

1 Introduction

Notre sujet d'étude étant la production d'ammoniac, en commençant par la synthèse de celui-ci à partir du reformage, il nous a été nécessaire de passer par l'étape de la gestion du plant. Ce rapport présente donc nos calculs et codes MATLAB du bilan de matière, en fonction de la température dans le réacteur et de la quantité d'ammoniac produite, du bilan d'énergie et finalement le calcul du nombre de tubes nécessaires à l'entrée des différents réactifs.

2 Flow-sheet rempli

La figure 1 présente le flow-sheet que nous avons complété à l'aide des sources [1] et [2].

3 Bilan de matière

Dans cette section nous allons utiliser ce que nous savons sur les réactions pour trouver les différents débits de matière du procédé en fonction du débit sortant de NH_3 et de la température du réformage primaire.

Il suffit *a priori* de prendre ce débit d'ammoniac désiré et remonter pas à pas dans les différentes équations pour arriver aux réactifs de base et ainsi savoir de combien de moles, ou de kilogrammes, de matière première nous avons besoin.

Cependant, ce n'est pas si simple étant donné que le procédé inclut des réactions à l'équilibre, pour lesquelles certains réactifs ne réagissent pas complètement, et accompagnent les produits dans les réactions suivantes. De plus, certains réactifs sont ajoutés à différents endroits dans la chaîne, aux quantités inconnues, ce qui ajoute encore un niveau de complexité.

Nous avons donc cherché une solution plus générale et automatique. Et cela signifie écrire un grand système d'équations et laisser notre environnement de calcul numérique favori le résoudre (presque) tout seul.

3.1 Inconnues et équations

Commençons par déterminer nos inconnues et les relations dont nous disposons.

Pour les inconnues, nous choisissons les débits de moles suivants :

