



SIEMENS

Ingenuity for life

Siemens Digital Industries Software

서멀 리액터를 위한 검증된 해석 프레임워크: 업계 최초

설계 및 작동 공간 탐색에 Simcenter STAR-CCM+ CFD
시뮬레이션 사용

개요

Simcenter™ STAR-CCM+™ 소프트웨어의 고급 물리 모델은 전산 유체 역학 (CFD) 시뮬레이션이 서멀 리액터 해석 시 제공할 수 있는 인사이트를 크게 증가시켰습니다. 이를 통해 사용자는 모호한 프로세스에 대한 이해도를 높이고 정상 상태 해석의 한계를 뛰어 넘는 수준으로 서멀 리액터의 성능을 향상시킬 수 있습니다. 이는 관측, 측정, 실험 및 시뮬레이션을 통합해 기존에는 다루기 어려웠던 실질적 다분야 문제를 해결하는 포괄적 방식의 일환으로 다중 물리 CFD를 사용해 얻을 수 있는 가치를 집중적으로 보여줍니다.

목차

개요.....	3
서멀 리액터의 구조	4
CFD의 역할 확장	5
작업에 맞는 모델.....	6
CFD에 측정을 더해 확신 강화	7
결론.....	10
참조.....	11

개요

예상치 못한 큰 진동. 기기 포트 주변에 균열 형성. 장비가 이런 이상 동작을 보이는 경우, 특히 고온 가스 흐름이 원소 유향을 생성하는 프로세스의 일부와 화학적으로 반응하는 유황 발전소의 서멀 리액터에서 이런 상황이 발생하는 것은 좋은 징조가 아닙니다. 전 세계 유황 공급분의 대부분은 천연 가스 처리 및 원유 정제 작업의 부산물을 통해 이 방식으로 생산됩니다. 서멀 리액터가 분명히 심상치 않아 보이는 이상 증상을 보이기 시작하면 상당히 착잡해집니다. 미국 켄자스 주 로렌스에 위치한 전산 해석 및 엔지니어링 계측 서비스 기업인 Porter McGuffie의 엔지니어는 바로 이런 상황을 해결해야 하는 과제를 맡았습니다.

Porter McGuffie는 Siemens Digital Industries Software의 Simcenter STAR-CCM+ 소프트웨어를 사용해 이를 해결할 솔루션을 개발했습니다. 이 솔루션은 고객의 문제를 해결할 뿐만 아니라 연소 장치의 열 음향 및 화학 처리 성능을 해석할 수 있는 최초의 프레임워크를 개발했습니다. 이 프레임워크는 관측, 측정 및 다중 물리 CFD 시뮬레이션을 통합해 원자로 내에서 발생하는 복잡한, 포괄적 방식의 일환으로 다중 물리 시뮬레이션을 사용하지 않고서는 드러낼 수 없는 상호작용에 대한 상세 인사이트를 제공합니다. 이를 통해 기존 리액터 내 문제를 해결할 뿐만 아니라 새로운, 더 나은 성능의 리액터를 설계할 수 있는 강력한 툴세트가 탄생했습니다.

서멀 리액터의 구조

황화수소가 포함된 가스에서 원소 황을 생성 또는 회수하는 프로세스는 수정 Claus 프로세스에 기반합니다. 여기서는 산성 가스 혼합물이 포함된 프로세스와 공기 또는 산소 부화 공기로 구성된 산화제 스트림이 있는 프로세스, 이 두 프로세스의 스트림이 혼합되고 반응하는 서멀 리액터에서 시작되는 일련의 다단계 화학 반응이 이뤄집니다. 이 프로세스의 첫 단계인 서멀 리액터의 성능은 황 플랜트 처리량에 직접적 영향을 미치며, 폐열 보일러와 같은 하부 라인 구성요소 성능에 영향을 미칩니다.

