مجموعه مقالات هفتمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران ۲۴ و ۲۵ بهمن ۱۳۹۶، ایران، تهران، دانشگاه صنعتی شریف FCCI-2018-1071

مدلسازی عددی اثر دما، تخلخل و جریان جرم متان و اکسیژن ورودی در تولید هیدروژن به روش اکسیداسیون جزیی متان در حضور کاتالیست پلاتینیوم

علی سعیدی استادیار، دانشگاه بیرجند، دانشکده مهندسی Ali.saeedi@birjand.ac.ir

نازیلا اللهدادی دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه بیرجند، دانشکده مهندسی nazila.allahdadi@birjand.ac.ir

چکیدہ

در سالهای اخیر تمرکز زیادی بر تولید و استفاده از گاز هیدروژن بهعنوان یک منبع انرژی پاک، صورت پذیرفتهاست در این بین به منظور کهش امکان رسوب کربن طلی فرآیند تولید هیدروژن، استفاده از روش اکسیداسیون جزیی متان با کاتالیست دارای اهمیت می باشد. در مقاله حاضر روش اکسیداسیون جزیلی متان در حضور پلاتینیوم در کانترا شبیه سازی شده است و اثرات دماهای ورودی مختلف راکتور، تخلخل و جریان جرم ورودی در دماهای مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که در دمای ۲۰۰ درجه سانتی گراد با افزایش تخلخل سطح واکنش تولید هیدروژن ۸٫۴ درصد افزایش می یابد و با افزایش جریان جرم سانتی گراد افزایش تخلخل و افزایش می یابد و در دمای ۲۵۰۰ درجه مختلف بر میزان تولید هیدروژن و مصرف متان و کسر مولسی گونههای کربن منواکسید و دی اکسیدکرین تقریبا اثری ندارد. همچنین با افزایش دما ز ۲۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد تولید همچنین با افزایش دما نزدیک به ۳۹ درصد افزایش می یابد.

کلمات کلیدی: اکسیداسیون جزیی، تولید هیدروژن، کاتالیست مقدمه

اكثر تقاضای انرژی جهان را سوختهای فسیلی تامین میكنند، اما این سوختها قابل كاهش هستند و باعث انتشار گازهاى گلخانهاى از جمله می شوند که در نهایت منجر به گرم شدن کره زمین و تغییرات آب و ${
m CO}_2$ هوایی می شوند [1]. از این رو در سال های اخیر تمرکز زیادی بر تولید و استفاده از گاز هیدروژن به عنوان یک منبع انرژی پاک، صورت پذیرفتهاست. هیدروژن اگر چه منبع انرژی به شمار نمی ود اما به عنوان حامل انرژی، میتواند به روشهای مختلف تولید شود. از روشهای تولید هیدروژن مىتوان به روشهاى فتوالكتروشيميايى، ترموشيميايى، الكتروليزآب، اکسیداسیون جزیی، ریفرمینگ (ریفرمینگ بخار متان، ریفرمینگ خشک متان و رفرمینگ اتوترمال) اشاره کرد [2]. از بین روشهای مختلف، برای كاهش امكان رسوب كربن طي فرآيند توليد هيدروژن استفاده از روش اکسیداسیون جزیی متان یک راه پیشنهادی میباشد [3]. در صورتی که واكنش اكسيداسيون جزيى در حضور كاتاليست انجام شود، سرعت واكنش در دماهای پایین نیز قابل افزایش میباشد [4]. اکسیداسیون جزئی کاتالیستی متان فرآیند بسیار امیدبخشی برای تولید هیدروژن و گاز سنتز به عنوان تکنولوژی پیشتازی در کنار ریفرمینگ بخار به شمار میرود.

 $CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2 \quad \Delta H = -36 \text{ Kjmol}^{-1}$ (1)

واکنش (۱)، واکنش اکسیداسیون جزیی متان را نشان میدهد.

