# Projet 3 - Rapport de tâche 1

### Groupe 124.3

FRENYO Péter (6266-12-00)
GILLAIN Nathan (7879-12-00)
LAMINE Guillaume (7109-13-00)
PIRAUX Pauline (2520-13-00)
PARIS Antoine (3158-13-00)
QUIRINY Simon (4235-13-00)
SCHRURS Sébastien (7978-13-00)

### 14 octobre 2014

# Table des matières

1	Calcul du flux des réactifs	2
2	Calcul du débit d'eau nécessaire pour refroidir le réactif	2
3	Sources des réactifs 3.1 Sources de diazote 3.1.1 Procédé cryogénique 3.1.2 Perméation gazeuse 3.1.3 Méthode de Ramsay 3.2 Sources de dihydrogène 3.2.1 Vaporeformage de méthane 3.2.2 Oxydation partielle d'hydrocarbure 3.2.3 Electrolyse	6 6 6 6 6 6 6 7 4
4	Premier jet du flow-sheet simplifié	4
5	Deuxième version du flow-sheet	4
6	Bilan de matiere	4
7	Equilibre du reformage primaire7.1Calcul de la constante d'équilibre7.1.1Première équation7.1.2Deuxième équation	8 8 8 9
8	Bilan d'energie	ę
9	Outil de gestion	11
10	Calcul du nombre de tuyaux	11

### 1 Calcul du flux des réactifs

**Hypothèse** Lors du calcul de ces flux, nous avons utilisé l'hypothèse que tous les réactifs sont consommés par le réacteur.

Calculs L'équation de la réaction de production de l'ammoniac par le procédé HABER-BOSCH est donnée par :

$$\frac{1}{2}N_2(g) + \frac{3}{2}H_2(g) \longrightarrow NH_3(g) + \Delta H$$

En sachant que l'on cherche à produire  $1000~\rm t$  de  $\rm NH_3$  par jour, on calcule assez facilement le flux de  $\rm N_2$  (les détails de calculs ont été omis dans ce rapport)

$$m_{N_2} = 823.5 \text{ t/d}$$

et le flux de H<sub>2</sub>

$$m_{H_2} = 176.4 \text{ t/d}.$$

# 2 Calcul du débit d'eau nécessaire pour refroidir le réactif

#### Hypothèses

- Les capacités calorifiques ne dépendent pas de la température;
- La pression dans le réacteur est constante et vaut 10<sup>5</sup> Pa.

Première méthode : on considère les capacités calorifiques constantes Pour la réaction donnée dans la section précédente, on a  $\Delta H(298.15~{\rm K}) = -46\cdot 10^3~{\rm J}$  pour une mole de NH<sub>3</sub>(g) produite [1]. Comme la réaction a lieu à 500 °C (c'est à dire 773.15 K), il va falloir calculer  $\Delta H(773.15~{\rm K})$ . Pour cela, nous avons besoin des capacités calorifiques moyenne à pression constante de chacun des réactifs et des produits de la réaction. Nous trouvons ces données dans une table [1].

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_{p_{NH_3(g)}} &= 37 \text{ J/molK} \\ C_{p_{H_2(g)}} &= 28.836 \text{ J/molK} \\ C_{p_{N_2(g)}} &= 29.124 \text{ J/molK} \end{array} \right.$$

On a donc:

$$\Delta H(773.15\;\mathrm{K}) = \Delta H(298.15\;\mathrm{K}) + \int_{298.15}^{773.15} C_{p_{NH_3(g)}} dT - \frac{1}{2} \int_{298.15}^{773.15} C_{p_{N_2(g)}} dT - \frac{3}{2} \int_{298.15}^{773.15} C_{p_{H_2(g)}} dT = -5.5887 \cdot 10^4\;\mathrm{J/mol}$$

Pour la quantité de NH $_3$  à produire par jour (à savoir  $58.83 \cdot 10^6$  mol), la quantité de chaleur produite est donc :

$$q = \Delta H(773.15 \text{ K}) \cdot n_{NH_3} = -3.28786 \cdot 10^{12} \text{ J}$$

