

이젝터 내에서 기-액 물질전달에 관한 CFD 해석

임중훈, 이용, 이동현*
 성균관대학교 화학공학과
 (dhlee@skku.edu*)

CFD Analysis for Gas-Liquid Mass Transfer in Ejector

Jong Hun Lim, Yoong Lee, Dong Hyun Lee*
 Department of Chemical Engineering, Sungkyunkwan University
 (dhlee@skku.edu*)

서론

이젝터(ejector)는 고압으로 분사되는 유체의 운동에너지를 이용하여 저압의 유체를 동반시키는데 사용하는 장치이다[1]. 구조가 단순하고 별도의 구동부가 없기 때문에 설치 및 유지보수비가 낮으며 반영구적이다. 또한 우수한 혼합특성 및 물질전달을 가진다는 점으로 인해 각종 유체수송 및 화학공업 전반에 걸쳐 많이 활용되고 있다[2].

이젝터를 이용해 기체와 액체를 혼합시키는 공정은 실제로 화학공업 전반에서 널리 사용되고 있으며, 이젝터 내에서 액체와 기체간의 물질전달에 대한 연구도 지속적으로 이루어져 왔다. 많은 연구에서 이젝터의 운전조건 및 설계조건에 따라 기체흡입량 및 물질전달 계수가 어떻게 변화하는지에 대해서는 잘 설명하고 있다[3-6]. 그러나 운전조건에 따라 기체가 액체 속에 어떻게 용해되는지에 대한 결과에 대해서는 설명하고 있지 않았다.

따라서 본 연구에서는 전산유체역학(CFD)를 이용해 기체-액체 이젝터를 이용한 물질전달 공정에서 운전조건에 따라 기체의 흡입량 및 액체 내에 용해되는 기체의 양이 어떻게 변화하는지를 살펴보고 최적의 운전조건을 찾고자 하였다. 유한체적법(FVM) 방식의 상용 코드인 FLUENT 6.3을 이용하였으며 기-액 이상흐름을 모델링하기 위해 제공되는 Eulerian multiphase model을 사용하였다.

유동해석

Fig. 1과 같은 형태를 가진 이젝터 내에서의 물질전달을 시뮬레이션 하였다. FLUENT를 이용하여 해석하기 위해 이것을 2차원 축대칭 형태로 Fig. 2와 같이 모델링하여 사용하였다. 이젝터의 사양은 전체길이= 2.5m이며 노즐의 직경(d_N)= 0.065m, 혼합부의 직경(d_M)= 0.08m, 혼합부 길이(L_M)= 0.1m, 확산부 길이(L_D)= 1.8m 이다.

Primary 유체로 물이 유입되며 흡입부에서는 염소기체와 소량의 질소가 유입된다. 유입된 물과 염소기체는 이젝터 뒷부분의 길이 22.5m인 loop pipe를 흐르면서 염소기체가 물에 용해된다. 유입되는 물의 유량은 질량유속을 부여하였으며 흡입되는 기체와 출구에서의 압력은 일정한 압력값을 부여하였다. 이 이상흐름을 모델링하기 위해

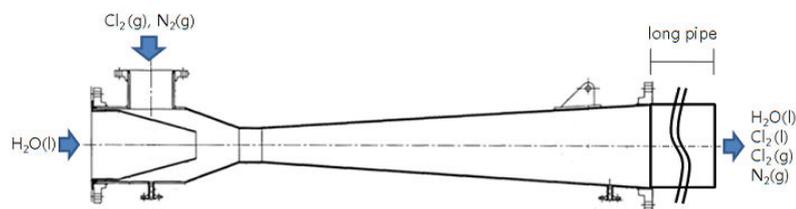


Fig. 1. Schematic diagram of ejector.

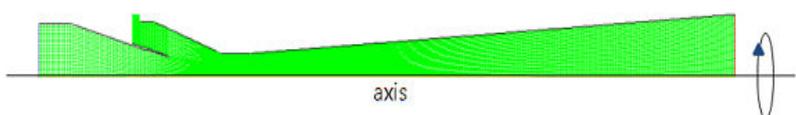


Fig. 2. 2D axisymmetric geometry of ejector.

