

Fischer-Tropsch 다관형 고정층 반응기의 CFD 시뮬레이션을 위한 전략 및 kinetic 분석

김현승, 조성현, 문동주¹, 신동일[†]
명지대학교; ¹KIST
(dongil@mju.ac.kr[†])

Fischer-Tropsch synthesis 반응은 1925년 F. Fischer와 H. Tropsch에 의해서 발명된 이래로 100년 가까이 되었지만, 정확한 메커니즘과 반응속도식이 규명되지 않고 있다. Fischer-Tropsch synthesis 다관형 고정층 반응기의 CFD 시뮬레이션은 명확히 규명되지 않은 Fischer-Tropsch kinetic, gas-liquid 상의 반응 특성, gas-liquid-solid 상의 유동 특성 그리고 촉매의 micro-scale과 반응기의 macro-scale을 모두 고려해야하는 multi-scale 문제를 포함한다. 본 연구에서는, Fischer-Tropsch 다관형 고정층 반응기의 CFD 시뮬레이션을 위해 lab-scale에서 도출된 kinetic의 형태 중 어떠한 형태가 적용이 용이한지와 측정이 불가능한 수준의 이성질체의 존재로 산출되기 어려운 고분자 부분에 대한 kinetic을 Anderson-Schulz-Flory Equation을 적용하여 kinetic을 보간하는 방법으로, 기존의 유사연구처럼 생성물의 일부 물질만 CFD에 반영하는 것에서 나아가 더 많은 생성물을 CFD 모델링에 반영하여 분석을 진행하였다.