

# 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

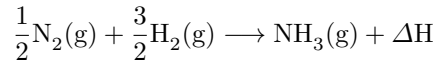
## Table des matières

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

## 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 :



En sachant que l'on cherche à produire 1000 t de  $\text{NH}_3$  par jour, on calcule assez facilement le flux de  $\text{N}_2$  (les détails de calculs ont été omis dans ce rapport)

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

et le flux de  $\text{H}_2$

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

## 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  $10^5 \text{ Pa}$ .

**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  $500^\circ\text{C}$  (c'est à dire  $773.15 \text{ K}$ ), 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].

$$\begin{cases} C_{p_{\text{NH}_3(\text{g})}} &= 37 \text{ J/molK} \\ C_{p_{\text{H}_2(\text{g})}} &= 28.836 \text{ J/molK} \\ C_{p_{\text{N}_2(\text{g})}} &= 29.124 \text{ J/molK} \end{cases}$$

On a donc :

$$\Delta H(773.15 \text{ K}) = \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^{773.15} C_{p_{\text{NH}_3(\text{g})}} dT - \frac{1}{2} \int_{298.15}^{773.15} C_{p_{\text{N}_2(\text{g})}} dT - \frac{3}{2} \int_{298.15}^{773.15} C_{p_{\text{H}_2(\text{g})}} dT = -5.5887 \cdot 10^4 \text{ J/mol}$$

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

$$q = \Delta H(773.15 \text{ K}) \cdot n_{\text{NH}_3} = -3.28786 \cdot 10^{12} \text{ J}$$

En connaissant la capacité calorifique de l'eau  $C_{H_2O(\text{g})} = 4185.5 \text{ J/kgK}$  [1] et en égalant  $q$  à  $m_{H_2O} \cdot C_{H_2O(\text{g})} \cdot \Delta T$  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'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

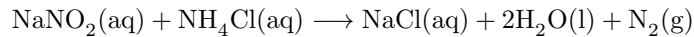
#### 3.1.1 Procédé cryogénique

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 m<sup>3</sup>/h) [3].

#### 3.1.3 Méthode de Ramsay

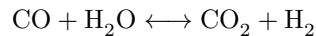
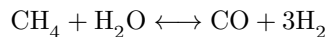


On chauffe le mélange de  $NaNO_2$  et  $NH_4Cl$  pour obtenir le  $N_2$  sous forme gazeuse. Un désavantage de cette méthode par rapport aux 2 premières est qu'il faut acheter les réactifs. De plus, il faut utiliser de l'énergie pour chauffer la réaction [6].

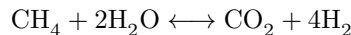
### 3.2 Sources de dihydrogène

#### 3.2.1 Vaporeformage de méthane

2 réactions sont utilisées pour ce procédé [4] :

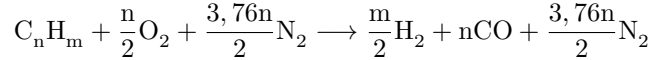


L'équation bilan obtenue est la suivante :



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].

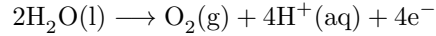
### 3.2.2 Oxydation partielle d'hydrocarbure



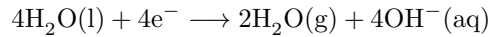
L'air est comburant pour cette réaction, qui a besoin d'être catalysée. Son caractère exothermique aide à la catalyse. L'inconvénient de cette méthode est son faible rendement [7].

### 3.2.3 Electrolyse

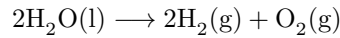
Réaction à l'anode :



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].

