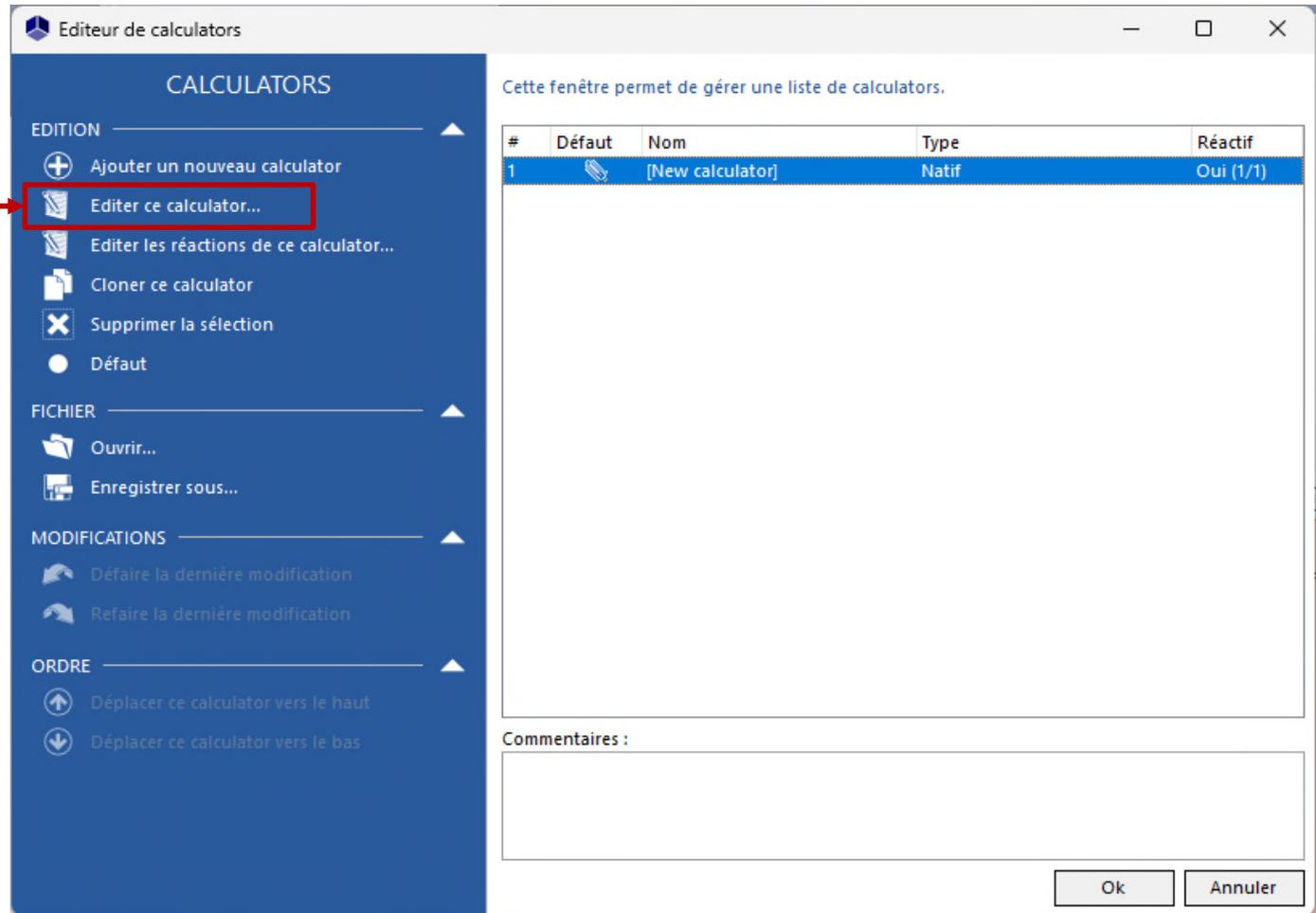
$$r = k^0 \times e^{(-E_a/RT)} \times C_{\text{propylène}} \times C_{m\text{-crésol}}$$

