

Paramètres étudiés

2.1 - Réactifs du reformage

- **Combustible**

Le thème de nos recherches concerne les hydrocarbures liquides et spécifiquement l'essence. L'essence est un mélange complexe d'hydrocarbures dont les chaînes carbonées sont comprises entre C₄ et C₁₂. Elle est généralement modélisée par l'Iso-octane (C₈H₁₈) qui en est l'un des principaux constituants.

Produits pétroliers	Composition
Gaz naturel	C ₁ -C ₂
Gaz de pétrole liquéfié (GPL)	C ₃ -C ₄
Essence	C ₄ -C ₁₂
Kérosène	C ₁₂ -C ₁₈
Diesel (gazole)	C ₁₀ -C ₂₄
Fiouls	C ₂₀ -C ₃₀₀
Bitumes	C ₄₀ -C ₃₀₀

Table. 7 - Composition de quelques produits pétroliers [111, 112]

Les réactifs du reformage sont : les hydrocarbures, l'eau et l'oxygène. La composition des réactifs peut être définie à l'aide de ratios. Cela permet, de comparer différents hydrocarbures et différents procédés.

- **Ratio O/C**

$$\text{ratio } O/C = O_{\text{air}}/C = \frac{n_o}{n_c} \quad [\text{Eq. 36}]$$

avec n_c le nombre d'atomes de carbone et n_o le nombre d'atomes d'oxygène provenant de l'air.

- **Ratio H₂O/C**

$$\text{ratio } H_2O/C = \frac{n_{H_2O}}{n_c} \quad [\text{Eq. 37}]$$

avec n_c , le nombre d'atomes de carbone et n_{H_2O} , le nombre de molécules d'eau.

- **Température d'entrée des réactifs :** T_{in} [K]

Sauf mention contraire, le mélange est introduit à la température $T_{in} = 400$ K

2.2 - Paramètres de réaction

Les paramètres de réaction sont au nombre de quatre : le volume du réacteur, la pression dans le réacteur, le débit total et la puissance nette fournie au système. Le volume, la pression et le débit total interviennent dans la modélisation de la cinétique chimique où ils déterminent directement le temps de séjour des espèces.

- **Volume du réacteur :** V [L]

La modélisation a porté sur des volumes compris entre 0.5 L et 30 L

- **Pression dans le réacteur :** P [atm]

La plage de pression étudiée est comprise entre 1 et 100 atmosphères.

- **Débit total :** Q_{tot} [g/s]

Il est calculé à partir du débit d'hydrocarbure Q_{CnHm} et des ratios O/C et H₂O/C. Dans la modélisation cinétique le débit d'hydrocarbure est égal à 0.1 g/s.

- **Puissance injectée dans le réacteur :** W [W]

Afin de s'affranchir de l'aspect quantitatif, la puissance nette fournie au système ne sera pas exprimée en watt, mais en pourcentage du pouvoir calorifique du carburant injecté :

$$x_{PCI} = \frac{W}{W_{C8H18}} = \frac{W}{Q_{C8H18} \cdot PCI_{C8H18}} \text{ et } \%_{PCI} = 100 \cdot x_{PCI} \quad [Eq. 38]$$

Avec : “ Q_i ” le débit molaire de l'espèce i , “ W ” la puissance électrique nette fournie au système, “ W_{C8H18} ” le pouvoir calorifique du carburant et “ PCI_{C8H18} ” le pouvoir calorifique inférieur molaire de l'iso-octane.

2.3 - Paramètres de conversion

- **Rendement de conversion :** η_{conv}

Le rendement énergétique de conversion utilisé dans la suite de ce rapport est défini ci-dessous. Il est directement proportionnel à la somme des moles d'hydrogène et de monoxyde de carbone produits. On suppose ainsi que le monoxyde de carbone peut potentiellement être converti en hydrogène par “Water Gas Shift” dans une étape ultérieure. La puissance injectée W est prise en compte dans la formule du rendement. Elle provient dans notre cas de la puissance électrique injectée dans le plasma. De manière générale dans la modélisation, cela correspond à tout apport externe de puissance.

$$\eta_{conv} = \frac{(Q_{CO} + Q_{H2}) \cdot PCI_{H2}}{Q_{C8H18} \cdot PCI_{C8H18} + W} \quad [Eq. 39]$$

Avec : “ Q_i ” le débit molaire de l'espèce i , “ W ” la puissance nette fournie au système et “ PCI_i ” le pouvoir calorifique inférieur de l'espèce i .

Dans la suite de ce document, nous l'exprimerons sous le terme : “rendement de conversion”.

- **Taux de conversion :** t_{conv}

Le taux de conversion représente le bilan entre le carbone présent dans les produits gazeux analysés (méthane, monoxyde de carbone et dioxyde de carbone) et le carbone initial de l'hydrocarbure.

$$t_{conv} = \frac{Q_{CO} + Q_{CO_2} + Q_{CH_4}}{8 \cdot Q_{C_{8H_{18}}}} \quad [Eq. 40]$$

Avec : “ Q_i ” le débit molaire de l'espèce i

