CFD를 활용한 현탁 중합 반응기의 유동 특성 분석

최두성, 김인선, 김홍찬, 임예훈, 한상필
LG 화학 기술 연구원

Study on the Flow Characteristics in Suspension Polymerization Reactors with CFD

Dooseong Choi, Insun Kim, Hongchan Kim, Ye Hoon Im, Sang Phil Han
LG Chemical Research Park

서론

화학 산업의 주요 제품 중 하나인 고분자 물질 생산에 있어서 교반 반응기의 활용은 보편적이다. 이렇게 사용되는 교반 반응기 내에서의 혼합 특성에 따라 생산되는 고분자 제품의 품질이 좌우되기 때문에, 오래전부터 반응기 내의 유동 현상에 대한 관심은 높았으나 체계적인 연구는 최근에 들어서야 수행되고 있는 실정이다. 반응기 내부는 보통 임펠러와 배플로 구성되어 있고, 난류 현상이 지배하는 매우 복잡한 구조의 유동현상이 존재한다. 이를 규명하기 위해 실험을 통한 유동 현상에 대한 연구가 주로 진행되어져 왔으나, 이러한 유동의 복잡성 때문에 측정이 매우 까다롭고 고가의 장비와 기술이 요구되는 실정이다. 따라서 실제 산업현장에서 활용되고 있는 다양한 형태와 조건에 대한 실험적 접근은 비용적 시간적 부담이 매우 크다고 할 수 있다. 그러나 컴퓨터의 발달과 CFD 알고리즘의 발전으로 인해 컴퓨터를 활용한 모사를 통해서도 반응기 내의 유동 조건을 일정 수준 이상 구현할 수 있게 되었고, 다양한 반응기의 특성에 대해서도 빠른 시간에 결과를 낼 수 있게 되었다. 본 연구에서는 CFD를 통한 반응기내의 유동을 해석하고 현탁 중합 반응으로 고분자 입자 형성시에 품질을 결정하는 유동 특성 요소에 대한 연구를 수행하였다.

이론

임펠러의 고속회전으로 인해 공급되어지는 에너지는 임펠러 부근에서의 복잡한 난류 유동 특성으로 급격한 소산이 일어나며 임펠러 블레이드에서 나온 흐름은 배플을 통해 반응기 상하로 이동되어진다. 임펠러 부근 영역은 배플을 포함한 나머지 체적 영역 (벌크 영역) 과 유동의 특성이 확연히 차이가 난다. 임펠러 영역과 벌크 영역으로 나눌 때 유체에 공급된 에너지는 60% 정도가 임펠러 영역에서 소산되며 나머지 40%정도가 벌크 영역에서 소산이 이루어진다고 한다[1]. 대부분의 반응기에서 임펠러 영역은 벌크 영역에 비해 매우 작은 부분을 차지하지만 대부분의 에너지가 소산되어 지고, 반응기 내에서의 유동 중 가장 복잡한 난류적 특성을 가지고 있다.

중합반응을 통해 생성되는 액적은 직경이 커지면서 증가하는 표면적에 대한 표면력을 상쇄하기에 충분한 외력이 공급되면 쪼개어 질 수 있다[2]. 이는 난류유동의 에디 (eddy) 에 의해 이루어지는데 액적은 그 크기보다 작은 에디들에 의해 깨어지며 그보다 큰 에디에 의해서는 수송이 이루어진다. 그러므로 임펠러 영역에서의 높은 난류소산율 (Turbulent Dissipation Rate) 에 의해 작은 크기의 에디가 발생하므로 임펠러 영역에서

대부분의 break-up이 일어난다[3]. 이렇게 깨어진 액적은 벌크 영역을 순환하면서 다른 액적들과의 충돌로 인해 뭉쳐지면서 고체 입자로 만들어 지고, 따라서 입자의 품질을 결정하는 특성 요소로 난류소산율이 중요한 역할을 한다[3, 4, 5, 6].

방법

CFD 분석에 사용된 SW는 상용 CFD Code인 FLUENT 6이고, 임펠러의 회전을 통해 유동이 발생하므로 MRF와 Sliding-Mesh 기법이 고려되어 진다. 비정상상태 유동의 해를 구하기 위해서는 Sliding-Mesh 기법을 사용해야 하지만, 정상상태 해를 얻기 위해서는 MRF 방법이 계산속도도 매우 빠르고 컴퓨터 자원을 많이 요구하지 않기 때문에 적합하다고 판단되어 진다. 일반적으로 MRF는 배플등이 임펠러 영역의 유동에 크게 영향을 미치지 않을 정도의 간격을 가지고 있을 때 높은 정확도를 보인다. 본 연구에서는 배플의 위치가 임펠러와 충분한 거리를 두고 있으므로 MRF를 통한 결과가 만족할 만한 정확도를 가지리라 예상된다.