일반적인 리액터는 연소 구역과 리액터 구역 (그림 1의 C와 E) 두 구역이 주를 이루며, 초크 링 또는 천공 벽/분리기 (D)로 분리됩니다. 이 두 개의 유입 프로세스 스트림은 리액터의 버너 버슬 (A)에서 결합되며, 버너 캔 (B)에 주입하기 전에 스트림에 높은 스핀을 부여해 Claus 반응의 아화학양론적 첫 (열) 단계를 위한 활발한 혼합을 촉진합니다. 리액터 구역은 파괴 및 개질 반응 완료, 암모니아 파괴를 촉진하는 화학 반응 (하부 촉매층에서 염 형성을 방지하기 위해 완전히 완료돼야 함) 및 황화수소를 여러 종류로 만듭니다. 그러므로 리액터가 이러한 반응이 완료되기에 적합한 조건을 제공할 수 있는 정도는 화학 효율 관점에서 리액터의 성능을 평가하는 중요한 척도입니다.

분리기 (초크 링, 체커 벽 또는 벡터 벽)의 목적은 버너에서 제트 흐름을 분리하고 분산하는 것이므로, 리액터 영역은 역 혼합 (길이 방향으로 혼합하면 반응물이 희석되고 반응 속도가 떨어져 노 효율이 감소함)을 방지하는 구성인 플러그 흐름 리액터의 거동을 한층 면밀히 모방합니다.

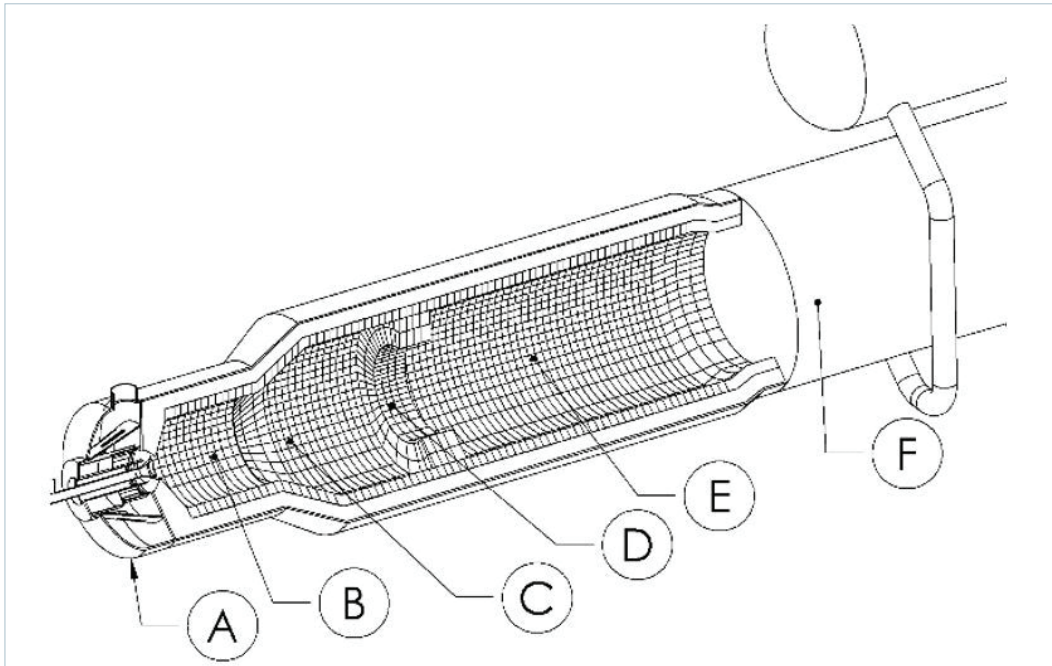


그림 1: 서멀 리액터의 일반적 레이아웃.

CFD의 역할 확장

서멀 리액터의 성능은 화염 형상, 화염 안정성, 내화성 재료의 고온 안정성, 연소 진동/버너 소음 및 반응 범위의 영향을 받습니다. 정상 상태 CFD 시뮬레이션은 화염 모양 및 내화 신뢰성 등 일부 관련된 문제를 해결하는 데 사용됐으나, 진동과 소음, 화학적 성능과 같은 다른 중요한 현상이 가진 근본적으로 시간 의존적인 속성은 과도 방식 사용을 필요로 합니다. CFD를 사용해 수 년간 다양한 화학 공정 산업 문제를 해결해 온 Porter McGuffie의 엔지니어는 반응기 내 화학 및 유체 상호 작용의 시간 이력을 시뮬레이션 할 수 있는 기능이 리액터 성능을 한층 완전히 파악할 수 있다는 점을 알고 있습니다. 특히 두 가지 중요한 리액터 성능 지표에 영향을 미치는 요인에 대해 알아볼 수 있는 기능을 제공합니다.

