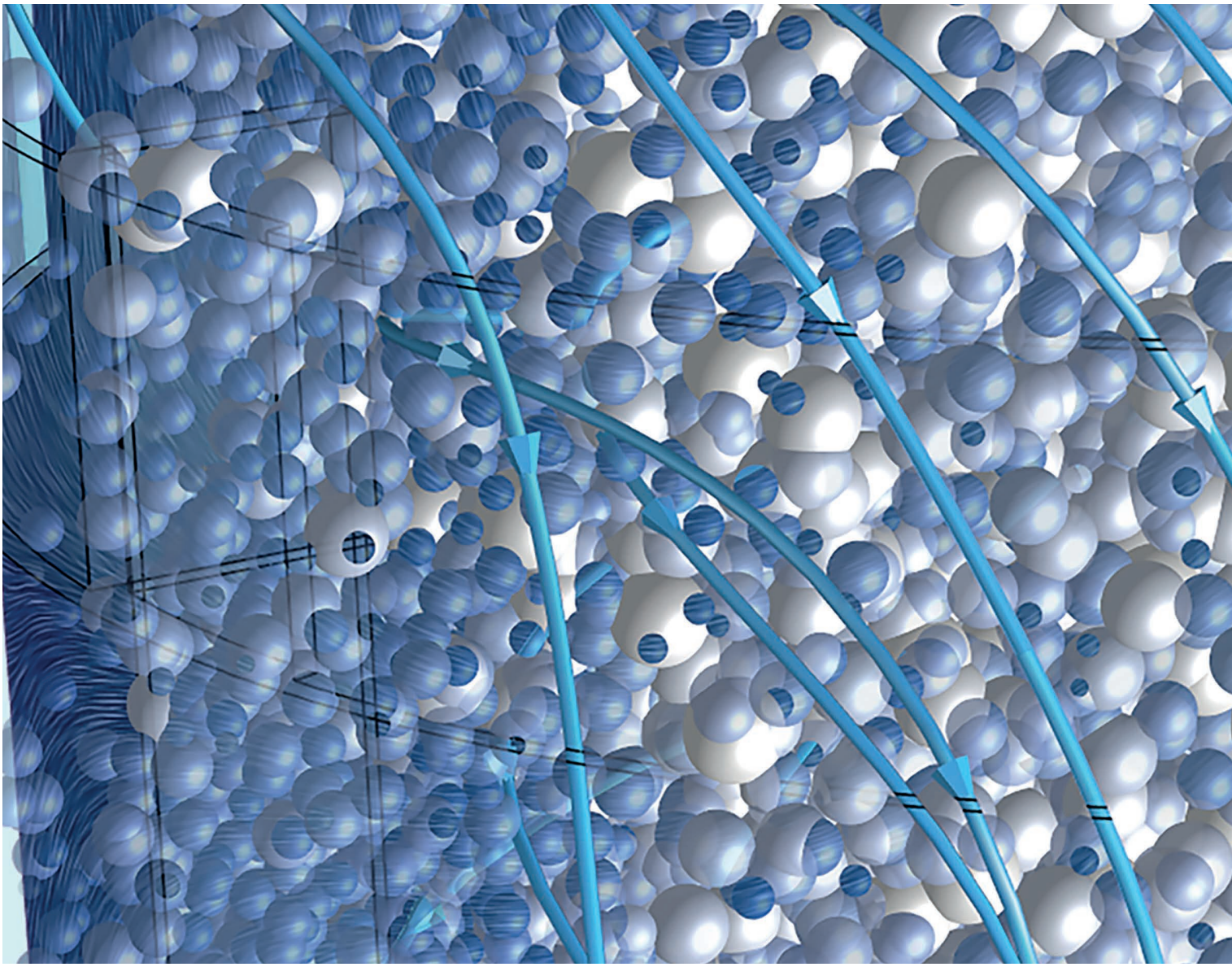
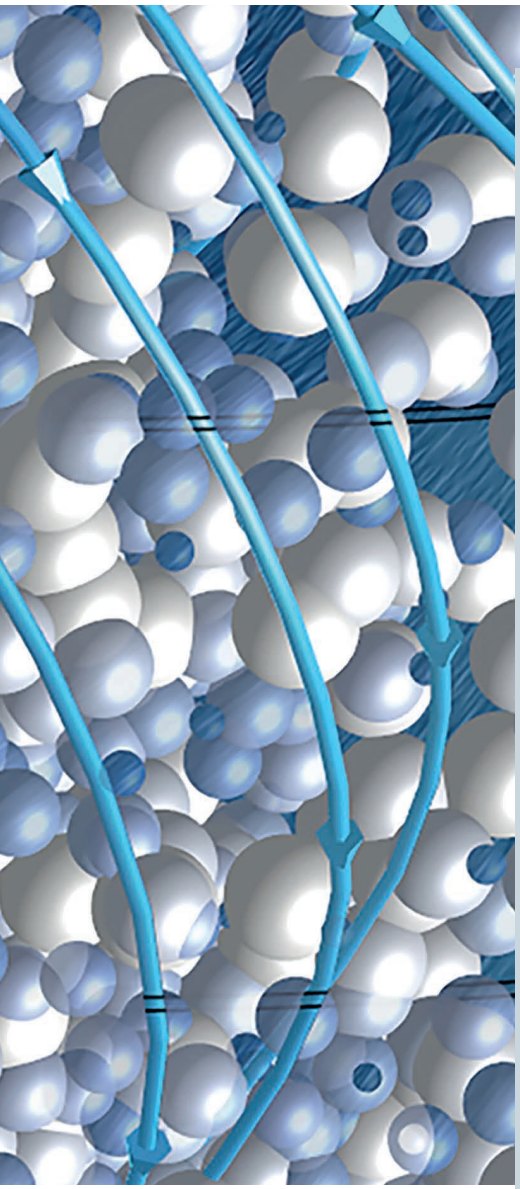
Siemens Digital Industries Software

