



**UCL** Université catholique de Louvain



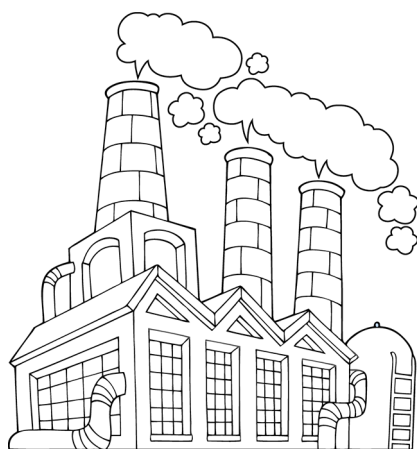
ÉCOLE  
POLYTECHNIQUE  
DE LOUVAIN

---

# RAPPORT S7 PROJET

[1cm]  $H_2$ ,  $CO_2$  ET LE GÉNIE CHIMIQUE

---



[2cm]

**Groupe 12.63**

Mohamed CHAABANI

Simon COLLIN

Bastien DELLEUZE

Louis DEVILLEZ

Estelle LOÏEN

Jérémy KRAUS

Luis TASCON GUTIERREZ

Ysaline WEINREB-WILLARD

**Cours :** LFSAB1503

**Année académique :** 2016-2017

**Date de remise :** 4 NOVEMBRE  
2016

# 1 FlowSheet

La FIGURE 1 représente la flowsheet de notre système. Les valeurs de nos différents flux peuvent être trouvées dans les TABLE 1, 2 et 3.

## 1.1 Données non présentes sur le schéma

	CH4	H2O	CO	CO2	H2
Réformeur - 1er Réacteur WGS [mol/s]	289.35	964.51	0	0	0
1er Réacteur WGS [mol/s]	25.90	613.27	175.66	87.79	878.13
2eme Réacteur WGS [mol/s]	25.90	476.71	39.11	224.34	1014.69
Refroidissement et absorption du CO2 [mol/s]	25.90	440.72	3.11	260.34	1050.69
Méthanation [mol/s]	25.90	0	3.11	0	1050.69
Sortie [mol/s]	29.0.1	3.11	0	0	1041.35
Sortie [T/j]	40.11	4.84	0	0	179.95

TABLE 1 – Tableau des flux entrant dans chaque partie de notre système

	CH4	H2O	O2	N2	Air
Four [mol/s]	184.34	0	388.8	1459.91	1847.99
Four [T/j]	254.83	0	1072.96	3531.81	4726.12
Total [mol/s]	473.69	964.51	388.08	1460.98	1849.34
Total [T/j]	654.86	1500	1072.96	3534.4	4729.58

TABLE 2 – Tableau des flux entrant dans le four pour notre système en entier

	Energie [MJ/s]	Donnée/Reçue
Four : Augmenter la température	67.76	Donnée
Four : Combustion	-148.02	Reçue
Réformeur : Augmenter la température	24.23	Donnée
Réformeur : Réaction SMR et WGS	56.03	Donnée
WGS 1 : Diminuer la température	-32.52	Reçue
WGS 1 : Réaction	-5.47	Reçue
WGS 2 : Diminuer la température	-12.75	Reçue
WGS 2 : Réaction	-1.44	Reçue

TABLE 3 – Tableau des énergies données ou reçues dans chaque partie de notre système

