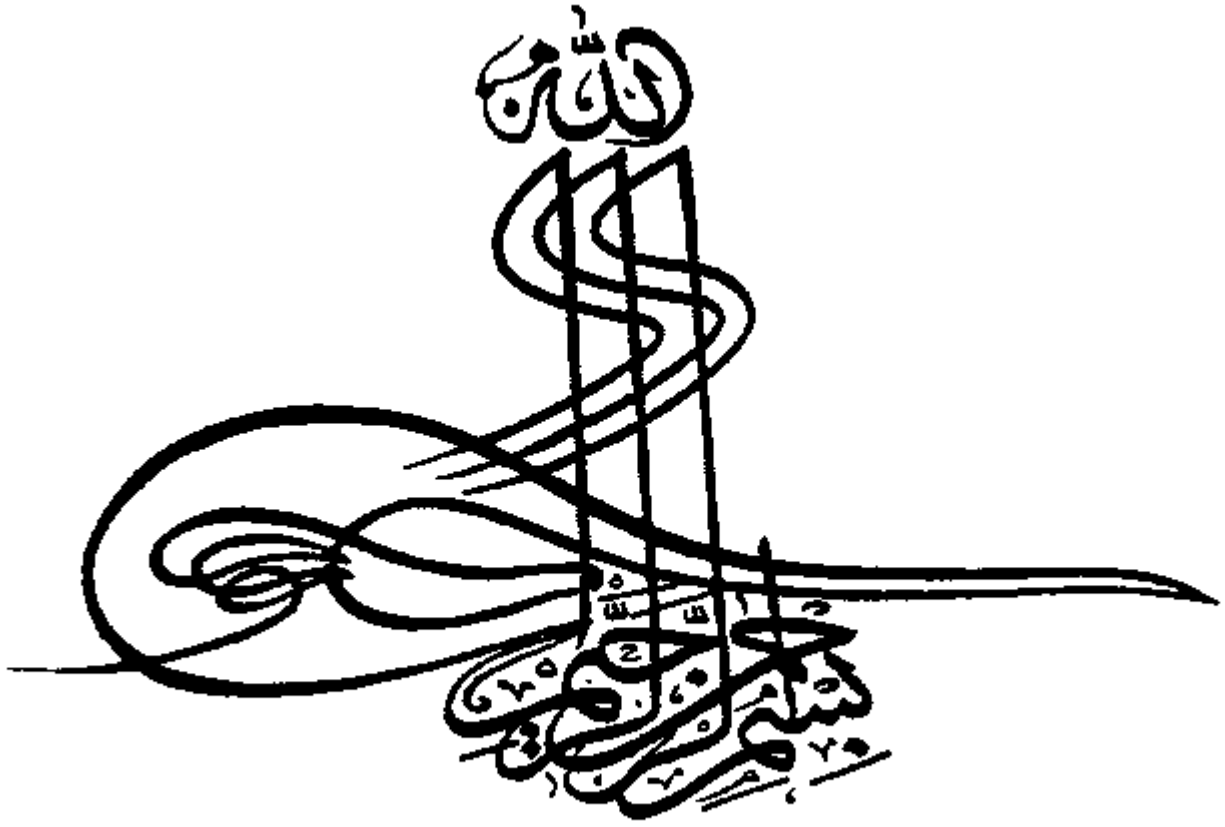

دانشگاه سمنان
دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

رساله دکتری رشته مهندسی شیمی

مدل سازی CFD و بررسی آزمایشگاهی میکروراکتور تولید هیدروژن

الهام امیدبخش امیری

استاد راهنما
دکتر فرامرز هرمزی

استاد مشاور
دکتر بهنام خوش اندام

تیر 1393

اظهارنامه

عنوان رساله: مدل سازی CFD و بررسی آزمایشگاهی میکروراکتور تولید هیدروژن

اینجانب الهام امیدبخش امیری دانشجوی دوره دکتری رشته مهندسی شیمی دانشکده مهندسی شیمی دانشگاه سمنان نویسنده پایان نامه مدل سازی CFD و بررسی آزمایشگاهی میکروراکتور تولید هیدروژن تحت راهنمایی دکتر هرمزی متعهد می شوم:

- تحقیقات در این رساله توسط اینجانب انجام شده و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در این پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی به جایی ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه سمنان است و مقالات مستخرج با نام " دانشگاه سمنان" و یا "Semnan University " به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند و در مقالات مستخرج از آن رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت های آنها) استفاده شده، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استقاده شده، اصل رازداری، ظوابط و اصول اخلاقی انسانی رعایت شده است.

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- **کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیرات ساخته شده) متعلق به دانشگاه سمنان است. این مطالب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.**
- **استفاده از اطلاعات و نتایج این پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نیست.**

تقدیم به بانوی دو عالم حضرت فاطمه زهرا (س)

حال که پله ای دیگر از نردبان علم ودانش را بالا رفته ام، لازم می دانم که از جناب آقای دکتر هرمزی که از راهنمایی های ایشان در این مدت استفاده کرده ام، کمال تشکر را داشته باشم.