더 나은 설계를 더 빠르게 탐색

화학 및 공정 산업에서의 다분야 시뮬레이션 및 설계 탐색

siemens.com/plm





목차

들어가는 말	**04 – 05**
Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow: "흔들지 말고, 저어서"가 필요한 경우가 있다	**06 – 07**
미래를 내다보는 CPI	**08 – 09**
마이크로 스케일에서 매크로 스케일/랩 스케일로 다시 플랜트 스케일로	**10 – 11**
Simcenter STAR-CCM+을 사용한 가상 플랜트	**12 – 15**
시뮬레이션을 사용한 다층-폴리 에스테르 필름 레이어 제어 향상	**16 – 21**
원료 의약품 연속 제조를 위한 수치 시뮬레이션	**22 – 25**
정제 및 코팅을 위한 수치 시뮬레이션	**26 – 29**
CFD로 백신 제조 공정 보안 구축	**30 – 35**
여기가 점점 뜨거워집니다! Zeeco, Simcenter STAR-CCM+을 사용해 히터 오작동 미스터리 해결	**36 – 39**
불량 진동 파악: Porter McGuffie, 히터 진동 문제 해결	**40 – 43**
연소 엔지니어 Jane이 보낸 어느 한 주	**44 – 49**
유리 덩어리에서 유리병이 되는 과정: Bottero, 전체 유리 성형 공정 시뮬레이션	**50 – 55**
Owens Corning, 레이저 용접 시뮬레이션으로 설계 사이클 단축 및 파트 설계 최적화	**56 – 61**
JFE 테크노 리서치, 일본식 '모노즈쿠리'에 시뮬레이션 적용	**62 – 65**
혼합 산업: 미세 조정 또는 설계 탐색을 통한 절감	**66 – 71**
Simcenter STAR-CCM+, Pierre Guerin에 경쟁 우위 제공	**72 – 75**
FCC 전산 해석	**76 – 81**

들어가는 말

Ravindra Aglave
Director,Chemical and Proces

화학 및 공정 산업은 원자재를 사용해 기능성 제품을 제조합니다. 원자재는 여러 산업에 사용돼 스마트폰에 들어가는 터치스크린과 송유관에 사용되는 부식 방지제, 자동차용 페인트와 폼부터 항공기용 탄소 섬유에 이르는 다양한 새로운 기능이 됩니다.

