

# Modélisation de Production d'Hydrogène par Reformage Catalytique du Méthane avec Captation de Dioxyde de Carbone

Léon Carmona, Ulysse Clotuche, Cyril Frébel\*

Année académique 2023-2024  
Le 4 Avril 2024



---

\*Projet réalisé dans le cadre du cours d'introduction aux méthodes d'analyse numérique proposé aux étudiants en première année de bachelier en ingénieur civil à l'ULiege

# Table des Matières

|          |   |          |
|----------|---|----------|
| <b>1</b> | <b>Remarques Générales</b>  | <b>2</b> |
| <b>2</b> | <b>Question 1: Recherche des Racines d'une Fonction</b>                 | <b>2</b> |
| 2.1      | Méthode de la bisection . . . . .                                       | 2        |
| 2.2      | Méthode de la secante . . . . .   | 2        |
| 2.3      | Méthode Utilisée . . . . .  | 2        |
| <b>3</b> | <b>Question 2: Méthodes de Résolution des Equations Différentielles</b> | <b>2</b> |
| 3.1      | Méthode d'Euler . . . . .   | 2        |
| 3.2      | Résolution par SolveIVP . . . . .                                       | 2        |
| 3.3      | Choix du Solveur . . . . .  | 2        |
| <b>4</b> | <b>Question 3: Variations des Facteurs du Réacteur</b>                  | <b>2</b> |
| 4.1      | Capture du Dioxyde de Carbone . . . . .                                 | 2        |
| 4.1.1    | Variations du méthane . . . . .   | 3        |
| 4.1.2    | Variations de l'hydrogène . . . . .                                     | 3        |
| 4.1.3    | Variations du monoxyde et du dioxyde de carbone . . . . .               | 3        |
| 4.1.4    | Variations de la température . . . . .                                  | 4        |
| 4.2      | Variation Vitesse Entrée des Solides . . . . .                          | 4        |
| 4.3      | Variation Vitesse Entrée des Gaz . . . . .                              | 5        |
| 4.4      | Variation de la Composition des Gaz en Entrée . . . . .                 | 6        |
| <b>5</b> | <b>Question 4: Optimisation de la Vitesse des Gaz</b>                   | <b>7</b> |
| 5.1      | Choix de la méthode de recherche de racines . . . . .                   | 7        |
| <b>6</b> | <b>Bibliographie</b>  | <b>7</b> |
| 6.1      | Documentation Modules . . . . .   | 7        |
| 6.1.1    | NumPy . . . . .   | 7        |
| 6.1.2    | SciPy . . . . .   | 7        |
| 6.2      | Livres . . . . .  | 7        |
| 6.2.1    | syllabus méthode numérique . . . . .                                    | 7        |

# 1 Remarques Générales

p\_e pour calculer pression des gaz à l'entrée, calculé avec quelle formule? dans les concentrations initiales pour avoir utilisé c à 10 exposant -3 sans contexte si demandée nulle

## 2 Question 1: Recherche des Racines d'une Fonction

### 2.1 Méthode de la bisection

Comme mentionné au cours théorique, la méthode ne converge pas si les deux points  $a$  et  $b$  de l'intervalle  $[a : b]$  donnés pour trouver les racines de la fonction.

a bisection pour sa robustesse. En effet, cette méthode converge toujours pour autant que les points de départ soient correctement choisis. L'image du premier point doit être négative et la seconde positive ou inversement selon que la fonction est croissante ou décroissante au niveau de la racine

comme souligné au cours, des erreurs de convergence apparaissent avec des pentes trop élevées nombre max d'itérations même signe

### 2.2 Méthode de la sécante

nombre max d'itérations

### 2.3 Méthode Utilisée

sécante: pas besoin d'avoir deux de signes différents, si en fait, donner exemple  $x^4 - 1$ , ordre de convergence plus rapide, Notre choix s'est porté vers la méthode de la sécante pour sa vitesse de convergence plus élevée.

