

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

CHAPITRE 2

ANALYSE DE SENSIBILITÉ

Dans le cadre de la deuxième thématique abordée durant notre projet, à savoir la gestion de la production, il nous a été demandé de faire varier certains paramètres du procédé afin d'analyser leur effet sur :

- La production de NH_3 , ceci étant notre but premier.
- Les débits intermédiaires.
- Le débit de CO_2 , son caractère polluant étant loin d'être négligeable. Cependant nous avons appris lors de notre visite à Yara¹ qu'il était possible de revendre celui-ci afin de rendre sa production utile. Par exemple dans l'industrie alimentaire.
- Le volume d'air à traiter, la séparation de celui-ci étant énergivore et coûteuse.

Nous allons faire varier les paramètres suivants dans les plages de valeurs indiquées :

Rapport $\frac{O_2}{CH_4}$ à l'entrée de l'ATR	0.2 - 0.8
Rapport $\frac{H_2O}{CH_4}$ à l'entrée de l'ATR	0.5 - 4
Température de sortie de la zone de reforming de l'ATR	1000 - 1600 [K]
Pression d'opération de l'ATR	20 - 100 [bar]

Pour réaliser notre analyse, nous avons choisi de nous concentrer chaque fois sur une conséquence possible de la variation des paramètres afin de faire clairement ressortir nos possibilités d'action sur ceux-ci.

Pour chaque variation, nous avons ressorti les graphes correspondants de notre outil de calcul matlab.

1. Dans le cadre du projet, différentes visites ont été proposées. L'une d'elles était la visite du centre de production d'ammoniac Yara à Tertre.

2.1 Influence sur le débit final de NH_3

2.1.1 Variation du ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$

Grâce au graphe de la figure 1.1 ci dessous, nous avons pu constater que le débit de NH_3 est maximum lorsque le ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$ est à sa plus petite valeur, c'est à dire 0,2. Cette valeur implique que la concentration molaire en CH_4 soit 5 fois plus élevée que celle en O_2 .

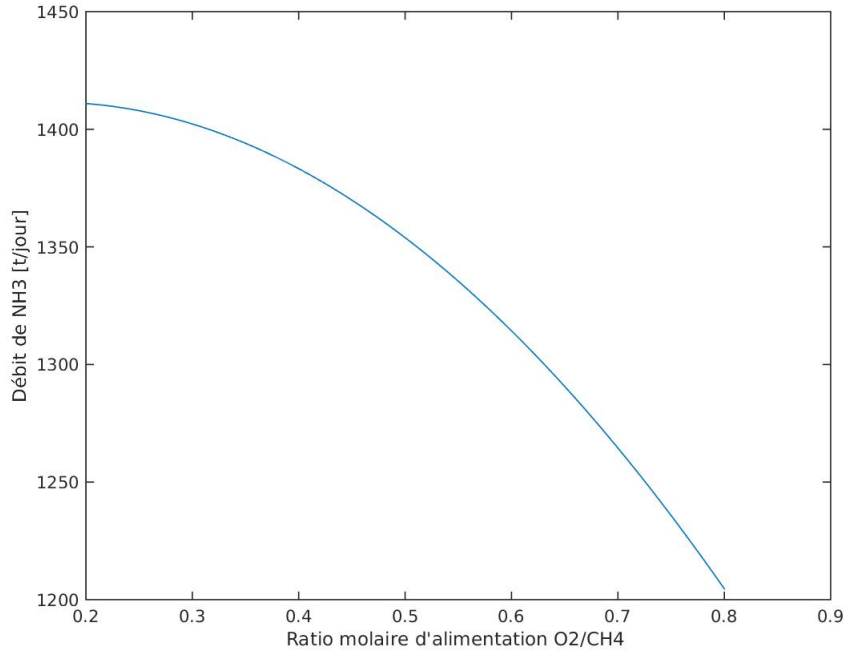


FIGURE 2.1 – Evolution du débit de sortie de NH_3 en fonction du ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$

Ce phénomène s'explique par le fait que l' O_2 n'intervient que dans la toute première réaction dans l'ATR, la combustion, que nous considérons comme complète :



Alors que le CH_4 , quant à lui intervient également dans les deux réactions simultanées :



La réaction (2.1) étant considérée complète, le nombre de moles réagissant est déterminé par le réactif limitant. Dans les plages de valeurs que nous utilisons, ce réactif sera toujours l' O_2 . Au moins le nombre de moles d' O_2 est élevé, au plus il restera du CH_4 prêt à réagir avec l' H_2O pour former du CO_2 et du H_2 .