- 열-음향 성능: 버너 소음의 주파수와 크기가 단일 주파수에서 집중되는지, 그 크기가 과도한 장비 손상을 일으킬 수 있을 정도로 높은지 여부 확인
- 화학적 성능: 리액터가 파괴 및 개질 반응을 완료하고 진동 및 레임 (lame) 불안정성에 대한 반응 관계를 허용할 수 있는 수준의 체류 시간을 제공하는 정도를 결정합니다.

이러한 지표에 기반해 리액터 성능을 평가할 수 있는 역량은 CFD 시뮬레이션에서 도출할 수 있는 인사이트를 대폭 늘리며, 측정, 관측 및 실험 등을 비롯한 포괄적 접근법의 일환으로 문제 및 설계를 해결하는 가치를 강화합니다. 실제로, 다중 물리 CFD 기반 시뮬레이션은 실험 제약과 비용 없이 장비에서 발생하는 다분야 및 모호한 상호 작용에 대한 인사이트를 얻을 수 있는 유일한 방법입니다. 이 방식을 활용해 기존 구형 리액터 설계를 한층 포괄적으로 검토할 수 있지만, 더 중요한 점은 완전히 새로운 고성능 리액터 설계로 나아갈 수 있다는 점입니다. 예를 들어 CFD 시뮬레이션을 사용해 설계 공간을 탐색해 초크 링 또는 천공 벽 유형, 형상 및 배치를 선택함으로써 여러 목표를 가장 잘 충족하는 특성 (예: 최소 진동 및 최대 화학적 성능)을 찾을 수 있습니다.

이는 주로 경험에 의존하는 현재의 설계 프로세스와는 상당한 차이가 있습니다. 초크 링 형상과 배치의 영향을 평가하는 것은 특히 중요합니다. 리액터 벽돌 구조의 일부이며 주기적으로 교체되는 이 초크 링은 리액터의 강철이 가공된 이후 문제 해결을 위해 변경할 수 있는 유일한 구성요소이기 때문입니다.

작업에 맞는 모델

Porter McGuffie의 엔지니어는 CFD에서 파생된 데이터를 사용해 생산 일정 상 제약이 있는 상황에서 엔지니어링 결정을 내립니다. 서멀 리액터 시뮬레이션에서 엔지니어는 Simcenter STAR-CCM+에서 DES (detached eddy simulation) 모델을 선택했습니다. DES는 경계층과 같은 흐름의 일부 부분에서 레이놀즈-평균 나비에 스톡스 (RANS) 시뮬레이션 기능과 비정상 분리 영역의 LES (large eddy simulation) 기능을 결합한 하이브리드 모델링 방식입니다. 이 방법은 적절한 계산 시간과 리소스를 필요로 하지만 음향 특성을 포착하는 데 필요한 충실도를 제공해 적절한 조화를 이룹니다. 이에 비해 음향 현상 해석에 주로 사용되는 LES는 훨씬 더 정밀한 계산 그리드를 필요로 하며, 상당량의 메모리와 계산 시간을 소요합니다.

서멀 리액터는 대규모 화학 공정의 일부이므로 모델 도메인에 장치를 포함시키는 대신 적절한 경계 조건을 신중히 적용해 상류 송풍기 및 하류 폐열 보일러 효과를 고려했습니다. 이를 통해 시뮬레이션 영역을 그림 2에 표시된 구성요소로 축소할 수 있습니다. 버너 버슬 (노란색), 반응기 내부 용적 (보라색) 및 다운스트림 부분 (분홍색)으로 시작해 다공성 매체 근사를 사용해 모든 다운스트림 구성요소의 효과를 모델링 합니다. 리액터의 열 및 물질 수지 (HMB)에서 가져온 온도와 유속, 가스 조성을 모델 입구에 적용했습니다 (질량 흐름 경계로 처리). 시뮬레이션의 목표는 리액터 내부 음향 반응을 예측하는 것이므로, 모든 입력에는 실제 노이즈 성분도 포함되었습니다¹. 화학 관점에서 시뮬레이션은 반응이 활성화된 다중 종 물리 모델을 사용했습니다.