تقدیم به پدر و مادر عزیزم که همواره پشتیبان من بودند. گرچه،

ذره ای از محبت بی دریغ آنها را نمی توانم جبران کنم.

چکیده

این رساله شامل دو بخش مدل‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی (یا به اختصار CFD) و بررسی آزمایشگاهی میکروراکتور تولید هیدروژن است. در بخش مدل سازی CFD، معادلات بقا در میکروراکتور با طرح های متفاوت کانال ها با آرایش موازی و ساختار حلقوی، با روش حجم محدود به کمک نرم افزار فلوئنت حل شده است. واکنش ریفرمینگ با بخار به همراه اکسایش درون میکروراکتور مورد بررسی قرار گرفته است. در آرایش موازی اثر شرایط عملیاتی بررسی شد. در ساختار حلقوی علاوه بر بررسی شرایط عملیاتی، تغییر قطر کانال در طول میکروراکتور بررسی شد. این بررسی منجر به معرفی مدل مخروطی شد. بررسی نتایج مدل ها نشان داد که مدل مخروطی با انجام همزمان دو واکنش مناسب تر از سایر مدل ها بوده است. با بررسی پارامترهای عملیاتی، مشخص شد که با افزایش نرخ جریان ورودی بخش ریفرمینگ به میزان ۱/۴ درصد، بازده تبدیل متانول حدود ۱۰ درصد کاهش می‌یابد. در حالیکه با افزایش دمای ورودی به میزان ۱۰ درجه کلوین، بازده تبدیل متانول حدود ۴ درصد افزایش می‌یابد. همچنین، به نظر می‌رسد همسو یا ناهمسو بودن جهت جریان ورودی در دو بخش، با دو جنس بخش جامد آلومینیوم و کوارتز، ممکن است به ترتیب بر بازده تبدیل متانول اثر داشته یا نداشته باشد. بررسی ها نشان داده است که به نظر می‌رسد، انتخاب مدل حلقوی مخروطی در حالیکه قطر در طول میکروراکتور کاهش می‌یابد، برای میکروراکتورهایی که واکنش گرمازا در آن انجام می‌شود، مناسب تر است و باعث افزایش بازده تبدیل می شود. همچنین، به نظر می‌رسد، انتخاب مدل حلقوی مخروطی در حالیکه قطر در طول میکروراکتور افزایش می‌یابد، برای میکروراکتورهایی که واکنش گرماگیر در آن انجام می‌شود، مناسب تر است. در بخش آزمایشگاهی، واکنش اتوترمال ریفرمینگ اتانول با بررسی اثر دو پارامتر دما و نرخ جریـان، مورد بررسی قرار گرفت. با افزایش دما، اگرچه میزان تبدیل افزایش می‌یابد ولی محصول جانبی مونوکسیدکربن به میزان ۰/۹ درصد تشکیل می‌شود. این محصول جانبی در همین مقدار ناچیز نیز برای الکترودهای پیل های سوختی نامطلوب است و باید با کنترل دما و انتخاب شرایط مناسب عملیاتی از تشکیل آن جلوگیری کرد.

کلیدواژه ها: هیدروژن، میکروراکتور، مدل سازی CFD ،کانال دایره‌ای، مدل حلقوی مخروطی.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول – مقدمه ۱
۱- مقدمه ۱
۱-۱ انرژی و سوخت پاک ۱
۱-۲ عصر هیدروژن ۲
۱-۳ فرآورنده سوخت ۳
۱-۴ میکروراکتور ۴
۱-۵ مدل سازی CFD ۵
فصل دوم – بیان مفاهیم ۸
۲- بیان مفاهیم ۸
۲-۱ خوراک فرایند تولید هیدروژن ۸
۲-۲ روش‌های موجود برای تولید هیدروژن ۹
۲-۳ کاتالیزورهای به کار برده شده ۱۲
۲-۴ تحلیل ترمودینامیکی واکنش ها ۱۳
۲-۵ مکانیسم واکنش ها ۱۹
۲-۶ سینتیک واکنش ها ۲۴
۲-۷ میکروراکتورها ۲۸
۲-۸ مدل سازی CFD فرایند تولید هیدروژن ۳۰
۲-۸-۱ گسسته سازی معادلات ۳۲
۲-۸-۲ اتصال سرعت – فشار ۳۴
فصل سوم – مروری بر مطالعات گذشته ۳۷
۳- مقدمه ۳۷
۳-۱ تولید هیدروژن در میکروراکتورها ۳۷
۳-۱-۱ مطالعات با واکنش ریفرمینگ با بخار ۳۹
۳-۱-۲ مطالعات با واکنش ریفرمینگ با بخار همراه با اکسایش ۴۱
فصل چهارم – شرح مدل و روش حل ۶۴
۴- مقدمه ۶۴
۴-۱ کانال‌ها با آرایش موازی ۶۵
۴-۱-۱ میکروراکتور با دو کانال مستطیلی با آرایش موازی ۶۶
۴-۱-۲ میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۶۶
۴-۱-۳ میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۷۵
۴-۲ میکروراکتور با ساختار حلقوی ۷۶
۴-۲-۱ میکروراکتور با ساختار حلقوی، مدل پوسته و لوله ۷۷
۴-۲-۲ مدل های حلقوی مخروطی ۷۸
۴-۲-۳ مدل‌های ریفرمر مخروطی ۸۳