Or, le H_2 est indispensable à l'étape finale, la synthèse de l'ammoniac :



L'azote, N_2 , étant obtenu par séparation de l'air et étant 4 fois plus présent dans ce dernier que l'oxygène, est présent en suffisance pour les quantités de H_2 prêtes à réagir². Dès lors, au plus il y a de H_2 , au plus nous obtenons du NH_3 , notre objectif final.

Cela explique donc la forme du graphe obtenu.

2.1.2 Variation du ratio molaire $\frac{H_2O}{CH_4}$

Sur le graphe de la figure 2.2 ci-dessous, il apparaît clairement que le débit de NH_3 augmente avec le ratio molaire d'alimentation $\frac{H_2O}{CH_4}$.

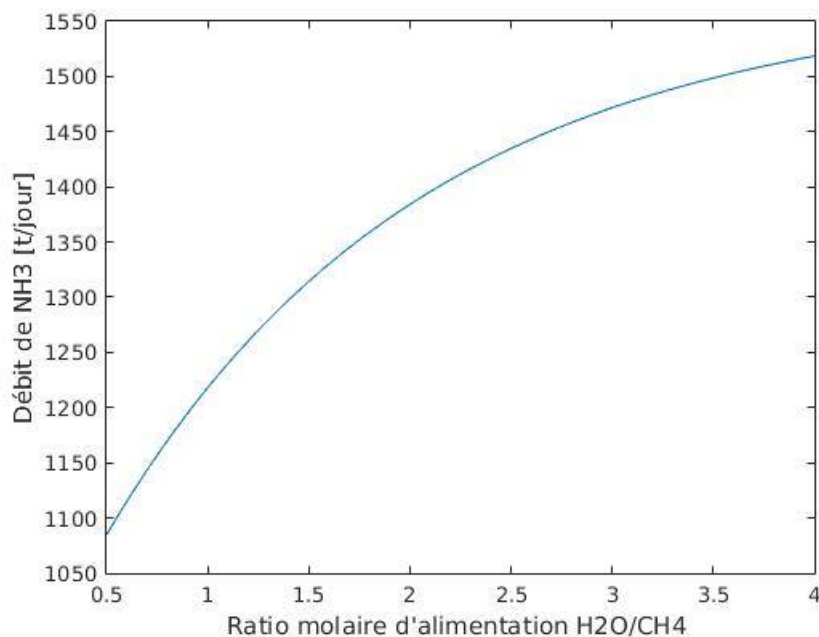


FIGURE 2.2 – Evolution du débit de sortie de NH_3 en fonction du ratio molaire $\frac{H_2O}{CH_4}$

Cela s'explique principalement par la réaction de formation du H_2 qui a lieu dans le WGS :



Etant donné que nous considérons cette réaction comme complète, c'est le réactif limitant qui détermine le nombre de moles de H_2 obtenues et, via l'intervention du H_2 dans l'étape finale, la quantité de NH_3 .

Le CO produit dépendant en partie de la quantité d' H_2O entrant dans l'ATR, il est proportionnel au flux entrant de ce dernier. Il est donc normal d'observer une augmentation du débit de sortie de NH_3 lorsqu'on augmente l'alimentation en H_2O , étant donné que la quantité de H_2 présente pour la synthèse en dépend directement.

2. Dans notre outil, selon nos hypothèses

2.1.3 Variation de la pression dans l'ATR

A NOTER : les K introduits dans l'outil ne dépendent que de T. Or en réalité K1 est proportionnel à p_{tot}^2 , ceci est une approximation fournie dans les paramètres de bases.