Avec :

Paramètres du modèle	Définition	Valeur
k^0	Facteur pré-exponentiel	197478 L.mol ⁻¹ .h ⁻¹
E_a	Energie d'activation	10266 cal.mol ⁻¹
C_i	Concentration du constituant « i »	Variable procédé (mol.L ⁻¹)

Etape 1 : sélection des constituants

Depuis « *l'éditeur de calculators* », sélectionnez « *Editer ce calculator* »



Etape 1 : sélection des constituants

Editeur de calculator thermodynamique

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

CONSTITUANTS | MODELE | PARAMETRES

#	Nom IUPAC	CAS Registry Number ®
1	THYMOL	89-83-8
2	PROPYLENE	115-07-1
3	m-CRESOL	108-39-4

1 - Sélectionnez les constituants suivants :

- Thymol
- Propylene
- m-cresol

2 - Cliquez sur « Ok »

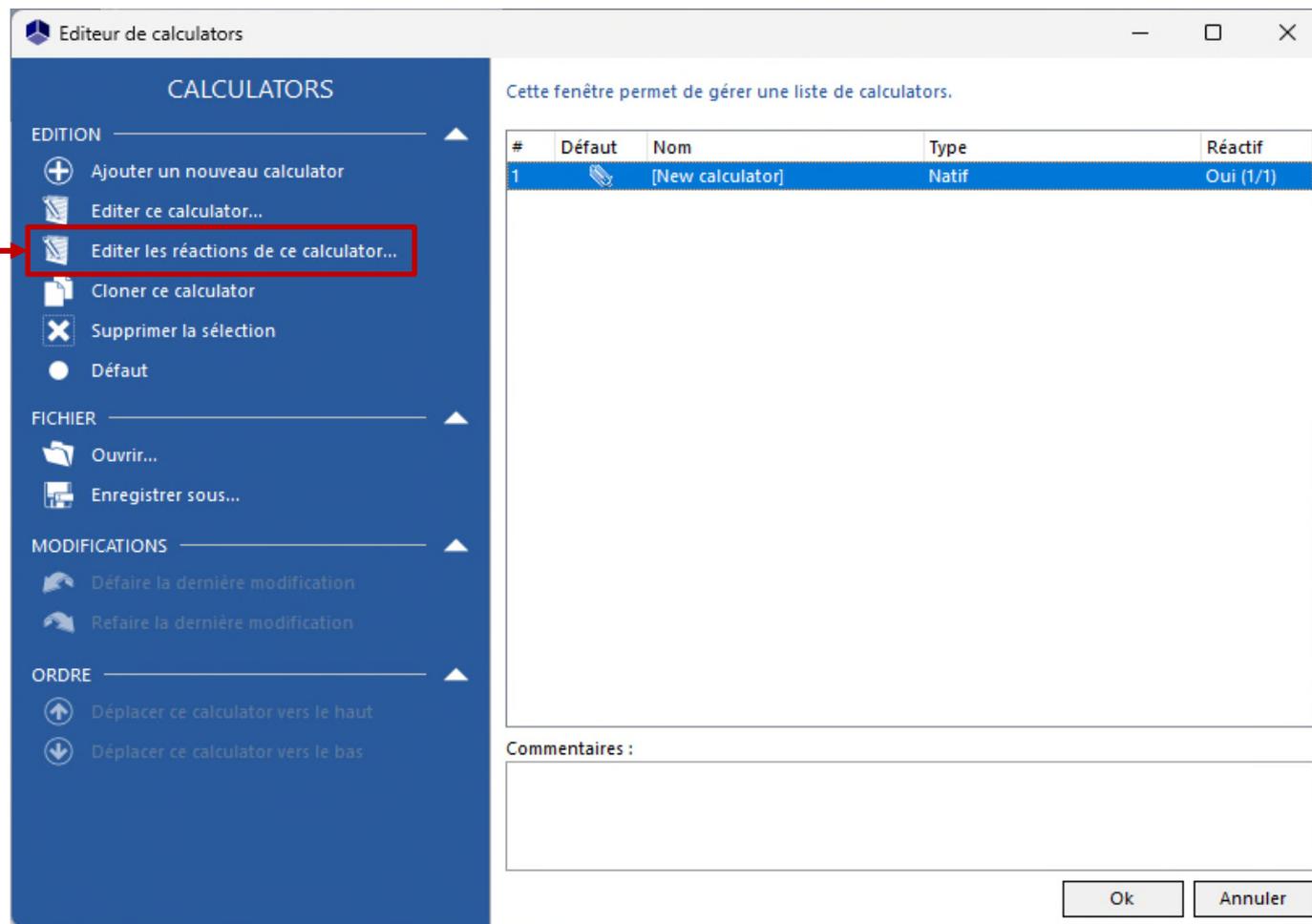
Les CAS Registry Numbers ® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par ProSim SA avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers ® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts.



