

# بررسی تولید هیدروژن از طریق ریفورمینگ متان در رآکتورهای مونولیتی با استفاده از روشهای CFD

محمد ایرانی

ایران، تهران، پژوهشگاه صنعت نفت، پژوهشکده گاز

iranim@ripi.ir

## چکیده:

در این تحقیق انجام واکنش ریفورمینگ متان روی کاتالیست Ni جهت تولید هیدروژن در مایکرو رآکتور با استفاده از مدل سازی ریاضی بررسی شده است. مدل سازی ریاضی با استفاده از روشهای CFD انجام گرفته که یک روش حل کامل و دقیق برای جریانهای واکنشی می باشد. یک تک کانال جهت شبیه سازی در نظر گرفته شد و مدل دوبعدی تقارن محوری جهت شبیه سازی انتخاب گردید. معادلات نرخ واکنش برای واکنشهای SMR و شیفت-آب-گاز (WGS) بر اساس مدل های موجود Langmuir-Hinshelwood انتخاب شد. آزمایشات مربوط به فرآیند SMR در یک رآکتور مقیاس آزمایشگاهی انجام گرفتند. نتایج حاصل از شبیه سازی با نتایج تجربی مقایسه گردید و توافق خوبی مشاهده گردید. مدل CFD تایید شده به عنوان آزمایشگاه مجازی در نظر گرفته شد. برای بررسی اثر پارامترها روی عملکرد رآکتور، یک طراحی آزمایش با استفاده از نرم افزار Expert Design انجام گرفت. پارامترهای بررسی شده شامل دمای خوراک، فشار عملیاتی، فلاکس جرمی خوراک و نسبت مولی بخار آب به متان بودند که با بررسی های انجام گرفته مشخص گردید که موثرترین پارامترهایی که روی درصد تبدیل از نظر آماری تاثیر دارد به ترتیب GHSV، نسبت مولی بخار آب به متان، فشار و دمای خوراک می باشند همچنین مقادیر پارامترها برای کارکرد بهینه رآکتور معرفی شدند. از بررسی نتایج CFD می توان مطالعات بیشتری روی عملکرد رآکتور انجام دادو با صرف هزینه کم اطلاعات ارزشمندی بدست آورد.

کلمات کلیدی: رآکتور مونولیتی، متان، ریفورمینگ با بخار، CFD، آنالیز حساسیت

## ۱- مقدمه

است. هیدروژن یکی از پاک ترین سوخت هایی است که می تواند جایگزین سوخت های فسیلی شود. بعلاوه تنوع گوناگونی از کاربردهای هیدروژن در صنعت وجود دارد که برخی از آنها عبارتند از: تولید آمونیاک، پیل سوختی، هیدروژناسیون و هیدروکراکینگ اشاره نمود.

رایج ترین فرآیند تولید هیدروژن در واحدهای صنعتی SMR است که در آن متان به هیدروژن تبدیل می گردد. تحقیقات در راستای تکنولوژی کوچک سازی فرآیندها برای توسعه تولید هیدروژن در مقیاس های کوچک در محل همچنان ادامه دارد [۲،۳]. رآکتورهای مونولیتی به دلیل مساحت در معرض بالای آنها، افت فشار کم، سهولت انتقال جرم و حرارت و مقاومت مکانیکی بالا به طور گسترده در بسیاری از کاربردها استفاده می گردند [۴]. بعلاوه استفاده از رآکتورهای مونولیتی مزایای فراوانی دیگری نسبت به

امروزه استفاده از گاز سنتز جایگاه ویژه ای در صنعت بخود اختصاص داده است. با استفاده از گاز سنتز و فرآیندهای مختلف می توان مواد متنوع شیمیایی تولید نمود، بنابراین گاز سنتز ماده اولیه بسیار با ارزشی جهت تولید مواد متنوع شیمیایی میباشد. در سالهای اخیر تلاشهای گسترده جهانی جهت استفاده موثر از گاز طبیعی و تبدیل آن به محصولات با ارزش و آسان از نظر حمل و نقل نظیر متانول، سوخت های هیدروکربنی مایع و مواد اولیه پتروشیمی نظیر اتیلن و سایر اولفین های سبک، انجام شده است [۱]. اثرات زیست محیطی انتشار گازهای آلاینده ناشی از احتراق سوخت های فسیلی از یک طرف و وضع قوانین بازدارنده در ارتباط با آلاینده های محیطی (Euro IV) از طرف دیگر نیاز به استفاده از سوخت های فسیلی پاک را افزایش داده

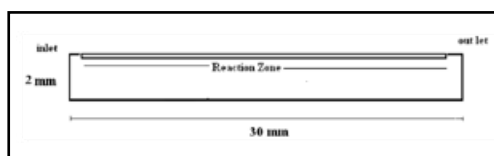


راکتورهای مرسوم دارد که عبارتند از: کاهش هزینه های ثابت و جایگیری در فضای کوچکتر [۲، ۷-۵].