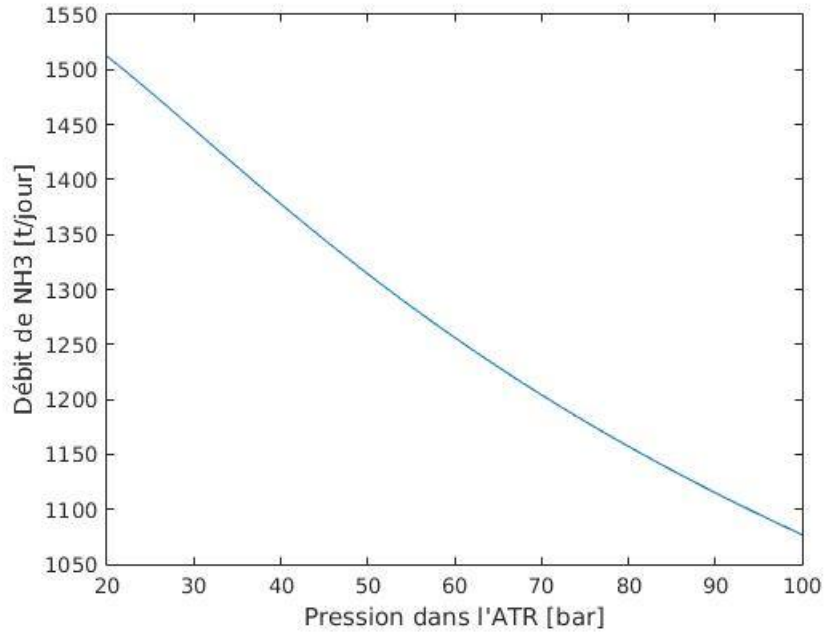


FIGURE 2.3 – Evolution du débit de sortie de NH_3 en fonction de la pression dans l'ATR

2.1.4 Variation de la température de la zone de reforming de l'ATR

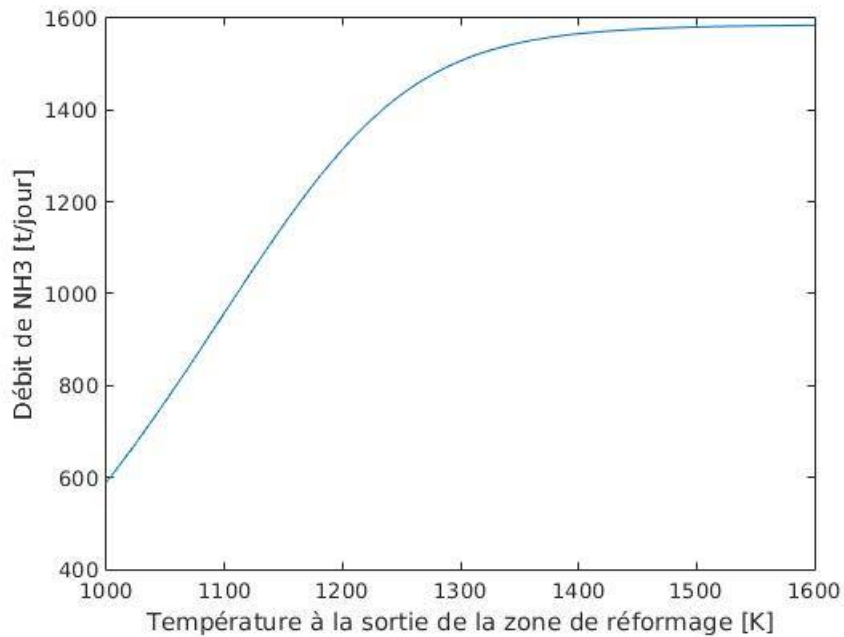


FIGURE 2.4 – Evolution du débit de sortie de NH_3 en fonction de la température de la zone de reforming de l'ATR

2.2 Influence sur le débit de CO_2

2.2.1 Variation du ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$

Le graphe de la figure 2.5 montre très clairement que le débit de CO_2 augmente quasiment linéairement avec l'augmentation du ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$

