

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE SALAH BOUBNIDER CONSTANTINE 3



FACULTE DE GENIE DES PROCÉDES

DEPARTEMENT DE GENIE PHARMACEUTIQUE

N° d'ordre:.....

Série:.....

Mémoire de Master

Filière : Génie des procédés

Spécialité : Génie pharmaceutique

**MODELISATION ET SIMULATION DE LA REACTION DE
WATER GAS SHIFT POUR LA PRODUCTION
D'HYDROGENE**

Dirigé par :

DEHIMI Leila

Grade: M.C.B

Présenté par :

CHIHEB Nour El Imen

SALMI Hadjer

**Année Universitaire : 2018/2019
Session (Juillet)**

Sommaire

Listes des figures

Liste des tableaux

Abréviations et nomenclature

Introduction générale 1

Chapitre I : Synthèse bibliographique

I.1 Historique 3

I.2 L'hydrogène 4

I.3 Caractéristiques de l'hydrogène 4

I.4 Utilisation de l'hydrogène 5

I.5 Production d'hydrogène 5

I.6 Production d'hydrogène par voie thermochimique 6

I.6.1 Vaporeformage (Reformage à vapeur) 6

I.6.2 Oxydation partielle 7

I.6.3 Reformage Autotherme (ATR) 8

I.6.4 Reformage à sec 9

I.7 Pile à Combustibles (Fuel cell) 9

I.7.1 Principe de fonctionnement d'une pile à combustible 10

I.8 Réaction de water gas shift 12

I.8.1 Choix du catalyseur 13

I.8.2 Choix du support 15

I.8.3 Origine de la désactivation des catalyseurs 15

I.8.3.1 Dépôt de coke 16

I.8.3.2 Frittage de la surface active 16

I.8.3.3 Empoisonnement des catalyseurs	16
I.9 Membranes et la séparation membranaire	17
I.9.1 Définition des membranes	17
I.9.2 Classification des membranes	18
I.9.2.1 Membranes denses	19
I.9.2.2 Membranes poreuses	19
I.9.3 Mode de transport dans les membranes	19
I.9.4 Réacteurs membranaires	20
I.9.4.1 Réacteurs à membrane interne	21
I.9.4.2 Réacteurs à membrane catalytique	21
I.9.5 Utilisation des réacteurs membranaire	22
I.9.5 Conclusion	23

Chapitre II : Modélisation et simulation

II.1 Introduction	24
II.2 Aspect thermodynamique	24
II.3 Schéma réactionnel et cinétique	25
II.4 Bilan de matière et le calcul des pressions partielles	26
II.5 Perméation de l'hydrogéné à travers la membrane	30
II.6 Hypothèses simplificatrices	31
II.7 Réacteur et conditions opératoires	32
II.8 Méthode de résolution	34

Chapitre III : Résultats et discussion

III.1 Effet de la température	35
III.2 Effet de pression dans la zone de la réaction	37
III.3 Effet du rapport H ₂ O/CO	39
III.4 Conclusion	42
Conclusion générale	43
Références bibliographique	45

Résume :

Dans ce travail, une membrane dense à base de nickel pour obtenir de l'hydrogène pur est couplée à un réacteur membranaire. Ce catalyseur Fe/Cr est particulièrement adapté pour effectuer le procédé de water gas shift (WGS) à haut température. Le modèle proposé est homogène, simule le procédé dans des conditions adéquates. Les conditions opératoires sont choisies de telle façon à obtenir les meilleurs résultats en termes de conversion du monoxyde de carbone et par conséquent un bon rendement en hydrogène perméé. Les principaux résultats obtenus par simulation montrent que, la température, la pression totale et les conditions d'alimentations sont les principaux paramètres qui peuvent affectant la zone réactionnelle.

Mots-clés : hydrogène, water-gas-shift, catalyseur Fe/Cr, réacteur membranaire.

Abstract :

In this work, a dense nickel-based membrane to obtain pure hydrogen is coupled to a membrane reactor. This Fe / Cr catalyst is particularly suitable for performing the water gas shift (WGS) process at high temperature. The proposed model is homogeneous, simulates the process under adequate conditions. The operating conditions are chosen so as to obtain the best results in terms of conversion of carbon monoxide and consequently a good yield of hydrogen permeates. The main results obtained by simulation show that the temperature, the total pressure and the feed conditions are the main parameters that can affect the reaction zone.

Keywords: hydrogen, water-gas-shift, Fe / Cr catalyst, membrane reactor

ملخص

في هذا العمل، يقترن غشاء كثيف قائم على النيكل للحصول على هيدروجين نقي بمفاعل غشاء. هذا المحفز Fe / Cr مناسب بشكل خاص لأداء عملية تحويل غاز الماء (WGS) في درجة حرارة عالية. النموذج المقترح متجانس، يحاكي العملية في ظل ظروف مناسبة. يتم اختيار ظروف التشغيل للحصول على أفضل النتائج من حيث تحويل أول أكسيد الكربون وبالتالي إنتاجية جيدة من تتخلل الهيدروجين. أظهرت النتائج الرئيسية التي تم الحصول عليها عن طريق المحاكاة أن درجة الحرارة والضغط الكلي وظروف التغذية هي المعلمات الرئيسية التي يمكن أن تؤثر على منطقة التفاعل.

الكلمات المفتاحية: هيدروجين ، ماء-تحويل-غاز ، Fe / Cr محفز ، مفاعل

غشاء