





دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

پایان نامه کارشناسی ارشد

گرایش طراحی فرآیندها

عنوان

مدل سازی CFD میکروراکتور تولید هیدروژن از متانول

توسط

نجمه چغانه

استاد راهنما

دکتر فرامرز هرمزی

شهریور ۹۰

این اثر ناچیز تقدیم به محضر پاک

شهیدان گمنام سال های دفاع

بایاد شهید گمنام آرمیده در دانشگاه سمنان

و شهیدان و الامقام جهاد علمی

بایاد مهندس شهید احمدی روشن

تقدیر و شکر

سجده سپاس بر محضر حضرت حق می سایم که بی مدد او هیچ کار به سرانجام نخواهد رسید.
نیز از راهبانی های استاد کراتقدر- آقای دکتر هرمزی- شکر می نمایم که شکر بنده، مقدمه شکر
خالق است.

بوسه ی قدردانی بردستان زحمت کش پدر و مادر و خانواده ی بزرگوارم می زنم که صبرشان
پشتوانه ی همیشگی ام بوده است.

و در انتها از همراهی های همیشگی همسرم هم قدردانی می نمایم که صبرش راهگشا بود و لطفش توشه

راه.

چکیده

هدف از این پژوهش، مطالعه‌ی عددی فرآیند ریفرمینگ با بخار متانول درون یک میکروکانال صفحه‌ای با دیواره‌ی پوشش داده شده از کاتالیزور است که در آن به مقایسه مقاومت‌های موجود در برابر واکنش برای تعیین وجود یا عدم وجود محدودیت‌های انتقال جرم، بررسی اثر پارامترهای سیال- گرمایی و نیز شکل سطح مقطع کانال بر روی بازده میکروکانال پرداخته شده است. برای این منظور معادلات بقا شامل معادله‌ی انتقال جرم، مومنتوم، حرارت و اجزاء همراه با واکنش شیمیایی با استفاده از دینامیک سیال محاسباتی حل شد. برای حل از روش حجم محدود و الگوریتم سیمپل استفاده شد.

برای بررسی اثر شکل مقطع، عملکرد کانال‌هایی با مقاطع مستطیل، دوزنقه، مثلث و نیم دایره مقایسه شد. نتایج نشان داد که زاویه‌ی رأس در کانال مثلثی، همچنین نسبت‌های قاعده‌ی بزرگ به ارتفاع و قاعده بزرگ به قاعده کوچک در کانال دوزنقه‌ای، مشخصه‌هایی موثر در تبدیل متانول هستند. به‌گونه‌ای که در شرایط مفروض، افزایش زاویه رأس در کانال مثلثی و نسبت قاعده‌ی بزرگ به ارتفاع در کانال دوزنقه منجر به کاهش تبدیل متانول شد. همچنین تبدیل متانول در کانال مستطیلی همواره از کانال دایره‌ای بالاتر بوده و نیز از دو کانال مثلثی و دوزنقه‌ی خاصی که فرض شد نیز بالاتر است. برای رسیدن به تبدیل یکسان در کانال‌های دایره، دوزنقه و مثلث، نیاز به وزن بیش‌تری از کاتالیزور در کانال مثلثی است. برای کانال‌هایی با ارتفاع و پهنای برابر و عدد رینولدز برابر جریان ورودی، تبدیل در کانال مستطیلی با کانال دوزنقه‌ای خاص بررسی شده نزدیک به هم و بالاتر از کانال مثلثی است. در این حالت افزایش نسبت قاعده‌ی بزرگ به قاعده‌ی کوچک در کانال دوزنقه، تبدیل متانول را افزایش داد. جمع‌بندی این نتایج نشان می‌دهد که سطح مقطع راکتور میکروکانال می‌تواند در بهبود عملکرد آن موثر باشد و باید در انتخاب راکتور میکروکانال بهینه در نظر گرفته شود.