فصل پنجم – نتایج و بحث ۸۵
۵- مقدمه ۸۵
۵-۱ کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۸۵
۵-۱-۱ استقلال شبکه ۸۵
۵-۱-۲ بررسی اعتبار نتایج ۸۷
۵-۱-۳ میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۸۸
۵-۱-۳-۱ اثر شرایط خوراک در بخش ریفرمینگ ۹۳
۵-۱-۳-۲ اثر جهت جریان ورودی دو بخش ریفرمینگ و اکسایش ۹۷
۵-۱-۴ میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۰
۵-۱-۴-۱ اثر شرایط ورودی خوراک در بخش ریفرمینگ ۱۰۳
۵-۲ میکروراکتور با ساختار حلقوی ۱۰۸
۵-۲-۱ بررسی اعتبار نتایج در ساختار حلقوی ۱۰۸
۵-۲-۲ مدل های حلقوی مخروطی ۱۰۹
۵-۲-۲-۱ اثر تغییر شرایط ورودی کانال ریفرمینگ در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۱۵
۵-۲-۲-۲ اثر تغییر ضخامت بخش جامد در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۱۸
۵-۲-۲-۳ اثر میزان تخلخل بستر در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع..... ۱۱۹
۵-۲-۲-۴ اثر زاویه همگرایی در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع..... ۱۲۱
۵-۲-۳ مدل‌های ریفرمر مخروطی ۱۲۲
۵-۲-۳-۱ اثر تغییر شرایط ورودی کانال ریفرمینگ در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۲۶
۵-۲-۳-۲ اثر تخلخل بستر در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۲۹
۵-۲-۳-۳ اثر زاویه واگرایی در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۳۱
۵-۳ انجام همزمان دو واکنش OX و SR در هر کانال ۱۳۲
۵-۴ انجام همزمان دو واکنش OX و SR در هر کانال مخروطی ۱۳۵
۵-۵ انجام همزمان دو واکنش ریفرمینگ اتانول و اکسایش متانول در هر کانال مخروطی ۱۳۷
۵-۶ نتیجه گیری ۱۳۸
فصل ششم – بخش آزمایشگاهی ۱۴۰
۶- مقدمه ۱۴۰
۶-۱ آماده سازی بخش آزمایشگاهی ۱۴۱
۶-۲ رویه راه اندازی برای هر نمونه گیری ۱۴۲
۶-۳ رویه نمونه گیری (انجام واکنش و آنالیز) ۱۴۳
۶-۴ کالیبراسیون ابزار ۱۴۴
۶-۴-۱ کالیبره کردن پمپ سرنگی ۱۴۵
۶-۴-۲ کالیبره کردن MFC ها ۱۴۵
۶-۴-۳ کالیبره کردن دستگاه کروماتوگرافی (GC) ۱۴۷
۶-۵ محاسبه و آنالیز داده ها ۱۴۸
۶-۶ نتایج و بحث ۱۴۹
۶-۶-۱ اثر دمای واکنش ۱۴۹
۶-۶-۲ اثر نرخ جریان مایع خوراک ۱۵۰

فصل هفتم – نتیجه گیری و پیشنهادات ۱۵۲
منابع ۱۵۵
پیوست ها ۱۶۲
پیوست۱ - فهرست اسامی لاتین ۱۶۳
پیوست۲- ابزار و مواد مورد استفاده ۱۶۵
پیوست۳- کپسول های استاندارد GC ۱۶۸

فهرست شکل‌ها

شکل **صفحه**

شکل ۱-۱. فرآورنده سوخت به کار برده شده پیش از پیل سوختی ۴

شکل ۱-۲. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از دما در S/C=2 و فشار برابر ۱ اتمسفر ۱۵

شکل ۲-۲. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی ازS/C در دمای ثابت ۵۰۰ ^{o} C و فشار برابر ۱ اتمسفر ۱۵

شکل ۲-۳. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از فشار در دمای ثابت ۵۰۰ ^{o} C و S/C =1.5 ..... ۱۶

شکل ۲-۴. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از دما در فشار اتمسفریک، O/E=0.5 و S/C =4 .... ۱۷

شکل ۲-۵. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از نسبت مولی بخارآب به اتانول در فشار اتمسفریک، O/E=0.5 و T= 500 ^{o}C ۱۸

شکل ۲-۶. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از نسبت مولی اکسیژن به اتانول در فشار اتمسفریک، S/E=4 و T= 500 ^{o}C ۱۸

شکل ۲-۷. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از فشار در دمای ثابت ۵۰۰ ^{o} C ، O/E=0.5 و S/E=4 ..... ۱۹

شکل ۲-۸. مقایسه تغییرات تبدیل متانول بر حسب تغییرات نسبت وزن کاتالیزور به کار برده شده به دبی حجمی خوراک ورودی در راکتور بستر پر شده در این مدل سازی با داده های آزمایشگاهی لی و همکاران، ۲۰۰۷ ..... ۲۷

