

Projet 3 - Tache 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)

20 novembre 2014

Table des matières

1	Introduction	2
2	Calcul du flux des réactifs	2
3	Calcul du débit d'eau nécessaire pour refroidir le réactif	2
4	Sources des réactifs	3
4.1	Sources de diazote	3
4.1.1	Procédé cryogénique	3
4.1.2	Perméation gazeuse	3
4.1.3	Méthode de Ramsay	3
4.2	Sources de dihydrogène	4
4.2.1	Vaporeformage de méthane	4
4.2.2	Oxydation partielle d'hydrocarbure	4
4.2.3	Electrolyse	4
5	Bilan de matiere	4
6	Equilibre du reformage primaire	6
6.1	Calcul de la constante d'équilibre	6
6.1.1	Première réaction	6
6.1.2	Deuxième réaction	7
6.2	Etat d'avancement	7
7	Bilan d'energie	8
8	Calcul du nombre de tubes	11
9	Outil de gestion	12
10	Etude paramétrique	12
I	Annexes	13

A Premier jet du flow-sheet simplifié	13
B Deuxième version du flow-sheet	14
C Code Matlab de l'outil de gestion	15

1 Introduction

Dans le cadre du projet P3, nous avons réalisé une étude théorique sur la fabrication industrielle d'ammoniac.

Ce rapport fournit premièrement les informations relatives aux réactifs nécessaires à la production d'une quantité fixée d'ammoniac, de la quantité d'eau nécessaire au refroidissement permettant d'atteindre la température requise pour que la réaction Haber-Bosch ait lieu, la source des réactifs utilisés ainsi que l'énergie nécessaire au réformage primaire.

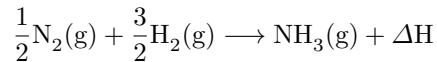
Nous fournissons ensuite un outil de gestion écrit en MATLAB synthétisant les calculs des quantités de matières nécessaires à la production d'une masse fixe d'ammoniac à une certaine température du réacteur du réformage primaire. Cet outil fournit les valeurs en moles de tout les composés à chaque étape de production.

Nous réalisons ensuite une étude paramétrique permettant la combinaison optimale de température et de production quotidienne d'ammoniac correspondant à nos produits disponibles, et nous finissons par un calcul du nombre de tubes nécessaires à un certain débit de CH_4 et de H_2O dans le réformeur primaire.

2 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 :



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

$$m_{\text{N}_2} = 823.5 \text{ t/d}$$

et le flux de H_2

$$m_{\text{H}_2} = 176.4 \text{ t/d.}$$

3 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 10^5 Pa .

Première méthode : on considère les capacités calorifiques constantes Pour la réaction donnée dans la section précédente, on a $\Delta H(298.15 \text{ K}) = -46 \cdot 10^3 \text{ J}$ pour une mole de $\text{NH}_3(\text{g})$ produite [1]. Comme la réaction a lieu à 500°C (c'est à dire 773.15 K), il va falloir calculer $\Delta H(773.15 \text{ K})$. 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].

$$\begin{cases} C_{p_{NH_3(g)}} &= 37 \text{ J/molK} \\ C_{p_{H_2(g)}} &= 28.836 \text{ J/molK} \\ C_{p_{N_2(g)}} &= 29.124 \text{ J/molK} \end{cases}$$

On a donc :

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

Pour la quantité de NH_3 à produire par jour (à savoir $58.83 \cdot 10^6 \text{ mol}$), 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 $C_{H_2O(g)} = 4185.5 \text{ J/kgK}$ [1] et en égalant q à $m_{H_2O} \cdot C_{H_2O(g)} \cdot \Delta T$ avec $\Delta T = 90 - 25 = 65 \text{ K}$, 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] :

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

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'erreur faite en utilisant l'approximation de la section précédente est de 3%.

4 Sources des réactifs

4.1 Sources de diazote

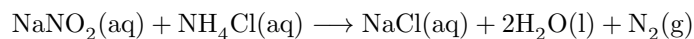
4.1.1 Procédé cryogénique

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^3/h [3].

4.1.2 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 m^3/h) [3].

4.1.3 Méthode de Ramsay

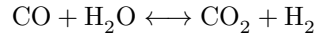
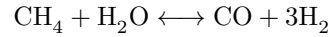


On chauffe le mélange de $NaNO_2$ et NH_4Cl pour obtenir le N_2 sous forme gazeuse. Un désavantage de cette méthode par rapport aux 2 premières est qu'il faut acheter les réactifs. De plus, il faut utiliser de l'énergie pour chauffer la réaction [6].

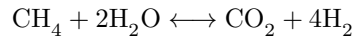
4.2 Sources de dihydrogène

4.2.1 Vaporeformage de méthane

2 réactions sont utilisées pour ce procédé [4] :

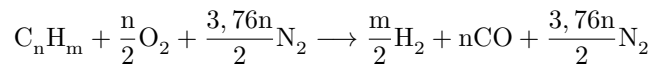


L'équation bilan obtenue est la suivante :



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].

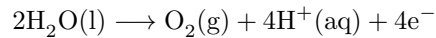
4.2.2 Oxydation partielle d'hydrocarbure



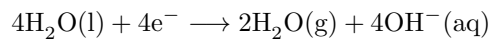
L'air est comburant pour cette réaction, qui a besoin d'être catalysée. Son caractère exothermique aide à la catalyse. L'inconvénient de cette méthode est son faible rendement [7].

4.2.3 Electrolyse

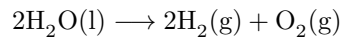
Réaction à l'anode :



Réaction à la cathode :



L'équation bilan obtenue est la suivante :

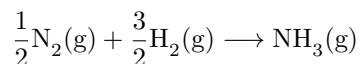


La réaction nécessite une grande quantité d'électricité. L'eau, quant à elle, est présente en quantité illimitée et est peu coûteuse. En pratique, cette méthode est très peu utilisée [7].

5 Bilan de matiere

Pour la compréhension de cette section, nous vous renvoyons vers le flow-sheet, dans l'annexe B. On pose le flux de $\text{NH}_3(\text{g})$ à la sortie égal à m_{NH_3} g/d¹.

