

## Optimization of the Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyzed synthesis of methanol using genetic algorithm

임혜원, 강석환<sup>1</sup>, 채호정<sup>1</sup>, 배종욱<sup>1</sup>, 전기원<sup>1</sup>, 박명준\*  
아주대학교; <sup>1</sup>화학연구원  
(mjpark@ajou.ac.kr\*)

메탄올은 미래의 대체에너지 중 하나로 대량생산 및 산업화를 위한 연구가 진행중이다. 메탄올 합성은 CO와 CO<sub>2</sub>를 수소화(hydrogenation)시켜 메탄올과 물을 합성하는 반응으로 여러 변수를 조작하여 생성물 수득율과 에너지 비용을 효율적으로 최적화 할 수 있다.

기존에 본 연구실에서 개발된 반응 속도식을 바탕으로 벤치 스케일에서의 메탄올 합성 반응기 모델링을 수행하였다. Mass transfer와 internal diffusion의 영향을 고려하기 위하여 각각 heterogeneous model과 effectiveness factor를 적용하였으며, 실험 데이터와 비교하여 개발된 반응기 모델의 유효성을 검증하였다. 최적화 수행을 위하여 parametric sensitivity를 통하여 효과적인 조절 변수를 결정하였으며, Genetic Algorithm을 이용하여 온도와 CO<sub>2</sub> fraction에 따라 메탄올 생성을 최대화 하는 운전조건을 찾았다.