

TP 3 – Réacteur de Synthèse de l'ammoniac

On se propose d'étudier par parties dans ce TP un procédé de synthèse de l'ammoniac.

Partie 1 Réacteur de synthèse d'ammoniac

Le schéma ci-contre représente le flowsheet d'un réacteur de synthèse de l'ammoniac.

Le flux d'entrée du réacteur est composé de l'argon, du méthane, de l'azote, et de l'hydrogène.

La réaction de synthèse est donnée par :

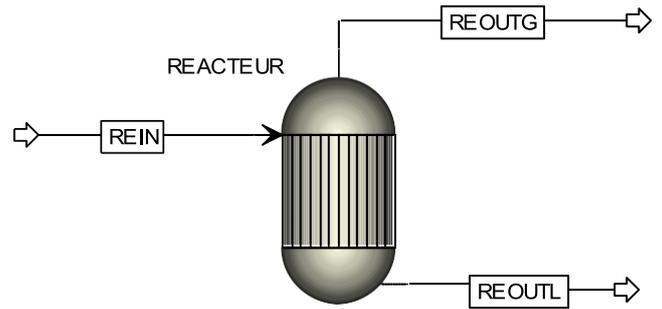
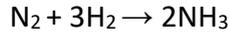


Figure 1 Réacteur de synthèse de l'ammoniac

Conditions opératoires :

Flux d'entrée	
Température	380 °c
Pression	280 bar
Débit	0,5 kmol/sec

Composition	
Composés	Fractions molaires :
AR	0.01
CH4	0.01
N2	0.245
H2	0.735

Simulation :

- Lancer le logiciel Aspen Plus, et choisir un modèle de type *General with metric units*. Enregistrer une première fois le document.
- Construire le flowsheet en choisissant comme réacteur *REquil*. Ce dernier modélise un réacteur dans lequel l'équilibre est fixé au moyen d'une approche stœchiométrique. Il calcule simultanément les équilibres chimiques et les équilibres entre phases (pas plus de deux). Dans ce cas, cela permettra de calculer la réaction qui a lieu en phase gazeuse en supposant que l'équilibre est atteint.
- Renseigner les différentes rubriques en utilisant la touche *Next*. On choisira ainsi :
 - La méthode *RK-Soave* (Redlich-Kwong-Soave) comme modèle pour estimer les coefficients d'équilibre liquide-vapeur et l'enthalpie des fluides.
 - Le réacteur fonctionne de façon adiabatique et à la pression de 280 bar. il faut aussi définir la réaction de synthèse dans l'onglet *Reactions* du bloc *REACTEUR*
- Du tableau des résultats, relever la fraction molaire du NH_3 en la commentant.

Etude paramétrique

Examiner l'influence de la température du flux d'entrée sur la fraction molaire en NH_3 à la sortie du réacteur (étude desensibilité).

- Dans la rubrique *Model Analysis Tool*, créer une nouvelle étude de sensibilité nommée *TEMP*.
- Dans l'onglet *Define*, définir une variable *XNH3* et la spécifier comme étant la fraction molaire en NH_3 du flux de sortie en phase gazeuse.
- Dans l'onglet *Vary*, définir une nouvelle variable *TEMP*. Il s'agit d'une variable de flux : la température du flux d'entrée dans le réacteur, à faire varier entre 250 et 500°C (25 points suffisent).
- Dans l'onglet *Tabulate*, demander au programme de lister dans la colonne 1 les valeurs de *XNH3* obtenues lorsque la température de *REIN* varie. Sauvegarder les résultats.

Application

1. Selon l'étude de sensibilité, la réaction est-elle endo ou exothermique ? En restant dans les bornes posées pour cette étude de sensibilité, quelle température de flux d'entrée choisir pour maximiser la synthèse d'ammoniac ?
2. En pratique, le procédé industriel de synthèse d'ammoniac (basé sur le procédé Haber-Bosch) fonctionne à des températures de l'ordre de 450-600°C. Est-ce en accord avec les résultats de la simulation ? Quelle pourrait être la raison à cela ?
3. De la même manière que cela a été fait pour la température du flux d'entrée, réaliser une étude paramétrique pour examiner l'influence de la pression du réacteur sur la synthèse d'ammoniac. Utiliser pour cela un réacteur adiabatique. Quelle pression préconiser ?