Thématique 2 : Gestion de la production

Groupe 11.64

23/09/2015Dernière mise à jour: 23 septembre 2015

1 Synthèse de l'ammoniac

$$3\mathrm{H}_2 + \mathrm{N}_2 \longrightarrow 2\mathrm{NH}_3$$

$3\mathrm{H}_2$	$m = 250 \times 10^9 \mathrm{g}$	N_2	$m = 1167 \times 10^9 \mathrm{g}$	$2\mathrm{NH}_3$	$m = 1417 \times 10^9 \mathrm{g}$
	$n=125\times 10^6\mathrm{mol}$		$n=41.7\times 10^6\mathrm{mol}$		$n=83.3\times 10^6\mathrm{mol}$
	$M=2.0\mathrm{gmol^{-1}}$		$M=28\mathrm{gmol^{-1}}$		$M=17\mathrm{gmol^{-1}}$

2 Aspect thermique

Données

— Température réacteur : 500 °C

— Débit eau : $630 \,\mathrm{m}^3/\mathrm{h}$

— Température eau (amont réacteur) : 20 °C

Calculs Nous utilisons les données de la table II du document "La thermodynamique technique". Cette table nous fourni les chaleurs molaires moyennes à pression constante $|\mu c_p|_0^t$ des principaux gaz en kJ kmol⁻¹ K. La chaleur molaire moyenne dans l'intervalle 0 à t°C y est définie par la relation :

$$|\mu c_p|_0^t = \frac{1}{t} \int_0^t \mu c_p dt$$

Pour chaque molécule de la réaction nous calculons la chaleur molaire de $25\,^{\circ}\text{C}$ à $500\,^{\circ}\text{C}$ à l'aide de la formule :

$$\int_{25}^{500} c_{p,m} = (500 \cdot |\mu c_p|_0^{500}) - (25 \cdot |\mu c_p|_0^{25})$$

Nous obtenons donc:

$$\begin{array}{ll} \int_{25}^{500} c_{p,m,\mathrm{NH_3}} &= (500 \cdot 42.42) - (25 \cdot 35.26) &= 20\,238.5\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \\ \\ \int_{25}^{500} c_{p,m,\mathrm{H_2}} &= (500 \cdot 29.25) - (25 \cdot 28.62) &= 13\,909.5\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \\ \\ \int_{25}^{500} c_{p,m,\mathrm{N_2}} &= (500 \cdot 29.86) - (25 \cdot 29.12) &= 14\,202.25\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \end{array}$$

À ces résultats nous ajoutons les données de la table VII du document cité plus haut. Cette table nous fourni les chaleurs de réaction dans les conditions standard de quelques transformations chimiques importantes :

$$C_{p,298}^0 = -\Delta \mu H_{298}^0$$

Pour chaque molécule nous calculons sa variation d'enthalpie à 500 °C à l'aide de la formule :

$$n \cdot \Delta H(500) = n \cdot \left(-C_{p,298}^0 + \int_{25}^{500} c_{p,m} \right)$$

Nous obtenons donc :

$$\begin{split} 2 \cdot \Delta H_{\mathrm{NH_3}}(500) &= 2 \cdot (-46200 + 20238.5) &= -57\,923\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \\ 3 \cdot \Delta H_{\mathrm{H_2}}(500) &= 3 \cdot (0 + 13909.5) &= 41\,728.5\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \\ \Delta H_{\mathrm{N_2}}(500) &= (0 + 14202.25) &= 14\,202.25\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \end{split}$$

Nous pouvons ensuite calculer la variation d'enthalpie totale de la réaction :

$$\begin{split} \Delta H &= 2\Delta H_{\rm NH_3} - 3\Delta H_{\rm H_2} - \Delta H_{\rm N_2} = -108\,{\rm kJ\,mol^{-1}~pour~2NH_3} \\ &= -54\,{\rm kJ\,mol^{-1}~pour~NH_3} \end{split}$$

3 Réactions ATR I et WGS

ATR I:

$$2O_2 + 2CH_4 + H_2O \longrightarrow CH_4 + 3H_2O + CO_2$$

WGS:

$$2H_2O + CO_2 + CO + H_2 \longrightarrow H_2O + 2CO_2 + 2H_2$$

4 Bilan des données

- O Quelle quantité de O_2 et N_2 nécessaire?
- 1a Quelle quantité d'énergie libérée lors de la combustion?
- 1a Quelle quantité de ${\rm CH_4}$ et ${\rm H_2O}$ (Pourquoi rentrée d' ${\rm H_2O}$ dans zone de combustion?)
- 1
b Zone de reformage \rightarrow 2 réactions incomplètes
 - $\circ K_c$ des 2 réactions
 - o Energie libérée ou absorbée par chaque réaction
- 2 Energie absorbée ou libérée par la réaction
- 3 Technique d'élimination du CO_2/H_2O + énergie
- 4 Voir séance 1 Température dans chaque bloc