شکل ۲-۹. مقایسه تغییرات تبدیل متانول بر حسب تغییرات نسبت وزن کاتالیزور به کار برده شده به دبی حجمی خوراک ورودی در راکتوری که دیواره آن با کاتالیزور پوشیده شده در این مدل سازی با داده های آزمایشگاهی لی و همکاران، ۲۰۰۷ ..... ۲۷

شکل ۲-۱۰. ناحیه کانال و لایه کاتالیزور در مدل سازی، در روش مدل سازی سطحی e=0 و در روش مدل سازی حجمی $e= R_b$ ۳۱

شکل ۲-۱۱. تقریب های موجود برای موقعیت حجم کنترل در روش حجم محدود (الف) طرح مرکز سلول، (ب) طرح لبه سلول ۳۲

شکل ۲-۱۲. گره مرکزی P با گره های اطرافش در حجم کنترل دو بعدی ۳۳

شکل ۳-۱. تعداد مقالات چاپ شده در زمینه تولید هیدروژن از سال ۲۰۰۰ تا ۲۰۱۴ ..... ۳۹

شکل ۳-۲. تعداد مقالات چاپ شده در زمینه ریفرمینگ با بخار از سال ۲۰۰۰ تا ۲۰۱۴ ..... ۴۱

شکل ۳-۳. هندسه و ابعاد به کار برده شده در مدل اکبری و همکارانش، ۲۰۱۱. کانال بالایی (کانال اکسایش)، توسط جامدی با ضخامت ۰/۳ میلیمتر از کانال پایینی (کانال ریفرمینگ) جدا شده است ۴۳

شکل ۳-۴. توزیع دما در (الف) طول راکتور، (ب) در جهت شعاعی در چند سطح مقطع در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۴

شکل ۳-۵. منحنی دما در دو بخش اکسایش و ریفرمینگ در طول کانال در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۵

شکل ۳-۶. تغییرات کسر مولی اجزاء در طول راکتور در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۵

شکل ۳-۷. تغییرات میزان تبدیل متانول و بازده هیدروژن با تغییر ضخامت کاتالیزور در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۶

شکل۳-۸. (الف) تغییرات میزان تبدیل متانول و بازده هیدروژن با نسبت S/C، (ب) تغییرات کسر مولی هیدروژن و مونوکسیدکربن با نسبت S/C در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۶

شکل ۳-۹. (الف) تغییرات کسر مولی هیدروژن و مونوکسیدکربن با افزایش GHSV کانال ریفرمینگ، (ب) تغییرات میزان تبدیل متانول، بازده هیدروژن و بیشینه دما با افزایش GHSV کانال ریفرمینگ در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۷
شکل۳-۱۰. (الف) تغییرات میزان تبدیل متانول، بازده هیدروژن و بیشینه دما با افزایش GHSV کانال اکسایش، (ب) تغییرات کسر مولی هیدروژن و مونوکسیدکربن با افزایش GHSV کانال اکسایش در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۸
شکل ۳-۱۱. (الف) تغییرات میزان تبدیل متانول، بازده هیدروژن و بیشینه دما با افزایش ضخامت لایه جامد، (ب) تغییرات کسر مولی هیدروژن و مونوکسیدکربن با افزایش ضخامت لایه جامد در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۸
شکل ۳-۱۲. هندسه سه بعدی به کار برده شده در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲، (الف) هندسه راکتور واحدی که شامل تک کانال ریفرمینگ و تک کانال اکسایش است، (ب) مجموعه میکروکانال موازی که در یک ردیف اکسایش و در ردیف بعدی ریفرمینگ انجام می‌شود ۴۹
شکل ۳-۱۳. تغییرات میزان تبدیل متانول، کسر مولی هیدروژن، بیشینه دما و کسر مولی مونوکسید کربن با افزایش میزان کاتالیزور به کار برده شده در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ..... ۵۰
شکل ۳-۱۴. تغییرات میزان تبدیل متانول، کسر مولی هیدروژن، بیشینه دما و کسر مولی مونوکسید کربن با افزایش طول راکتور در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ..... ۵۱
شکل ۳-۱۵. کانتور تغییرات کسر مولی (الف) هیدروژن، (ب) مونوکسیدکربن در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ..... ۵۱
شکل ۳-۱۶. سه مدل راکتور بررسی شده در کار انجام شده توسط چین و همکاران، ۲۰۱۲، (الف) راکتور استوانه ای که تنها ریفرمینگ در آن انجام می‌شود، (ب) راکتور با ساختار پوسته و لوله که در قسمت لوله واکنش ریفرمینگ و در قسمت پوسته واکنش احتراق انجام می‌شود، (ج) راکتور با ساختار پوسته و لوله که در قسمت پوسته واکنش ریفرمینگ و در قسمت لوله واکنش احتراق انجام می‌شود ۵۶
شکل ۳-۱۷. اثر GHSV-C روی عملکرد راکتور پوسته احتراق، $GHSV\text{-}R=5.73*10^4\ h^{-1}$ (الف) دمای گاز در محفظه ریفرمینگ و احتراق، (ب) کسرمولی متانول در محفظه ریفرمینگ و احتراق، (ج)کسرمولی هیدروژن در محفظه ریفرمینگ، (د) کسرمولی مونوکسیدکربن در محفظه ریفرمینگ. همه‌ی تغییرات در خط مرکز رسم شده است ۵۷
شکل ۳-۱۸. توزیع دمای گاز و کسر مولی برای راکتور پوسته احتراق که عایق است، $GHSV\text{-}R=5.73\ 10^4$ h^{-1} و $GHSV\text{-}C=3.6\ 10^5\ h^{-1}$ ۵۷
شکل ۳-۱۹. اثر GHSV-R روی عملکرد راکتور پوسته احتراق با GHSV-C متغیر در محدوده $1.8*10^5\text{-}9*10^5\ h^{-1}$، همه‌ی پارامترها در مقدار متوسط در خروجی ریفرمینگ ارزیابی شده‌اند (الف) دمای گاز ریفرم شده، (ب) تبدیل متانول، (ج) بازده هیدروژن و (د) گزینش پذیری مونوکسیدکربن ۵۸
شکل ۳-۲۰. اثر اتلاف حرارتی بر عملکرد راکتور پوسته احتراق با ضرایب انتقال حرارت خارجی مختلف، $GHSV\text{-}R=5.73\ 10^4\ h^{-1}$ و $GHSV\text{-}C=3.6\ 10^5\ h^{-1}$ (الف) دمای گاز در طول محور مرکزی بخش ریفرمینگ و احتراق، (ب) تبدیل متانول در طول محور مرکزی بخش ریفرمینگ ۵۹
شکل ۴-۱. کانال های مستطیلی که دیواره آنها با کاتالیزور پوشانده شده است (استوتز و پولیکاکوس، ۲۰۰۵) . ۶۵
شکل ۴-۲. مقایسه مقادیر آزمایشگاهی با مدل با سطح مقطع دایره ای و مربعی (داده آزمایشگاهی لی و همکاران، ۲۰۰۷) ۶۶

