

Superstructure optimization process for methanol production from CO₂ and H₂

이희원, 김홍곤, 나종걸, Karnitski Aliaksandr, 이 옹[†]
KIST
(ulee@kist.re.kr[†])

메탄올 합성반응식과 에너지는 CuO/ZnO/Al₂O₃ 촉매를 기반으로 한 열역학 데이터를 이용했다. 반응기 최적화는 genetic algorithm을 이용했으며 전체 공정에 대한 최적화는 superstructure optimization 방법을 사용했다. 반응기 내부는 반응 진행 방향에 따라 고온(약 250℃)에서 저온(약 169℃)으로 온도가 변화하면서 메탄올 반응을 진행했다. 결과적으로 고온에서 CO₂가 CO와 메탄올로 전환이 이루어지고 저온으로 갈수록 CO가 주로 메탄올로 전환되는 반응이 진행되는 것을 확인 할 수 있었다. 촉매량의 분포는 오목한 형태를 이루었다. 반응기 최적화를 통해 최종 메탄올 생산량이 약 3% 정도 증가하는 것을 확인했다. 전체 공정에 대해서 에너지 사용량을 줄이기 위해 superstructure optimization 방법을 사용했고, 반응기로 Feed gas가 들어가기 전 preheater와 열교환기에서의 열 사용량이 약 13%정도 감소하는 것을 확인했다.