

촉매 입자의 형상에 따른 회분식, 연속식 촉매 반응기의 수학적 모델링

조영상[†]

한국산업기술대학교

(yscho78@kpu.ac.kr[†])

반응-확산 방정식을 촉매 입자에 적용하여 회분식 또는 연속식 반응기에서 반응물의 농도가 시간에 따라 변하는 양상을 수학적으로 예측한 결과를 소개하고자 한다. 촉매 입자의 형상은 구, 원통, slab 등의 모양으로 가정되었으며, 각각의 형상을 갖는 촉매 입자들이 회분식과 연속식 반응기에 투입된 경우 입자 내부의 반응물 농도와 bulk 유체의 반응물 농도에 대한 지배방정식을 설정하여 라플라스 변환에 의한 풀이를 수행하였다. 화학 반응은 촉매 입자 내부에서만 1차 반응으로 진행된다고 가정하였으며, 라플라스 변환의 역변환은 residue 이론, convolution 이론 등을 적용하여 수행되었고, 최종적으로 반응물의 무차원 농도에 대한 결과식을 수학적으로 얻을 수 있었다. 수학적 해는 촉매 입자의 형상 뿐 아니라 반응기의 운전 방식에 따라 서로 다른 형태로 얻어졌으며, 농도에 영향을 미치는 다양한 인자들을 조절하여 반응기의 거동에 미치는 영향을 조사하였다. 회분식 반응기에서는 Thiele modulus, 촉매의 투입량, Biot 수 뿐 아니라 촉매 입자의 형상에 따라 농도 변화가 다르게 예측되었다. 연속식 반응기에는 가장 간단한 형태인 CSTR을 가정하여 모델링이 수행되었으며, 반응기의 운전이 영향을 미치는 요인으로 반응물의 체류 시간 등이 추가로 조사되었다.

감사: 본 연구는 한국연구재단의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다(No. 2021R1F1A1047451).