역사적으로 문명은 일상에서 사용하는 가정용 도구와 운송 수단으로써의 소재를 찾고 처리하며 적용하는 능력을 통해 진화했습니다. 석기 시대부터 화학 및 공정 공학 기술이 시작됐으며, 이후 청동기, 철기를 거쳐 현재에 이르렀습니다. 실제로 영화 졸업에 나왔던 "플라스틱" 이란 단어가 이런 흐름을 잘 나타냅니다.

상대적으로 낮은 가치의 원자재를 가져와 반응을 거쳐 높은 가치의 재료로 변환하고, 폐기물과 불필요한 물질로 나누는 과정은 화학 산업의 모든 공정의 기본이 됩니다. 과거에는 이러한 공정의 설계와 세부 작업이 대부분 경험을 통해 이뤄졌습니다. 화학 공학은 제 1차 세계 대전과 2차 세계 대전으로 고무, 연료 및 폭발물에 대한 수요가 높았던 20세기 초 과학 및 공학의 한 분야로 등장했습니다. 화학 산업 공정을 묘사하는 기본 방정식이 개발되고 실험에 의해 보완됐으며, 수학적으로 설명하기 어려운 현상에 대한 상관 관계를 도출하는 데 사용됐습니다. 당시 화학 공정 엔지니어가 사용하는 세 가지 주요 방식은 실험과 해석적 계산, 경험이었습니다.

최초의 공정 시뮬레이션 툴은 1970년대 컴퓨터가 등장하면서 탄생했습니다. 1980년대에는 항공우주 및 자동차 산업이 주도하는 새로운 수치 해석 방식이 개발됐습니다. 엔지니어는 CFD (Computational fluid dynamics)를 사용해 실제 프로토타입을 제작하지 않고도 "원본" 설계를 테스트하고 검증할 수 있게 됐습니다. CFD 사용은 유체 흐름과 열 전달에 상당한 영향을 받는 항공우주 산업과 자동차 산업에서 빠르게 확산됐습니다. 반면 화학 산업에서는 분자 수준의 화학이 혁신을 주도합니다.

당시에는 화학 공정에 들어가는 소규모 공정은 CFD 모델을 생성할 수 있을 정도로 충분히 파악되지 못한 상태였습니다. 그러나 최근 몇 년간 상당한 연구를 통해 소규모 모델이 발전하면서 특히 내연 엔진과 그 외 형태 모두에 적용된 연소 반응을 비롯한 한층 폭 넓고 심도 있는 적용이 가능해졌습니다. 결정화, 동결 건조 등과 같은 다른 여러 공정 개발도 현재 학계에서 이뤄지고 있습니다. 이렇듯 빠르게 진행된 연구 내용은 역시나 빠르게 개발되는

Simcenter STAR-CCM+™에 반영돼 있습니다. 지난 몇 년 사이에 이러한 새로운 기능 중 다수가 구현 및 검증됐으며, 이는 소프트웨어 기능을 대거 도약시켰습니다. Simcenter STAR-CCM+는 이제 대규모 이동 공정 (질량, 열, 관성 전달)와 소규모 공정 간 격차를 해소하며, 엔지니어는 이를 활용해 대규모 공정이 제품 품질과 수율에 미치는 영향에 대해 알아볼 수 있습니다.

