

CFD를 이용한 관상 열교환기형 반응기의 mixing 효율 분석

이지현¹, 송현섭¹, 한상필¹

ANALYSIS OF MIXING EFFICIENCY OF A TUBULAR HEAT-EXCHANGER REACTOR USING CFD

Ji Hyun Lee, Hyun-Seob Song, and Sang Phil Han

We have investigated the mixing behavior of a tubular heat exchanger reactor using CFD and compared its mixing performance with different type of reactors such as jet mixer and continuous stirred tank reactor (CSTR). The mixedness in each reactor was quantified introducing a statistical average value, the coefficient of variation (CoV), which is a normalized standard deviation of concentration of a component over the whole fluid domain. Through the analysis of the flow pattern and turbulent energy distribution, we suggested a simple but effective way to improve the mixing performance of the tubular heat-exchanger reactor, which include the addition of the internals and/or the increase of the recycle flow rate. It was found that the CoV value of the tubular reactor could be nearly equivalent to that of CSTR by applying those two alternatives suggested here.

Key Words: 전산유체역학(CFD), 반응기(Reactor), 혼합(Mixing), 교반기(Impeller), CoV(Coefficient of Variation)

1. 서 론

화학 산업에서 주로 사용되는 반응기의 주요 설계 품목 중 하나는 반응기 내부에 투입되는 반응물의 혼합 특성이다. 동일한 처방으로 생산된 제품이라 하더라도 반응기의 혼합 성능에 따라 시간당 생산성, 공정 안정성뿐만 아니라 최종 제품의 물성에도 큰 차이가 나타나게 되므로 이의분석과 측정은 그 의미가 크다. 지금까지 반응기의 혼합 효율을 측정하기 위해 많은 실험적 분석 방법이 제시되고 있으나 대부분 반응기 일부분에서의 시료 채취를 통한 간접적인 방법에 의존을 하므로 정확한 분석에는 한계가 있다. 본 논문에서는 CFD를 이용하여 실제 산업현장에서 사용되고 있는 관상 열교환기형 반응기에 대한 내부 유동 분석을 통해 해당 반응기의 혼합 효율을 평가하였다. 반응기 내부 혼합 효율의 정량적인 분석을 위하여 특정 반응 물질이 반응기 내부에 분산되어 있는 정도를 판단할 수 있는 CoV(Coefficient of Variation) 수치를 분석에 활용하였고 동일한 분석 방법을 관상 열교환기형 반응기와 함께 산업 현장에서 많이 사용되는 jet reactor 와 CSTR (Continuous Stirred-Tank Reactor) 에도 적용함으로써 구조가 완전히 다른 반응기간에 반응물의 상대적인 혼합 효율도 비교하였다.

또한 기존 관상 열교환기형 반응기에 대한 혼합 효율의 증대를 위해 몇 가지의 개선안을 도출하여 분석을 수행하였으며 그 효과를 정량적으로 예측하고 비교하였다.

2. 해석 방법

본 연구에서는 상용 CFD Code인 FLUENT(ver 6.2.16)를 이용하여 해당 반응기에 대한 전산 유체 해석을 수행하였다. 3차원 유동해석을 위한 비압축성, 정상 유체에 대한 연속 방정식, 운동량 방정식(Navier-Stokes equation)과 standard k-ε 난류 모델을 적용하였다. 이와 함께 반응기의 혼합 효율을 정량적으로 계산하기 위하여 다상 이송(multiphase transport) 모델을 도입하였다. 구체적으로는 물질이 상이한 두 물질(분산상+연속상)에 대하여 다상 이송 모델(multiphase model)을 적용하여 분산상의 체적 분포를 계산하고 여기서 얻어진 데이터를 통해 반응기 전체에서 분산상의 체적 분율의 표준 편차를 계산함으로써 혼합 정도의 척도로 활용할 수 있도록 하였다. 특히 분산상의 체적 분율의 표준 편차를 평균값으로 normalize 하여 운전조건이 서로 다른 반응기간의 분석에 있어서의 반응물의 혼합 정도도 비교가 가능할 수 있도록 하였는데 다음의 식 1과 같다.