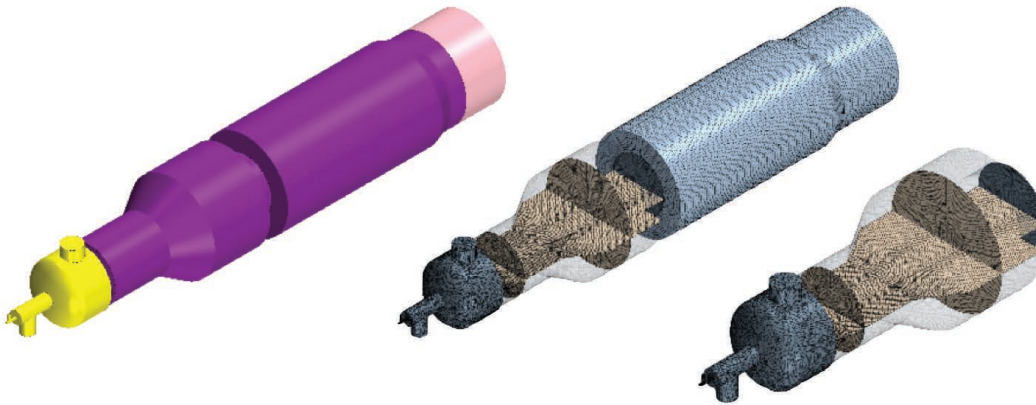


그림 2: CFD 시뮬레이션을 위해 개발된 도메인 (왼쪽) 및 계산 그리드의 두 가지 보기 (오른쪽 두 개 이미지).

CFD에 측정을 더해 확신 강화

이 시뮬레이션 방법은 손상을 유발하는 수준의 강한 진동을 경험한 리액터에서 진동의 원인을 성공적으로 파악하는 데 사용되었습니다². Porter McGuffie 엔지니어는 계측 및 측정이라는 또 다른 핵심 기술을 사용해 계산 결과를 검증했으며, CFD 모델에서 예측된 진동이 문제가 발생한 리액터에서 측정된 진동의 5% 이내임을 보여줬습니다.

독점 버너 정보를 공개하지 않고 그 유용성을 한층 자세히 나타내기 위해 알려진 진동 문제가 있는 리액터에서 나온 것과 유사하지만 반드시 동일하지는 않은 형상과 공정 흐름 조건을 사용하는 세 가지 시나리오에 동일한 시뮬레이션 방법을 적용했습니다. 각 시나리오에서 리액터 성능은 앞서 설명한 두 가지 지표에 기반해 평가했습니다.

그림 3은 문제를 일으킨 것으로 알려진 고속 작동 시 리액터 CFD 시뮬레이션에서 얻은 화염 패턴을 보여줍니다. 여기서 두 가지 모드가 관찰됐습니다. 하나는 혼합 지연으로 화염이 길고 느리며, 화염이 초크 링 (그림 3 왼쪽 이미지) 너머로 확장됐으며, 다른 하나는 음향 압력으로 인해 화염이 플래시 백 됩니다. 이는 주로 느린 반응에 의한 것인데, 고온 내화물에 중대한 손상을 일으킬 수 있습니다 (그림 3 오른쪽 이미지).

그림 4는 턴다운 (그림 4 왼쪽 이미지)와 초크 링 없는 고속 작동 시 리액터의 CFD 시뮬레이션에서 나온 화염 패턴을 보여줍니다. 턴다운 작동 시나리오에서 관측된 진동은 없지만, 화염 패턴을 보면 화염이 초크 링 근처까지 확장된 걸 알 수 있습니다. 초크 링이 없으면 화염은 리액터 내부 중앙에 위치합니다.