Nous utilisons une méthode bottom-up. Nous partons donc de la réaction :



1. Avec g/d = grammes par jour.

Et donc,

$$n_{NH_3} = \frac{m_{NH_3}}{17} \text{ mol/d}$$

Ce qui donne les valeurs suivantes pour le nombre de moles final de N_2 et de H_2 nécessaire ("final" étant donné que, pour rappel, nous partons de la fin) :

$$n_{N_2,f} = \frac{n_{NH_3}}{2} = \frac{m_{NH_3}}{34} \text{ mol/d}$$

et

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

On sait que le $N_2(g)$ provient uniquement de l'air entrant dans le réacteur du réformage secondaire. Et comme on a posé comme hypothèse 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 :

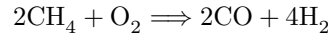
$$n_{air} = n_{N_2} \cdot \frac{100}{78} = \frac{m_{NH_3}}{26.52} \text{ mol/d}$$

Et :

$$n_{O_2} = n_{air} \cdot \frac{21}{100} = \frac{0.21m_{NH_3}}{26.52} \text{ mol/d}$$

$$n_{Ar} = n_{air} \cdot \frac{1}{100} = \frac{0.01m_{NH_3}}{26.52} \text{ mol/d}$$

La réaction dans le réformage secondaire, durant laquelle l'air est inséré, est la suivante :



Nous savons par hypothèse que le $CH_4(g)$ et le $O_2(g)$ sont présents en quantité stoechiométrique. Nous avons donc la quantité suivante de CH_4 à l'entrée du réformage secondaire (RS) :

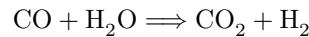
$$n_{CH_4,RS} = 2 \cdot n_{O_2} = \frac{0.42m_{NH_3}}{26.52} \text{ mol/d}$$

Ainsi que les quantités suivantes de CO et de H_2 créés

$$n_{CO,RS} = n_{CH_4,RS} = \frac{0.42m_{NH_3}}{26.52} \text{ mol/d}$$

$$n_{H_2,RS} = 2 \cdot n_{CH_4,RS} = \frac{0.84m_{NH_3}}{26.52} \text{ mol/d}$$

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



On sait que $n_{CO,WGS} = n_{CO,RP} + n_{CO,RS}$ avec $n_{CO,WGS}$ le nombre de moles de CO à l'entrée de la réaction Water-Gas-Shift, $n_{CO,RP}$ celui à la sortie du réformage primaire et $n_{CO,RS}$ celui à la sortie du réformage secondaire.

Dans la réaction Water-Gas-Shift, nous avons $n_{CO,WGS}$ moles de CO, un excès de H_2O en réactifs, et $n_{CO,WGS}$ moles de CO_2 et de H_2 formés :

$$n_{CO_2} = n_{CO} = n_{H_2}.$$

S'il reste du H_2O à la fin de cette réaction, le nombre de moles d'eau à la sortie de la réaction Water-Gas-Shift sera égal aux moles d'eau à la sortie du réformage primaire moins $n_{CO,WGS}$ (le nombre de moles utilisés dans la réaction Water-Gas-Shift) :

$$n_{H_2O,dégagé} = n_{H_2O,RP} - n_{CO,WGS}.$$

On peut aussi déduire que le nombre de moles de CO_2 dégagé à la fin de la réaction Water-Gas-Shift, n_{CO_2-tot} , vaut la somme du nombre de moles de CO_2 produits par le réformage primaire et par la réaction Water-Gas-Shift :

$$n_{CO_2-dégagé} = n_{CO_2,RP} + n_{CO_2,WGS}.$$

Etant donné que l'on a le nombre de moles de H_2 nécessaire à la production de m_{NH_3} g/d, qui est de $n_{H_2,f}$, et que l'on connaît le nombre de moles de H_2 produit à travers les diverses réactions, nous savons les égaliser de la manière suivante (les indices RP , RS et WGS signifiant à la sortie du réformage primaire, secondaire et de la réaction Water-Gas-Shift) :

$$n_{H_2,f} = n_{H_2,RP} + n_{H_2,RS} + n_{H_2,WGS}$$

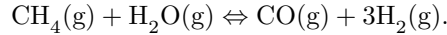
6 Equilibre du reformage primaire

6.1 Calcul de la constante d'équilibre

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

6.1.1 Première réaction

Calculons la constante d'équilibre K_1 de la réaction suivante :



Connaissant l'enthalpie en conditions standards [1] et les capacités calorifiques dépendant de la température [5],

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{pCO}(T) = 27.62 + (5.02 \cdot 10^{-3})T \text{ J/molK} \\ C_{pH_2}(T) = 29.3 - (0.84 \cdot 10^{-3})T + (2.09 \cdot 10^{-6})T^2 \text{ J/molK} \\ C_{pCH_4}(T) = 14.23 + (75.3 \cdot 10^{-3})T - (18 \cdot 10^{-6})T^2 \text{ J/molK} \\ C_{pH_2O}(T) = 30.13 + (10.46 \cdot 10^{-3})T \text{ J/molK} \end{array} \right.$$

on peut écrire

$$\Delta C_p(T) = 3C_{pH_2}(T) + C_{pCO}(T) - C_{pCH_4}(T) - C_{pH_2O}(T).$$

On peut donc directement calculer $\Delta H_1(T)$:

$$\Delta H_1(T) = \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T \Delta C_p(T) dT = 188369.87 + 71.16T - 0.04163T^2 + (8.09 \cdot 10^{-6})T^3 \text{ J/mol}$$

Connaissant l'entropie en conditions standards [1], on peut également directement calculer ΔS_1

$$\begin{aligned} \Delta S_1(T) &= \Delta S(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T \frac{\Delta C_p}{T} dT \\ &= -167.05 + 71.16 \ln T - 0.08326T + (1.2135 \cdot 10^{-5})T^2 \text{ J/mol/K} \end{aligned}$$

On peut alors calculer ΔG_1

$$\Delta G_1(T) = 188369.9 - (71.16 \ln T)T + 238.21T + 0.04163T^2 - (4.045 \cdot 10^{-6})T^3 \text{ J/mol} \quad (1)$$

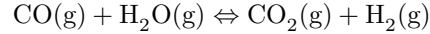
et donc enfin obtenir K_1

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

où ΔG_1 est donnée par l'équation 1.

