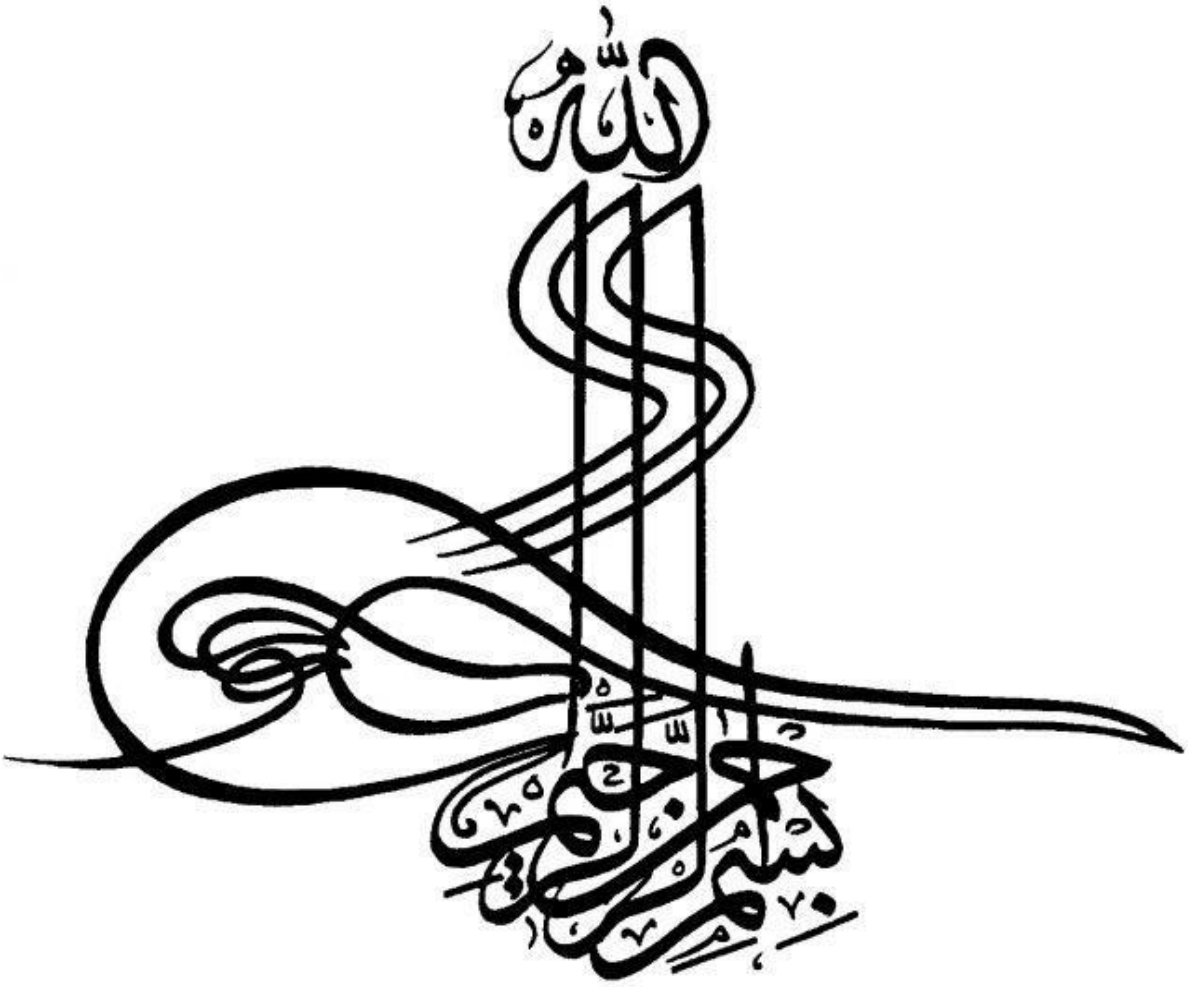
الله
بسم الله الرحمن الرحيم

چکیده

در این پژوهش مکانیزم تولید متانول بدون تغییر است و تنها با تغییر در تعدادی از شرایط عملیاتی (دما و فشار و...) تولید متانول در میکروکانال بررسی و مدل شده است و مدلسازی CFD میکروراکتور توسط نرم‌افزار Gambit و Fluent برای سنتز متانول در شرایط ناهمگن انجام شده است. متانول با استفاده از گاز سنتز بر روی کاتالیست جامد ($Cu/ZnO/Al_2O_3$) پوشش داده شده در سطح دیواره تولید می‌شود. طراحی آزمایش‌ها با استفاده از روش مرکب مرکزی (CCD) و نرم‌افزار Design Expert انجام شد. فاکتورهای دما، فشار، طول و شعاع راکتور و در نهایت نسبت گاز سنتز ورودی در مدلسازی در نظر گرفته شده است. به جز نسبت گاز سنتز سایر پارامترها به صورت کمی بررسی شد. شرایط بهینه عملیاتی فشار ۹۰ بار، دمای ۴۸۹/۶۵ کلوین، طول میکروراکتور برابر با ۲۵ cm، شعاع میکروراکتور برابر با۱/۵ mm بود. مقدار بالاتر هیدروژن در گاز سنتز، بازده متانول بالاتری داشت. در این شرایط بیشینه مقدار متانول برابر با ۵۹/۰۴٪ تولید شد.

واژه‌های کلیدی: میکروراکتور، متانول، مدلسازی CFD ، پوشش کاتالیستی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: مقدمه

۱-۱-مقدمه ۲