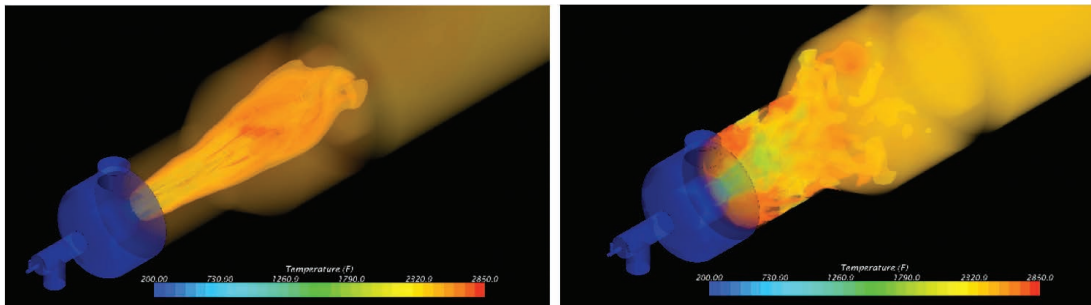


그림 3: 고속 작동과 준 안정 작동 모드에서 서멀 리액터의 화염 패턴을 보여주는 CFD 시뮬레이션: 초크 링 근처의 화염 (왼쪽)과 버너 캔 (오른쪽).

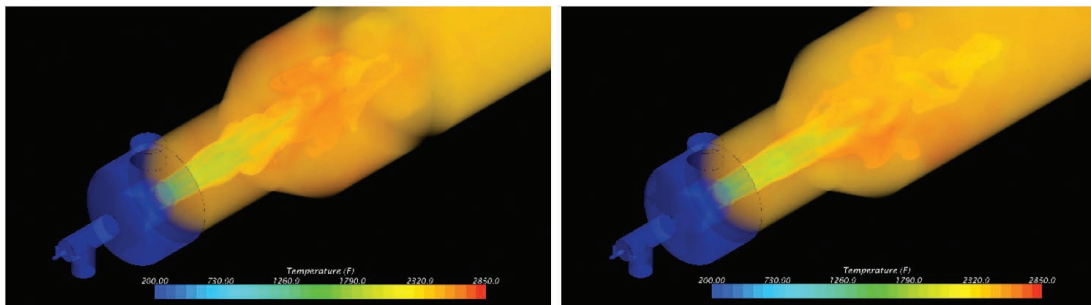


그림 4: 턴다운 작동 (왼쪽) 및 초크 링이 없는 고속 작동 (오른쪽)에서 서멀 리액터의 화염 패턴을 보여주는 CFD 시뮬레이션.

리액터의 예상 음향 성능 고속, 턴다운, 초크 링 없음으로 설정된 각 시나리오 대 주파수에서 계산된 음향 압력의 전력 스펙트럼 밀도 (PSD) 플롯인 그림 5에 나타나 있습니다. 고속 케이스 (초크 링 포함)에서 현저하게 더 높은 노이즈 강도는 현장 측정치와 상당한 연관성을 보였습니다. 예측 주파수와 측정 진동 간 차이는 5% 미만입니다.

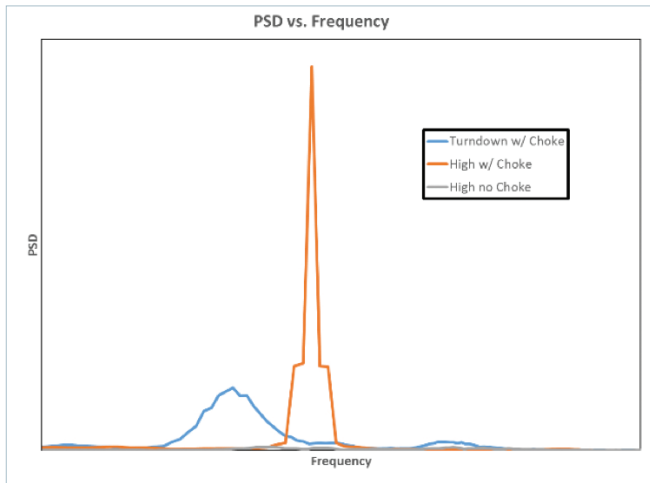


그림 5: 세 가지 시나리오에 대한 전력 스펙트럼 밀도 대 주파수.