## 4 Premier jet du flow-sheet simplifié

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

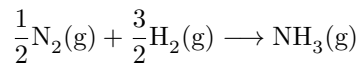
## 5 Deuxième version du flow-sheet

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 :



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

Et donc,

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

Ce qui donne

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

et

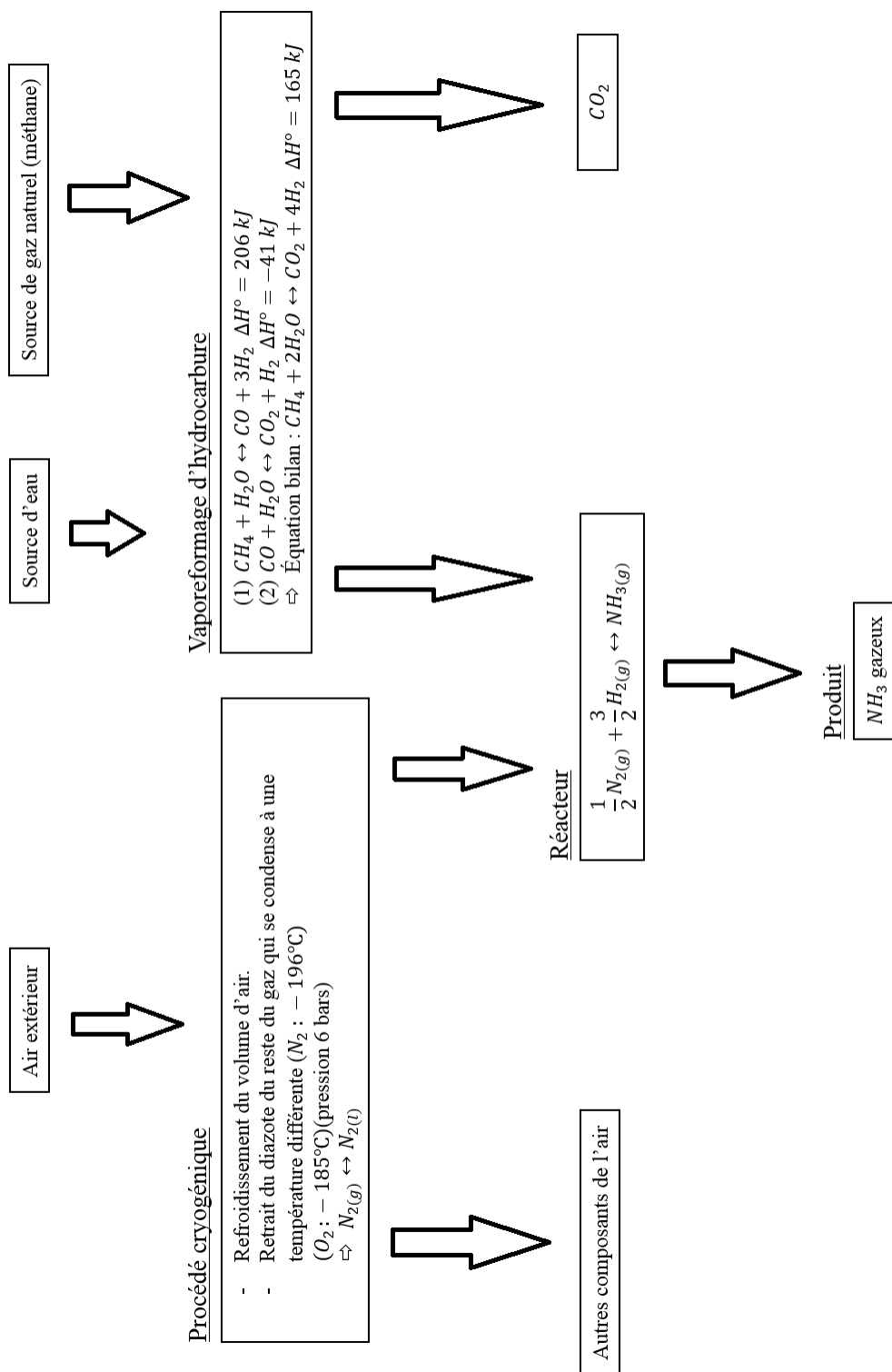


FIGURE 1 – Première ébauche de notre flow-sheet.

