

Thématique 2 : Gestion de la production

Groupe 12.64

7 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}_{CH_4}	800	t/j	Débit massique d'alimentation de CH_4
O_2/CH_4	0.6	-	Rapport O_2/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_{ATR}	1200	K	Température de la zone reforming de l'ATR
p_{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 (1×10^6 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}_{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 CH_4 .

	CH_4	+	2O_2	\longrightarrow	CO_2	+	$2\text{H}_2\text{O}$
\dot{n}_i [Mmol/j]	\dot{n}_{CH_4}		\dot{n}_{CO_2}		0		0
\dot{n}_f [Mmol/j]	$\dot{n}_{\text{CH}_4} - \dot{n}_{\text{CO}_2}$		0		\dot{n}_{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_4	+	H_2O	\rightleftharpoons	3H_2	+	CO
\dot{n}_0	\dot{n}_{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_2O	\rightleftharpoons	H_2	+	CO_2
\dot{n}_0	0		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}$		0		\dot{n}_{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 :

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

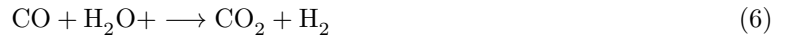
$$K_2 = \frac{(\dot{n}_{\text{CO}_2} + \beta)(3\xi + \beta)}{(\xi - \beta)(\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \xi - \beta)} \quad (5)$$

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 water gas shift :



	CO	+	H_2O	\longrightarrow	CO_2	+	H_2
\dot{n}_i	\dot{n}_{CO}		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}$		\dot{n}_{CO_2}		\dot{n}_{H_2}
\dot{n}_f	0		$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} - \dot{n}_{\text{CO}}$		$\dot{n}_{\text{CO}_2} - \dot{n}_{\text{CO}}$		$\dot{n}_{\text{H}_2} - \dot{n}_{\text{CO}}$