همانطور که در شکل دیده می شود رآکتور با مخلوطی از گاز متان و بخار آب تغذیه می گردد. میزان دبی گاز با کنترل کننده دبی جرمی (۵۸۵۰ MFC-BROOKS®) و میزان دبی جرمی بخار آب با دستگاه مدل Bronkhorst Hi-Tec تنظیم می گردد. رآکتور مونولیتی که کاتالیست نیکل روی آن واشکوت شده در یک سیلندر شیشه ای از جنس کوارتز قرار داده شده و با پشم سنگ آب بندی می گردد. یک هیتر کربندی جهت ایجاد گرمای واکنش به دور سیلندر شیشه ای از جنس کوارتز بسته شده است. محصولات واکنش توسط یک خط لوله به GC متصل است تا آنالیز گازها انجام گیرد.

### ۳- مدلسازی

هندسه (شکل ۲-۲) در نظر گرفته شده برای شبیه سازی واکنش SMR در رآکتور مونولیتی یک کانال با عرضی برابر ۲mm و نیکل واشکوت شده است

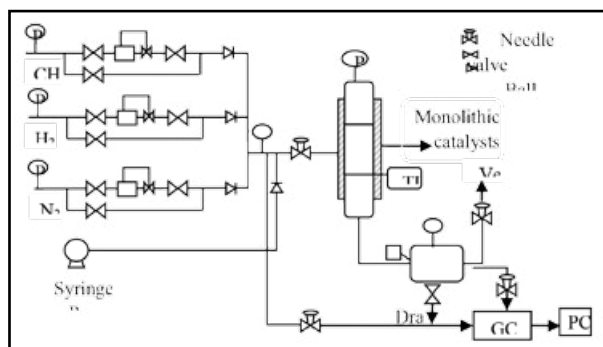


شکل ۲-۲ هندسه مسئله

مزایایی که در بالا برای رآکتور مونولیتی ذکر گردید، برای منابع گازی دور افتاده که کمتر در دسترس باشند [۸] مانند جزایر سیری، خارک و قشم جذابیت بیشتری دارند. ذخایر گاز اثبات شده ایران حدود ۱۰۴۵/۷ تریلیون فوت مکعب است که ۱۵/۸ درصد کل ذخایر جهان می باشد. ایران بعد از روسیه از لحاظ ذخایر گازی مقام دوم را دارد [۹]. بنابراین پتانسیل زیادی برای تولید هیدروژن موجود است. به منظور بررسی استفاده از این پتانسیل، پژوهشگاه صنعت نفت گستره وسیعی از فعالیتهای تجربی و شبیه سازی را انجام داده است. در این تحقیق تولید هیدروژن با استفاده از فرآیند SMR در یک رآکتور مقیاس پنج بررسی شد. همچنین اثر پارامترهای دمای خوراک، فشار عملیاتی، فلاکس جرمی خوراک و دمای دیواره روی عملکرد رآکتور، با استفاده از طراحی تجربی آزمایشها روی کارکرد رآکتور بررسی گردید و مقادیر این پارامترها برای کارکرد بهینه بدست آمد.

### ۲- سامانه تست رآکتوری

یک شکل شماتیک از مجموعه ای که آزمایشات در آن انجام شده در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱- شماتیک دستگاهی که آزمایشات تجربی توسط آن انجام شده است.