۱-۲- میکروراکتور ۳

۱-۳- دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) ۴

۱-۴- هدف از پژوهش حاضر ۶

فصل دوم: مروری بر تحقیقات گذشته

۲-۱- مقدمه ۹

۲-۲-پیشینه تحقیق ۹

۲-۳-فرآیندهای تولید متانول ۱۱

۲-۳-۱- خواص متانول: ۱۲

۲-۴-میزان تولید متانول در جهان و ایران ۱۳

۲-۵-کاتالیست های صنعتی ۱۴

۲-۶-انواع کاتالیست در آزمایشگاه ۱۸

۲-۶-۱- $Cu/ZnO/Al_2O_3$ ۱۸

۲-۶-۱-۱- تاثیر دمای کلسیناسیون بر روی کاتالیست ۱۸

۲-۶-۱-۲- تاثیر دمای احیا بر روی کاتالیست ۲۰

۲-۶-۱-۳-تاثیر میزان مس بر روی کاتالیست ۲۱

۲-۶-۱-۴-تاثیر نسبت Zn/Cu بر روی کاتالیست ۲۲

۲-۶-۱-۵-غیر فعال شدن کاتالیست ۲۲

۲-۷- پوشش دهی کاتالیست روی دیواره میکروراکتور ۲۴

۲-۷-۱- استفاده از کاتالیست های ساختاری ۲۴

۲-۷-۲- پوشش کاتالیست بر روی پایه های فلزی و غیر فلزی ۲۵

۲-۷-۲-۱-پوشش دهی خارج از محل ۲۶

۲-۷-۲-۲- پوشش دهی در محل ۲۸

۲-۷-۳- ساخت زیر لایه به کمک اکستروژن ۲۹

۲-۷-۴- تجهیزات لازم در روش اکستروژن ۳۰

۲-۷-۵- ترکیب خمیر و افزودنی ها ۳۲

۲-۸- تاریخچه و خصوصیات میکروکانال ها ۳۴
۲-۸-۱- کاربرد میکروکانال‌ها ۳۴
۲-۹-مدلسازیهای مشابه ۳۶
۲-۹-۱- خلاء موجود در پژوهشهای انجام گرفته ۳۹
۲-۱۰- خلاصه فصل ۴۰