6.1.2 Deuxième réaction

Calculons maintenant la constante d'équilibre K_2 de la deuxième réaction :



Connaissant l'enthalpie en conditions standards [1] et les capacités calorifiques dépendant de la température [5],

$$C_{p\text{CO}_2}(T) = 32.22 + (22.18 \cdot 10^{-3})T - (3.35 \cdot 10^{-6})T^2$$

on peut écrire

$$\Delta C_p(T) = C_{p\text{H}_2}(T) + C_{p\text{CO}_2}(T) - C_{p\text{CO}}(T) - C_{p\text{H}_2\text{O}}(T).$$

On peut donc directement calculer $\Delta H_2(T)$

$$\begin{aligned} \Delta H_2(T) &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T \Delta C_p(T) dT \\ &= -42533.33 + 3.77T + (2.93 \cdot 10^{-3})T^2 - (4.2 \cdot 10^{-7})T^3 \text{ J/mol.} \end{aligned}$$

Connaissant l'entropie en conditions standards [1], on peut également directement calculer $\Delta S_2(T)$

$$\begin{aligned} \Delta S_2(T) &= \Delta S(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T \frac{\Delta C_p(T)}{T} dT \\ &= -65.9 + 3.77 \ln(T) + (5.86 \cdot 10^{-3})T - (6.3 \cdot 10^{-7})T^2 \text{ J/molK} \end{aligned}$$

Nous pouvons donc calculer ΔG_2

$$\Delta G_2 = -42533.33 - (3.77 \ln(T))T + 69.67T - (2.93 \cdot 10^{-3})T^2 + (2.1 \cdot 10^{-7})T^3 \text{ J/mol} \quad (2)$$

pour enfin obtenir K_2

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

où ΔG_2 est donné par l'équation 2.

Remarque Pour plus de précisions et afin d'automatiser le calcul de ces constantes d'équilibres, nous avons créé deux fonctions Matlab, `ComputeK1(T)` et `ComputeK2(T)` qui suivent exactement cette démarche et que vous pouvez retrouver dans l'annexe C.

6.2 Etat d'avancement

Analysons maintenant plus en détails les deux réactions qui ont lieu dans le réformage primaire. Ces deux réactions se passent à l'équilibre dans le même réacteur. De plus, dans la gamme de températures qui nous intéressent, on considère tous les composants à l'état gazeux. Nous ferons l'hypothèse que ces gaz se comportent comme des gaz parfaits. Voici donc les tableaux d'avancement en conséquence, dans les table 1 et 2.

Ici, x et y sont respectivement les avancements des première et deuxième réactions. Nous travaillons en moles par jour. On remarque bien que les quantités à l'équilibre correspondent dans les deux tableaux. Avant de s'attaquer à l'écriture des quotients réactionnels à l'équilibre, notons que le nombre total de moles de gaz se trouve en prenant une seule fois le nombre de moles de chaque composant.

$$\text{On a donc : } n_{\text{gaz,tot}} = n_{01} + n_{02} + 2x$$

Nous pouvons écrire nos deux équilibres :

	CH ₄ (g)	+	H ₂ O(g)	⇌	CO(g)	+	3H ₂ (g)
n_i	n_{01}		n_{02}		0		0
$n_{eq}(x)$	$n_{01} - x$		$n_{02} - x - y$		$x - y$		$3x + y$
a_{eq}	$\frac{n_{01}-x}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$		$\frac{n_{02}-x-y}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$		$\frac{x-y}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$		$\frac{3x+y}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$

TABLE 1 – Tableau d’avancement de la première réaction.

	CO(g)	+	H ₂ O(g)	⇌	CO ₂ (g)	+	H ₂ (g)
n_i	x		$n_{02} - x$		0		$3x$
$n_{eq}(x)$	$x - y$		$n_{02} - x - y$		y		$3x + y$
a_{eq}	$\frac{x-y}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$		$\frac{n_{02}-x-y}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$		$\frac{y}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$		$\frac{3x+y}{n_{gaz,tot}} \frac{p}{p^\circ}$

TABLE 2 – Tableau d’avancement de la première réaction.

$$\begin{cases} K_1 = \frac{(x-y)(3x+y)^3 p_{tot}^2}{(n_{02}-x)(n_{02}-x-y)n_{gaz,tot}^2 p_0^2} \\ K_2 = \frac{y(3x+y)}{(x-y)(n_{02}-x-y)} \end{cases}$$

Pour ces équations, p_{tot} est la pression à la sortie du réacteur, c’est-à-dire 28 bars et p_0 est la pression standard, c’est à dire 1 bar. K_1 et K_2 ont été calculés plus tôt en fonction de la température. De plus, grâce au bilan de matière fait précédemment, nous obtenons les deux équations suivantes :

$$\begin{cases} n_{01} - x = \frac{7}{442} \cdot m_{NH_3} \\ 3x + y = \frac{9}{221} \cdot m_{NH_3} - (x - y) \end{cases}$$

Ainsi, nous avons un système de quatre équations à quatre inconnues qui nous permettra d’exprimer toutes les entrées/sorties en fonction de la température et du débit de NH₃.

7 Bilan d’énergie

Afin d’évaluer la quantité totale d’énergie dont nous avons besoin pour mener à bien la synthèse d’ammoniac, nous allons regarder les quantités requises à chaque étape du processus pour ensuite déterminer la totalité des besoins énergétiques du système.

