# Table des matières



# 1 Introduction

# 2 Bilan de masse du plant

On cherche à calculer les quantités de $CH_4$, $H_2O$ et d'air [1](respectivement $n_i(CH_4)$, $n_i(H_2O)$ et $n_i(\text{air})$, en moles) nécessaires pour produire $n_f(NH_3)$ mol d'ammoniac, avec une température du réformeur primaire de $T$ K.

Pour ce faire, nous décomposons le bilan en deux parties : tout d'abord, nous allons considérer les réactions se passant au sein du plant (réformeur primaire, réformeur secondaire, WGS et réacteur) et en déduire les quantités de matière nécessaires ; ensuite, nous ajouterons à ce premier bilan la masse de méthane utilisée pour chauffer les réactifs à la température $T$ du réformeur primaire.

## 2.1 Bilan des réactions de synthèse

L'ensemble des entrées, sorties et réactions se décomposent de la manière suivante :

- entrée de $CH_4$ et $H_2O$ ($n_i(CH_4)$ et $n_i(H_2O)$) ;
- réformeur primaire (réactions $R_1$ et $R_2$, incomplètes) ;
- entrée d'air ($n_i(\text{air})$) ;
- réformeur secondaire (réaction $R_3$, complète) ;
- water-gas shift (réaction $R_4$, complète) ;
- sortie de $H_2O$ et $CO_2$ ($n_f(H_2O)$ et $n_f(CO_2)$) ;
- synthèse de l'ammoniac (réaction $R_5$, complète) ;
- sortie de Ar et $NH_3$ ($n_f(\text{Ar})$ et $n_f(NH_3)$).

D'un côté nous avons donc 11 inconnues correspondant aux quantités d'entrée et de sortie, et à l'avancement des réactions ; de l'autre, nous avons deux variables : la quantité finale d'ammoniac et la température du réformeur primaire.

On peut considérer chacune de ces 12 grandeurs comme étant les coefficients de vecteurs dans un espace $V \in \mathbb{R}^9$ représentant des flux des 9 espèces chimiques différentes qui apparaissent dans le plant. Ainsi, un vecteur $(1, 0, \dots, 0)^T$ pourrait correspondre à

1. La composition de l'air étant : 78% $N_2$, 21% $O_2$, 1% Ar, en fraction molaire.

une entrée de $CH_4$, et un autre vecteur $(0,\ldots,-1)^T$ à une sortie de $NH_3$. Une réaction serait alors également représentée sous la forme d'un vecteur (par exemple, $R_1$ : $(-1,-1,3,1,0,\ldots,0)^T$).

De cette manière, on peut manipuler algébriquement les 12 « flux » et résoudre les dépendances linéaires entre ceux-ci.

Dans un premier temps, si l'on omet de considérer que les réactions se produisant dans le réformeur primaire ne sont pas complètes,

Pour obtenir la solution à ce problème, il nous faut, dans un premier temps, résoudre les relations linéaires entre les différentes inconnues. Mathématiquement, cela correspond à obtenir une base de l'espace vectoriel des solutions.

Dans l'ordre, les colonnes sont : $n_i(CH_4)$, $n_i(H_2O)$, $n_i(\text{air})$, $n_f(H_2O)$, $n_f(CO_2)$, $n_f(\text{Ar})$, $n_f(NH_3)$, $R_1$, $R_2$, $R_3$, $R_4$ et $R_5$.

$$\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -2 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 1 & 4 & 1 & -3 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 2 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & .21 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & .78 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
0 & 0 & .01 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2
\end{pmatrix}$$

### 2.2 Bilan de la combustion du méthane

## 3 Nombre de tubes d'alimentation

## A Flowsheet

**Four**
Combustion de $CH_4$
*Irreversible et complète*

**Réformage primaire**(Réformage à vapeur de $CH_4$)

$$CH_4 + H_2O \Leftrightarrow CO + 3\,H_2$$

*Equilibre à $T$ (sortie)*

**Réformage secondaire**

$$2\,CH_2 + O_2 \Rightarrow$$

*Considérée comme irréversible et complète à la fin.*

**Réacteurs Water-Gas-Shift**

$$CO + H_2O \Rightarrow CO_2 + H_2$$

*Considérée comme complète à la fin.*

$CO_2 + H_2$

**Absorption de $\mathbf{CO_2}$ et compression** (séparation d'$H_2O$)
*Considérées complètes.*

$CO_2(l)$

**Synthèse d'$\mathbf{NH_3}$ et séparation**

$$N_2 + 3\,H_2 \Leftrightarrow {}_2NH_3$$

*Considérées complètes.*

$NH_3$