کلمات کلیدی: راکتور میکروکانال، هیدروژن، متانول، ریفرمینگ، دینامیک سیال

محاسباتی

صفحه	فهرست عناوین
۱.....	۱. مقدمه.....
۲.....	۱.۱ اهمیت و جایگاه پروژه.....
۲.....	۱.۱.۱ جهان و چالش انرژی.....
۳.....	۲.۱.۱ پیل سوختی.....
۵.....	۳.۱.۱ تولید هیدروژن از متانول.....
۷.....	۴.۱.۱ دینامیک سیالات محاسباتی.....
۱۱.....	۲.۱ شرح مسأله و هدف کار.....
۱۲.....	۳.۱ مروری بر فصلهای گزارش.....
۱۴.....	۲. مقدمه‌ای بر میکروراکتور و مروری بر مطالعات انجام شده.....
۱۵.....	۱.۲ میکرو راکتورها.....
۱۶.....	۱.۱.۲ تفاوت میکروراکتور با راکتورهای متداول جاری.....
۱۷.....	۲.۱.۲ کاربرد میکروراکتورها.....
۱۸.....	۳.۱.۲ انواع میکروراکتور.....
۱۹.....	۲.۲ مروری بر مطالعات انجام شده.....
۱۹.....	۱.۲.۲ تولید هیدروژن از متانول.....
۲۱.....	۲.۲.۲ میکروراکتور با دیواره پوشش داده شده.....
۲۲.....	۳.۲.۲ ابعاد مدلسازی.....
۲۵.....	۴.۲.۲ هندسه.....
۳۶.....	۵.۲.۲ جمع بندی مرورکارهای انجام شده.....
۴۱.....	۳. مدل سازی عددی.....
۴۲.....	۱.۳ تشریح مسأله.....
۴۴.....	۲.۳ هندسه.....
۴۵.....	۴.۳ معادلات حاکم.....
۵۰.....	۵.۳ مدل سرعت واکنش.....
۵۱.....	۶.۳ شرایط مرزی.....
۵۵.....	۳.۳ شبکه بندی.....

۴.۳	حل عددی	۵۶
4.	نتایج شبیه‌سازی دینامیک سیال محاسباتی	۵۹
۱.۴	اعتبار سنجی	۶۰
۳.۴	بررسی مقاومت‌های موجود در برابر واکنش	۶۴
۳.۴	بررسی اثر دما	۶۸
۴.۴	بررسی اثر ترکیب خوراک ورودی	۶۹
۵.۴	بررسی اثر سرعت خوراک ورودی	۷۱
۶.۴	بررسی اثر هندسه کانال	۷۲
۱.۶.۴	مقایسه‌ی تبدیل متانول در کانال‌ها در شرایط هیدرودینامیکی برابر	۷۴
۲.۶.۴	مقایسه‌ی تبدیل متانول در کانال‌ها در میزان برابر کاتالیزور مصرفی و دبی یکسان خوراک ورودی	۹۱
۵.	نتیجه‌گیری و ارائه‌ی پیشنهادات	۹۸
۱.۵	نتیجه‌گیری	۹۹
۲.۵	ارائه‌ی پیشنهادات	۱۰۱
۶.	مراجع	۱۰۲