Comme chaque réaction se passe à des températures différentes de la température ambiante, nous calculerons le $\Delta H_{reaction}$ à température ambiante selon l’équation suivante

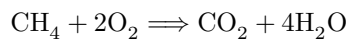
$$\Delta H_{reaction} = \Sigma \Delta H_{f,produits} - \Sigma \Delta H_{f,reactifs}$$

Ensuite, à l’aide des C_p variables en fonction de la température, nous serons alors en mesure de déterminer le $\Delta H_{reaction}$ à la température voulue selon l’équation

$$\Delta H(T_2) = \Delta H(T_1) + \int_{T_2}^{T_1} C_{p_{reactifs}} dT + \int_{T_1}^{T_2} C_{p_{produits}} dT$$

où T_1 est ici la température ambiante, soit 298.15 K.

Équation de combustion La combustion du méthane se passe dans le four, et fournit la totalité de l’énergie requise par l’ensemble du processus, avec un rendement de 75 pourcents. La réaction se produit selon l’équation chimique suivante :



$$\begin{aligned}
\Delta H_{reaction} &= \Sigma \Delta H_{f,produits} - \Sigma \Delta H_{f,reactifs} \\
&= (-393.51) + 2 \cdot (-241.82) - (-74.81) + 2 \cdot 0 \\
&= (-877.15) - (-74.81) \\
&= -802.34 \text{ kJ/mol}
\end{aligned}$$

La réaction se passe généralement à une température avoisinant les 1300 K. Voici les C_p variables en fonction de la température des différents composants[5] (exprimés en J/molK) :

$$\begin{cases}
C_{pCH_4}(T) &= 14.23 + 75.3 \cdot 10^{-3}T + (-18 \cdot 10^{-6})T^2 \\
C_{pO_2}(T) &= 25.73 + 12.97 \cdot 10^{-3}T + (-3.77 \cdot 10^{-6})T^2 \\
C_{pCO_2}(T) &= 32.22 + 22.18 \cdot 10^{-3}T + (-3.35 \cdot 10^{-6})T^2 \\
C_{pH_2O}(T) &= 30.13 + 10.46 \cdot 10^{-3}T + (0 \cdot 10^{-6})T^2
\end{cases}$$

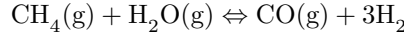
Calculons maintenant le ΔH pour une température T_2 de 1300 K :

$$\begin{aligned}
\Delta H(1300 \text{ K}) &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^{1300} C_{p_{reactifs}} dT + \int_{298.15}^{1300} C_{p_{produits}} dT \\
&= -805.99 \text{ kJ/mol}
\end{aligned}$$

On peut donc voir que cette réaction est largement exothermique, c'est elle qui fournira l'énergie nécessaire aux réactions du réformage primaire.

Reformage primaire Dans notre travail, la température du réformage primaire est un paramètre. Nous obtiendrons donc une enthalpie dépendant de la température. Le réformage primaire est composé de deux équations.

La première réaction est donnée par

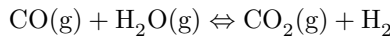


Connaissant l'enthalpie en conditions standards [1] et les capacités calorifiques dépendant de la température [5] :

$$\begin{cases}
C_{pCO}(T) &= 27.62 + (5.02 \cdot 10^{-3})T \text{ J/molK} \\
C_{pH_2}(T) &= 29.3 - (0.84 \cdot 10^{-3})T + (2.09 \cdot 10^{-6})T^2 \text{ J/molK} \\
C_{pCH_4}(T) &= 14.23 + (75.3 \cdot 10^{-3})T - (18 \cdot 10^{-6})T^2 \text{ J/molK} \\
C_{pH_2O}(T) &= 30.13 + (10.46 \cdot 10^{-3})T \text{ J/molK}
\end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\Delta H_1(T) = \Delta H(298.15 \text{ K}) &= + \int_{298.15}^T C_{pCO(g)} dT + 3 \int_{298.15}^T C_{pH_2(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pCH_4(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pH_2O(g)} dT \\
&= 188369.87 + 71.16T - 0.04163T^2 + (8.09 \cdot 10^{-6})T^3 \text{ kJ/mol}
\end{aligned}$$

La deuxième réaction est donnée par

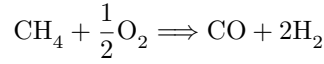


Connaissant l'enthalpie en conditions standards [1] et les capacités calorifiques dépendant de la température [5] :

$$C_{pCO_2}(T) = 32.22 + (22.18 \cdot 10^{-3})T + (3.35 \cdot 10^{-6})T^2 \text{ J/molK}$$

$$\begin{aligned}
\Delta H_2(T) &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T C_{pCO_2(g)} dT + \int_{298.15}^T C_{pH_2(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pCO(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pH_2O(g)} dT \\
&= -42533.33 + 3.77T + (2.93 \cdot 10^{-3})T^2 - (4.2 \cdot 10^{-7})T^3 \text{ kJ/mol}
\end{aligned}$$

Reformage secondaire



$$\begin{aligned}\Delta H_{\text{reaction}} &= \Sigma \Delta H_{f,\text{produits}} - \Sigma \Delta H_{f,\text{reactifs}} \\ &= (-110.53) + 2 \cdot 0 - ((-74.81) + \frac{1}{2} \cdot 0) \\ &= (-110.53) - (-74.81) \\ &= -35.72 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

Le reformage secondaire s'opere generalement a une temperature de 1173 K. Voici les C_p variables en fonction de la temperature des differents composants[5] (exprimees en J/molK) :

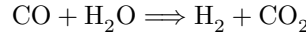
$$\left\{ \begin{array}{l} C_{p_{\text{CH}_4}}(T) = 14.23 + 75.3 \cdot 10^{-3}T + (-18 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{O}_2}}(T) = 25.73 + 12.97 \cdot 10^{-3}T + (-3.77 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{CO}}}(T) = 27.62 + 5.02 \cdot 10^{-3}T + (0 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{H}_2}}(T) = 29.3 + (-0.84) \cdot 10^{-3}T + (2.09 \cdot 10^{-6})T^2 \end{array} \right.$$

Calculons maintenant le ΔH a 1173.15 K :

$$\begin{aligned}\Delta H(1173.15 \text{ K}) &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{\text{reactifs}}} dT + \int_{298.15}^{1173.15} C_{p_{\text{produits}}} dT \\ &= -20.29 \text{ kJ}\end{aligned}$$

Il s'agit donc d'une reaction exothermique.

