

Modélisation d'un réacteur PROX d'oxydation préférentielle

Dans un réacteur PROX d'oxydation préférentielle, une petite quantité d'oxygène est rajoutée au gaz de synthèse sortant du reformeur pour oxyder préférentiellement le CO en présence d'un catalyseur à base de platine. Une petite quantité d'hydrogène réagit elle aussi, selon les deux réactions exothermiques :



Cette technique permet de quasiment éliminer le CO, au prix d'une consommation modique d'hydrogène.

Le réacteur d'oxydation préférentielle "PROX" est constitué d'un lit fixe de catalyseur, traversé par le mélange de réactifs (air + "reformat secondaire"). Du fait de l'exothermicité des réactions, il est refroidi par un circuit d'eau. On le modélise par un réacteur où les réactions sont quasi-totales (95 à 100 %) et dont les produits constituant le "reformat tertiaire" sont refroidis par un thermocoupleur. L'apport d'oxygène est réalisé par mélange avec de l'air.

Les hypothèses sont les suivantes :

- La réaction avec le CO a lieu en premier (d'où le nom d'oxydation préférentielle), avec le degré d'avancement x_1 par rapport au CO. La réaction avec l'hydrogène prend place ensuite, avec l'avancement x_2 (défini par rapport à l'oxygène restant). Cette sélectivité est due au catalyseur et non à la thermodynamique.
- Ensuite x_1 et x_2 (comprises entre 0 et 1) sont des paramètres, déterminés par la cinétique des deux réactions,

Leurs valeurs sont de l'ordre de 0,99 et 0,98 respectivement

La composition des espèces se déduit de la réaction globale ci-dessous, où z représente la fraction molaire d'hydrogène ayant réagi.



Compte tenu de sa définition la relation entre z et x_2 peut être obtenue :

$$x_2 = \frac{\varepsilon - x_1/2 - z/2}{\varepsilon - x_1/2} = 1 - \frac{z}{\varepsilon - x_1/2}$$

$$z = (1 - x_2)(2\varepsilon - x_1)$$

La composition des gaz en entrée du réacteur Prox (et en sortie du réacteur ShitCO) est donnée Figure 1.

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
CO	0,0008426353	0,001676575
CO2	0,1073435	0,3355748
H2	0,4212778	0,06032501
CH4 ` méthane	0,003366579	0,003836472
H2O	0,4661071	0,5964731
N2	0,001062407	0,002114077

Figure 1 : composition du gaz en sortie du réacteur ShitCO

La composition des gaz en sortie du réacteur Prox est donnée figure 2. La concentration molaire en CO est tombée à 8,3 ppm, soit un peu moins d'1/% de sa valeur d'entrée.

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
H2	0,4177032	0,05925949
CO2	0,1072782	0,3322662
H2O	0,4623027	0,5861285
CH4 ` méthane	0,003338584	0,003769353
N2	0,009238929	0,01821432
CO	0,000008356284	0,00001647244
Ar	0,00009432549	0,0002651986
O2	0,00003574584	0,00008049791

Figure 2 : composition du gaz en sortie du réacteur Prox