$CH_4 + H_2O \longrightarrow CO + 3H_2$	$R_1 = \frac{k_1 \left( p_{CH_4} p_{H_2O} - \frac{p_{H_2}^3 p_{CO}}{K_1} \right)}{p_{H_2}^{2.5} (DEN)^2}$
$CO + H_2O \longrightarrow CO_2 + H_2$	$R_2 = \frac{k_2 \left( p_{CO} p_{H_2O} - \frac{p_{H_2} p_{CO_2}}{K_2} \right)}{(DEN)^2}$
$CH_4 + 2H_2O \longrightarrow CO_2 + 4H_2$	$R_3 = \frac{k_3 \left( p_{CH_4} p_{H_2O}^2 - \frac{p_{H_2}^4 p_{CO_2}}{K_1 K_2} \right)}{p_{H_2}^{2.5} (DEN)^2}$

جدول ۱- واکنشهای در نظر گرفته شده در این شبیه سازی

در راکتور فرآیند SMR مواد واکنش دهنده که شامل بخار آب و متان می‌باشند. مواد واکنش دهنده در این راکتور با توجه به نوع کاتالیست (نیکل) انتخاب شده دست خوش واکنش‌های جداول ۱ و ۲ می‌گردند. پارامترهای نرخ واکنش در جدول ۱ آمده است.

$$\begin{aligned}
 K_1 &= 10266.76 \cdot \exp(-26830/T + 30.114) \\
 K_2 &= \exp(4400/T - 4.036) \\
 k_1 &= 9.49 \cdot 10^{16} \cdot \exp(-240100/(8.314 \cdot T)) \\
 k_3 &= 2.29 \cdot 10^{16} \cdot \exp(-243900/(8.314 \cdot T)) \\
 k_{CH_4} &= 6.65 \cdot 10^{-6} \cdot \exp(38280/(8.314 \cdot T)) \\
 k_{CO} &= 8.23 \cdot 10^{-7} \cdot \exp(70650/(8.314 \cdot T)) \\
 k_{H_2O} &= 1.77 \cdot 10^5 \cdot \exp(-88680/(8.314 \cdot T)) \\
 k_{H_2} &= 8.23 \cdot 10^{-22} \cdot \exp(82900/(8.314 \cdot T)) \\
 DEN &= 1 + K_{CO} P_{CO} + K_{H_2} P_{H_2} + K_{CH_4} P_{CH_4} + \frac{K_{H_2O} P_{H_2O}}{P_{H_2}}
 \end{aligned}$$

جدول ۲ اطلاعات مدل سینتیکی بهینه واکنش‌های ریفرمینگ متان با استفاده از بخار آب

انرژی و اجزاء می‌باشند.

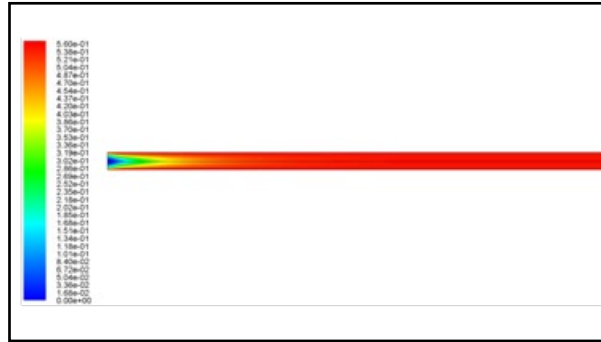
### ۳-۱- معادلات حاکم بر مسئله

معادلات حاکم بر جریان شامل بقای جرم، اندازه حرکت،

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) &= S_m & (5-3) \\
 \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho Y_i \vec{v}) &= -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i & (6-3) \\
 \frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) &= -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} & (7-3) \\
 \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \vec{v}) &= \nabla \cdot \left( k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\vec{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_E & (8-3)
 \end{aligned}$$

(شکل ۳) در دمای  $K$  ۱۰۷۳ رسم شده است. همانطور که در شکل مشاهده می‌گردد قسمت اعظم تغییرات در ۹ میلی‌متر اول انجام می‌گیرد بنابراین طول موثر راکتور ۹ میلی‌متر است و بقیه طول مربوط به توسعه زمان اورهال است. به عبارتی وقتی ۹ میلی‌متر اول کاتالیست استفاده گردید، از باقیمانده طول کاتالیست استفاده خواهد شد.

