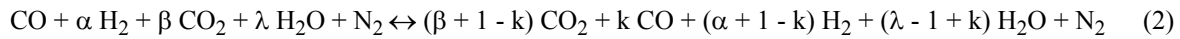


## Utilisation du composant de conversion du CO

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



Le composant ShiftCO reçoit en entrée un gaz dont la composition peut être quelconque, pourvu qu'il contienne CO et H<sub>2</sub>O, et que la fraction molaire de H<sub>2</sub>O soit supérieure à celle de CO ( $\lambda \geq 1$ ). Il recalcule complètement la composition du corps de sortie, qui doit lui aussi être un gaz composé, faute de quoi la modification n'est pas prise en compte. Le composant étant adiabatique, il n'admet pas de thermocoupleur.

Le composant recherche la solution d'un système de trois équations à trois inconnues non linéaire. Les deux premières représentent la réaction chimique tandis que la troisième exprime l'équilibre enthalpique du réacteur : la chaleur libérée par la réaction sert à échauffer les réactifs et les produits, jusqu'à la température T.

Avec les hypothèses retenues pour le modèle (cf. note de modélisation), le calcul du composant ne requiert aucun autre paramètre. Son écran est donc particulièrement simple (figure 1).

Figure 1 : Ecran du composant

Le schéma dans ThermoOptim d'un exemple d'unité de conversion est donné figure 2, avec, avant l'entrée du composant externe, un mélangeur destiné à humidifier le gaz pour que  $\lambda \geq 1$  (shiftCOH2O.prj et .dia).

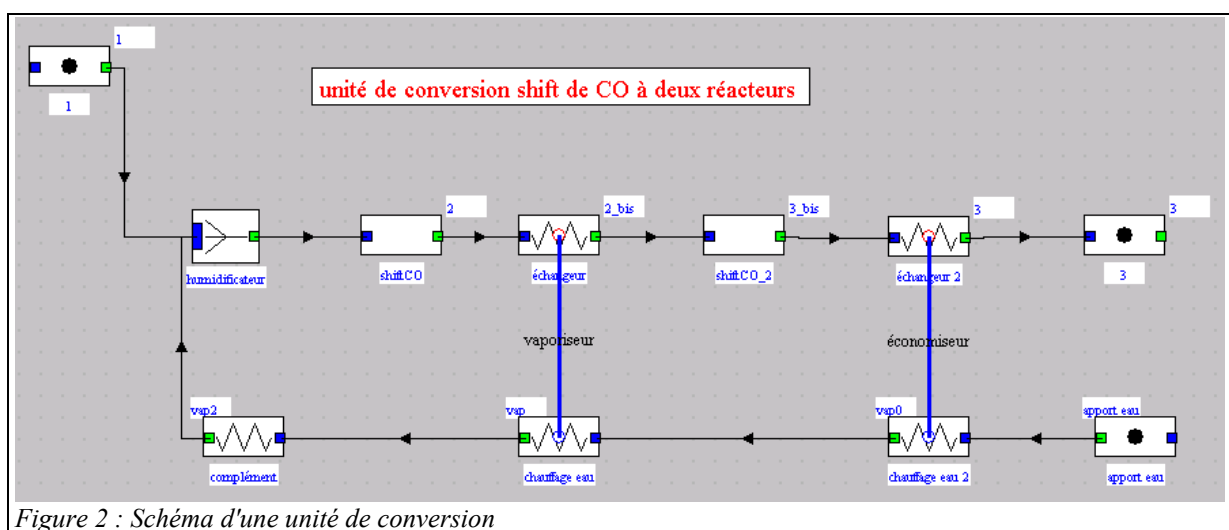


Figure 2 : Schéma d'une unité de conversion

Le modèle fait appel à un composant externe modélisant le réacteur, utilisé deux fois, sous les noms de "shiftCO" et "shiftCO\_2". Les autres éléments sont des composants standard du noyau de ThermoOptim.