



چکیده

این رساله شامل دو بخش مدل سازی 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 فلئنت 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 می یابد. در حالیکه با افزایش دمای ورودی به میزان ۱۰ درجه کلوین، بازده تبدیل متانول حدود ۴ درصد افزایش می یابد. همچنین، به نظر می رسد 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 می رسد، انتخاب مدل حلقوی مخروطی در حالیکه قطر در طول میکروراکتور کاهش می یابد، برای میکروراکتورهایی که واکنش گرمایزا در آن انجام می شود، مناسب تر است و باعث افزایش بازده تبدیل می شود. همچنین، به نظر می رسد، انتخاب مدل حلقوی مخروطی در حالیکه قطر در طول میکروراکتور افزایش می یابد، برای میکروراکتورهایی که واکنش گرمایگیر در آن انجام می شود، مناسب تر است. در بخش آزمایشگاهی، واکنش اتوترمال ریفرمینگ اتانول با بررسی اثر دو پارامتر دما و نرخ جریان، مورد بررسی قرار گرفت. با افزایش دما، اگرچه میزان تبدیل افزایش می یابد ولی محصول جانبی مونوکسید کربن به میزان ۹/۰ درصد تشکیل می شود. 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، کanal دایره‌ای، مدل حلقوی مخروطی.

فهرست مطالب

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

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

۱۵۲	فصل هفتم - نتیجه گیری و پیشنهادات
۱۵۵	منابع
۱۶۲	پیوست ها
۱۶۳	پیوست ۱ - فهرست اسامی لاتین
۱۶۵	پیوست ۲ - ابزار و مواد مورد استفاده
۱۶۸	پیوست ۳ - کپسول های استاندارد GC

فهرست شکل‌ها

صفحه	شکل
۴	شکل ۱-۱. فرآورنده سوخت به کار برده شده پیش از پیل سوختی
۱۵	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 از S/C در دمای ثابت C^{500} و فشار برابر ۱ اتمسفر
۱۶	شکل ۳-۲. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از فشار در دمای ثابت C^{500} و $S/C = 1.5$
۱۷	شکل ۴-۲. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از دما در فشار اتمسферیک، $O/E=0.5$ و $S/C = 4$
۱۸	شکل ۵-۲. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از نسبت مولی بخارآب به اتانول در فشار اتمسferیک، $T=500^{\circ}\text{C}$ و $O/E=0.5$
۱۸	شکل ۶-۲. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از نسبت مولی اکسیژن به اتانول در فشار اتمسferیک، $T=500^{\circ}\text{C}$ و $S/E=4$
۱۹	شکل ۷-۲. محصولات تعادلی تولیدی به صورت تابعی از فشار در دمای ثابت C^{500} و $O/E=0.5$ و $S/E=4$
۲۷	شکل ۸-۲. مقایسه تغییرات تبدیل مтанول 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، 2007
۲۷	شکل ۹-۲. مقایسه تغییرات تبدیل مtanول 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، 2007
۳۱	شکل ۱۰-۲. ناحیه کanal و لایه کاتالیزور در مدل سازی، در روش مدل سازی سطحی $e=0$ و در روش مدل سازی حجمی $e=R_b$
۳۲	شکل ۱۱-۲. تقریب های موجود برای موقعیت حجم کنترل در روش حجم محدود (الف) طرح مرکز سلول، (ب) طرح لبه سلول
۳۳	شکل ۱۲-۲. گره های اطرافش در حجم کنترل دو بعدی
۳۹	شکل ۱-۳. تعداد مقالات چاپ شده در زمینه تولید هیدروژن از سال 2000 تا 2014
۴۱	شکل ۲-۳. تعداد مقالات چاپ شده در زمینه ریفرمینگ با بخار از سال 2000 تا 2014
۴۳	شکل ۳-۳. هندسه و ابعاد به کار برده شده در مدل اکبری و همکارانش، 2011 . کanal بالایی (کanal اکسایش)، توسط جامدی با ضخامت $3/0$ میلیمتر از کanal پایینی (کanal ریفرمینگ) جدا شده است
۴۴	شکل ۴-۳. توزیع دما در (الف) طول راکتور، (ب) در جهت شعاعی در چند سطح مقطع در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، 2011
۴۵	شکل ۵-۳. منحنی دما در دو بخش اکسایش و ریفرمینگ در طول کanal در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، 2011
۴۵	شکل ۶-۳. تغییرات کسر مولی اجزاء در طول راکتور در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، 2011
۴۶	شکل ۷-۳. تغییرات میزان تبدیل مtanول و بازده هیدروژن با تغییر ضخامت کاتالیزور در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، 2011
۴۶	شکل ۸-۳. (الف) تغییرات میزان تبدیل مtanول و بازده هیدروژن با نسبت S/C ، (ب) تغییرات کسر مولی هیدروژن و مونوکسید کربن با نسبت S/C در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، 2011