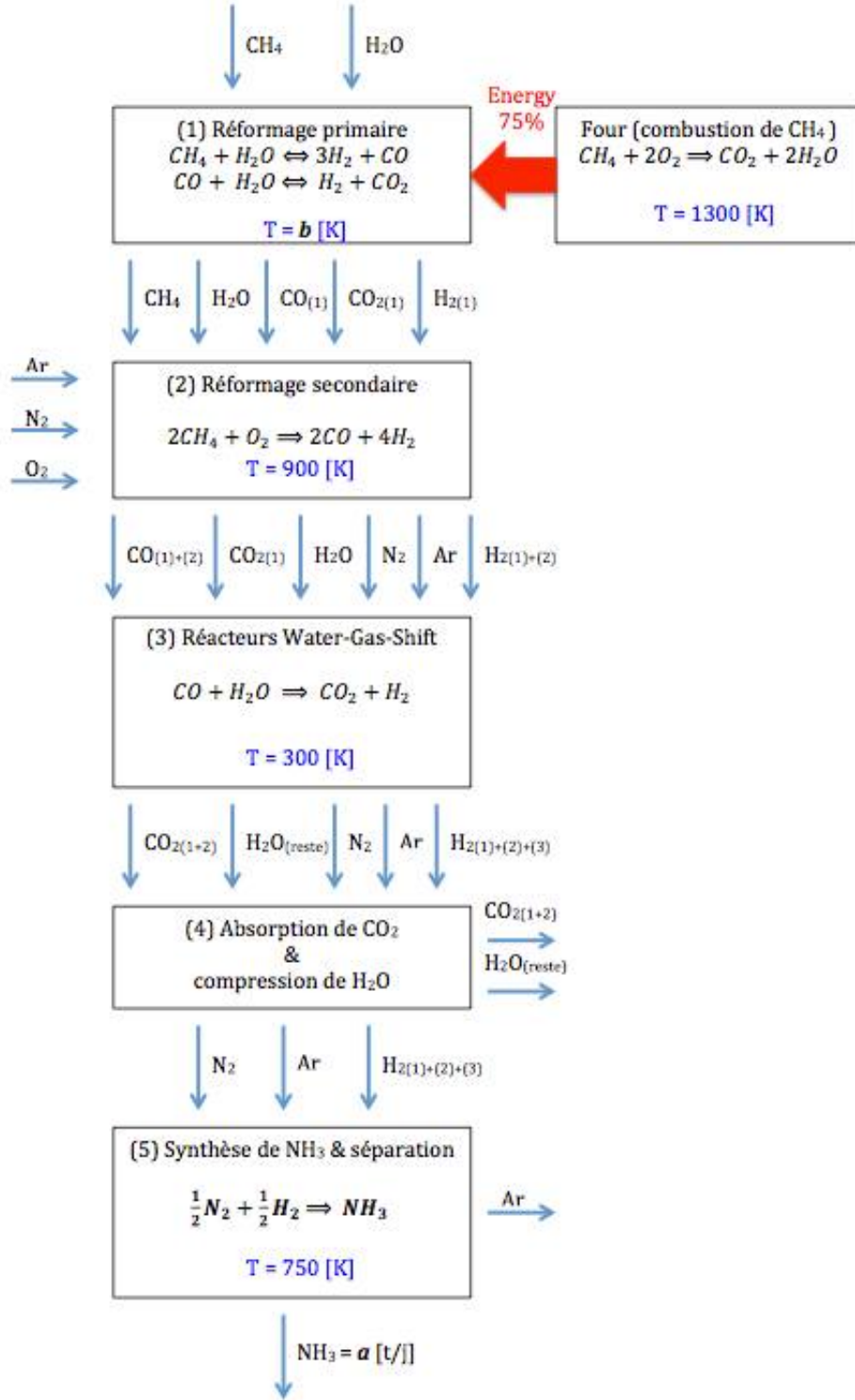


FIGURE 2 – Deuxième ébauche de notre flow-sheet.