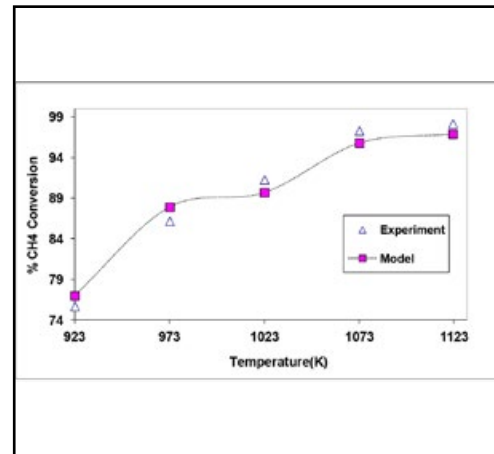
حل معادلات حاکم بر مسئله با گسسته‌سازی دامنه فیزیکی مسئله و تبدیل آن به یک دامنه محاسباتی آغاز می‌گردد. برای ایجاد شبکه‌بندی شکل هندسی راکتور از نرم‌افزار Gambit استفاده شده است. پس از ایجاد دامنه محاسباتی لازم است هر یک معادلات ارائه شده بر روی المان‌های تولید شده اعمال گردند. برای شبیه‌سازی از نرم‌افزار FLUENT استفاده گردید. روش مورد استفاده در این نرم‌افزار روش حجم محدود (Finite Volume) می‌باشد. در ابتدا برای اعتبارسنجی مدل CFD، با استفاده از اطلاعات آزمایشگاهی موجود چند شبیه‌سازی انجام گرفت که کانتور کسر مولی



شکل-۳ کانتور کسر مولی هیدروژن در طول رآکتور

طراحی آزمایشات با استفاده از روش D-optimal صورت گرفت که تعداد آزمایشات به همراه مقدار پارامتر مورد مطالعه در جدول ۳ آمده است. در ادامه، مواردی از شبیه سازیهای انجام شده که در آن در صد تبدیل ( پاسخ ) بیش از ۹۰ درصد است، انتخاب شده و نتایج ارائه شده که راجع به آن به تفصیل بحث شده است. از نتایج طراحی آزمایشات جدول آنالیز واریانس (جدول ۴) چنین بر می آید که همه پارامترهای مذکور روی در صد تبدیل موثر بوده و مطابق F-Test این آنالیز موثرترین پارامترهایی که روی در صد تبدیل از نظر آماری تاثیر دارد به ترتیب GHSV، نسبت مولی بخار آب به متان، فشار و دمای خوراک می باشند. در این جدول p-value نشان دهنده اهمیت پارامترهای گزینش شده برای آزمایش است که بر اساس مقدار F-Test به دست می آید. چنانچه این مقدار برای هر پارامتر از ۰/۰۵ کمتر باشد، نشان دهنده اهمیت این پارامتر در آزمایش مورد نظر است. علاوه بر این، هر چه این مقدار در مقایسه با مقدار متناظر با پارامترهای دیگر کمتر باشد، از اهمیت بیشتری برخوردار است.

نتایج شبیه سازی با اطلاعات تجربی مقایسه گردید. پارامتر مورد مقایسه در صد تبدیل بود که همانگونه که در شکل ۴ مشاهده می گردد حد اکثر خطای موجود کمتر از ۱۰ درصد بود که مقداری از خطا به خطای آزمایش مربوط است.



شکل-۴ مقایسه نتایج تجربی و شبیه سازی

در هر صورت اختلاف مشاهده شده بین نتایج شبیه سازی و آزمایشگاهی منطقی است. بنابراین می توانیم از مدل CFD تایید شده توسط اطلاعات تجربی به عنوان آزمایشگاه مجازی استفاده کرده و بررسی های بیشتر با استفاده از مدل CFD انجام گیرد. برای بررسی اثر پارامترهای مختلف در هر دو حالت مذکور یک سری شبیه سازیها با استفاده از طراحی تجربی آزمایشها انجام گرفت که در جدول ۳ تمامی آزمایشات به همراه مقادیر پارامترها آمده است. پارامترهای گستره بررسی هریک از آنها در جدول آمده است:

PARAMETER	VALUE
Feed Temperature (K)	۸۷۳-۱۱۷۳
GHSV	۱-۴
Steam to Methane Ratio	۱-۳
Pressure (bar)	۱۰-۴۰



