

تحلیل عملکرد و بهینه‌سازی چند هدفه راکتور میکروکانال برای هیدروژن‌زدایی اکسایشی پروپان به پروپیلن با استفاده از روش پاسخ سطح

مصطفی احمدی اهنک، الهام یساری* و علی احمدپور

گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، ایران

تاریخ دریافت: تاریخ پذیرش:

چکیده

با استفاده از فرآورده‌های نفتی در صنعت پتروشیمی و انجام یک سری فرآیندهای شیمیایی، می‌توان محصولات متنوع و با ارزش افزوده به‌دست آورد. پروپیلن یکی از این محصولات بسیار مهم و اساسی است که می‌تواند برای تولید مواد مختلف مورد استفاده قرار گیرد. بنابراین، در مطالعه حاضر، یک مدل پایا و دو بعدی از فرآیند هیدروژن‌زدایی اکسایشی پروپان به پروپیلن در یک راکتور میکروکانال در شبیه‌ساز COMSOL انجام شد. سپس، یک بهینه‌سازی چند هدفه با هدف افزایش پروپیلن (افزایش تولید) و کاهش CO (جلوگیری از تشکیل کک) برای اولین بار انجام گرفت. در مرحله اول مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی خطایی حدود ۷٪ را نشان می‌دهد که براساس فرضیات مدل قابل قبول است. به منظور تجزیه و تحلیل فرآیند، اثر دما، سرعت جریان خوراک، ترکیب خوراک و ضریب انتقال حرارت بر میزان تولید پروپیلن و CO بررسی شد. سپس برای بهینه‌سازی عملکرد راکتور و با توجه به هزینه محاسباتی مدل COMSOL و مسئله بهینه‌سازی، یک مدل جایگزین برای راکتور میکروکانال براساس روش طراحی آزمایش (DOE) ارائه شد. سرانجام، با کمک مدل حاصل بهینه‌سازی چند هدفه فرآیند توسط روش D-optimal انجام و جبهه بهینه پرتو به‌دست آمد. با توجه به نتایج بهینه‌سازی، افزایش پروپیلن منجر به افزایش تولید CO می‌شود که نشان دهنده وجود تضاد بین این دو تابع هدف می‌باشد. پس از بهینه‌سازی نتایج یکی از نقاط بهینه جبهه پرتو ارائه گردید. دما و سرعت بهینه در این نقطه 513°C و 0.103 m/s می‌باشد. در این شرایط، بیشترین مقدار غلظت پروپیلن و کمترین مقدار CO به ترتیب برابر با 0.195 و 0.088 mol/m^3 محاسبه می‌گردد.

کلمات کلیدی: هیدروژن‌زدایی اکسایشی، پروپان، میکروکانال، مدل‌سازی، بهینه‌سازی چند هدفی

*مسئول مکاتبات

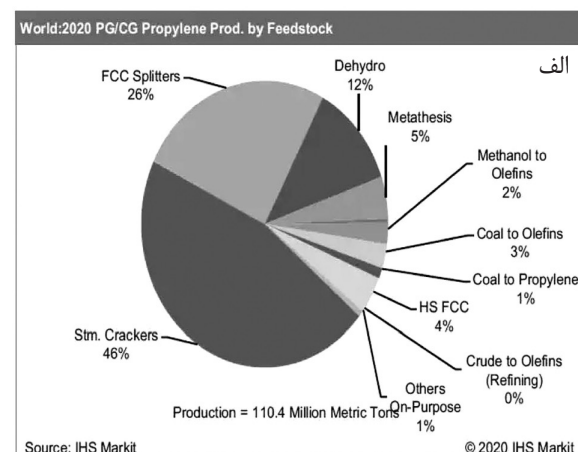
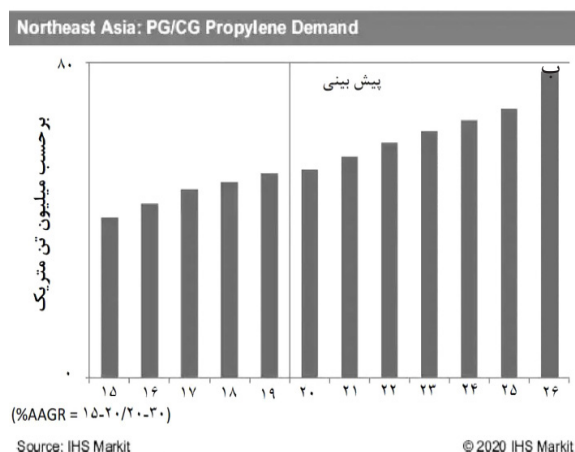
elhamyasari@um.ac.ir

آدرس الکترونیکی
شناسه دیجیتال: (DOI:10.22078/PR.2021.4408.2998)

مقدمه

مداوم تقاضای الفین سبک در سراسر جهان صورت گرفته است. در حال حاضر، الفین‌های سبک از طریق کراکینگ با بخار نفتا یا کراکینگ کاتالیستی یا هیدروژن‌زدایی کاتالیستی تولید می‌شوند. با این حال، این فرآیندها با محدودیت‌هایی چون مصرف بالای انرژی، تشکیل کک و محدودیت ترمودینامیکی مواجه هستند. هیدروژن‌زدایی اکسایشی گاز پروپان به‌عنوان یک فناوری جایگزین مورد بررسی و پژوهش قرار گرفته است، که معایب فرآیندهای مرسوم را ندارد [۸]. محققان زیادی در طول سی سال گذشته بر روی واکنش ODH کار کرده‌اند و کاتالیست‌های متعدد، شرایط عملکردی مختلف و پارامترهای بسیاری مورد ارزیابی قرار گرفته است. الیور شوارتز و همکاران کاتالیست VO_x را در راکتور میکروراکتور مورد بررسی قرار دادند و نشان دادند که با افزایش محتوای وانادیوم میزان گزینش‌پذیری کاهش می‌یابد [۹]. بوری و همکاران نیز به‌صورت آزمایشگاهی این فرآیند را در راکتور میکروکانال مورد بررسی قرار دادند و با استفاده از کاتالیست Cr-TUD-1 میزان تبدیل پروپان را حدوداً ۴۵٪ و گزینش‌پذیری پروپیلن را تقریباً ۷۵٪ گزارش کرده‌اند [۱۰]. روتری و همکاران به‌صورت آزمایشگاهی محتواهای مختلف کاتالیست بر پایه‌های مختلف را در یک راکتور میکروکانال مورد بررسی قرار دادند.

با استفاده از فرآورده‌های نفتی در صنعت پتروشیمی و انجام یک‌سری فرآیندهای شیمیایی، می‌توان محصولات متنوع و با ارزش افزوده به‌دست آورد [۱]. [۲]. از جمله مواد اولیه مهم و کلیدی برای صنایع شیمیایی الفین‌های سبک مانند اتیلن و پروپیلن هستند. تقاضا برای الفین‌های سبک افزایش یافته و هنوز هم در حال افزایش است [۴ و ۵]. از جمله مهمترین مشتقات پروپیلن عبارت‌اند از: پلی پروپیلن، آکریلونیتریل، پروپیلن اکسید، اسید آکریلیک، ایزو پروپیلن الکل، الیگومرها و دیگر مواد واسط مختلف که سرانجام به‌عنوان مواد مورد نیاز صنایع الکترونیک، خودروسازی، ساختمان‌سازی و بسته‌بندی استفاده می‌شوند [۶]. انتظار می‌رود ظرف ۱۲ سال، ظرفیت تولید جهانی پروپیلن از ۱۲۰ میلیون تن ۱۸ به حدود ۱۶۰ میلیون تن افزایش یابد [۷]. در طی همه‌گیری کووید ۱۹ نیز پروپیلن جایگاه ویژه‌ای به‌خود اختصاص داده است، از جمله کاربردهای آن می‌توان جهت استفاده در بسته‌بندی، برنامه‌های بهداشتی و پزشکی اشاره نمود. شکل ۱ میزان تقاضا برای پروپیلن در آسیای شمالی و همچنین، میزان تولید پروپیلن جهان را نشان می‌دهد [۷]. تبدیل آلکان‌های سبک به الفین‌های مربوطه موضوع تحقیق‌های زیاد و گسترده‌ای طی دو دهه گذشته بوده است که این امر با افزایش

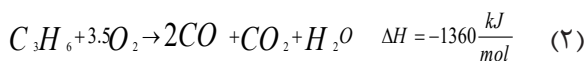
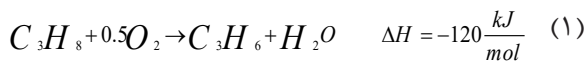


شکل ۱ الف) تولید پروپیلن و ب) تقاضای پروپیلن در آسیای شمالی [۷]

تولید پروپیلن و کاهش کربن منواکسید براساس روش پاسخ سطح انجام گرفت.