En connaissant la capacité calorifique de l'eau  $C_{H_2O(g)}=4185.5~\mathrm{J/kgK}$  [1] et en égalant q à  $m_{H_2O}\cdot C_{H_2O(g)}\cdot \Delta T$  avec  $\Delta T=90-25=65~\mathrm{K}$ , on trouve un flux d'eau égal à

$$m_{H_2O} = 1.2085 \cdot 10^7 \text{ kg/d} \Rightarrow V_{H_2O} \approx 1.2085 \cdot 10^7 \text{ L/d} = 139.8 \text{ L/s}$$

Deuxième méthode : les capacités calorifiques dépendent de la température On peut être plus précis en utilisant les capacités calorifiques suivantes [5] :

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_{p_{NH_3(g)}}(T) &= 31.81 + (15.48 \cdot 10^{-3}) \mathrm{T} + (5.86 \cdot 10^{-6}) \mathrm{T}^2 \; \mathrm{J/molK} \\ C_{p_{H_2(g)}}(T) &= 29.30 - (0.84 \cdot 10^{-3}) \mathrm{T} + (2.09 \cdot 10^{-6}) \mathrm{T}^2 \; \mathrm{J/molK} \\ C_{p_{N_2(g)}}(T) &= 27.62 + (4.19 \cdot 10^{-3}) \mathrm{T} \; \mathrm{J/molK} \end{array} \right.$$

En refaisant le calcul ci-dessus en tenant compte de la variation des capacités calorifiques en fonction de la température, nous obtenons un débit un peu inférieur de 135.662 L/s. On remarque que l'approximation faite ci-dessus n'est pas si mauvaise que ça. Nous vous épargons ici les détails de calculs (que nous avons réalisé avec MATLAB).

### 3 Sources des réactifs

#### 3.1 Sources de diazote

#### 3.1.1 Procédé cryogénique

Ce procédé se base sur la séparation des différents constituants de l'air en fonction de leur température d'ébullition (l'oxygène  $O_2$  se condense avant le diazote  $N_2$ ). L'air est purifié jusqu'à liquéfaction et les différents constituants sont séparés dans une colonne de rectification par distillation fractionnée. Cette méthode permet d'avoir du diazote  $N_2$  pur à 99,99%. Cette méthode est efficace pour une consommation au-delà de 200 m<sup>3</sup>/h [3].

#### 3.1.2 Perméation gazeuse

Ce procédé utilise les différentes vitesses d'effusion des molécules de gaz à travers une membrane. L' $O_2$ ,  $H_2O$  et le  $CO_2$  s'effusent plus rapidement que le  $N_2$ . Cette méthode nous permet d'obtenir du  $N_2$  sec pur à 95-99. Ce procédé s'utilise pour des débits forts variables  $(3-1000~{\rm m}^3/{\rm h})$  [3].

#### 3.1.3 Méthode de Ramsay

$$NaNO_2(aq) + NH_4Cl(aq) \longrightarrow NaCl(aq) + 2H_2O(l) + N_2(g)$$

On chauffe le mélange de  $NaNO_2$  et  $NH_4Cl$  pour obtenir le  $N_2$  sous forme gazeuse. Un désavantage de cette méthode par rapport aux 2 premières est qu'il faut acheter les réactifs. De plus, il faut utiliser de l'énergie pour chauffer la réaction [6].

#### 3.2 Sources de dihydrogène

#### 3.2.1 Vaporeformage de méthane

2 réactions sont utilisées pour ce procédé [4] :

$$\mathrm{CH_4} + \mathrm{H_2O} \longleftrightarrow \mathrm{CO} + 3\mathrm{H_2}$$

$$CO + H_2O \longleftrightarrow CO_2 + H_2$$

L'équation bilan obtenue est la suivante :

$$\mathrm{CH_4} + 2\mathrm{H_2O} \longleftrightarrow \mathrm{CO_2} + 4\mathrm{H_2}$$

Cette réaction nécessite un catalyseur : le nickel. Le rendement varie entre 40-45%. Le problème de cette méthode est qu'elle rejette une grande quantité de  $CO_2$ , gaz à effet de serre [7].

