

Modélisation d'un reformeur de vapocraquage dans ThermoOptim

Par souci de simplicité, nous supposons dans cet exemple que le gaz naturel ne contient que du méthane, de l'éthane, du gaz carbonique et de l'azote. La prise en compte d'autres composants réactifs ou inertes ne pose pas de problème particulier, si l'on fait l'hypothèse que les autres réactifs réagissent complètement comme l'éthane.

Le reformeur reçoit du gaz naturel humidifié, qui réagit selon les trois réactions :



La réaction de l'éthane peut être considérée comme complète, alors que les deux autres sont à l'équilibre, leurs constantes étant données par :

$$\ln(K_{p1a}) = 31,0152 - \frac{28\,357,7}{T} + \frac{610\,573}{T^2} \quad (4)$$

$$\ln(K_{p2}) = -3,57414 + \frac{3\,642,48}{T} + \frac{292\,593}{T^2} \quad (5)$$

Appelant F° le débit molaire de gaz naturel, x le débit molaire de CO issu de la réaction (1), y le débit molaire de CO₂ issu de (3), $w/2$ le débit molaire de CO issu de la réaction (2), a et d les fractions molaires de CH₄ et de CO₂ dans le gaz naturel, et SC le nombre de moles de H₂O par mole de gaz naturel, on peut écrire :

$$F_{\text{CO}} = x + 2w - y$$

$$F_{\text{CO}_2} = y + d.F^\circ$$

$$F_{\text{H}_2} = 3x + 5w + y$$

$$F_{\text{CH}_4} = a.F^\circ - x$$

$$F_{\text{H}_2\text{O}} = SC.F^\circ - x - 2w - y$$

$$F_{\text{tot}} = (1+SC).F^\circ + 2x + 4w$$

$$K_{1a}(T) = P^2 \cdot (F_{\text{H}_2}^3 \cdot F_{\text{CO}}) / (F_{\text{CH}_4} \cdot F_{\text{H}_2\text{O}} \cdot F_{\text{tot}}^2) \quad (6)$$

$$K_2(T) = (F_{\text{CO}_2} \cdot F_{\text{H}_2}) / (F_{\text{CO}} \cdot F_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (7)$$

Les deux équations d'équilibre (6) et (7) forment un système non linéaire difficile à résoudre. On peut cependant remarquer que celle de la réaction (7) est une forme quadratique en x et y , qui permet d'exprimer formellement l'une de ces deux variables par rapport à l'autre comme solution d'une équation du second degré.

Si l'on exprime x en fonction de y de cette manière et que l'on réinjecte la valeur obtenue dans l'autre équation, on obtient une formulation implicite en y , qui peut être résolue numériquement plus facilement. Une seule des deux solutions de l'équation du second degré doit être retenue, et l'équation en y ne possède qu'une solution positive réelle. L'intervalle de recherche de sa valeur n'est cependant pas évident à trouver, notamment du fait de l'existence d'une singularité dans la fonction, correspondant à l'annulation de F_{CH_4} .

x étant fonction croissante de y , une solution consiste à chercher une borne supérieure y_{max} de l'intervalle en résolvant l'équation $y = f(a.F^\circ)$ solution de (7). La borne inférieure peut être choisie proportionnelle à y_{max} : $y_{\text{min}} = 0.9 y_{\text{max}}$. La solution de (6) est alors facilement obtenue par dichotomie entre ces deux bornes.

Le modèle que l'on peut retenir est dans ces conditions le suivant :

- 1) la composition des espèces est donnée par la résolution des équations ci-dessus : à partir des débits molaires de combustible humidifié en entrée, on détermine les compositions et débits molaires des différentes espèces en sortie, le seul paramètre à prendre en compte étant la température du réacteur ;
- 2) la chaleur nécessaire à la réaction peut alors être calculée et imposée par un thermocoupleur ;
- 3) cette chaleur est fournie par une chambre de combustion située directement en amont du thermocoupleur

Dans Thermoptim, le reformeur de vapocraquage est représenté par une transfo externe connectée à un thermocouple. La classe s'appelle Reformer.