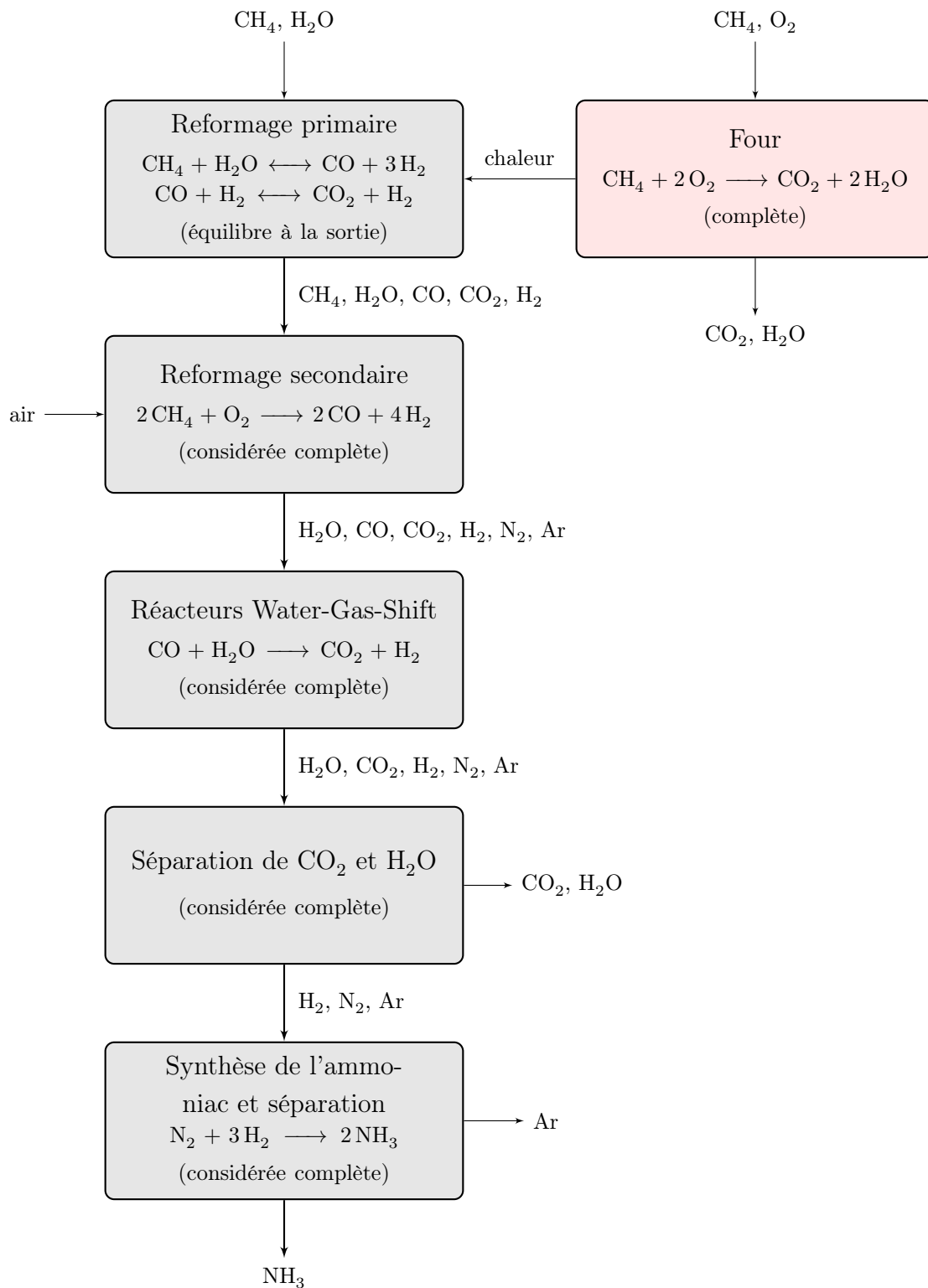


FIGURE 1 – Flow-sheet simplifiée du procédé de production d'ammoniac.

- in_1, in_2, in_3 les entrées de CH_4 , H_2O et air ;
- $out_1, out_2, out_3, out_4$ les sorties de H_2O , CO_2 , Ar et NH_3 ;
- $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ et ϵ les degrés d'avancement des cinq réactions.

Il s'agit bien de débits, que nous exprimerons en mol/s, car le procédé fonctionne en continu.¹

En ce qui concerne les équations, nous pouvons exprimer :

- la conservation de chacune des 9 espèces à travers le procédé : ce qui est apporté ou produit doit évaluer ce qui est enlevé ce qui réagit ;
- le débit de sortie de NH_3 , imposé par l'utilisateur ;
- les deux relations d'équilibre à la sortie du réacteur de réformage primaire.

Nous avons $3 + 4 + 5 = 12$ inconnues et $9 + 1 + 2 = 12$ équations, donc le système est résoluble.

Les différentes inconnues et équations sont illustrées dans la figure 2. Les inconnues (entrées, sorties et réactions) sont représentées par des cercles, tandis que les 9 relations de conservation de matière sont représentées par des flèches entre les inconnues.

3.2 Expression des équations

4 Bilan énergétique

5 Nombre de tubes du réacteur

Dans cette partie, nous allons estimer le nombre de tubes opérés en parallèle pour apporter le méthane à l'entrée du réacteur de reformage primaire.

L'énoncé nous indique que pour une capacité de 1500 t/j d'ammoniac, la vitesse superficielle typique à l'entrée du réacteur de reformage à vapeur de méthane est typiquement de 2 m/s. Nous savons que les tubes sont circulaires et leur diamètre est 10 cm.

Nous prenons également pour les besoins du raisonnement qu'à l'endroit concerné une pression de 31 bar et une température de 1000 K.

Pour commencer, nous pouvons aisément déduire le débit volumique pour un tube, comme le produit de la vitesse c , et de la section du tube A . Nous obtenons :

$$\dot{V}_{\text{tube}} = c * A = 2 \text{ m/s} \times \pi(0.05 \text{ m})^2 = 0.0157 \text{ m}^3/\text{s}$$