### 3.2.2 Oxydation partielle d'hydrocarbure

$$C_nH_m+\frac{n}{2}O_2+\frac{3,76n}{2}N_2 \longrightarrow \frac{m}{2}H_2+nCO+\frac{3,76n}{2}N_2$$

L'air est comburant pour cette réaction, qui a besoin d'être catalysée. Son caractère exothermique aide à la catalyse. L'inconvénient de cette méthode est son faible rendement [7].

#### 3.2.3 Electrolyse

Réaction à l'anode:

$$2H_2O(1) \longrightarrow O_2(g) + 4H^+(aq) + 4e^-$$

Réaction à la cathode :

$$4 \mathrm{H_2O(l)} + 4 \mathrm{e^-} \longrightarrow 2 \mathrm{H_2O(g)} + 4 \mathrm{OH^-(aq)}$$

L'équation bilan obtenue est la suivante :

$$2H_2O(1) \longrightarrow 2H_2(g) + O_2(g)$$

La réaction nécessite une grande quantité d'électricité. L'eau, quant à elle, est présente en quantité illimitée et est peu coûteuse. En pratique, cette méthode est très peu utilisée [7].

# 4 Premier jet du flow-sheet simplifié

La première ébauche de notre flow-sheet se trouve à la figure 1.

### 5 Deuxième version du flow-sheet

Voici la deuxième version du flow-sheet (Figure 2).

### 6 Bilan de matiere

On pose le flux de  $NH_3(g)$  à la sortie égal à  $m_{NH_3}$  g/d.

Nous partons de la réaction :

$$\frac{1}{2}N_2(g) + \frac{3}{2}H_2(g) \longrightarrow NH_3(g)$$

$$m_{NH_3} = m_{NH_3} g/d$$

Et donc,

$$n_{NH_3} = \frac{\mathrm{m_{NH_3}}}{17} \; \mathrm{mol}$$

Ce qui donne

$$n_{N_2} = \frac{n_{NH_3}}{2} = \frac{m_{NH_3}}{34} \text{ mol}$$

 $_{
m et}$ 

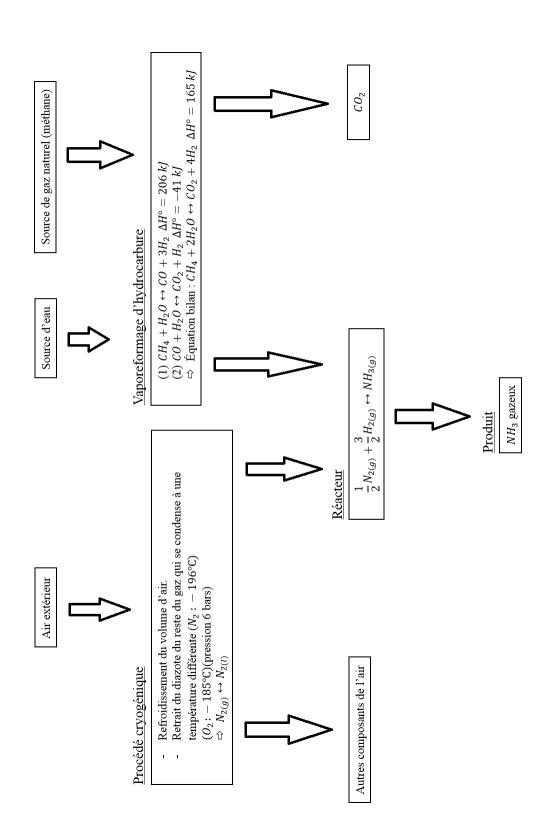


FIGURE 1 – Première ébauche de notre flow-sheet.