	TF	SCR	P	GHSV	conversion
۱	۸۰۰	۲	۴۰	۴	۰.۷۲۵۷۴۹
۲	۸۰۰	۲	۴۰	۲	۰.۷۷۱۳۴۵
۳	۹۰۰	۳	۴۰	۴	۰.۸۸۵۶۳۸
۴	۸۰۰	۲	۴۰	۴	۰.۸۱۳۳۳۳
۵	۸۰۰	۲	۴۰	۲	۰.۸۹۶۹۸۳
۶	۹۰۰	۱	۴۰	۲	۰.۸۸۳۴۵
۷	۹۰۰	۲	۳۰	۲	۰.۹۳۹۱۶۱
۸	۷۰۰	۲	۲۰	۲	۰.۷۱۹۴۳۸
۹	۸۰۰	۳	۳۰	۴	۰.۸۲۸۳۸۲
۱۰	۷۰۰	۱	۴۰	۴	۰.۵۷۶۳۵۶
۱۱	۸۰۰	۱	۲۰	۴	۰.۵۹۰۵۵۱
۱۲	۷۰۰	۳	۲	۴	۰.۶۴۶۱۵۳
۱۳	۹۰۰	۳	۲۰	۳	۰.۷۹۶۶۱
۱۴	۸۰۰	۱	۳۰	۳	۰.۷۴۴۴۱۹
۱۵	۹۰۰	۱	۴۰	۴	۰.۸۵۹۷۵۱
۱۶	۷۰۰	۱	۲۰	۳	۰.۶۰۲۴۸۱
۱۷	۸۰۰	۲	۳۰	۳	۰.۸۳۲۲۱
۱۸	۷۰۰	۳	۴۰	۲	۰.۸۶۲۶۸۹
۱۹	۹۰۰	۱	۳۰	۳	۰.۸۲۱۶۹۴
۲۰	۷۰۰	۳	۳۰	۲	۰.۸۴۴۳۱۱
۲۱	۹۰۰	۲	۲۰	۴	۰.۶۹۷۶۹۹
۲۲	۸۰۰	۲	۲۰	۳	۰.۷۶۵۴۰۳
۲۳	۸۰۰	۳	۲۰	۲	۰.۸۶۳۹۹۱
۲۴	۹۰۰	۲	۴۰	۳	۰.۸۹۸۸۲۹
۲۵	۷۰۰	۳	۴۰	۳	۰.۸۱۷۵۸۷
۲۶	۹۰۰	۱	۳۰	۴	۰.۰۹۰۳۸۷
۲۷	۸۰۰	۳	۳۰	۲	۰.۹۳۰۱۲۲
۲۸	۸۰۰	۳	۲۰	۳	۰.۷۴۴۰۹۱
۲۹	۷۰۰	۲	۳۰	۳	۰.۷۳۶۵۶۷
۳۰	۷۰۰	۳	۳۰	۳	۰.۸۲۵۸۹۳
۳۱	۸۰۰	۱	۴۰	۲	۰.۹۰۸۹۴
۳۲	۷۰۰	۱	۳۰	۲	۰.۶۲۳۳۲۶
۳۳	۹۰۰	۱	۲۰	۲	۰.۸۴۷۷۵۷
۳۴	۸۰۰	۳	۴۰	۳	۰.۹۱۳۵۵۷
۳۵	۷۰۰	۲	۳۰	۴	۰.۷۶۴۵۶۷
۳۶	۹۰۰	۳	۴۰	۲	۰.۹۶۳۱۲
۳۷	۸۰۰	۱	۴۰	۳	۰.۷۹۶۵۵۴
۳۸	۹۰۰	۳	۳۰	۳	۰.۸۹۹۵۵

جدول ۳ - طراحی آزمایشها جهت بررسی اثر پارامترهای مختلف و پاسخ



همانطور که در جدول ۴ مشاهده می شود، با توجه به مقدار P-value (۰/۰۴) اندرکنش پارامترهای فشار و نسبت مولی بخار آب به متان، بر روی آزمایشات از اهمیت بالایی برخوردار است. در صورتیکه، مقدار P-value برای اندرکنش