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

Etape 2 : sélection du type de réaction chimique

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



Etape 2 : sélection du type de réaction chimique

Il est possible d'ajouter, éditer, dupliquer ou supprimer des réactions

Il est possible de générer les expressions littérales des réactions

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	n-crésol + C3H8 => Thymo Cinétique		Liquide	Arrhenius

Commentaires :

Ok Annuler

Il est possible d'activer ou désactiver chaque réaction

Etape 2 : sélection du type de réaction chimique

1 - Sélectionnez « Ajouter une 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	m-crésol + C3H8 => Thymo	Cinétique	Liquide	Arrhenius

2 - La liste des réactions est affichée ici

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

Commentaires :

Ok Annuler

Etape 2 : sélection du type de réaction chimique

3 types de réactions possibles :

- Equilibrée
 $A \rightleftharpoons B$
- Contrôlée par la cinétique
 $A \Rightarrow B$
- Instantanée
Pas d'accumulation des réactifs

Les onglets de définition des paramètres de la réaction apparaissent ici

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

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

ID: {96D9B064-3DD8-4A4C-9AA7-E054C287B669}

Equilibrée
Cinétique
Instantanée

Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS

Défaire
Refaire

AIDE

Aide technique...

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom m-crésol + C3H8 => Thymol 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
THYMOL	89-83-8	1	0
PROPYLENE	115-07-1	-1	1
m-CRESOL	108-39-4	-1	1

Ok Annuler

1 - Sélectionnez le type de réaction chimique :
« *Cinétique* »

2 - Cliquez sur « *Aide technique* » afin d'obtenir des informations sur les modèles réactionnels disponibles

Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois le type de réaction choisi, renseignez les paramètres du modèle réactionnel :

1 - Sélectionnez l'onglet « Général »

2 - Renseignez un nom (facultatif)

3 - Renseignez la phase réactionnelle

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
THYMOL	89-83-8	1	0
PROPYLENE	115-07-1	-1	1
m-CRESOL	108-39-4	-1	1

Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois le type de réaction choisi, renseignez les paramètres du modèle réactionnel :

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: {96D9B064-3DD8-4A4C-9AA7-E054C287B669}

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom m-crésol + C3H8 => Thymol Activé

ID utilisateur

Etat physique Liquide

Chaleur de la réaction Calculée 0 cal/mol

Modèle de concentration Concentration molaire

Modèle de vitesse Arrhenius

Propriétés

Propriété	Ordre
N	0
T	1
P	1
m	1

Ok Annuler

4 - Indiquez une « Chaleur de réaction » calculée à partir des ΔH_f^0

La chaleur de réaction peut être :

