

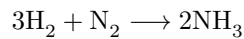
Thématique 2 : Gestion de la production

Groupe 11.64

Séance 1 : 23/09/2015

Dernière mise à jour: 30 septembre 2015

1 Synthèse de l'ammoniac



3H_2	$m = 250 \times 10^9 \text{ g}$	N_2	$m = 1167 \times 10^9 \text{ g}$	2NH_3	$m = 1417 \times 10^9 \text{ g}$
	$n = 125 \times 10^6 \text{ mol}$		$n = 41.7 \times 10^6 \text{ mol}$		$n = 83.3 \times 10^6 \text{ mol}$
	$M = 2.0 \text{ g mol}^{-1}$		$M = 28 \text{ g mol}^{-1}$		$M = 17 \text{ g mol}^{-1}$

2 Aspect thermique

Données

- Température réacteur : 500 °C
- Débit eau : 630 m³/h
- Température eau (amont réacteur) : 20 °C

Calculs Nous utilisons les données de la table II du document "La thermodynamique technique". Cette table nous fournit 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 °C à 500 °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 :

$$\begin{aligned} \int_{25}^{500} c_{p,m,\text{NH}_3} &= (500 \cdot 42.42) - (25 \cdot 35.26) = 20\,238.5 \text{ J mol}^{-1} \\ \int_{25}^{500} c_{p,m,\text{H}_2} &= (500 \cdot 29.25) - (25 \cdot 28.62) = 13\,909.5 \text{ J mol}^{-1} \\ \int_{25}^{500} c_{p,m,\text{N}_2} &= (500 \cdot 29.86) - (25 \cdot 29.12) = 14\,202.25 \text{ J mol}^{-1} \end{aligned}$$

À ces résultats nous ajoutons les données de la table VII du document cité plus haut. Cette table nous fournit 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 :

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

Nous obtenons donc :

$$2 \cdot \Delta H_{\text{NH}_3}(500) = 2 \cdot (-46200 + 20238.5) = -57\,923 \text{ J mol}^{-1}$$

$$3 \cdot \Delta H_{\text{H}_2}(500) = 3 \cdot (0 + 13909.5) = 41\,728.5 \text{ J mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{\text{N}_2}(500) = (0 + 14202.25) = 14\,202.25 \text{ J mol}^{-1}$$

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

$$\begin{aligned} \Delta H &= 2\Delta H_{\text{NH}_3} - 3\Delta H_{\text{H}_2} - \Delta H_{\text{N}_2} = -108 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ pour } 2\text{NH}_3 \\ &= -54 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ pour } \text{NH}_3 \end{aligned}$$

La formation d'une mole de NH_3 produit donc 54 kJ mol⁻¹. En sachant que nous produisons 83.3×10^6 mol par jour, nous pouvons calculer l'énergie totale dégagée par jour :

$$83.3 \times 10^6 \cdot 54 = 4.50 \times 10^9 \text{ kJ par jour}$$

Pour refroidir le réacteur, nous avons un échangeur de chaleur avec un débit d'eau à 20 °C à 630 000 L h⁻¹. Cela nous fait donc 15.12×10^6 L par jour. En sachant qu'il faut 4.185 kJ pour augmenter de 1 °C 1 L d'eau, il nous faudrait pour chauffer toute l'eau d'un degré une énergie totale de :

$$15.12 \times 10^6 \cdot 4.185 = 63.28 \times 10^6 \text{ kJ}$$

Enfin, la variation de température nous est donnée par le rapport entre l'énergie dégagée par la réaction et l'énergie nécessaire pour chauffer un litre d'eau d'un degré :

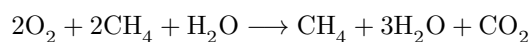
$$\frac{4.50 \times 10^9}{63.28 \times 10^6} = 71.11 \text{ °C}$$

En additionnant cette variation avec la température initiale de l'eau, nous obtenons la température de l'eau à la sortie de l'échangeur :

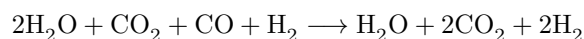
$$71.11 + 20.00 = 91.11 \text{ °C}$$

3 Réactions ATR I et WGS

ATR I :



WGS :



4 Bilan des données

- 0 Quelle quantité de O_2 et N_2 nécessaire ?
- 1a Quelle quantité d'énergie libérée lors de la combustion ?
- 1a Quelle quantité de CH_4 et H_2O
 (Pourquoi rentrée d' H_2O dans zone de combustion ?)
- 1b Zone de reformage \rightarrow 2 réactions incomplètes
 - K_c des 2 réactions
 - 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