УДК 536.24

Моделирование паровой конверсии метанола в водород в микроканале с распределенным по длине тепловым потоком^{*}

В.В. Кузнецов, С.П. Козлов

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск Новосибирский государственный университет

E-mail: vladkus@itp.nsc.ru

Проведено численное моделирование течения реагирующей смеси паров метанола и воды в двумерном плоском микроканале при активировании химических превращений на стенке канала. Моделирование проводилось в рамках уравнений Навье–Стокса для ламинарного течения многокомпонентного сжимаемого газа. Исследована взаимосвязь тепловых, диффузионных и физико-химических процессов в условиях сильной эндотермической реакции и распределенного внешнего подвода тепла по длине канала. Показано, что существенным является не только количество подведенного к зоне реакции тепла, но и способ его подвода по длине канала, что позволяет оптимизировать компактный реактор для получения водорода.

Ключевые слова: паровая конверсия метанола, тепломассоперенос, химические превращения, микроканал, каталитическая реакция.

введение

Течение реагирующей смеси газов в микроканалах используется в микрохимических реакторах для интенсификации тепло- и массообмена при химических превращениях [1–3]. Преимуществом использования микроканалов является малое внешнее диффузионное сопротивление, что позволяет проводить химические реакции в условиях существенной термодинамической неравновесности. Микроканальные реакторы применяются, например, для конверсии углеводородов и спиртов в СО и H_2 , а также для целого ряда других энергонапряженных химических процессов. В работе [4] проведено сравнение различных методов получения водорода для питания топливных элементов. Паровая конверсия метанола — один из перспективных методов получения водорода ввиду того, что он протекает при относительно низких температурах и дает высокий выход водорода [5–6] при малом содержании окиси углерода. В таких процессорах катализатор на стенках каналов используется для увеличения скорости реакции при низких температурах.

^{*} Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-08-65526).

[©] Кузнецов В.В., Козлов С.П., 2008

Основной реакцией паровой конверсии метанола является

$$CH_3OH + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + 3H_2, \tag{1}$$

для поддержания которой необходим внешний подвод тепла. Существуют работы, авторы которых считают, что это требование препятствует развитию реакторов паровой конверсии из-за уменьшения их эффективности [7]. Однако использование тепла параллельно проходящих химических реакций в соседних каналах реактора может сделать паровой риформинг метанола привлекательной альтернативой другим методам получения водорода [8]. Паровая конверсия метанола в микроканальном реакторе рассмотрена в работе [9]. Здесь же экспериментально изучалась кинетика паровой конверсии метанола на PdZn катализаторе. Кинетика паровой конверсии метанола на Cu/ZnO катализаторе исследовалась в работе [10].

Существуют различные подходы к моделированию каталитических реакций в каналах реактора. В одномерных моделях поршневого течения пренебрегают поперечным тепло- и массоопереносом или учитывают его через эффективные коэффициенты тепло- и массообмена [11]. Модель реактора идеального смешения предполагает, что конверсия реагентов определяется скоростью реакции в большей степени, чем процессами переноса. Сравнивая расчеты по этой модели с решением системы полных уравнений Навье–Стокса в [12], определена область, в которой данное приближение справедливо. В работе [13] для расчета ламинарного течения реагирующей смеси при неполном окислении метана в канале монолитного реактора использовалась 2D эллиптическая модель на основе уравнений Навье–Стокса. В работе [14] для расчета паровой конверсии метанола — 3D модель, решаемая CFD FLUENT, квази 3D модель, представляющая собой поршневую модель для реагирующего потока в сочетании с 3D моделью для теплообмена, упрощенная 1D модель, которая является поршневой моделью с допущением того, что температура каталитического слоя постоянна.

В настоящей работе на основе численного решения полной системы уравнений Навье–Стокса рассмотрена паровая конверсия метанола в плоском двумерном микроканале при внешнем подводе тепла к реагирующей смеси. Целью работы является численное исследование взаимосвязи тепловых, диффузионных и физико-химических процессов в условиях сильной неизотермичности реакций и распределенного внешнего подвода тепла по длине канала.

МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Численное моделирование двумерного течения газа и процессов переноса в плоском двумерном микроканале при наличии химических превращений, активированных на стенках каналов, проводилось в рамках уравнений Навье–Стокса для ламинарного течения многокомпонентного сжимаемого газа:

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V)}{\partial y} = 0, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho U^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho UV)}{\partial y} + \frac{dP}{dx} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \left(2\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} \right) \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) \right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial \left(\rho U^2\right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\rho V^2\right)}{\partial y} + \frac{dP}{dy} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(2\frac{\partial V}{\partial y} - \frac{2}{3}\left(\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y}\right)\right)\right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x}\right)\right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\rho Uh)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho Vh)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum h_i \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\sum h_i \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + U \frac{\partial P}{\partial x} + V \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right)^2,$$
(5)

$$\frac{\partial(\rho UY_i)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho VY_i)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial y}\right),\tag{6}$$

$$P = \frac{\rho R_m T}{M}, \quad M = \frac{1}{\sum Y_i / M_i}.$$
(7)

Здесь x и y — продольная и поперечная координаты, ρ — плотность смеси газов, U и V — продольная и поперечная скорости, T — температура, Y_i — массовые концентрации компонентов, M_i — молекулярный вес *i*-го компонента. R_m — универсальная газовая постоянная.

Вязкость μ и теплопроводность λ смеси газов зависят от температуры и концентрации компонентов и вычисляются по соотношениям [15–16]:

$$\mu = \sum_{i=1}^{n} \frac{\mu_{i} x_{i}}{\sum_{k=1}^{n} G_{ik} x_{k}}, \quad G_{ik} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\left(1 + \left(\mu_{i}/\mu_{k}\right)^{1/2} \left(M_{k}/M_{i}\right)^{1/4}\right)^{2}}{\left(1 + M_{i}/M_{k}\right)^{1/2}},$$
(8)

$$\lambda = \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_{i} x_{i}}{\sum_{k=1}^{n} A_{ik} x_{k}}, \quad A_{ik} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\left(1 + \left(\lambda_{i}/\lambda_{k}\right)^{1/2} \left(M_{i}/M_{k}\right)^{1/4}\right)^{2}}{\left(1 + M_{i}/M_{k}\right)^{1/2}}, \quad x_{i} = \frac{Y_{i}/M_{i}}{\sum_{i=1}^{n} Y_{i}/M_{i}}.$$
 (9)

Значения вязкости μ_i и теплопроводности λ_i каждого компонента смеси задавались полиномиальными функциями температуры пятой степени, построенными исходя из данных справочника [17], x_i — мольная доля компонента смеси. Коэффициент диффузии *D* и энтальпия *h* смеси определялись следующим образом:

$$D = \frac{9,99 \cdot 10^{-5} T^{1,75}}{p}, \quad h = \sum_{i}^{N} Y_{i} h_{i}, \quad h_{i} = h_{i,0} + \int_{298}^{T} C p_{i} dT.$$
(10)

Здесь c_p — теплоемкость при постоянном давлении, определяемая как полиномиальная функция температуры, построенная исходя из справочных данных, h_i — энтальпия *i*-го компонента смеси, $h_{i,0}$ — энтальпия образования компонентов смеси и p — давление в микроканале.

Система уравнений Навье–Стокса записывалась в переменных функция тока и завихренность и решалась конечно-разностным методом по неявной трехслойной разностной схеме. Дифференциальная задача аппроксимировалась на шаблоне "крест". Для решения системы алгебраических уравнений, получающихся в результате замены производных их разностными аппроксимациями, применялся итерационный метод Зейделя. Использовалась равномерная прямоугольная сетка. При числах Маха меньше 0,005 гидродинамический перепад давления в канале не учитывался для экономии времени счета. На входе в канал задавался ударный профиль скорости, нулевая поперечная скорость, постоянные по сечению канала: температура смеси и массовые концентрации исходных компонентов реакции, которыми являются метанол и пары воды. Расчеты выполнялись в предположении зеркальной симметрии стационарного течения относительно срединной плоскости течения, где рассматривалась только половина канала. На стенках канала для компонент скорости задавались условия прилипания. Использованы следующие граничные условия на стенке в области реакции:

$$-\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial y} = s_{s,i} M_i, \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} = \Sigma r_{s,k} \Delta H_k + q_w.$$
(11)

Здесь $s_{s,i}$ — скорость появления (исчезновения) *i*-го компонента на поверхности канала во всех протекающих реакциях, $r_{s,k}$ — скорость *k*-ой реакции, протекающей на поверхности канала, ΔH_k — теплота *k*-ой реакции, q_w — плотность внешнего теплового потока.