فهرست شکل‌ها	صفحه
شکل ۱-۲: نمایی از قطعه‌ی مدل شده حاوی ۴ کانال موازی [۳۱].....	۲۹
شکل ۲-۲: اثر نسبت ارتفاع به طول کانال مستطیلی بر روی تبدیل متانول در دماهای مختلف [۲۴].....	۳۰
شکل ۳-۲: نمایی از کانال مدل شده [۳۲].....	۳۲
شکل ۴-۲: متوسط ضریب انتقال حرارت بر حسب عدد رینولدز در کانال‌های مختلف [۳۵].....	۳۴
شکل ۵-۲: مقایسه‌ی تعداد مقالات عددی و تجربی منتشر شده در دهه‌ی اخیر در جامعه آماری بررسی شده ۳۶	۳۶
شکل ۶-۲: مقایسه‌ی موضوعی مقالات بررسی شده.....	۳۷
شکل ۱-۳: طرح ساده‌ای از کانال مدل شده.....	۴۳
شکل ۲-۳: نمایی از هندسه‌ی تولید شده برای نیمی از راکتور همراه با تبیین مرزها: S ، O و W به ترتیب	
نشانه‌ی مرز ورودی، خروجی، تقارن و دیواره.....	۵۲
شکل ۳-۳: نمای بخشی از کانال شبکه‌بندی شده.....	۵۶
شکل ۱-۴: نمایی از هندسه مدل شده و شبکه بندی آن.....	۶۱
شکل ۲-۴: تغییرات تبدیل متانول با تغییر نسبت وزن کاتالیزور به دبی مولی خوراک ورودی: خط پیوسته، بیانگر	
نتایج عددی کار حاضر و نقاط منفرد بیانگر نتایج کار تجربی لی [۲].....	۶۳
شکل ۳-۴: توزیع کسر مولی اجزای مخلوط گازی در صفحه میانی میکروراکتور در نسبت وزن کاتالیزور به دبی	
برابر با ۱/۴۴ (الف) متانول، ب) آب، ج) هیدروژن، د) دیاکسید کربن.....	۶۴
شکل ۴-۴: متوسط تغییرات تبدیل متانول نسبت به افزایش دمای ورودی در طول ۰/۱ متری کانال.....	۶۸
شکل ۵-۴: تغییرات متوسط کسر مولی اجزا نسبت با تغییر نسبت مولی بخار آب به متانول ورودی در صفحه	
خروجی راکتور در شرایط دبی مولی خوراک و دبی مولی متانول ورودی ثابت.....	۷۰
شکل ۶-۴: تغییرات متوسط تبدیل متانول نسبت با تغییر نسبت مولی بخار آب به متانول ورودی در صفحه خروجی	
راکتور در شرایط دبی مولی خوراک و دبی مولی متانول ورودی ثابت.....	۷۱
شکل ۷-۴: تغییرات متوسط تبدیل متانول نسبت به تغییر سرعت خوراک ورودی در صفحه خروجی کانال..	۷۲
شکل ۸-۴: طرح ساده‌ای از سطح مقطع کانال‌های بررسی شده.....	۷۴
شکل ۹-۴: متوسط تبدیل متانول در طول کانال مثلثی با زوایای رأس ۶۰، ۴۵ و ۹۰ درجه در شرایط قطر	
هیدرولیک برابره کانال.....	۷۸
شکل ۱۰-۴: متوسط تبدیل متانول در طول کانال دوزنقه‌ای در نسبت قاعده‌ی بزرگ به ارتفاع ۲/۲، ۱/۱ و ۰/۵ در	
شرایط قطر هیدرولیک برابر سه کانال.....	۸۱

- شکل ۴-۱۱: متوسط تبدیل متانول در طول کانال ذوزنقه‌ای در نسبت‌های قاعده‌ی بزرگ به قاعده‌ی کوچک ۱/۵، ۲/۲ و ۳/۵ در شرایط قطر هیدرولیک برابر سه کانال ۸۴
- شکل ۴-۱۲: متوسط تبدیل متانول در طول کانال‌هایی با سطح مقطع متفاوت در شرایط قطر هیدرولیک برابر کانال‌ها ۸۶
- شکل ۴-۱۳: تغییرات افت فشار در طول کانال‌هایی با سطح مقطع متفاوت در شرایط قطر هیدرولیک برابر کانال‌ها ۸۷
- شکل ۴-۱۴: نمایی از مقاطع کانال‌هایی با پهنا و ارتفاع برابر ۸۸
- شکل ۴-۱۵: نمودار تغییر متوسط تبدیل متانول در طول کانال‌های ذوزنقه با نسبت قاعده‌ی بزرگ به کوچک ۱/۴ و ۲/۵ در شرایط پهنا و ارتفاع برابر کانال‌ها و عدد رینولدز برابر خوراک ورودی ۸۹
- شکل ۴-۱۶: تغییرات متوسط تبدیل متانول در طول کانال با سطح مقطع متفاوت در شرایط پهنا و ارتفاع برابر کانال‌ها و عدد رینولدز برابر خوراک ورودی ۹۰
- شکل ۴-۱۷: تغییرات متوسط افت فشار در طول کانال با سطح مقطع متفاوت در شرایط پهنا و ارتفاع برابر کانال‌ها و عدد رینولدز برابر خوراک ورودی ۹۱
- شکل ۴-۱۸: تغییرات متوسط تبدیل متانول در طول کانال‌هایی با سطح مقطع متفاوت در شرایط برابری دبی خوراک ورودی و مقدار کاتالیزور مصرفی ۹۴
- شکل ۴-۱۹: تغییرات دما در صفحه‌ی تقارن الف) کانال مستطیلی ب) کانال نیم‌دایره‌ای ج) کانال ذوزنقه‌ای د) کانال مثلثی، در شرایط برابری دبی خوراک ورودی و مقدار کاتالیزور مصرفی ۹۵
- شکل ۴-۲۰: تغییرات دما در خط میانی کانال با سطح مقطع متفاوت در شرایط برابری دبی خوراک ورودی و مقدار کاتالیزور مصرفی ۹۶
- شکل ۴-۲۱: تغییرات متوسط افت فشار در طول کانال با سطح مقطع متفاوت در شرایط برابری دبی خوراک ورودی و مقدار کاتالیزور مصرفی ۹۷

