

# شبیه‌سازی دوبعدی هتروژن راکتور کاتالیستی تبدیل متان با بخار آب

علیرضا خواجه‌امیری<sup>۱\*</sup>، مائده خواجه‌امیری<sup>۲</sup>

۱- دکتری تخصصی شیمی آلی، سازمان تحقیقات و جهاد خودکفایی نذاجا و عضو هیئت علمی دانشگاه علوم پزشکی آجا، تهران، ایران

۲- کارشناس مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

پیام‌نگار: a\_khajeamiri@yahoo.com

## چکیده

در این مقاله یک مدل دوبعدی هتروژن برای پیش‌بینی عملکرد یک راکتور ریفرمینگ متان با بخار آب به کار گرفته شده است. مقاومت‌های خارجی و داخلی برای انتقال جرم و حرارت در دانه کاتالیست برای این مدل در نظر گرفته شده و دستگاه معادلات دیفرانسیل حاصل به روش عددی حل شده است. برای بررسی اثر پارامترهای مختلف مانند دما، فشار، نسبت بخار به متان، شبیه‌سازی‌های مختلفی انجام شده و نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های یک راکتور صنعتی مقایسه شده است. تطابق خوبی میان داده‌های صنعتی و نتایج شبیه‌سازی دیده می‌شود که بیانگر کارایی مدل در پیش‌بینی عملکرد راکتور است. همچنین درصد خطای نسبی برای موارد مختلف (دما و فشار و...) ۱٪ تا ۱۰٪ اندازه‌گیری شده است.

تاریخ دریافت: ۹۷/۰۱/۲۳

تاریخ پذیرش: ۹۷/۰۴/۰۵

شماره صفحات: ۳۲ تا ۴۰

**کلیدواژه‌ها:** گاز سنتز،

ریفرمینگ متان، مدل دوبعدی

هتروژن، شبیه‌سازی.

## ۱. مقدمه

در سال‌های اخیر نگرانی‌های جهانی در مورد مسائل زیست‌محیطی و انتشار گازهای گلخانه‌ای افزایش یافته است. مشکلات زیست‌محیطی ناشی از منابع مختلف انرژی و نیز افزایش قیمت سوخت‌های فسیلی موجب گسترش تکنولوژی‌های جدید برای تولید انرژی شده است [۱]؛ همچنین کاهش انتشار دی‌اکسید کربن در تولید انرژی و سوخت لازمه‌ی گسترش روش‌های جدید تولید انرژی است، بنابراین روش‌های جدید بر اساس حامل‌های انرژی پاک مانند هیدروژن اجرا می‌شود. ریفرمینگ هیدروکربن‌ها با بخار آب به ویژه گاز طبیعی، مهم‌ترین و اقتصادی‌ترین روش برای تولید هیدروژن و

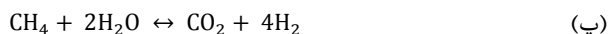
گاز سنتز مورد نیاز در صنایع شیمیایی و پتروشیمیایی است [۲]. متان یک مولکول بسیار پایدار است و ریفرمینگ با بخار آب در راکتور بستر ثابت انجام می‌شود که متان با بخار آب زیاد در دمای بالا روی کاتالیست نیکل یا فلزات کمیاب واکنش می‌دهد [۳-۴]. از آن جایی که این فرایند به شدت گرماگیر است، گرمای زیادی به وسیله کوره به راکتور اعمال می‌شود، بنابراین لوله‌های راکتور و دانه‌های کاتالیست در معرض گرادیان شدید دمایی در راستای شعاع و محوری قرار می‌گیرند [۵]. در گسترش این نوع راکتورها دانستن گرادیان‌های دمایی و فشار جزئی اجزا در طول راکتور و نیز داخل دانه کاتالیست به طراحی و بهینه کردن شکل کاتالیست و نیز هندسه راکتور، برای افزایش کارایی کمک می‌کند. اگرچه مدل‌های گوناگونی برای توضیح انتقال

\* تهران، اتوبان شهید بابایی، بعد از اتوبان امام علی (ع)، جنب ستاد هوانیروز، سازمان تحقیقات و جهاد خودکفایی نذاجا

تیراندازی و معادلات راکتور با استفاده از روش رانگ-کاتا درجه چهار با برنامه‌نویسی در نرم‌افزار متلب حل شد.

### ۳. مدل‌سازی ریاضی

سینتیک واکنش‌های ریفرمینگ بخار آب و جابه‌جایی گاز آب با رابطه ارایه‌شده به وسیله ژو و فرامنت<sup>[۱۴]</sup> بیان می‌شود.



با توجه به ضرایب استوکیومتری در واکنش‌های بالا، سرعت مصرف و یا تولید اجزاء مختلف را می‌توان به دست آورد:

$$r_{\text{CO}} = r_1 - r_2 \quad (۱)$$

$$r_{\text{CH}_4} = -r_1 - r_3 \quad (۲)$$

$$r_{\text{CO}_2} = r_2 + r_3 \quad (۳)$$

برای به دست آوردن سرعت واکنش‌های ۱ تا ۳، از مدل پیشنهادی ژو و فرامنت استفاده می‌کنیم [۱۴]:

$$r_1 = \frac{k_1}{P_{\text{H}_2}^{2.5}} [P_{\text{CH}_4} P_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{P_{\text{H}_2}^3 P_{\text{CO}}}{K_1}] / (\text{DEN})^2 \quad (۴)$$

$$r_2 = \frac{k_2}{P_{\text{H}_2}} [P_{\text{CO}} P_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{P_{\text{H}_2} P_{\text{CO}_2}}{K_2}] / (\text{DEN})^2 \quad (۵)$$

$$r_3 = \frac{k_3}{P_{\text{H}_2}^{3.5}} [P_{\text{CH}_4} P_{\text{H}_2\text{O}}^2 - \frac{P_{\text{H}_2}^4 P_{\text{CO}_2}}{K_3}] / (\text{DEN})^2 \quad (۶)$$