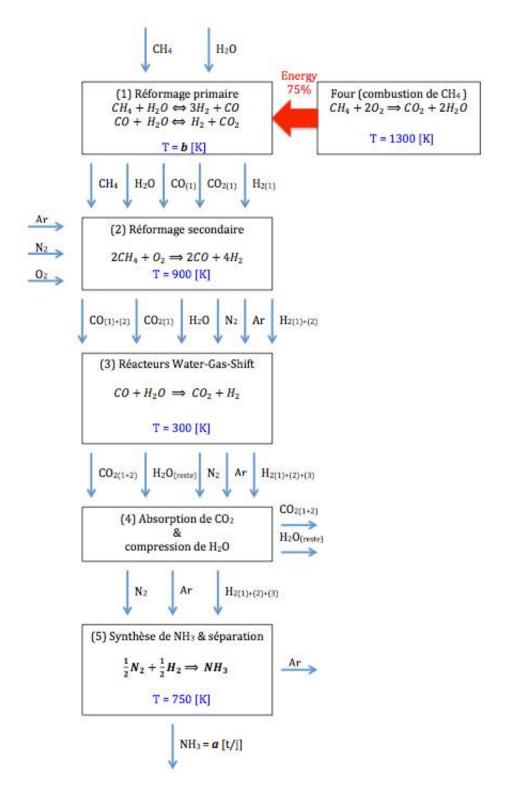


FIGURE 2 – Deuxième ébauche de notre flow-sheet.

$$n_{H_2} = \frac{3}{2} \cdot n_{NH_3}$$

On sait que le  $N_2(g)$  provient uniquement de l'air entrant dans le réacteur du réformage primaire. Et comme on peut considérer que l'air est composé de 78% de  $N_2(g)$ , 21% de  $O_2(g)$  et 1% d'Ar(g), on peut déduire que

$$n_{air}$$

entrant dans le réacteur du réformage primaire vaut :

 $n_{air} = n_{N_2} \cdot \frac{100}{78} = \frac{25 \text{m}_{\text{NH}_3}}{663} \text{ mol}$ 

Et:

$$n_{O_2} = n_{air} \cdot \frac{21}{100} = \frac{7 \mathrm{m_{NH_3}}}{884} \; \mathrm{mol}$$

$$n_{Ar}=n_{air}\cdot\frac{1}{100}=\frac{1\text{m}_{\text{NH}_3}}{2652}\text{ mol}$$

On sait par la réaction du réformage primaire suivante et par l'hypothèse que le  $\mathrm{CH}_4(g)$  et le  $\mathrm{O}_2(g)$  sont présents en quantité stoechiométrique :

$$2CH_4 + O_2 \Longrightarrow 2CO + 4H_2$$

que:

$$n_{CH_4} = 2 \cdot n_{O_2} = \frac{7 \text{m}_{\text{NH}_3}}{442} \text{ mol}$$

$$n_{CO} = n_{CH_4} = \frac{7 \text{m}_{\text{NH}_3}}{442} \text{ mol}$$

$$n_{H_2} = 2 \cdot n_{CH_4} = \frac{7 \text{m}_{\text{NH}_3}}{221} \text{ mol}$$

On s'intéresse ensuite à la réaction du Water-Gas-Shift :

$$CO + H_2O \Longrightarrow CO_2 + H_2$$

On sait que  $n_{CO}$  du WGS =  $n_{CO}$  produit au réformage primaire  $+n_{CO}$  produit au réformage secondaire. Et donc on a :

$$n_{CO_2} = n_{CO} = n_{H_2O}$$

S'il reste du  $H_2O$  à la fin de cette réaction,  $n_{H2O}$  sera égal à  $n_{H2O}$  du réformage primaire moins le  $n_{CO}$  du WGS.

On peut aussi déduire que  $n_{CO_2-tot} = n_{CO_2-réformage primaire} + n_{CO_2-WGS}$ .