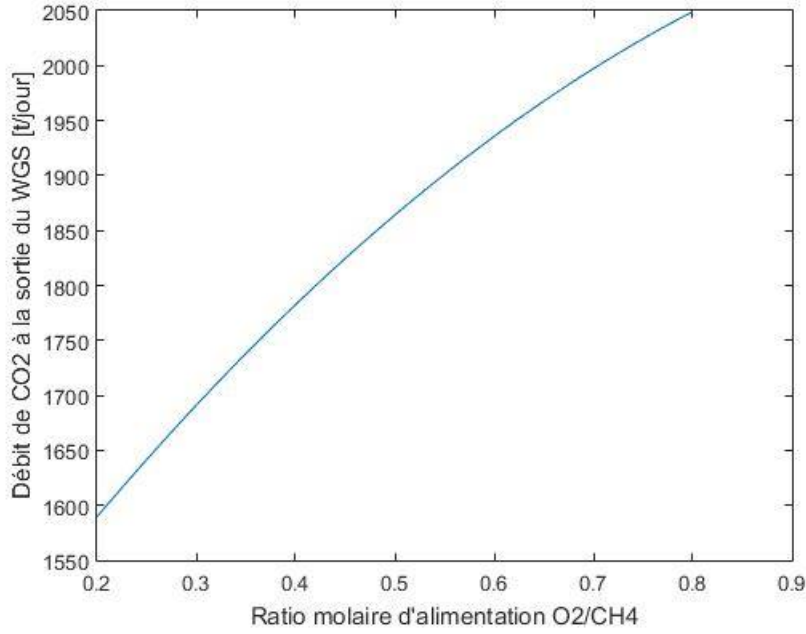


FIGURE 2.5 – Evolution du débit de sortie de CO_2 en fonction du ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$

Cela s'explique principalement par la réaction de combustion qui est la première à avoir lieu dans l'ATR :



Au plus il y a de O_2 présent à l'entrée de l'ATR, au plus le nombre de moles qui réagiront au cours de la combustion sera grand et au plus la quantité de CO_2 produite sera élevée.

Le débit de sortie de CO_2 est majoritairement constitué de celui rejeté par cette première réaction. En effet, les deux réactions suivantes dans l'ATR se font à l'équilibre, et donc la quantité de CO_2 produite est moindre, même si bien présente.

2.2.2 Variation du ratio molaire $\frac{H_2O}{CH_4}$

Lorsque l'on augmente progressivement le ratio molaire $\frac{H_2O}{CH_4}$ on observe également une augmentation du débit de CO_2 à la sortie du WGS.

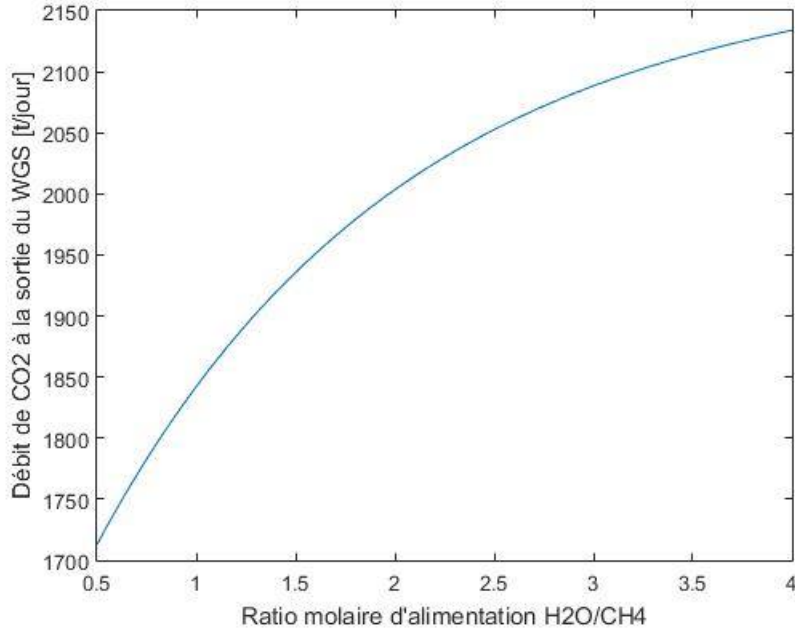


FIGURE 2.6 – Evolution du débit de sortie de CO_2 en fonction du ratio molaire $\frac{H_2O}{CH_4}$

Ce résultat est conforme à ce que nous attendions et s'explique tout d'abord par une analyse des deux réactions en équilibre dans l'ATR.



