fives
Industry can do it

EXEMPLE D'APPLICATION SIMULIS KINETICS

IDENTIFICATION DU SCHEMA REACTIONNEL DE LA SYNTHESE DU THYMOL

INTERET DE L'EXEMPLE
Cet exemple présente l'utilisation de données expérimentales en suivi de concentration pour établir un schéma réactionnel. Les réactions prises en compte sont contrôlées par la cinétique. A l'issue de l'identification, un calculateur réactif est généré. Ainsi, les constituants, le modèle thermodynamique et les réactions chimiques pourront être renseignés automatiquement dans les simulations BatchReactor et BatchColumn.

DIFFUSION	☑ Libre Internet	☐ Réservée clients	☐ Restreinte	☐ Confidentielle

FICHIER SIMULIS KINETICS CORRESPONDANT	*SIMKIN_EX_FR-Thymol.kin*

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.

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

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

TABLE DES MATIERES

1. INTRODUCTION 4

2. MECANISME REACTIONNEL 5

3. CONSTITUANTS 6

4. MODELE THERMODYNAMIQUE 7

5. IDENTIFICATIONS 7

5.1. Paramètres 7

5.1.1. Réactions 7

5.1.2. Paramètres à identifier 7

5.1.3. Données expérimentales 7

5.2. Résultats 8

6. EXPORTATION DES RESULTATS 10

7. BIBLIOGRAPHIE 11

8. NOMENCLATURE 11

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

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 l'identification des paramètres cinétiques du schéma réactionnel de la synthèse du thymol (une réaction principale et trois réactions secondaires). Les données expérimentales sont fournies en concentration.

Il est le premier d'une série de trois exemples traitants de la synthèse et de la purification du thymol. Le second exemple « BATCHREA_EX_FR - Thymol » étudie la synthèse du thymol dans un réacteur batch en utilisant les cinétiques identifiées dans cet exemple. Le troisième exemple « BATCHCOL_EX_FR - Thymol » traite de la purification du thymol par distillation batch à l'issue de sa synthèse.

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

2. MECANISME REACTIONNEL

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

$$m\text{–}\,crésol + propylène \rightarrow thymol$$

Soit :

$$C_7H_8O + C_3H_6 \rightarrow C_{10}H_{14}O \qquad \text{(R1)}$$

Trois réactions concurrentes sont également considérées.

- ✓ Synthèse du 3M2P :

$$m\text{–}\,crésol + propylène \rightarrow 3M2P$$

Soit :

$$C_7H_8O + C_3H_6 \rightarrow C_{10}H_{14}O \qquad \text{(R2)}$$

- ✓ Synthèse du 3M5P :

$$m\text{-}crésol + propylène \rightarrow 3M5P$$

Soit :

$$C_7H_8O + C_3H_6 \rightarrow C_{10}H_{14}O \qquad \text{(R3)}$$

- ✓ Synthèse du 3M4P :

$$m\text{–}\,crésol + propylène \rightarrow 3M4P$$

Soit :

$$C_7H_8O + C_3H_6 \rightarrow C_{10}H_{14}O \qquad \text{(R4)}$$

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

3. CONSTITUANTS

Les constituants pris en compte dans l'identification des paramètres cinétiques sont :

Nom	Formule	Numéro CAS[1]
Propylène(*)	C_3H_6	115-07-1
m-crésol(*)	C_7H_8O	108-39-4
Thymol(*)	$C_{10}H_{14}O$	89-83-8
3-methyl-2-isopropylphenol (3M2P)	$C_{10}H_{14}O$	-
1-methyl-3-hydroxy-5-isopropyl benzène (3M5P)(*)	$C_{10}H_{14}O$	3228-03-3
1-methyl-3-hydroxy-6-isopropyl benzène (3M4P)(*)	$C_{10}H_{14}O$	3228-02-2

Les constituants suivis d'un astérisque proviennent de la base de données standard de Simulis Thermodynamics, serveur de calculs de propriétés physico-chimiques et d'équilibres entre phases utilisé dans Simulis Kinetics. Les propriétés thermodynamiques stockées dans cette base de données sont issues de la base DIPPR [ROW23].

Le constituant 3M2P (3-methyl-2-isopropylphenol) a été créé en clonant le constituant thymol de la base de données standard. Seulement le nom, le numéro CAS[1], le point normal d'ébullition et la pression de vapeur saturante ont été modifiés :

- ✓ Nom IUPAC : 3M2P
- ✓ Nom spécifique : 3-methyl-2-isopropylphenol
- ✓ Numéro CAS[1] : 55000-01-6 (numéro arbitraire)
- ✓ Température normale d'ébullition : 501,1 K
- ✓ Pression de vapeur saturante :
  - Corrélation : Equation #99
  - T_{min} : 50 K
  - T_{max} : 700 K

$$Ln(P^0) = 20{,}88 - \frac{7569}{T + 30{,}15}$$

Pour afficher dans l'interface du logiciel les acronymes des constituants à la place de leur nom complet dans la base de données standard, les acronymes 3M2P, 3M4P et 3M5P sont spécifiés comme « Nom IUPAC » des constituants correspondants. Ceci permet de conserver les noms définis dans « Nom spécifique ».