مازو و همکاران [5]، تولید گاز سنتز (H₂ و OC) به روش اکسیداسیون جزیی متان در دمای ۸۵۰–۹۶۰ درجه سانتیگراد روی NdCaCoO_{3.96} در راکتور بستر ثابت را مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنها نشان می دهد که بیش از ۹۰ درصد CH₄ و CD به H₂ و OD با نسبت برابر ۲ تبدیل می شوند. همچنین تجزیه NdCaCoO_{3.96} در وضعیت اکسداسیون جزیی متان باعث تشکیل اکسید کبالت و فلز کبالت می شود. برای این کاتالیست در ۱۴۰ ساعت واکنش، کاهش فعالیت مشاهده نشده است. تشکیل گاز سنتز همراه با رسوب کربن روی کاتالیزور همراه است. با این حال، این فرایند تا حد زیادی بر خواص کاتالیزوری مواد تاثیر نمی گذارد.

تانگ و ماتسومورا اثر فعالیت کاتالیست و شدت جریان واکنشگرها را بر روی درصد تبدیل متان و میزان جدایش هیدروژن در یک راکتور غشایی بررسی کردند. نتایج مطالعه آنها نشاندادهاست که عبورپذیری هیدروژن از غشا و فعالیت کاتالیست بر روی میزان جدایش هیدروژن و سرعت تولید آن موثر بوده و افزایش عبورپذیری هیدروژن از غشا و فعالیت کاتالیست باعث افزایش میزان جدایش هیدروژن و تولید آن می شود [6].

هالت ایرن فیگن و همکاران [7]، کاتالیزورهای مختلف برای اکسیداسیون جزئی متان را از لحاظ خواص ساختاری و عملکرد شیمیایی توسعه و مورد مطالعه قرار دادند. برای این منظور کاتالیستهای CO، Ni-Co، No-Co، م Ru-Ni-Co، و نیکل را بر روی سازه های یکپارچه سرامیکی بارگذاری کردند. آنها آزمایشهای فعالیت کاتالیزورها در یک راکتور لولهای با سرعت جریان کل ۴۵۰ میلی لیتر بر دقیقه در دماهای ۶۰۰ تا ۵۸۰ درجه سانتیگراد انجام دادند. نتایج آنها نشان داد که co-Ni-Ru موفقترین کاتالیزورها بودند و ۹۵٬۸۹ یا در حالی که بازده تولید هیدروژن در دمای ۹۵،۰۵ درجه سانتی گراد ۹۵٬۸۹ درصد می باشد، تبدیل میشود.

آکیلا باراما و همکاران [8]، اکسیداسیون جزئی متان در حضور کاتالیست-های (NiMg) A و دمای واکنش ۷۵۰ درجه سانتی گراد و نسبت متان به O₂ برابر ۲ مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنها نشان میدهد که با کاهش دما و افزایش میزان نیکل و آلومینیوم در ترکیب کاتالیزورها، فعالیت کاتالیزورها افزایش می یابد.

آکیلا باراما و همکاران [9]، اکسیداسیون جزیی متان در حضور کاتالیزورها بر پایهی Mg-Al-Ni را در محدوده دمای ۵۰۰ تا ۸۰۰ درجه سانتیگراد مورد آزمایش قرار دادند. نتایج آنها نشان میدهد که کاتالیزورهای آغشته به ۱۰ درصد وزنی Ni/MgAl₂O₄ بالاترین فعالیت و ثبات را در اکسیداسیون جزئی متان از خود نشان میدهند که منجر به تولید گاز سنتز (CO و H2) در ۸۰۰ درجه سانتیگراد همراه با ۹۵٪ تبدیل متان میشود.

ماريانا و همكاران [10]، تبديل متان به گاز سنتز (هيدروژن و كربنمنواكسيد) توسط اكسيداسيون جزيى متان با استفاده از كاتاليست پلاتينيوم را بررسي كردند. نتايج آنها نشان ميدهد كه افزودن آلومينيوم (Al) نسبت به افزودن زركونیم (Zr) و سریم (Ce) به پلاتینیوم، میزان تبدیل متان به هیدروژن در دماهای بالاتر (۸۰۰–۵۵۰ درجه سانتی گراد)، بیشتر می شود. همچنین آن ها با استفاده از کاتالیست PtZr در دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد به تولید ۶۰ درصدی هیدروژن در حالی که تولید كربن دى كسيد ناچيز مىباشد دست يافتند. با توجه به تحقيقات صورت گرفته و مطالب بیان شده در اهمیت بررسی روش اکسیداسیون جزیی برای تولید هیدروژن در حضور کاتالیست، در تحقیق حاضر مدلسازی یکبعدی فرآيند اكسيداسيون جزئي متان در حضور كاتاليست پلاتينيوم با روش مدلسازی ترمودینامیکی در محیط برنامه نویسی پایتون و با استفاده از کدهای کانترا انجام شده است و اثرات تغییرات دمای اولیه، ضریب تخلخل (نسبت حجم فضای خالی بر حجم کل) و جریان جرم متان و اکسیژن ورودی بر میزان تولید هیدروژن و تجزیه متان و آلایندهها مورد بررسی قرار گرفته است.