شکل ۴-۳. هندسه میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی، (الف) نمای سه بعدی، (ب) نمای از روبرو با ابعاد هندسی ۶۷
شکل ۴-۴. شرایط مرزی به کار برده شده در میکروراکتور با دو کانال دایره ای با آرایش موازی ۷۱
شکل ۴-۵. شبکه به کار برده شده برای میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۷۵
شکل ۴-۶. میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی، در کانال‌های آبی رنگ واکنش ریفرمینگ و در کانال‌های سبز رنگ واکنش اکسایش انجام می‌شوند. فقط قسمت خط‌چین مدل‌سازی می‌شود . ۷۶
شکل ۴-۷. شبکه به کاربرده شده در میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی، در یک ردیف از میکروکانال ها واکنش اکسایش انجام می‌شود، درحالیکه در ردیف بعدی، واکنش ریفرمینگ انجام می‌شود ۷۶
شکل ۴-۸. شکل شماتیک مدل حلقوی، (الف) نمای کناری، (ب) نمای روبرو، r_1=0.5 mm ،r_2=1.2 mm ،t=0.2mm و L=20mm ۷۹
شکل ۴-۹. نمای کناری (الف) مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع، (ب) مدل حلقوی مخروطی با افزایش سطح مقطع ۸۰
شکل ۴-۱۰. شبکه به کار برده شده در مدل حلقوی مخروطی (الف) نمای کناری، (ب) نمای روبرو ۸۳
شکل ۴-۱۱. نمای کناری (الف) مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع، (ب) مدل ریفرمر مخروطی با کاهش سطح مقطع ۸۴
شکل ۵-۱. بررسی اثر تعداد شبکه بر میزان تبدیل متانول در طول میکروراکتور برای میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره ای با آرایش موازی ۸۶
شکل ۵-۲. مقایسه تغییرات میزان تبدیل متانول با نسبت بخار به متانول مختلف در خوراک در این مدل‌سازی با مجموعه کانال ها با آرایش موازی با داده های مدل تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ..... ۸۸
شکل ۵-۳. کانتور تغییرات کسر مولی در کانال ریفرمینگ، (الف) متانول، (ب) بخار آب، (ج) دی اکسیدکربن، (د) هیدروژن، در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۸۹
شکل ۵-۴. تغییرات کسر مولی اجزاء در طول کانال ریفرمینگ در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۸۹
شکل ۵-۵. کانتور کسر جرمی متانول در کانال اکسایش در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی .. ۹۰
شکل ۵-۶. تغییرات کسر جرمی متانول در طول کانال اکسایش در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۱
شکل ۵-۷. کانتور دما در (الف) نمای سه بعدی در سرتاسر میکروراکتور، (ب) در نمای از جلوی چهار طول میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۲
شکل ۵-۸. متوسط تغییرات دمایی در وسط دو کانال اکسایش (TOX) و ریفرمینگ (TSR) در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۳
شکل ۵-۹. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول میکروراکتور با GHSV مختلف ورودی در در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۴
شکل ۵-۱۰. تغییرات بازده هیدروژن در طول میکروراکتور با GHSV مختلف ورودی در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۵
شکل ۵-۱۱. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول میکروراکتور با دماهای ورودی مختلف در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۶