که داریم:

$$\text{DEN} = 1 + K_{\text{CO}} P_{\text{CO}} + K_{\text{H}_2} P_{\text{H}_2} + K_{\text{CH}_4} P_{\text{CH}_4} + K_{\text{H}_2\text{O}} P_{\text{H}_2\text{O}} / P_{\text{H}_2} \quad (۷)$$

2. Xu-Froment

جرم، شرایط عملیاتی، مدل‌سازی سینتیکی و ترکیب گاز فرایند ریفرمینگ متان ارایه شده است [۱۰-۱۶]، در مقالات منتشرشده، کارهای کمی وجود دارد که مقاومت انتقال جرم و حرارت میان دانه و فاز سیال را در نظر گرفته باشد [۱۳-۱۱].

در این مقاله یک مدل دوبعدی هتروژن ارایه شده که توزیع جرم و حرارت را با در نظر گرفتن مقاومت‌های انتقال جرم و حرارت به صورت دوبعدی در راکتور و نیز در داخل دانه، نشان می‌دهد.

مدل‌سازی ریاضی راکتور در حالت پایا انجام شده و معادلات با استفاده از روش تفاضل محدود در نرم‌افزار متلب<sup>۱</sup> حل شده است.

### ۲. مروری بر مطالعات پیشین

درباره مدل‌سازی و شبه‌سازی تبدیل متان با بخار آب، مقالات، پایان‌نامه‌ها و گزارش‌های زیادی در منابع علمی داخل و خارج، منتشر شده است که در ادامه به تعدادی از آن‌ها اشاره شده و تقریباً تکراری است.

فاطمی و شاه‌کرمی [۱۱] مدل‌سازی ریاضی و بهینه‌سازی فرایند ریفرمینگ ترکیبی متان (انجام هم‌زمان دو فرایند ریفرمینگ خشک و ریفرمینگ متان با بخار آب) در راکتور بستر سیالی غشایی و راکتور بستر ثابت را انجام و نتایج را ارایه داده‌اند.

آل ابراهیم و همکاران [۱۲]، راکتور ریفرمینگ ترکیبی متان با بخار آب و دی‌اکسید کربن را مدل‌سازی و شبه‌سازی کردند که با توجه به گرمای زیاد تولیدشده در کوره و همچنین واکنش‌های بسیار گرماگیر در داخل لوله ریفورمر، از یک مدل دوبعدی برای مدل‌سازی راکتور استفاده شده است. معادلات بیلان جرم و حرارت، همراه معادله تغییر فشار در طول راکتور و همچنین معادلات بیلان جرم در داخل کاتالیست به‌طور هم‌زمان با استفاده از روش‌های عددی و به وسیله نرم‌افزار متلب حل شده و تغییرات غلظت، دما و فشار در نقاط مختلف راکتور به صورت نمودارهایی به دست آمده است.

نبوی و همکاران [۱۳] شبه‌سازی راکتور کاتالیستی ریفرمینگ متان با بخار آب را با در نظر گرفتن مقاومت انتقال جرم درونی برای کاتالیست کروی شکل و مسطح انجام دادند. شبه‌سازی برای یک راکتور صنعتی با طول ۹ متر با در نظر گرفتن معادلات موازنه جرم و انرژی و موازنه جرم برای دانه کاتالیست انجام شد. معادلات دیفرانسیل با مقادیر مرزی دانه کاتالیست با استفاده از روش

1. Matlab

فرضیات زیر در مدل سازی در نظر گرفته شده است:

(۱) شرایط پایا است؛

(۲) از نفوذ محوری چشم پوشی شده است؛

(۳) دمای دیواره لوله های راکتور ثابت در نظر گرفته شده

است؛

(۴) از تغییرات سرعت محوری سیال چشم پوشی شده است.

طول زمان بدون تغییر باقی می ماند. معادله بقای جرم برای این سامانه که در یک میدان جریان سیال قرار دارد به شکل زیر تعریف می شود:

$$\frac{\partial w_i}{\partial z} = \frac{1}{\rho v_z} \left[ -v_z w_i \frac{\partial \rho}{\partial z} + D_{er} \left( \frac{\partial \rho}{\partial r} \left( \frac{\partial w_i}{\partial r} \right) + \frac{\rho}{r} \left( \frac{\partial w_i}{\partial r} \right) + \rho \frac{\partial^2 w_i}{\partial r^2} \right) - k_g a_v (w_i - w_i^s) \right] \quad (8)$$

#### ۲-۵ معادله بقای انرژی

معادله بقای انرژی نیز در مختصات استوانه ای به شکل زیر است:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{\rho C_p v_z} \left[ \lambda_{er} \left( \frac{1}{r} \left( \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) - h_f a_v (T - T^s) \right] \quad (9)$$

معادله مومنتوم

$$\frac{dp}{dz} = -f \rho g \frac{v_z^2}{d_p} \quad (10)$$

ضریب اصطکاک

$$f = \frac{1-\epsilon}{\epsilon^3} \left( 1.75 + 4.2 Re \epsilon^{\frac{5}{6}} \frac{1-\epsilon}{Re} \right) \quad (11)$$