Simcenter STAR-CCM+를 사용하면 시뮬레이션 경험은 많지 않으나 공정 지식이 풍부한 공정 엔지니어도 쉽게 시뮬레이션을 사용할 수 있습니다. 혼합 전용 툴인 Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow와 통합된 Simcenter STAR-CCM+는 가상 공정 설계 및 개발 플랫폼을 제공합니다. 이 획기적 기능은 CFD 시뮬레이션을 오늘날 화학 산업의 공정 시뮬레이션만큼 쉽게 할 수 있는 것으로 만들기에 충분합니다. 또한 이 기능이 비즈니스에 가져다 줄 가치도 분명합니다:

- 새로운 컨셉트를 테스트 해 공정 요건을 충족할 수 있는 재량
- 아이디어와 솔루션을 실제 작동 조건 및 규모로 테스트 가능
- 예비 설계 및 파일럿 규모 지식을 활용해 공정 확장

시뮬레이션을 통해 얻은 인사이트를 이제 더 많은 엔지니어들이 사용할 수 있습니다. 최근 공정 시뮬레이션 도구를 다루는 대학에서 많은 공정 엔지니어가 배출되면서 Siemens는 이들이 공정 시뮬레이션 뿐만 아니라 CFD와 이산요소법 (DEM) 시뮬레이션에 대한 이해도 갖춘 상태에서 진입할 것으로 예상합니다. 이러한 지식과 기술의 유입은 업계를 한층 효율적이며 친환경적으로, 혁신적으로 탈바꿈 시킬 것입니다.

*"Simcenter STAR-CCM+*를 사용하면 시뮬레이션 경험은 부족하지만 공정 지식은 풍부한 공정 엔지니어도 시뮬레이션을 사용할 수 있습니다."

Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow: "흔들지 말고, 저어서"가 필요한 경우가 있다

Ravindra Aglave
Director,Chemical and Proces

마티니에 매료되다

어렸을 때 처음 본 제임스 본드 영화에서 혼합에 대해 알게 됐습니다. 제임스 본드는 마티니를 주문할 때 "젓지 말고 흔들어서"라고 말합니다. 왜 젓거나 완전히 혼합해달라고 하지 않는지 궁금했지요. 바닥이 원뿔 모양으로 된 용기에 임펠러 하나가 있었고, 용기의 1/3 정도 액체가 채워져 있었습니다. 간단히 설명하자면 패시브 스칼라를 사용해 제 2 액체를 나타낼 수 있었습니다. Q는 제임스 본드의 아이폰이나 기어에 딱 맞는 디바이스를 만들 역량이 충분했지요. 어린 나이였지만 제 안의 공학 유전자는 이걸 탐구하고 있었습니다. 제가 자란 나라에서는 혼합 음료가 흔치 않아서 혼합을 늦춘 것이 맛과 입천장에서 증발하는 현상에 어떤 영향을 미치는 지 감도 잡지 못했습니다. 그러나 전 제임스 본드 영화를 볼 때마다 그 장면을 기다렸습니다.