On peut aussi conclure que:

$$n_{H_2-\text{réformage primaire}} = n_{H_2-\text{synthèse}}$$

 $\mathrm{NH}_3$  -  $\mathrm{n}_{H_2\mathrm{-r\acute{e}formarge\ secondaire}} - n_{H_2\mathrm{-WGS}}$ 

Après la résolution de l'équilibre du réformage primaire, on obtient les valeurs suivantes :

$$n_{H_2O-r\text{\'e}formage primaire} =$$

 $n_{CO-réformage primaire} =$ 

 $n_{CO_2-r\text{\'e}formage primaire} =$ 

 $n_{H_2-r\text{\'e}formage primaire} =$ 

$$n_{CO-WGS} =$$

$$n_{CO2-WGS} =$$
 $n_{H_2-WGS} =$ 
 $n_{CO_2-\text{final}} =$ 
 $n_{H_2O-\text{final}} =$ 

# 7 Equilibre du reformage primaire

### 7.1 Calcul de la constante d'équilibre

Pour calculer la constante d'équilibre nous allons utiliser  $K = \exp{\frac{-\Delta G}{RT}}$  avec  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ 

### 7.1.1 Première équation

$$CH_4(g) + H_2O(g) \longrightarrow CO(g) + 3H_2$$

Connaissant les capacités calorifiques dépendantes de la température :

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_{p_{CO}}(T) &= 27.62 + (5.02 \cdot 10^{-3}) \mathrm{T~J/molK} \\ C_{p_{H_2}}(T) &= 29.3 - (0.84 \cdot 10^{-3}) \mathrm{T} + (2.09 \cdot 10^{-6}) \mathrm{T}^2 \mathrm{~J/molK} \\ C_{p_{CH_4}}(T) &= 14.23 + (75.3 \cdot 10^{-3}) \mathrm{T} - (18 \cdot 10^{-6}) \mathrm{T}^2 \mathrm{~J/molK} \\ C_{p_{H_2O}}(T) &= 30.13 + (10.46 \cdot 10^{-3}) \mathrm{T~J/molK} \end{array} \right.$$

$$\Delta H_1(T) = \Delta H(298.15 \; \mathrm{K}) + \int_{298.15}^T C_{p_{CO(g)}} dT + 3 \int_{298.15}^T C_{p_{H_2(g)}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{CH_4(g)}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{H_2O_{(g)}}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{H_2O_$$

$$= 188369.87 + 71.16T - 0.04163T^2 + (8.09 \cdot 10^{-6})T^3$$

$$\Delta S_1(T) = \Delta S(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T C_{p_{CO(g)}} dTT + 3 \int_{298.15}^T C_{p_{H_2(g)}} dTT + \int_T^{298.15} C_{p_{CH_4(g)}} dTT + \int_T^{298.15} C_{p_{H_2O_{(g)}}} dTT + \int_T^{298.$$

$$= -167.05 + 71.16 \ln T - 0.08326T + (1.2135 \cdot 10^{-5}T^2)$$

$$\Delta G_1(T) = 188369.9 - (71.16 \ln T)T + 238.21T + 0.04163T^2 - (4.045 \cdot 10^{-6}T^3)$$

Nous obtenons donc

$$K_1 = \exp \frac{-\Delta G_1}{RT}$$

avec la valeur de  $\Delta G_1$  calculée plus tôt.

### 7.1.2 Deuxième équation

$$\mathrm{CO}(\mathrm{g}) + \mathrm{H_2O}(\mathrm{g}) \longrightarrow \mathrm{CO_2}(\mathrm{g}) + \mathrm{H_2}$$