◇ Justifications

## 3 Question 2: Méthodes de Résolution des Equations Differentielles

### 3.1 Méthode d'Euler

### 3.2 Résolution par SolveIVP

choix rtol ou atol, permettre d'atteindre la précision demandée

### 3.3 Choix du Solveur

Dans la suite de notre rapport, la seule méthode utilisée pour déterminer les valeurs cherchées sera celle offerte par SolveIVP, ce choix a été effectué selon les points suivants concernant la convergence vers une solution:

- ◇ Vitesse: la vitesse de convergence est nettement plus rapide lors de l'utilisation de la solution offerte par [Scipy](#), notre supposition est que la méthode d'Euler ayant été développée uniquement en Python est plus lente que les fonction SolveIVP développée en C (langage compilé et pas interprété, ce qui représente en gain de temps considérable dépendamment de la tâche à effectuer, dans notre cas c'est représentatif) voir cours théorique car je suppose que l'ordre de convergence est juste le même
- ◇ Exactitude: les deux méthodes convergent vers des solutions "identiques", le choix d'une méthode ou de l'autre ne porte donc pas sur ce critère

## 4 Question 3: Variations des Facteurs du Réacteur

### 4.1 Capture du Dioxyde de Carbone

Afin d'activer ou non la capture du dioxyde de carbone, un paramètre supplémentaire a été rajouté à la fonction, celui-ci disposant d'une valeur booléenne par défaut paramétrée à *True* de sorte à ce que la récupération du carbone soit activée par défaut.

Du point de vue des résultats pratiques de l'expérimentation, la différence est plutôt mineure de sorte que nous avons longuement douté de la suffisance des changements causés par la capture ou non du  $CO_2$ . Voici donc une analyse détaillée des résultats obtenus au point précédent.

Il est important de noter que la captation du carbone est activée pour toutes les autres mesures hormis celle destinée à voir l'impact de ce paramètre, il ne sera donc à l'avenir plus précisé si oui ou non le  $CO_2$  en excès sera capté ou non.

#### 4.1.1 Variations du méthane

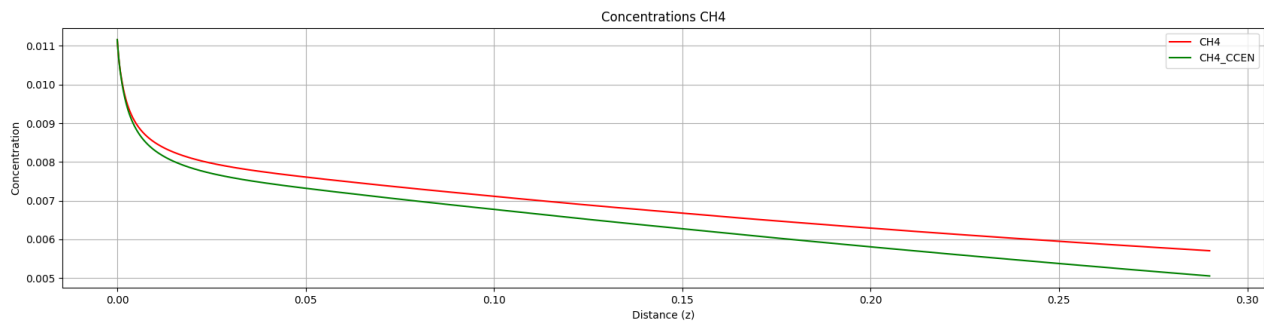
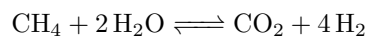


Figure 1: Evolution de la concentration en  $CH_4$  avec l'avancement dans le réacteur

Dans le graphique ci-dessous, on trouve l'avancement de la concentration en méthane avec le temps, justifier le fait que la performance soit meilleure avec la captation du carbone ( $CCEN$  pour Carbon Capture ENabled) est plus efficace paraît décent, au vu de la formule suivante:



Où le fait de retirer du  $CO_2$  tend à faire basculer l'équilibre vers une production de cette même substance pour retourner à l'équilibre, d'où une concentration en  $CH_4$  inférieure avec captation de dioxyde de carbone.