صفحه	فهرست جدول‌ها
۲۶	جدول ۱-۲: برخی کارهای انجام شده در حوزه میکروراکتور مستطیلی [۲۵]
۳۸	جدول ۲-۲: برخی از کارهای انجام شده در حوزه‌ی شکل مقطع میکروراکتور
۴۰	جدول ۳-۲: برخی از کارهای انجام شده در حوزه‌ی شکل مقطع میکروکانال
۴۴	جدول ۱-۳: شرایط عملیاتی و خواص فیزیکی مورد استفاده [۱۵]
۵۲	جدول ۲-۳: شرایط اولیه برای حل معادلات حاکم
۵۳	جدول ۳-۳: شرایط مرزی برای حل معادلات حاکم در ورودی
۵۳	جدول ۴-۳: شرایط مرزی برای حل معادلات حاکم در خروجی
۵۴	جدول ۵-۳: شرایط مرزی برای حل معادلات حاکم در مرز تقارن
۵۴	جدول ۶-۳: شرایط مرزی برای حل معادلات حاکم در دیواره
۵۵	جدول ۷-۳: تبدیل متانول در شبکه بندی های مختلف کانال
۶۹	جدول ۲-۴: ترکیب خوراک ورودی
۷۵	جدول ۳-۴: ابعاد کانال‌ها و شرایط عملیاتی
۷۶	جدول ۴-۴: ابعاد کانال مثلثی در زوایای رأس مختلف
۷۷	جدول ۵-۴: متوسط تبدیل متانول به ازای سه اندازه از شبکه مختلف
۷۹	جدول ۶-۴: اثر زاویه‌ی رأس بر زمان تماس
۸۰	جدول ۷-۴: ابعاد کانال دوزنقه‌ای
۸۱	جدول ۸-۴: تبدیل متانول به ازای اندازه شبکه مختلف
۸۲	جدول ۹-۴: اثر α بر روی زمان تماس
۸۳	جدول ۱۰-۴: ابعاد کانال دوزنقه‌ای
۸۵	جدول ۱۱-۴: اثر γ بر روی زاویه‌ی تماس
۸۸	جدول ۱۲-۴: ابعاد کانال‌ها و شرایط عملیاتی
۹۳	جدول ۱۴-۴: ابعاد کانال‌ها و شرایط عملیاتی

نماد

غلظت جزء i در مخلوط	C_i
غلظت در سطح دیواره	C_s
ضریب نفوذ جرمی	D_{ik}
انرژی اکتیواسیون	E_a
ارتفاع کانال	h
هدایت حرارتی	k
ثابت بولتزمن	k_B
ضریب انتقال جرم	K_g
ثابت سرعت واکنش مشاهده شده	K_{obs}
ثابت سرعت واکنش	K_0
طول کانال	L
جرم مولکولی	M_w
تعداد اجزای شیمیایی در واکنش	N
فشار	P
ثابت عمومی گازها	R
دما	T
دمای دیواره	T_w
پهنای کانال	W
کسر مولی	X
کسر جرمی	Y
مختصات	x, y, z
مولفه‌های سرعت	U, v, w
تبدیل متانول	η
تابع اولیه‌ی برخورد نفوذی	Ω_D
ویسکوزیته	μ
دانسیته	ρ
قطر موثر لنار - جونز	σ_{in}

زیر نماد

اولیه	<i>Initial</i>
ورودی	<i>in</i>
خروجی	<i>out</i>
دیواره	<i>wall</i>
مطلق	<i>abs</i>
عملیاتی	<i>op</i>
مخلوط گازی	<i>mix</i>
جزء در مخلوط	<i>i</i>
متانول	<i>me</i>
آب	<i>wa</i>

فصل اول

مقدمه

۱.۱ اهمیت و جایگاه پروژه

در این پژوهش، مدل‌سازی دینامیک سیال محاسباتی تولید هیدروژن از متانول مورد بررسی قرار می‌گیرد. در بخش اول اهمیت تولید هیدروژن از متانول، میکروراکتورها و معرفی دینامیک سیال محاسباتی ارائه می‌شود.