Connaissant les capacités calorifiques dépendantes de la température de l'équation précedente et celle-ci :

$$C_{p_{CO_2}}(T) = 32.22 + (22.18 \cdot 10^{-3})T + (3.35 \cdot 10^{-6})T^2$$

$$\Delta H_2(T) = \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T C_{p_{CO_2(g)}} dT + \int_{298.15}^T C_{p_{H_2(g)}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{CO(g)}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{H_2O_{(g)}}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{H_2O_{(g$$

$$= -42533.33 + 3.77T + (2.93 \cdot 10^{-3})T^{2} - (4.2 \cdot 10^{-7})T^{3}$$

$$\Delta S_2(T) = \Delta S(298.15 \; \mathrm{K}) + \int_{298.15}^T C_{p_{CO_2(g)}} dTT + 3 \int_{298.15}^T C_{p_{H_2(g)}} dTT + \int_T^{298.15} C_{p_{CO(g)}} dTT + \int_T^{298.15} C_{p_{H_2O_{(g)}}} dTT + \int_T^{298$$

$$= -65.9 + 3.77 \ln(T) + (5.86 \cdot 10^{-3})T - (6.3 \cdot 10^{-7})T^{2}$$

$$\Delta G_2 = -42533.33 + 69.67T - (2.93 \cdot 10^{-3})T^2 + (2.1 \cdot 10^{-7})T^3$$

Nous obtenons donc

$$K_2 = \exp \frac{-\Delta G_2}{RT}$$

avec la valeur de  $\Delta G_2$  calculée plus tôt.

# 8 Bilan d'energie

Equation de combustion :

$$CH_4 + 2O_2 \Longrightarrow CO_2 + 4H_2O$$

$$\Delta H_{reaction} = \Sigma \Delta H_{f,produits} - \Sigma \Delta H_{f,reactifs}$$
  
=  $((-393.51) + (2*(-241.82))) - ((-74.81) + 2*0))$ 

= (-877.15) - (-74.81)

=-802.34kJ/mol

Reformage primaire:

$$CH_4 + 2H_2O \iff 4H_2 + CO_2$$

$$\Delta H_{reaction} = \Sigma \Delta H_{f,produits} - \Sigma \Delta H_{f,reactifs}$$
  
=  $(4 * 0 + (-393.51)) - (-74.81 + 2 * (-241.82))$ 

=(-393.51)-(-558.45)

= 164.94kJ/mol

Reformage secondaire:

$$CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \Longrightarrow CO + 2H_2$$

$$\Delta H_{reaction} = \Sigma \Delta H_{f,produits} - \Sigma \Delta H_{f,reactifs}$$

$$= ((-110.53)) + (2*0)) - ((-74.81) + \frac{1}{2}*0))$$

$$= (-110.53) - (-74.81)$$

$$= -35.72kJ/mol$$

Le reformage secondaire s'opere generalement a une temperature de 1173 K.

Calculons les  $C_p$  des differents composants a cette temperature :

 $C_{p_{CH_4}}(1173.15 \text{ K})$ :

$$14.23 + 75.3 * 10^{-3} * T + (-18 * 10^{-6}) * T^2 = 14.23 + 75.3 * 10^{-3} * 1173.15 + (-18 * 10^{-6}) * (1173.15)^2 = 14.23 + 88.34 - 24.77 = 77.8(J.mol^{-1}.K^{-1})$$

 $C_{p_{O_2}}(1173.15 \text{ K}):$ 

$$25.73 + 12.97 * 10^{-3} * T + (-3.77 * 10^{-6}) * T^2 = 25.73 + 12.97 * 10^{-3} * 1173.15 + (-3.77 * 10^{-6}) * (1173.15)^2 = 25.73 + 15.22 - 5.19 = 35.76 (J.mol^{-1}.K^{-1})$$

$$C_{p_{CO}}(1173.15 \text{ K}): \\ 27.62 + 5.02 * 10^{-3} * T + (0 * 10^{-6}) * T^2 = 27.62 + 5.02 * 10^{-3} * 1173.15 = 27.62 + 5.89 = 33.5(J.mol^{-1}.K^{-1})$$

$$C_{p_{H_2}}(1173.15 \text{ K}):$$

$$29.3 + (-0.84) * 10^{-3} * T + (2.09 * 10^{-6}) * T^2 = 29.3 - 0.84 * 10^{-3} * 1173.15 + (2.09 * 10^{-6}) * (1173.15)^2 = 29.3 - 0.98 + 2.88$$