معادله رینولدز

$$Re = \frac{\rho_g v_z d_p}{\mu} \quad (12)$$

شرایط مرزی

در  $z = 0$

$$w_i(r, 0) = w_i^0, \quad T(r, 0) = T^0, \quad p(0) = p^0$$

در  $r = 0$

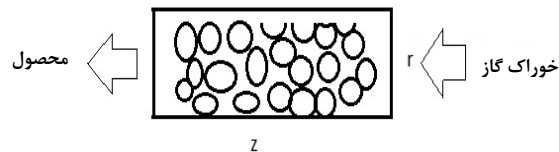
$$\frac{dw_i(0,z)}{dr} = 0, \quad \frac{dT(0,z)}{dr} = 0$$

در  $r = R$

$$\frac{dw_i(R,z)}{dr} = 0, \quad \frac{dT(R,z)}{dr} = -\frac{U}{\lambda_{er}} (T(R,z) - T^w)$$

#### ۴. هندسه مدل

مدل استفاده شده برای سیال، استوانه دوطبقی در نظر گرفته شده که از تغییرات در راستای زاویه به دلیل تقارن هندسی، چشم پوشی شده است. پس از مدل سازی و حل معادلات، به تغییرات اندک در راستای شعاع اشاره شده است، بنابراین با یک بعدی در نظر گرفتن مدل در راستای محوری نیز نتایج قابل استفاده است. همچنین دانه های کاتالیست مورد استفاده نیز به صورت کره های توپر با در نظر گرفتن معادله تغییر در راستای شعاع، مدل سازی شده است. برای رسیدن به این معادلات می توان مستقیم از معادلات تغییر (پیوستگی، حرکت، انرژی و جرم در حضور واکنش) استفاده کرد. همچنین با نوشتن موازنه پیرامون حجم کنترل نیز می توان به همین معادلات رسید. در شکل (۱) نمایی از راکتور و کاتالیست های موجود نشان داده شده است.



شکل ۱. نمایی از راکتور.

معادلات حاکم بر راکتور (شکل (۱)) در ادامه آمده است.

#### ۵. فاز سیال

##### ۱-۵ معادله بقای جرم

معادله پیوستگی، تغییرات یک کمیت شدتی مانند  $L$  را در یک سامانه بیان می کند. لازم به ذکر است که سامانه به صورت مجموعه ای از اجزا تعریف می شود که ویژگی های اساسی این اجزا در

ضریب کلی انتقال حرارت از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\alpha_w} + \frac{d_i}{2\lambda_{st}} \ln \frac{d_o}{d_i} \quad (13)$$

ضریب انتقال حرارت دیواره ( $\alpha_w$ ) و ضریب هدایت موثر حرارت شعاعی ( $\lambda_{ef}$ ) از رابطه ارایه‌شده به وسیله دیکسن و کرسول<sup>[۱۵]</sup> به دست آمده است. نفوذ موثر شعاعی ( $D_{ef}$ ) از رابطه ارایه‌شده به وسیله فرامنت و هافمن<sup>[۱۶]</sup> محاسبه شده است.

### ۵-۳ فاز جامد (کاتالیست)

موازنه جرم

$$\frac{2}{\xi} D \rho \frac{dw_i}{d\xi} + \rho D \frac{d^2 w_i}{d\xi^2} + D \frac{dw_i}{d\xi} \left( \frac{d\rho}{d\xi} \right) + R(1 - \xi) \rho_{cat} = 0 \quad (14)$$

موازنه انرژی

$$\frac{2}{\xi} K \frac{dT}{d\xi} + K \frac{d^2 T}{d\xi^2} + \sum \Delta H_{r,i} R_i (1 - \xi) \rho_{cat} = 0 \quad (15)$$

شرایط مرزی

$$\xi = 0$$

$$\frac{dw_i(0)}{d\xi} = 0, \quad \frac{dT(0)}{d\xi} = 0$$

$$\xi = r_p$$

$$\frac{dw_i(r_p)}{d\xi} = -\frac{k_g a_v}{D} (w_i - w_i^{bulk}), \quad \frac{dT(r_p)}{d\xi} = -\frac{h a_v}{K} (T - T^{bulk})$$

برای دانه کاتالیست ضریب نفوذ موثر از رابطه ارایه‌شده به وسیله ژو و فرامنت<sup>[۱۴]</sup> محاسبه شده است.

### ۶. روش حل

برای حل دستگاه معادلات دیفرانسیل پاره‌ای از روش تفاضل محدود استفاده شده است. در واقع روش تفاضل محدود برای محاسبه مشتق‌های جزئی، محیط و دنیای پیوسته پیرامون ما را به محیط گسسته تبدیل می‌کند. این مطلب به صورت دقیق حل معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی را با استفاده از روش تفاضل محدود بررسی می‌کند. بنابراین نخست مفهوم تقریب تفاضل محدود و شیوه

محاسبه آن بررسی می‌شود؛ سپس پارامتر مهم خطای برشی، معرفی و همچنین روابط حاکم بر تقریب تفاضل محدود در مراتب بالاتر و حالت چندبعدی مطالعه می‌شود.

### ۷. نتایج و بحث

مدل دوبعدی ارایه‌شده در این کار، پروفایل دمایی و فشار جزئی اجزا را در راکتور و نیز در داخل دانه کاتالیست محاسبه می‌کند. پروفایل فشار جزئی متان و هیدروژن و نیز پروفایل توزیع دما در راکتور در شکل (۲) نشان داده شده است. همان‌طور که در نمودار نشان داده شده، تغییرات چشم‌گیری در راستای شعاعی راکتور رخ نداده است؛ بنابراین می‌توان در کارهای بعدی راکتور را با دقت مناسبی به شکل یک‌بعدی مدل‌سازی کرد. در شکل (۲-پ) مشاهده می‌شود که با توجه به طبیعت گرماگیر بودن واکنش، ابتدا دما تا حد کمینه کاهش و سپس با پیشرفت واکنش، دما نیز افزایش می‌یابد، اما با این وجود، غلظت اجزا در راستای شعاعی تقریباً ثابت است.