۱.۱.۱ جهان و چالش انرژی

انرژی از دیرباز به عنوان موتور محرک جوامع بشری شناخته شده و با پیشرفت بشر بر اهمیت و تأثیر گذاری آن در زندگی افزوده شده است. با ازدیاد سریع جمعیت و گسترش جوامع شهری، تقاضای انرژی در جهان به شدت افزایش یافته است به گونه‌ای که پاسخ به آن را در صدر چالش‌های پیش‌روی سرمداران کشورها قرار داده است. تا چندین دهه قبل، سوخت‌های فسیلی مانند نفت، گاز و ذغال سنگ تنها بازیگران سناریوی تأمین انرژی جهان بوده‌اند اما روند نامناسب بهره‌گیری از این منابع، جهان را از یک سو با خطر اتمام این منابع و از سوی دیگر با اثرات مخرب زیست محیطی ناشی از احتراق آن‌ها روبه‌رو کرده است.

آنگونه که آمارها نشان می‌دهد تا ۲۵ سال دیگر (سال ۲۰۳۵ میلادی) نیاز انرژی جهان، ۶۰ درصد افزایش می‌یابد. از سوی دیگر رشد بی‌رویهی تولید گازهای گلخانه‌ای حاصل از سوزاندن سوخت‌های فسیلی، به شدت بر دمای زمین اثر گذاشته است، بگونه‌ای که اگر روند افزایش دمای زمین ادامه یابد، جهان در معرض نابودی قرار خواهد گرفت.

محدودیت منابع فسیلی و تأثیرات منفی آن بر روی محیط زیست، در کنار افزایش قیمت سوخت‌های فسیلی، منازعات سیاسی و تأثیرات آن بر روی ارائه‌ی انرژی پایدار از جمله دلایلی هستند که بسیاری از سیاستمداران و متخصصین مباحث انرژی و محیط زیست را به حرکت به سوی ایجاد ساختاری نوین مبتنی بر امنیت ارائه‌ی انرژی، حفظ محیط زیست و ارتقای کارایی

سیستم انرژی وادار کرده است. افزایش گرایش به سمت انرژی‌های نو مانند انرژی خورشیدی، انرژی باد و انرژی هسته‌ای دلیلی بر این مدعا است. در این بین هیدروژن یکی از بهترین گزینه‌ها برای ایفای نقش حامل انرژی در این سیستم جدید است.

هیدروژن بعنوان فراوان‌ترین عنصر موجود در سطح زمین به روش‌های مختلف قابل تولید است. از جمله ویژگی‌هایی که هیدروژن را از سایر گزینه‌های مطرح سوختی متمایز می‌کند، فراوانی، انتشار بسیار ناچیز آلاینده‌ها، برگشت‌پذیر بودن چرخه‌ی تولید و کاهش اثرات گلخانه‌ای آن است. سیستم انرژی هیدروژنی به دلیل استقلال از منابع اولیه انرژی، سیستمی دائمی، پایدار، فناپذیر، فراگیر و تجدیدپذیر است. پیش‌بینی می‌شود در آینده‌ای نه چندان دور تولید و مصرف آن بعنوان حامل انرژی در سراسر جهان گسترش یابد و اقتصاد هیدروژنی تثبیت شود؛ با این رویکرد، بسیاری بر این باورند که سوخت نهایی بشر هیدروژن بوده و بشر در آینده‌ای نه چندان دور عصر هیدروژن را تجربه خواهد کرد.