مبانی و روش حل

در مدل های ترمودینامیکی حجم کنترل بر کل حجم مورد نظر منطبق شده و شرایط دمایی و فشاری برای تمامی نقاط یکنواخت فرض می شود که اصطلاحا به آن شرایط صفربعدی گفته می شود. در مدل سازی مقاله حاضر برای بررسی تغییرات کسر مولی گونهها در طول راکتور (حل یک بعدی)، همانند مدل مشبندی در تحلیل CFD از ترکیب تعدادی مدل صفربعدی پشت سر هم یک مدل یک بعدی طراحی شده است. در این مدل راکتورها به عنوان فضاهای صفر بعدی به صورت یک مش یکبعدی پشت سر هم قرار گرفته و شرایط خروجی هر راکتور به عنوان شرایط ورودی راکتور بعدی در نظر گرفته می شود. با این تکنیک می توان از نگاه صفر بعدی یک حل یکبعدی را مورد بررسی قرار داد. با توجه به دقت عملکردی و نتایج اعتبارسنجی مناسب مکانیزم واکنش سطحی کویکینو و دتسچمن [11] از این مکانیزم برای مدل سازی واکنش شیمیایی اکسیداسیون جزئی متان در حضور کاتالیست پلاتینیوم استفاده شده است. کد مورد نظر برای استفاده در نرمافزار کانترا (مجموعه کانترا، بهعنوان یک ابزار نرمافزاری با مدل برنامەنويسى شىءگرا درزمينـەى احتـراق، سـينتيك شـيميايى، فراينـدهاى ترمودینامیکی و انتقال جرم و حرارت می باشد)، در محیط پایتون نوشته شدهاست. مکانیزم احتراق در یک راکتور بستر ثابت (PFR) که یک راکتور فشار ثابت میباشد، مورد بررسی قرار گرقتهاست. در این راکتور (شکل۱) واکنش های شیمیایی در زمان حرکت واکنش گرها درون PFR انجام می شود. این راکتور دارای یک ورودی و خروجی می باشد. جریان در این راکتور بستر ثابت، در حالت پایا در نظر گرفته شدهاست و محیط به صورت متخلخل فرض شده است، در واقع شبکه متخلخل به صورت یک ضریب افت فشار در شبکه دخیل شده است. نمایی از کاتالیست پلاتینیوم استفاده شده در ساختار راکتور استفاده شده، در شکل ۲ که توسط اولیور و همکاران [12] بررسی شده، نشان داده شدهاست. در کار حاضر تغییرات کسرمولی و CO_2 ، H_2 و CO_2 ، H_2 در طول راکتور برای دماهای ورودی مختلف مورد CO_2 ، H_2 بررسی قرار گرفتند. محیط متخلخل بر واکنشهای سطحی انجام شده در راکتور با اعمال یک ضریب تخلخل (به صورت حجم فضای خالی بر حجم کل تعریف میشود) اثر می گذارد. از این رو اثر ضریب تخلخلهای متفاوت بر تغییرات کسر مولی گونههای نامبرده در خروجی راکتور در دماهای ورودی مختلف مورد بررسی قرار گرفتهاست.

در انتها نیز جریان جرم متان و اکسیژن ورودی (با درنظر گرفتن اکسیژن و متان به عنوان خوراک ورودی به راکتور در اکسیداسیون جزیی متان) بر تغییرات کسر مولی این گونهها در خروجی راکتور مورد بررسی قرار گرفته است.