شکل ۵-۱۲. تغییرات بازده هیدروژن در طول میکروراکتور با دماهای ورودی مختلف در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۶
شکل ۵-۱۳. اثر جهت جریان ورودی بر بازده تبدیل متانول در بخش ریفرمینگ در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۷
شکل ۵-۱۴. اثر جهت جریان ورودی بر بازده هیدروژن در بخش ریفرمینگ در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۹۸
شکل ۵-۱۵. تغییرات دمای بالک سیال در طول میکروراکتور در وسط دو کانال ریفرمینگ و اکسایش در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی در (الف) جریان های همسو، (ب) جریان های ناهمسو ۹۹
شکل ۵-۱۶. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ در دو جریان همسو و ناهمسو ۱۰۰
شکل ۵-۱۷. تغییرات کسر مولی اجزاء واکنش دهنده و محصولات در بخش ریفرمینگ در میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۱
شکل ۵-۱۸. کانتور دما در چهار سطح مقطع از ابتدای طول میکروراکتور در میکروراکتور با مجموعه کانال-های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۲
شکل ۵-۱۹. تغییرات متوسط دمای بالک سیال در طول میکروراکتور در وسط دو بخش ریفرمینگ (TSR) و اکسایش (TOX) در میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۲
شکل ۵-۲۰. اثر دمای ورودی بر بازده تبدیل متانول در بخش ریفرمینگ در میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۳
شکل ۵-۲۱. اثر دمای ورودی بر بازده هیدروژن در بخش ریفرمینگ در میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۴
شکل ۵-۲۲. اثر نرخ جریان ورودی بر بازده تبدیل متانول در بخش ریفرمینگ در میکروراکتور با مجموعه کانال‌های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۶
شکل ۵-۲۳. اثر نرخ جریان ورودی بر بازده هیدروژن در بخش ریفرمینگ در میکروراکتور با مجموعه کانال-های دایره‌ای با آرایش موازی ۱۰۷
شکل ۵-۲۴. مقایسه تغییرات تبدیل متانول در طول راکتور در این مدل سازی با ساختار حلقوی با داده‌های مدل چین و همکارانش، ۲۰۱۲ ..... ۱۰۹
شکل ۵-۲۵. کانتور دما در چهار سطح مقطع در طول میکروراکتور در مدل های حلقوی و حلقوی مخروطی ۱۱۰
شکل ۵-۲۶. تغییرات دمای بالک سیال در(الف) کانال ریفرمینگ، (ب) کانال اکسایش برای هر سه مدل ۱۱۱
شکل ۵-۲۷. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ برای سه مدل ۱۱۲
شکل ۵-۲۸. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ برای سه مدل ۱۱۳
شکل ۵-۲۹. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ با افزایش دمای ورودی در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع..... ۱۱۵
شکل ۵-۳۰. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ با افزایش دمای ورودی در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۱۶
شکل ۵-۳۱. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ با افزایش نرخ جریان ورودی در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۱۷
شکل ۵-۳۲. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ با افزایش نرخ جریان ورودی در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۱۷

شکل ۵-۳۳. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ با افزایش ضخامت بخش جامد در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۱۸
شکل ۵-۳۴. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ با افزایش ضخامت بخش جامد در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع..... ۱۱۹
شکل ۵-۳۵. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ با افزایش تخلخل بستر بخش ریفرمینگ در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع، تخلخل بستر اکسایش ثابت و برابر ۰/۳۵ است ۱۲۰
شکل ۵-۳۶. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ با افزایش تخلخل بستر بخش ریفرمینگ در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع، تخلخل بستر اکسایش ثابت و برابر ۰/۳۵ است ۱۲۰
شکل ۵-۳۷. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ با افزایش میزان همگرایی در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع..... ۱۲۱
شکل ۵-۳۸. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ با افزایش میزان همگرایی در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع..... ۱۲۲
شکل ۵-۳۹. کانتور تغییرات دما برای سه مدل در چهار سطح مقطع در طول میکروراکتور..... ۱۲۳
شکل ۵-۴۰. تغییرات میزان تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ برای سه مدل حلقوی، ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع و ریفرمر مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۲۴
شکل ۵-۴۱. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ برای سه مدل حلقوی، ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع و ریفرمر مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۲۵
شکل ۵-۴۲. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ با افزایش دمای ورودی در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۲۷
شکل ۵-۴۳. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ با افزایش دمای ورودی در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۲۷
شکل ۵-۴۴. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ با افزایش نرخ جریان ورودی در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۲۸
شکل ۵-۴۵. تغییرات بازده هیدروژن در طول کانال ریفرمینگ با افزایش نرخ جریان ورودی در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۲۹
شکل ۵-۴۶. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول میکروراکتور با تغییر تخلخل بستر ریفرمینگ در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع، تخلخل بخش اکسایش ثابت و برابر ۰/۳۵ است ۱۳۰
شکل ۵-۴۷. تغییرات بازده هیدروژن در طول میکروراکتور با تغییر تخلخل بستر ریفرمینگ در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع، تخلخل بخش اکسایش ثابت و برابر ۰/۳۵ است ۱۳۰
شکل ۵-۴۸. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول میکروراکتور با تغییر میزان واگرایی در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۳۱
شکل ۵-۴۹. تغییرات بازده تبدیل متانول در طول میکروراکتور با تغییر میزان واگرایی در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۳۲
شکل ۵-۵۰. کانتور دما در سه سطح مقطع از طول میکروراکتور برای دو مدل Together و Parallel ۱۳۴
شکل ۵-۵۱. بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ برای دو مدل Together و Parallel ۱۳۴