1. Toutefois, les calculs seraient identiques pour un mode opératoire discret.

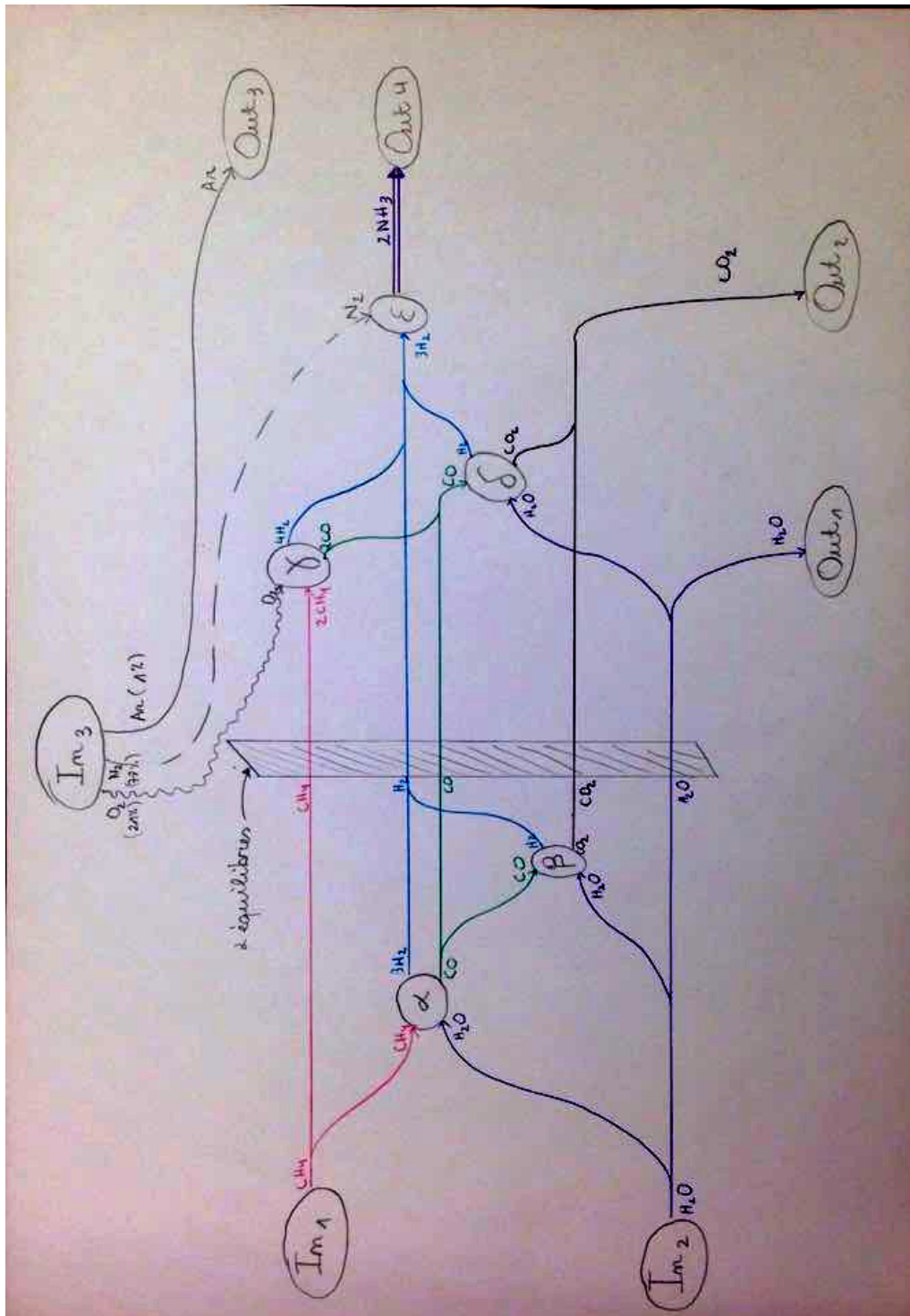


FIGURE 2 – Procédé de production du point de vue de la matière. On remarque que les relations d'équilibres s'appliquent après que les deux réactions du reformage primaire aient eu lieu.

Ensuite, calculons le débit molaire de NH_3 à la sortie à partir du débit massique $\dot{m} = 1500 \text{ t/j} = 17.36 \text{ kg/s}$. En le divisant ce dernier par la masse molaire de NH_3 (0.017 kg/mol), on obtient un débit de :

$$\dot{n}_{\text{sortie}} = \frac{\dot{m}}{M_{\text{NH}_3}} = \frac{17.36 \text{ kg/s}}{0.017 \text{ kg/mol}} = 1021.18 \text{ mol/s}$$

En utilisant la fonction `moles` de notre outil de gestion, nous déterminons les débits molaires à l'entrée du réacteur :

$$\dot{n}_{\text{entrée}} = 451.7 \text{ mol/s}$$

Maintenant, calculons le débit volumique total, \dot{V} . Appliquons pour cela la loi des gaz parfaits :

$$\dot{V} = \frac{\dot{n}_{\text{entrée}} RT}{p} = 1.211 \text{ m}^3/\text{s}$$

Pour finir, nous pouvons déterminer le nombre de tubes nécessaire avec la relation suivante :

$$\frac{\dot{V}}{\dot{V}_{\text{tube}}} = \frac{1.211 \text{ m}^3/\text{s}}{0.0157 \text{ m}^3/\text{s}} = 77.16$$

Nous concluons donc qu'environ 80 tubes seront nécessaires pour apporter le méthane dans le réacteur de reformage primaire.

6 Outil de gestion

Références

- [1] *Emissions Factors & AP 42. Compilation of Air Pollutant Emission Factors*. U.S. Environmental Protection Agency. URL : <http://www.epa.gov/ttnchie1/ap42/> (visité le 23/09/2014).
- [2] David Léon BANQUY. « Procédé de production d'ammoniac et du gaz de synthèse correspondant ». Brevet européen EP0032096. 26 déc. 1980. URL : <http://worldwide.espacenet.com/publicationDetails/biblio?CC=EP&NR=0032096> (visité le 23/09/2014).