공학 문제 해결

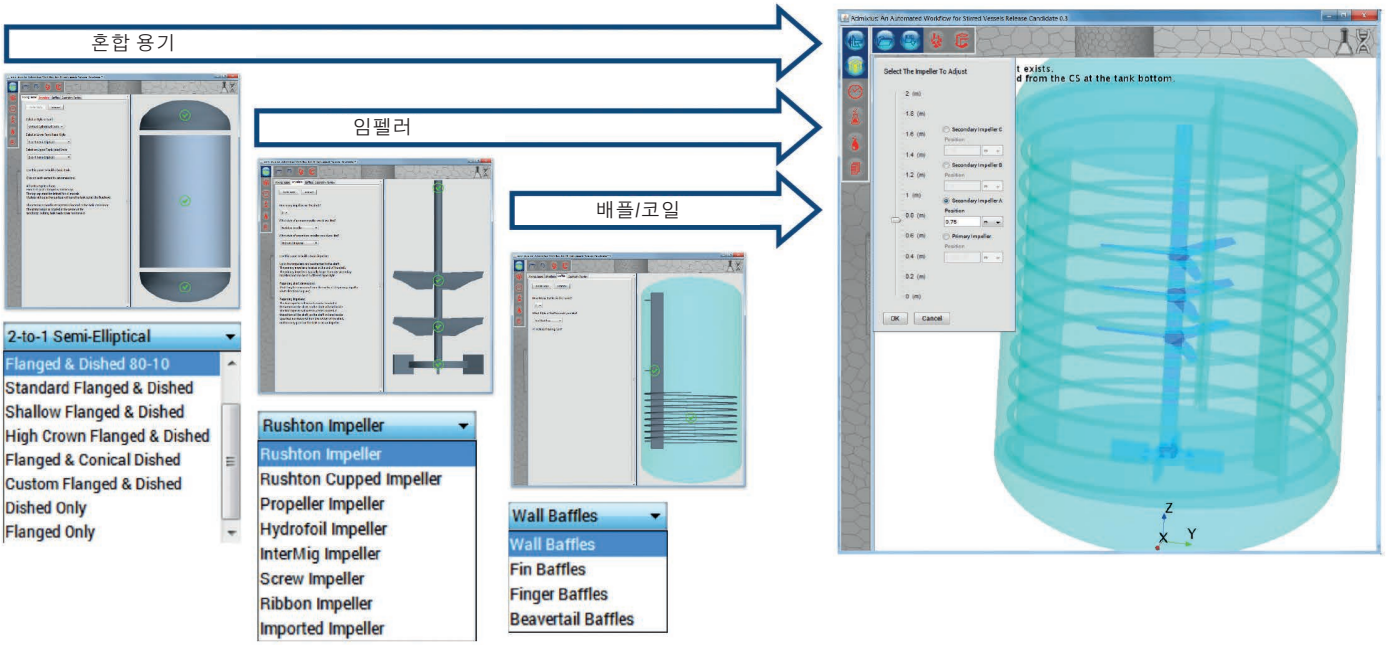
사물의 작동 원리, 특히 화학 반응에 관심이 많았던 저는 커서 반응/연소 분야에 주력하는 화학 엔지니어가 됐습니다. 혼합 문제는 이제 한층 진지한, 전문적으로 필요한 영역이 됐습니다. 학습 모델링과 CFD 시뮬레이션을 통해 이 현상을 한층 근본적으로 살펴볼 수 있었습니다. 교반 용기에서 혼합할 때 지오메트리와 재료 데이터의 기본 정보로 시작하는 것과 실질적으로 시뮬레이션을 시작하는 것 사이에는 여전히 큰 격차가 있었습니다. Q같이 가상 프로토타입과 실제 프로토타입을 혼합해서 사용하는 천재는 이런 문제를 어떻게 해결할까요? 그도 난관에 봉착할까요? 아마 그는 다음과 같은 문제를 겪었을 겁니다:

- 다소 복잡한 지오메트리를 생성하는 데 시간이 많이 걸림
- 우수 사례가 없어 학습 곡선이 가파름
- 노련한 사용자는 다른 영역으로 이동 시 지식을 남기지 않음
- 포스트 시뮬레이션 해석에 시간이 많이 걸림

포인트 시뮬레이션을 넘어

이는 저와 제 동료가 혼합 시뮬레이션을 수행하기 위한 가상 제품 개발 (VPD) 툴을 인식하고 설계하며 제작하게 된 계기가 됐습니다. Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow. 이는 사용자가 거쳐야 하는 필수 단계를 매끄럽게 안내합니다.

각 단계는 사용자에 지오메트리 매개변수, 메시 유형 선택, 재료 속성 등의 정보를 입력할 수 있는 옵션을 제공합니다. 플래시에서 생성할 수 있는 표준 임펠러 유형이 있으며, 혹은 CAD 지오메트리를 가져오기 할 수 있습니다. 우수



사례 값이 자동 선택돼 다상 (G-L, S-L, 상용성 L-L) 시뮬레이션을 설정할 수 있는 가능성이 있습니다. 원하는 경우 단일 지점 또는 다중 지점 스파저를 설정할 수 있습니다. 그러나 사용자는 Simcenter STAR-CCM+에 생성된 SIM 파일에서 바로 변경하거나 조정할 수 있습니다.

더 나은 설계를 더 빠르게!

