

CO₂ hydrogenation process simultaneous optimization about reactor and process by cfd and ASPNE simulation

이희원, 이웅[†], 나종걸¹

KIST; ¹이화여대

(ulee@kist.re.kr[†])

CO₂ hydrogenation 반응을 진행하는 공정 중 반응기 내부에서 흡열 반응과 발열 반응이 함께 존재한다. 그 중에서 반응기 초입 부분에서 발열 반응이 강하게 일어나는 것을 확인할 수 있다. 발열 반응에 의해 반응기 내부 특정 부분에서 온도가 올라가게 되면 촉매의 수명이 단축되고 열이 다른 부분으로 확산되며 thermal runaway를 발생 시킬 수 있다. 이를 해결하기 위해 반응기 내부 cfd modeling과 ASPEN simulation을 통해 반응기 내부의 촉매 분포를 바꿔가며 반응기 내부 온도 분포를 낮출 수 있는 방법을 선택했다. 반응기 내부와 전체 공정을 함께 simulation을 진행하면서 최적화된 촉매 분포를 선택할 수 있게 됐다.