شرح فرآیند

واکنش‌های اکسایشی جزئی، سیستم پیچیده‌ای دارند که در آن واکنش‌های متعدد ممکن است اتفاق بیفتد که طبق مرجع [۱۵] واکنش‌ها ساده‌سازی شده‌اند به طوری که در فرآیند هیدروژن زدایی از گاز پروپان، ابتدا گاز اکسیژن بر روی کاتالیست جذب شده و تبدیل به گونه فعال برای واکنش می‌شود. پس از این مرحله و تشکیل گونه فعال، گاز پروپان با اکسیژن فعال وارد واکنش شده (۱) و بخار آب و پروپیلن (C₃H₆) تولید می‌کند. C₃H₆ مجدداً با اکسیژن فعال طبق واکنش (۲) وارد واکنش شده و ضمن تولید مجدد بخار آب، دی اکسید کربن نیز تولید می‌شود [۱۶].



سرعت واکنش‌ها به صورت روابط ۳ و ۴ می‌باشد و مقادیر عددی پارامترهای واکنش‌ها در ادامه نشان داده شده است. سرعت واکنش تولید مستقیم پروپیلن شامل واکنش تولید پروپیلن و واکنش سوختن پروپیلن به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$r_1 = k_1 \exp\left(-\frac{E_{A.1}}{RT}\right) C_{C_3H_8}^{m_1} C_{O_2}^{m_2} \quad (3)$$

$$r_2 = k_2 \exp\left(-\frac{E_{A.2}}{RT}\right) C_{C_3H_6}^{m_3} C_{O_2}^{m_4} \quad (4)$$

ثوابت سرعت برای واکنش‌های مذکور در جدول ۱ نشان داده شده است.

و نشان دادند که پایه کاتالیست تأثیر چشم‌گیری بر روی سنتیک فرآیند هیدروژن زدایی اکسایشی دارد [۱۱]. کریستین اینگر و همکاران خاصیت پایداری و کاربردی بودن مواد سازنده دیواره میکروکانال را برای فرآیند ODH مورد بررسی قرار دادند [۱۲]. ژاو و همکاران نیز به صورت آزمایشگاهی فرآیند ODH را در راکتور میکروکانال با استفاده از کاتالیست B₂O₃/SiO₂ مورد بررسی قرار دادند و میزان گزینش پذیری پروپیلن را ۸۶٪ و میزان درصد تبدیل پروپان را ۱۶/۹٪ گزارش کرده‌اند [۱۳]. انجام تحقیقات متعدد آزمایشگاهی در این زمینه اهمیت شبیه‌سازی و بهینه‌سازی راکتور میکروکانال برای فرآیند هیدروژن زدایی اکسایشی را نشان می‌دهد. با داشتن یک شبیه‌ساز مناسب که براساس داده‌های تجربی صحت‌سنجی شده است می‌توان از انجام آزمایشات متعدد صرف‌نظر کرد و همچنین رفتار راکتور را در شرایط مختلف مورد مطالعه و بررسی قرار داد. در این پژوهش، ابتدا به وسیله نرم‌افزار کامسول راکتور میکروکانال مدل‌سازی و شبیه‌سازی گردید. سپس، اعتبارسنجی راکتور شبیه‌سازی شده با نتایج آزمایشگاهی ارائه شده در مرجع [۱۴] انجام گرفت. پس از اعتبارسنجی مدل، با کمک مدل شبیه‌سازی شده تأثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد راکتور مورد بررسی و تحلیل قرار گرفت. به دلیل زمان بر بودن فرآیند بهینه‌سازی مدل شبیه‌سازی شده، از مدل‌های جایگزین^۱ مانند روش‌های طراحی آزمایش و نرم‌افزار DESIGN EXPERT استفاده گردید. با هدف بهبود عملکرد فرآیند، بهینه‌سازی چند هدفی به منظور افزایش

جدول ۱ مقادیر عددی پارامترهای سرعت واکنش [۱۵]

تولید پروپان				سوختن پروپان			
K ₁	E _{A1}	m ₁	m ₂	K ₂	E _{A2}	m ₃	m ₄
(mol ^{0.25} /m ^{-2.25} .s.kg)	(kJ.mol ⁻¹)			(mol ^{0.25} /m ^{-2.25} .s.kg)	(kJ.mol ⁻¹)		
۹۵/۱ * ۱۰ ^۵	۱۱۱	۶۵/۰ ± ۰/۱۰	۱/۰ ± ۰۰۲/۰	۹/۴۳ * ۱۰ ^۴	۱۰۲	۰/۷ ± ۰/۲	۱/۰۲ ± ۰/۲

مدل‌سازی و شبیه‌سازی راکتور

راکتور میکروکانال به راکتوری گفته می‌شود که با ابعاد کوچک (حداقل یکی از ابعاد آنها کمتر از ۱ (و یا ۱۰ mm) و نسبت سطح به حجم معمولاً بین $50000-100000 \text{ m}^2/\text{m}^3$ و نیز کانال‌های ریزی در حد میکرون که سطح داخلی آن پوشیده از کاتالیست است با ایجاد شرایطی تقریباً هم‌دما، محدودیت‌های انتقال جرم و حرارت را به‌شدت کم می‌کند و موجب ایجاد واکنش با کارایی بالا می‌شود. در راکتورهای میکروکانال به علت انتقال حرارت مناسب، تشکیل نقاط داغ که یکی از معایب بزرگ راکتورهای عادی است به‌خوبی، قابل پیش‌گیری و کنترل است. از این‌رو، این نوع از راکتورها با داشتن توانایی کنترل دما برای واکنش‌های بسیار گرمازا مانند اکسیژن‌زدایی اکسایشی از گاز پروپان مناسب است. راکتورهای میکروکانال به‌صورت جریان آرام کار می‌کنند و در مقایسه با راکتورهای بستر ثابت که به‌صورت غیر منظم پرشده‌اند افت فشار کم‌تری دارند [۱۶ و ۱۷]. راکتورهای میکروکانال به‌صورت تک کانال و یا چندکانال قابل بررسی هستند. در بررسی حاضر، جهت شبیه‌سازی واکنش مورد نظر از مدل تک کانال استفاده شده است که برای به‌دست آوردن تبدیل واکنش‌دهنده‌ها، گزینش‌پذیری محصول، میزان گرمای تولیدی و پروفایل دما داخل کانال مناسب است. برای شبیه‌سازی راکتور نیاز به حل هم‌زمان معادلات جرم و حرارت می‌باشد. این معادلات به‌ترتیب بیانگر توزیع غلظت و دما در طول راکتور هستند. برای انجام شبیه‌سازی از رایانه‌ای با مشخصات ۴ گیگابایت حافظه رم، پردازنده Intel® Core i5 فرکانس ۲/۵ GHz و سیستم عامل ۶۴ بیتی استفاده شده است. مدلی که در این مطالعه استفاده شده به‌صورت دو بعدی و شبه همگن می‌باشد. فرضیات مدل عبارت است از:

- واکنش صرفاً در فاز گاز در نظر گرفته شده است.
- مدل‌سازی به‌صورت دو بعدی و پایا می‌باشد.