### ۷-۱ مقایسه نتایج حاصل مدل‌سازی با یک واحد صنعتی

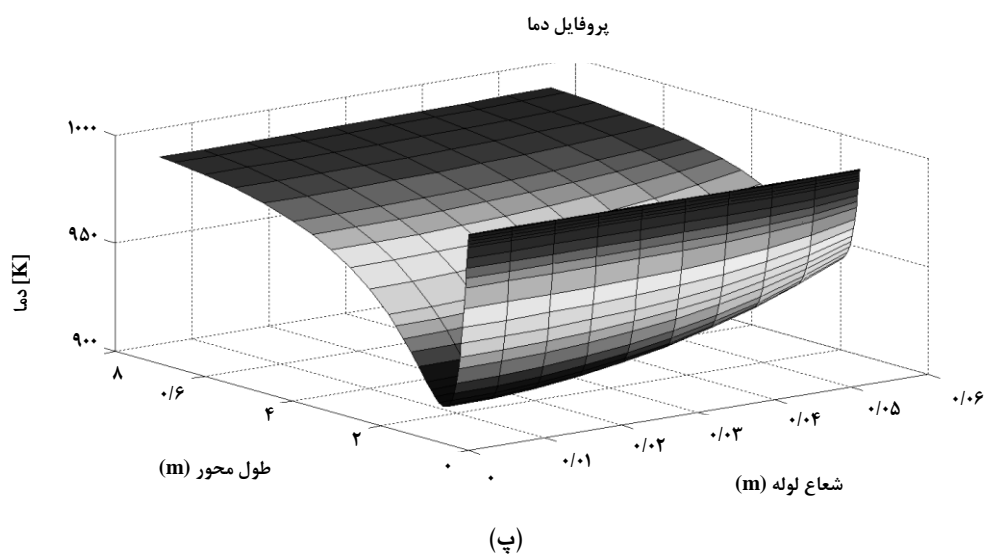
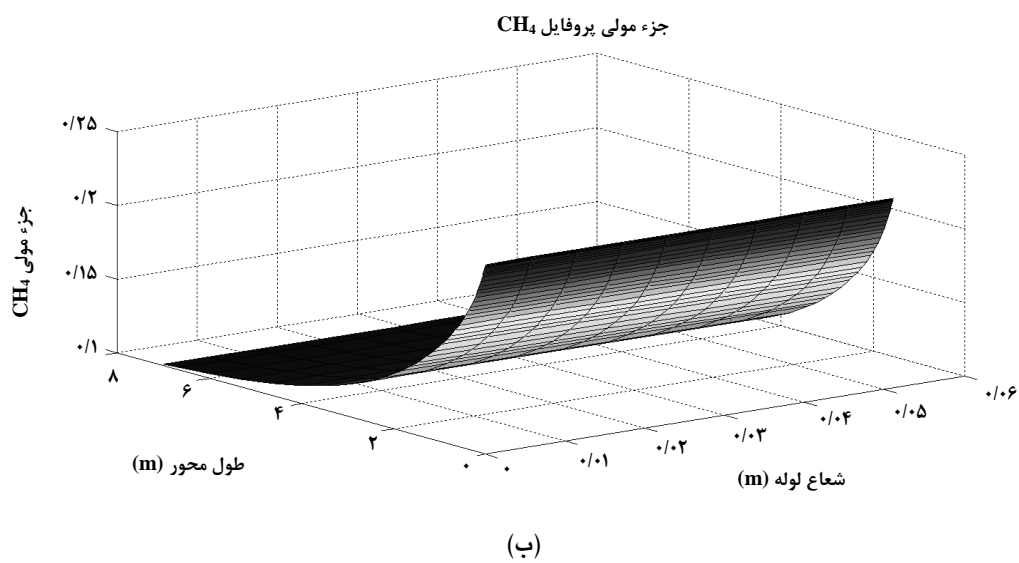
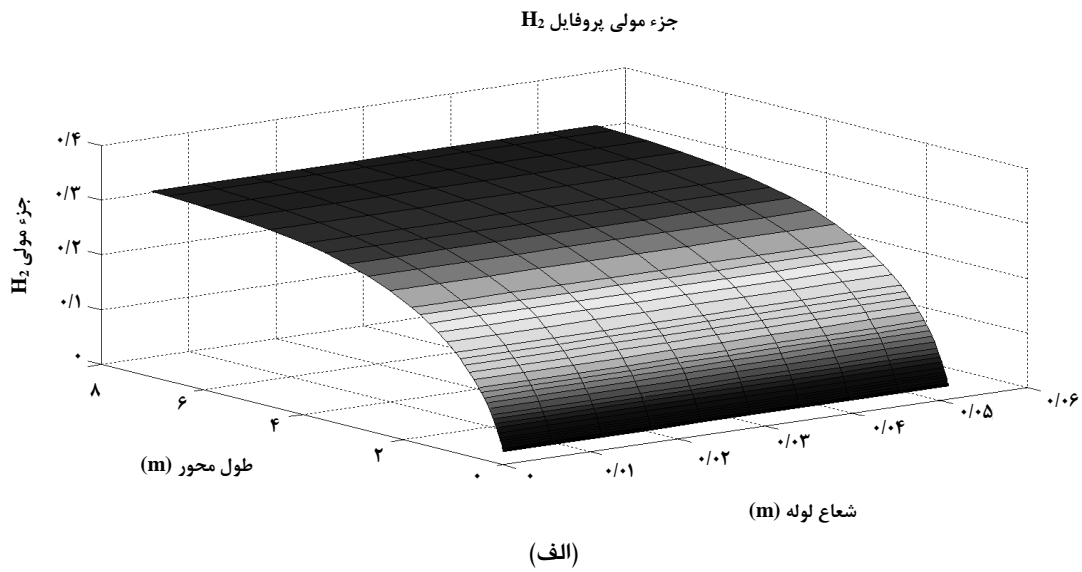
در جدول (۱) نتایج شبیه‌سازی با مقادیر صنعتی آن که مربوط است به راکتور پتروشیمی اراک، آمده است. سایر داده‌های مربوط به ابعاد راکتور، کاتالیست و شرایط خوراک در منبع<sup>[۱۷]</sup> موجود است. درصد خطاهای کم، بیانگر این است که مدل با دقت مناسبی رفتار راکتور صنعتی را پیش‌بینی می‌کند. با این حال سینتیک استفاده‌شده و خطای حل عددی را می‌توان از دلایل این اختلاف دانست.