#### 4.1.2 Variations de l'hydrogène

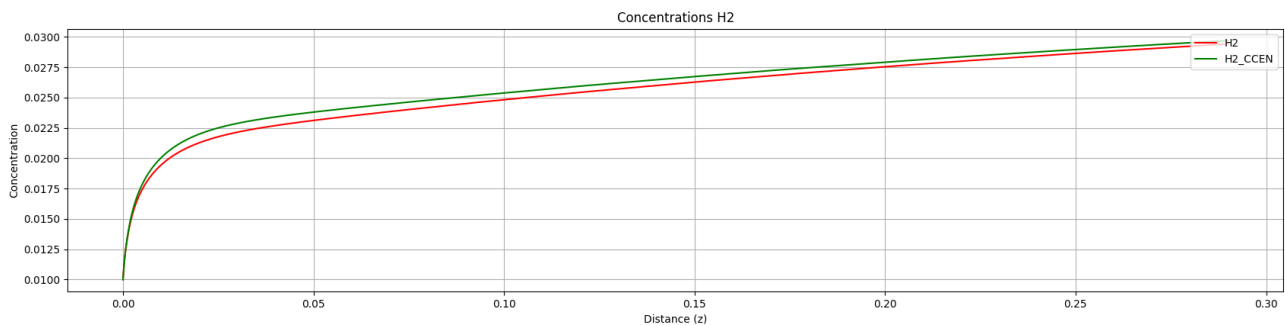


Figure 2: Evolution de la concentration en  $H_2$  avec l'avancement dans le réacteur

#### 4.1.3 Variations du monoxyde et du dioxyde de carbone

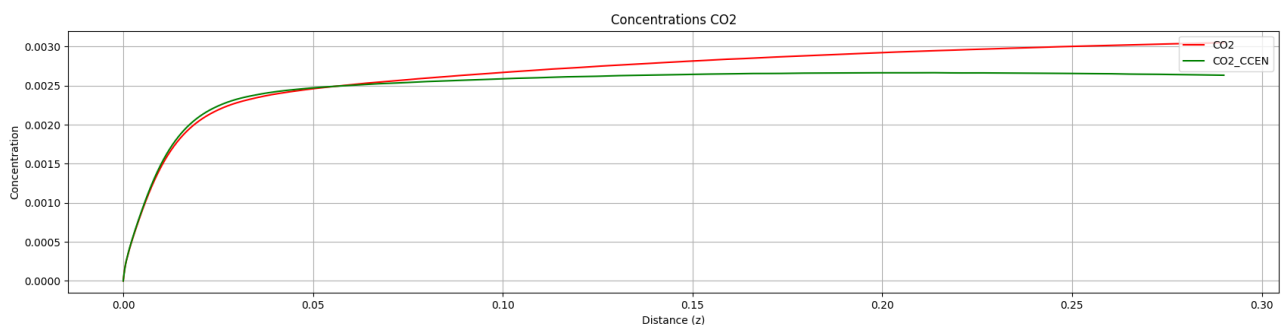


Figure 3: Evolution de la concentration en  $CO_2$  avec l'avancement dans le réacteur

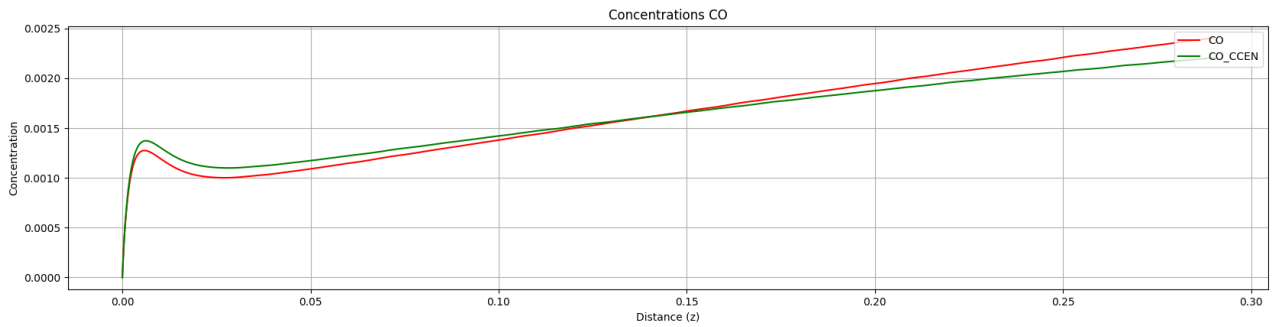


Figure 4: Evolution de la concentration en CO avec l'avancement dans le réacteur

De toute évidence les résultats parlent d'eux même, le dioxyde de carbone est capturé, ainsi la concentration avec capture est inférieure à celle sans capture, ce qui correspond aux résultats attendus puisque si le gaz est capturé, sa concentration va diminuer, ce qui est trivial.