فصل سوم: مدلسازی

۳-۱-مقدمه ۴۲
۳-۲-اساس و پیشنیاز مدلسازی ۴۲
۳-۳-سینیک و مکانیسم واکنش ۴۴
۳-۴-مراحل حل یک مسئله در مدلسازی CFD ۵۰
۳-۴-۱-معرفی نرم افزار GAMBIT و FLUENT ۵۰
۳-۵-یک برنامه CFD چگونه عمل میکند؟ ۵۲
۳-۵-۱-تفاضل محدود، عناصر محدود، روش های طیفی ۵۲
۳-۵-۱-۱- روش حجم محدود ۵۲
۳-۵-۲-حل معادلات جبری با استفاده از یک روش تکرار ۵۳
۳-۵-۲-۱-توضیح سازگاری و پایداری ۵۳
۳-۵-۳-مراحل کاری تمام برنامه های CFD از جمله FLUENT ۵۴
۳-۵-۳-۱-تعریف هندسه ۵۴
۳-۵-۳-۲-شبکه بندی(مشبندی) ۵۴
۳-۵-۴-معرفی انواع سلول های محاسباتی با شکل های مختلف ۵۵
۳-۵-۵-بررسی شرایط سیستم ۵۶
۳-۵-۵-۱-شرایط مرزی و اولیهی سیستم ۵۶
۳-۶-طراحی آزمایش ها ۶۱
۳-۶-۱-روش سطح پاسخ (RSM) ۶۱
۳-۶-۲- استفاده از روش سطح پاسخ جهت طراحی آزمایش ۶۳
۳-۶-۲-۱- مراحل روش سطح پاسخ به عنوان یک تکنیک بهینه سازی ۶۳
۳-۷- روش سطح پاسخ به عنوان یک فرآیند متوالی ۶۴
۳-۸- اجرای طراحی آزمایش ها ۶۶
۳-۹- خلاصه فصل ۶۸

فصل چهارم: بحث و بررسی نتایج

۴-۱-مقدمه ۷۰

۴-۲-تحلیل نتایج توسط نرم افزار Design Expert ۷۰

۴-۳-بررسی نتایج مدلسازی ۷۳

۴-۴-کانتورها و نمودارهای حاصل ازمدلسازی ۷۴

۴-۴-۱- اثر متغیر های فرآیندی بر روی تولید متانول ۷۷

۴-۴-۱-۱-دما ۷۷

۴-۴-۱-۲-فشار ۷۸

۴-۴-۱-۳-سرعت جریان ۷۹

۴-۴-۱-۴-غلظت $H_2/CO/CO_2$ (نسبت گاز سنتز) در یک چرخه ۷۹

۴-۴-۱-۵-راکتور ۸۰

۴-۴-۱-۶-روشهای دیگر تولید متانول ۸۱

۴-۵-بهینه سازی ۸۱

۴-۶-خلاصه فصل ۸۲

فصل پنجم: جمع بندی و پیشنهادها

۵-۱-مقدمه ۸۴

۵-۲-نتایج ۸۴

۵-۳- طراحی مفهومی و ارزیابی اقتصادی درفرآیند تولید متانول ۸۵

۵-۴-پیشنهادها ۸۷

پیوست ۸۸

مراجع ۹۰

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول ۲-۱- برخی خواص متانول..... ۱۲
جدول ۲-۲- تأثیر دمای کلسیناسیون بر کاتالیست [۹]..... ۱۹
جدول ۲-۳- تاثیر دمای احیا بر کاتالیست [۹]..... ۲۰
جدول ۲-۴- تأثیر میزان مس بر روی کاتالیست [۹]..... ۲۱
جدول ۲-۵- تاثیر نسبتZn/Cu بر روی کاتالیست [۹]..... ۲۲
جدول ۲-۶- نتایج واکنش روی کاتالیست در ۴ زمان مختلف [۱۰]..... ۲۳
جدول ۲-۷- خواص کاتالیست پایه مس [۱۰]..... ۲۴
جدول ۳-۱- پارامترهای سینتیکی برای واکنش تولید متانول..... ۴۶
جدول ۳-۲- ثوابت تعادلی..... ۴۹
جدول ۳-۳- شرایط مرزی میکروراکتور..... ۵۷
جدول ۳-۴- پارامترهای مختلف معادلات بقا..... ۶۰
جدول ۳-۵- تعریف سطوح متغیرها..... ۶۶
جدول ۳-۶- مقادیر پیشنهاد شده برای متغیرها در هر اجرا..... ۶۶
جدول ۴-۱- جدول آنالیز واریانس..... ۷۱
جدول ۴-۲- ترکیبات موجود در گاز خوراک..... ۷۹
جدول ۴-۳- نقطه بهینه و میزان مطلوبیت..... ۸۱
جدول ۵-۱- تغییرات میزان گزینشپذیری متانول برحسب فشار در دمای ۲۵۰ °C..... ۸۶
جدول ۵-۲- تغییرات درصد تبدیل CO_2 و CO بر حسب فشار در دمای ۲۵۰ °C..... ۸۶