## 1.2 Schéma

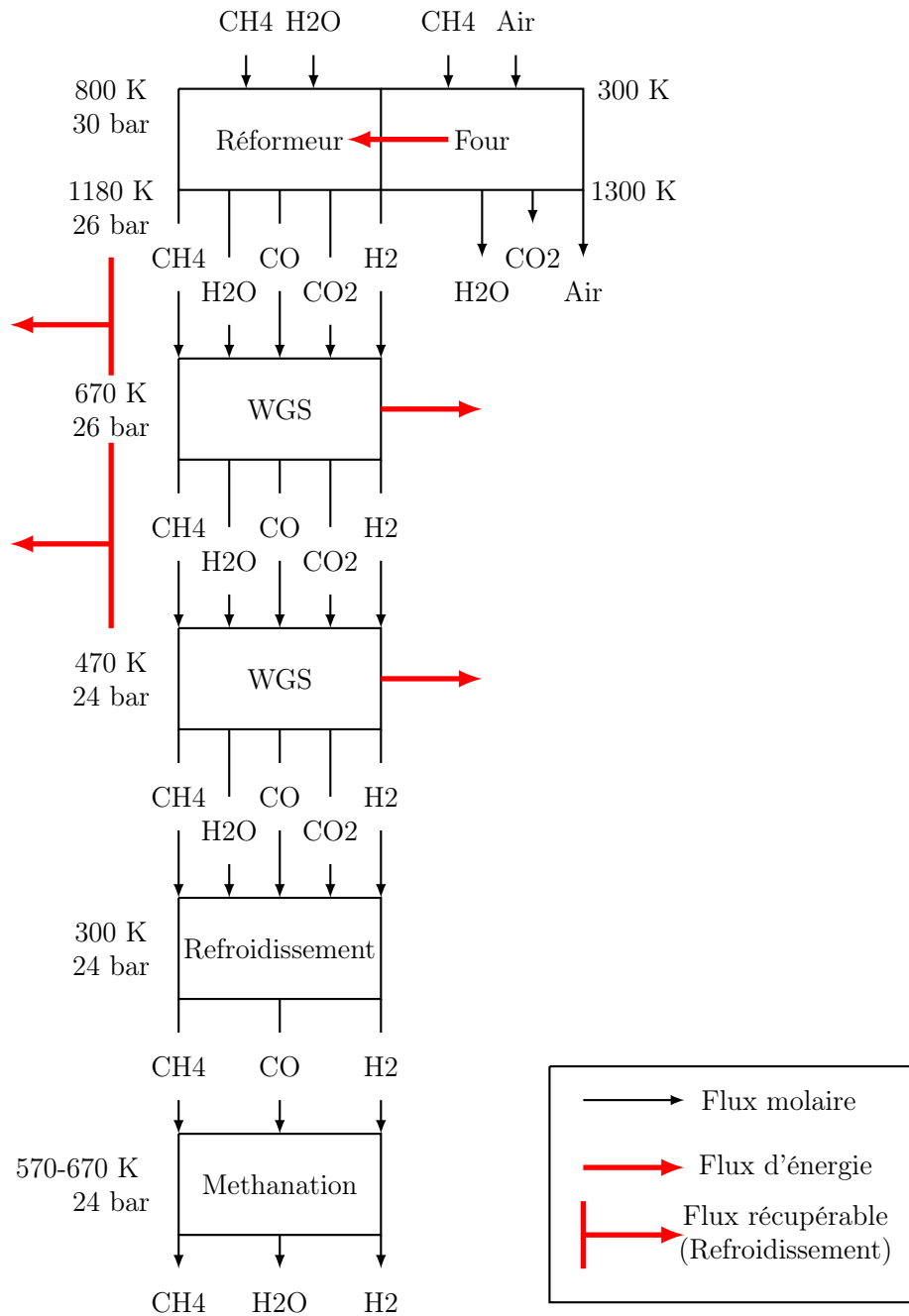


FIGURE 1 – Flow sheet de notre systeme

## 2 Outil de gestion

### 2.1 Structure

Notre outil de gestion se compose de 8 fonctions :

**ChaleurFour.m** Calcule le volume qui sort du four en fonction de la température d'entrée et de sortie, de l'énergie venant du réformeur et de l'énergie qu'on apporte à celui-ci pour le chauffer.

**Double\_eq.m** Calcule le double équilibre du réformeur.

**Gestion.m** Envoie à tout moment les données calculées en fonction des entrées à l'interface graphique.

**Prod.m** Fonction auto-générée par Matlab afin de produire l'interface graphique.

**SolutionFunction.m** Fonction qui résout l'équation de ChaleurFour.m.

**Solvator.m** Solveur utilisé dans Double\_eq pour résoudre la double équation.

**WGS.m** Calcule les flux sortant du WGS.

**Graphe.m** Trace les graphes de notre système.

### 2.2 Input

Nous avons plusieurs données que nous pouvons définir en entrée :

- Le flux de  $\text{CH}_4$  rentrant dans le réformeur.
- Le flux d' $\text{H}_2\text{O}$  rentrant dans le réformeur.
- La température de sortie du réformeur.
- La température de sortie du 2<sup>ème</sup> réacteur.

Notre fonction "Prod.m" nous permet d'avoir une interface graphique où nous pouvons directement changer ces 4 variables très intuitivement afin de voir les changements dans les tableaux de données.