Ces réaction produisent déjà une partie du CO_2 qui constituera le débit final de celui-ci. Il apparaît clairement que la quantité de H_2O influe d'une part sur la production de CO, qui réagira ensuite avec le H_2O qui, d'autre part, réagit pour former du CO_2 . Le tout dans une forme d'équilibre.

De plus, les H_2O et CO restant réagiront ensuite dans le WGS :



Cette réaction est complète de telle façon que tout le CO réagit. Le nombre de moles de CO_2 formées durant cette réaction dépendant donc du nombre de moles de CO présentes, ces dernière dépendant de la quantité de H_2O entrant dans le WGS.

Cependant, il est intéressant de remarque la forme non linéaire du graphe. En effet, il apparaît une esquisse de limite dans l'augmentation du débit de CO_2 produite en fonction de la quantité de H_2O . Cela s'explique par l'équilibre dans lequel se déroulent les deux réaction de l'ATR produisant le CO et le CO_2 .

2.2.3 Variation de la pression dans l'ATR

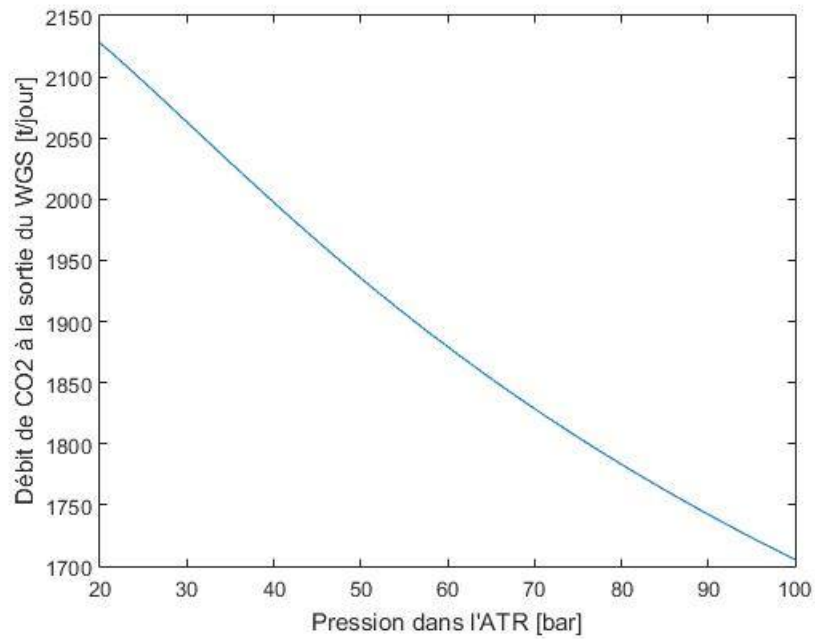


FIGURE 2.7 – Evolution du débit de sortie de CO_2 en fonction de la pression dans l'ATR