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل ۲-۱- توزیع ذخایر گاز طبیعی در جهان [۷]..... ۱۷

شکل ۲-۲- توزیع محصولات و روش های تبدیلی گاز طبیعی..... ۱۸

شکل ۲-۳- تاثیر دمای کلسیناسیون بر کاتالیست..... ۱۹

شکل ۲-۴- تاثیر دمای احیا بر کاتالیست..... ۲۱

شکل ۲-۵- قالب اکستروژن با قابلیت تولید اشکال متنوع کاتالیستی [۲۲]..... ۳۰

شکل ۲-۶- شمایی از دو نوع اکسترودر فشاری (بالایی) و حلزونی (پایینی) [۲۳]..... ۳۱

شکل ۲-۷- بررسی تغییرات فشار روی تولید متانول..... ۳۷

شکل ۲-۸- راکتور حاوی مبدل حرارتی..... ۳۸

شکل ۲-۹- مدلسازی تولید متانول در نرم افزار کامسول..... ۳۹

شکل ۳-۱- اجزای میانی و جذب شده بر روی کاتالیست..... ۴۸

شکل ۳-۲- تاریخچهی انتشار و توسعه نرم افزار Fluent..... ۵۱

شکل ۳-۳- نمایی از هندسه و دامنه محاسباتی میکروراکتور..... ۵۵

شکل ۳-۴- انواع سلولهای محاسباتی..... ۵۶

شکل ۳-۵- گونه های مدل..... ۵۸

شکل ۳-۶- واکنشهای ناهمگن..... ۵۹

شکل ۳-۷- سطح پاسخ بدون انحنا..... ۶۲

شکل ۳-۸- سطح پاسخ با انحنا..... ۶۳

شکل ۳-۹- ماهیت توالی روش سطح پاسخ..... ۶۴

شکل ۳-۱۰- طراحی سطح پاسخ دوبعدی..... ۶۵

شکل ۴-۱- نمودارهای صحت مدل..... ۷۲

شکل ۴-۲- نمودارهای برهم کنش..... ۷۳

شکل ۴-۳- تغییر میزان کربن مونواکسید در طول راکتور..... ۷۵

شکل ۴-۴- کانتور جزء جرمی متانول در طول راکتور..... ۷۵

شکل ۴-۵- نمودار تغییرات متانول در طول راکتور..... ۷۶

شکل ۴-۶- تغییر فشار در طول راکتور..... ۷۶

شکل ۴-۷- نمودار سرعت واکنش بر اساس واکنش کلی..... ۷۷

شکل ۴-۸- نمودار میزان تولید متانول با افزایش دما..... ۷۸

شکل ۴-۹- تاثیرافزایش فشار بر تولید متانول..... ۷۸
شکل ۴-۱۰- تاثیر شعاع راکتور در بازدهی واکنش..... ۸۰
شکل ۵-۱- میزان تأثیر گذاری هر پاراکتر روی بازده تولید..... ۸۵

فصل اول

مقدمه

۱-۱-مقدمه

متانول ساده‌ترین الکل آلیفاتیکی است که شامل یک اتم کربن می‌باشد و برخلاف الکل‌های بالاتر توسط فرآیند آبگیری نمی‌توان آن را به الفین تبدیل کرد. این ماده ایمن‌ترین و آسان‌ترین هیدروکربن اکسیژن‌دار برای ذخیره‌سازی و انتقال می‌باشد. متانول از گاز سنتز توسط فرآیند ریفرمینگ بخار گاز طبیعی حاصل می‌گردد [۱]. امروزه صنعت متانول یکی از پویاترین صنایع در دنیاست و این ماده، خوراک اصلی در تولید طیف وسیعی از محصولات پتروشیمی (اعم از حد واسط، پایین دستی و مصرف نهایی) می‌باشد. متانول یکی از سه محصول بسیار مهم صنایع شیمیایی در دنیا بوده و با توجه به کمبود قابل پیش‌بینی منابع انرژی در آینده، مصرف مستقیم متانول به عنوان سوخت پاک [۲] و یا در تولید هیدروژن مصرفی پیل‌های سوختی [۳]، بسیار مورد توجه است. متانول را می‌توان از گاز طبیعی، زغال سنگ و بایومس تولید کرد [۴]. جهت سنتز متانول نسبت استوکیومتری $(H_2 - CO_2)/CO + CO_2)$ برابر با ۲ به عنوان یکی از انتخاب‌های مناسب برای این نسبت می‌باشد. به دلایل سینتیکی و کنترل محصولات جانبی استوکیومتری بالای ۲ ترجیح داده می‌شود [۵].

