

Geometric optimization of random packing catalyst in trickle-bed reactor using computational fluid dynamics

이예송, 강우진¹, 이원보¹, 나종걸^{1,†}

이화여자대학교; ¹서울대학교

(jgna@ewha.ac.kr[†])

화학 산업에서 화학 반응 시에 촉매를 이용하는 것은 이미 대중이다. 하지만, 상용 성형촉매의 형상 및 크기는 각 반응마다 최적화 값이 다르고, 촉매 형상에 따라 같은 반응에서도 압력 강하 및 온도 분포 등 촉매 성능 및 안정성과 직결된 요소들이 달라지기 때문에 이를 고려하면서 최대의 전환율과 선택도를 가지는 촉매 형상을 찾아 반응기성능을 최대로 이끌어내는 것은 설계연구에서 필수적인 요소이다. 특히 trickle-bed 반응기는 성형 촉매의 형상에 따라 그 성능이 크게 달라지는 것으로 알려져 있기에 최적 촉매 형상을 찾는 시뮬레이션 기반 역설계가 필요하다.

본 연구에서는 강제 물리엔진을 사용하여 무작위로 충전된 촉매를 전산유체역학 모델과 연동함으로써 반응기 구조, 다상 유동, 난류모델, 복합 열전달, 촉매 형상을 고려할 수 있는 자동화 최적설계 플랫폼을 구축하였다. 최적 전환율과 선택도를 가지는 촉매 형상을 설계하기 위해 해당 플랫폼에 multi-objective Bayesian optimization을 적용하여 다양한 화학 반응에 따라 변하는 최적 촉매 형상에 대한 분석을 진행하였다. 그 결과 전환율과 선택도를 동시에 최대화하는 파레토 곡선을 성공적으로 얻어 설계에 반영할 수 있는 기반을 구축하였다.