#### 4.1.4 Variations de la température

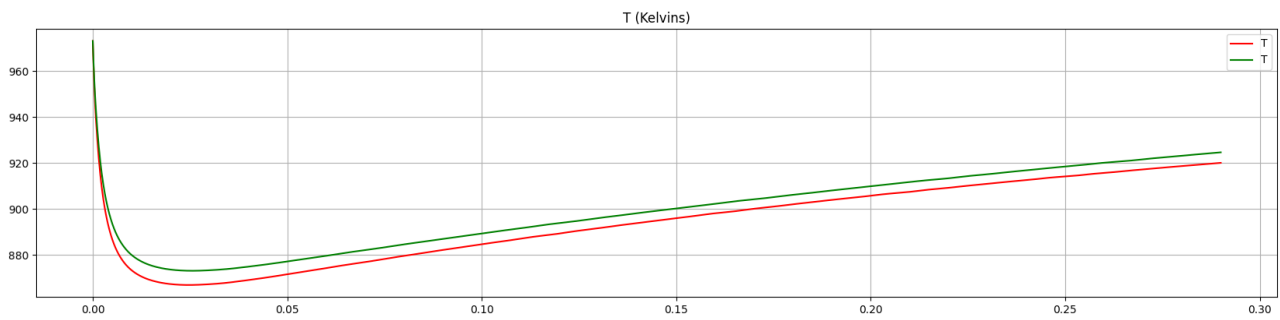


Figure 5: Evolution de la température T (Kelvins) avec l'avancement dans le réacteur

Du point de vue de la température c'est un peu plus compliqué à expliquer, comme le détaille la formule du calcul de la dérivée de la température, celle-ci dépend du changement de nombreuses variables qu'il serait trop compliqué de détailler ici, les résultats semblent plausibles car ils convergent tous les deux à la même vitesse vers le même voisinage, il ne nous est malheureusement pas possible de détailler plus loin notre raisonnement.

## 4.2 Variation Vitesse Entrée des Solides

Le premier choix critique qui a été décidé dans le but d'avoir des résultats plus intéressants a été de faire varier les résultats de manière "non-dichotomique" c'est à dire pas en établissant une comparaison entre deux valeurs de  $u_s$  mais bien d'établir une liste de valeurs à évaluer, en prenant ensuite les valeurs de sortie de différents gaz, il est possible de voir graphiquement une évolution de la constitution en sortie en fonction de la valeur prise par  $u_s$ . Cependant la comparaison de deux valeurs données de  $u_s$  ayant déjà été implémentée, l'utilisation de cette méthode de comparaison reste disponible pour l'utilisateur du programme.

Comme dit précédemment nous avons d'abord abordé le problème avec une approche dichotomique, c'est à dire en comparant les valeurs deux à deux. C'est en procédant à une telle approche que nous nous sommes rendu compte qu'il était difficile de déterminer quelles valeurs choisir pour établir les comparaisons. Un résultat notable est celui d'un cas frontière de tolérance du programme avec  $u_s = 10^{-3}$  où le programme retourne après quelques itérations qu'il lui est impossible d'effectuer plus de calcul étant donné que le programme a déjà dépassé le epsilon machine.

De plus, la complexité au développement a porté ses fruits pour la partie 4 de notre recherche qui a essentiellement constitué en l'optimisation de la valeur de  $u_s$  pour obtenir un taux de  $CO_2$  donné.

meshgrid pour pas juste avoir la dernière valeur?