 $= 31.19(J.mol^{-1}.K^{-1})$ 

Calculons maintenant le  $\Delta H$  a 1173.15 K :

$$\Delta H(1173.15~{\rm K}) = \Delta H(298.15~{\rm K}) + \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{reactifs}} dT + \int_{298.15}^{1173.15} C_{p_{produits}} dT$$

$$=\Delta H(298.15~{\rm K}) + \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{CH_4}} dT + \frac{1}{2} \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{O_2}} dT + \int_{298.15}^{1173.15} C_{p_{CO}} dT + 2 \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{H_2}} dT \\ = -35.72 kJ/mol + \int_{1173.15}^{298.15} (14.23 + 75.3 * 10^{-3}T + (-18*10^{-6})T^2) dT + \frac{1}{2} \int_{1173.15}^{298.15} (25.73 + 12.97*10^{-3}T + (-3.77*10^{-6})T^2) dT + \int_{298.15}^{1173.15} (27.62 + 5.02*10^{-3}T + (0*10^{-6})T^2) dT + 2 \int_{298.15}^{1173.15} (29.3 + (-0.84)*10^{-3}T + (2.09*10^{-6})T^2) dT$$

$$= -35.72kJ/mol - \left[14.23T + \frac{75.3*10^{-3}}{2}T^2 + \left(\frac{-18*10^{-6}}{3}\right)T^3\right]_{298.15}^{1173.15} - \frac{1}{2}\left[25.73T + \frac{12.97*10^{-3}}{2}T^2 + \left(\frac{-3.77*10^{-6}}{3}\right)T^3\right]_{298.15}^{1173.15} + \left[27.62T + \frac{5.02*10^{-3}}{2}T^2 + \frac{(0*10^{-6})}{3}T^3\right]_{298.15}^{1173.15} + 2\left[29.3T + \frac{(-0.84)*10^{-3}}{2}T^2 + \frac{(2.09*10^{-6})}{3}T^3\right]_{298.15}^{1173.15} \\ = -35720 - \left(58823.4 - 7430.5\right) - \frac{1}{2}\left(37081 - 8214.57\right) + \left(35856.9 - 8458.03\right) + 2\left(34920.1 - 7986.16\right)$$

= -35720 - 51392.9 - 14433.215 + 27398.87 + 53867.88

=-20279.365J

Water-Gas-Shift:

$$CO + H_2O \Longrightarrow H_2 + CO_2$$

$$\Delta H_{reaction} = \Sigma \Delta H_{f,produits} - \Sigma \Delta H_{f,reactifs}$$

$$= (0 + (-393.51)) - (-110.53 + (-241.82))$$

$$= (-393.51) - (-352.35)$$

$$= -41.16kJ/mol$$

Le Water Gas Shift s'opere generalement entre 200 et 400°. Nous considererons alors une temperature de reaction de  $300^{\circ}$ , soit 573.15 K.

Calculons les  $C_p$  des differents composants a cette temperature :

$$C_{p_{CO}}(573.15 \text{ K}):$$
 27.62 + 5.04 \*  $10^{-3} * T + (0 * 10^{-6}) * T^2 = 27.62 + 5.04 * 10^{-3} * 573.15 + (0 * 10^{-6}) * (1173.15)^2 = 27.62 + 2.89 = 30.5(J.mol^{-1}.K^{-1})$ 