- Fournie
 - Négative si exothermique
 - Positive si endothermique
- Calculée à partir des ΔH_f^0

Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois le type de réaction choisi, renseignez les paramètres du modèle réactionnel :

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: {96D9B064-3DD8-4A4C-9AA7-E054C287B669}

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom m-crésol + C3H8 => Thymol Activé

ID utilisateur

Etat physique Liquide

Chaleur de la réaction Calculée kcal/mol

Modèle de concentration Concentration molaire

Modèle de vitesse Arrhenius

Propriétés		Stoechiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stoechiométrie	Ordre
THYMOL	89-83-8	1	0
PROPYLENE	115-07-1	-1	1
m-CRESOL	108-39-4	-1	1

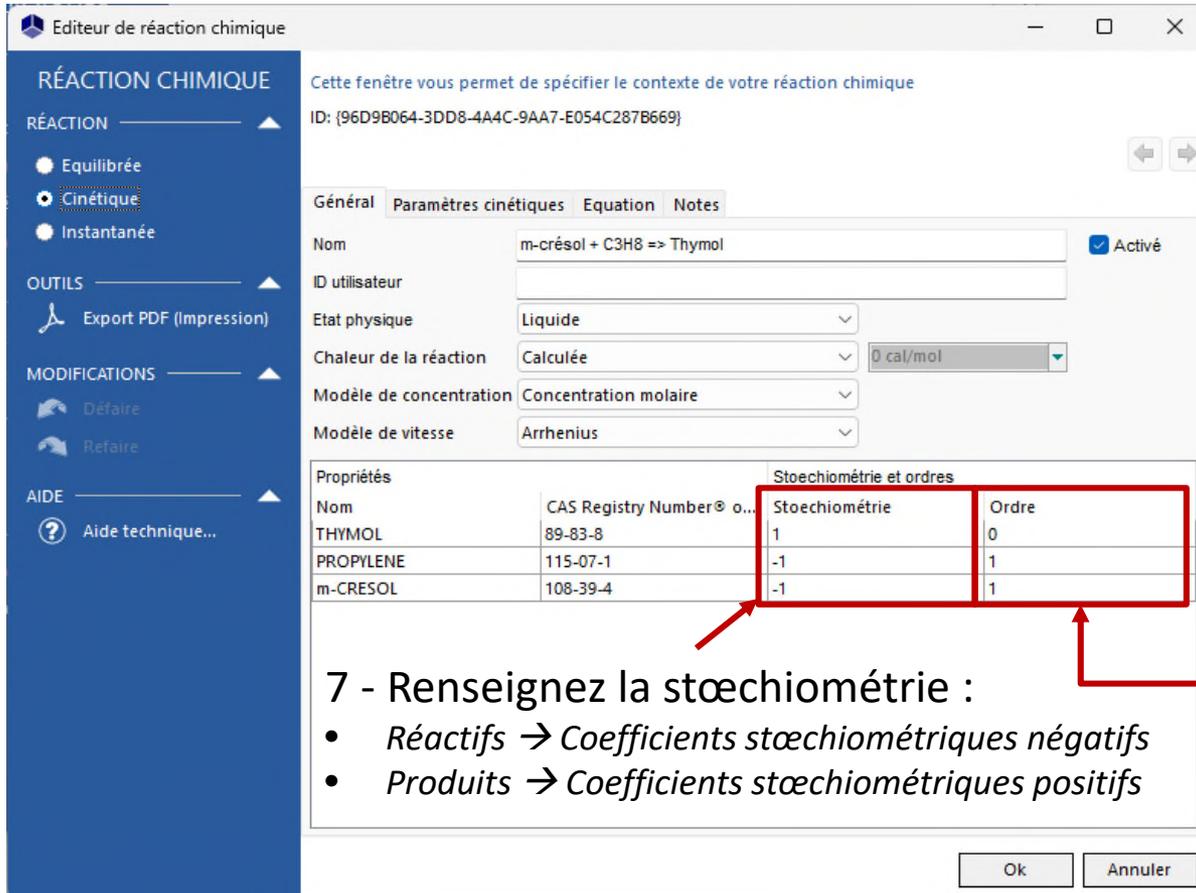
Ok Annuler

5 – Choisissez le modèle de concentration

6 – Choisissez le modèle de vitesse

Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois le type de réaction choisi, renseignez les paramètres du modèle réactionnel :