Начальное отношение массовых концентраций водяного пара и метанола в расчетах равно $Y_{\rm H_2O}/Y_{\rm CH_3OH} = 1$. Давление в микроканале 1 бар. Перед областью реакции в канале располагался участок длинной 20 мм для стабилизации профиля скорости смеси.

Паровая конверсия метанола является сложным процессом, состоящим не только из серий реакций, проходящих на катализаторе, но также включающим обмен реагентов и продуктов между газовой фазой и областью реакций. В работе [10] предложен следующий механизм паровой конверсии метанола, где реакция (1) дополнена двумя:

$$CH_3OH \Leftrightarrow CO + 2H_2,$$
 (12)

$$CO_2 + H_2 \Leftrightarrow CO + H_2O.$$
 (13)

Для этих реакций показано, что их скорости определяются парциальными давлениями и скоростью адсорбции компонентов на активных центрах катализатора. Полученные выражения для скоростей реакций зависят от парциальных давлений компонентов и температуры следующим образом:

$$r_{1} = \frac{k_{r}K_{CH_{3}O(1)}^{*}\left(\frac{P_{CH_{3}OH}}{P_{H_{2}}^{0.5}}\right)\left(1 - \frac{P_{CO}P_{H_{2}}^{3}}{k_{r}P_{CH_{3}OH}P_{H_{2}O}}\right)C_{S1}^{T}C_{S1a}^{T}}{\left(1 + K_{CH_{3}O(1)}^{*}(P_{CH_{3}OH}/P_{H_{2}}^{0.5}) + K_{HCOO(1)}^{*}P_{CO_{2}}P_{H_{2}}^{0.5} + K_{OH(1)}\left(P_{H_{2}O}/P_{H_{2}}^{0.5}\right)\right)\left(1 + K_{H^{(a)}}^{0.5}P_{H_{2}}^{0.5}\right)}, (14)$$

$$r_{2} = \frac{k_{w}^{+}K_{OH(1)}\left(\frac{P_{CO}P_{H_{2}O}}{P_{H_{2}}^{0.5}}\right)\left(1 - \frac{P_{CO2}P_{H_{2}}}{k_{w}P_{CO}P_{H_{2}O}}\right)(C_{S1}^{T})^{2}}{\left(1 + K_{CH_{3}O(1)}(P_{CH_{3}OH}/P_{H_{2}}^{0.5}) + K_{HCOO(1)}^{*}P_{CO_{2}}P_{H_{2}}^{0.5} + K_{OH(1)}^{*}\left(P_{H_{2}O}/P_{H_{2}}^{0.5}\right)\right)^{2}}, (15)$$

$$r_{3} = \frac{k_{d}K_{CH_{3}O(2)}^{*}\left(\frac{P_{CH_{3}OH}}{P_{H_{2}}^{0.5}}\right)\left(1 - \frac{P_{CO}P_{H_{2}O}}{k_{d}P_{CH_{3}OH}}\right)C_{S2}^{T}C_{S2a}}{\left(1 + K_{CH_{3}O(2)}(P_{CH_{3}OH}/P_{H_{2}}^{0.5}) + K_{OH(2)}^{*}\left(P_{H_{2}O}/P_{H_{2}}^{0.5}\right)\right)\left(1 + K_{H^{(2a)}}^{0.5}P_{H_{2}}^{0.5}\right)}. (16)$$

Здесь r_i — удельные скорости реакций в расчете на единицу площади поверхности катализатора (моль/(м²с)), C_{S1}^T и C_{S2}^T — концентрации центров катализатора, рав-

ные 7,5×10⁻⁶ моль/м², а C_{S1a}^{T} и C_{S2a}^{T} равны 1,5×10⁻⁵ моль/м², k_i — константы скоростей реакций определяются по закону Аррениуса, а K_i — константы равновесия, определяющиеся по правилу Вант–Гоффа и являющиеся функцией температуры. В расчетах использовались константы скоростей реакций и энергии активации из работы [10]. Катализатор имеет поверхность намного большую, чем поверхность канала. Тогда $r_{s,i} = \psi r_i$, где ψ — отношение площади поверхности катализатора к геометрической площади поверхности канала. В настоящей работе ψ = 30000, что соответсвует значениям для катализаторов паровой конверсии метанола.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНОЛА В ДВУМЕРНОМ МИКРОКАНАЛЕ