• از تبادل حرارت راکتور با محیط صرف نظر شده است.
 معادلات استفاده شده در شبیه‌سازی راکتور میکروکانال در **جدول ۲** خلاصه شده است. در روابط مربوط به موازنه جرم، C_p نشان‌دهنده غلظت جز i برحسب mol/m^3 ، u_s سرعت خطی سیال برحسب m/s ، $D_{e,i}$ ضریب نفوذ جرمی مؤثر جزء i در مخلوط برحسب m^2/s می‌باشد که در ادامه به آن می‌پردازیم. در روابط مربوط به موازنه انرژی، λ نشان‌دهنده ضریب نفوذ هدایتی مؤثر مخلوط گازی برحسب $\text{w}/\text{m}\cdot\text{k}$ که با استفاده از روابط محاسبه خواهد شد، ρ_g چگالی سیال برحسب kg/m^3 ، C_p ظرفیت حرارتی مخلوط گازی برحسب $\text{J}/\text{kg}\cdot\text{k}$ ، ΔH_i گرمای حاصل از واکنش برحسب J/mol می‌باشد و همچنین h_v ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی برحسب $\text{w}/\text{m}^2\cdot\text{k}$ می‌باشد. با استفاده از روابط ارائه شده در **جدول ۲** می‌توان گرمای واکنش را تابعی از دما گرفت. خواص فیزیکی گاز براساس اجزاء مخلوط گاز محاسبه می‌شود. دانسیته مخلوط گازی تابع جرم مولکولی متوسط (\bar{M})، فشار کل (P) و دما (T) از رابطه (۶) به‌دست می‌آید. همچنین برای هر جزء، ظرفیت گرمای ویژه، ضریب هدایت حرارتی و ویسکوزیته به‌صورت تابعی از دما از مرجع [۱۸] استفاده شده است. شرایط مرزی به منظور حل معادلات جرم و انرژی در **شکل ۲** نشان داده شده است. همچنین، ابعاد کانال شبیه‌سازی شده در **جدول ۳** آورده شده است.

نتایج

به منظور صحت‌سنجی شبیه‌سازی این فرآیند، یکی از کانال‌های میکرو راکتور شبیه‌سازی و نتایج حاصل با نتایج Steinfeldt [۱۴] مقایسه شده است. آزمایش انجام شده در مقاله مذکور در حضور کاتالیست وانادیوم/آلومینیوم اکساید با قطر متوسط 225 تا $355 \mu\text{m}$ در میکرو راکتور کوارتزی بستر ثابت انجام گرفته است.

جدول ۲ روابط موازنه جرم و انرژی و خواص فیزیکی، استفاده شده در شبیه‌سازی راکتور میکروکانال

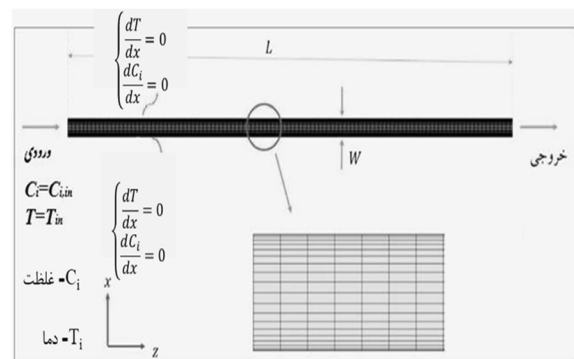
موازنه جرم:	
$i = CO$	$\nabla(-D_{e,CO}\nabla C_{CO}) + u_s \cdot \nabla C_{CO} = (2r_2)\rho_b$ (۵)
$i = CO_2$	$\nabla(-D_{e,CO_2}\nabla C_{CO_2}) + u_s \cdot \nabla C_{CO_2} = (-r_2)\rho_b$ (۶)
$i = CO_2$	$\nabla(-D_{e,O_2}\nabla C_{O_2}) + u_s \cdot \nabla C_{O_2} = (-0.5r_1 - 3.5r_2)\rho_b$ (۷)
$i = C_3H_8$	$\nabla(-D_{e,C_3H_8}\nabla C_{C_3H_8}) + u_s \cdot \nabla C_{C_3H_8} = (-r_1)\rho_b$ (۸)
$i = C_3H_6$	$\nabla(-D_{e,C_3H_6}\nabla C_{C_3H_6}) + u_s \cdot \nabla C_{C_3H_6} = (r_1 - r_2)\rho_b$ (۹)
موازنه انرژی:	
	$\nabla(-\lambda_e \nabla T) + u_s \cdot \nabla(\rho_g C_p T) = \sum r_i \rho_g \Delta H_i(T) - \frac{1}{L} h_y (T - T_{wall})$ (۱۰)
	$\Delta H(T) = \Delta H_{298} + \int_{298}^T \overline{\Delta C_p} dT$ (۱۱)
خواص فیزیکی:	
	$\rho_g = \frac{PM}{RT}$; $C_p = \sum x_i C_{pi}(T)$; $\lambda_g = \sum x_i \lambda_i(T)$; $\mu = \sum x_i \mu_i(T)$ (۱۲)

جدول ۳ ابعاد کانال شبیه‌سازی شده

ابعاد کانال شبیه‌سازی شده		
عمق (D)	عرض (W)	طول (L)
۲۵۰ μm	۳۰۰ μm	۲۰ mm

حاکي از تطابق خوب نتايج حاصل از شبیه‌سازی و نتايج آزمایشگاهی می‌باشد. اختلاف نتايج حاصل از شبیه‌سازی و آزمایشگاهی حدود ۷٪ می‌باشد.

• بررسی اثر سرعت، دما، ترکیب خوراک و ضریب انتقال حرارت بر روی تبدیل واکنش‌گرها به منظور بررسی دقیق‌تر رفتار راکتور مورد نظر، آنالیز حساسیت انجام گرفت و تأثیر تغییر پارامترهای مختلف سرعت، دما، ترکیب خوراک و ضریب انتقال حرارت بر روی تبدیل واکنش‌گرها نشان داده شد. همان‌طور که از شکل ۵ مشاهده می‌شود طبق بررسی‌هایی که در نسبت خوراک ۵۵-۰/۱۵-۰/۳ انجام شد، مشاهده گردید با افزایش سرعت خوراک (یا همان افزایش دبی) تبدیل واکنش‌گرها کاهش می‌یابد.