각 시나리오에서 리액터의 화학적 성능은 지정 온도에서 선택한 종의 예상 체류 시간의 결합된 효과로 정량화 했습니다. 전환율 (전체 처리량/황 생성)은 특정 화합물에 대해 설정된 파괴 체류 시간 요구사항을 충족하지 않는 공정 흐름에서 유입되는 오염 물질의 양을 최소화/제거하는 것에 따라 달라지므로 화학적 성능이 중요합니다. Porter McGuffie가 최근 미공개로 실시한 작업은 서멀 리액터에서 암모니아 파괴의 화학적 움직임을 명시적으로 모델링 했으며, 여기서 소개하는 시뮬레이션에서는 화학 종이 특정 온도 범위에 노출되는 시간을 추적하기 위해 열류 추적기를 사용합니다. 이 시나리오에 사용된 리액터에서 트레이서는 허용 가능한 암모니아 (NH_3) 파괴를 정량화하는 데 일반적으로 사용되는 기준인 섭씨 1,250도($^{\circ}\text{C}$) 이상의 온도에 최소 0.5초 동안 노출됐는지 확인했습니다. 그림 6은 이러한 트레이서가 높은 속도 및 턴다운 작업에 사용된 예시를 보여 줍니다. 초크 링이 포함된 고속 시나리오에서는 유입되는 산성 가스 흐름 중 5.1%가 요구사항을 충족하지 못하는 것으로 나타났습니다.

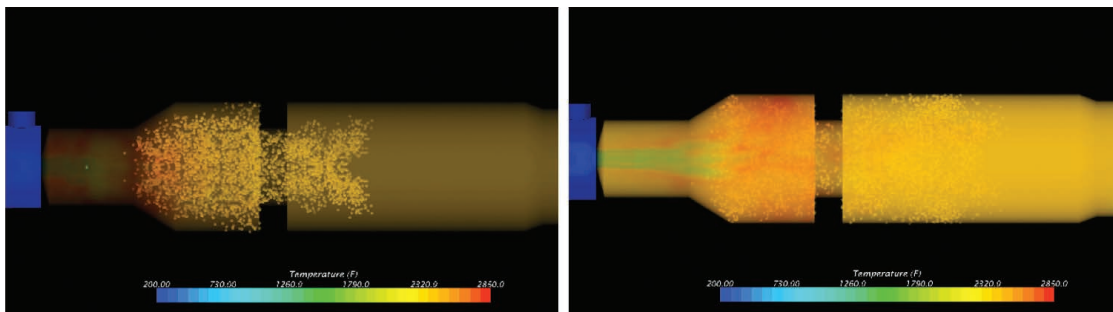


그림 6: 고속 작동 (왼쪽) 및 턴다운 작동 (오른쪽)에 대한 CFD 시뮬레이션의 샘플 트레이서 결과.

누적 분포 함수는 다양한 유속 사례에 대한 체류 시간 결과를 요약하고 비교하는 데 유용한 방법입니다. 그림 7은 앞에서 설명한 세 가지 시나리오의 결과를 보여줍니다. 각 곡선의 각 점은 시뮬레이션 중에 해당 시간 동안 1,250°C 이상에 노출된 트레이서의 백분율을 나타냅니다. 각 곡선의 각 점은 시뮬레이션 중에 해당 시간 동안 1,250°C 이상에 노출된 트레이서의 백분율을 나타냅니다. 따라서 최소 필수 체류 시간 값 (0.5초, 수직 회색 선)과 각 곡선의 교차점은 체류 시간 요구사항을 충족하지 못한 공정 흐름의 비율을 나타냅니다. 그림 7을 보면 고속/초크 링 없음 시나리오 (파란색 곡선)에서 유입 스트림의 상당 부분이 양호한 음향 거동을 보였음에도 요구사항을 충족하지 못했습니다(그림 5 참조).