2.2.4 Variation de la température de la zone de reforming de l'ATR

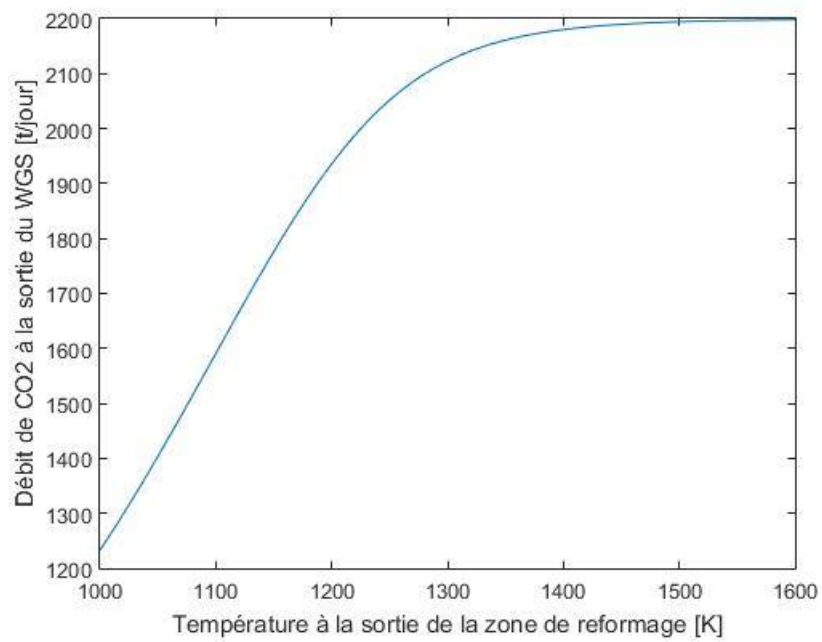


FIGURE 2.8 – Evolution du débit de sortie de CO_2 en fonction de la température de sortie de la zone de reforming de l'ATR

2.3 Influence sur la température maximale de l'ATR

2.3.1 Variation du ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$

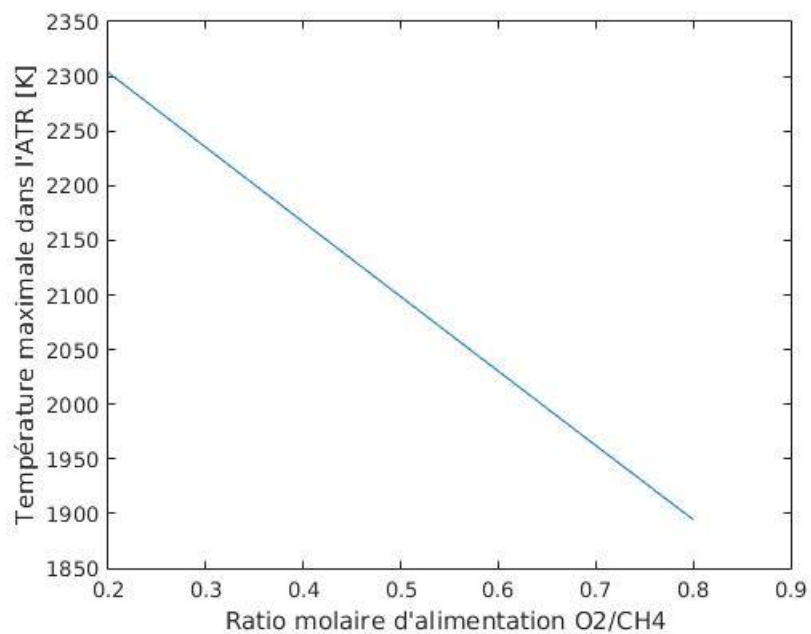


FIGURE 2.9 – Evolution de la température maximale de l'ATR en fonction du ratio molaire $\frac{O_2}{CH_4}$

2.3.2 Variation du ratio molaire $\frac{H_2O}{CH_4}$

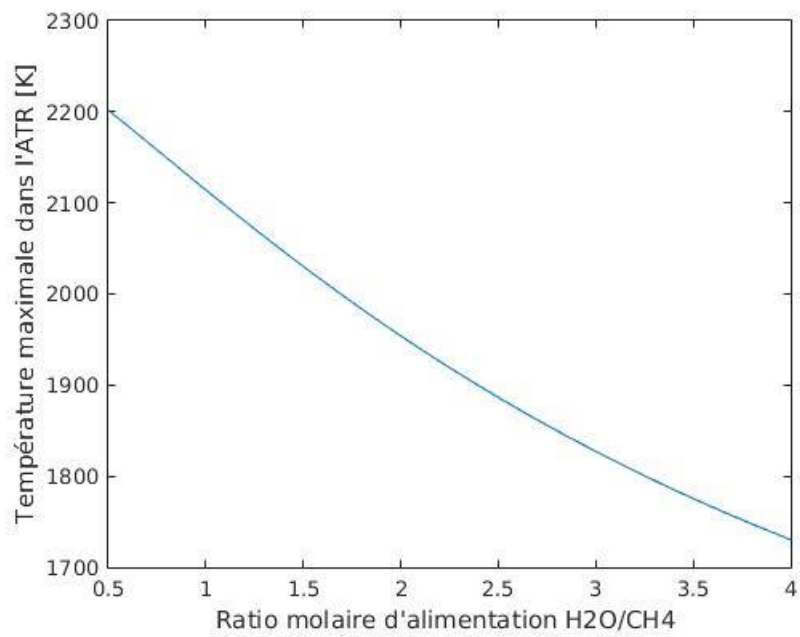


FIGURE 2.10 – Evolution de la température maximale de l'ATR en fonction du ratio molaire $\frac{H_2O}{CH_4}$