معادلات حاكم

معادله بقای جرم (رابطه ۱)، جرم کلی از محتویات راکتور را به عنوان نتیجهای از جریان ورودی و خروجی به راکتور و تولید گونههای روی دیواره راکتور را نشان میدهد:

$$\frac{dm}{dt} = \sum_{in} \dot{m}_{in} - \sum_{out} \dot{m}_{out} + \dot{m}_{wall}$$
(1)

همچنین برای بقای گونهها داریم:

$$m \frac{\mathrm{d}Y_k}{\mathrm{d}t} = \sum_{in} \dot{\mathrm{m}}_{in} \left(Y_{k,in} - Y_k \right) + \dot{\mathrm{m}}_{k,gen} - Y_k \dot{\mathrm{m}}_{wall}$$
 (2) راکتور استفاده شده فشار ثابت میباشد بنابراین خواهیم داشت:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dU}{dt} + \mathcal{P}\frac{dV}{dt} + V\frac{d\mathcal{P}}{dt}$$
(3)

U m^3 بر ماکتور برحسب V Kg حجم راکتور برحسب M مراکتور و Y_k کسر انرژی داخلی، T دما برحسب کلوین، H آنتالپی کلی در راکتور و Y_k کسر جرمی هرگونه میباشد.

ضریب تخلخل (نسبت حجم فضای خالی بر حجم کل) نیز که بر مساحت کاتالیست درون راکتور تاثیر می گذارد (به این صورت که با افزایش ضریب تخلخل سطح واکنشی افزایش مییابد) و در نهایت با تاثیر بر جریان جرم در معادلات اثر می گذارد.



شکل ۱ – طرح شماتیک راکتور بستر ثابت PFR



شكل ٢ -تصويري از كاتاليست پلاتينيوم [12]

نتايج:

نتایج مدل سازی برای درصد تبدیل متان با نتایج کار ماریانا و همکاران [10] اعتبارسنجی شده که در شکل ۳ قابل مشاهده است. مقادیر مرجع به طور آزمایشگاهی با استفاده از یک راکتور بستر ثابت، با پوشش ۲۰mg از کاتالیست پلاتینیوم و تحت فشار اتمسفر محاسبه شده است. بیشینه درصد خطای بین دادههای آزمایشگاهی و نتایج مدلسازی به میزان ۱۰ درصد است. که نشان از دقت مناسب کد حاضر در مدلسازی میزان تبدیل گونه متان تا دمای ۸۰۰ درجه سانتی گراد دارد.

برای مدلسازی حاضر، مکانیزم ۴۶ واکنشی (مکانیزم واکنش سطحی کویکینو و دتسچمن[11]) و شبیهسازی کامل استفاده شدهاست.

شکل ۴ نتایج مربوط به تغییرات کسر مولی گونه ی H₂ در طول راکتور برای دماهای ورودی ۷۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد را نشان میدهد. با افزایش دمای ورودی بیشترین تولید هیدروژن تقریبا در فاصله ۵٫۵ میلیمتری ابتدایی راکتور اتفاق میافتد و از آن به بعد تا انتهای راکتور کسر مولی ثابت باقی میماند. با افزایش دما تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد تولید هیدروژن به میزان ۴۸ درصد نسبت به تولید آن در دمای ۷۰۰ درجه سانتی گراد افزایش مییابد. با افزایش دما تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد تاثیر چندانی بر افزایش تولید هیدروژن مشاهده نمیشود.

شکل ۵ تغییرات کسر مولی گونه ی CH₄ در طول راکتور برای دماهای ورودی ۲۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتیگراد را نشان می دهد. با افزایش دما مصرف متان حدود ۳۹ درصد افزایش مییابد. در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد تجزیه متان حدود ۹ درصد و در دماهای ۱۵۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتیگراد حدود ۲۲ درصد میباشد.

تغییرات کسر مولی گونهی CO در طول راکتور برای دماهای ورودی ۷۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد در شکل ۶ آمده است. با افزایش دما از ۷۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد تولید CO حدود ۲۹ درصد افزایش می ابد. مشاهده می شود که با افزایش دما از ۱۵۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد تولید CO تقرببا ثابت باقی می ماند.

شکل ۷ نشان می دهد که بیشترین میزان کربن دی اکسید در دمای ۷۰۰ درجه سانتی گراد تولید می شود. در دماهای ۱۵۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد که کمترین میزان تولید کربن دی کسید (تقریبا ۲۰۰۰۲) در خروجی راکتور مشاهده می شود. همچنین با افزایش دما از ۷۰۰ تا ۱۹۰۰ درجه سانتی گراد CO2 خروجی از راکتور نزدیک به ۱۶ درصد کاهش می یابد.