شکل ۵-۵۲. کانتور دما در سه سطح مقطع از طول میکروراکتور برای دو مدل Together و Conical Together ۱۳۶
شکل ۵-۵۳. بازده تبدیل متانول در طول کانال ریفرمینگ برای دو مدل Together و Conical Together ۱۳۶
شکل ۵-۵۴. بازده تبدیل اتانول در طول کانال ریفرمینگ برای دو مدل Together و Conical Together ۱۳۸
شکل ۶-۱. تصویری از set up تهیه شده برای بخش آزمایشگاهی ۱۴۱
شکل ۶-۲. منحنی کالیبراسیون پمپ سرنگی ۱۴۵
شکل ۶-۳. منحنی کالیبراسیون برای MFC گاز اکسیژن، محور عمودی مقدار اندازه گیری شده با Bubble Flow Meter، محور افقی مقدار تنظیم شده در MFC ۱۴۶
شکل ۶-۴. منحنی کالیبراسیون برای MFC گاز نیتروژن، محور عمودی مقدار اندازه گیری شده با Bubble Flow Meter، محور افقی مقدار تنظیم شده در MFC ۱۴۶
شکل ۶-۵. میزان تبدیل اتانول بر حسب دما، نسبت مولی S/E برابر ۴، نسبت مولی O/E برابر ۰/۵، دبی مایع خوراک (آب و اتانول) برابر ۰/۲ میلی لیتر بر دقیقه ۱۵۰
شکل ۶-۶. میزان تبدیل اتانول بر حسب نرح جریان مایع خوراک، نسبت مولی S/E برابر ۴، نسبت مولی O/E برابر ۰/۵، دمای واکنش $400^{o}C$ ۱۵۱
شکل پ۲-۱. تصویر SEM از کاتالیزور به کار برده شده، متوسط قطر ذرات (۶۹ میکرومتر) ۱۶۵
شکل پ۲-۲. ابزار مورد استفاده، (الف) MFC، (ب) پمپ سرنگی، (ج) کوره و راکتور لوله ای با کنترلر PID دما، (د) کندانسور پوسته و کویلی، (و) دستگاه کروکاتوگرافی گازی با دتکتور μ-TCD ۱۶۷
شکل پ۳-۱. کروماتوگرام به دست آمده برای کپسول استاندارد ۳ ..... ۱۶۸

فهرست جدول‌ها

جدول **صفحه**

جدول ۲-۱. نسبت O/C بهینه و حداکثر بهره‌وری تحت شرایط ترمودینامیکی خنثی برای سوخت‌های مختلف مطابق با کار احمد و کرومپلت، ۲۰۰۱ ..... ۱۲
جدول ۳-۱. ابعاد هندسی و شرایط عملیاتی به کار برده شده در تدبیر و اکبری، ۲۰۱۱ ..... ۴۳
جدول ۳-۲. خلاصه نتایج شبیه سازی انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ برای بررسی اثر غلظت متانول ورودی ۵۰
جدول ۳-۳. ابعاد هندسی و شرایط بهینه پیشنهادی برای میکروراکتور در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ..... ۵۲
جدول ۳-۴. شرایط خروجی راکتور برای مدل پیشنهادی در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ..... ۵۲
جدول ۳-۵. مروری بر مطالعات انجام شده در زمینه مدل سازی واکنش ریفرمینگ با بخار همراه با اکسایش .. ۶۱
ادامه جدول ۳-۵. مروری بر مطالعات انجام شده در زمینه مدل سازی واکنش ریفرمینگ با بخار همراه با اکسایش ۶۲
جدول ۴-۱. مقادیر σ و ε/k برای هریک از مواد (تریبال، ۱۹۸۰) ۷۰
جدول ۴-۲. شرایط مرزی برای کانال اکسایش و ریفرمینگ در میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی ۷۲
جدول ۴-۳. گرمای استاندارد دو واکنش ریفرمینگ و اکسایش ۷۲
جدول ۴-۴. ابعاد هندسی مدل حلقوی ۷۹
جدول ۴-۵. شرایط مرزی به کار برده شده برای سه مدل حلقوی، حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع و حلقوی مخروطی با افزایش سطح مقطع ۸۲
جدول ۵-۱. بررسی اثر تعداد شبکه بر میزان تبدیل در خروجی میکروراکتور برای بررسی اثر شبکه بندی در مدل‌سازی‌ها ۸۷
جدول ۵-۲. افزایش میزان تبدیل متانول در طول میکروراکتور وقتی دمای ورودی از ۴۲۳ به ۴۴۳ کلوین افزایش می‌یابد ۱۰۴
جدول ۵-۳. افزایش میزان تبدیل متانول در طول میکرو راکتور وقتی دمای ورودی از ۴۴۳ به ۴۶۳ کلوین افزایش می‌یابد ۱۰۵
جدول ۵-۴. افزایش میزان تبدیل متانول در طول میکروراکتور وقتی GHSV از ۶۹۲۳ به ۴۹۴۵ کاهش می‌یابد ۱۰۷
جدول ۵-۵. افزایش میزان تبدیل متانول در طول میکروراکتور وقتی GHSV از ۴۹۴۵ به ۲۶۹۷ کاهش می‌یابد ۱۰۸
جدول ۵-۶. افزایش میزان تبدیل متانول در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع نسبت به مدل حلقوی ۱۱۳
جدول ۵-۷. افزایش میزان تبدیل متانول در مدل حلقوی مخروطی با کاهش سطح مقطع نسبت به مدل حلقوی مخروطی با افزایش سطح مقطع ۱۱۴
جدول ۵-۸. افزایش میزان تبدیل متانول در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع نسبت به مدل حلقوی ۱۲۴

