

## CFD를 이용한 고분자 반응기내 입자 부유에 관한 연구

차 효 숙<sup>1\*</sup>, 송 현 섭<sup>1</sup>, 한 상 필<sup>1</sup>

## A CFD STUDY ON THE SOLIDS SUSPENSION IN POLYMERIZATION REACTORS

Hyo Sook Cha, Hyun-Seob Song, and Sang Phil Han

*This article has investigated the spatial distribution of the solid particles in polymerization reactors using CFD analysis (FLUENT v. 6.2.1). The suspension of the solids in stirred reactors is affected by a number of parameters including particle diameter, vessel shape, impeller size, impeller speed, and rotating direction of stirrer. The degree of solids suspension in the vessel was quantified with a statistical average value,  $\sigma^2$ . The best stirring conditions were determined based on  $\sigma^2$ , which was found to depend on the vessel bottom shape.*

**Key Words:** 혼합(Mixing), 고체 입자 부유(Solids Suspension), 전산유체역학(CFD), 교반기(Stirred Tank)

## 1. 서 론

산업 현장에서 널리 적용되는 있는 다상 시스템중 하나인 고체-액체에서 중요한 이슈는 액체 내 고체 입자의 부유와 분산이다. 고체 입자는 주로 촉매, 반응 중간 또는 최종 생성물 등이다. 반응기 내 고체 입자의 균일한 분포는 공정 효율을 증대시킬 뿐 아니라 최종 제품의 질을 결정하는 중요한 요소로 작용한다. 교반기 내 고체 입자 분포에 대한 실험은 이탈리아의 볼로냐 대학의 Mixing Research Group을 중심으로 많이 이루어지고 있으며 최근 들어 CFD (Computational Fluid Dynamics)를 이용한 연구 결과도 많이 나오고 있다. 과거에는 실험만으로 반응기 내부 입자 분포를 연구하였으나 최근에는 컴퓨터 메모리 발달과 더불어 고체 입자의 분포를 푸는 알고리즘의 개발에 힘입어 다양한 교반 시스템에서의 입자 분포를 예측할 수 있게 되었기 때문이다. Bakker 등은 임펠러의 수, 종류, 크기, 위치에 따른 반응기내 유체 거동과 고체 입자의 분산을 실험과 CFD 분석을 통해 알아보고 고체 입자의 분포가 반응기 내 유체 거동에 많은 영향을 받는다는 것을 보였으며[1], Derksen은 Rushton turbine이 장착된 교반기에서 glass bead의 부유를 large-eddy simulation을 적용하여 유체 속

도와 입자 분포를 알아보았다[2]. Rao 등은 disk turbine과 pitched-blade turbine이 장착된 교반기에서 고체 입자 크기와 loading 양에 따른 최소 교반 속도를 실험을 통해 구해 보았으며[3]. Montante와 Bakker는 다단 임펠러를 적용한 교반기에서 임펠러 종류와 배플 유무에 따른 입자 분포를 FLUENT로 예측하고, 그 결과를 실험 데이터와 비교하여 CFD 계산의 정확성을 증명하였다[4]. 본 논문에서는 2단 임펠러가 장착된 교반기에서의 고체 입자 분포를 반응기 형태, 입자 크기, 하부 임펠러의 크기, 교반 속도 및 임펠러의 회전 방향에 따라 알아보았다. 입자 분포는 반응기 높이를 따른 입자 부피비를 이용하여 정량화하였다.

## 2. 본 론

## 2.1 액상에서의 입자 분포

액상에서의 입자 분포 정도는 일반적으로 on-bottom motion, complete off-bottom suspension, 그리고 uniform suspension, 세 단계로 나누어 설명된다[5]. On-bottom motion은 모든 고체 입자가 반응기 바닥 근처에 있는 상태이며 입자의 표면이 액상에 완전히 노출되어 있지 않다. Complete off-bottom suspension은 고체 입자가 반응기 바닥에 1~2초 이상 머물지 않는 상태를 뜻하며 Zweitering criterion 또는 1-s criterion이라고 불린다. 이 상태에서는 입자의 표면이 최대한 액상에 노출되어 있다. Uniform suspension은 입자의 농도가

1 LG화학기술연구원 CRD연구소

\* Corresponding Author E-mail: chaahs@lgchem.com

반응기 전반적으로 균일하며 임펠러의 속도나 동력이 증가하여도 입자의 분포가 더 이상 변하지 않는 상태를 뜻한다. 100% uniformity는 사실상 어렵기 때문에 일반적으로 고체 입자의 부유 높이가 반응기 높이의 90%에 도달하면 uniform suspension이라고 말한다. On-bottom motion에서 complete off-bottom suspension 또는 uniform suspension 상태에 이르기 위해서는 동력이 추가로 필요하다.