그러나 핵심 가치는 다음의 두 가지에서 옵니다:

1. 일반적인 플롯, 윤곽에 대해 자동화된 결과 포스트프로세싱. 이는 트레이서 해석을 포함하는 기능과 통합됩니다. 추후 해석이 용이하도록 이 모든 결과는 Excel로 보내집니다.
2. 생성된 지오메트리는 자동으로 매개변수화됩니다. 이는 사용자가 몇 가지 드롭다운 메뉴와 클릭만으로 많은 수고가 들어가는 설계 공간 탐색을 실행할 수 있다는 뜻입니다.

혼합 공정 설계, 개발 및 확장 작업을 하지만 시뮬레이션이나 CFD 배경 지식은 없는 화학 및 공정 엔지니어를 위한 시간이 있다면 바로 지금일 겁니다! Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow는 엔지니어가 운영, 엔지니어링, 개발 또는 연구 등 어떤 작업을 하든 문제를 해결하고 공정을 최적화하기 위해 현장에서 활발히 작업할 수 있도록 장벽을 허물어 줍니다. 엔지니어는 Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow를 사용해 자체 문제 해결 툴세트에 시뮬레이션을 도입하고 Simcenter STAR-CCM+가 가진 다양한 다중 물리 기능이 가진 강점에 기반해 적용 사례를 확장해 나갈 수 있습니다. 제임스 본드가 스파이가 아니라 엔지니어였다면 이렇게 말했을 겁니다. "흔들지 말고 저어서!"

미래를 내다보는 CPI

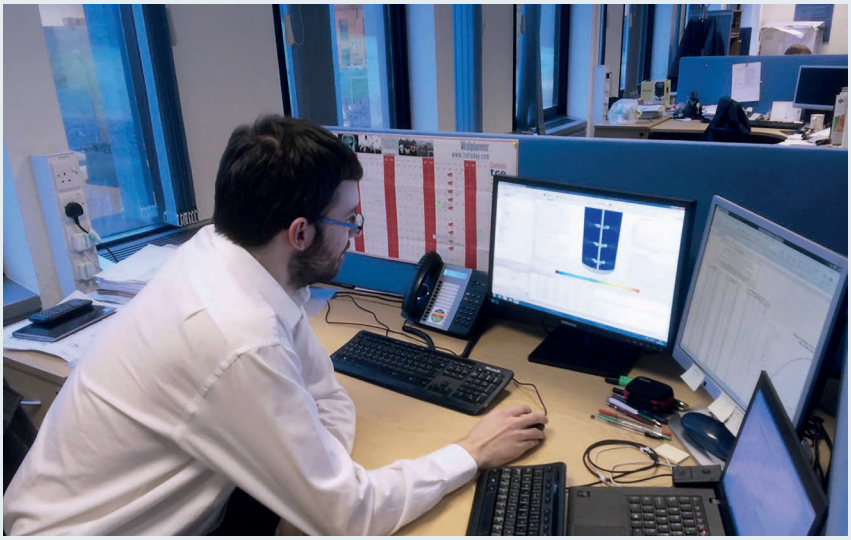


그림 1: Alex Smith, CPI 시니어 공정 엔지니어

최근에 저는 최신 시설과 통합된 과학 및 공학 지식을 사용해 고객이 프로토타입을 사용하고 차세대 제품과 공정으로 확장할 수 있도록 지원하는 영국 소재 기술 혁신 센터인 CPI (Cetnre for Process Innovation)의 Alex Smith와 이야기를 나눴습니다. Smith는 최근에 CPI에 합류했으며, 곧 입사 1주년을 앞두고 있습니다. 그는 IBandB (Industrial Biotechnology and Bio-refining) 사업부 소속 시니어 공정 엔지니어이며, 시뮬레이션 작업을 익혀야 하는 상황이 빈번했습니다. 현재는 모델 개발과 미래 사용자 교육과 관련한 CFD 기능을 개발하며, 플랜트 개선 및 문제 해결 방식과 같은 한층 "표준화된" 공정 엔지니어링 작업에 주력하고 있습니다.