- شکل ۳. ۹-۳. (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
- شکل ۳. ۱۰-۳. (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. ۱۱-۳. (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. ۱۲-۳. 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. ۱۳-۳. تغییرات میزان تبدیل متانول، کسر مولی هیدروژن، بیشینه دما و کسر مولی مونوکسیدکربن با افزایش میزان کاتالیزور به کار برده شده در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ۵۰
- شکل ۳. ۱۴-۳. تغییرات میزان تبدیل متانول، کسر مولی هیدروژن، بیشینه دما و کسر مولی مونوکسیدکربن با افزایش طول راکتور در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ۵۱
- شکل ۳. ۱۵-۳. کانتور تغییرات کسر مولی (الف) هیدروژن، (ب) مونوکسیدکربن در کار انجام شده توسط تدبیر و اکبری، ۲۰۱۲ ۵۱
- شکل ۳. ۱۶-۳. سه مدل راکتور بررسی شده در کار انجام شده توسط چین و همکاران، ۲۰۱۲، (الف) راکتور استوانه‌ای 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. ۱۷-۳. اثر GHSV-C روی عملکرد راکتور پوسته احتراق، $GHSV-R=5.73 \times 10^4 \text{ h}^{-1}$ (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. همهٔ تغییرات در خط مرکز رسم شده است ۵۷
- شکل ۳. ۱۸-۳. توزیع دمای گاز و کسر مولی برای راکتور پوسته احتراق که عایق است، $GHSV-R=5.73 \times 10^4 \text{ h}^{-1}$ و $GHSV-C=3.6 \times 10^5 \text{ h}^{-1}$ ۵۷
- شکل ۳. ۱۹-۳. اثر GHSV-R روی عملکرد راکتور پوسته احتراق با GHSV-C متغیر در محدوده $1.8 \times 10^5 \text{ h}^{-1}$ - $9 \times 10^5 \text{ h}^{-1}$ ، همهٔ 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. ۲۰-۳. اثر اتلاف حرارتی بر عملکرد راکتور پوسته احتراق با ضرایب انتقال حرارت خارجی مختلف. $GHSV-C=3.6 \times 10^5 \text{ h}^{-1}$ و $GHSV-R=5.73 \times 10^4 \text{ h}^{-1}$ (الف) دمای گاز در طول محور مرکزی بخش ریفرمینگ و احتراق، (ب) تبدیل متانول در طول محور مرکزی بخش ریفرمینگ ۵۹
- شکل ۳. ۱-۴. کانال‌های مستطیلی که دیواره آنها با کاتالیزور پوشانده شده است (استوتز و پولیکاکوس، ۲۰۰۵). ۶۵
- شکل ۳. ۲-۴. مقایسه مقادیر آزمایشگاهی با مدل با سطح مقطع دایره‌ای و مربعی (داده آزمایشگاهی لی و همکاران، ۲۰۰۷) ۶۶

۳-۴	henkel	هنگ میکروراکتور با دو کانال دایره‌ای با آرایش موازی، (الف) نمای سه بعدی، (ب) نمای از روی رو با ابعاد هندسی
۶۷
۷۱
۷۵
۷۶
۷۹
۸۰
۸۳
۸۴
۸۶
۸۸
۸۹
۹۰
۹۱
۹۲
۹۳
۹۴
۹۵
۹۶