## 2.2 반응기 형상

본 논문에서는 크기와 바닥 모양이 다른 두 반응기를 대상으로 고체 입자 부유를 살펴보았다. 반응기 1의 바닥은 일반적인 1/4 타원체 형태이고 반응기 2의 바닥은 타원체가 반응기 안쪽으로 들어와 있어 바닥 양 끝 쪽이 뾰족하게 돌출되어 있다. 임펠러는 2단으로 되어 있고 상단 임펠러는 반경 방향 유동을 주로 형성시키는 종류이고 하단 임펠러는 축 방향 유동을 주로 형성시키는 종류이다. 두 반응기 모두 배플은 총 4개로 90°를 이루고 있다.

## 2.3 수치 해석 방법 및 계산 조건

본 연구에서는 난류모델로  $k-\epsilon$  모델이 사용되었고 격자는 비정렬격자(unstructured grids)를 사용하였다. 반응기의 회전하는 임펠러 영역을 rotating frame으로 설정하고 다른 고정되는 영역을 stationary frame으로 설정하였다. 액면은 symmetry 조건으로 지정하였다. 반응기내에 액체와 고체가 공존하므로 mixture model을 이용하여 유동과 입자 분포를 계산하였다. 계산 소프트웨어는 FLUENT v. 6.2.1이다. 중력과 원심력으로 인해 형성되는 vortex를 무시하고 액면은 수평면을 유지한다고 가정하였다. 입자 크기는 반응기 1에서는 50, 100, 150  $\mu\text{m}$ , 반응기 2에서는 150  $\mu\text{m}$ 로 하였다. 반응기 1의 RPM은 200이며 반응기 2의 RPM은 65로 하였다.

## 2.4 계산 결과

### 2.4.1 유동 특성

두 반응기의 전체적인 유동 패턴은 유사하다. 상단 임펠러에서 강한 반경 방향의 유동이 형성되어 위, 아래로 소용돌이가 만들어진다. 상부 소용돌이를 형성하는 유체는 반응기 벽 근처에서 아래로 내려가고 하부 소용돌이를 형성하는 유체는 벽 근처에서 위로 올라가 다시 순환한다. 하부 임펠러 근처에서도 소용돌이가 형성되나 크기가 상대적으로 매우 작아 전체적인 유동 패턴에는 거의 영향을 끼치지 않는다.

### 2.4.2. 반응기 형태에 따른 입자 분포

반응기 1과 2에서 반응기 높이에 따른 입자 분포를 살펴본다. 입자의 직경은 150  $\mu\text{m}$ 로 동일하게 하였다. 입자 분포를

정량적으로 측정하기 위해 통계적 평균값인 분산,  $\sigma^2$ 을 이용하였다.  $\sigma^2$ 은 식 (1)과 같다.

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_1^N [(\phi_{v,h}/\phi_v) - 1]^2 \quad (1)$$

위 식에서  $\phi_{v,h}$ 은 반응기 높이 h에서의 고체 입자의 부피비,  $\phi_h$ 는 고체 입자의 평균 부피비이다.

반응기 1과 2의 전체  $\sigma^2$  값은 각각 0.057과 0.062로 거의 차이가 없으나 각 높이에서의  $\sigma^2$  값은 차이가 많았다. 하부 임펠러 위쪽으로는 반응기 2가 1에 비해 입자 분포가 더 균일하나 반응기 바닥 근처에서는 반응기 2가 입자 부유에 더 불리하였다. 이것은 바닥 모양의 차이에 의한 것으로 판단된다. 각각의 반응기에서의 입자 분포는 Fig. 1, 2와 같다. Fig. 2에서 x축은 무차원화된 입자 부피비로 각각의 높이에서의 입자 부피 비를 평균 입자 부피비로 나눈 값이며, y축은 무차원화된 높이로 각각의 측정 높이를 반응기의 전체 높이로 나눈 값이다. 본 논문에서 얻은 반응기 높이에 따른 입자 분포의 패턴은 Einkenkel이 실험으로 얻은 glass bead의 반응기 높이에 따른 입자 분포 패턴과 유사하다[5].