Расчеты проводились для паровой конверсии метанола в канале с зазором H = 0,5 мм для равномерной сетки с 21 узлом поперек канала при различных условиях подвода тепла к реагирующей смеси. Длина зоны реакции в расчетах равнялась L = 40 мм. Температура смеси на входе — 527 °К. Скорость газовой смеси на входе U = 0,67 м/с. Теплофизические величины на входе задавались так, что соответствовали следующим безразмерным параметрам: Re = $2\text{H}^* U\rho/\mu = 19,82$, Sc = $2H^* U/D = 11,7$, Pr = 0,89, M = 0,00154.

Паровая конверсия метанола является сильно эндотермической реакцией, поэтому без подвода тепла к реагирующей смеси степень превращения метанола мала из-за понижения температуры смеси вниз по потоку. При внешнем подводе тепла степень превращения существенно возрастает. На рис. 1 представлены результаты расчета полей концентрации метанола (*a*) и водорода (*b*) в микроканале



Рис. 1. Распределение мольных долей метанола (*a*) и водорода (*b*) по длине и ширине канала H = 0,5 мм при плотности теплового потока 1 кВт/м², Re = 19,8, Sc = 11,7, Pr = 0,89, M = 0,00154.



Рис. 2. Изменение мольной концентрации компонентов на оси канала шириной 0,5 мм при $q_w = 1 \text{ кBr/m}^2$ (CH₃OH (1), H₂O (2), CO (3), CO₂ (4), H₂ (5) (*a*). Скорости реакций в щелевом канале шириной 0,5 мм при плотности теплового потока 1 кBr/м² (*b*). Re = 19,8, Sc = 11,7, Pr = 0,89, M = 0,00154.

с шириной зазора 0,5 мм при плотности теплового потока равной 1 кВт/м². Видно, что внешнее диффузионное сопротивление в микроканале мало и изменение концентрации компонентов смеси по сечению канала незначительно.

На рис. 2, *а* приведены распределения мольных концентраций метанола, воды, окиси углерода, двуокиси углерода и водорода по длине канала. Концентрации компонентов приведены для центра канала. Концентрация водорода на выходе их канала (37,63 %) примерно в три раз выше концентрации двуокиси углерода (12,36 %), а концентрация моноксида углерода мала (0,27 %), что говорит о том, что определяющей реакцией в рассмотриваемых условиях является реакция паровой конверсии метанола. Соответствующие скорости реакций (1), (12) и (13) показаны на рис. 2, *b*. Реакции (12) и (13), приводящие к появлению моноксида углерода, имеют существенно меньшую скорость, что дает содержание окиси углерода в продуктах реакции меньше одного процента.

Как видно из уравнений (14)–(16), скорость каталитических реакций существенно зависит от температуры реагирующей смеси газов. Чем выше температура смеси в зоне реакции, тем интенсивнее протекает паровой риформинг метанола в начале канала и тем сильнее остывает смесь реагирующих газов, что может привести к немонотонному изменению температуры вдоль канала. На рис. 3 показано изменение температуры смеси вдоль и по ширине канала с зазором 0,5 мм при



Рис. 3. Температура смеси по длине и ширине канала H = 0,5 мм при плотности теплового потока 1 кВт/м². Re = 19,8, Sc = 11,7, Pr = 0,89, M = 0,00154.



Рис. 4. Температура (*a*) и мольная концентрация водорода (*b*) на оси в щелевом канале шириной 0,5 мм при равномерном по длине канала подводе тепла с плотностью теплового потока 0, 0,5, 0,7 и 1 кВт/м²; q = 1 (*1*), 0,7 (*2*), 0,5 (*3*), 0 (*4*) кВт/м², Re = 19,8, Sc = 11,7, Pr = 0,89, M = 0,00154.

плотности внешнего теплового потока 1 kBt/m^2 . Внешний тепловой поток распределен равномерно по длине зоны реакции. Видно, что изменение температуры по сечению канала незначительно, в то время как вдоль канала температура существенно неоднородна: на начальном участке она монотонно уменьшается, а в конце канала наблюдается разогрев смеси.