[1] *CAS Registry Numbers® are the intellectual property of the American Chemical Society and are used by Fives ProSim SAS with the express permission of ACS. CAS Registry Numbers® have not been verified by ACS and may be inaccurate.*

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

4. MODELE THERMODYNAMIQUE

Le profil thermodynamique « Idéal » a été retenu dans cet exemple.

5. IDENTIFICATIONS

5.1. Paramètres

5.1.1. Réactions

Pour l'ensemble des réactions décrites au paragraphe 2 :

- ✓ Ordre 1 par rapport aux réactifs,
- ✓ Ordre 0 par rapport aux produits.

5.1.2. Paramètres à identifier

Pour chaque réaction décrite au paragraphe 2, les paramètres à identifier sont :

- ✓ Facteur pré-exponentiel,
- ✓ Energie d'activation de la réaction.

5.1.3. Données expérimentales

Le tableau suivant précise les données opératoires expérimentales.

	Essai 1	Essai 2
Données isothermes	oui	
Volume	constant	
Conditions initiales		
Température	15°C	35°C
Pression	1 atm	1 atm
Volume	1 l	1 l
Composition		
Propylène	4,9338 mol/l	4,7526 mol/l
m-crésol	5,7597 mol/l	5,5481 mol/l
Durée de la réaction	de 0 h à 100 h	
Fichier de donnes expérimentales		
Nom	Thymol_Set1.txt	Thymol_Set2.txt
Unité de temps	h	
Unité de concentration	mol/l	
Ordre des données	Temps, [m-crésol], [Thymol], [3M2P], [3M5P], [3M4P], [Propylène]	

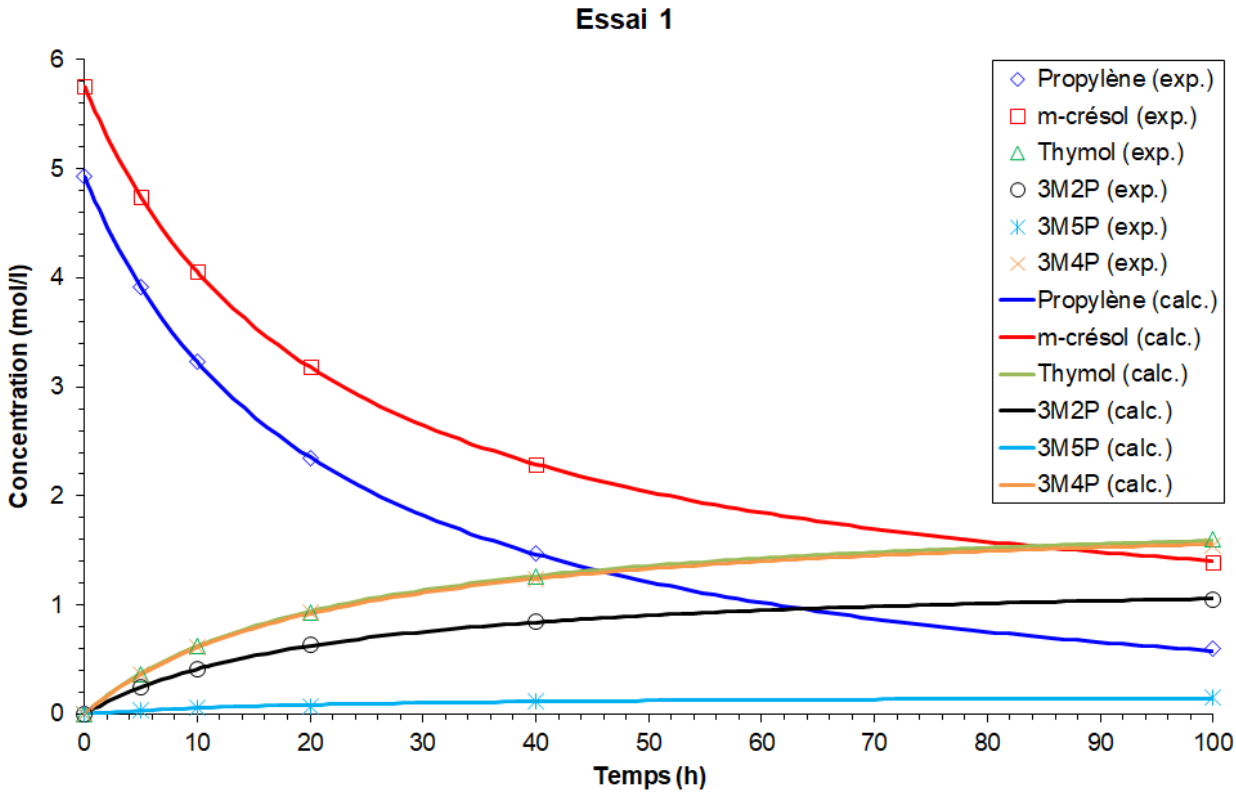
Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