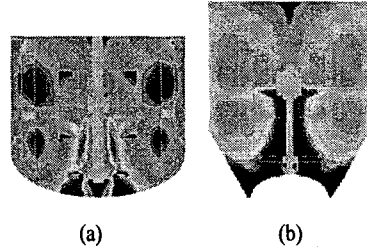
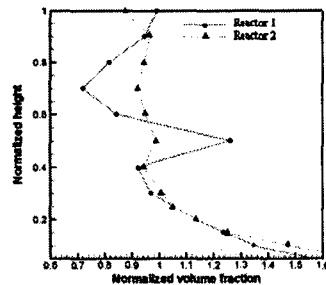


Fig. 1 Solids distribution in (a) reactor 1; (b) reactor 2



	Reactor 1	Reactor 2
$\sigma^2$	0.057	0.062

Fig. 2 Normalized distribution of solids over the relative layer height in reactor 1 and 2

2.4.3 입자 크기에 따른 입자 분포

반응기 1에서의 입자 크기별 반응기 높이에 따른 입자 분포와  $\sigma^2$  값은 Fig. 3과 같다. 입자 분포의 불균일성은 입자 크기가 클수록 커짐을 알 수 있었다. 특히 바닥 근처에서 입자 부유도가 상대적으로 큰 것으로 미루어 볼 때 바닥 근처의 입자 부유가 좋지 않음을 알 수 있었다.

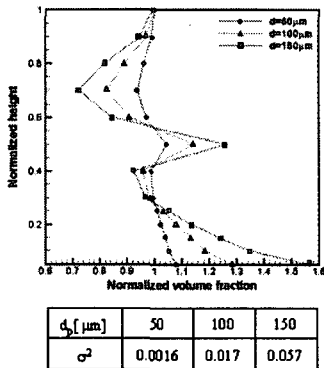


Fig. 3 Effect of particle size on solids distribution in reactor 1

2.4.4 하부 임펠러 크기에 따른 입자 분포

하부 임펠러의 폭을 2배, 길이는 1.8배로 증가시켜 보았다. 입자의 크기는 150  $\mu\text{m}$ 로 하였다. 반응기 1의 경우 하부 임펠러의 크기를 증가시키면 하부 임펠러 근처의 유동 활성화로 인해 전체적인 유동 패턴이 변하며 입자 분포는 반응기 전체적으로 고른 분포를 보였다.  $\sigma^2$  값 또한 0.058에서 0.013으로 감소하였다. 반응기 2에서는 기존 크기의 하부 임펠러가 입자 분포에 더 유리한 것으로 나타났다. 반응기 2의 경우 바닥 모양의 특이성으로 인해 유동 흐름이 방해 받아 도리어 입자 부유에 좋지 않은 것으로 판단된다. 각각의 반응기에서의 하부 임펠러 크기 증가에 따른 입자 분포는 Fig. 4, 5와 같다.

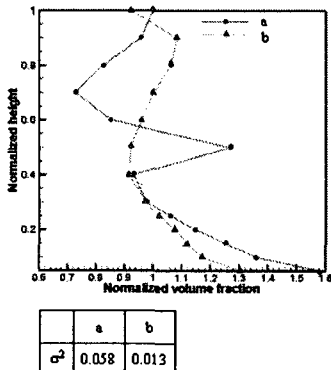


Fig. 4 Effect of bottom impeller size on solids distribution in reactor 1 (a)  $D=0.34T, w=0.2D$ ; (b)  $D=0.612T, w=0.4D$

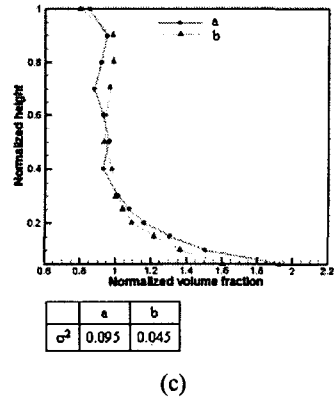


Fig. 5 Effect of bottom impeller size on solids distribution in reactor 2 (a)  $D=0.46T, w=0.28D$  (b)  $D=0.828T, w=0.56D$

2.4.5 교반 속도에 따른 입자 분포

반응기 1은 200과 337 RPM, 반응기 2는 65와 130 RPM으로 테스트해 보았다. 반응기 1, 2 모두 교반 속도가 증가하여도 유동 패턴은 변화가 없으며 하부 임펠러의 tip speed 증가로 인해 바닥 근처에서의 입자 부유가 조금 개선되나 반응기 전체적인 입자 분산 효과는 커지지 않았다. 각각의 반응기에서의 교반 속도에 따른 입자 분포는 Fig. 6과 같다.