جدول ۵-۹. افزایش میزان تبدیل متانول در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع نسبت به مدل ریفرمر مخروطی با کاهش سطح مقطع ۱۲۵
جدول ۶-۱. هدایت حرارتی برای برخی از گازها ۱۴۸
جدول ۶-۲. تغییرات ترکیب گاز خروجی با تغییرات دما، نسبت مولی S/E برابر ۴، نسبت مولی O/E برابر ۰/۵، دبی مایع خوراک (آب و اتانول) برابر ۰/۲ میلی لیتر بر دقیقه ۱۵۰
جدول پ۲-۱. مواد مصرفی مورد نیاز در طرح ۱۶۵
جدول پ۲-۲. ابزار مورد استفاده در طرح ۱۶۶
جدول پ۳-۱. ترکیب کپسول‌های استاندارد برای کالیبراسیون دستگاه کروماتوگرافی گازی (GC) ۱۶۸
جدول پ۳-۲. عدم قطعیت تکرارپذیری برای کپسول استاندارد ۱ ..... ۱۶۸

فهرست علائم و اختصارات

ε	Porosity of Bed	تخلخل بستر
μ_{mix}	Viscosity of Mixture (kg m^{-1} s^{-1})	ویسکوزیته مخلوط
ρ_{mix}	Density of Mixture (kg m^{-3})	چگالی مخلوط
$C_{p,i}$	Heat specific of i component (J $kg^{-1}K^{-1}$)	حرارت ویژه جزء i
$C_{p,mix}$	Heat specific of Mixture (J $kg^{-1}K^{-1}$)	حرارت ویژه مخلوط
D_{eff}	Effective mass diffusivity coefficient (m^2s^{-1})	ضریب نفوذ جرمی مؤثر
E_{act}	Activation Energy (kJmol^{-1})	انرژی اکتیواسیون
GC	Gas Chromatography	کروماتوگرافی گازی
GHSV	Gas Hours Space Velocity (h^{-1})	سرعت فضایی گاز
k_0	Constant Reaction rate	ثابت سرعت واکنش
k_{eff}	Effective Thermal conductivity (w $m^{-1}K^{-1}$)	هدایت حرارتی مؤثر
$k_{g,mix}$	Thermal conductivity of gaseous Mixture (w $m^{-1}K^{-1}$)	هدایت حرارتی مخلوط گازی
k_s	Thermal conductivity of Solid (w $m^{-1}K^{-1}$)	هدایت حرارتی جامد
L	Micro-Reactor Length	طول میکروراکتور
MFC	Mass Flow Controller	کنترل کننده جریان جرمی
Mw	Molar mass (kg kmol^{-1})	جرم مولکولی
OX	Oxidation	اکسایش
P_i	Partial Pressure of i component (Pa)	فشار جزئی جزء i

r_i	Reaction rate of i reaction	سرعت واکنش i
r_1	Radius of inner cylindrical (mm) in annulus model	شعاع استوانه داخلی در مدل حلقوی
r_2	Radius of outer cylindrical (mm) in annulus model	شعاع استوانه خارجی در مدل حلقوی
R	Universal gas constant, 8.314 (J $mol^{-1}K^{-1}$)	ثابت عمومی گاز
SEM	Scanning Electron Microscope	میکروسکوپ سایش الکترونی
S_h	Heat Source	منبع حرارتی
S_m	Mass Source	منبع جرمی
SR	Steam Reforming	ریفرمینگ با بخار
t	Thickness of solid section	ضخامت بخش جامد
T	Temperature (K)	دما
TCD	Thermal Conductivity Detector	دتکتور هدایت گرمایی
x_i	Mole fraction of i component	کسر مولی جزء i
y_i	Mass fraction of i component	کسر جرمی جزء i