Editeur de réaction chimique

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

ID: {96D9B064-3DD8-4A4C-9AA7-E054C287B669}

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Nom m-crésol + C3H8 => Thymol Activé

ID utilisateur

État physique Liquide

Chaleur de la réaction Calculée 0 cal/mol

Modèle de concentration Concentration molaire

Modèle de vitesse Arrhenius

Propriétés		Stœchiométrie et ordres	
Nom	CAS Registry Number® o...	Stœchiométrie	Ordre
THYMOL	89-83-8	1	0
PROPYLENE	115-07-1	-1	1
m-CRESOL	108-39-4	-1	1

7 - Renseignez la stœchiométrie :

- Réactifs → Coefficients stœchiométriques négatifs
- Produits → Coefficients stœchiométriques positifs

Ok Annuler

8 - Renseignez les ordres partiels, par défaut :

- Réactifs → Valeur absolue des coefficients stœchiométriques
- Produits → 0

Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois le type de réaction choisi, renseignez les paramètres du modèle réactionnel :

Editeur de réaction chimique

Cette fenêtre vous permet de spécifier le contexte de votre réaction chimique
ID: {96D9B064-3DD8-4A4C-9AA7-E054C287B669}

1 - Sélectionnez l'onglet « Paramètres cinétiques »

2 - Renseignez l'énergie d'activation

3 - Renseignez le facteur pré-exponentiel et ses unités

Général Paramètres cinétiques Equation Notes

Energie d'activation 10266 cal/mol

Facteur pré-exponentiel 197478

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

Ok Annuler

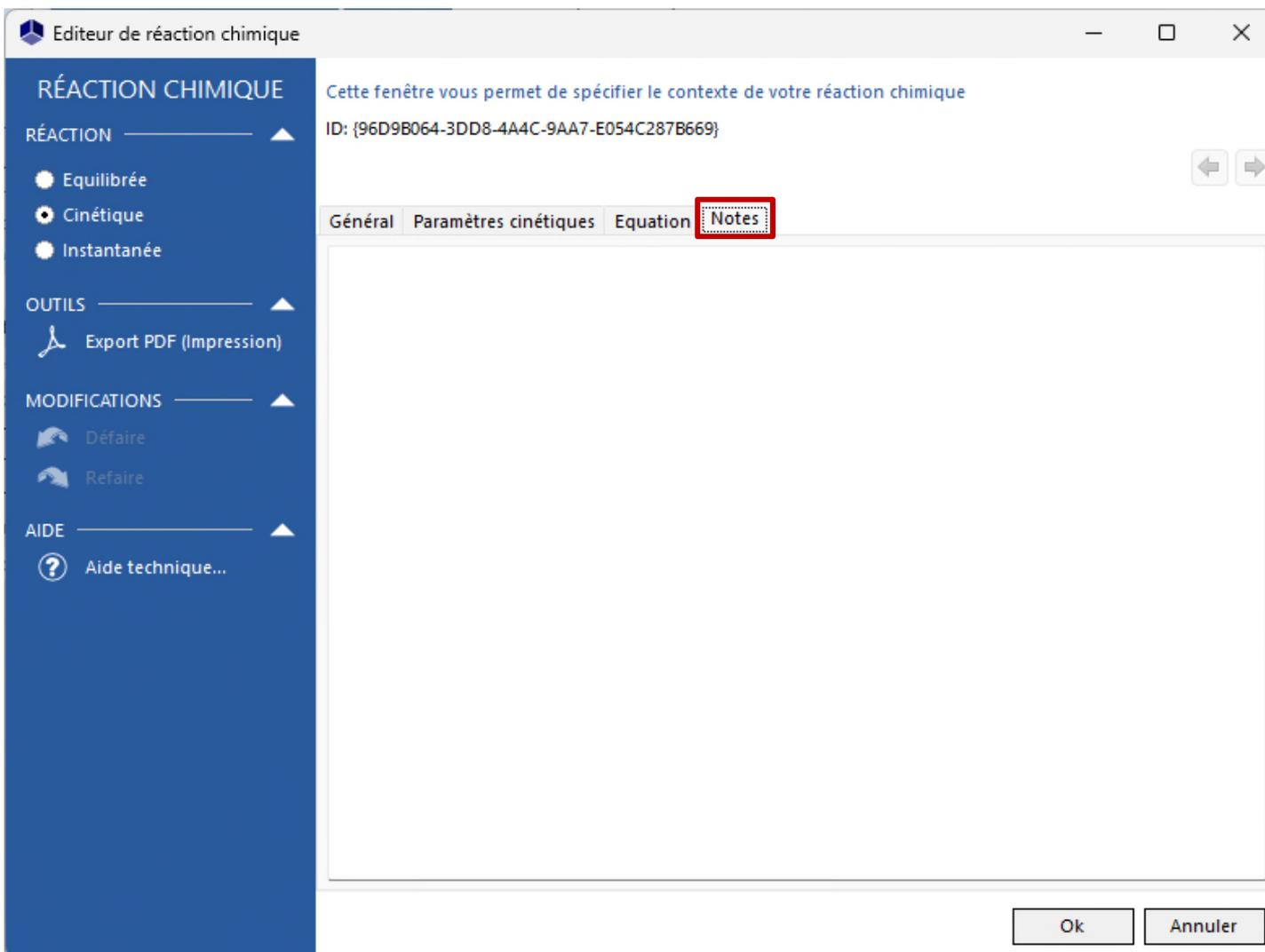
Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois le type de réaction choisi, le modèle est visible ici :