Падение температуры (см. рис. 3) соответствует области, где реакции с поглощением тепла проходят настолько интенсивно, что скорость потери энергии становится больше скорости подвода тепла к смеси. Рост температуры смеси газов на выходе из микроканала объясняется тем, что скорости реакций зависят от концентрации продуктов: с уменьшением доли метанола в газовой смеси скорости реакций уменьшаются. Это приводит к тому, что количество подводаимого тепла превышает количество затрат тепла на эндотермические реакции, и излишек тепла идет на нагрев газа, что позволяет оптимизировать процесс паровой конверсии метанола, не только изменяя количество тепла, подводимого к стенкам канала, но и распределяя плотность теплового потока по длине канала.

На рис. 4, *а* представлено изменение темпертуры смеси газов на оси канала при различной плотности равномерно подводимого к стенкам теплового потока. При уменьшении плотности теплового потока, температура на выходе из микроканала становится меньше, причем без подвода тепла изменение температуры вдоль канала становится монотоным. Выход водорода при уменьшении плотности теплового потока, как видно на рис. 4, *b*, тоже уменьшается. Организуем неравномерный по длине канала внешний тепловой поток таким образом, что в начале канала

его значение максимально, и он линейно уменьшается по длине канала, достигая нуля на выходе. На рис. 5 представлено изменение темпертуры смеси газов на оси канала при различной средней плотности линейно спадающего теплового

Рис. 5. Температура на оси в щелевом канале при линейно спадающем подводе тепла со средней плотностью теплового потока 0, 0,5, 0,7 и 1 кВт/м², Re = 19,8, Sc = 11,7, Pr = = 0,89, M = 0,00154; q = 1 (1), 0,7 (2), 0,5 (3), 0 (4) кВт/м².





Рис. 6. Изменение мольной концентрации компонентов на оси канала H = 0,5 мм при линейно спадающем (сплошные линии) и равномерном (пунктирные) подводе тепла при средней плотности теплового потока $q_w = 1$ кВт/м² (*a*). Скорости реакций при тех же условиях (*b*). Re = 19,8, Sc = 11,7, Pr = 0,89, M = 0,00154.

потока. Линейно спадающий по длине канала тепловой поток поддерживает более высокую температуру в области реакций и увеличивает скорость химических превращений метанола.

На рис. 6 показано изменение мольных концентраций компонентов реагирующей смеси (*a*) и скорости каталитических реакций (*b*) по длине канала для равномерного и линейно спадающего теплового потока. Видно, что при линейно спадающем по длине канала тепловом потоке каталитические реакции протекают интенсивнее и выход водорода увеличивается.

На рис. 7 показана зависимость конверсии метанола от плотности внешнего теплового потока для равномерного (сплошная линия) и линейно спадающего (пунктирная линия) подводов тепла по длине канала. Как видно, степень химических превращений метанола линейно зависит от плотности теплового потока. При той же его средней плотности линейно спадающий по длине канала подвод тепла увеличивает степень химических превращений метанола по сравнению с равномерным подводом тепла по длине канала. Таким образом, целесообразнее подводить тепло более интенсивно в начале канала, где повышение температуры реагирующей смеси существенно увеличивает скорость реакций. Нагревание смеси в конце канала оказывается не столь эффективным из-за того, что падение концентрации метанола становится ограничивающим фактором для скорости реакций, и тепло идет, главным образом, на повышение температуры газовой смеси.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численные расчеты паровой конверсии метанола в плоском двумерном микроканале с учетом реакций паровой конверсии метанола, его разложения и паровой конверсии моноксида углерода на стенках показали, что химические превращения метанола в водородсодержащий газ проходят при миллисекундных временах контакта, что позволяет создать компактный реактор для получения водорода. При ширине микроканала меньше 500 мкм



Рис. 7. Степень конверсии метанола от плотности внешнего теплового потока. Равномерный (1) и линейно спадающий (2) подводы тепла, H = 0.5 мм, Re = 19,8, Sc = 11,7, Pr = 0,89, M = 0,00154.