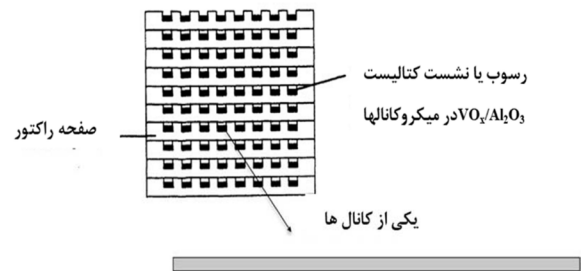


شکل ۲ شماتیک میکروراکتور با شرایط مرزی

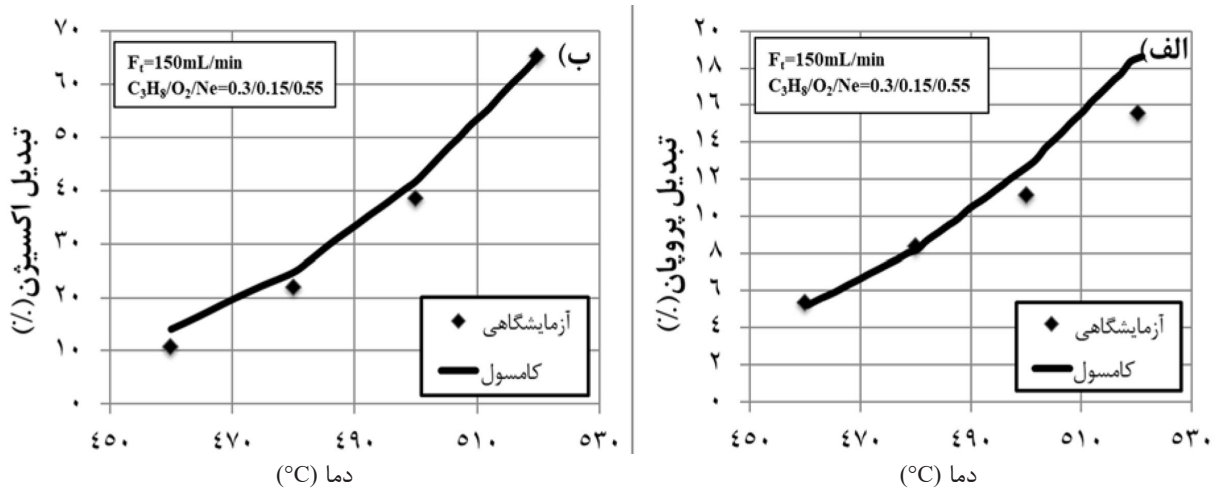
راکتور مذکور از ۱۰ صفحه موازی تشکیل شده که در روی هر صفحه ۳۴ میکروکانال به ابعاد ۰/۳ و ۰/۲۵ mm و طول ۲۰ mm دارد (شکل ۳). ابتدا به منظور بررسی استقلال از مش، مش‌بندی‌های مختلف مورد بررسی قرار گرفت و نتایج در جدول ۴ آورده شد. اختلاف ناچیز بین نتایج مش‌بندی‌های مختلف نشان می‌دهد که از تعداد ۸۵ مش به بعد نتایج مستقل از مش هستند. راکتور میکروکانال مدل‌سازی شده که در شکل ۳ نشان داده شده است در شرایط عملیاتی یکسان شبیه‌سازی و نتایج آن در شکل ۴ نشان داده شده است. نتایج حاصل

جدول ۴ بررسی استقلال از مش در دمای ۵۰۰ °C

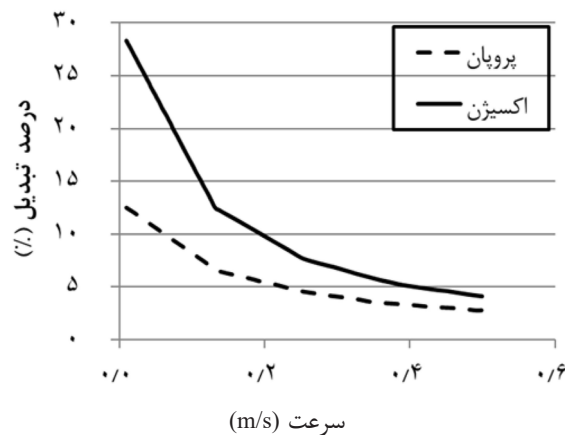
درصد تبدیل پروپان	تعداد مش‌بندی‌ها
۱۲/۷۶۵	۴۰۲
۱۲/۷۶۴۵	۱۰۶
۱۲/۷۶۷	۹۸
۱۲/۷۶۲	۸۵



شکل ۳ شماتیک میکروراکتور آزمایشگاهی [۱۵]



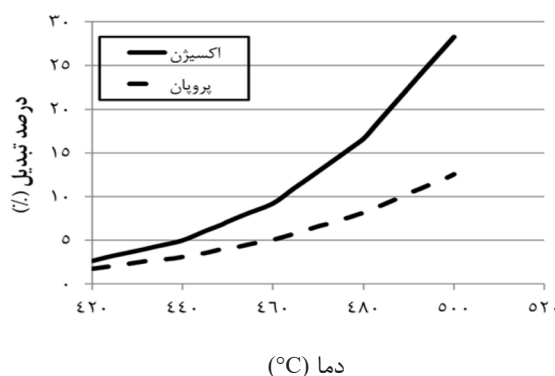
شکل ۴ صحت‌سنجی مدل‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی: الف) درصد تبدیل پروپان در مقابل دما و ب) درصد تبدیل اکسیژن در مقابل دما



شکل ۵ تغییرات درصد تبدیل اکسیژن و پروپان به پروپیلن

است که افزایش دما باعث فعال شدن کاتالیست و افزایش سرعت واکنش و در نتیجه مصرف بیشتر واکنش‌دهنده‌ها یا به عبارتی، افزایش درصد تبدیل واکنش‌گرها می‌گردد. بنابراین، افزایش دما پارامتری اثرگذار بر میزان تولید می‌باشد.

افزایش سرعت خوراک باعث کاهش زمان ماند واکنش‌گرها و در نتیجه، کاهش درصد تبدیل می‌گردد. بررسی تأثیر تغییرات دما در شکل ۶ مشاهده می‌شود. این بررسی در شرایط ۰/۱۵-۰/۵۵-۰/۳ $C_3H_8/O_2/Ne$ و فشار اتمسفر و سرعت ۰/۱ m/s انجام گرفته است. روند تغییرات بدین صورت



شکل ۶ بررسی تأثیر دما بر روی واکنش دهنده‌ها

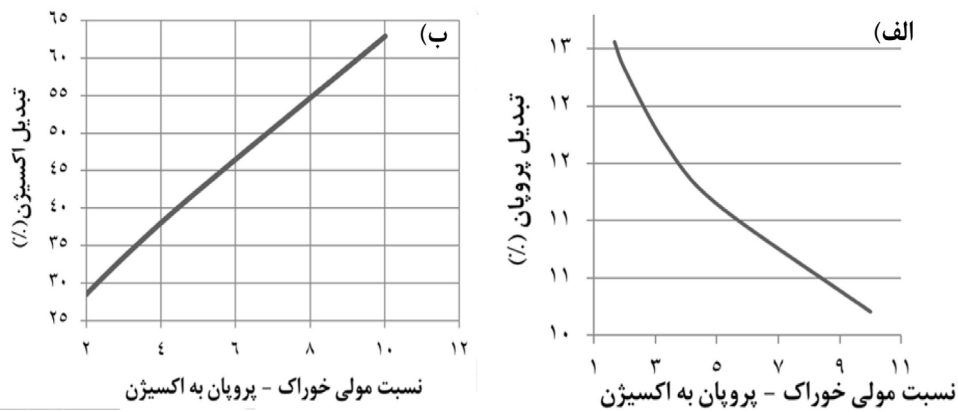
تبدیل واکنش‌گرها نیز در طول راکتور با توجه به اینکه با افزایش ضریب انتقال حرارت، گرمای انتقال یافته افزایش می‌یابد و بنابراین دما کاهش یافته در نتیجه درصد تبدیل کم می‌شود (شکل ۸). این مسئله به نوعی در بررسی تأثیر دما بر عملکرد راکتور نیز نشان داده می‌شود.