$$n_{\text{H}_2} = \frac{3}{2} \cdot n_{\text{NH}_3}$$

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 :

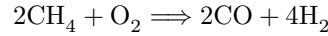
$$n_{air} = n_{N_2} \cdot \frac{100}{78} = \frac{25m_{NH_3}}{663} \text{ mol}$$

Et :

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

$$n_{Ar} = n_{air} \cdot \frac{1}{100} = \frac{1m_{NH_3}}{2652} \text{ mol}$$

On sait par la réaction du réformage primaire suivante et par l'hypothèse que le  $CH_4(g)$  et le  $O_2(g)$  sont présents en quantité stoechiométrique :



que :

$$n_{CH_4} = 2 \cdot n_{O_2} = \frac{7m_{NH_3}}{442} \text{ mol}$$

$$n_{CO} = n_{CH_4} = \frac{7m_{NH_3}}{442} \text{ mol}$$

$$n_{H_2} = 2 \cdot n_{CH_4} = \frac{7m_{NH_3}}{221} \text{ mol}$$

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



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,  $n_{H_2O}$  sera égal à  $n_{H_2O}$  du réformage primaire moins le  $n_{CO}$  du WGS.

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

On peut aussi conclure que :

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

$$NH_3 - n_{H_2-\text{réformage secondaire}} - n_{H_2-\text{WGS}}$$

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

$$n_{H_2O-\text{réformage primaire}} =$$

$$n_{CO-\text{réformage primaire}} =$$

$$n_{CO_2-\text{réformage primaire}} =$$

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

$$n_{CO-\text{WGS}} =$$

$$n_{CO_2-WGS} =$$

$$n_{H_2-WGS} =$$

$$n_{CO_2-final} =$$

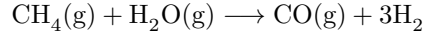
$$n_{H_2O-final} =$$

## 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



Connaissant les capacités calorifiques dépendantes de la température :

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

$$\Delta H_1(T) = \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T C_{pCO(g)} dT + 3 \int_{298.15}^T C_{pH_2(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pCH_4(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pH_2O(g)} dT$$

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

$$\Delta S_1(T) = \Delta S(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T C_{pCO(g)} dT + 3 \int_{298.15}^T C_{pH_2(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pCH_4(g)} dT + \int_T^{298.15} C_{pH_2O(g)} dT$$

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

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

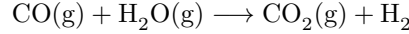
Nous obtenons donc

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

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



### 7.1.2 Deuxième équation



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

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

$$\Delta H_2(T) = \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T C_{p_{\text{CO}_2(g)}} dT + \int_{298.15}^T C_{p_{\text{H}_2(g)}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{\text{CO(g)}}} dT + \int_T^{298.15} C_{p_{\text{H}_2\text{O(g)}}} dT$$

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

$$\Delta S_2(T) = \Delta S(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^T C_{p_{\text{CO}_2(g)}} dTT + 3 \int_{298.15}^T C_{p_{\text{H}_2(g)}} dTT + \int_T^{298.15} C_{p_{\text{CO(g)}}} dTT + \int_T^{298.15} C_{p_{\text{H}_2\text{O(g)}}} dTT$$

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

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

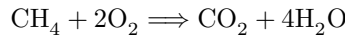
Nous obtenons donc

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

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

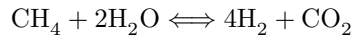
## 8 Bilan d'énergie

### Equation de combustion



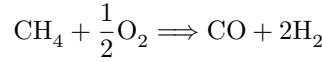
$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{reaction}} &= \Sigma \Delta H_{f,\text{produits}} - \Sigma \Delta H_{f,\text{reactifs}} \\ &= ((-393.51) + (2 \cdot (-241.82))) - ((-74.81) + 2 \cdot 0) \\ &= (-877.15) - (-74.81) \\ &= -802.34 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