диффузионные процессы в газовой фазе выравнивают поле концентраций компонентов в поперечном сечении канала, и реакции проходят в кинетической области. Преобладающая реакция паровой конверсии метанола имеет наибольшую скорость на входе в канал и сохраняет высокие значения на всей длине реактора. Реакция проходит с поглощением тепла и при плотности внешнего теплового потока меньше 0,5 кВт/м², степень химических превращений метанола мала. Для рассмотренных условий степень химических превращений метанола непрерывно возрастает при увеличении плотности внешнего теплового потока и достигает 0,6 при плотности теплового потока 1 кВт/м². При этом мольная доля водорода в продуктах реакции достигает 0,376. При равномерном по длине канала подводе тепла температура потока имеет минимум в начале канала в области интенсивных химических превращений. Подвод тепла в конце реактора в большей степени разогревает смесь газов, чем поддерживает протекание эндотермических реакций. Линейно спадающий по длине канала тепловой поток увеличивает степень химических превращений метанола и снижает выходную температуру продуктов реакции по сравнению с равномерным тепловым потоком, что может быть использовано для повышения энергоэффективности микроканального реактора паровой конверсии метанола.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Kolb G., Hessel V. Micro-structured reactor for gas phase reaction // Chem. Engng. J. 2004. Vol. 98. P. 1–38.
- Kusakabe R, Morooka S., Maeda H. Development of a microchannel catalytic reactor system // Korean J. Chem. Engng. — 2001. — Vol. 18, No. 3. — P. 271–276.
- 3. Kuznetsov V.V., Vitovsky O.V., et. al. Hydrodynamics and Heat and Mass Transfer at Chemical Conversions in Slot Reactors // J. of Engng. Thermophysics. 2007. Vol. 16, No. 2. P. 99–106.
- Brown, L.F. A Comparative study of fuels for on-board hydrogen production for fuel-cell-powered automobiles // Inter. J. of Hydrogen Energy. — 2001. — Vol. 26, No. 4. — P. 381–397.
- Kumar R., Ahmed S., Krumpelt M., The low temperature partial-oxidation reforming of fuels for transportation fuel cell systems // Fuel Cell Seminar Abstracts, Nov. 17-20, 1996, Orlando, FL. — P. 750–753.
- 6. Peters R., Dusterwald H.G., Hohlein B. Investigation of a methanol reformer concept considering the particular impact of dynamics and long-term stability for use in a fuel-cell-powered passenger car // J. of Power Sources. 2000. Vol. 86, Iss. 1-2. P. 507–514.
- 7. Ahmed S., Krumpelt M. Hydrogen from hydrocarbon fuels for fuel cells // Inter. J. of Hydrogen Energy. 2001. Vol. 26, No. 4. P. 291–301.
- Frauhammer, J., Eigenberger G., et. al. A new reactor concept for endothermic high-temperature reactions // Cheml. Engng. Sci. — 1991. — Vol. 54, Iss. 15-16. — P. 3661–3670.
- 9. Pfeifer P., A. Kölbl, K. Schubert. Kinetic investigations on methanol steam reforming on PdZn catalysts in microchannel reactors and model transfer into the pressure gap region // Catalysys Today. — 2005. — Vol. 110, Iss. 1-2. — P. 76–85.
- Peppley B.A., Amphlett J.C., Kearns L.M., Mann R.F. Methanol-steam reforming on Cu/ZnO/Al₂O₃ catalysts. Pt. 2. A comprehensive kinetic model // Appl. Catalysis A. 1999. Vol. 179, No. 1. P. 31–49.
- Hickman, D. A., L. D. Schmidt. Steps in Ch4 oxidation on Pt and Rh surfaces high-temperature reactor simulations // AIChE J. — 1993. — Vol. 39, No. 7. — P. 1164–1177.
- Chaniotis, A.D., Poulikakos D. Catalytic partial oxidation methane reforming for fuel cells // J. of Power Sources. — 2005. — Vol. 142. — P. 184–193.
- Deutschmann O., Schmidt L.D. Modeling the partial oxidation of methane in a short-contact- time reactor // AIChE J. — 1998. — Vol. 44, No. 11. — P. 2465–2477.
- Hyung Gyu Park, Jonathan A. Malen, W. Thomas Piggott, et. al. Methanol Steam Reformer on a Silicon Wafer // J. of Microelectromechanical Systems. — 2006. — Vol. 15, No. 4. — P. 976–985.
- **15. Mason E.A., Saxena S.C.** Formula for the thermal conductivity of gas mixtures // The Physics of Fluids. 1958. Vol. 1. P. 361–369.
- 16. Wilke C.R. Viscosity equation for gas mixtures // J. Chem. Phys. 1950. Vol. 18. P. 517-519.
- **17. Варгафтик Н.Б.** Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. С. 23–49, 154–210, 404–406.

Статья поступила в редакцию 21 января 2008 г.