بهینه‌سازی شرایط عملیاتی با کمک طراحی آزمایش^۱

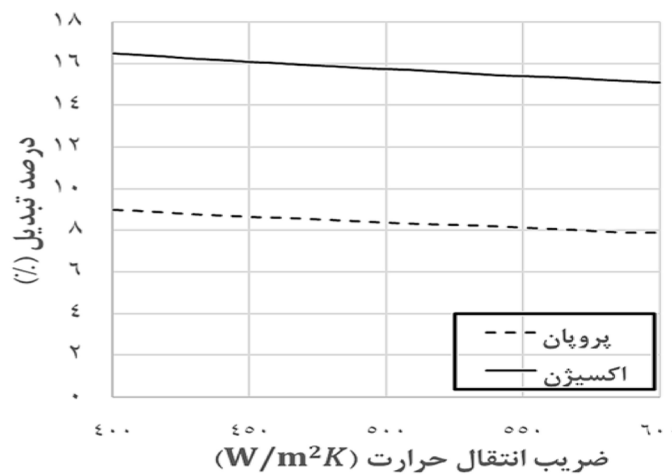
به منظور بهبود عملکرد راکتور بهینه‌سازی انجام گرفت. با توجه به زمان بر بودن محاسبات مدل ارائه شده در نرم‌افزار کامسول و به دنبال آن زمان‌بر شدن هم‌گرایی در بهینه‌سازی از طراحی آزمایش به منظور ایجاد مدل جعبه سیاه استفاده شد. طراحی آزمایش یکی از قوی‌ترین فنون بهبود کیفیت و افزایش بهره‌وری است. در این شیوه از طریق انجام برخی آزمایش‌ها، به صورت آگاهانه تغییراتی در فرآیند اعمال می‌شود تا تأثیر آنها در پاسخ فرآیند مورد بررسی قرار گیرد. روش‌های پاسخ سطح انواع مختلفی دارد. روشی که در اینجا در نظر گرفته شده است، روش D-OPTIMAL می‌باشد. تعداد اجراهای کمتر در مقایسه با روش‌های فاکتوریل استاندارد و فاکتوریل کسری و نیز مناسب برای مسائل با فضای جستجوی مقید از مزایای این روش می‌باشد. در این مطالعه به منظور طراحی آزمایش و استفاده شده است.

در بررسی دیگر، به منظور بررسی تأثیر ترکیب خوراک ورودی بر میزان تولید، نسبت پروپان به اکسیژن تغییر داده شد. همان‌طور که از نمودارهای شکل ۷ مشاهده می‌گردد در شرایط دمایی 500°C ، فشار اتمسفر و سرعت خوراک 0.1 m/s ، با افزایش نسبت پروپان به اکسیژن مقدار تبدیل پروپان کاهش و اکسیژن افزایش می‌یابد. این مسئله به این علت است که با کاهش درصد اکسیژن در مقایسه با پروپان در نسبت‌های مختلف، پروپان به صورت ماده اضافی باقی می‌ماند و عملاً اکسیژن کافی برای واکنش با پروپان وجود ندارد. به همین دلیل، تبدیل پروپان کاهش می‌یابد. در مقابل اکسیژن موجود با توجه به میزان افزایش پروپان بیشتر مصرف می‌شود و میزان تبدیل آن افزایش می‌یابد. این بررسی با هدف مطالعه اثر ضریب انتقال حرارت بر روی میزان تبدیل صورت گرفت. انتقال حرارت بر اساس ضریب انتقال حرارت بهینه محاسبه شده در طراحی و شبیه‌سازی، ساخت صورت می‌گیرد. ضریب انتقال حرارت تابع نوع فلز به کار برده شد، ماده سرد ساز، آرایش لوله‌ها، جریان همسو و ناهمسو و از این دست می‌باشد، که با تعیین این موارد ضریب کلی مورد نظر حاصل می‌شود. در بررسی فعلی به جهت مطالعه این اثر فرض شده است که یک جریان سردساز با ضریب کلی انتقال حرارت مورد نظر وجود دارد. در صورت وجود جریان سردساز و انتقال حرارت، دمای مخلوط در طول راکتور کاهش می‌یابد. درصد

1. Design of Experiment



شکل ۷ اثر ترکیب خوراک بر روی درصد تبدیل واکنش‌گرها: الف) پروپان و ب) اکسیژن



شکل ۸ درصد تبدیل واکنش‌گرها نسبت به ضریب انتقال حرارت

$$V + 0.091345 \times T \times V^2 - 1.94689E - 006 \times T^2 + 23.59944 \times V^2$$

$$1/\text{Sqrt}(C_{CO}) = +1487.41204 - 8.96030 \times T + 116.18191 \times$$

$$V - 6.42369 \times T \times V + 0.017999 \times T^2$$

$$-112.57975 \times V^{(2)} + 5.84034 \times E - 003 \times T^{(2)} \times V +$$

$$0.22876 \times T \times V^{(2)} - 1.20445E - 005 \times T^{(3)} - 9.56192 \times V^3$$

جدول ۵ پارامترهای عملیاتی در شبیه‌سازی میکروراکتور

پارامترهای مورد بررسی	دامنه تغییرات پارامترها
دما	۵۲۰-۴۶۰ °C
سرعت	۰/۰-۰۵/۴ m/s

جهت اطمینان از صحت مدل برآزش شده نیاز است ارزیابی‌هایی از لحاظ آماری صورت گیرد که این بررسی‌ها از طریق آنالیز واریانس و نمودارهای تشخیصی می‌باشد. جدول ۶ نتایج تحلیل ANOVA را نشان می‌دهد.

مدل برآزش شده برای میزان تولید CO و C_3H_6 به صورت چند جمله‌ای درجه دو و سه می‌باشد که با حذف جملات غیر مهم (مقدار P-Value کمتر از ۰/۰۵) به صورت رابطه (۱۳) محاسبه شده است. در این پژوهش ۲ پارامتر مؤثر در تولید پروپیلن به عنوان پارامترهای متغیر در طراحی آزمایش انتخاب شده‌اند (درجه آزادی ۲ می‌باشد). دما و سرعت خوراک ورودی متغیرهایی هستند که در این شبیه‌سازی به دنبال درک تأثیر آن‌ها در میزان تولید پروپیلن هستیم. جدول ۵ دامنه تغییرات این پارامترها را نشان می‌دهد. همچنین، تعداد داده‌ها یا آزمایشات ۲۱ عدد می‌باشد.

$$1/(\text{Sqrt}(C_{\text{C}_3\text{H}_6})) = +270.7877 - 1.55224 \times T + (13)$$