이는 시뮬레이션 기능을 개발하는 매우 합리적이고 지속가능한 방식처럼 들립니다. CFD 시뮬레이션에 처음 투자하는 기업에겐 특히 그렇습니다. 저는 Smith에게 왜 CPI가 CFD 시뮬레이션 기능에 투자하기로 결정했는지에 대해 물어봤습니다. 그는 "흥미롭고 익숙하지 않은 새로운 공정 개발을 지원하는 우리 같은 위치에 있는 기업에겐 최신 툴과 기법을 사용해 고객이 최상의 결과를 낼 수 있도록 지원하는 것이 중요합니다" 라고 말합니다. "저희는 이를 염두에 두고 일반적인 모델링 및 시뮬레이션 기능을 향상시키는 데 주력하고 있으며, CFD 모델링 도입은 그러한 기능 개발의 한 측면에 불과합니다."

시뮬레이션 철학

CPI의 시뮬레이션 철학에 대한 질문에 Smith는 CFD는 기존 전문성에 기반해 제작된 툴이며, 이는 다만 지원할 뿐 대체하지는 않는다는 점을 강조합니다. "시운전 조건을 선택할 때 저희는 기술 및 운영팀의 경험과 판단에 주로 의존합니다. 한 장비에 대한 가상 모델을 사용하면 시운전을 실행하기 전에 결과에 대한 인사이트를 미리 얻을 수 있으며, 숙련 인력들이 가장 적절한 시운전을 선택하는 데 도움이 되는 추가 툴과 정보를 제공합니다."

이런 맥락에서 CPI의 CFD 시뮬레이션은 실제 테스트를 향상시키는 목적이지 이를 대체하기 위한 차원은 아닙니다. 컴퓨터 기반 시뮬레이션은 실제 테스트를 대체할 수 없습니다" 라고 Smith는 말합니다. 이 모델의 목적은 테스트 시작 전 장비의 작동 방식을 미리 가늠해 공정 효율성을 높일 수 있도록 실제 테스트에 한층 주력하는 것입니다. 이런 방식으로 한층 적절한 시작점에서 실제 테스트를 시작할 수 있으며, 부적절한 장비 테스트를 실시하거나 불필요한 시간을 들이는 일을 줄일 수 있습니다.

미래 개발

CPI로서도 이 CFD 기능은 아직 낯설지만 Smith 팀은 비즈니스 전반에 걸친 CFD 기능 개발을 이어가는 것에 대한 명확한 비전을 갖고 있습니다. "CPI가 한 첫 번째 CFD 모델링 적용 사례는 현재 작동 중인 장비에 대한 이해도를 향상시킬 목적으로 기존 장비에 대해 검증된 모델을 생성하는 것이었으며, 이를 통해 현장에서 할 수 있는 플랜트 스케일 외 다른 스케일도 시뮬레이션 할 수 있게 됐습니다. 처음에는 교반 탱크 반응기의 혼합 거동을 정확하게 예측할 수있는 모델을 개발하는 데 주력했고, 앞으로는 산소 전달 및 기타 주요 공정 속성에 대해 살펴볼 것입니다."

CPI의 궁극적 목표는 CFD 모델링을 IBandB 외부로, 전사적으로 확대하는 것입니다. CPI의 사업부는 모두 서로 다른 현장을 두고 있어 이들이 사용하는 시뮬레이션 소프트웨어를 적용 가능하게 만들고 다양한 조건과 문제를 해결할 수 있도록 만드는 것이 중요합니다. Smith는 "IBandB의 장기적 목표는 장기적으로 CFD 모델링을 새로운 반응기 설계를 검증하는 툴로 사용하고 문제 해결과 일반적인 플랜트 성능 개선에 사용하는 것입니다" 라고 말합니다.

그는 또한 CPI같은 기업에서 가장 흥미로운 부분 중 하나는 그 다음은 무엇을 할 지 전혀 감을 잡을 수 없다는 점입니다. 그는 이렇게 말합니다: 우리 기업의 목표는 사람과 기업이 실험실에서 생산 스케일에 이르는 공정을 개발할 수 있도록 지원하는 것이므로, 실제로 학계와 중소기업에서 개발되는 새로운 공정과 아이디어를 지속적으로 받아들일 수 있어야 합니다."