### 2.3 Gestion de l'outil

Nous avons rendu une fonction permettant d'ouvrir une interface graphique, l'aperçu des flux est de cette manière facilement observable. La gestion est donc intuitive ainsi, la prise en main est rapide. De plus l'exécution de la fonction graphe permet d'afficher tous les graphes désirés.

## 3 Effet des variables sur le flux final

Voici la valeur des paramètres constants utilisé pour l'étude de l'effet des différentes variables variables :

- $T_{Ref} = 1180$  K
- $T_{Wgs} = 470$  K
- $\dot{m}_{CH_4} = 400$  Kg/s
- $\dot{m}_{H_2O} = 1500$  Kg/s

### 3.1 Variation de la température de sortie du réformeur

Lorsque nous faisons varier la température à la sortie du réformeur, nous remarquons (voir la FIGURE 2) que cela induit un changement sur la quantité de  $H_2$  produite ainsi que sa pureté. En effet, plus cette température augmente, plus la quantité produite augmente. A 1020 K, le rapport  $\frac{Masse\ d'\ H_2}{Masse\ d'\ entrée}$  est égal à 0.06 et augmente de façon quasi linéaire jusqu'à une température de 1140 K. A ce stade, la température commence à évoluer de façon plus lente pour arriver à un rapport égal à 0.099 lorsque la température est de 1220 K. Pour ce qui est de la pureté du dihydrogène, celle-ci est de 84% à 1020 K et augmente de façon linéaire jusque 1060 K. Elle évolue ensuite de façon similaire à la quantité produite d' $H_2$  car l'augmentation diminue au fil de l'augmentation de température. La pureté est égale à 98% à ces températures.

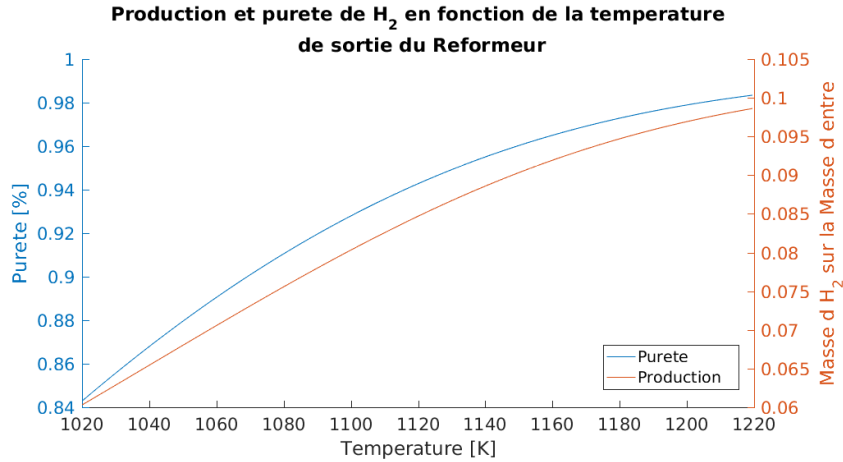


FIGURE 2 – Graphe comparant l'évolution de la pureté de L' $H_2$  et l'évolution du taux de la masse D' $H_2$  sur la masse d'entrée, tout deux en fonction de la température de sortie du Réformeur

Ces deux observations sont liées à la constante d'équilibre de la transformation SMR. En effet, lorsque la température de sortie du réformeur augmente, la constante d'équilibre augmente. Ce qui signifie que l'activité des produits augmente. Or, nous savons que l'activité d'un gaz est définie par  $\frac{p}{p_0}$  et par la loi des gaz parfaits, nous savons que la pression de celui-ci dépend de son nombre de moles. Celles-ci ne dépendent pas de l'enthalpie de la réaction