۲.۱.۱ پیل سوختی

عمل تبدیل انرژی شیمیایی موجود در هیدروژن به انرژی الکتریکی توسط دستگاهی به نام پیل سوختی انجام می‌شود. در واقع اهمیت فناوری پیل سوختی در یک سیستم انرژی بر پایه هیدروژن به گونه‌ای است که بسیاری آن را لوکوموتیو قطار توسعه عصر هیدروژن نامیده‌اند.

در بین سیستم‌های تبدیل انرژی، پیل‌های سوختی با ویژگی‌هایی چون بازده بالا، آلودگی پایین، آسان بودن سوخت‌گیری مجدد و گستردگی سوخت‌های قابل استفاده در آن، در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. پیل سوختی، نوعی پیل الکترو شیمیایی است که انرژی حاصل از واکنش سوخت و اکسید کننده را مستقیماً به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کند. بدنه‌ی اصلی پیل سوختی متشکل از الکتروود آند، الکتروود کاتد و الکتروولیت است. برای یک پیل سوختی

اکسید جامد، اکسیژن در کاتد به یون اکسیژن کاهیده می‌شود. یون‌های اکسیژن به سمت آند از طریق یک الکترولیت مهاجرت کرده و با یک سوخت مانند هیدروژن واکنش می‌دهند تا الکترون، گرما و آب آزاد سازد.

در بین انواع پیل‌های سوختی مورد استفاده در وسایل قابل حمل، پیل سوختی غشای تعویض یونی به دلیل دمای عملکردی پایین، حجم کوچک و وزن سبک، رواج بیشتری یافته است. سوخت‌های مورد استفاده در این پیل‌ها، دانسیته‌ی حجمی بالاتری دارند. مثلاً دانسیته‌ی حجمی هیدروژن مایع ۲۵۰۰ وات بر ساعت است، در حالی که باتری‌های لیتیومی معمول تنها ۴۰۰ وات بر ساعت انرژی فراهم می‌کنند.

پیل سوختی حاوی واحد تهیه سوخت است که در آن سوخت مایع به گاز غنی از هیدروژن تبدیل می‌شود. برای کاربردهای قابل حمل، واحد تهیه سوخت باید کوچک و سبک وزن باشد. به همین دلیل در سال‌های اخیر تلاش‌هایی برای کوچک کردن راکتور مورد استفاده در آنها انجام شده است که نتیجه‌ی آن ظهور میکروراکتورهایی است که دارای مزایایی نسبت به راکتورهای متداول هستند.

ویژگی اصلی میکروراکتورها، نسبت سطح به حجم بالا در مقایسه با راکتورهای معمولی است. ضرایب انتقال حرارت و جرم در آن‌ها بزرگ است و رژیم جریان اغلب آرام است. کنترل ویژگی‌های فرآیندی مانند دما، فشار و زمان اقامت نیز در واکنش‌هایی که در حجم کوچک اتفاق می‌افتند، آسان‌تر است [۱]. طراحی میکروراکتور یکی از نکات مهم در رسیدن به بازده مطلوب در تولید هیدروژن است. هندسه‌ی مناسب راکتور می‌تواند انتقال گازهای واکنش دهنده و نیز کنترل گرما را بهبود بخشیده و در نتیجه نرخ تولید هیدروژن را افزایش دهد.

۳.۱.۱ تولید هیدروژن از متانول

بررسی‌ها برای انتخاب سوخت مورد نیاز پیل‌های سوختی غشای تعویض یونی نشان داده است متانول، هیدروکربن مناسبی برای تولید هیدروژن است. زیرا می‌تواند در دماهای پایین (C^o ۲۵۰ ~)، در مقایسه با دمای بالای مورد نیاز برای سایر سوخت‌های مرسوم مانند بنزین، اتانول و غیره، به هیدروژن تبدیل شود. همچنین حاوی سولفور یا سایر مواد سمی برای کاتالیزور واکنش تبدیل نیست. در ضمن ذخیره‌سازی و به‌کارگیری آن آسان است. اگرچه دانسیته‌ی انرژی متانول از سوخت‌های بنزینی و دیزلی پایین‌تر است اما یکی از مهم‌ترین موادی است که در آن نسبت هیدروژن به کربن زیاد بوده و محتوای انرژی بالایی دارد. این ماده در ایران ارزان و قابل دسترس بوده و میزان مونوکسیدکربن تولیدی آن، نیز بسیار کم است.