$$251.19493 \times V - 0.82065 \times T \times V + 3.00020E$$

$$-003 \times T^2 - 70.87207 \times V^{(2)} + 6.94609E - 004 \times T^2 \times$$

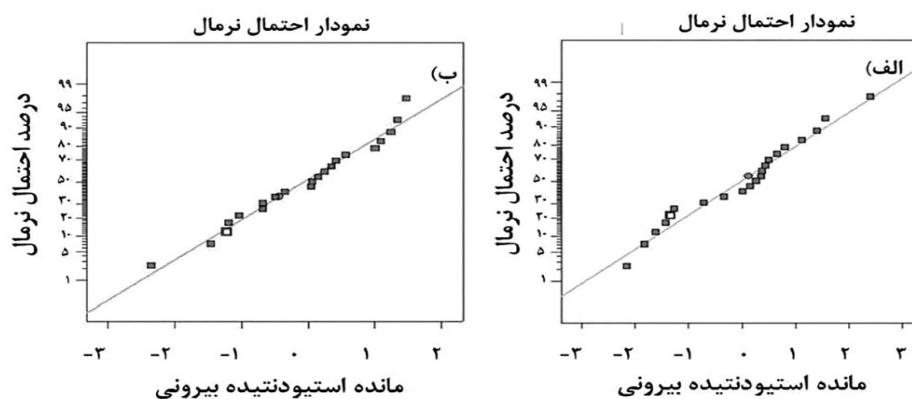
جدول ۶ نتایج بررسی ANOVA						
الف جدول آنالیز واریانس [C ₃ H ₆]						
Source	مجموع مربعات	df	میانگین مربعات	مقدار-F	مقدار-p-Prob>F	
Model	۴۷/۲۵	۹	۵/۲۵	۲۶۸۸۵/۷۹	<۰/۰۰۰۱	قابل توجه
A-T	۱/۱۹	۱	۱/۱۹	۶۰۹۸/۱۳	<۰/۰۰۰۱	
B-V	۱/۳۸	۱	۱/۳۸	۷۰۸۹/۶۰	<۰/۰۰۰۱	
AB	۱/۱۸	۱	۱/۱۸	۶۰۵۳/۳۰	<۰/۰۰۰۱	
A ²	۰/۲۵	۱	۰/۲۵	۱۲۷۶/۰۵	<۰/۰۰۰۱	
B ²	۰/۲۹	۱	۰/۲۹	۱۴۹۶/۳۱	<۰/۰۰۰۱	
A ² B	۰/۰۲۱	۱	۰/۰۲۱	۱۰۶/۷۱	<۰/۰۰۰۱	
AB ²	۹/۹۹۹E-۰۰۳	۱	۹/۹۹۹E-۰۰۳	۵۱/۲۰	<۰/۰۰۰۱	
A ³	۲/۳۸۰E-۰۰۳	۱	۲/۳۸۰E-۰۰۳	۱۹/۱۲	۰/۰۰۵۰	
B ³	۰/۰۱۲	۱	۰/۰۱۲	۲۱/۶۱	<۰/۰۰۰۱	
Residual	۲/۱۴۸E-۰۰۳	۱۱	۱/۹۵۳E-۰۰۴			
Lack of Fit	۱/۰۲۵E-۰۰۳	۹	۱/۱۳۹E-۰۰۴	۰/۲۰	۰/۹۶۴۱	غیر قابل توجه
Pure Error	۱/۱۲۳E-۰۰۳	۲	۵/۶۱۳E-۰۰۴			
Cor Total	۴۷/۲۵	۲۰				
R-Squared ۱/۰۰۰۰ Adj R-Squared ۰/۹۹۹۹ Pred R-Squared ۰/۹۹۹۸						
ب جدول آنالیز واریانس [CO]						
Model	۶۴۰/۱۹	۹	۷۱/۱۳	۳۳۴۹۲/۱۵	<۰۰۰۱/۰	قابل توجه
A-T		۱۴/۲۹	۱	۱۴/۲۹	۳۰/۶۷۳۰	<۰/۰۰۰۱
B-V		۱۹/۹۳	۱	۱۹/۹۳	۹۳۸۵/۳۹	<۰/۰۰۰۱
AB		۴۳/۱۷	۱	۴۳/۱۷	۲۰۳۲۶/۰۶	<۰/۰۰۰۱
A ²		۷/۴۲	۱	۷/۴۲	۳۴۹۵/۱۹	<۰/۰۰۰۱
B ²		۰/۱۴	۱	۰/۱۴	۶۳/۹۶	<۰/۰۰۰۱
A ² B		۱/۴۷	۱	۱/۴۷	۶۹۳/۶۴	<۰/۰۰۰۱
AB ²		۰/۰۶۳	۱	۰/۰۶۳	۲۹/۵۲	<۰/۰۰۰۲
A ³		۰/۰۹۱	۱	۰/۰۹۱	۴۲/۸۹	<۰/۰۰۰۱
B ³		۹۶۲/۱E-۰۰۳	۱	۱/۹۶۲E-۰۰۳	۰/۹۲	۰/۳۵۷۱
Residual		۰/۰۲۳	۱۱	۲/۱۲۴E-۰۰۳		
Lack of Fit		۰/۰۲۲	۹	۲/۳۹۵E-۰۰۳	۲/۶۵	۰/۳۰۳۸
Pure Error		۱/۸۰۶E-۰۰۳	۲	۹/۰۳۱E-۰۰۴		
Cor Total		۶۴۰/۲۲	۲۰			
R-Squared ۱/۰۰۰۰ Adj R-Squared ۰/۹۹۹۹ Pred R-Squared ۰/۹۹۹۷						

شده در رابطه (۱۳) به‌خوبی می‌تواند رفتار فرآیند را برازش کرده و برای بهینه‌سازی مورد استفاده قرار گیرند. از سوی دیگر به منظور بررسی صحت مدل، نمودار احتمال نرمال نیز بررسی شده است. در این نمودارها داده‌ها می‌بایست از یک خط پیروی کند و ممکن است یک حالت S شکل نیز نشان دهد. **شکل ۹** منحنی احتمال نرمال را برای خطاهای میان مدل و داده‌های حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهد. این داده‌ها تا حدود زیادی از منحنی نرمال تبعیت می‌کنند زیرا خطاها در امتداد یک خط راست قرار گرفته است. این مسئله حاکی از صحیح بودن مدل به‌دست آمده است.

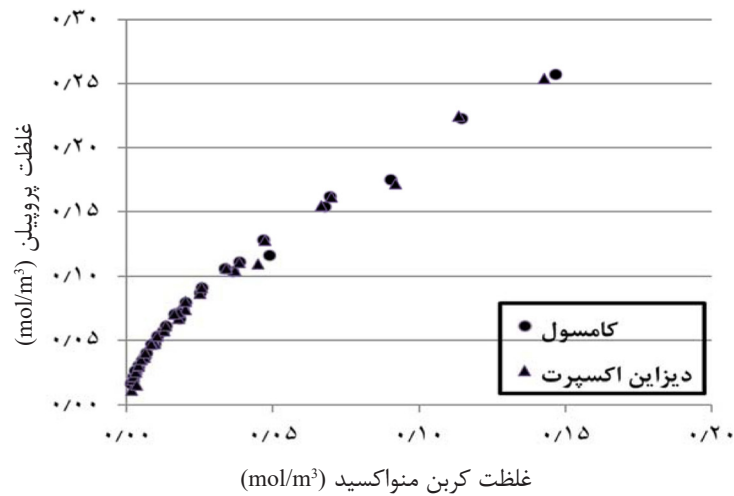
بهینه‌سازی چند هدفی و جبهه پرتو

در این قسمت در محدوده دمایی ۴۶۰ تا ۵۲۰ °C و سرعت ۰/۰۵ تا ۰/۴ m/s ابتدا بهینه‌سازی با تعریف دو تابع هدف حداکثر کردن تولید پروپیلن و حداقل کردن CO توسط نرم‌افزار Design Expert انجام گرفت. متغیرهای بهینه‌سازی استفاده شده دما و سرعت می‌باشند. همان‌طور که در **شکل ۱۰** نشان داده شده است با افزایش میزان پروپیلن میزان کربن منو اکسید نیز افزایش می‌یابد که ساز و کار واکنش نیز گویای این مسئله است. همین تقابل میان دو تابع هدف سبب تشکیل جبهه پرتو و نقاط بهینه متعدد شده است. این بدان معناست که حداکثر کردن میزان پروپیلن باعث افزایش میزان کربن منو اکسید می‌گردد.

شاخص P-value یا مقدار احتمال یا سطح احتمال، معیاری است که در جهت تصمیم‌گیری برای قبول یا رد فرض خام استفاده می‌شود. این مقدار به معنای این هست که نتیجه حاصل یا رابطه برازش شده تا چه حد جامعه اصلی را بازنمایی می‌کند. هر چه این مقدار کمتر باشد، دقت برازش و نتایج بالاتر است. به‌طور معمول عدد ۰/۰۵ به‌عنوان معیار در نظر گرفته می‌شود. علاوه‌بر این معیار، معیار دیگری تحت عنوان فقدان برازش بررسی شده است. این معیار بیان می‌کند که آیا مدل برازش شده مدل ضعیفی از داده‌ها است یا خیر. به بیان دیگر آیا رابطه ارائه شده به‌خوبی ارتباط منطقی و مناسب بین ورودی‌ها و خروجی برقرار کرده است. به منظور بررسی این موارد در **جداول ۶** تحلیل واریانس برای بررسی برازندگی مدل انجام گرفته است. با توجه به اینکه در مدل به‌دست آمده مقدار P-value کمتر از ۰/۰۵ محاسبه شده، نشان‌دهنده این مطلب است که مدل به‌دست آمده برازندگی مناسب دارد و معنادار است (کمتر از ۰/۰۵). همچنین در مدل به‌دست آمده مقدار فقدان برازش بالاتر از ۰/۵٪ و به‌صورت not significant محاسبه شده است. این مقدار نیز به معنای عدم وجود فقدان برازش و مناسب بودن مدل برازش شده است. مقدار R2 نیز نزدیک یک محاسبه شده است. با توجه به **جداول ۶**، مقادیر P-value، R2 و فقدان برازش نشان می‌دهد که مدل‌های ارائه



شکل ۹ نمودار احتمال نرمال: (الف) پروپیلن و (ب) منواکسید کربن



شکل ۱۰ مقایسه نتایج بهینه‌سازی چند هدفی طراحی آزمایش با نتایج شبیه‌سازی

از DOE در کنار زمان اجرای بسیار کم‌تر دقت قابل قبولی داشت. **جدول ۵** محدوده متغیرهای بهینه‌سازی را نشان می‌دهد. همان‌طور که در **جدول ۷** نشان داده شده است مقدار خطای به‌دست آمده برای یک نقطه انتخابی از جبهه پرتو برای توابع هدف تولید C_3H_6 و CO به ترتیب ۴/۱ و ۴/۸ می‌باشد.