### Reformage primaire



$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{reaction}} &= \Sigma \Delta H_{f,\text{produits}} - \Sigma \Delta H_{f,\text{reactifs}} \\ &= (4 \cdot 0 + (-393.51)) - (-74.81 + 2 \cdot (-241.82)) \\ &= (-393.51) - (-558.45) \\ &= 164.94 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

## 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'opère généralement à une température de 1173 K. Calculons les  $C_p$  des différents composants à cette température :

$C_{p_{\text{CH}_4}}$  (1173.15 K) :

$$14.23 + 75.3 \cdot 10^{-3}T + (-18 \cdot 10^{-6})T^2 = 14.23 + 75.3 \cdot 10^{-3} \cdot 1173.15 + (-18 \cdot 10^{-6}) \cdot (1173.15)^2 = 14.23 + 88.34 - 24.77 = 77.8 \text{ J/mol/K}$$

$C_{p_{\text{O}_2}}$  (1173.15 K) :

$$25.73 + 12.97 \cdot 10^{-3}T + (-3.77 \cdot 10^{-6})T^2 = 25.73 + 12.97 \cdot 10^{-3} \cdot 1173.15 + (-3.77 \cdot 10^{-6}) \cdot (1173.15)^2 = 25.73 + 15.22 - 5.19 = 35.76 \text{ J/mol/K}$$

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

$$27.62 + 5.02 \cdot 10^{-3}T + (0 \cdot 10^{-6})T^2 = 27.62 + 5.02 \cdot 10^{-3} \cdot 1173.15 = 27.62 + 5.89 = 33.5 \text{ J/mol/K}$$

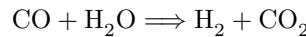
$C_{p_{\text{H}_2}}$  (1173.15 K) :

$$\begin{aligned}29.3 + (-0.84) \cdot 10^{-3}T + (2.09 \cdot 10^{-6})T^2 &= 29.3 - 0.84 \cdot 10^{-3} \cdot 1173.15 + (2.09 \cdot 10^{-6}) \cdot (1173.15)^2 = 29.3 - 0.98 + 2.88 \\ &= 31.19 \text{ J/mol/K}\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}\Delta H(1173.15 \text{ K}) &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{\text{reactifs}}} dT + \int_{298.15}^{1173.15} C_{p_{\text{produits}}} dT \\ &= \Delta H(298.15 \text{ K}) + \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{\text{CH}_4}} dT + \frac{1}{2} \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{\text{O}_2}} dT + \int_{298.15}^{1173.15} C_{p_{\text{CO}}} dT + 2 \int_{1173.15}^{298.15} C_{p_{\text{H}_2}} dT \\ &= -35.72 \text{ kJ/mol} + \int_{1173.15}^{298.15} (14.23 + 75.3 \cdot 10^{-3}T + (-18 \cdot 10^{-6})T^2) dT + \frac{1}{2} \int_{1173.15}^{298.15} (25.73 + 12.97 \cdot 10^{-3}T + (-3.77 \cdot 10^{-6})T^2) dT \\ &\quad + \int_{298.15}^{1173.15} (27.62 + 5.02 \cdot 10^{-3}T + (0 \cdot 10^{-6})T^2) dT + 2 \int_{298.15}^{1173.15} (29.3 + (-0.84) \cdot 10^{-3}T + (2.09 \cdot 10^{-6})T^2) dT \\ &= -35.72 \text{ kJ/mol} - \left[ 14.23T + \frac{75.3 \cdot 10^{-3}}{2}T^2 + \frac{(-18 \cdot 10^{-6})}{3}T^3 \right]_{1173.15}^{298.15} - \frac{1}{2} \left[ 25.73T + \frac{12.97 \cdot 10^{-3}}{2}T^2 + \frac{(-3.77 \cdot 10^{-6})}{3}T^3 \right]_{1173.15}^{298.15} \\ &\quad + \left[ 27.62T + \frac{5.02 \cdot 10^{-3}}{2}T^2 + \frac{(0 \cdot 10^{-6})}{3}T^3 \right]_{298.15}^{1173.15} + 2 \left[ 29.3T + \frac{(-0.84 \cdot 10^{-3})}{2}T^2 + \frac{(2.09 \cdot 10^{-6})}{3}T^3 \right]_{298.15}^{1173.15} \\ &= -35720 - (58823.4 - 7430.5) - \frac{1}{2}(37081 - 8214.57) + (35856.9 - 8458.03) + 2(34920.1 - 7986.16) \\ &= -35720 - 51392.9 - 14433.215 + 27398.87 + 53867.88 \\ &= -20279.365 \text{ J}\end{aligned}$$