사용된 Eulerian multiphase model에 대한 자세한 내용은 FLUENT user's guide[7]를 참고하였다.

계산결과는 residual property가 continuity 항목에 대해 10^{-4} , 난류에 대해 10^{-5} , 각 phase의 volume fraction에 대해 10^{-6} , velocity에 대해 10^{-7} 의 값을 나타내었으며 약 8,000~10,000회의 반복계산을 수행한 후 완전히 수렴된 결과값을 사용하였다.

물질전달 모델

염소기체가 물에 용해되는 과정을 시뮬레이션 하기 위해 이중경막론(two film theory)을 바탕으로 물질전달 식을 구성하였다. Flux(j)는 다음과 같이 표현할 수 있다[9].

$$j_L = k_L(c_{Li} - c_L) \quad (1)$$

$$j_G = k_G(p - p_i) \quad (2)$$

정상상태에서

$$j_L = j_G = j \quad (3)$$

기-액 계면에서 평형상태를 가정하고 Henry's law에서

$$p_i = Hc_L \quad (4)$$

미지의 접촉면에서의 농도는 식 (1), (2)으로부터 소거 될 수 있다.

기체상과 평형을 이루고 있는 액상 계면농도(C_L^*)는 다음과 같이 표시할 수 있다.

$$C_L^* = p/H \quad (5)$$

물에 대한 염소의 용해도가 크기 때문에 액상에서의 저항보다는 기체상에서의 저항이 지배적이다. 기체상에 대해 flux를 나타내면

$$j = K_G(p - p^*) \quad (6)$$

$$p^* = Hc_L \quad (7)$$

여기서 기체상 총괄물질전달 계수(K_G)는 다음과 같다.

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L} \quad (8)$$

기-액 시스템에서 interfacial area는 가장 중요한 parameter이다. 흡수가 일어나는 경우에 있어서(그 속도에 상관없이), 물질전달 속도는 $k_L a$ ($k_G a$)와 같이 interfacial area(a)의 함수인 volumetric mass transfer coefficient에 의해 결정된다. interfacial area는 체적(V)에 대한 표면적(A)의 비로 다음과 같이 정의된다.

$$a = \frac{A}{V} = \frac{A\epsilon_G}{V_G} \quad (9)$$

위의 식들을 바탕으로 물질전달 속도를 다음과 같이 나타낸다

$$ja = K_G a (p_A - Hx_A) \quad (10)$$

상온에서 물에 대한 염소의 헨리상수(H)는 67583.775 kPa 이다[9]. K_G 값은 diffusivity 값의 함수로 식 (11)를 통해 계산할 수 있다[10]

$$K_G = 1.634 \times 10^{-4} D^{0.684} \quad (11)$$

여기서 염소의 diffusivity 값(D)은 $1.110 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ 이다[11].

Interfacial area(a)는 계면을 형성하는 한 물질의 volume fraction과 cell의 크기의 함수이다.

$$a = f(v_f, S) \quad (12)$$

모든 cell을 정사각형이라고 가정하고 기-액 계면이 cell의 대각선에 평행으로 형성된다고 가정하였다. 그리고 volume fraction의 함수인 x 를 다음과 같이 정의하였다.

$$\begin{cases} x = v_f & (0 \leq v_f \leq 0.5) \\ x = 1 - v_f & (0.5 \leq v_f \leq 1) \end{cases} \quad (13)$$

대각선에 의해 생성되는 삼각형의 넓이는 다음과 같다.

$$xz^2 = \frac{1}{2}c^2z^2 \quad (14)$$

여기서 z 는 정사각형 한 변의 길이이고 c 는 0에서 1 사이의 값을 가지는 임의의 상수이다. 식 (14)로부터 삼각형 빗변의 길이를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\sqrt{2c^2z^2} = \sqrt{2 \times 2xz^2} = 2\sqrt{xS} \quad (15)$$