Water-Gas-Shift



$$\begin{aligned}\Delta H_{\text{reaction}} &= \Sigma \Delta H_{f,\text{produits}} - \Sigma \Delta H_{f,\text{reactifs}} \\ &= 0 + (-393.51) - (-110.53 + (-241.82)) \\ &= -393.51 - (-352.35) \\ &= -41.16 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

Le Water Gas Shift s'opere generalement entre 200 et 400°. Nous considererons alors une temperature de reaction de 573°, soit 573.15 K.

Voici les C_p variables en fonction de la temperature des differents composants[5] (exprimees en J/molK) :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{p_{\text{CO}_2}}(T) = 32.22 + 22.18 \cdot 10^{-3}T + (-3.35 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{H}_2\text{O}}}(T) = 30.13 + 10.46 \cdot 10^{-3}T + (0 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{CO}}}(T) = 27.62 + 5.02 \cdot 10^{-3}T + (0 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{H}_2}}(T) = 29.3 + (-0.84) \cdot 10^{-3}T + (2.09 \cdot 10^{-6})T^2 \end{array} \right.$$

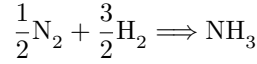
Calculons maintenant le ΔH a 573.15 K :

$$\begin{aligned}\Delta H(573.15 \text{ K}) &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{573.15}^{298.15} C_{p_{\text{reactifs}}} dT + \int_{298.15}^{573.15} C_{p_{\text{produits}}} dT \\ &= -55.63 \text{ kJ}\end{aligned}$$

Il s'agit donc d'une reaction exothermique.

Séparation de CO_2 et de H_2O Pour cette étape, nous ferons l'hypothèse que les étapes requises pour enlever le CO_2 et le H_2O des composants présents dans le circuit ne nécessitent pas d'énergie, ou du moins énergétiquement indépendante des autres besoins en énergie du reste du système.

Synthèse du NH₃



$$\begin{aligned}\Delta H_{\text{reaction}} &= \Sigma \Delta H_{f,\text{produits}} - \Sigma \Delta H_{f,\text{réactifs}} \\ &= -46 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

La réaction se passe à 750 K.

Voici les C_p variables en fonction de la température des différents composants[5] :

$$\begin{cases} C_{p_{\text{N}_2}}(T) &= 27.62 + 4.19 \cdot 10^{-3}T + (0 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{H}_2}}(T) &= 29.3 - 0.84 \cdot 10^{-3}T + (2.09 \cdot 10^{-6})T^2 \\ C_{p_{\text{NH}_3}}(T) &= 31.81 + 15.48 \cdot 10^{-3}T + (5.86 \cdot 10^{-6})T^2 \end{cases}$$

Calculons maintenant le ΔH à 750 K :

$$\begin{aligned}\Delta H(750 \text{ K}) &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^{750} C_{p_{\text{réactifs}}} dT + \int_{298.15}^{750} C_{p_{\text{produits}}} dT \\ &= -27.98 \text{ kJ}\end{aligned}$$

Il s'agit donc d'une réaction exothermique.

Conclusion Étant donné le fait que nous ayons besoin de X kJ pour le reformage primaire, et que l'énergie que la combustion donne au début du système se fait à un rendement de 75 pourcent, nous pouvons facilement déterminer le débit de CH₄ à injecter dans le four au départ. Cependant, la quantité d'énergie nécessaire lors du reformage primaire varie en fonction de la température. Par conséquent, la combustion sera aussi fonction de la température, et ce en prenant en compte le rendement de 75 pourcent².

8 Calcul du nombre de tubes

Nous allons maintenant calculer le nombre de tubes dont nous aurons besoin pour notre réacteur multi-tubulaire. Ces tubes, d'un rayon $r = 5$ cm, doivent permettre le passage des réactifs à l'entrée du reformage primaire avec une vitesse superficielle $c = 2$ m/s. Nous expliquerons la modélisation dans un premier temps, et prendrons un exemple ensuite.

Nous pouvons déterminer le débit volumique, noté \dot{V} , grâce à l'expression de la loi des gaz parfaits $p\dot{V} = \dot{n}RT$ où \dot{n} est le débit molaire, R est la constante des gaz parfaits, T est la température imposée dans le reformage primaire et p est la pression dans le réformage primaire, c'est à dire 31 bars :

$$\dot{V} = \frac{\dot{n}RT}{p} = \frac{\dot{n} \cdot 8.314 \cdot T}{31 \cdot 10^5} = (2.68 \cdot 10^{-6}) \cdot \dot{n}T$$

Ensuite, à l'aide des notions de système ouvert et de l'hypothèse $\dot{m}_{\text{entrée}} = \dot{m}_{\text{sortie}}$, nous obtenons que $\dot{V} = c \cdot A$ avec \dot{V} où A est la somme des sections de tous les tubes. En remplaçant par les valeurs que nous possédons, nous obtenons :

$$A = \frac{\dot{V}}{c} = \frac{(2.68 \cdot 10^{-6}) \cdot \dot{n}T}{2} = (1.34 \cdot 10^{-6}) \cdot \dot{n}T \text{ m}^2$$

Or, on sait que la surface d'un tube vaut $\pi r^2 = 7.85 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$. Le nombre de tubes est, dès lors, le rapport de la section totale A trouvée plus haut sur la section d'un tube. Ce qui nous donne finalement :

$$\text{Nombre de tubes} = \frac{(1.34 \cdot 10^{-6}) \cdot \dot{n}T}{7.854 \cdot 10^{-3}} = (1.707 \cdot 10^{-4}) \cdot \dot{n}T$$

Pour terminer cette partie, nous allons calculer le nombre de tubes nécessaires pour la production de 1500 t/d de NH₃ à une température $T = 1080$ K. L'outil de gestion nous donne alors $\dot{n}_{\text{réactifs}} = \dot{n}_{\text{CH}_4} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} = 872.22 \text{ mol/s}$.

2. "prendre en compte le rendement de 75 pourcent" signifie faire fonctionner le four à 133.3 pourcent afin d'avoir la quantité d'énergie nécessaire malgré le rendement inférieur à 100 pourcent.

