

Modèle de conversion du CO

La conversion du CO en CO₂ se fait selon la réaction d'équilibre (1), équimolaire, et donc non influencée par la pression.



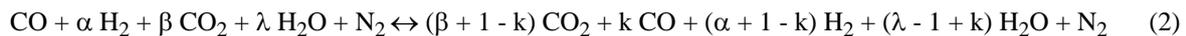
Cette réaction montre qu'à la stœchiométrie, il faut une mole de H₂O par mole de CO. En pratique, elle se fait toujours avec un excès d'eau variable selon les cas.

Considérons un gaz de composition donnée figure 1.

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
CO	0,03018695	0,06006241
CO ₂	0,07799918	0,2438392
H ₂	0,3919335	0,05612304
CH ₄ méthane	0,003366579	0,003836472
H ₂ O	0,4954514	0,6340248
N ₂	0,001062407	0,002114077

Figure 1 : composition du gaz de synthèse humide

A l'entrée dans l'unité de conversion du CO, le gaz contient non seulement des réactifs mais aussi des produits (CO₂ et H₂) et N₂ qui est inerte. La réaction réelle peut donc s'écrire sous la forme (2).



Nous avons établi un modèle de cette réaction en supposant qu'elle est à l'équilibre, la constante d'équilibre étant K_p.

Entre 500 K et 1000 K, avec une précision de l'ordre de 0,5 %, K_p est donné par l'équation (3), qui présente l'intérêt qu'elle s'inverse sans problème particulier : il s'agit d'une équation du 2^{ème} degré en $\frac{1}{T}$.

$$\ln(K_p) = -3,57414 + \frac{3\,642,48}{T} + \frac{292\,593}{T^2} \quad (3)$$

La réaction (1) mettant en jeu un nombre de moles constant, l'équilibre est indépendant de la pression et n'est fonction que de la température. D'après la loi d'action de masse, on a ici :

$$K_p = \frac{[\text{CO}_2] [\text{H}_2]}{[\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]} = \frac{(\beta + 1 - k) (\alpha + 1 - k)}{(\lambda - 1 + k) k} \quad (4)$$

Connaissant α , β , λ et T, c'est-à-dire K_p, k est aussi donné par une équation du second degré.

En pratique cependant, T, K_p et k sont la solution d'un système de trois équations à trois inconnues, malheureusement non linéaire. Les deux premières sont (3) et (4), tandis que la troisième (5) correspond à l'équilibre enthalpique du réacteur : la chaleur libérée par la réaction sert à échauffer les réactifs et les produits, jusqu'à la température T.

Pour l'exprimer, il faut calculer la composition des produits de la réaction et la température adiabatique de fin de réaction.

T_{ad} est obtenue en écrivant le bilan énergétique de la réaction pour 1 kmole de combustible :

L'enthalpie des produits est égale à celle des réactants (m h₁), plus la chaleur libérée pendant la réaction. Le débit-masse total se conserve. La chaleur libérée sert à échauffer les produits jusqu'à la température T_{ad} :

$$m h_2(T_{ad}) = m h_1 + Q \eta_{\text{react}}$$

On peut éventuellement introduire un terme supplémentaire pour tenir compte de pertes du réacteur, le rendement thermique η_{th} . Dans ces conditions, on ne parle plus de température adiabatique de fin de réaction, mais plutôt de température de fin de réaction T_{react} .

L'équation enthalpique s'écrit alors : $m h_2(T_{react}) = m h_1 + Q \eta_{react} \eta_{th}$ (5)

T_{react} peut être obtenue par inversion de la fonction enthalpie.

$Q \eta_{react}$ se calcule facilement à partir de la réaction (1) ou (2) :

$$Q \eta_{react} = -\Delta H_r = (1 - k) h_{fCO} + (1 - k) h_{fH_2O} - (1 - k) h_{fCO_2}$$

$$Q \eta_{react} = 41\,170 (1 - k) \text{ kJ/kmole de CO}$$

L'algorithme de recherche de la solution est une dichotomie pour k variant entre 0,01 et 0,999. Deux valeurs de T sont estimées, l'une à partir des équations (3) et (4), l'autre à partir de (5). On itère jusqu'à ce qu'elles soient égales.

Avec une unité de conversion à deux réacteurs, la composition finale du gaz converti est donnée figure 2.

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
CO	0,0008426353	0,001676575
CO2	0,1073435	0,3355748
H2	0,4212778	0,06032501
CH4 `méthane	0,003366579	0,003836472
H2O	0,4661071	0,5964731
N2	0,001062407	0,002114077

Figure 2 : composition du gaz converti