 $C_{p_{H_2O}}(573.15 \text{ K}):$ 

 $30.13 + 10.46*10^{-3}*T + (0*10^{-6})*T^2 = 30.13 + 10.46*10^{-3}*573.15 + (0*10^{-6})*(573.15)^2 = 30.13 + 5.99 = 36.12(J.mol^{-1}.K^{-1})$ 

$$\begin{split} &C_{p_{CO_2}}(573.15~\mathrm{K}):\\ &32.22 + 22.18*10^{-3}*T + (-3.35*10^{-6})*T^2 = 32.22 + 22.18*10^{-3}*573.15 + (-3.35*10^{-6})*(573.15)^2 = 32.22 + 12.71 - 1.1\\ &= 43.83(J.mol^{-1}.K^{-1}) \end{split}$$

$$C_{p_{H_2}}(573.15 \text{ K}):$$
  $29.3 + (-0.84)*10^{-3}*T + (2.09*10^{-6})*T^2 = 29.3 - 0.84*10^{-3}*573.15 + (2.09*10^{-6})*(573.15)^2 = 29.3 - 0.48 + 0.69 = 29.5(J.mol^{-1}.K^{-1})$ 

Calculons maintenant le  $\Delta H$  a 573.15 K :

$$\Delta H(573.15~{\rm K}) = \Delta H(298.15~{\rm K}) + \int_{573.15}^{298.15} C_{p_{reactifs}} dT + \int_{298.15}^{573.15} C_{p_{produits}} dT$$

$$=\Delta H(298.15~{\rm K}) + \int_{573.15}^{298.15} C_{p_{CO}} dT + \int_{573.15}^{298.15} C_{p_{H_2O}} dT + \int_{298.15}^{573.15} C_{p_{CO_2}} dT + \int_{298.15}^{573.15} C_{p_{H_2}} dT \\ = -41.16kJ/mol + \int_{573.15}^{298.15} (27.62 + 5.04 * 10^{-3}T + (0 * 10^{-6})T^2)dT + \int_{573.15}^{298.15} (30.13 + 10.46 * 10^{-3}T + (0 * 10^{-6})T^2)dT + \int_{298.15}^{573.15} (30.22 + 22.18 * 10^{-3}T + (-3.35 * 10^{-6})T^2)dT + \int_{298.15}^{573.15} (29.3 + (-0.84) * 10^{-3}T + (2.09 * 10^{-6})T^2)dT \\ = -41.16kJ/mol - [27.62T + \frac{5.04*10^{-3}}{2}T^2 + (\frac{0*10^{-6}}{3})T^3]_{298.15}^{573.15} - [30.13T + \frac{10.46*10^{-3}}{2}T^2 + (\frac{0*10^{-6}}{3})T^3]_{298.15}^{573.15} + [32.22T + \frac{22.18*10^{-3}}{2}T^2 + \frac{(-3.35*10^{-6})}{3}T^3]_{298.15}^{573.15} + [29.3T + \frac{(-0.84)*10^{-3}}{2}T^2 + \frac{(2.09*10^{-6})}{3}T^3]_{298.15}^{573.15} = -41160 - (16658.2 - 8458.91) - (18987.1 - 9448.17) + (21899.7 - 10562.6) + (16786.5 - 8716.92) \\ = -41160 - 8199.29 - 9538.93 + 11337.1 + 8069.58 \\ = -55630.7J$$

# 9 Outil de gestion

# 10 Calcul du nombre de tuyaux

### Références

- [1] Atkins and Jones. Principes de chimie. De Boeck, 2nd edition, 2013.
- [2] Ph.D. Bruce Mattson. Microscale gas chemistry: Experiments with nitrogen. http://mattson.creighton.edu/N2/index.html, septembre 2014.
- [3] Société chimique de France.
- [4] Association française pour l'Hydrogène et les piles à combustibles. http://www.afhypac.org/fr/3\_production\_de\_1\_hydrogene, septembre 2014.
- [5] Sorbonne Universités. Capacité calorifique molaiure à pression constante. http://www.edu.upmc.fr/chimie/lc101-202-301/communs/public/capcalo.htm, octobre 2014.
- [6] Wikipédia. http://fr.wikipedia.org/wiki/diazote, septembre 2014.
- [7] Wikipédia. http://fr.wikipedia.org/wiki/dihydrogene, septembre 2014.