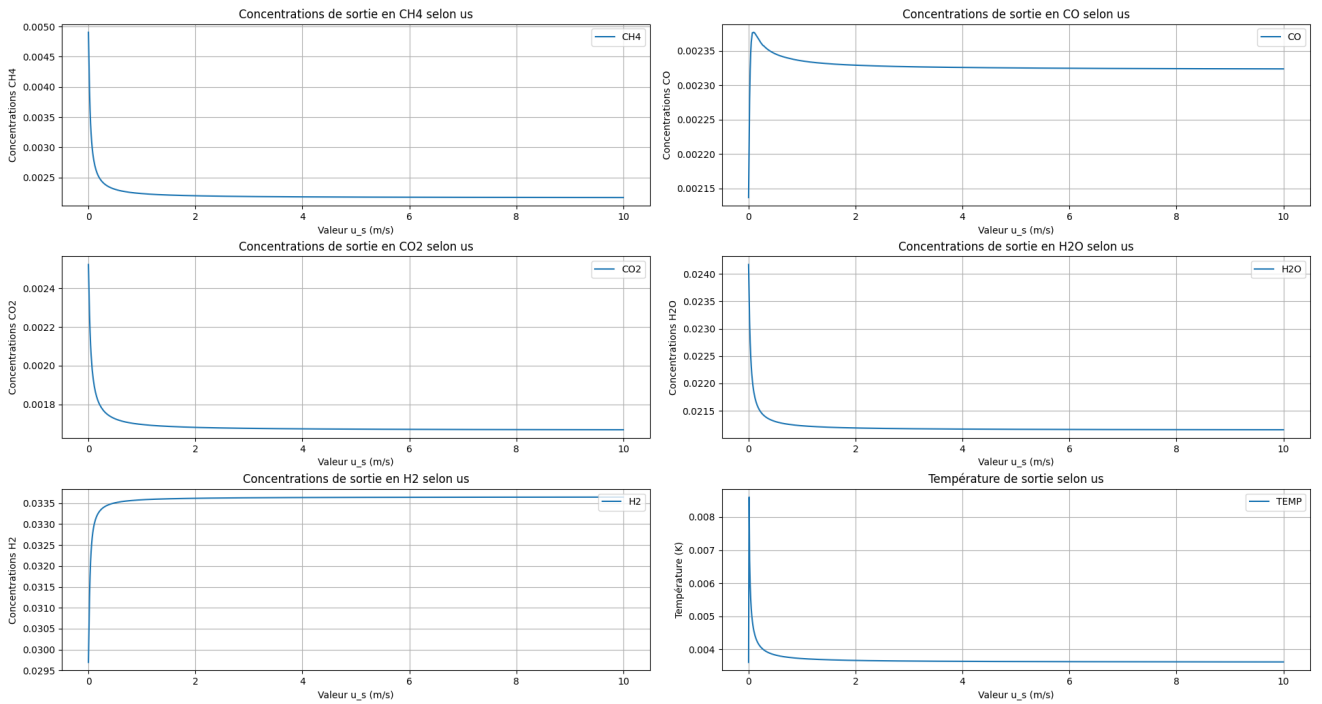


Figure 6: Evolution des concentrations du réacteur selon la vitesse de traversée du CaO

Au vu de la manière dont a été implémentée notre fonction, il était possible de choisir un intervalle initial et un final ainsi que le nombre de points à estimer, celui-ci ayant été fixé à 1000, la vitesse initiale a été fixée au minimum possible avant d'obtenir une erreur 0.001 a ainsi été utilisé, la valeur finale est 10 m/s car rien ne se passe après (ayant essayer de monter jusqu'à 100 m/s) et après 100 mètres par secondes les mesures ne sont plus réalistes. Pour revenir sur la borne minimale de la vitesse 0.001 m/s nous a semblé suffisant à savoir que cela représente 1 mm/s de précision, ce qui est plutôt précis en supposant que le modèle théorique est fort optimiste par rapport au modèle pratique qui lui n'aura certainement pas une telle précision.