و یا به بیان دیگر، حداقل کردن میزان کربن منواکسید میزان پروپیلن کمتری تولید خواهد نمود. در نهایت، می‌بایست از میان پاسخ‌های بهینه متعدد با توجه به اولویت‌های عملیاتی نقطه بهینه مورد نظر مشخص گردد. همچنین، نتایج حاصل از بهینه‌سازی در نرم‌افزار DOE مجدد به مدل شبیه‌سازی شده در کامسول داده شد و همان‌طور که از این شکل برمی‌آید، مدل حاصل

جدول ۷ مقایسه نتایج یکی از نقاط جبهه پرتو (نقطه میانی) در کامسول و DOE

نقاط بهینه	دمای ورودی (°C)	سرعت ورودی (m/s)	غلظت C_3H_6 (mol/m^3)	غلظت CO (mol/m^3)
Design Expert	۵۱۳	۰/۱۰۵	۰/۱۹۵	۰/۰۸۸
Comsol	۵۱۳	۰/۱۰۵	۰/۱۸۱۶۹	۰/۰۸۳۷
مقدار خطا	--	--	% ۴/۱	% ۴/۸

نتیجه‌گیری

در این پژوهش فرآیند تولید پروپیلن از گاز پروپان در یک راکتور میکروکانال مدل‌سازی، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی شد. در بررسی پیش‌رو، ابتدا مدلی برای یک کانال از راکتور آزمایشگاهی در نرم‌افزار کامسول شبیه‌سازی شد. سپس مدل شبیه‌سازی شده، با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی صحت‌سنجی شد. بعد از اطمینان از صحت‌سنجی مدل، با استفاده از مدل ارائه شده تعداد آزمایشات بیشتری انجام گرفت که این تعداد ۲۱ آزمایش می‌باشد. با کمک این تعداد داده حاصل از شبیه‌سازی، مدلی با سرعت به مراتب بیشتر و دقت قابل قبول با هدف استفاده در بهینه‌سازی راکتور آزمایشگاهی، به کمک نرم‌افزار Design of Experiment ۱۰ برآزش شد. در نهایت با کمک مدل جایگزین بهینه‌سازی انجام گرفت. مدل شبیه‌سازی و صحت‌سنجی شده در نرم‌افزار کامسول نقش یک آزمایشگاه مجازی را در بررسی فعلی داشته است.

به جهت بهبود عملکرد راکتور مورد بررسی، بهینه‌سازی چند هدفه با هدف حداکثر شدن میزان پروپیلن و حداقل شدن میزان CO به دلیل جلوگیری از تولید کک انجام شد. به منظور بهینه‌سازی تابع چند هدفه در این فرآیند از نرم‌افزار Design Expert و روش D-Optimal استفاده شد. با توجه به نتایج به دست آمده، مشاهده شد که مدل به دست آمده از طراحی آزمایش تطابق خوبی با نتایج شبیه‌سازی شده در نرم‌افزار کامسول داشته است. در این فرآیند مشاهده شد که افزایش دما و سرعت ورودی به راکتور به ترتیب موجب افزایش و کاهش مقدار پروپیلن و به تبع آن، CO

می‌شود. همچنین، افزایش ضریب انتقال حرارت موجب کاهش پروپیلن تولیدی خواهد شد که این به دلیل کاهش سرعت‌های واکنش به شدت گرمای هیدروژن‌زدایی اکسایشی است. از طرفی، افزایش پروپان در خوراک ورودی نسبت به اکسیژن موجب کاهش تبدیل پروپان خواهد شد. همچنین، نشان داده شد که با استفاده از روش طراحی آزمایش و نرم‌افزار Design Expert می‌توان با تعیین متغیرهای ورودی و متغیر پاسخ شناخت خوبی نسبت به فرآیند و تعیین نقاط بهینه متناسب با هدف مورد نظر ارائه کرد.

علائم و نشانه‌ها

r_1, r_2 : سرعت واکنش

k_1, k_2 : ضریب آرینیوس

$E_{A,1}, E_{A,2}$: انرژی فعال‌سازی

R : ثابت جهانی گازها (J/kg mole)

T : دما (K)

C : غلظت (mole/m^3)

u_s : سرعت خطی سیال (m/s)

$D_{e,i}$: ضریب نفوذ جرمی مؤثر جزء i (m^2/s)

λ_e : نشان‌دهنده ضریب نفوذ هدایتی مؤثر مخلوط

گازی (واحد: W/m K)

ρ_g : چگالی سیال (kg/m^3)

C_p : ظرفیت حرارتی مخلوط گازی (J/kg K)

ΔH_i : گرمای حاصل از واکنش (واحد: J/mole)

h_y : ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی ($\text{w/m}^2 \cdot \text{K}$)

\bar{M} : جرم مولکولی متوسط (g/mole)

P : فشار کل (atm)

مراجع

- [۱]. ارژنگ، علوی س م، (۱۳۹۵) هیدروژن‌زدایی اکسایشی پروپان روی کاتالیست دوفلزی نیکل-وانادیوم بر پایه ترکیبی تیتانیا-سیلیکا، نشریه پژوهش نفت، ۲۶، ۴-۹۵: ۸۰-۹۱.
- [۲]. بابایی م، امیدخواه م ر، (۱۳۹۳) بررسی اثر غشاء سرامیکی Pd/Ag بر هیدروژن‌زدایی پروپان، نشریه پژوهش نفت، ۲۵، ۸۲: ۴-۱۴.