On trouve alors immédiatement :

$$\text{Nombre de tubes} = 160.83$$

que l'on arrondit bien sur à l'unité supérieure pour obtenir 161.

9 Outil de gestion

Notre outil de gestion se base sur les équations écrites lors du bilan de matière et lors du calcul de l'état d'avancement des réactions dans le reformage primaire. Il résout donc un système à 4 équations et à 4 inconnues et ne sélectionne que les solutions positives et réelles. Il présente les résultats sous forme d'un tableau reprenant les flux de chaque composants à chaque étape du procédé. Les résultats sont présentés en mol/s · Nous avons également intégré le calcul du nombre de tubes nécessaires au passage du mélange $\text{CH}_4(\text{g})$ et $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$.

Le code Matlab de l'outil de gestion peut être trouvé à l'annexe C. Remarquez que l'outil de gestion utilise deux autres fonctions `ComputeK1` et `ComputeK2` qui permettent respectivement de calculer la constante d'équilibre de la première et de la deuxième réaction du reformage primaire pour une température T .

10 Etude paramétrique

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.afhypo.org/fr/3_production_de_l_hydrogene, septembre 2014.
- [5] Sorbonne Universités. Capacité calorifique molaire 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.

Première partie

Annexes

A Premier jet du flow-sheet simplifié

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

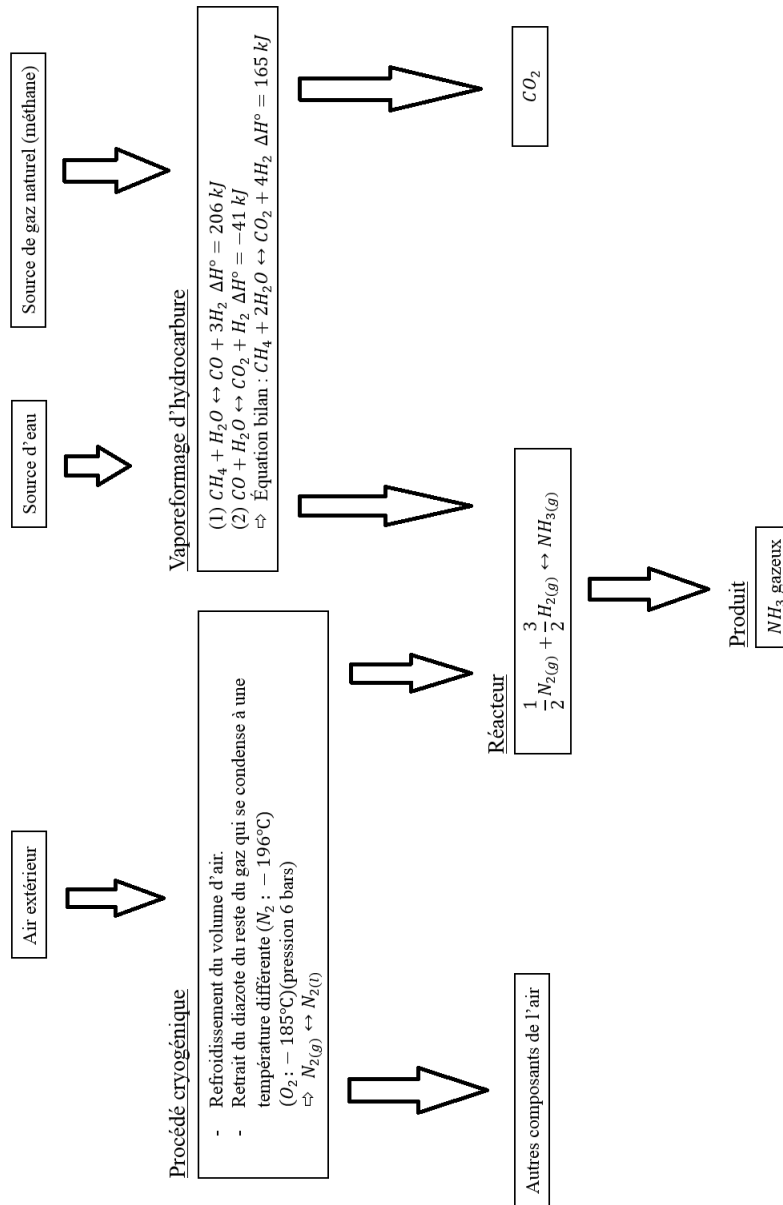


FIGURE 1 – Première ébauche de notre flow-sheet.

B Deuxième version du flow-sheet

La deuxième version de notre flow-sheet se trouve à la figure 2.

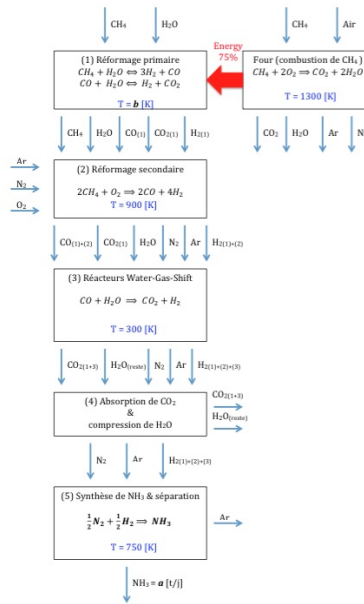


FIGURE 2 – Deuxième ébauche de notre flow-sheet.