### 4.3 Variation Vitesse Entrée des Gaz

Nous avons ainsi procédé de la même manière qu'au point précédent pour évaluer les variations en sortie impliquées par les variations de  $u_g$  en récupérant uniquement les concentrations en sortie. De même qu'au point précédent notre première approche était d'établir une approche "dichotomique" qui n'a finalement pas porté ses fruits pour ainsi laisser place à une approche d'essai de nombreuses valeurs et de ne porter notre attention que sur les valeurs en sortie, qui sont finalement celles attendues dans une application industrielle.

De nouveau nous avons fait varier la valeur de la vitesse des gaz mais cette fois entre 1 et 10 m/s avec un maximum de flexibilité de 50 points pour établir la fonction autrement un erreur est retournée.

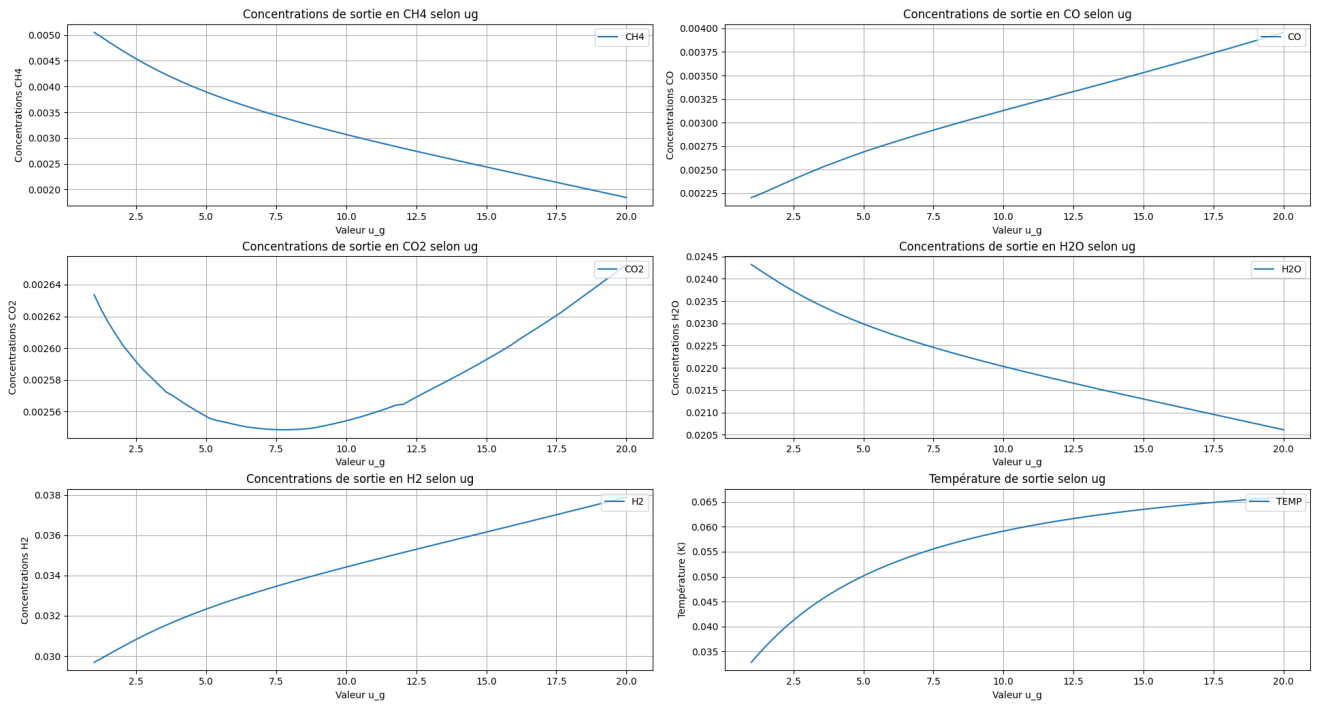


Figure 7: Evolution des concentrations du réacteur selon la vitesse de traversée des gaz

#### 4.4 Variation de la Composition des Gaz en Entrée

Avant d'entrer en détail dans la manière dont nous avons procédé pour faire varier la composition des gaz à l'entrée du réacteur, il est nécessaire de préciser que la somme des pressions partielles des gaz injectés est restée constante au fur et à mesure des variations du ratio, soit  $P_{CH_4} + P_{H_2O} = \frac{1}{22.4}$ , ce choix ayant été effectué suite au fait que la concentration initiale respecte le ratio 3/4 1/4, la somme de ces deux coefficients donnant bien 1, nous avons décidé de faire alors varier  $x$  et  $y$ , les coefficients de  $CH_4$  et  $H_2O$ , où  $y = 1 - x$  de sorte à ce que la somme de  $x$  et  $y$  donne toujours 1.