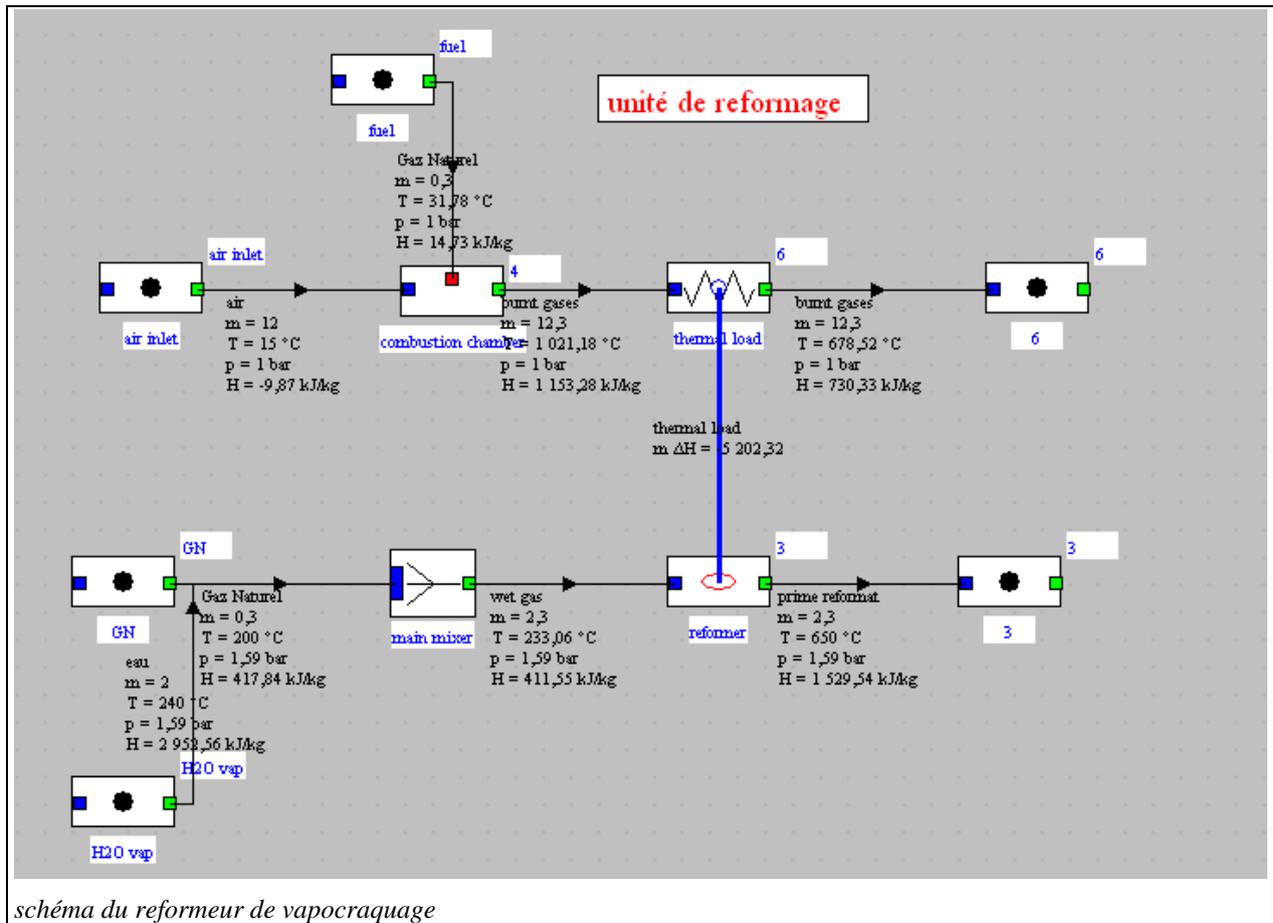


schéma du reformeur de vapocraquage

L'écran du composant reformeur est :

transfo: reformer type: externe

type énergie: autre débit imposé système fermé observée

point amont: 2 débit: 2,3 système ouvert

m ΔH: 2 571,37

T (°C): 233,06 CH4 reformer

P (bar): 1,59 Tcr (°C): 650.000

h (kJ/kg): 411,55

titre: 1

point aval: 3 F° : 0.01736 SC : 6.40 y : 0.01257 x : 0.01542

T (°C): 650

P (bar): 1,59

h (kJ/kg): 1 529,54

titre: 1

thermal load

Ecran du composant reformeur

Les débits d'entrée sont déterminés par les composants placés en amont de cette transfo et de la chambre de combustion. Comme ils sont exprimés en unités massiques, le débit molaire F° , la valeur de SC et les valeurs de x et y sont affichées sur l'écran de la transfo.

La puissance thermique apportée par le thermocoupleur est déterminée par la transfo.

nom: thermal load type: contre-courant

thermal fluid: thermal load process: reformer

Te: 1 021,17771318 Te: 650

Ts: 678,51990757 calculé Ts: 650,1 fluide méthode pinct.

m: 12,3 calculé m: 2,3 pincement minimum: 10

Cp: 1,23432943 Cp: 22 618,76915183

m ΔH: -5 202,31714381 m ΔH: 5 202,31714381

calculate exchange UA: 38,96613284

epsilon: 0,923163739 R: 0,000291836354

NUT: 2,56655817

DTML: 133,50868473

Ecran du thermocoupleur

Les compositions des gaz que l'on obtient sont données ci-dessous :

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
CH4 ` méthane	0,1243921	0,1113837
C2H6 ` éthane	0,008112529	0,01361569
CO2	0,001352088	0,003321271
N2	0,001352088	0,002114077
H2O	0,8647912	0,8695652

gaz naturel humidifié, PCI : 6 217 kJ/kg

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
CO	0,03018695	0,06006241
CO2	0,07799918	0,2438392
H2	0,3919335	0,05612304
CH4 ` méthane	0,003366579	0,003836472
H2O	0,4954514	0,6340248
N2	0,001062407	0,002114077

réformat primaire, PCI : 7 531 kJ/kg