본 연구에서는 2차원 geometry를 사용하였으므로 식 (9)에서 표면적 대신 삼각형의 빗변의 길이를, 체적 대신 삼각형의 면적을 대입하여 계산하면 interfacial area(a)는 다음 식과 같이 나타낼 수 있다.

$$a = \frac{2\sqrt{xS}}{S} = 2\sqrt{\frac{x}{S}} \quad (16)$$

이상의 물질전달 모델을 FLUENT에서 사용하기 위해 UDF(User Defined Function)으로 구성하였다.

결과 및 토의

Fig. 3은 물의 유입량 $m_{water} = 150\text{kg/s}$, 기체 흡입부 경계면에서의 절대압 $P = 202,650\text{Pa}$ 일 때 유동해석 결과를 나타내는 그림이다. Nozzle을 통해 물이 유입되고 기체 흡입부를 통해 염소기체가 흡입되는 것을 볼 수 있다. Fig. 4는 이젝터 내부에서 물질전달이 이루어지는 모습을 나타내고 있다. 이젝터의 확산부에서 물질전달이 가장 빠르게 일어나는 모습을 볼 수 있다.

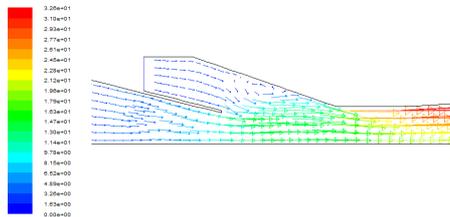


Fig. 3. Vector of velocity magnitude in ejector.

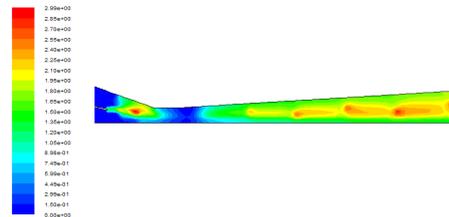


Fig. 4. Contours of mass transfer rate in ejector.

Fig. 5는 유입되는 물의 유량에 따른 기체의 흡입량을 나타낸 그래프이며, Fig. 6은 유입되는 물의 유량에 대한 기체 흡입량의 비를 나타낸 그래프이다.

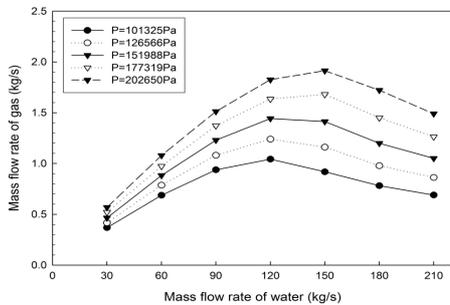


Fig. 5. Gas suction rate at inlet boundary.

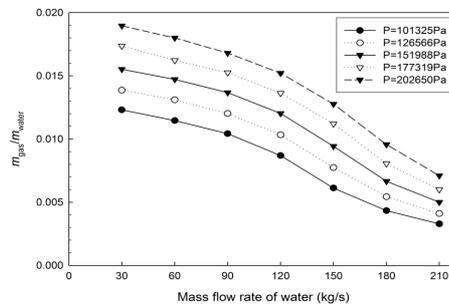


Fig. 6. Gas/Water mass ratio.

Fig. 5에 나타나는 것과 같이 유입되는 물의 양이 증가하면서 기체의 흡입량이 증가하는 모습을 보이다가 기체 흡입량이 최대치에 도달하고 물의 유량이 증가할수록 기체의 흡입

량이 감소하는 모습을 보인다. 이러한 경향은 다른 연구결과에서도 찾아볼 수 있다[12]. 한편 유입되는 물의 양이 일정할 때 기체 흡입부에서의 압력이 증가할수록 염소기체의 흡입량이 증가하는 모습을 보인다.