متانول (CH_3OH) یا متیل الکل در دمای محیط، مایعی خنثی و بدون رنگ با بویی ملایم می‌باشد. این ماده بسیارسمی است به طوری که بلعیدن یا استنشاق آن می‌تواند باعث کوری یا مرگ شود. متانول با نام الکل چوب یا جوهر چوب نیز شناخته می‌شود. الکل چوب واقعی، که متانول ترکیب اصلی آن است، از تقطیر چوب به دست می‌آید و همچنین در محصولات تقطیر شده اسید pyroligneous نیز یافت می‌شود.

از متانول، بیشتر به عنوان ماده اولیه برای تولید مواد شیمیایی مختلف استفاده می‌گردد. چرا که این ماده می‌تواند در واکنش‌های بسیاری شرکت کند. علت این امر را می‌توان وجود عامل هیدروکسید، نداشتن عامل بازدارنده استری گروه متیل و همچنین حضور گروه $\underline{C}H_2OH$ دانست. مهم‌ترین محصول شیمیایی متانول، فرمالدئید می‌باشد. تولید فرمالدئید از متانول توسط فرایند کاتالیستی در دمایی حدود ۶۳۵°C بر روی کاتالیست نقره مطابق واکنش‌های زیر انجام می‌گیرد:

$$CH_3OH + 1/2\ O_2 \rightarrow HCHO + H_2O \qquad (۴-۱)$$

$$CH_3OH \rightarrow HCHO + H_2 \qquad (۵-۱)$$

یکی دیگر از کاربردهای متانول، واکنش با مونوکسید کربن در دمای در حدود $^{\circ}C$ ۳۵۰ و فشار ۷۰۰ اتمسفر بر روی کاتالیست کربونیل کبالت برای تولید اسید استیک می‌باشد.

$$CH_3OH + CO \leftrightarrow CH_3COOH \qquad (۶-۱)$$

متانول به مقدار زیادی به عنوان تولید کننده انرژی و یا به عنوان افزودنی به سوخت‌ها استفاده می‌شود. چرا که این ماده بدون ایجاد کردن آلاینده های معلق مانند NO_X وSO_X و خاکستر سوخته می‌شود و همچنین زمانی که به صورت مخلوط با بنزین به کاربرده می‌شود، CO کمتری تولید می‌شود. یکی دیگر از مصارف متانول، تولید متیل ترشیو بوتیل اتر (MTBE) می‌باشد. این ماده به بنزین بدون سرب افزوده می‌شود تا عدد اکتان آن را بالا ببرد. جالب است که بدانید متانول را می‌توان از طریق فرآیند تبدیل متانول به بنزین (MTG) به بنزین با عدد اکتان بالا تبدیل کرد.

۱-۲-میکروراکتور

یک تفاوت بسیار برجسته که میکروکانال‌ها نسبت به سایر دستگاه‌ها دارند این است که با کنار هم قرار دادن صفحات میکروکانال می‌توان بدون تغییر در ابعاد کانال به سمت مقیاس صنعتی رفت یعنی تنها با افزودن چند میکروکانال به هم یا قرار دادن آنها روی هم میتوان حجم دستگاه را بالا برده و در مقیاس صنعتی بدون تغییر در بازده کار محصول تولید کرد. درحالی که در سایر دستگاه‌های صنعتی متداول با افزایش اندازه از حالت پایلوت به صنعتی برای رسیدن به حجم مورد نظر ممکن است طرح با شکست مواجه شود.