¹ 비회원, LG화학 기술원 CRD연구소

* Corresponding author E-mail: leejha@lgchem.com

$$CoV = \frac{\sigma}{C_m} = \frac{\sqrt{(C - C_m)^2} | m}{C_m} \quad (1)$$

C_m : 반응기 내 분산상의 체적 분을 평균값

σ : 반응기 내 분산상의 체적 분을 표준편차

반응기 내부에 교반기의 회전이 고려되어야 하는 CSTR의 해석을 위해서는 계산 속도와 컴퓨터 자원 등을 고려하여 MRF 방법을 사용하였다.

3. 분석 결과 및 토론

3.1 관상 열교환기형 반응기 해석

관상 열교환기형 반응기는 반응기 내부에 설치된 튜브를 통해 반응에 필요한 열을 공급 받거나 반응 시 발생하는 반응 열의 제거가 이루어지는데 반응기 하부로 반응 물질이 들어가서 내부에 설치된 배플과 튜브를 거치면서 반응이 이루어지고 반응이 끝난 물질은 이후 반응기 끝단 상부로 배출되는 구조를 가지고 있다.

3.2 해석 결과

관상 열교환기형 반응기의 유동 분석에 있어서 투입되는 물질은 서로 잘 섞이지 않는 물상(aqueous phase)과 유기상(organic phase)으로서 시간당 투입되는 체적 비교를 통해 물상을 분산상으로 유기상은 연속상으로 하여 계산하였다. Fig. 1은 해당 반응기의 단면을 잘라서 본 내부 유동 분포를 나타낸 것으로 튜브와 배플 주변에서는 속도 크기가 높게 나타나지만 반응기 입구와 튜브 사이의 빈 공간에서 상대적으로 유속이 감소되고 유동이 정체되는 것을 확인 할 수 있다.

Fig. 2는 동일 단면에서 분산상인 물상의 체적 분율을 나타낸 것이고 Fig. 3은 해당 단면에서의 난류 소산 에너지 분포를 나타낸 것이다. 분석 결과 반응기 내부의 튜브와 배플이 설치된 영역에서는 반응물이 튜브와 배플을 지나면서 발생하는 난류 소산 에너지에 의해 반응물간의 혼합이 잘 이루어지므로 분산상의 체적 분율이 분산상과 유기상이 완전히 혼합되었을 때의 분율과 큰 차이를 보이지 않는 반면 Fig. 1에서 확인된 정체 영역 부근에서는 분산상인 물상의 체적 분포가 편중되어 있음을 확인 할 수 있다. 결국 해당 영역에서는 물상과 유기상의 층 분리가 일어나서 반응의 효율이 많이 떨어질 것으로 예상할 수 있다.



Fig.1 Flow pattern of a tubular heat-exchanger reactor

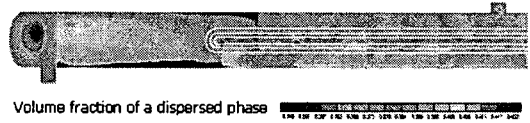


Fig.2 Volume fraction of a dispersed phase



Fig.3 Turbulence energy distribution of a tubular heat-exchanger reactor

3.3 기타 반응기 해석

다양한 반응기별 혼합 효율을 상대적으로 비교하기 위하여 다음의 Fig. 4와 같은 서로 다른 타입의 반응기를 살펴보았다. Fig. 4(a)의 jet reactor는 반응기 내부에 아무런 회전체 없이 반응기 주변에 설치된 펌프의 순환을 통해 반응물의 혼합이 이루어지는 특징을 갖는 반응기로서 주로 대용량의 저장 탱크와 같이 운전 비용이 낮은 대신 빠른 혼합 능력에 대한 요구가 상대적으로 적은 경우에 사용된다. 다음으로 Fig. 4(b)의 CSTR은 반응기 내부에 설치된 임펠러의 교반을 통해 혼합이 이루어지는 설비인데 교반에 의한 분산력이 다른 타입의 반응기와 비교하여 상당히 높기 때문에 내부 유체의 액적(droplet) 크기를 짧은 시간 안에 충분히 작게 만들 수 있으며 혼합 효율이 상대적으로 높다는 장점이 있다.