جدول ۱. مقایسه نتایج صنعتی با نتایج شبیه‌سازی<sup>[۱۴]</sup>.

پارامتر	صنعتی	شبیه‌سازی	درصد خطای نسبی
دمای خروجی (K)	۹۸۰/۱۵	۹۹۵/۷۱۶	۱/۵۸۸
فشار خروجی (bar)	۲۸/۱	۲۸/۴۶۹	۰/۴۵۸
جزء مولی خروجی از راکتور			
H <sub>2</sub>	۰/۳۳۰۱	۰/۳۴۰۳	۳/۰۹۰
CO	۰/۰۲۹۸	۰/۰۳۲۳	۸/۳۸۹
CO <sub>2</sub>	۰/۰۶۱۸	۰/۰۶۲۳	۰/۸۰۹
CH <sub>4</sub> *	۰/۰۹۶۰	۰/۱۰۴۰	۸/۳۳۳
H <sub>2</sub> O	۰/۴۳۱۰	۰/۴۶۱۲	۷/۰۰۶

\* شامل متان و سایر هیدروکربن‌ها که مقدار معادل متان برای آن‌ها در نظر گرفته شده است.

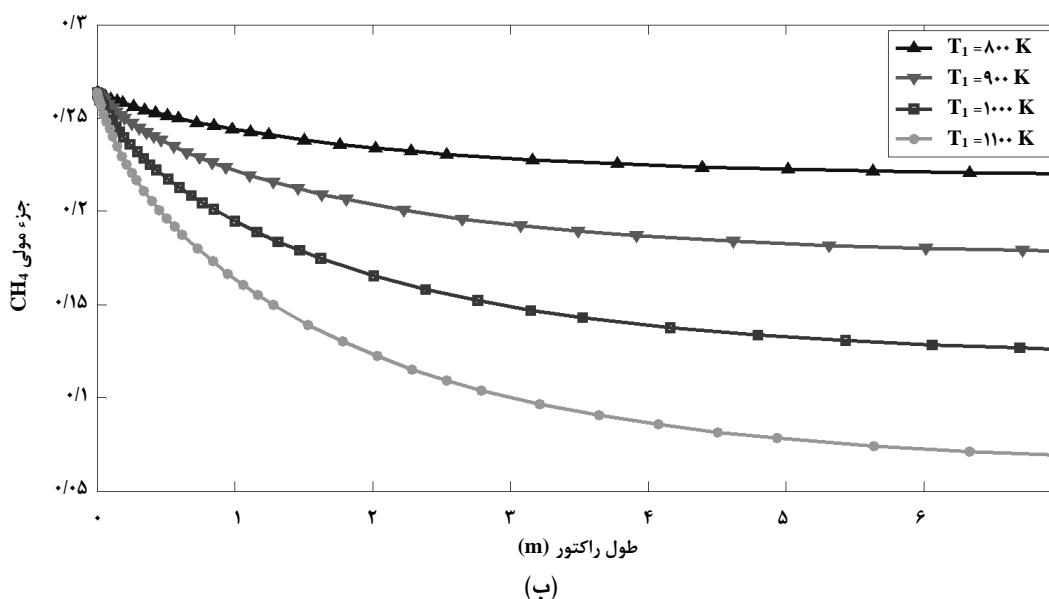
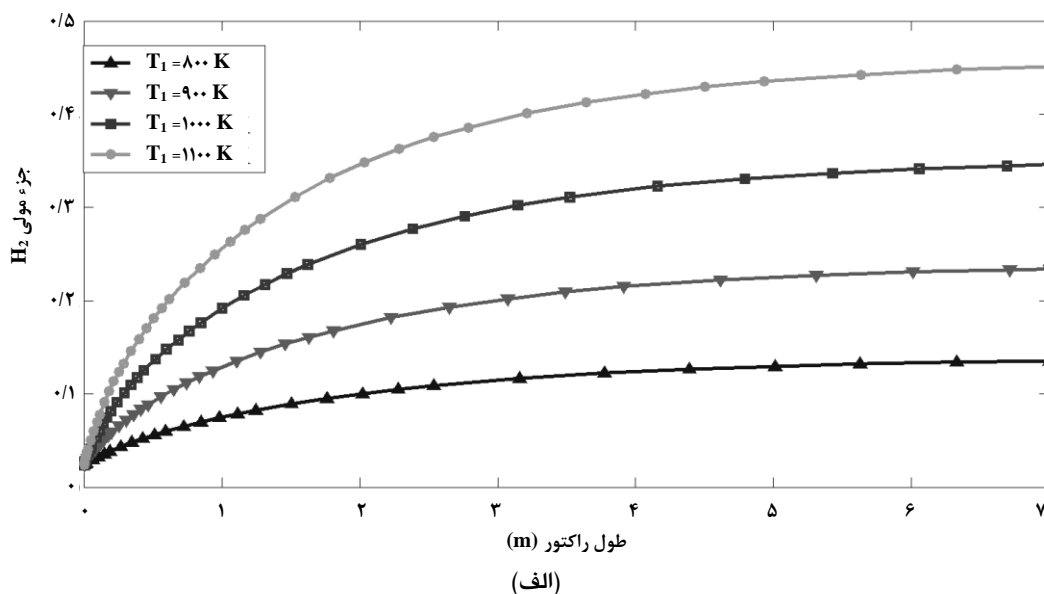
1. Dixon-Creswell  
2. Froment-Hofmann  
3. Xu -Froment2