5.2. Résultats

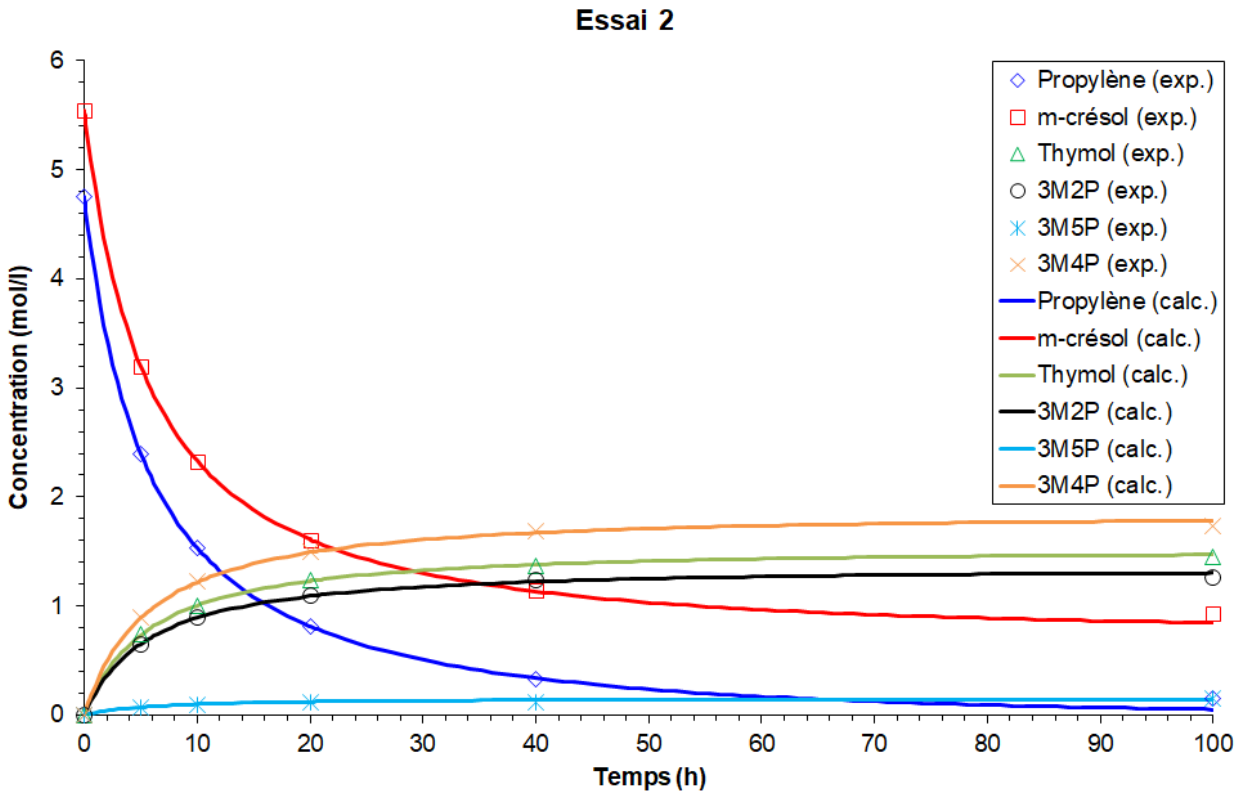
Le tableau suivant présente les valeurs des paramètres identifiés ainsi que leurs intervalles de confiance.

	Facteur pré-exponentiel ($l.mol^{-1}.h^{-1}$)	Energie d'activation (cal/mol)
Synthèse du thymol	$1{,}9710^{5}$ +/- 3.10^{-2}	10 266 +/- 2.10^{-2}
Synthèse du 3M2P	$1{,}11.10^{7}$ +/- 3.10^{-2}	12 806 +/- 2.10^{-2}
Synthèse du 3M5P	$7{,}46.10^{4}$ +/- 2.10^{-1}	11 082 +/- 2.10^{-1}
Synthèse du 3M4P	$5{,}18.10^{6}$ +/- 3.10^{-2}	12 149 +/- 2.10^{-2}

Les figures suivantes montrent une comparaison entre les données expérimentales et les modèles identifiés.