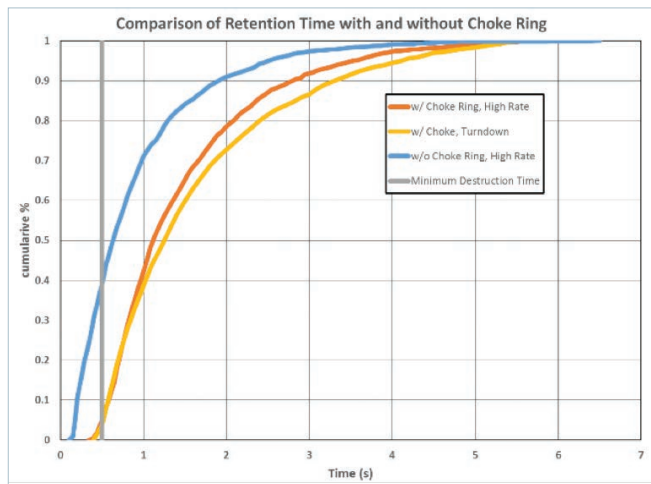


그림 7: 초크 링 유/무 시나리오에 대해 CFD로 예측한 1,250°C 이상의 체류 시간 누적 분포 함수.

시뮬레이션 결과에 따르면 초크 링을 현재 위치에 유지하면 진동 문제 상 고속 작동이 불가하지만, 초크 링이 없으면 체류 시간이 프로세스 요구사항을 충족하지 못합니다. 이로 인해 Porter McGuffie 엔지니어는 NH₃ 파괴에 대한 체류 시간 (공정) 요구사항을 충족하면서 고속 작동 (낮은 진동 수준)을 허용하는 초크 링 위치를 찾을 수 있는지 파악하기 위해 예비 설계 탐색을 수행했습니다. 이들은 계산 모델을 업데이트 해 초크 링이 현재 위치의 다운스트림이 되게 했습니다. 초크 링이 없는 시뮬레이션은 소음 수준이 낮았기 때문입니다 (그림 5 참조). 그 다음 시뮬레이션에서 화염 불안정성이 관찰될 때까지, 화염이 버너 캔에 들어갈 때까지 공기 노즐을 향해 업스트림으로 이동하는 초크 링 위치를 사용해 일련의 분석을 수행했습니다. 이 시뮬레이션의 결과가 그림 8에 나타나 있습니다. 안정된 화염 모양에 해당하는 위치가 설정되면 이 구성에 대한 트레이서 테스트를 수행해 체류 시간 요구사항을 충족하지 않는 공정 흐름의 비율을 결정했습니다. 여기에서는 스트림 중 약 35%가 요구사항을 충족하지 못했으며, 초크 링이 없는 시나리오보다 약간 나은 수준입니다. 이는 현재의 초크 링 지오메트리를 사용해 허용 가능한 NH₃ 파괴를 달성하지만, 최소한의 진동으로 고속은 달성할 수 없음을 나타냅니다. 그러나 이 시도를 통해 이 해석 프레임워크가 분리기의 지오메트리를 설계 매개변수로 사용해 설계 및 작동 조건 공간을 탐색할 수 있는 가능성을 시사합니다. 또한 이 해석 프레임워크는 이러한 매개변수의 상호 작용과 엔지니어링 목표에 대한 매개변수의 민감도를 보여줍니다.

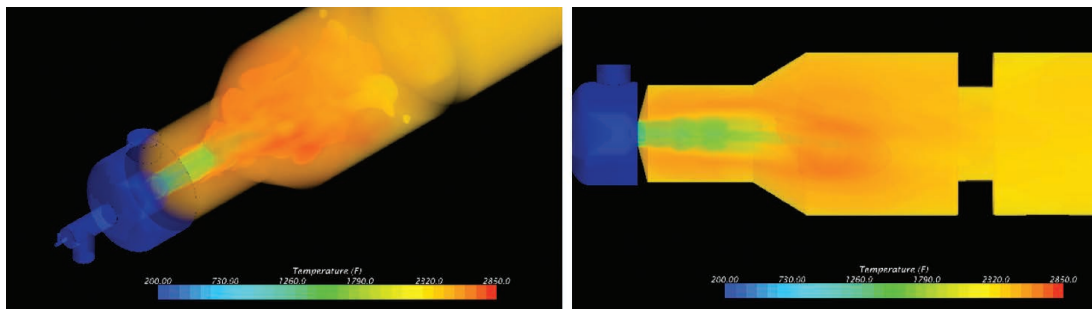


그림 8: 안정적인 화염 패턴 (왼쪽)과 화염 불안정 시작 시의 패턴을 보여주는 CFD 시뮬레이션.