استفاده از میکرو راکتور ایمن‌تر از سیستم مرسوم راکتوری است. ایمنی این ابزار به خاطر آسانی در محدود نمودن حجم کوچک سیال است که این خصیصه بالاخص در مورد تبدیلات شیمیایی مانند واکنش‌هایی با واسطه‌های انفعالی قوی بسیار اهمیت می‌یابد. مثلاً حتی اگر یک واکنش به شدت گرمازا نیز در راکتور انجام شود کل حرارت تولید شده نمی‌تواند در حد قابل توجهی باشد. انتخاب طرح و ساخت

میکرو کانال‌ها و جنس آن‌ها وابسته به کاربرد مد نظر است. میکرو کانال‌ها از مواد مختلفی ساخته می‌شوند از جمله این مواد می‌توان به فولاد ضد زنگ، شیشه، سیلیکون و پلیمرها اشاره کرد.

۱-۳-دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)

دینامیک سیالات محاسباتی یا CFD عبارت از تحلیل سیستم‌های شامل جریان سیال، انتقال حرارت و پدیده‌های همراه، نظیر واکنش‌های شیمیایی، براساس شبیه‌سازی کامپیوتری می‌باشد. CFD روش بسیار توانمندی است، بطوری که طیف وسیعی از کاربردهای صنعتی و غیر صنعتی را در بر می‌گیرد. برخی مثال‌ها عبارتند از:

- آئرودینامیک هواپیما و وسایل نقلیه
- هیدرورودینامیک کشتی‌ها
- نیروگاه: احتراق در موتورهای IC و توربین‌های گازی
- توربوماشین: جریان‌های داخل گذرگاه‌های دوار، پخش کننده‌ها
- مهندسی برق و الکترونیک: خنک کاری دستگاه‌هایی که دارای مدارهای ریز می‌باشند
- مهندسی فرایندهای شیمیایی: اختلاط و شکل‌گیری پلیمر
- مهندسی محیط زیست: توزیع آلودگی وجریان های گذرا
- مهندسی پزشکی: جریان خون عبوری از رگ‌ها
- هواشناسی: پیش بینی وضع هوا

برای تحلیل رفتار سیالات می‌توان مطالعات آزمایشگاهی و تجربی را بکار برد. از سال‌ها و قرن‌های گذشته دانشمندان زیادی از جمله اولر[1]، لیبینیز[2]، پرانتل[3]، استوکسی[4]، ناویر[5] و... تلاش‌های فراوانی جهت مطالعه، بررسی و شناخت رفتار جریان‌های سیالات، در طول دوران‌های مختلف انجام دادند. این تلاش‌ها منجر به پیدایش مکانیک سیالات Fluids Mechanic گردید. به عبارت دیگر مکانیک سیالات شالوده نتایج و یافته‌های مطالعه شده می‌باشد که به صورت آزمایشگاهی و در اثر سعی و خطا و تکرارهای گسترده به دست آمده است. با استفاده از نتایج حاصل شده از آزمایش‌های مختلف و استفاده گسترده از معادلات دیفرانسیل و روابط ریاضی، معادلات حاکم تئوری کاربردی به دست آمدند. ضمناً بسیاری از دانشمندان به تعمیم وتحلیل معادلات مکانیک سیالات پرداختند.

پس بطور کلی برای تحلیل رفتار سیالات دو روش موجود می‌باشد:

۱- روش آزمایشگاهی و تجربی

۲- روش تئوری (استفاده از معادلات حاکمه)

شرایط مسئله مانند دو بعدی یا سه بعدی بودن هندسه، شرایط مرزی، دوفازی بودن مسئله، بزرگی ابعاد هندسی مسئله و ... باعث استفاده از روش‌های عددی جهت حل معادلات گردید. جواب‌های عددی به صورت المان محدود و یا تقریب مناسب به حل مسئله پرداخته و جواب‌های ایده‌آل و قابل قبولی را به ما می‌دهند.

توسعه و پیشرفت علوم کامپیوتر و استفاده گسترده از زبان‌های برنامه‌نویسی منشا پیدایش دینامیک سیالات محاسباتی، جهت حل عددی معادلات مکانیک سیالات در قرن حاضر گردید. به بیان دیگر CFD یا روش عددی، یک روش جدید، سریع و کاربردی در دنیای امروز است که به حل معادلات مکانیک سیالات می‌پردازد. کدهای CFD معادلات پیوستگی جرم، انرژی و اندازه حرکت را روی یک دامنه که توسط کاربر

---

[1]- Euler
[2]- Lybiniz
[3]- Prandtl
[4]- Stokes
[5]- Navier

مشخص می‌شود، حل می‌نمایند. روش CFD تکنیکی بسیار قوی بوده و محدوده‌ی بزرگی از کاربردهای صنعتی را در بر می‌گیرد. در زمینه‌ی کاربردهای مهندسی شیمی می‌توان به پلیمریزاسیون، جریان‌های چند فازی، مدلسازی راکتورها، ته‌نشینی، جداسازی و اختلاط اشاره کرد.

