

國立中興大學機械工程研究所

碩士論文

指導教授：盧昭暉 博士

燃料電池用自發熱甲醇重組器性能量測  
與數值模擬

Measurement and Numerical Simulation of the  
Performance of the Autothermal Type Methanol  
Reformer for fuel cells

研究生：林弘民 撰

中華民國九十三年七月十日

## 摘要

本文主要可分成兩部分，第一部分為設計並製作一甲醇重組器平台。本甲醇重組器主要特色係利用現今機車電子控制式噴射引擎之燃油噴射器，作為本甲醇重組器進料之控制使用，此外水與甲醇之供料採獨立供給，不同於大多數甲醇重組器研究中甲醇與水採預混合的方式供給；甲醇重組中所用之觸媒原料為 SUD-CHEMIE 公司針對甲醇重組製氫所開發之 MDC-3 型商品化觸媒，並且將觸媒塗佈於機車用不鏽鋼蜂巢載體上來進行反應實驗；第二部分為使用熱力學分析與化學動力學模式來討論操作參數對甲醇重組反應特性。

在實驗結果方面，當進料噴嘴設定在 4Hz [ Injector set 6ms/10ms ]、S/M=1.27、總進料量為 5.04g/min與反應溫度於 350°C 時有最高氫氣產量 0.234mole/min，相當於燃料電池則可供應 422 瓦的 PEMFC 所使用；在熱力學分析方面，發現甲醇重組反應製氫中，最佳 S/M 比設定應為 1.5~2.0 之間，最佳 O/M 比設定為 0.2~0.4 之間。在化學動力學模式在預測 H<sub>2</sub> 濃度上有相當好的準確性，但是在 H<sub>2</sub>O、CO 與 CO<sub>2</sub> 的出口濃度預測與實際實驗值尚有差異。

## Abstract

This thesis consists of two parts. First, a methanol reformer is designed and the E.F.I.(Electric Fuel Injection) system of motorbike engine is used in this study to control the feeding of methanol and water for the reformer. Unlike the premixed stream used in other study, methanol and water were injected independently in this study. The commercial MDC-3 catalyst coated on the honeycomb stainless steel support was used for the methanol reforming reaction. Second, the effect of operating parameters on the methanol reforming efficiency was studied with a thermodynamic model and a kinetic model.

In the experiment results, when the injector is set at 4Hz, S/M=1.27, feeding rate 5.04g/min and reactor outlet temperature 350 °C, the maximum rate of hydrogen yield obtained of 0.234mole/min, which is equivalent to 422 Watt of power of the PEM Fuel Cell. In the thermodynamic analysis, results show that the best operation parameters were S/M=1.5~2.0 and O/M=0.2~0.4. In the kinetic model results, the predicted H<sub>2</sub> yield are in good agreement with the experiment results, but the predicted H<sub>2</sub>O, CO and CO<sub>2</sub> yields are different with experiment results.

# 目錄

目錄.....	I
表目錄.....	IV
圖目錄.....	V
符號說明.....	XI
第一章 緒論.....	1
1.1 前言.....	1
1.2 文獻回顧.....	3
1.3 研究目的.....	5
第二章 甲醇重組反應製氫原理.....	13
2.1 燃料的選擇.....	13
2.2 甲醇重組反應原理.....	13
2.2.1 蒸氣重組反應法.....	14
2.2.2 部分氧化重組法.....	15
2.2.3 自發熱重組法.....	16
第三章 實驗設備與方法.....	19
3.1 系統配置.....	19
3.1.1 燃料供給系統.....	19
3.1.2 金屬蜂巢擔體觸媒.....	20
3.1.3 本體設計.....	21
3.1.4 攜載氣體系統.....	22
3.1.5 溫度控制系統.....	22

3.2 氣體量測分析系統.....	23
3.2.1 氣相層析儀.....	23
3.2.2 出口氣體流量計.....	23
3.2.3 氫氣測定器.....	24
3.2.4 車用廢氣分析儀.....	24
3.3 實驗規劃.....	25
3.3.1 儀器的校正.....	25
3.3.2 噴嘴的校正.....	26
3.3.3 S/M 與 O/M 比的訂定.....	27
3.3.4 進料量與反應溫度的設定.....	27
3.4 甲醇轉換率計算.....	28
第四章 性能量測結果與討論.....	45
4.1 330CPSI, 50%MDC-3 金屬擔體觸媒測試結果.....	46
4.2 400CPSI, 50%MDC-3 金屬擔體觸媒測試結果.....	47
4.3 400CPSI, 80%MDC-3 金屬擔體觸媒測試結果.....	49
4.3.1 甲醇蒸氣重組反應.....	50
4.3.2 甲醇自發熱重組反應.....	51
4.4 雙觸媒測試結果.....	55
4.4.1 雙觸媒甲醇蒸氣重組反應.....	55
4.4.2 提高進料率對雙觸媒甲醇蒸氣重組反應的影響.....	56
4.4.3 雙觸媒甲醇自發熱重組反應.....	57
4.4.4 提高進料率對雙觸媒甲醇自發熱重組反應的影響.....	59
4.5 實驗總結.....	60
4.6 討論.....	61

第五章 甲醇重組反應熱力學分析與數值模擬.....	89
5.1 甲醇重組反應熱力學分析.....	89
5.1.1 絕熱反應溫度.....	90
5.1.2 反應平衡濃度.....	92
5.1.3 熱力學模式的應用.....	94
5.1.4 反應平衡濃度與實驗結果比較.....	95
5.2 甲醇重組反應化學動力學模式.....	96
5.2.1 理論假設.....	96
5.2.2 甲醇重組反應與數學模式.....	97
5.2.3 擴散方程式與觸媒表面濃度方程式.....	99
5.2.4 能量方程式.....	102
5.3 參數設定與計算結果.....	102
5.3.1 參數設定.....	102
5.3.2 數值計算方法.....	103
5.3.3 計算結果.....	105
5.4 討論.....	109
第六章 結論與未來研究方向.....	119
6.1 結論.....	119
6.1.1 甲醇重組器性能量測.....	119
6.1.2 數值模擬.....	120
6.2 未來研究方向.....	121