반응기 내의 난류 유동을 해석하기 위해서 Standard k-ε 모델을 사용하여 반응기 내의 복잡한 유동특성이 계산되어 지도록 하였다. Standard k-ε 모델은 계산 시간이 빠르고 컴퓨터의 자원을 많이 소모하지 않고 많이 검증된 장점이 있다. 계산하고자 하는 반응기의 형상은 정렬격자로 그리드를 생성하기엔 어려움이 많이 있기 때문에 비정렬격자로 생성하였다. 난류 모델의 그리드 의존도를 검사하기 위해 Rushton Turbine 반응기에서의 k-ε 모델의 속도 프로파일을 실험 결과와 비교 하였다. 계산에 사용된 반응기의 형상은 실험에서의 형상과 같다. 실험은 Wu, Paterson 이 LDV를 통해 3가지 속도 성분을 200 rpm의 임펠러 흐름영역에서 측정한 결과와 비교하였다[1]. MRF의 계산 결과의 경우 유동장이 시간 평균된 결과와 같으며 임펠러의 각도에 따라 샘플링된 값들을 평균하여 실험과 비교하였다. 본 연구에서는 임펠러 팁과 가장 가까운 r/R=0.37(r=5.0Cm)과 반응기 벽에 가장 근접하는 r/R=0.78(r=10.5Cm)인 지점에서의 속도 프로파일을 비교하였다. 비교한 결과는 그림 1에 나타난다. 실험과 비교해서 만족할 만한 정확도를 보여줌을 알 수 있다. 이는 Tabor의 연구결과에서도 확인을 할 수 있다[7]. 따라서 k-ε 모델과 MRF방법 그리고 비정렬격자를 이용해도 반응기 내의 유동을 정확하게 예측할 수 있음을 확인할 수 있다.

실제 산업현장에서 사용되는 2가지 반응기에 대해 CFD를 적용하여 유동 특성을 비교해 보았다. 반응기 형상은 그림 2와 같다. 반응기 크기와 체적은 동일하고 배플의 형상도 삼각 배플로 동일하다. A 반응기는 일반적으로 많이 쓰이는 평행한 블레이드의 3단 임펠러가 장착되어 있고, B 반응기는 곡면 형태의 얇은 블레이드 모양을 가진 1단의 임펠러가 장착되어 있다. 동일 파워 조건에서의 유동장을 계산한 후 유동의 형태를 비교하였고 난류소산율의 분포 특성을 비교해 보았다.

결과 및 토론

2가지 반응기의 유동장의 차이는 그림 3을 통해 알 수 있다. A 반응기는 임펠러가 3단으로 구성되어 있기 때문에 유동의 순환이 크게 3부분으로 나누어짐을 알 수 있고 B 반응기의 경우 바닥에서만 임펠러의 회전으로 인한 에너지가 공급되기 때문에 전 체적을 크게 도는 하나의 순환을 보여준다. 유동의 특성들은 표 1에 보여진다. 동일한 에너지가

공급되었을 때 B 반응기의 경우가 큰 난류소산율을 가짐을 알 수 있고, 이에 근거하여 A 타입 보다는 B 타입이 높은 난류소산 특성을 가짐을 알 수 있다.

표 1 반응기 유동 특성

	Power/Volume	ω(rad/s)	V_{tip}	k_{max}	$\bar{\varepsilon}$	ε_{max}
Case A	2983.9	8.06	11.29	11.58	2.28	894.2
Case B	2948.9	9.42	13.28	15.57	2.56	2713.3

난류소산율의 반응기 체적내 분포는 그림 4에 보여진다. A 반응기의 경우 임펠러가 3단으로 이루어져 있으므로 A 반응기 보다 체적의 많은 부분을 차지 하는 값이 더 높음을 알 수 있다. 즉 벌크 영역에서의 소산율 값은 A 반응기가 더 높음을 알 수 있다. 그러나 생성 입자의 크기는 난류 소산율의 최대값에 더 의존하며, 이 값은 B 반응기가 높기 때문에 생성되는 입자의 평균 크기는 B 반응기의 생산 제품이 더 작으리라 예상된다.

본 연구에서는 고분자 반응기의 혼합특성을 연구하기 위해 CFD를 이용하였고, 계산에 사용된 방법 및 모델이 실제 유동을 잘 모사한다는 것을 알 수 있다. 이를 토대로 실제 산업현장에서 사용되는 반응기에서 임펠러의 종류에 따라 내부의 유동의 패턴이 많은 차이가 남을 가시적으로 확인할 수 있었으며, 이러한 방법으로 현탁 중합 반응기에서의 유동 현상과 그에 따른 입자 형성을 일정 수준 이상 예측하는 것이 가능하리라 사료된다.