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'opère généralement entre 200 et 400°. Nous considérerons alors une température de réaction de 300°, soit 573.15 K.

Calculons les  $C_p$  des différents composants à cette température :

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

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

$C_{p_{CO_2}}$  (573.15 K) :

$$32.22 + 22.18 * 10^{-3} * T + (-3.35 * 10^{-6}) * T^2 = 32.22 + 22.18 * 10^{-3} * 573.15 + (-3.35 * 10^{-6}) * (573.15)^2 = 32.22 + 12.71 - 1.1 = 43.83(J.mol^{-1}.K^{-1})$$

$C_{p_{H_2}}$  (573.15 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 :

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

## 9 Outil de gestion

## 10 Calcul du nombre de tuyaux

Maintenant, nous allons calculer le nombre de tubes dont nous aurons besoin pour notre réacteur multi-tubulaire. Nous avons ces données de base :  $m_{NH_3} = 1500 \text{ t/d}$ ,  $d_{tube} = 10^{-1} \text{ m}$  et  $c = 2 \text{ m/s}$  où  $m_{NH_3}$  est le débit massique par jour d'ammoniac,  $d_{tube}$  est le diamètre d'un tube et  $c$  est la vitesse superficielle à l'entrée du réacteur. Transformons d'abord le débit massique en débit volumique.

$$1500 \text{ t/d} = 1.736 \cdot 10^{-2} \text{ t/s} = 17.36 \cdot v \text{ m}^3/\text{s} = \dot{V}$$

avec  $v$  le volume massique (en  $\text{m}^3/\text{kg}$ ) du mélange que l'on introduit dans le réacteur. Nous pouvons déterminer  $v$  grâce à l'expression de la loi des gaz parfaits sous forme thermodynamique  $v = \frac{R^* T}{31 \cdot 10^5}$  où  $R^*$  vaut  $\frac{R}{16 \cdot x_{CH_4} + 18 \cdot x_{H_2O}}$  ( $x_{CH_4}$  et  $x_{H_2O}$  sont les fractions molaire du méthane et de l'eau entrant dans le système). Ensuite, à l'aide des notions de système ouvert et de l'hypothèse  $\dot{m}_{entre} = \dot{m}_{sortie}$ , nous obtenons que  $\dot{V} = c \cdot A$  avec  $\dot{V}$  le débit volumique et  $A$  la somme des sections de tous les tubes. En remplaçant par les valeurs que nous possédons, nous obtenons :

$$A = \frac{\dot{V}}{c} = \frac{1.736 \cdot 10 \cdot v}{2} = 8.68 \cdot v \text{ m}^2$$

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

$$\text{Nombre de tubes} = \frac{8.68 \cdot v}{7.854 \cdot 10^{-3}} = 1105.17 \cdot v$$

## 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\\_l\\_hydrogene](http://www.afhypac.org/fr/3_production_de_l_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.