C Code Matlab de l'outil de gestion

```
1 function [Output] = OutilDeGestionV2(a, T, print)
2 % OutilDeGestionV2 - Calcul les dbits de matieres chaque ape du
3 % processus de fabrication de l'ammoniac.
4 %
5 % Cette fonction MATLAB retourne, sous forme de tableau, tous les dbits de
6 % matiere (en moles/s), chaque ape, ncessaire la fabrication de a tonnes/jour
7 % d'ammoniac une temprature de T kelvin. Elle retourne alement le
8 % nombre de tubes ncessaires aux passage du mlange H2O et CH4 l'entre
9 % du reformage primaire. Cette fonction utilise deux fonctions auxiliaire,
10 % ComputeK1 et ComputeK2. Le troisieme argument print permet de choisir ce
11 % que retourne la fonction. Si print = true, la rponse retourne sera
12 % affiche sous forme de tablau. Si print = false, la rponse retourne
13 % sera un simple vecteur sans mise en forme. Ce dernier argument permet de
14 % manipuler plus facilement les donnees, pour l'ude paramtrique par
15 % exemple.
16 %
17 % OutilDeGestionV2(a, T, print)
18 %
19 % Dernire version : 19-11-2014
20 % Auteur : le groupe 1243
21
22 % On limite la precision a 4 decimales.
23 format short;
24
25 % Donnees thermodynamiques
26 Output1 = ComputeK1(T);
27 Output2 = ComputeK2(T);
28 DeltaH1 = Output1(1);
29 DeltaH2 = Output2(1);
30 K1 = Output1(2);
31 K2 = Output2(2);
32 ptot = 28e5;
33 p0 = 1e5;
34
35 % Equation d'equilibre du reformage primaire
36 syms x y n01 n02 real positive;
37 eqn1 = K1 == ((x-y)*((3*x + y)^3)*ptot^2)/((n01-x)*(n02-x-y)*(n01+n02+(2*x))^2*p0^2);
38 eqn2 = K2 == (y*(3*x + y))/((x-y)*(n02-x-y));
39 eqn3 = n01 - x == (0.42*a*10^6)/(26.52*86400);
40 eqn4 = 4*x + 3*(0.42*a*10^6)/(26.52*86400) == (3*a*10^6)/(34*86400);
41 eqns = [eqn1 eqn2 eqn3 eqn4];
42 [x, y, n01, n02] = solve(eqns, x, y, n01, n02);
43
44 % Reformeur primaire
45 CH4_in1 = double(n01);
46 H2O_in1 = double(n02);
47
48 % Nombre de tubes
49 R = 8.3144621;
50 Tubes = ceil(((CH4_in1 + H2O_in1)*R*T)/(2*31e5*7.854e-3));
51
52 % Reformeur secondaire
53 CH4_in3 = (0.42*a*10^6)/(26.52*86400);
54 H2O_in2 = double(n02-x-y);
55 CO_in1 = double(x-y);
56 CO2_in1 = double(y);
57 H2_in1 = double(3*x + y);
58 O2_in2 = (0.21*a*10^6)/(26.52*86400);
59 N2_in1 = 0.5*(a*10^6)/(17*86400);
60 Ar_in1 = (0.01*a*10^6)/(26.52*86400);
61
62 % Bilan d'energie pour le four : ne fonctionne pas encore. Je ne sais pas
63 % par quels coefficients je dois multiplier les DeltaH, il faut peut- re
64 % aussi vrifier le DeltaH du four. Voir aussi s'il n'y a pas une question
```

```

65 % de rendement.
66 syms nfour;
67 eqn5 = (CH4_in1-CH4_in3)*DeltaH1 + CO2_in1*DeltaH2 == nfour*805990;
68 nfour = solve(eqn5, nfour);
69
70 % Four
71 CH4_in2 = double(nfour);
72 O2_in1 = 2*double(nfour);
73
74 % Water-Gas-Shift
75 CO_in2 = (0.42*a*10^6)/(26.52*86400) + CO_in1;
76 CO2_in2 = double(y);
77 N2_in2 = 0.5 *(a*10^6)/(17*86400);
78 H2_in2 = H2_in1 + 0.84*(a*10^6)/(26.52*86400);
79 Ar_in2 = (0.01*a*10^6)/(26.52*86400);
80 H2O_in3 = H2O_in2;
81
82 % Separation
83 CO2_in_out = double(n01);
84 N2_in3 = 0.5 *(a*10^6)/(17*86400);
85 H2_in3 = 1.5 * (a*10^6)/(17*86400);
86 Ar_in3 = (0.01*a*10^6)/(26.52*86400);
87 H2O_in_out = H2O_in2 - CO_in2;
88
89 % Synthese d'ammoniac
90 N2_in4 = 0.5 *(a*10^6)/(17*86400);
91 H2_in4 = 1.5 * (a*10^6)/(17*86400);
92 Ar_in4 = (0.01*a*10^6)/(26.52*86400);
93 NH3_out = (a*10^6)/(17*86400);
94
95 % Un peu de mise en forme...
96 if print
97     Elements = {'-- TUBES'; '-- REFORMER PRIMAIRE'; 'CH4 (in)1'; 'H2O (in)1'; '-- FOUR'; 'CH4 (in)2'; 'O2 (in)2';
98         '-- REFORMER SECONDAIRE'; 'CH4 (in)3'; 'H2O (in)2'; 'CO (in)1'; 'CO2 (in)1'; 'H2 (in)1';
99         'O2 (in)2'; 'N2 (in)1'; 'Ar (in)1'; '-- WATER-GAS-SHIFT'; 'CO (in)2'; 'CO2 (in)2'; 'N2 (in)2';
100         'H2 (in)2'; 'Ar (in)2'; 'H2O (in)3'; '-- SEPARATION'; 'CO2 (in) = CO2 (out)'; 'N2 (in)3';
101         'H2 (in)3'; 'Ar (in)3'; 'H2O (in) = H2O (out)'; '-- AMMONIA SYNTHESIS'; 'N2 (in)4';
102         'H2 (in)4'; 'Ar (in) = Ar (out)'; 'NH3 (out)'};
103     MolesBySecond = {Tubes; '-----'; CH4_in1; H2O_in1; '-----'; CH4_in2; O2_in1;
104         '-----'; CH4_in3; H2O_in2; CO_in1; CO2_in1; H2_in1;
105         O2_in2; N2_in1; Ar_in1; '-----'; CO_in2; CO2_in2; N2_in2;
106         H2_in2; Ar_in2; H2O_in3; '-----'; CO2_in_out; N2_in3;
107         H2_in3; Ar_in3; H2O_in_out; '-----'; N2_in4;
108         H2_in4; Ar_in4; NH3_out};
109
110     Output = table(MolesBySecond, 'RowNames', Elements);
111 else
112     Output = [Tubes; CH4_in1; H2O_in1; CH4_in2; O2_in1;
113         CH4_in3; H2O_in2; CO_in1; CO2_in1; H2_in1;
114         O2_in2; N2_in1; Ar_in1; CO_in2; CO2_in2; N2_in2;
115         H2_in2; Ar_in2; H2O_in3; CO2_in_out; N2_in3;
116         H2_in3; Ar_in3; H2O_in_out; N2_in4;
117         H2_in4; Ar_in4; NH3_out];
118 end
119 end