شکل ۸ تغییرات کسر مولی تولید هیدروژن و مصرف متان در ضرایب تخلخل متفاوت (۲,۰، ۳,۰، ۵,۰ و ۲,۰) برای دماهای ورودی ۹۰۰، ۱۱۰۰، ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد در خروجی راکتور را نشان می دهد. مطابق شکل ۸، در دماهای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد افزایش تخلخل بر میزان تولید هیدروژن و مصرف متان تقریبا اثری ندارد در حالی که برای دماهای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی گراد با افزایش تخلخل تولید هیدروژن به ترتیب ۹٫۸ درصد و ۲ درصد و مصرف متان به ترتیب ۷ درصد و ۲ درصد افزایش می یابد.

تغییرات کسر مولی منواکسیدکربن و دی اکسیدکربن در ضرایب تخلخل متفاوت (۰۰,۱ ،۰۰,۳ ،۰٫۹ و ۰٫۷) برای دماهای ورودی مختلف ۹۰۰، ۱۱۰۰، ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ در خروجی راکتور در شکل ۹ مشاهده می شود.

شکل ۹ نشان می دهد که در دماهای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد افزایش تخلخل بر کسر مولی گونه ها تاثیر چندانی ندارد ولی برای دماهای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی گراد با افزایش تخلخل به ترتیب کسر مولی کربن میاکسید ۵ و ۲ درصد افزایش و دی اکسیدکربن ۳ و ۱ درصد کاهش مییابد. همچنین مشاهده می شود که با افزایش دما از ۹۰۰ تا ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد تقریبا برای هر ضریب تخلخل OD در خروجی راکتور به میزان ۱۵ درصد افزایش و CO نزدیک به ۱۰ درصد کاهش می یابد. به طور کلی مطابق شکل ۸ و ۹ می توان گفت که اثرات افزایش تخلخل بر تغییرات کسر مولی گونه ها در دماهای پایین تر نسبت به دماهای بالاتر بیشتر می باشد.





شکل ۴– تغییرات کسر مولی H₂ در طول راکتور در دماهای اولیه مختلف

هفتمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران، ۲۴و ۲۵ بهمن ماه ۱۳۹۶ تهران، دانشگاه صنعتی شریف

شکل ۱۰ تغییرات کسر مولی هیدروژن و مصرف متان در جریان جرم متان و اکسیژن ورودی مختلف در دماهای اولیه ۹۰۰، ۱۱۰۰، ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد را نشان می دهد. مشاهده می شود که در دماهای ۹۰۰ و تولید هیدروژن به ترتیب ۸ و ۳ درصد کاهش یافته و میزان مصرف متان به ترتیب ۳ و ۶ درصد افزایش می یابد. برای دماهای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد افزایش جریان جرم متان و اکسیژن ورودی تقریبا بر تولید هیدروژن و مصرف متان تاثیری ندارد در حالی که با افزایش دما از ۹۰۰ تا افزایش ۲۰ تا ۲۸ درصدی تولید هیدروژن و کاهش ۱۷ تا ۳۳ درصدی متان مشاهده می شود.

شکل ۱۱ تغییرات کسر مولی کربن مواکسید و کربن دیاکسید در جریان جرم متان و اکسیژن ورودی مختلف در دماهای اولیه مختلف (۹۰۰، ۱۱۰۰ درجه برای و ۱۵۰۰) را نشان می دهد. در دماهای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی گراد با افزایش جریان جرم متان و اکسیژن ورودی کسر مولی کربن منواکسید کاهش و کسر مولی دی اکسیدکربن افزایش می یابد. مشابه قبل برای دماهای ۱۳۰۰ و ۱۵۰۰، افزایش جریان جرم متان و اکسیژن ورودی تقریبا بر کسر مولی کربن منواکسید و کربن دیاکسید اثری ندارد. جریان جرم ورودی در دماهای پایین تر نسبت به دماهای بالاتر تاثیرات بیشتری بر تغییرات کسر مولی گونهها دارد. همچنین مشاهده می شود که با افزایش دما از ۹۰۰ تا ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد برای جریان جرم متان و اکسیژن ورودی مختلف افزایش ۱۴ تا ۱۸ درصدی CO و کاهش ۲ تا ۱۱ درصدی CO₂ مشاهده می شود.