شکل ۲. (الف) توزیع غلظت هیدروژن در راکتور، (ب) توزیع غلظت متان در راکتور، (پ) توزیع دما درون راکتور.

واکنش می‌شود، موجب افزایش تبدیل متان و تولید هیدروژن می‌شود که با توجه به ماهیت گرماگیر بودن فرایند و اصل لوشاتولیه این موضوع توضیح داده می‌شود.

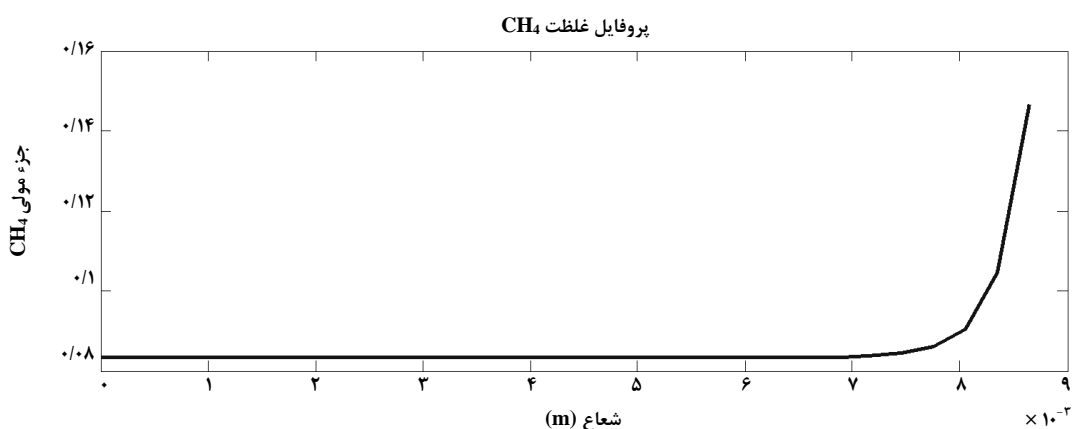
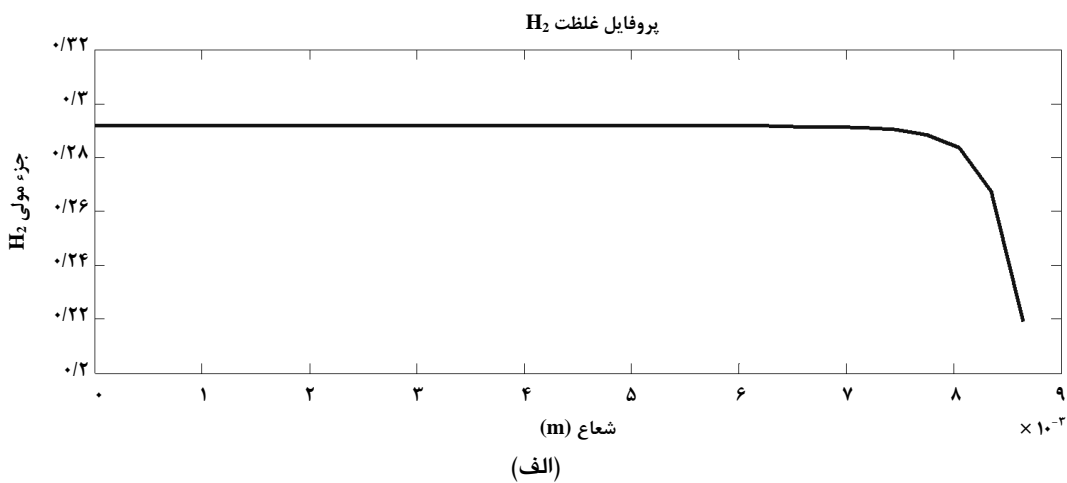
شکل (۳-الف)، اثر دما روی تولید هیدروژن و شکل (۳-ب)، اثر دما روی غلظت متان را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل مشخص است، افزایش دمای دیواره راکتور که باعث افزایش دمای



شکل ۳. (الف) اثر تغییر دما روی تولید هیدروژن، (ب) اثر تغییر دما روی غلظت متان.

که بیانگر این است که حجم زیادی از دانه کاتالیست بدون استفاده می‌ماند. برای حل این مشکل پیشنهاد می‌شود دانه‌های کاتالیست در ابعاد کوچک‌تر ساخته شود؛ اما یک ایده بهتر این است که خواص دانه برای افزایش ضریب نفوذ جرمی بهبود یابد.