۱۳۶ شکل ۵۲-۵. کانتور دما در سه سطح مقطع از طول میکروراکتور برای دو مدل Conical و Together
۱۳۶ شکل ۵۳-۵. بازده تبدیل متانول در طول کanal ریفرمینگ برای دو مدل Conical و Together
۱۳۸ شکل ۵۴-۵. بازده تبدیل اتانول در طول کanal ریفرمینگ برای دو مدل Conical و Together
۱۴۱ شکل ۱-۶. تصویری از set up تهیه شده برای بخش آزمایشگاهی
۱۴۵ شکل ۲-۶. منحنی کالیبراسیون پمپ سرنگی
۱۴۶ شکل ۳-۶. 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 ۴-۶. منحنی کالیبراسیون برای MFC گاز نیتروژن، محور عمودی مقدار اندازه گیری شده با Bubble Flow Meter، محور افقی مقدار تنظیم شده در MFC
۱۵۰ شکل ۵-۶. میزان تبدیل اتانول بر حسب دما، نسبت مولی S/E برابر ۴، نسبت مولی O/E برابر $1/5$ ، دبی مایع خوراک (آب و اتانول) برابر $2/0$ میلی لیتر بر دقیقه
۱۵۱ شکل ۶-۶. میزان تبدیل اتانول بر حسب نرح جريان مایع خوراک، نسبت مولی S/E برابر ۴، نسبت مولی O/E برابر $5/1$ ، دمای واکنش C 400°
۱۶۵ شکل پ ۱-۲. تصویر SEM از کاتالیزور به کار برد شده، متوسط قطر ذرات (۶۹ میکرومتر)
۱۶۷ شکل پ ۲-۲. ابزار مورد استفاده، (الف) MFC، (ب) پمپ سرنگی، (ج) کوره و راکتور لوله ای با کنترل PID دمای، (د) کندانسور پوسته و کویلی، (و) دستگاه کروکاتوگرافی گازی با دتکتور μ -TCD
۱۶۸ شکل پ ۱-۳. کروماتوگرام به دست آمده برای کپسول استاندارد ۳

فهرست جدول‌ها

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

جدول ۹-۵. افزایش میزان تبدیل متانول در مدل ریفرمر مخروطی با افزایش سطح مقطع نسبت به مدل ریفرمر مخروطی با کاهش سطح مقطع	۱۲۵
جدول ۱-۶. هدایت حرارتی برای برخی از گازها	۱۴۸
جدول ۲-۶. 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 ۰/۰۵ میلی لیتر بر دقیقه	۱۵۰
جدول پ-۱. مواد مصرفی مورد نیاز در طرح	۱۶۵
جدول پ-۲. ابزار مورد استفاده در طرح	۱۶۶
جدول پ-۳. ترکیب کپسول‌های استاندارد برای کالیبراسیون دستگاه کروماتوگرافی گازی (GC)	۱۶۸
جدول پ-۴. عدم قطعیت تکرارپذیری برای کپسول استاندارد ۱	۱۶۸

فهرست علائم و اختصارات

ε	Porosity of Bed	تخلخل بستر
μ_{mix}	Viscosity of Mixture ($\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$)	ویسکوزیتیه مخلوط
ρ_{mix}	Density of Mixture (kg m^{-3})	چگالی مخلوط
$C_{p,i}$	Heat specific of i component ($\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$)	حرارت ویژه جزء i
$C_{p,mix}$	Heat specific of Mixture ($\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$)	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 ($\text{w m}^{-1}\text{K}^{-1}$)	هدایت حرارتی مؤثر
$k_{g,mix}$	Thermal conductivity of gaseous Mixture ($\text{w m}^{-1}\text{K}^{-1}$)	هدایت حرارتی مخلوط گازی
k_s	Thermal conductivity of Solid ($\text{w m}^{-1}\text{K}^{-1}$)	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

فصل اول - مقدمه

۱- مقدمه

در این فصل، ابتدا از اهمیت هیدروژن به عنوان انرژی پاک صحبت می‌شود. مجموعه‌ای از عوامل مختلف از جمله محدودیت منابع فسیلی، تأثیرات منفی زیست محیطی بهره‌گیری از منابع هیدروکربنی، افزایش قیمت سوخت‌های فسیلی، موجب شده که متخصص‌های مباحث انرژی و محیط زیست، بررسی بیشتری در این زمینه انجام دهند تا ساختار نوین مبتنی بر امنیت ارائه انرژی و حفظ محیط زیست ایجاد کنند. اهمیت هیدروژن در این بحث قابل توجه است. در ادامه این فصل، به معرفی فرآورنده سوخت برای تولید هیدروژن، پرداخته می‌شود. سپس به استفاده از میکروراکتورها در این سیستم اشاره می‌شود و در بخش انتهایی نیز به معرفی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD^۱) به عنوان ابزاری برای مدل‌سازی این سیستم پرداخته می‌شود.

۱-۱ انرژی و سوخت پاک

سوخت‌های جامد، مایع یا گاز، حامل‌های انرژی هستند. عملاً اکثر سوخت‌های موجود در بازار، بر اساس منابع فسیلی بودند که شامل هیدروکربن‌ها با ترکیب گوناگون هستند (کلب^۲، ۲۰۰۸). با این حال،

¹ Computational Fluid Dynamic
² Kolb