결론

Simcenter STAR-CCM+에서 고급 물리 모델을 적용한 Porter McGuffie의 새로운 애플리케이션은 불투명한 공정을 파악하고 정상 상태 해석의 한계를 훨씬 뛰어넘는 서멀 리액터의 성능을 개선하기 위해 시뮬레이션이 제공할 수 있는 인사이트 규모를 대폭 증가시켰습니다. 실제로 이는 업계 최초의 개발이라는 결과로 이어졌습니다. 문제가 있는 리액터를 포괄적으로 평가할 수 있는 검증된 해석 프레임워크를 비롯해 완전히 새로운 작동 체계를 마련하기 위해 설계 및 운영 공간을 탐색할 수 있습니다. Porter McGuffie의 연구는 관측, 측정, 실험 및

시뮬레이션을 통합한 포괄적 방식의 일환으로써의 다중 물리 CFD의 가치를 강조해 기존에는 처리하기 어려웠던 여러 실질적 문제를 해결합니다. Porter McGuffie는 "문제를 해결할 실질적이며 경제적으로 타당한 솔루션을 찾겠다"는 목표에 발맞춰 복잡한 3D 다중 물리 CFD 시뮬레이션을 실용적으로 사용하며 작업을 이어가고 있습니다. 이는 기존 장치의 문제를 해결하기 위한 사후 고심일 뿐만 아니라, 화학 공정 및 정제 산업의 엔지니어링 설계 및 해석을 위한 사전예방식 예측 방식의 일환으로 제공됩니다.

참조

1. Michael A. Porter, Sean McGuffie: "Designing a Robust Thermal Reactor," Brimstone Sulfur Symposium, Vail, Colorado, September 2016
2. Anthony DeFilippo, Mike Porter, Sean McGuffie: "Complex Physics Models for the Refining Industry, Energy and Process," CFD Symposium, Houston, Texas, May 2017

Siemens Digital Industries Software

본사

Granite Park One
5800 Granite Parkway
Suite 600
Plano, TX 75024
USA
+1 972 987 3000

미주 지역

Granite Park One
5800 Granite Parkway
Suite 600
Plano, TX 75024
USA
+1 314 264 8499

유럽 지역

Stephenson House
Sir William Siemens Square
Frimley, Camberley
Surrey, GU16 8QD
+44 (0) 1276 413200

아태 지역

Unit 901-902, 9/F
Tower B, Manulife Financial Centre
223-231 Wai Yip Street, Kwun Tong
Kowloon, Hong Kong
+852 2230 3333

Siemens Digital Industries Software 소개

Siemens Digital Industries Software는 업계의 디지털 혁신을 주도하는 세계적인 소프트웨어 솔루션 제공업체로, 제조업체가 혁신을 실현할 수 있는 새로운 기회를 창출합니다. 텍사스 플레인노에 본사를 둔 Siemens Digital Industries Software는 전 세계 140,000여 고객을 보유하고 있으며, 규모를 막론한 기업이 아이디어를 실현하는 방법, 제품을 실제로 구현하는 방법, 운영 중인 제품과 자산을 사용 및 파악하는 방법을 혁신할 수 있도록 지원합니다. Siemens Digital Industries Software 제품과 서비스에 대한 자세한 내용은 siemens.com/plm에서 확인할 수 있습니다.

siemens.com/plm

© 2019 Siemens Product Lifecycle Management Software Inc. Siemens 및 Siemens 로고는 Siemens AG 의 등록 상표입니다. Femap, HEEDS, Simcenter, Simcenter 3D, Simcenter Amesim, Simcenter FLOEPD, Simcenter Flomaster, Simcenter Flotherm, Simcenter MAGNET, Simcenter Motorsolve, Simcenter Samcef, Simcenter SCADAS, Simcenter STAR-CCM+, Simcenter Soundbrush, Simcenter Sound Camera, Simcenter Testlab, Simcenter Testxpress 및 STAR-CD 는 미국 및 기타 국가 소재 Siemens Product Lifecycle Management Software Inc. 또는 계열사/자회사의 상표 또는 등록 상표입니다. 기타 모든 상표, 등록 상표 또는 서비스 마크는 해당 소유자에 귀속됩니다.

66629-82628-C8-KO 10/20 LOC