

# Thématique 2 : Gestion de la production

Groupe 12.64

12 octobre 2015

## Première partie

## Bilan de matière

Dans cette partie nous calculerons pour toutes les étapes du procédé les bilans de matière. À base de ceux-ci nous déterminerons les débits de production d'ammoniac, d'alimentation d'air, ainsi que tous les débits intermédiaires entre les unités opérationnelles. Nous étudierons aussi un cas de production d'ammoniac avec des paramètres donnés.

Nos paramètres ainsi que leurs valeurs pour le cas précis sont les suivants :

Paramètre	Valeur	Unité	Description
$\dot{m}_{\text{CH}_4}$	800	t/j	Débit massique d'alimentation de $\text{CH}_4$
$\text{O}_2/\text{CH}_4$	0.6	-	Rapport $\text{O}_2/\text{CH}_4$ à l'entrée de l'ATR
$\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4$	1.5	-	Rapport $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4$ à l'entrée de l'ATR
$T_{\text{ATR}}$	1200	K	Température de la zone reforming de l'ATR
$p_{\text{ATR}}$	50	bar	Pression d'opération de l'ATR

TABLE 1 – Paramètres influant le fonctionnement du procédé

Pour faciliter nos calculs nous considérons le symbole  $\dot{n}$  comme étant le nombre de Mmol ( $1 \times 10^6$  mol) produit par jour. Les débits molaire que nous utilisons dans nos calculs dépendent de la zone dans laquelle ils sont calculés. Par exemple le  $\dot{n}_{\text{CH}_4}$  de la zone de combustion n'est pas le même que celui de la zone de reformage.

## 1 Zone de combustion

Nous commençons par la zone de combustion où se produit la réaction chimique suivante :



On considère la réaction comme étant complète avec un excès de  $\text{CH}_4$ .

	$\text{CH}_4$	+	$2\text{O}_2$	$\longrightarrow$	$\text{CO}_2$	+	$2\text{H}_2\text{O}$
$\dot{n}_i$ [Mmol/j]	$\dot{n}_{\text{CH}_4}$		$\dot{n}_{\text{CO}_2}$		0		0
$\dot{n}_f$ [Mmol/j]	$\dot{n}_{\text{CH}_4} - \dot{n}_{\text{CO}_2}$		0		$\dot{n}_{\text{CO}_2}$		$2\dot{n}_{\text{CO}_2}$

## 2 Zone de reformage

Deux équilibres chimiques ont lieu simultanément dans la zone de reformage. Notamment :





	CH <sub>4</sub>	+	H <sub>2</sub> O	$\rightleftharpoons$	3H <sub>2</sub>	+	CO
$\dot{n}_0$	$\dot{n}_{\text{CH}_4}$		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}$		0		0
$\dot{n}_f$	$\dot{n}_{\text{CH}_4} - \xi$		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \xi - \beta$		$3\xi + \beta$		$\xi - \beta$

TABLE 2 – Avancement du premier équilibre chimique

	CO	+	H <sub>2</sub> O	$\rightleftharpoons$	H <sub>2</sub>	+	CO <sub>2</sub>
$\dot{n}_0$	0		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}$		0		$\dot{n}_{\text{CO}_2}$
$\dot{n}_f$	$\xi - \beta$		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \xi - \beta$		$3\xi + \beta$		$\dot{n}_{\text{CO}_2} + \beta$

TABLE 3 – Avancement du deuxième équilibre chimique

On calcule ensuite pour chaque équilibre la constante d'équilibre :

$$K_1 = \frac{(\xi - \beta)(3\xi + \beta)^3}{(\dot{n}_{\text{CH}_4} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} + 2\xi - \beta)^2} \cdot \frac{p_t^2}{p_0^2} \cdot \frac{1}{(\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \xi - \beta)(\dot{n}_{\text{CH}_4} - \beta)} \quad (4)$$

$$K_2 = \frac{(\dot{n}_{\text{CO}_2} + \beta)(3\xi + \beta)}{(\xi - \beta)(\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \xi - \beta)} \quad (5)$$

Au final, nous obtenons à la sortie de la zone de reformage les débits suivants :

$$\begin{aligned} \dot{n}'_{\text{CH}_4} &= \dot{n}_{\text{CH}_4} - \xi \\ \dot{n}'_{\text{H}_2\text{O}} &= \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \xi - \beta \\ \dot{n}'_{\text{CO}_2} &= \dot{n}_{\text{CO}_2} + \beta \\ \dot{n}'_{\text{CO}} &= \xi - \beta \\ \dot{n}'_{\text{H}_2} &= 3\xi + \beta \end{aligned}$$

### 3 Water Gas Shift (WGS)

La réaction complète suivante à lieu dans le water gas shift :



	CO	+	H <sub>2</sub> O	$\longrightarrow$	CO <sub>2</sub>	+	H <sub>2</sub>
$\dot{n}_i$	$\dot{n}_{\text{CO}}$		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}$		$\dot{n}_{\text{CO}_2}$		$\dot{n}_{\text{H}_2}$
$\dot{n}_f$	0		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \dot{n}_{\text{CO}}$		$\dot{n}_{\text{CO}_2} - \dot{n}_{\text{CO}}$		$\dot{n}_{\text{H}_2} - \dot{n}_{\text{CO}}$

On considère la réaction comme étant complète avec un excès d'H<sub>2</sub>O

### 4 Condensation et absorption

Durant cette étapes aucune réaction chimique n'a lieu. Cette étape permet de retirer tout l'H<sub>2</sub>O et le CO<sub>2</sub> pour la suite du procédé. On considère que cette étape s'effectue complètement et qu'il ne reste plus aucune trace d'H<sub>2</sub>O ou de CO<sub>2</sub>.

### 5 Synthèse de l'ammoniac

La réaction complète suivante a lieu durant la dernière étape du procédé :



	$3\text{H}_2$	+	$\text{N}_2$	$\longrightarrow$	$2\text{NH}_3$
$\dot{n}_i$	$\dot{n}_{\text{H}_2}$		$\dot{n}_{\text{N}_2}$		0
$\dot{n}_f$	$\dot{n}_{\text{H}_2} - 3\dot{n}_{\text{N}_2}$		0		$2\dot{n}_{\text{N}_2}$