Source	Sum of square	df	Mean square	F Value	p-value Prob > F	
Model	۰.۶۳۹۷۷۰۶۳۷	۱۶	۰.۰۳۹۹۸۵۶۶۵	۳.۷۰۹۱۷۲	۰.۰۰۲۹	significant
A-Tf	۰.۰۶۹۴۸۰۷۱۸	۲	۰.۰۳۴۷۴۰۳۵۹	۳.۲۲۲۶۰۴	۰.۰۶۰۲	
B-SCR	۰.۱۴۴۴۵۳۷۸۵	۲	۰.۰۷۲۲۲۶۸۹۲	۶.۶۹۹۹۵	۰.۰۰۵۶	
C-P	۰.۰۸۴۴۴۱۵۷۶	۲	۰.۰۴۲۲۲۰۷۸۸	۳.۹۲۵۷۸۴	۰.۰۳۵۶	
D-GHSV	۰.۱۶۱۸۵۱۸۸۲	۲	۰.۰۸۰۹۲۵۹۴۱	۷.۵۰۶۸۹۶	۰.۰۰۳۵	
BC	۰.۱۲۹۹۱۰۹۱۳	۴	۰.۰۳۲۴۷۷۷۲۸	۳.۰۱۲۷۱۷	۰.۰۴۱۳	
BD	۰.۰۸۴۴۶۹۶۱۲	۴	۰.۰۲۱۱۱۷۴۰۳	۱.۹۵۸۹۰۴	۰.۱۳۸	
Residual	۰.۲۲۳۲۸۴۴۸۴	۲۱	۰.۰۱۰۷۸۰۲۱۴			
Lack of Fit	۰.۲۱۴۶۵۶۶۴۴	۱۹	۰.۰۱۱۲۹۷۷۱۸	۱.۹۲۶۶۴۹	۰.۰۳۹۶۷	not significant
Pure Error	۰.۰۱۱۷۲۷۸۴	۲	۰.۰۰۵۸۶۳۹۲			
Cor Total	۰.۸۶۶۱۵۵۱۲	۳۷	۰.۰۳۹۹۸۵۶۶۵			

جدول ۴- آنالیز واریانس برای واکنشهای سطحی

با توجه به تحلیل‌های آماری منتج از طراحی تجربی آزمایشها، ۱۰ مورد (جدول ۵) که در آن مقدار درصد تبدیل بالا می باشد ذکر شده که بسته به شرایط و محدودیت‌های عملیاتی می توان از بین آنها شرایط بهینه را انتخاب کرد. به عنوان مثال انتخاب نرم افزار با توجه به درصد بالای تبدیل، مورد ۱ است ولی با توجه به فشار بالای عملیاتی (۴۰ بار) و فاصله کم درصد تبدیل آن با مورد شماره ۲ با فشار عملیاتی ۳۰ بار، مورد ۲ مناسب تر به نظر می رسد. همچنین با توجه به شکل ۵ (نمودار Half-Normal) دیده می شود که پارامترهای A,B,C,D که بترتیب نمایانگر GHSV،

Number	Tf	SCR	P	GHSV	Conversion	Desirability	
۱	۹۰۰	۳	۴۰	۳	۰.۹۸۰۶۰۳	۱	Selected
۲	۹۰۰	۳	۳۰	۲	۰.۹۶۳۷۶۸	۱	
۳	۹۰۰	۱	۴۰	۳	۰.۹۵۵۹۷۶	۰.۹۹۱۸۱۴	
۴	۹۰۰	۱	۴۰	۲	۰.۹۵۳۲۵۴	۰.۹۸۸۶۹۵	
۵	۸۰۰	۳	۴۰	۲	۰.۹۵۰۴۴۳	۰.۹۸۵۴۷۴	
۶	۸۰۰	۳	۳۰	۲	۰.۹۳۳۶۰۸	۰.۹۶۶۱۸۵	
۷	۹۰۰	۳	۴۰	۳	۰.۹۲۶۵۰۷	۰.۹۵۸۰۴۸	
۸	۸۰۰	۱	۴۰	۳	۰.۹۲۵۸۱۷	۰.۹۵۷۲۵۷	
۹	۸۰۰	۱	۴۰	۲	۰.۹۲۳۰۹۵	۰.۹۵۴۱۳۸	
۱۰	۹۰۰	۲	۳۰	۲	۰.۹۱۷۳۴۲	۰.۹۴۷۵۴۶	

جدول ۵ موارد انتخاب شده توسط نرم افزار با کارکرد بهینه

reforming of methane in a microchannel reactor with microstructured catalysts. *Catal. Today*, 2005. 110(1-2): p. 92-97.

[2] Tonkovich AY, Perry S, Wang Y, Qiu D, LaPlante T, Rogers WA. Microchannel process technology for compact Methane steam reforming. *Chem Eng Sci* 2004; 59 (22-23): 4819-4824.

[3] Hickman D, Schmidt L D. Production of syngas by direct catalytic oxidation of Methane, *Science* 1993; 259: 343-346.

[4] Boger T. Monolithic catalysts for the chemical industry. *Ind Eng Chem Res* 2004; 43: 4602-4611.

[5] Benson R S and Ponton J W. Process Miniaturisation-A Route to Total Environmental Acceptability. *Chem Eng Res Des* 1993; 71: 160-168.