참고 문헌

1. H. Wu and G. K. Patterson : “Laser-Doppler Measurements of Turbulent-Flow Parameters in a Strirred Mixer”, Chem. Eng. Sci., Vol. 44, No. 10, 2207-2221, 1989
2. Hinze, J. O. : “Fundamentals of the Hydrodynamic Mechanism of Splitting in Dispersion Process”, A.I,Ch.E., 1, 289-295, 1955
3. Vivaldo-Lima, E., Wood, P. E. and Penlidis, A. : “An updated review on suspension polymerization”, Ind. Eng. Chem. Res., 36(4), 939-965, 1997
4. Zhou, G. and Kresta. S. M. : “Correlation of mean drop size and minimum drop size with the turbulence energy dissipation and the flow in an agitated tank”, Chem. Eng. Sci., Vol. 53, No. 11, 2063-2079, 1998
5. Wernersson, E. S. and Tr dh, C., “Scale-up of Rushton turbine-agitated tanks”, Chem. Eng. Sci., Vol. 54, 4245-4256, 1999
6. Zhou, G. and Kresta. S. M., “Evolution of drop size distribution in liquid-liquid dispersions for various impellers”, Chem. Eng. Sci., Vol. 53, No. 11, 2099-2113, 1998
7. Tabor, G., Gosman, A. D. and Issa, R. I., “Numerical simulation of the flow in a mixing vessel stirred by a rushton turbine”, I. Chem. E. Fluid Mixing V : UK conference on Mixing, Bradford, 1996

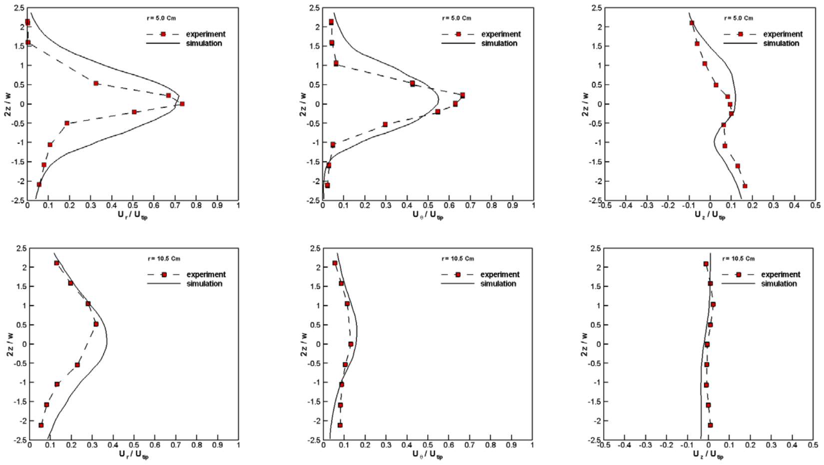

그림 1 Rushton Turbine 에서의 실험과 수치해석 결과 비교

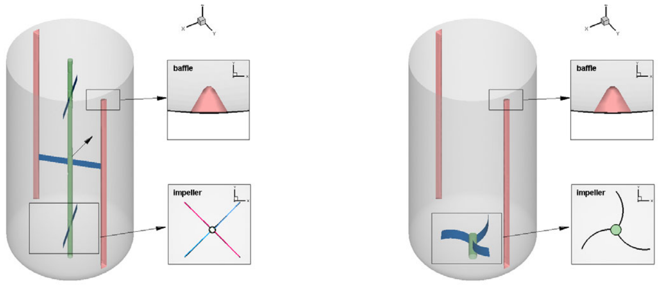

그림 2 A, B 반응기 형상

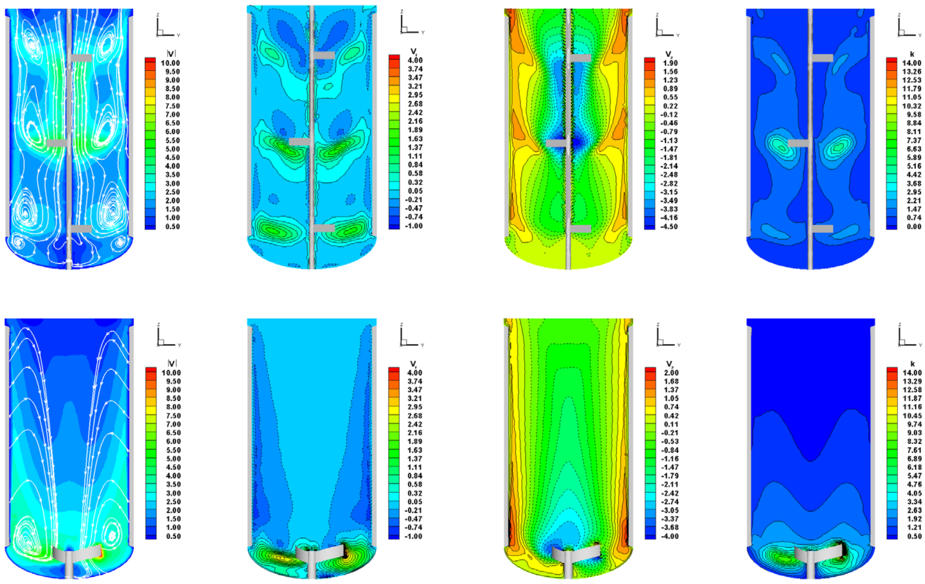

그림 3 A, B 반응기의 속도 및 난류운동에너지 패턴

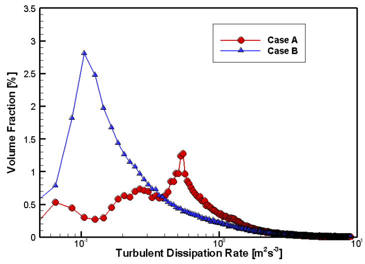

그림 4 난류소산율 체적 분포