Fig. 7은 loop 출구에서의 물에 용해된 염소의 질량비를 나타낸 그래프이다.

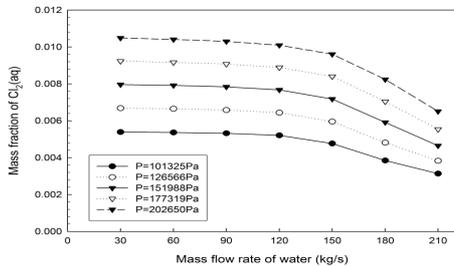


Fig. 7. Mass fraction of $Cl_2(aq)$ at the end of loop.

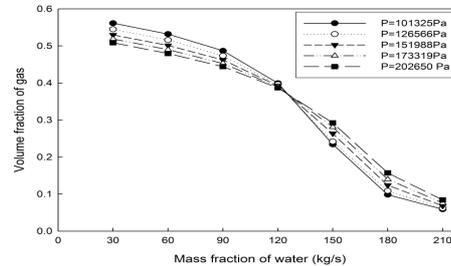


Fig. 8. Volume fraction of gas at the end of loop.

기체의 흡입량이 최대치에 도달할 때 까지는 염소의 농도가 크게 변하지 않으나 기체의 흡입량이 감소하면서 염소의 농도가 크게 감소하는 모습을 보인다. Fig. 8은 물에 녹지 않고 loop를 빠져나가는 기체의 volume fraction을 나타낸 것이다. Fig. 6의 결과와 비교하면 물에 대한 기체의 비율이 높을수록 물에 녹지 않고 남아있는 기체의 양이 많은 것을 알 수 있으며 Fig. 7의 결과가 Fig. 6과 다르게 나타나는 것을 설명할 수 있다. 유량이 일정할 때 기체 흡입부의 압력을 높이면 흡입되는 기체의 양이 증가하므로 물에 녹는 염소의 양이 증가하는 모습을 보인다.

결론

이젝터 내에서 염소가 물에 녹는 물질전달에 대한 CFD 시뮬레이션이 진행되었다. 유입되는 물의 양이 증가할수록 흡입되는 염소기체의 양이 증가하다가 특정 유량에서 최대치에 도달한 후 기체의 흡입량이 감소하는 모습을 나타내었다. 유입되는 물의 양이 일정할 때 기체 흡입부의 계기압이 증가할수록 물에 녹는 염소가 증가하였다.

참고문헌

1. Sun, D. W. and I.W Eames, *Journal of the Institute of Energy*, **68**, 65 (1995).
2. Choi, B. G., H. D. Kim and D. J. Kim, *Journal of KSPE*, **4(3)**, 1 (2000).
3. S. Balamurugan, M.D. Lad, V.G. Gaikar and A.W. Patwardhan, *Chemical Engineering Journal*, **131**, 83 (2007).
4. N.N. Dutta and K.V. Raghavan, *Chemical Engineering Journal*, **36**, 111 (1987).
5. P.H.M.R. Cramers and A.A.C.M. Beenackers, *Chemical Engineering Journal*, **82**, 131 (2001).
6. P. Havelka, V. Linek, J. Sinkule, J. Zahradnik and M. Flaiová, *Chemical Engineering Science*, **55**, 535 (2000).
7. Fluent Inc., *FLUENT 6.0 User's Guide* (2001).
8. Deckwer, W. D., *Bubble Column Reactors*, John Wiley & Sons Ltd., New York (1992).
9. Seader, J. D. and E. J. Henley, *Separation Process Principle*, 2nd Ed., John Wiley & Sons. (2005).
10. Tamir, A. and J. C. Merchuk, *Chemical Engineering Science*, **33**, 361 (1978).
11. Sherwood, T. K. and R. L. Pigford, *Absorption and Extraction*, 2nd Ed., McGraw-Hill, New York, (1952).
12. S. Balamurugan, V.G. Gaikar and A.W. Pathardhan, *Chemical Engineering Research and Design*, **84(A12)**, 1166 (2006).