```

```

1 function [Output] = ComputeK1(T)
2 % ComputeK1 - Calcul la constante d' uilibre de la premiere reaction du
3 % reformage primaire ainsi que le DeltaH1 de cette reaction.
4 %
5 % Cette fonction MATLAB calcule la constante d'equilibre K1
6 % de la premiere reaction du reformage primaire en fonction de la
7 % temprature T exprime en Kelvin ainsi que le DeltaH1 de cette reaction.
8 % CH4(g) + H2O(g) <-> CO(g) + 3H2(g)
9 % Les donnees thermodynamiques utilises proviennent du Atkins et de
10 % <http://www.edu.upmc.fr/chimie/lc101-202-301/communs/public/capcalo.htm> .

```



```

11 %
12 % ComputeK1(T)
13 %
14 % Dernire version : 16-11-2014
15 % Auteur : le groupe 1243
16
17 R = 8.3144621;
18 syms t;
19 % Capacite calorifique a pression constante en fonction de la temperature,
20 % en joules/mole*Kelvin
21 CpCO = @(t) 27.62 + (5.02e-3)*t;
22 CpH2 = @(t) 29.30 + (0.84e-3)*t + (2.09e-6)*t.^2;
23 CpCH4 = @(t) 14.23 + (75.3e-3)*t - (18e-6)*t.^2;
24 CpH2O = @(t) 30.13 + (10.46e-3)*t;
25 DeltaCp = @(t) (3*CpH2(t) + CpCO(t)) - (CpCH4(t) + CpH2O(t));
26
27 % Enthalpies de formation et de reaction standard (298.15K), en joules par moles.
28 HfstdCO = -110.53e3;
29 HfstdH2 = 0;
30 HfstdCH4 = -74.81e3;
31 HfstdH2O = -241.82e3;
32 Hrstd = (3*HfstdH2 + HfstdCO) - (HfstdCH4 + HfstdH2O);
33
34 DeltaH1 = Hrstd + integral(DeltaCp, 298.15, T);
35
36 % Entropie de formation et de reaction standard (298.15K), en
37 % joules/mole*Kelvin (298.15K)
38 SstdCO = 197.67;
39 SstdH2 = 130.68;
40 SstdCH4 = 186.26;
41 SstdH2O = 188.83;
42 Srstd = (3*SstdH2 + SstdCO) - (SstdCH4 + SstdH2O);
43
44 DeltaCpByt = @(t) (3*CpH2(t) + CpCO(t))./t - (CpCH4(t) + CpH2O(t))./t;
45 DeltaS1 = Srstd + integral(DeltaCpByt, 298.15, T);
46 DeltaG1 = DeltaH1 - T*DeltaS1;
47 K1 = exp(-DeltaG1/(R*T));
48
49 Output = [DeltaH1, K1];
50 end

```

```

1 function [Output] = ComputeK2(T)
2 % ComputeK2 - Calcul la constante d' uilibre de la deuxime raction du
3 % reformage primaire ainsi que le DeltaH2 de cette raction.
4 %
5 % Cette fonction MATLAB calcule la constante d'equilibre K2
6 % de la premiere reaction du reformage primaire en fonction de la
7 % temprature T exprime en Kelvin ainsi que le DeltaH2 de cette raction.
8 % CO(g) + H2O(g) <-> CO2(g) + H2(g)
9 % Les donnees thermodynamiques utilises proviennent du Atkins et de
10 % <http://www.edu.upmc.fr/chimie/lc101-202-301/communs/public/capcalo.htm> .
11 %
12 % ComputeK2(T)
13 %
14 % Dernire version : 16-11-2014
15 % Auteur : le groupe 1243
16
17 R = 8.3144621;
18 syms t;
19 % Capacite calorifique a pression constante en fonction de la temperature,
20 % en joules/mole*Kelvin
21 CpCO = @(t) 27.62 + (5.02e-3)*t;
22 CpH2 = @(t) 29.30 + (0.84e-3)*t + (2.09e-6)*t.^2;
23 CpCO2 = @(t) 32.22 + (22.18e-3)*t - (3.35e-6)*t.^2;
24 CpH2O = @(t) 30.13 + (10.46e-3)*t;
25 DeltaCp = @(t) (CpH2(t) + CpCO2(t)) - (CpCO(t) + CpH2O(t));

```

```

26
27 % Enthalpies de formation et de reaction standard (298.15K), en joules par moles.
28 HfstdCO = -110.53e3;
29 HfstdH2 = 0;
30 HfstdCO2 = -393.51e3;
31 HfstdH2O = -241.82e3;
32 Hrstd = (HfstdH2 + HfstdCO2) - (HfstdCO + HfstdH2O);
33
34 DeltaH2 = Hrstd + integral(DeltaCp, 298.15, T);
35
36 % Entropie de formation et de reaction standard (298.15K), en
37 % joules/mole*Kelvin (298.15K)
38 SstdCO = 197.67;
39 SstdH2 = 130.68;
40 SstdCO2 = 213.74;
41 SstdH2O = 188.83;
42 Srstd = (SstdH2 + SstdCO2) - (SstdCO + SstdH2O);
43
44 DeltaCpByt = @(t) (CpH2(t) + CpCO2(t))./t - (CpCO(t) + CpH2O(t))./t;
45 DeltaS2 = Srstd + integral(DeltaCpByt, 298.15, T);
46 DeltaG2 = DeltaH2 - T*DeltaS2;
47 K2 = exp(-DeltaG2/(R*T));
48
49 Output = [DeltaH2, K2];
50 end

```