در ادامه بررسی دیاگرام پیشروی گونه کربن و هیدروژن در فرایند اکسیداسیون جزیی متان رسم شدهاست. در این دیاگرامها بر اساس کمیتهای سینتیکی واکنشهای زنجیرهای کلیه مسیرهای موجود در فرایند اکسیداسیون جزیی متان برای شرایط با دمای اولیه ۳۰۰، ۷۰۰ و برای هیدروژن، ضریب تخلخل ۲٫۰ و فشار اتمسفر است. ضخامت هر پیکان نشاندهنده اهمیت مسیر موردنظر است. لازم به ذکر است این دیاگرام در شرایط دمایی و ترکیب ورودی معرفی شده به این شکل خواهد بود و با تغییر دما، فشار و ترکیب ورودی تغییر خواهد کرد.

شکل ۱۲ نشان می دهد که در دمای ۳۰۰ درجه سانتی گراد امکان تشکیل CO از تجزیه متان بسیار کم و حدود ۵ درصد میباشد. درحالی که مطابق شکل ۱۳ و ۱۴ در دمای ۷۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتی گراد احتمال تشکیل دوباره (Ch2(s) از تشکیل CO خیلی بیشتر میباشد.

نتیجه گیری:

مدلسازی عددی (ترمودینامیک یک بعدی) تولید هیدروژن به روش اکسیداسیون جزئی متان در حضور کاتالیست پلاتینیوم در محیط پایتون با استفاده از کدهای کانترا انجام شد. عملکرد مدلسازی حاضر با نتایج آزمایشگاهی اعتبار سنجی شد و اثرات دماهای اولیه مختلف در طول راکتور، اثرات تخلخل و جریان جرم ورودی مختلف در خروجی راکتور بررسی شد که نتایج زیر حاصل این بررسی است:

 ۱ افزایش دمای ورودی بیشترین تولید هیدروژن و کربن-منواکسید و بیشترین مصرف متان تقریبا در فاصله ۰٫۵ میلی-متری ابتدایی راکتور اتفاق میافتد و از آن به بعد تا انتهای

راكتور كسر مولى ثابت باقى مىماند.

- ۲- در دمای ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد افزایش تخلخل و افزایش جریان جرم متان و اکسیژن ورودی مختلف بر میزان تولید هیدروژن و مصرف متان و کسر مولسی گونههای کربن منواکسید و دی اکسید کربن تقریبا اثری ندارد.
- ۳- در دماهای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی گراد با افزایش ضریب
 تخلخل تولید هیدروژن به ترتیب تا میزان ۸٫۴ درصد و ۲ درصد
 و مصرف متان به ترتیب تا میزان ۷ درصد و ۲ درصد افزایش
 می یابد.
- ۴- دماهای ۹۰۰ و ۱۱۰۰ درجه سانتی گراد با جریان جرم متان و اکسیژن ورودی مختلف میزان تولید هیدروژن به ترتیب ۸ و ۳ درصد کاهش یافته و میزان مصرف متان به ترتیب ۳ و ۶ درصد افزایش می یابد.
- ۵- اثرات افزایش تخلخل و جریان جرم متان و اکسیژن ورودی مختلف بر تغییرات کسر مولی گونهها در دماهای پایین تر نسبت به دماهای بالاتر بیشتر می باشد.



شکل ۵– تغییرات کسر مولی CH₄ در طول راکتور در دماهای اولیه مختلف



شکل ۶– تغییرات کسر مولی CO در طول راکتور در دماهای اولیه مختلف

هفتمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران، ۲۴و ۲۵ بهمن ماه ۱۳۹۶ تهران، دانشگاه صنعتی شریف



شکل ۷- تغییرات کسر مولی CO₂ در طول راکتور در دماهای اولیه مختلف



شکل ۸– تغییرات کسر مولی H₂ و CH₄ در ضرایب تخلخل مختلف در دماهای مختلف در خروجی راکتور



دماهای اولیه مختلف در خروجی راکتور



شکل ۱۰– تغییرات کسر مولی H₂ و CH₄ در جریان جرم ورودی مختلف در دماهای اولیه مختلف در خروجی راکتور