- [۳]. طلعتی آ، حقیقی م، رحمانی ف، (۱۳۹۵) تبدیل اتان به اتیلن در حضور دی اکسید کربن روی نانوکاتالیست Cr-K/TiO₂-ZrO₂ سنتزی به روش‌های رسوبی و تلقیح، نشریه پژوهش نفت، ۲۶، ۶-۹۵: ۱۷۴-۱۸۷.
- [4]. Davidson A L, Gibson E K, Cibir G, van Rensburg H, Parker S F, Webb P B, Lennon D (2020) The application of inelastic neutron scattering to investigate iron-based Fischer-Tropsch to olefins catalysis, *Journal of Catalysis*, 392: 197-208.
- [5]. Ronda-Lloret M, Rothenberg G, Shiju N R (2019) A critical look at direct catalytic hydrogenation of carbon dioxide to olefins. *ChemSusChem*, 12, 17: 3896-3914.
- [6]. Routes C (2009) Olefins via Enhanced FCC.
- [7]. <https://ihsmarkit.com/research-analysis/propylene-industry-developments-in-northeast-asia.html>.
- [8]. Al-Ghamdi S A, de Lasa H I (2014) Propylene production via propane oxidative dehydrogenation over VO_x/γ-Al₂O₃ catalyst, *Fuel*, 128: 120-140.
- [9]. Schwarz O, Frank B, Hess C, Schomäcker R (2008) Characterisation and catalytic testing of VO_x/Al₂O₃ catalysts for microstructured reactors, *Catalysis Communications*, 9, 2: 229-233.
- [10]. Burri A, Hasib M A, Mo Y H, Reddy B M, Park S E (2018) An efficient Cr-TUD-1 catalyst for oxidative dehydrogenation of propane to propylene with CO₂ as soft oxidant, *Catalysis Letters*, 148, 2: 576-585.
- [11]. Routray K, Reddy K R S K, Deo G (2004) Oxidative dehydrogenation of propane on V₂O₅/Al₂O₃ and V₂O₅/TiO₂ catalysts: understanding the effect of support by parameter estimation, *Applied Catalysis A: General*, 265, 1: 103-113.
- [12]. Enger B C, Walmsley J, Bjørgum E, Lødeng R, Pfeifer P, Schubert K, Venvik H J (2008) Performance and SEM characterization of Rh impregnated microchannel reactors in the catalytic partial oxidation of methane and propane, *Chemical Engineering Journal*, 144, 3: 489-501.
- [13]. Zhou Y, Wang Y, Lu W, Yan B, Lu A (2020) A high propylene productivity over B₂O₃/SiO₂@ honeycomb cordierite catalyst for oxidative dehydrogenation of propane, *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 28, 11: 2778-2784.
- [14]. Steinfeldt N, Buyevskaya O V, Wolf D, Baerns M (2001) Comparative studies of the oxidative dehydrogenation of propane in, *Natural Gas Conversion VI*, 185.
- [15]. Frank B, Dinse A, Ovsitser O, Kondratenko E V, Schomäcker R (2007) Mass and heat transfer effects on the oxidative dehydrogenation of propane (ODP) over a low loaded VO_x/Al₂O₃ catalyst, *Applied Catalysis A: General*, 323: 66-76.
- [16]. Tonkovich A, Kuhlmann D, Rogers A, McDaniel J, Fitzgerald S, Arora R, Yuschak T (2005) Microchannel technology scale-up to commercial capacity, *Chemical Engineering Research and Design*, 83, 6: 634-639.
- [17]. Hwang S M, Kwon O J, Kim J J (2007) Method of catalyst coating in micro-reactors for methanol steam reforming, *Applied Catalysis A: General*, 316, 1: 83-89.
- [18]. Green D W, Southard M Z (2019) *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, 7th ed.; McGraw-Hill Education: New York, NY, USA, 9-53.



Performance Analysis and Multi-objective Optimization of Microchannel Reactor for Oxidative Dehydrogenation Propane to Propylene Using Response Surface Method

Mostafa Ahmadi Ohnak, Elham Yasari* and Ali Ahmadpour

Chemical Engineering Department, Faculty of Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran

elhamyasari@um.ac.ir

DOI:10.22078/PR.2021.4408.2998

Received: March/04/2021

Accepted: August/19/2021

Introduction

Demand for light olefins has increased since the 1930s and is still growing [1,2]. Among the most important derivatives of propylene, polypropylene, acrylonitrile, propylene oxide, acrylic acid, isopropylene alcohol, oligomers are the famous, and various other intermediates that are eventually used as materials needed in the electronics, automotive, construction and packaging industries [3]. Within 12 years, global propylene production capacity is expected to increase from 120 million tons in 2018 to about 160 million tons in 2030 [4].

Nowadays, for the production of propylene, a steam cracking unit with fluidized catalytic cracking is used. Other technologies that have been studied and developed but have not reached the commercial implementation stage are thermal catalytic cracking and oxidative dehydrogenation [5]. Conventional commercial methods of producing olefins on the one hand do not meet the growing needs of the market, and on the other hand, require high energy consumption for production. As a result, new methods are needed to increase its production. In this study, the oxidative dehydrogenation process of propane is investigated through modeling, simulation and multi-objective optimization of microchannel reactors with the purpose of increasing propylene production and decreasing CO as an environmental pollutant using C software and response surface methodology.

Materials and Methods

First, the microchannel reactor was modeled and simulated by COMSOL software. Then the validation of the simulated reactor was performed with the laboratory results presented in the Steinfeldt, 2001 [6]. After model validation, the effect of different parameters on the reactor performance was investigated and analyzed with the help of a simulated model. Due to the computational cost of the simulated model, alternative models such as experimental design methods were used. In order to improve the process performance, multi-objective optimization was performed with the purpose of increasing propylene production and decreasing carbon monoxide with the help of the proposed surrogate model.

Results and Discussion

Laboratory data were used to evaluate the model [6]. The microchannel reactor was simulated under the same operating conditions, and the results were evaluated. The results indicate their good compatibility. The difference between the simulation and laboratory results is about 7%. By examining the effect of velocity, temperature, feed composition and heat transfer coefficient on the conversion of reactants, it was found out that by increasing feed flow rate, the conversion of reactants decreases. Increasing the feed flow rate reduces the residence time of the reactants and thus reduces the conversion percentage. Also,

increasing the temperature activates the catalyst and increases the reaction rate, resulting in more reactants or, in other words, increasing the conversion rate of the reactants. To investigate the heat transfer coefficient, a cooling flow is provided for the microchannel. In the presence of a cooling stream, the heat transfer increases and the mixture temperature throughout the reactor reduces. The conversion percentage of the reactor along the reactor decreases, due to the fact that by increasing the heat transfer coefficient, the transferred heat increases so the temperature decreases and as a result, the conversion percentage decreases, too. Moreover, increasing propane in the feed flowrate relative to oxygen reduces propane conversion due to lack of the other important reactant (oxygen).

Due to the computational cost of the simulated model and optimization process, alternative models, such as experimental design methods were used. In order to improve the process performance, multi-objective optimization was performed with the purpose of increasing the production of propylene and decreasing carbon monoxide with the help of the proposed surrogate model. As the amount of propylene increases, so does the amount of carbon monoxide. The trade-off between the two objective functions has resulted the pareto front and multiple optimal points. This means that maximizing the amount of propylene will increase the amount of carbon monoxide, or in other words, minimizing the amount of carbon monoxide will produce less propylene. Finally, the optimal point must be determined among the various optimal responses according to the operational priorities. Also, the results of the optimization in the DOE software have been re-given to the simulated model in COMSOL, the DOE model has had acceptable accuracy with very low execution time.

Conclusions

In this study, the process of propylene production from propane in a microchannel reactor was simulated and optimized. Temperature control, mass and heat transfer are the main challenges in the reactors that

micro-reactors are good options for these issues. Given the above, it can be said that by increasing reaction temperature, there is no significant axial temperature gradient or hot spots in the microchannel reactors, although there is a problem that appears in the fixed bed reactors.

In order to optimize the multi-objective functions in this process, Design Expert software and D-Optimal method were used. According to the obtained results, it was observed that the model obtained from the experimental design had a good agreement with the simulated results in COMSOL software. In this process, it was observed that increasing the temperature increases the amount of propylene and CO, and increasing the velocity decreases the amount of propylene and CO. In this study, optimization was performed with the purpose of maximizing the amount of propylene and minimizing the amount of CO due to coke production.

References

1. Davidson A L, Gibson E K, Cibin G, van Rensburg, H, Parker S F, Webb P B, Lennon D (2020) The application of inelastic neutron scattering to investigate iron-based Fischer-Tropsch to olefins catalysis, *Journal of Catalysis*, 392, 197-208.
2. Ronda-Lloret M, Rothenberg G, Shiju N R (2019) A critical look at direct catalytic hydrogenation of carbon dioxide to olefins, *ChemSusChem*, 12, 17: 3896-3914.
3. Routes C (2009) Report Abstract – Olefins via Enhanced FCC.
4. Lucía Fernández (2021) <https://www.statista.com/statistics/1065879/global-propylene-production-capacity/>.
5. Gartside R J, Ramachandran B (2012) Integrated propylene production, *Google Patents*, 10.
6. Steinfeldt N, Buyevskaya O V, Wolf D, Baerns M (2001) Comparative studies of the oxidative dehydrogenation of propane in. natural gas conversion VI, 185, Access Online via Elsevier Amazon.com.