

## Modèle de conversion du CO

La conversion du CO en CO<sub>2</sub> se fait selon la réaction d'équilibre (1), équimolaire, et donc non influencée par la pression.



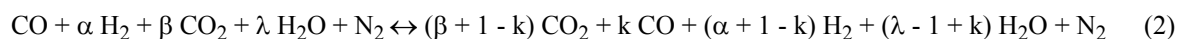
Cette réaction montre qu'à la stœchiométrie, il faut une mole de H<sub>2</sub>O par mole de CO.

Considérons un gaz de composition donnée figure 1 (afin que la réaction de conversion du CO soit la plus totale possible, on l'effectue avec un excès d'eau voisin de 10 %).

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
CO	0,364922	0,4898814
H <sub>2</sub>	0,1344096	0,01298573
CO <sub>2</sub>	0,02284963	0,04819479
H <sub>2</sub> O	0,4018773	0,3469813
N <sub>2</sub>	0,07594142	0,1019568

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 (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).



Nous avons établi un modèle de cette réaction en supposant qu'elle est à l'équilibre, la constante d'équilibre étant donnée par le tableau ci-contre.

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

Température °C	K
227	134
327	27.6
427	8.95
527	4.11
627	2.20
727	1.37

$$\ln(K_p) = -3,69088 + \frac{3710,59}{T} + \frac{292\,593}{T^2} \quad (3)$$

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 :

$$K_p = \frac{[\text{CO}_2][\text{H}_2]}{[\text{CO}][\text{H}_2\text{O}]} = \frac{(1 - k)^2}{(\lambda - 1 + k)k} = \frac{(\beta + 1 - k)(\alpha + 1 - k)}{(\lambda - 1 + k)k} \quad (4)$$

Connaissant  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\lambda$  et T, c'est-à-dire K<sub>p</sub>, k est aussi donné par une équation du second degré.

En pratique cependant, T, K<sub>p</sub> 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<sub>ad</sub> 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 h<sub>1</sub>), 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<sub>ad</sub> :

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

On peut éventuellement introduire un terme supplémentaire pour tenir compte de pertes du réacteur, le rendement thermique  $\eta_{th}$ . 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	0,04794129	0,06435771
H2	0,4513904	0,04361024
CO2	0,3398304	0,7167755
H2O	0,08489655	0,07329977
N2	0,07594142	0,1019568

Figure 2 : composition du gaz converti