The screenshot shows the 'Editeur de réaction chimique' (Chemical Reaction Editor) window. The left sidebar contains navigation options: 'RÉACTION CHIMIQUE' (with sub-options: Equilibrée, Cinétique, Instantanée), 'OUTILS' (Export PDF), 'MODIFICATIONS' (Défaire, Refaire), and 'AIDE' (Aide technique...). The main area is titled 'CETTE FENÊTRE VOUS PERMET DE SPÉCIFIER LE CONTEXTE DE VOTRE RÉACTION CHIMIQUE' and shows the reaction ID: {96D9B064-3DD8-4A4C-9AA7-E054C287B669}. The 'Equation' tab is selected and highlighted with a red box. The equation displayed is
$$r = k^0 \cdot e^{(-E_a / RT)} \cdot \prod_{i=1}^{N_c} A_i^{\alpha_i}$$
 Below the equation, the variables are defined: r : Vitesse, k^0 : Facteur pré-exponentiel, E_a : Energie d'activation, T : Température, N_c : Nombre de constituants, α_i : Ordre direct du constituant i. The window has 'Ok' and 'Annuler' buttons at the bottom right.

Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois le type de réaction choisi, vous pouvez noter vos remarques ici :



Etape 3 : configuration du modèle réactionnel

Une fois les paramètres renseignés :

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

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

ID: {96D9B064-3DD8-4A4C-9AA7-E054C287B669}

Paramètres cinétiques

Energie d'activation: 10266 cal/mol

Facteur pré-exponentiel: 197478

Unité du facteur pré-exponentiel

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

Ok Annuler

Cliquez sur « Ok » pour confirmer



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
info@prosim.net



ProSim, Inc.

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

☎: +1 215 600 3759