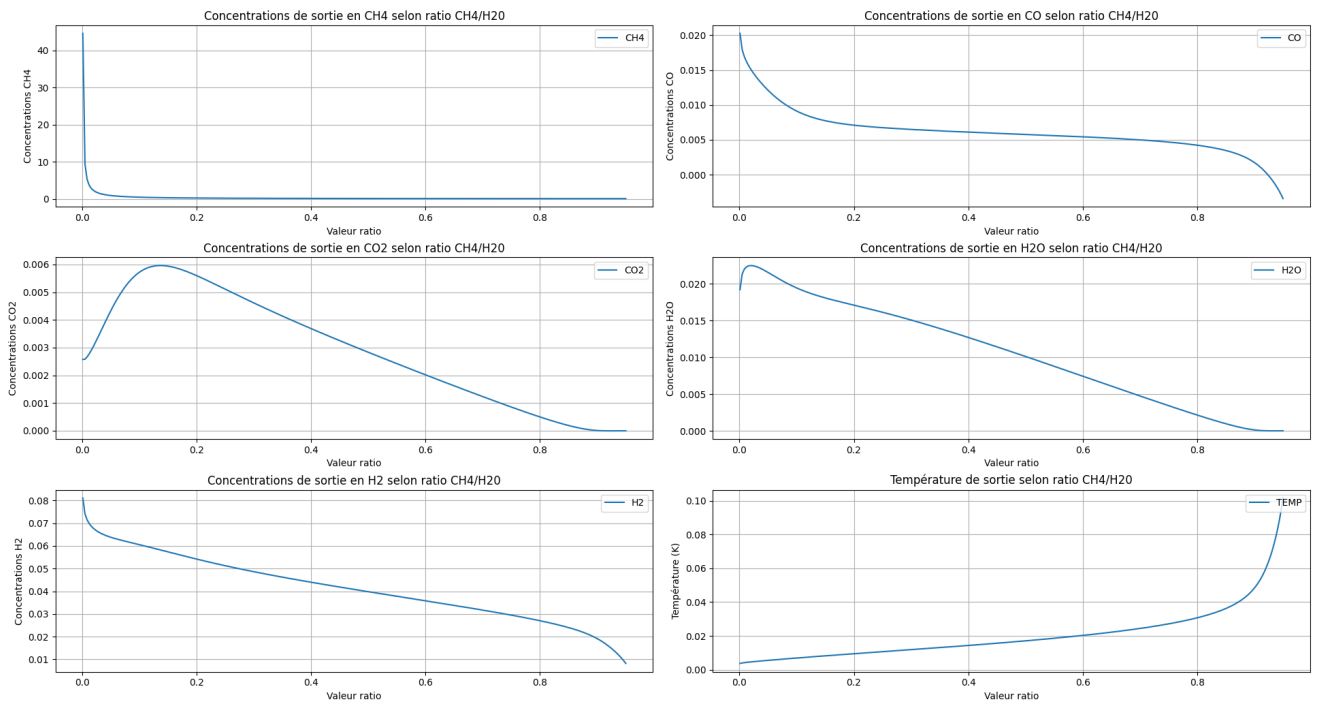


Figure 8: Evolution des concentrations du réacteur selon le ratio  $CH_4/H_2O$

## 5 Question 4: Optimisation de la Vitesse des Gaz

### 5.1 Choix de la méthode de recherche de racines

L'utilisation de la méthode de la sécante

## 6 Bibliographie

### 6.1 Documentation Modules

#### 6.1.1 NumPy

#### 6.1.2 SciPy

voir lesquels noter parmi ceux utilisés

### 6.2 Livres

#### 6.2.1 syllabus méthode numérique