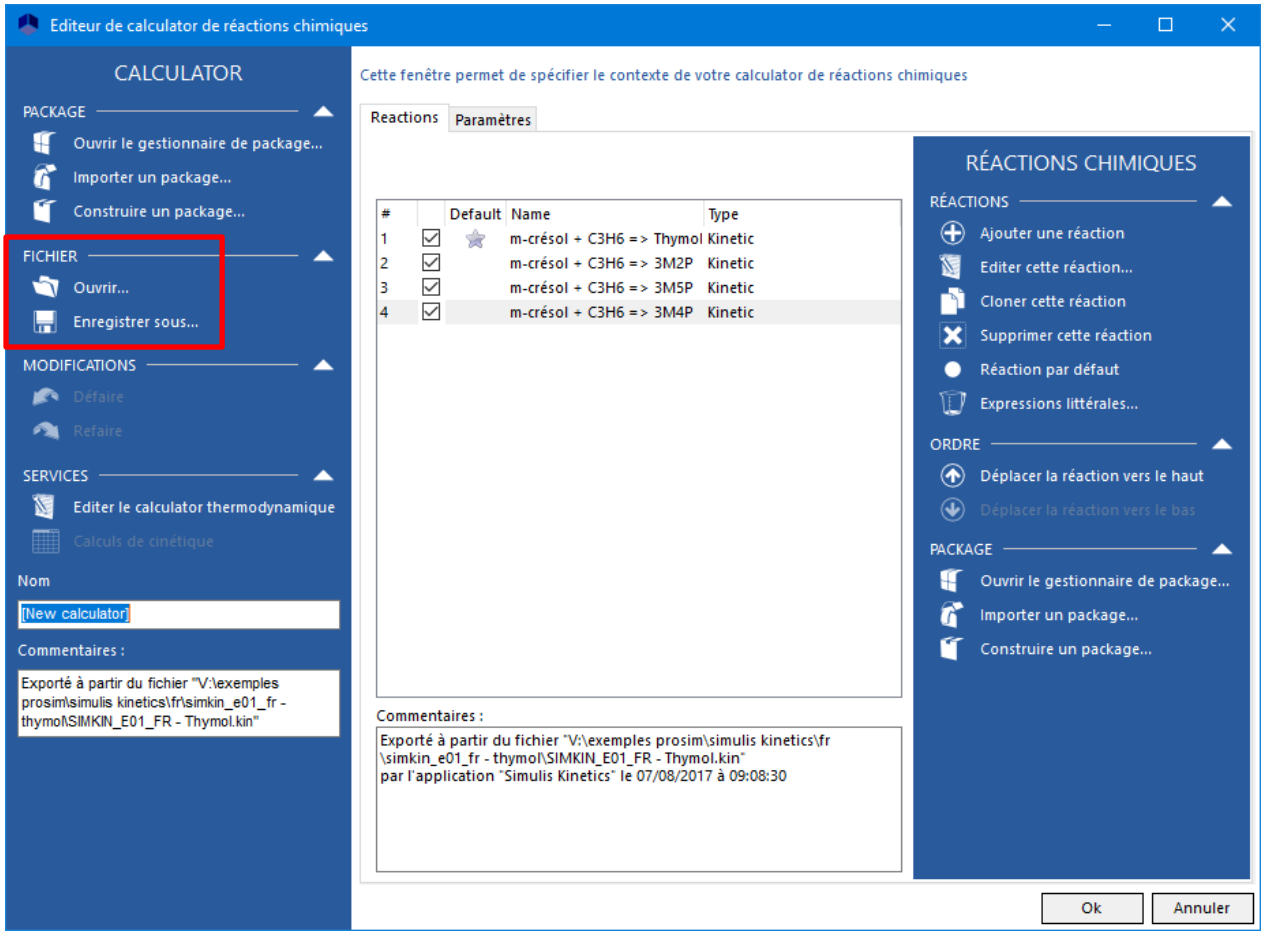
Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

6. EXPORTATION DES RESULTATS

Cliquez sur l'icône pour exporter les constituants, le modèle thermodynamique, les réactions et leurs paramètres dans un fichier « .ReacCalculator » à partir du menu « Fichier/Enregistrer sous… » de la fenêtre qui s'ouvre. Ainsi, ces informations pourront être rechargées lors de la mise au point de fichiers de simulation dans les logiciels BatchReactor et BatchColumn.



Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés

7. BIBLIOGRAPHIE

[ROW23] ROWLEY R.L., WILDING W.V., OSCARSON J.L., GILES N.F., “DIPPR® Data Compilation of Pure Chemical Properties”, Design Institute for Physical Properties, AIChE (2023)

8. NOMENCLATURE

$[i]$	Concentration du produit i	mol/l
P^0	Pression de vapeur saturante du 3M2P	mmHg
T	Température	K

Indices

Min	Valeur minimale
Max	Valeur maximale

Copyright © 2025 Fives ProSim, Labège, France –Tous droits réservés