해당 설비에 대한 반응물간의 혼합 효율은 관상 열교환기형 반응기와 동일한 방법으로 수행하였는데 먼저 내부 유동 분석을 통해 정체 영역을 확인하고 이후 분산상의 체적 분포 분석을 통해 층 분리 영역을 확인하였다. 분석 결과 jet reactor의 경우는 반응기 상/하부에서 분산상인 물상의 편중이 뚜렷한 반면 CSTR의 경우에는 분산상이 반응기 전체에 고르게 분포됨으로써 물상과 유기상간의 층 분리가 거의 일어나지 않았으며 결국 이러한 사실을 통해 jet reactor 대비 CSTR의 혼합 효율이 우수함을 다시 한번 확인할 수 있다.

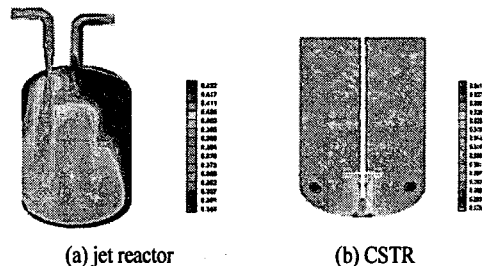


Fig.4 Volume fraction of a dispersed phase in jet reactor and CSTR

3.4 혼합 효율 비교

앞서 제시된 세 반응기에 대한 분산상의 체적분을 분포를 분석한 결과 CSTR에 비하여 관상 열교환기형 반응기와 jet reactor의 혼합 효율이 크게 떨어짐을 확인할 수 있었다. 이것은 jet reactor와 관상 열교환기의 경우 반응기 내부에 아무런 회전체가 없는 구조이기 때문에 CSTR의 경우와 같이 고속으로 회전하는 임펠러를 통해 분산이 이루어지는 경우 대비 분산력이 떨어지기 때문이다.

다음으로는 구조가 서로 다른 반응기간에 혼합 효율의 정량적 비교를 위하여 앞서 언급된 식(1)을 바탕으로 하여 CoV를 계산하고 그 중 혼합 효율이 가장 우수한 CSTR의 CoV 수치를 1.00으로 하였을 때 나머지 반응기의 CoV 상대값을 Table. 1에 정리하였다. 그 결과 jet reactor와 관상 열교환기형 반응기의 혼합 효율이 4배 이상 떨어짐을 확인할 수 있다.

Table. 1 CoV of reactors

반응기 타입	Relative CoV
CSTR	1.00
jet reactor	4.23
관상 열교환기형 반응기	4.70

3.5 관상 열교환기형 반응기 개선

다양한 반응기에 대한 각각의 유동 분석을 통해 현재의 관상 열교환기형 반응기의 혼합 효율이 크게 떨어짐을 확인할 수 있었다. 이에 해당 설비의 혼합 효율 증대를 위한 몇 가지 개선안을 도출하여 그 효과를 CoV 수치로 비교하였으며 그 내용은 Table. 2와 같다. 분석 결과 반응기 내부에 배플을 추가로 설치 한 경우와 투입되는 반응물의 유량을 증가 시킬 경우 내부 혼합 효율이 증대되는 것을 확인할 수 있는 데 이 역시 내부 설비/운전 조건 변경을 통한 난류 소산 에너지 증가로 인한 결과로 판단할 수 있다.

Table.2 CoV of a tubular heat-exchanger reactor

반응기 개선안	Relative CoV
현재 구조	4.70
배플 추가 설치	1.55
유량 증가	1.60
배플 추가 설치+inlet 위치 변경	1.46
배플 추가 설치+유량 증가	1.05

4. 결 론

본 논문에서는 CFD를 이용하여 관상 열교환기형 반응기에 대한 혼합 효율을 분석하였으며 이를 jet reactor 및 CSTR과 비교하였다. 반응기 내부의 유동 분포와 난류 소산에너지 분석을 통해 반응기 내부에 배플을 추가하고 유량을 증가시킨 결과 관상 열 교환 반응기의 혼합 효율이 개선 되었으며, 이를 CoV 수치로 비교 하였을 때 CSTR과 근접한 결과를 얻을 수 있었다

참고문헌

- [1] Paul, Atiemo-Obeng and Kresta, 2004, *Handbook of Industrial Mixing*, Wiley, New Jersey, p.410-413.
- [2] Zughbi and Rakib 2003, "Mixing in a fluid jet agitated tank : effects of jet angle and elevation and number of jets", *chemical engineering science*, Vol.59, p.829-842.
- [3] Zlokarnik, 2001, *Stirring*, Germany
- [4] Zlokarnik, 2002, *Scale-up in Chemical Engineering*, Germany