۱-۴-هدف از پژوهش حاضر

کشور عزیز ما ایران دومین دارنده ذخائر گاز طبیعی جهان می‌باشد. میادین گاز طبیعی از بازارهای مصرف که بیشتر کشورهای اروپایی و شرق آسیا هستند، دور می‌باشند و به همین دلیل انتقال گاز طبیعی و خام فروشی آن مقرون به صرفه نمی‌باشد. از این رو تبدیل گاز طبیعی به مواد با ارزش افزوده بالا به صورت ویژه‌ای مورد توجه قرار گرفته است. با توجه به اهمیت متانول در صنعت شیمیایی و پتروشیمیایی، تولید آن با روش‌های مختلف بررسی شده است. زیرا متانول که به صورت مایع می‌باشد، به راحتی قابل انتقال و عرضه به بازارهای جهانی است. هم‌چنین متانول کاربردهای فراوانی از قبیل افزودنی سوخت، تولید الفین‌ها، تولید بنزین، تولید اسید استیک و ... را داراست. برای تولید متانول از گاز طبیعی، ابتدا گاز طبیعی به گاز سنتز تبدیل می‌شود و سپس گاز سنتز به متانول تبدیل می‌شود. معمولاً برای تبدیل گاز سنتز به متانول نیاز به فشار بالایی است که باعث ایجاد مشکلات عملیاتی برای این فرآیند شده است. در این بین برای بهبود راه‌های تولید، کوچک کردن مقیاس تجهیزات استفاده شده با اهمیت می‌باشدکه مورد توجه این پایان‌نامه است. در بین روش‌های بررسی شده برای بهبود تولید متانول توجه به اصلاح کاتالیست بسیار بیشتر بوده، هدف ما بررسی راه‌های فرایندی و شرایط عملیاتی است.

در این پایانامه، هدف مدلسازی یک راکتور در مقیاس میکرو برای جایگزین کردن با راکتورهای استفاده شده در فرآیند تولید متانول به‌منظور به حداقل رساندن فضای عملیاتی و در عین حال بهبود پدیده‌های انتقال است. مرحله ابتدایی این کار پوشش‌دهی کاتالیست بر روی یک سطح یا استفاده از یک سری روش‌های بررسی شده، جهت تکمیل میکروراکتور خواهد بود. سطح پوشش داده شده با کاتالیست درون میکرو راکتورقرار خواهد گرفت. پوشش کاتالیست باید به گونه‌ای باشد که شرایط عملیاتی این فرآیند از جمله دمای حدود $^{\circ}C$ ۳۰۰ را تحمل کند و نیز با مقاومت بالایی بر روی سطح قرار گرفته باشد تا در حین عبور گازهای واکنش از سطح جدا نشود. کوچک بودن مقیاس راکتور این مزیت را که بتوان انرژی

مورد نیاز واکنش را بهتر و مؤثرتر در اختیار آن قرار داد، فراهم می‌نماید. استفاده از میکروراکتور به علت مزیت آن در بحث پدیده‌های انتقال نسبت به راکتورهای معمولی تولید متانول می‌باشد.

در این تحقیق یک میکروراکتور لوله ای با با ابعاد میکرو مورد بررسی و مدلسازی قرار گرفته است. بر روی دیواره داخلی راکتور کاتالیست جامد در ابعاد نانو به روش تلقیح پوشش داده شده است. بررسی میزان تولید متانول در این راکتور با توجه به از بین رفتن گرادیان دمایی و همچنین در دسترس بودن کاتالیست برای بخش عمده‌ایی از گاز سنتز ورودی (با توجه به کوچک بودن قطر راکتور) در این مدلسازی انجام می‌گیرد.

فصل دوم

مروری بر تحقیقات گذشته