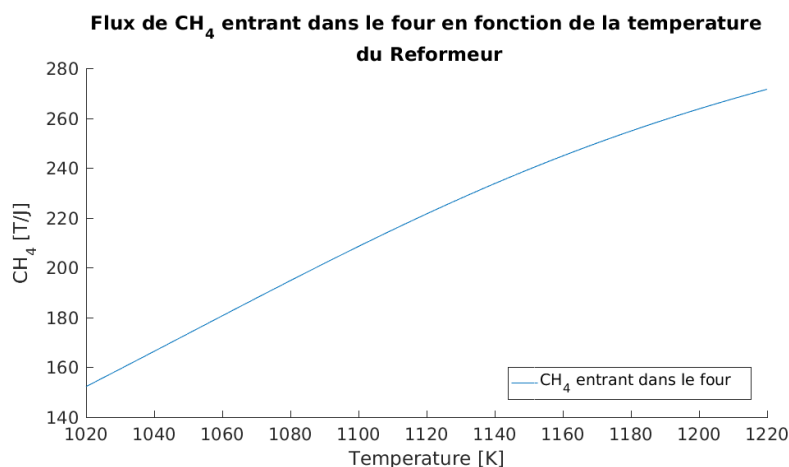


FIGURE 3 – Evolution du flux de  $\text{CH}_4$  entrant dans le four en fonction de la température du Réformeur

SMR car elle est considérée comme constante pour la gamme de température que nous avons considéré.

La variation de température de sortie du réformeur induit également un effet sur la quantité de  $\text{CH}_4$  entrant dans le four (voir la figure 3). Nous remarquons que celle-ci augmente de façon quasi linéaire lorsque la température augmente. Ceci est cohérent car la réaction SMR est endothermique, elle a donc besoin d'énergie fournie par le four. Or, si l'équilibre du four se déplace vers la droite, il faut donc que le flux du  $\text{CH}_4$  augmente.

### 3.2 Variation de la température de sortie du WGS

La variation de la température de sortie du WGS induit un effet opposé à la variation engendrée par un changement de la température de sortie du réformeur, comme vous pouvez le remarquer à la figure 4. En effet, on observe que plus la température augmente, plus la pureté et la quantité produite de  $\text{H}_2$  diminuent de façon parabolique. Les variations sont tous de même moins importantes que lors de la variation de la température de sortie du réformeur car à 470K, le rapport  $\frac{\text{Masse d'H}_2}{x \text{ Masse d'entrée}}$  est égal à 0.095 et la pureté de 97,25% tandis qu'à 670 K, ils valent respectivement 0.0935 et 93,25%.

Ces deux observations sont liées à la constante d'équilibre de la transformation WGS. En effet, plus la température augmente, plus la constante d'équilibre diminue. L'activité des produits diminue donc également.

Cette variation de température n'a aucun effet sur la quantité de  $\text{CH}_4$  entrant dans le four (voir figure 5) car cette réaction est exothermique, elle rejette donc de l'énergie et n'a pas besoin qu'on lui en apporte.

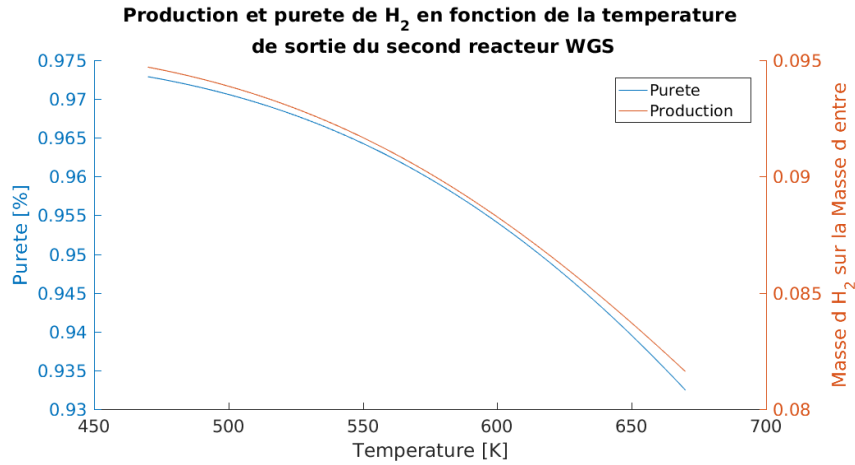


FIGURE 4 – Graphe comparant l'évolution du taux de pureté de L'H<sub>2</sub> et l'évolution du taux de la masse d'entrée, tout deux en fonction de la température de sortie du second réacteur WGS