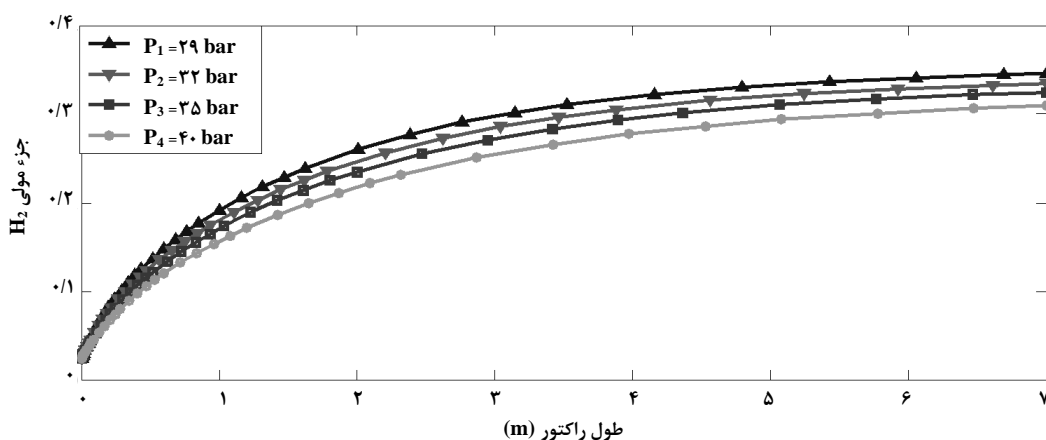
شکل (۴)، فشار جزیبی هیدروژن و متان را داخل دانه کاتالیست در دوسوم طول از ورودی راکتور نشان می‌دهد؛ همان‌طور که مشخص است، واکنش در لایه‌ی نازکی از کاتالیست انجام می‌شود و می‌توان گفت انتقال جرم داخل دانه کاتالیست، کنترل‌کننده است



شکل ۴. (الف) توزیع غلظت هیدروژن درون دانه کاتالیست، (ب) توزیع غلظت متان درون دانه کاتالیست.

فرایند با افزایش مول همراه است، بر اساس اصل لوشاتولیه، افزایش فشار، سرعت واکنش تولید هیدروژن را کاهش خواهد داد.

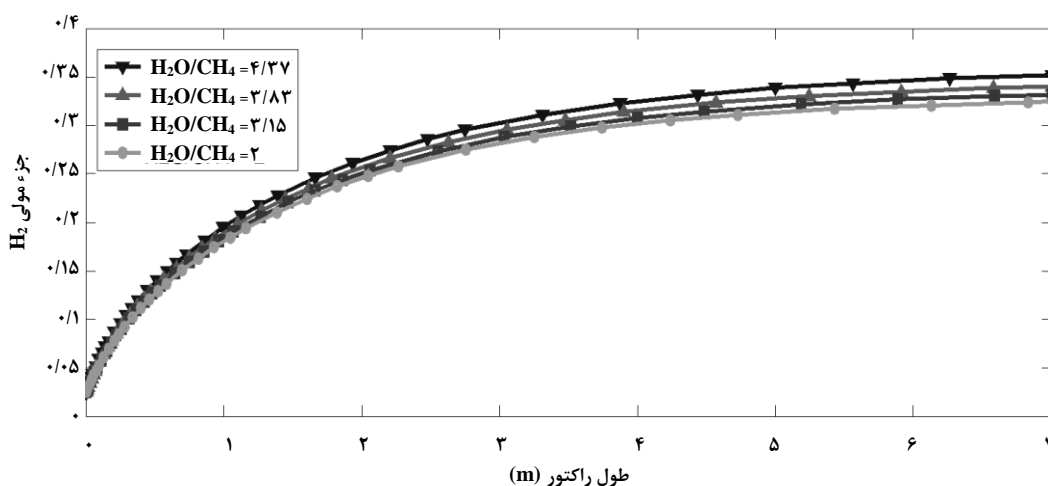
در شکل (۵)، اثر افزایش فشار گاز ورودی روی تولید هیدروژن نشان داده شده است. همان طور که در شکل دیده می‌شود، افزایش فشار موجب کاهش تولید هیدروژن می‌شود؛ از آن جا که واکنش کلی



شکل ۵. اثر تغییر فشار روی تولید هیدروژن.

جایی که از نظر عملیاتی امکان‌پذیر باشد، برای تولید بیشتر هیدروژن، این نسبت زیاد باشد؛ البته مقدار بهینه با توجه به هزینه‌های واحد و قیمت هیدروژن تعیین می‌شود.

در شکل (۶)، اثر افزایش نسبت بخار به متان بر تولید هیدروژن نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل پیداست، با افزایش این نسبت، تولید هیدروژن افزایش می‌یابد که با توجه به معادلات واکنش‌ها و نیز اصل لوشاتولیه قابل توجیه است. توصیه می‌شود تا



شکل ۶. اثر تغییر نسبت بخار آب به متان در خوراک بر تولید هیدروژن.

### ۸. نتیجه‌گیری کلی

از عوامل موثر بر ترکیب گاز سنتز دما، فشار عملیاتی و نسبت مولی H<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub> در خوراک است. با کنترل مناسب این پارامترها می‌توان کارایی راکتور را بهبود بخشید. در واقع تا حد امکان می‌توان در دماهای بالا بسته به نوع آلیاژ راکتور و فشارهای پایین و حداکثر نسبت 4 H<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub> از راکتور استفاده کرد. با توجه به این که اثر فشار نسبت به سایر متغیرها کمتر است، این متغیر ثابت در نظر گرفته می‌شود. از آن‌جا که واکنش ریفرمینگ بسیار گرماگیر است، دمای بالا باعث پیشرفت واکنش و تبدیل بیشتر متان می‌شود؛ همچنین به خاطر این که واکنش شیفت گاز-آب، گرمازا است، دمای بالا این واکنش را فرو می‌نشاند؛ بنابراین افزایش دما باعث تبدیل بیشتر متان به CO<sub>2</sub>، CO و H<sub>2</sub> و تبدیل کمتر CO به CO<sub>2</sub> می‌شود.

