

A robust iterative method of computing effectiveness factors in porous catalysts

김동현*, 이지태
경북대학교
(dhkim@knu.ac.kr*)

촉매반응에서 유효성인자를 수치적으로 계산하는 새로운 방법에 관한 연구이다. 유효성인자를 근사적으로 계산하는 방법들이 잘 알려져 있으나 이들은 경우에 따라 30%가 넘는 오차를 보이기도 한다. 지금까지 유효성인자의 수치적 계산에는 finite difference method(FDM), orthogonal collocation method(OCM), shooting method(SM)등이 사용되어 왔다. SM에는 두가지 방법이 있다. 촉매중심에서 SM을 적용하는 방법(SM1)과 촉매표면에서 적용하는 방법(SM2)가 있다. 반응속도식이 비선형인 경우 FDM과 OCM은 수렴문제가 발생한다. SM1은 촉매 중심에서 반응물 농도가 양의 값을 갖는 경우에만 사용할 수 있으며, SM2는 이러한 제한은 없으나 특성상 수치적계산이 대단히 불안정하다. 본 연구에서 제시하는 방법은 SM2가 갖는 수치적불안정성을 이용하여 항상, 어떤 형태의 반응속도식(선형 또는 비선형)에 대해서도 유효성인자를 정확하게 계산하는 것에 관한 것이다. 이 방법에 따라 작성된 포트란 프로그램은 web page 주소 cre.knu.ac.kr에서 제공하고 있다. 이 방법은 다중 정상상태를 나타내는 경우에도 적용될 수 있으며 이 경우 모든 정상상태에 대한 유효성 인자들과 아울러 각 정상상태의 안정성에 대해서도 쉽게 판별할 수 있게 한다.