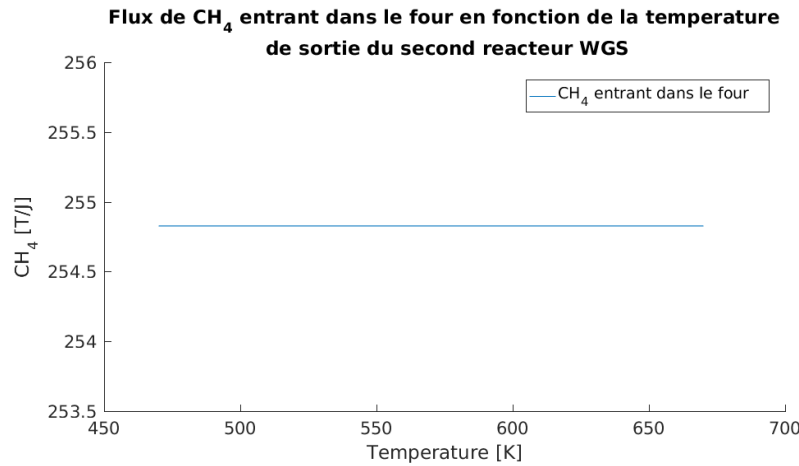


FIGURE 5 – Evolution du flux de CH<sub>4</sub> entrant dans le four en fonction de la température de sortie du deuxième réacteur WGS

### 3.3 Variation du rapport molaire H<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub>

Comme le montre la figure 6, le rapport molaire H<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub> a une influence sur la quantité d' H<sub>2</sub> produite ainsi que sur sa pureté. Celles-ci augmentent de façon quasi linéaire lorsque le rapport augmente. Ceci est dû à la réaction de notre système. Lorsque le rapport augmente, cela signifie que la quantité d'H<sub>2</sub>O augmente. Ceci implique donc que nous avons besoin d'un plus grand flux de CH<sub>4</sub> pour assurer la réaction. Grâce au principe de Le Chatelier, nous pouvons dire que la réaction directe est favorisée. Cela engendre donc que nous produisons d'avantage de H<sub>2</sub> et que la pureté augmente également. De plus, lorsque la quantité d'H<sub>2</sub>O augmente, il est plus évident pour nous de la retirer durant l'étape de refroidissement. Cette variation a donc également un impact sur la quantité de CH<sub>4</sub> (figure 7) entrant dans

le four comme expliqué précédemment.

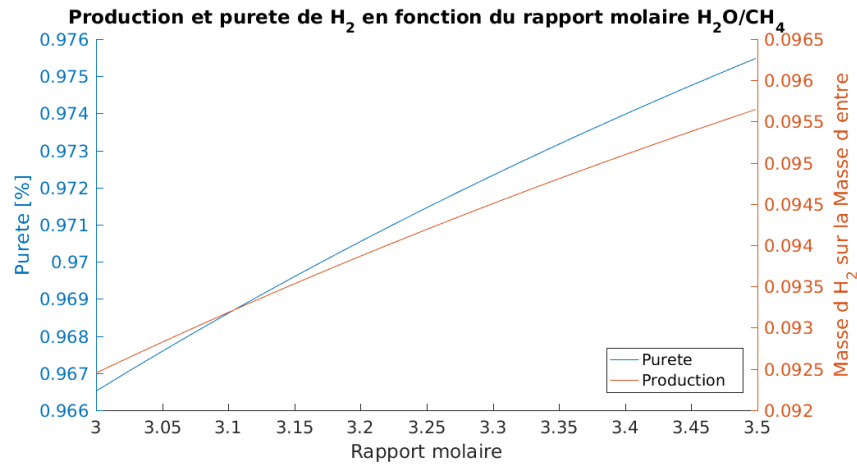


FIGURE 6 – Graphe comparant l'évolution du taux de pureté de l' $H_2$  et l'évolution du taux de la masse d' $H_2$  sur la masse d'entrée, tout deux en fonction du rapport molaire  $H_2O$  sur  $CH_4$

