

Comparison of Numerical modeling approach for Fischer-Tropsch synthesis reactor

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

1925년 독일의 과학자 Franz Fischer와 Hans Tropsch에 의해 Fischer-Tropsch synthesis가 처음 개발된 이래로 100년 가까운 시간이 지났지만, 반응의 복잡함(complex) 때문에 아직도 명확한 반응 메커니즘이 규명되지 않고 있다. 이러한 이유로, Fischer-Tropsch synthesis를 위한 반응속도식의 형태는 Power-law 형태의 전통적인 lumped model과 반응 메커니즘을 기반으로 한 Langmuir-Hinshelwood Hougen-Watson(LHHW)형태가 혼용되어 사용되고 있으며, 모델링에 적합한 kinetics 형태의 선정에 대한 명확한 기준이 없다. 또한 복잡한 polymerization 반응이기에 product distribution을 고려한 화학종별 kinetics를 material balance에 적용하여 수학적으로 풀기위한 approach 역시 명확하지 못하다. 반응의 특성상 다상흐름의 형태를 띠고 있는데 명확한 flow regime 또한 밝혀지지 않아 Euler-Euler approach 중에서도 Mixture method와 Eulerian method가 기준 없이 혼용되고 있다. 본 연구에서는, Fischer-Tropsch 반응의 Multi-tubular fixed bed type의 reactor를 numerical하게 모델링하기 위해, 기존 연구중 이태석의 Non-ASF approach를 이용하여 Fischer-Tropsch kinetics를 적용하고, Mixture method와 Eulerian method를 적용한 결과를 비교하여 Fischer-Tropsch synthesis reactor 모델링에 보다 적합한 방법론을 제안하였다.