متانول می‌تواند به طور مستقیم برای تولید انرژی استفاده شده و یا در سیستم مبدل سوخت ابتدا به هیدروژن تبدیل شده و سپس از هیدروژن تولیدی برای تولید انرژی استفاده شود. روش‌های متداول برای تولید هیدروژن از متانول عبارتند از:

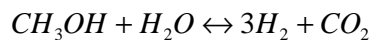
شکست مستقیم



اکسیداسیون جزئی



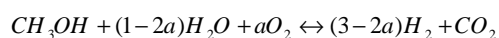
ریفرمینگ با بخار



(۳-۱)

$$\Delta H_{298}^0 = 49.5 \text{ KJ/mol}$$

ریفرمینگ اکسایشی



(۴-۱)

$$\Delta H^0 = (49.5 - 241.8 * 2a) \text{ KJmol}^{-1} \quad 0 \leq a \leq 0.5$$

در انتخاب واکنش مناسب برای تولید هیدروژن باید نکات زیر مورد توجه قرار گیرد.

- در پیل‌های سوختی هیدروژنی، حتی مقدار ناچیز مونوکسید کربن می‌تواند الکتروکاتود پلاتینی را خراب کند.
- با توجه به اینکه هیدروژن محصول اصلی است، لذا باید نسبت تولید آن به سایر محصولات بیشتر باشد.
- واکنش مورد نظر نیاز به دمای بالا نداشته باشد، چون در تبدیل دما بالای متانول مونوکسید کربن تولید می‌شود.
- شرایط انجام واکنش باعث غیر فعال شدن کاتالیست نشود، زیرا یکی از راه‌های غیر فعال شدن کاتالیست، سمی شدن آن در اثر حرارت است.

در بین این فرآیندها، واکنش ریفرمینگ با بخار، غلظت بالا برای هیدروژن و غلظت پایین

برای مونوکسید کربن را فراهم می‌کند. دمای انجام واکنش نسبت به سایر فرآیندها پایین بوده و

نسبت تولید هیدروژن به دی‌اکسید کربن در آن بالا است. به دلیل این ویژگی‌ها، استفاده از این فرآیند برای تولید هیدروژن، مطلوب به نظر می‌رسد. اگرچه به دلیل گرماگیر بودن واکنش، نیاز به یک مبدل حرارتی درونی است و واکنش نیز کند است.

۴.۱.۱ دینامیک سیالات محاسباتی^۱

امروزه علوم محاسباتی نقش مهمی در حل مسائل علمی و فناوری ایفا می‌کنند به گونه‌ای که موفقیت بسیاری از شرکت‌ها و بخش‌های مختلف صنعتی، وابسته به میزان توانمندی آن‌ها در استفاده از روش‌های نوین محاسباتی است. شبیه‌سازی دینامیک سیال محاسباتی از آن جمله است. دینامیک سیال محاسباتی عبارت از تحلیل سیستم‌های شامل جریان سیال، انتقال حرارت و پدیده‌های همراه آنها نظیر واکنش‌های شیمیایی، براساس کدهای کامپیوتری است.

استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی از ابتدای سال ۱۹۷۰ شروع شد. در آن زمان، از این مفهوم برای ترکیب فیزیک، ریاضیات عددی و در حالت پیشرفته‌تر، علوم کامپیوتر به کار برده شده برای شبیه‌سازی جریان‌های سیال استفاده می‌شد. پیشرفت‌ها در این حوزه وابسته به پیشرفت و تکامل فناوری کامپیوتری است. پیچیدگی‌های زیاد رفتار جریان از دلایلی است که موجب شده دینامیک سیال محاسباتی به کندی پیشرفت کند. امروزه، دینامیک سیال محاسباتی روش بسیار توانمندی است، بطوریکه طیف وسیعی از کاربردهای صنعتی و غیرصنعتی را در زمینه‌های هواپیمایی، توربو ماشین‌ها و ماشین‌ها و طراحی کشتی در بر می‌گیرد.

مزایای دینامیک سیال محاسباتی در طراحی سیستم‌های سیالاتی نسبت به روش‌های

تجربی:

(۱) کاهش اساسی در زمان و قیمت طراحی‌های جدید

^۱ Computational Fluid Dynamic (CFD)