2.3.3 Variation de la pression dans l'ATR

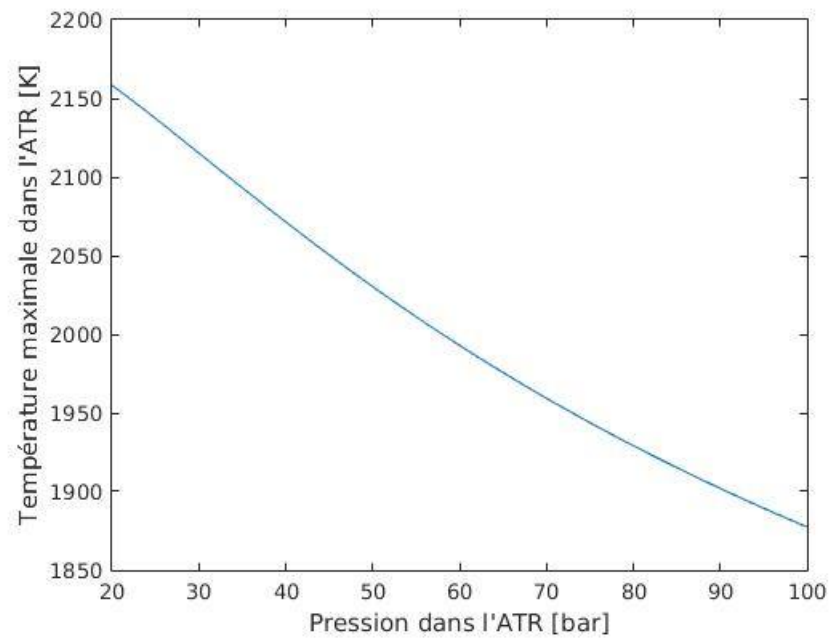


FIGURE 2.11 – Evolution de la température maximale de l'ATR en fonction de la pression dans l'ATR

2.3.4 Variation de la température de la zone de reforming de l'ATR

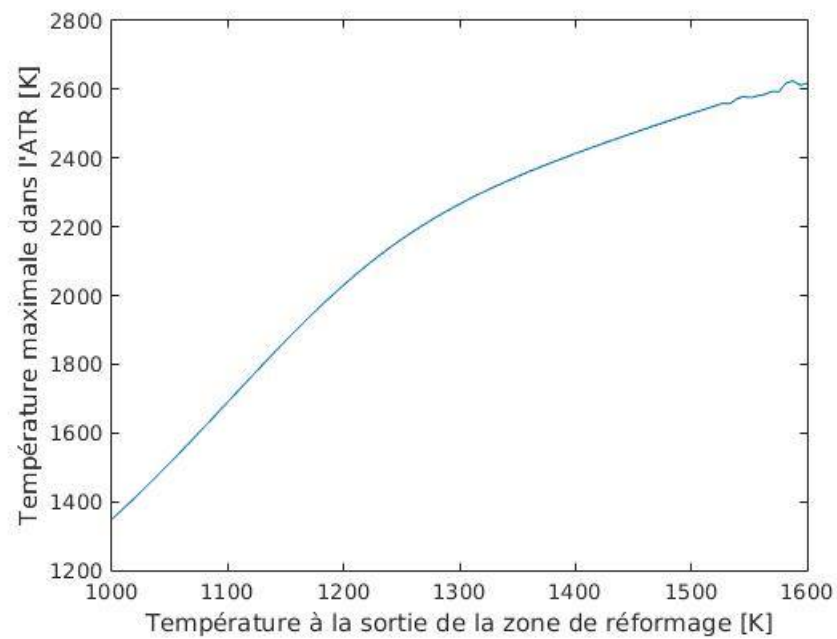


FIGURE 2.12 – Evolution de la température maximale de l'ATR en fonction de la température de sortie de la zone de reforming de l'ATR