[6] Tonkovich AY, Yang B, Perry ST, Fitzgerald SP, Wang Y. From seconds to milliseconds to microseconds through tailored microchannel reactor design of a steam Methanereformer. *Catal Today* 2007; 120:21-29.

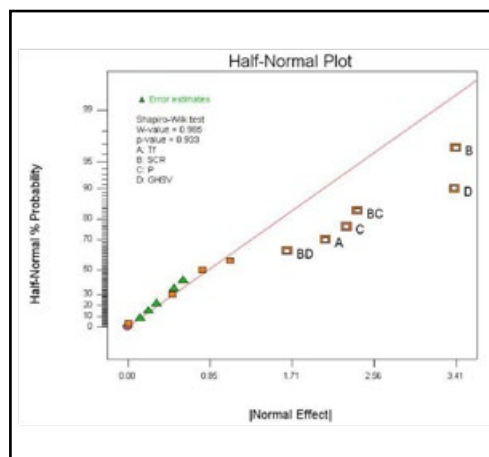
[7] Bradley RJ, Nathan LC, Diana NT, Robert AD, Jamelyn DH, Wang Y. Engineered SMR catalysts based on hydrothermally stable, porous, ceramic supports for microchannel reactors.

*Catal Today* 2007; 120:54-62.

[8] Avci AK, Trimm DL, Karakaya M. Microreactor catalytic combustion for chemicals processing. *Catal Today* 2010; 155: 66-74.

[9] BP Statistical Review of World Energy June 2011, [www.bp.com/statisticalreview](http://www.bp.com/statisticalreview).

فشار، نسبت مولی بخار آب به متان و دمای خوراک می باشد و اندرکنش های BC و BD با توجه به اینکه از خط Half-Normal فاصله دارند، روی مدل موثرند.



شکل ۵ نمودار Half-Normal (خروجی نرم افزار Design Expert)

#### ۴- نتیجه گیری:

در این تحقیق مدلسازی و شبیه سازی انتقال جرم و حرارت برای واکنش ریفرمینگ گاز متان با بخار آب به منظور تولید هیدروژن در رآکتورهای مونولیتی انجام شد. این شبیه سازی در حالت پایا انجام گرفت. نتایج شبیه سازی با نتایج تجربی مقایسه گردیدند که توافق خوبی حاصل گردید. مدل CFD تایید شده به عنوان آزمایشگاه مجازی مورد استفاده قرار گرفت. با استفاده از طراحی تجربی آزمایش ها و مدل تایید شده، یک سری شبیه سازی جهت یافتن اثر پارامترهای دمای خوراک، فشار عملیاتی، فلاکس جرمی خوراک و نسبت مولی بخار آب به متان انجام گرفت که با بررسی های انجام گرفته مشخص گردید که موثرترین پارامترهایی که روی درصد تبدیل از نظر آماری تاثیر دارد به ترتیب GHSV، نسبت مولی بخار آب به متان، فشار و دمای خوراک می باشند همچنین مقادیر پارامترها برای کارکرد بهینه رآکتور معرفی شدند. از بررسی نتایج CFD می توان مطالعات بیشتری روی عملکرد رآکتور انجام داد و با صرف هزینه کم اطلاعات ارزشمندی بدست آورد.

#### منابع:

[1] Cao, C.S., Y. Wang, and R.T. Rozmiarek, Heterogeneous reactor model for steam

# Steam Methane Reforming(SMR) Reaction in Monolith Reactors Using CFD Modeling

Mohammad Irani

Gas Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran.

Zipcode: 1485733111

## Abstract

In the present work, Steam Methane Reforming(SMR) reaction in monolith reactors was modeled. Experiments of SMR were carried out in a Bench-scale monolith reactor. A single-channel was considered and two axi-symmetric CFD models were developed for modeling. General kinetic models for SMR and Water-Gas-Shift (WGS) reaction rates based on Langmuir-Hinshelwood type were employed. Good agreement was achieved between bench experimental data and the model. The validated CFD model was considered as numerical laboratory. Using experimental design a sensitivity analysis was run in order to find the effect of feed temperature, GHSV, pressure and inlet H<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub> molar ratio on the reactor performance. It was concluded that obtained results from CFD analysis gives precise guidelines for further studies on optimization of monolithic reactor performance.

**Keywords:** Monolith reactor, CFD, Steam reforming, sensitivity analysis