شکل ۱۱– تغییرات کسر مولی CO₂ و CO در جریان جرم ورودی مختلف در دماهای اولیه مختلف در خروجی راکتور



شکل ۱۲- دیاگرام مسیر مربوط به گونه C در دمای ۳۰۰ درجه سانتی گراد

هفتمين كنفرانس سوخت و احتراق ايران، ٢۴و ٢۵ بهمن ماه ١٣٩۶

تهران، دانشگاه صنعتی شریف

مراجع

- [1] S. Ahmed and M. Krumpelt, "Hydrogen from hydrocarbon fuels for fuel cells," *International journal of hydrogen energy*, vol. 26, pp. 291-301, 2001.
- [2] S. Saeidi, F. Fazollahi, S. Najari, D. Iranshahi, J. J. Klemeš, and L. L. Baxter, "Hydrogen Production: Perspectives, Separation with special emphasis on Kinetics of WGS Reaction: A state-of-the-art review," *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2016.
- [3] C. Avila-Neto, S. Dantas, F. Silva, T. Franco, L. Romanielo, C. Hori, *et al.*, "Hydrogen production from methane reforming: thermodynamic assessment and autothermal reactor design," *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, vol. 1, pp. 205-215, 2009.
- [4] J. Zhu, D. Zhang, and K. King, "Reforming of CH 4 by partial oxidation: thermodynamic and kinetic analyses," *Fuel*, vol. 80, pp. 899-905, 2001.
- [5] A. G. Dedov, A. S. Loktev, D. A. Komissarenko, G. N. Mazo, O. A. Shlyakhtin, K. V. Parkhomenko, *et al.*, "Partial oxidation of methane to produce syngas over a neodymium–calcium cobaltate-based catalyst," *Applied Catalysis A: General*, vol. 489, pp. 140-146, 2015/01/01/ 2015.
- [6] J. Tong and Y. Matsumura, "Effect of catalytic activity on methane steam reforming in hydrogen-permeable membrane reactor," *Applied Catalysis A: General*, vol. 286, pp. 231-226,2005.
- H. E. Figen and S. Z. Baykara, "Hydrogen production by partial oxidation of methane over Co based, Ni and Ru monolithic catalysts," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 40, pp. 7439-7451, 2015/06/29/ 2015.
- [8] D. Kaddeche, A .Djaidja, and A. Barama, "Partial oxidation of methane on coprecipitated Ni–Mg/Al catalysts modified with copper or iron," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 42, pp. 15002-15009, 2017/06/01/ 2017.
- [9] H. Messaoudi, S. Thomas, A. Djaidja, S. Slyemi, R. Chebout, S. Barama, et al., "Hydrogen production over partial oxidation of methane using NiMgAl spinel catalysts: A kinetic approach," *Comptes Rendus Chimie*, vol. 20, pp. 738-746, 2017/07/01/ 2017.
- [10] M. M. Souza and M. Schmal, "Methane conversion to synthesis gas by partial oxidation and CO 2 reforming over supported platinum catalysts," *Catalysis letters*, vol. 91, pp. 11-17, 2003.
- [11] J. P.-R. R. Quiceno, J. Warnatz, O. Deutschmann."<u>www.detchem.com s</u>,"*Heidelbe* ۱۳۹۶ مفتمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران، ۲۴ و ۲۵ بهمن ماه ۱۳۹۶



شکل ۱۳- دیاگرام مسیر مربوط به گونه C در دمای ۷۰۰ درجه سانتی گراد



شکل ۱۴- دیاگرام مسیر مربوط به گونه C در دمای ۱۰۰۰ درجه سانتی گراد

تهران، دانشگاه صنعتی شریف

- J. P.-R. R. Quiceno, J. Warnatz, O.
 Deutschmann."<u>www.detchem.com s</u>,"*Heidelbe rg University ,German*, Appl.
 Catal. A: General (2006).
- [12] O. Korup, C. F. Goldsmith, G. Weinberg, M. Geske, T. Kandemir, R. Schlögl, *et al.*, "Catalytic partial oxidation of methane on. platinum investigated by spatial reactor profiles, spatially resolved spectroscopy ,and microkinetic modeling," *Journal of catalysis*, vol. 297, pp. 1-16, 2013.