### فهرست علائم و نشانه‌ها

$d_i$	[m]	قطر داخلی لوله		
$d_o$	[m]	قطر خارجی لوله		
$d_p$	[m]	قطر دانه کاتالیست		
$f$	[-]	ضریب اصطکاک		
$h$	[m <sup>2</sup> K]	ضریب انتقال حرارت میان گاز و ذرات کاتالیست		
$a_v$	[kg.m <sup>2</sup> /s]	نسبت سطح به حجم کاتالیست		
$k$	[W/m K]	هدایت حرارتی دانه کاتالیست		
$P$	[Pa]	فشار		
$r$	[m]	موقعیت شعاعی لوله راکتور		
$T$	[K]	دما		
$U$	[W/m <sup>2</sup> K]	ضریب کلی انتقال حرارت		
$v_z$	[m/s]	سرعت ظاهری سیال در راستای Z		
$w_i$	[-]	جز جرمی i ام		
$\alpha_w$	[W/m <sup>2</sup> K]	ضریب انتقال حرارت دیواره		
$\mu$	[kg/ms]	ویسکوزیته گاز	$a_v$	[m <sup>-1</sup> ]
$\lambda_{er}$	[W/m K]	هدایت حرارتی شعاعی	$C_{pi}$	[J/kmol K]
$\lambda_{st}$	[W/m K]	هدایت حرارتی دیواره	$D_i$	[m <sup>2</sup> /s]
$\varepsilon$	[-]	کسر خالی حجمی		
				نسبت سطح به حجم کاتالیست
				ظرفیت گرمایی جزء i ام
				نفوذ جزء i ام



[10] Elnashaie, S.S.E.H., Elshishini, S.S., 1993. Modeling, Simulation and Optimization of Industrial Catalytic Fixed Bed Reactors. Gordon and Breach, Amsterdam, The Netherlands.	$\Delta H_j$	[kJ/mol]	گرمای واکنش زام
	$\rho_i$	[kg/m <sup>3</sup> ]	دانسیته جزء اام
	$\xi$	[m]	موقعیت شعاعی ذرات کاتالیست

[۱۱] فاطمی، شهره؛ شاه‌کرمی پیروز، "شبیه‌سازی و بهینه‌سازی فرایند ریفرمینگ ترکیبی متان"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه تهران (۱۳۸۹).

[۱۲] لطفی، ناصر، آل‌ابراهیم‌دهکردی، حبیب؛ طالبی مزرعه‌شاهی، محمد؛ "شبیه‌سازی راکتور بستری ثابت ریفرمینگ ترکیبی متان با بخار آب و دی‌اکسید کربن"، اولین کنفرانس ملی نفت، گاز، پتروشیمی و توسعه پایدار، تهران (۱۳۹۳).

[۱۳] بوی، سید رضا؛ عباسی، محمود؛ حسینی، سید امین؛ "شبیه‌سازی راکتور ریفرمینگ متان با بخار آب حاوی کاتالیست با هندسه کروی و مسطح"، مجله شیمی کاربردی (اندیشه علوم)، چاپ سوم، دانشگاه سمنان (۱۳۹۵).

[14] J. Xu, G.F. Froment, 1989, Methane steam reforming, methanation and water-gas shift. I. Intrinsic kinetics, AIChE J. 35 88.

[15] A.G. Dixon, D.L. Cresswell, 1979, Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds, AIChE J. 25 663.

[16] G.F. Froment, P.K. Hofmann, Design of fixed-bed gas-solid catalytic reactor, in: Chemical Reactor and Reactor Engineering, Marcel Dekker, New York, 1987.

[۱۷] آتشی، حسین؛ آراء، آرش؛ یعقوبی، قاسم؛ "تعیین مدل و شبیه‌سازی راکتور تولید گاز سنتز". نشریه دانشکده مهندسی، (۱۳۸۵).

## مراجع

- [1] Liguras, D.K., Goundani, K., Verykios, X.E., 2004. Production of hydrogen for fuel cells by catalytic partial oxidation of ethanol over structured Ni catalysts. J. Power Sour. 130, 30-37.
- [2] A.M. Adris, B.B. Pruden, C.J. Lim, J.R. Grace, 1996, On the reported attempts to radically improve the performance of the steam reforming reactor, Can. J. Chem. Eng. 74, 177.
- [3] Rostrup-Nielsen, J.R., Sehested, J., Nørskov, J.K., 2002. Hydrogen and synthesis gas by steam- and CO<sub>2</sub> reforming. Adv. Catal. 47, 65-139.
- [4] Rostrup-Nielsen, J.R., Bak Hansen, J.-H., 1993. CO<sub>2</sub>-reforming of methane over transition metals. J. Catal. 144, 38-49.
- [5] Rostrup-Nielsen, J.R., Christiansen, L.J., Bak Hansen, J.H., 1988. Activity of steam reforming catalysts: role and assessment. Appl. Catal. 43, 287-303.
- [6] Kvamsdal, H.M., Svendsen, H.F., Hertzberg, T., Olsvik, O., 1999. Dynamic simulation and optimization of a catalytic steam reformer. Chem. Eng. Sci. 54, 2697-2706.
- [7] Quinta Ferreira, R.M., Marques, M.M., Babo, M.F., Rodrigues, A.E., 1992. Modeling of the methane steam reforming reactor with large-pore catalyst. Chem. Eng. Sci. 47, 2909-2914.
- [8] Rostrup-Nielsen, J.R., 1993. Production of synthesis gas. Catal. Today 18, 305-324.
- [9] Adris, A.M., Pruden, B.B., Lim, C.J., Grace, J.R., 1996. On the reported attempts to radically improve the performance of the steam reforming reactor. Can. J. Chem. Eng. 74, 177-186.