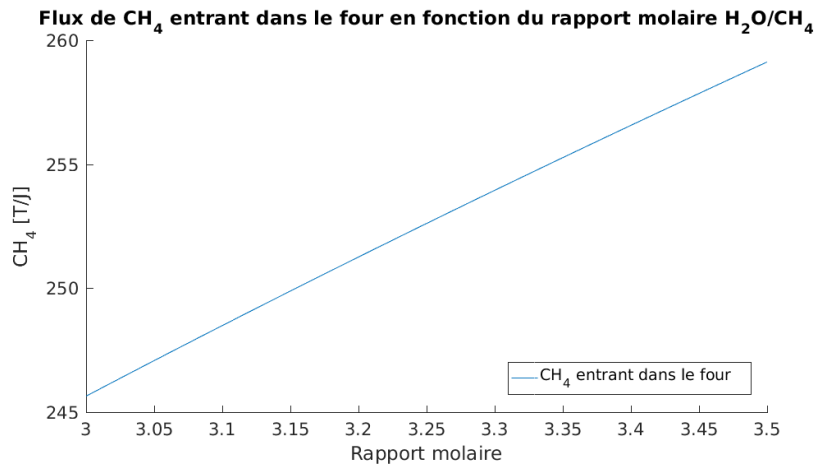


FIGURE 7 – Evolution du flux de  $CH_4$  entrant dans le four en fonction du rapport molaire  $H_2O$  sur  $CH_4$

## 4 Récupération de la chaleur

L'unité SMR a besoin de vapeur d'eau à 30 bar pour préchauffer les gaz du réformeur et une température de 800 K. Pour cela, on doit chauffer de l'eau préalablement pressurisée à 30 bar et initialement à une température de 293,15 K. Afin d'éviter le gaspillage, on récupère l'énergie dissipée entre la sortie du SMR et l'entrée du WGS-HT. On cherche donc à connaître



quelle est l'énergie requise pour chauffer l'eau et quelle quantité d'énergie peut être fournie par le procédé lui même.

#### 4.1 Energie requise par le flux d'eau

La quantité d'énergie nécessaire pour chauffer un kilogramme d'eau liquide pressurisée de 293.15 K jusqu'à 800 K est la différence d'enthalpie.

$$\begin{aligned}\Delta H_{eau} &= \int_{T_1}^{T_{vap}} C_{p_{eau,L}} dT + \Delta H_{vap} + \int_{T_{vap}}^{T_2} C_{p_{eau,V}} dT \\ \Delta H_{eau} &= \int_{293.15}^{507.15} 4418 dT + 1794 * 10^3 + \int_{507.15}^{800} 3407 dT \\ \Delta H_{eau} &= 3737191,95 \text{ [J/Kg]}\end{aligned}$$

#### 4.2 Energie récupérée au échangeurs de chaleur

Durant le passage du Réformeur au WGS un refroidissement a lieu et un flux d'énergie est dégagé sous forme de chaleur. Ce flux est exprimé à continuation avec les flux des composants en [Kg/s].

$$\begin{aligned}Q_1 &= \int_{T_{RefoutWGS}}^{T_{pro}} C_{p_{pro}} dT (Flux_{CH_4} + Flux_{eau} + Flux_{H_2} + Flux_{CO} + Flux_{CO_2}) \\ Q_1 &= \int_{1180}^{670} 2900 dT (0,4 + 11 + 1,8 + 4,9 + 3,9)\end{aligned}$$

$$Q_1 = -32538000 \text{ [J/s]}$$

Un deuxième refroidissement se produit dans le WGS entre la partie à haute température et celle à base température. Il peut être calculer comme celui précédemment à partir des flux en [Kg/s] et la capacité du mélange.

$$\begin{aligned}Q_2 &= \int_{T_{WGS-HT}}^{T_{WGS-LT}} C_{p_{pro}} dT (Flux_{CH_4} + Flux_{eau} + Flux_{H_2} + Flux_{CO} + Flux_{CO_2}) \\ Q_2 &= \int_{670}^{470} 2900 dT (0,4 + 11 + 1,8 + 4,9 + 3,9)\end{aligned}$$

$$Q_2 = -12760000 \text{ [J/s]}$$

Les chaleurs sont bien négatif car elles sont exothermique pour la réaction.

#### 4.3 Bilan d'énergie

Le flux de vapeur d'eau est 17 kg/s donc on peut égaliser les flux pour les comparer. L'énergie totale qu'on doit fournir est  $\Delta H_{eau} * 17 = 63\,532\,263.15 \text{ [J/s]}$ . On peut maintenant calculer le pourcentage d'énergie épargnée.

$$\frac{Flux \text{ d'énergie}}{Flux \text{ fourni}} = \frac{32\,538\,000}{63\,532\,263.15} = 0,51$$

On peut conclure que récupérer la chaleur entre le Réformeur et le WGS permet d'économiser 51% de l'énergie requise pour chauffer l'eau du Réformeur. L'épargne est considérable, en effet plus de la moitié de l'énergie est récupérée ce qui permet de réduire les pertes de notre bilan énergétique.