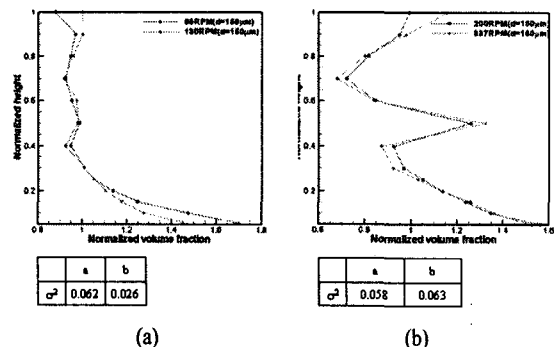


Fig. 6 Effect of rotating speed on solids distribution in (a) reactor 1; (b) reactor 2

2.4.6 임펠러 회전 방향에 따른 입자 분포

하부 임펠러의 회전 방향을 유체를 아래로 누르는 방향(down-pumping)과 위로 퍼 올리는 방향(up-pumping)으로 하여 입자 분포를 살펴보았다. 반응기 1의 경우는 하부 임펠러 회전 방향은 유동 패턴과 입자 분포에 거의 영향을 주지 않았다. 반응기 2의 경우는 유동 패턴의 변화는 없으나 입자 분포에서는 하부 임펠러를 up-pumping하는 것이 유리하였다. 하부 임펠러의 회전 방향에 따른 입자 분포는 Fig. 7과 같다. Fig. 7의 (a)는 반응기 1에서의 입자 분포로 그래프 a, d는 기존 크기의 하부 임펠러로 각각 down-pumping과 up-pumping한 경우

이며, b, c는 하부 임펠러 크기를 증가시키고 각각 down-pumping과 up-pumping한 경우이다. Fig. 7의 (b)는 반응기 2에서의 입자 분포로 그래프 a, c는 기존 크기의 하부 임펠러로 각각 up-pumping과 down-pumping한 경우이며 b, d는 하부 임펠러 크기를 증가시키고 각각 up-pumping과 down-pumping한 경우이다.

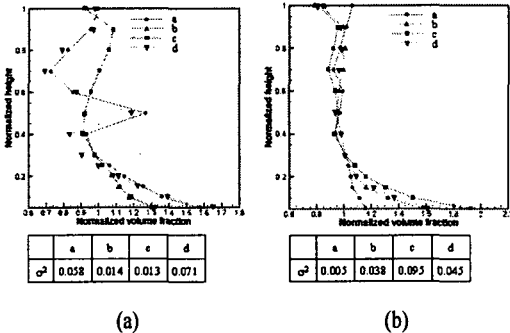


Fig. 7 Effect of rotating direction of bottom impeller on solids distribution in (a) reactor 1; (b) reactor 2

2.4.7 최선안

반응기 1은 하부 임펠러를 폭 2배, 길이 1.8배로 증가시키고 회전 방향을 유체를 up-pumping하게 하는 것이 입자 부유와 분산에 매우 효과적이었으며 반응기 2는 하부 임펠러의 크기를 증가시키지 않고 유체를 up-pumping하는 것이 가장 효과적이었다. 각각의 최적안의 입자 분포는 Fig. 8과 같다.

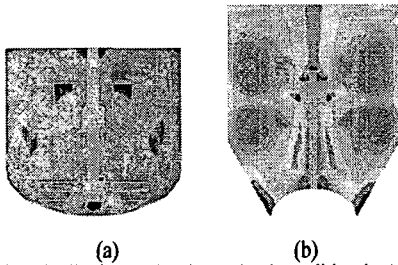


Fig. 8 Solids distribution under the optimal condition in (a) reactor 1; (b) reactor 2

3. 결론

본 논문에서는 반응기 내에서의 유동 특성 및 입자 분포를 반응기 형태, 입자 크기, 임펠러의 크기, 교반 속도, 임펠러의 회전 방향에 따라 살펴보았다. 입자 분포는 반응기 높이 방향으로의  $\sigma^2$  값으로 비교 분석하였다. 입자 분포의 불균일성은 입자 크기가 클수록 크며 교반 속도는 입자 분산에 큰 효과가 없었다. 임펠러 크기와 회전 방향은 반응기 형태에 따라 입자 분산에 미치는 영향이 달랐다.

참고문헌

- [1] Andre Bakker, Julian B. Fasano, and Kevin J. Myers, 2000, "Effects of Flow Pattern on the Solids Distribution in a Stirred Tank," The Online CFD Book at <http://www.bakker.org/cfm>.
- [2] J.J. Derksen, 2003, "Numerical simulation of Solids suspension in a Stirred Tank," *AICHE J.*, Vol49-11, p.2700-2714.
- [3] K.S.M.S. Raghava Rao, V.B. Rewatkar, and J.B. Joshi, 1988, "Critical Impeller Speed for Solid suspension in Mechanically Agitated Contactors," *AICHE J.*, Vol34-8, p.1332-1340.
- [4] Giuseppina Montante and Andre Bakker, 2004, "Stirring Up the Phases in Tall Tanks," *Fluent News*, p.8-9.
- [5] Einenkel W.-D., 1980, "Fluid dynamics of the suspension process," *Ger. Chem. Eng.* 3, p.118-124.