왜 Simcenter STAR-CCM+를 사용해야 할까요?

Smith 팀은 CFD 제공업체 선정 전 다양한 소프트웨어 선택 과정을 거쳤으며, 최종적으로 Simcenter STAR-CCM+ 소프트웨어를 선택했습니다. Smith는 다음과 같이 말합니다: "저희에게 특히 유용한 Simcenter STAR-CCM+ 기능이 몇 가지 있습니다. 예를 들어 솔루션 개발 중에 이를 실시간으로 모니터링 할 수 있는 기능은 모델이 제대로 개발되고 있는지 빠르게 확인하고, 실행이 마무리될 때까지 기다릴 필요가 없어 상당한 시간 절감 효과를 가져다 줍니다." Simcenter STAR-CCM+를 사용한 CPI 사람들은 전반적으로 사용이 편리하다는 점을 인상 깊게 봤습니다: Smith는 "올-인-원 윈도우 방식은 모든 것을 간편하고 정돈된 모습으로 유지하며 매우 직관적인 사용을 지원합니다" 라고 말합니다.

제품 개발 속도가 빠르고 고객 수요에 기반한 프로그램 (IdeaStorm)을 개발하려는 의지는 특히 CPI가 유용하게 생각하는 이점입니다. Smith는 "Simcenter STAR-CCM+의 기능은 기존 릴리스를 토대로 지속적으로 개선되며, 이는 그저 모양 뿐인 개선이 아니라 실질적으로 저희가 유용하다고 생각하는 새로운 기능들입니다." 그는 또한 전담 지원 엔지니어 (DSE)가 있다는 점도 매우 아주 유용하다고 말합니다. "기술 지원을 사용해야 하는 경우 우리 엔지니어가 우리의 요구사항을 잘 이해할 거란 확신을 가질 수 있습니다."

그림 2:CPI의 IBandB (Industrial biotechnology and bio-refining)

CPI에게 Simcenter STAR-CCM+가 특히 차별화되는 이유에 대해 묻자 그는 주저 없이 이렇게 말합니다: "저희에겐 꼭 물리적 모델이 필요한 건 아닙니다. 이 모델을 즉시 수정할 수 있는 기능과 수정 과정에서 그 효과를 모니터링하는 기능이 더 중요합니다." 이런 방식으로 모델 실행 중에 물리적 조건과 모델 선택을 세분화 할 수 있으며, 이 세분화로 인한 효과는 즉각 시각적으로 확인할 수 있습니다. 이는 Simcenter STAR-CCM+의 강력한 포스트프로세싱 기능과 통합돼 실제 작동에 매우 비슷하게 나타내는 모델을 비교적 빠르게 개발할 수 있으며, 메시와 물리적 설정을 세분화 하느라 시간을 들여 반복 공정을 거치지 않아도 됩니다."

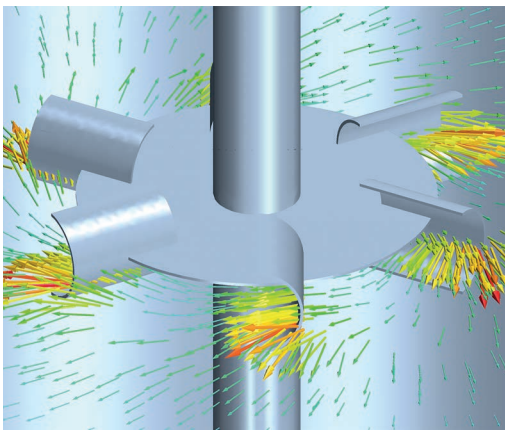


그림 3: Simcenter STAR-CCM+를 사용해 예측한 혼합 탱크의 임펠러 주위 3D 유동 패턴.

마이크로 스케일에서 매크로/랩 스케일, 플랜트 스케일로

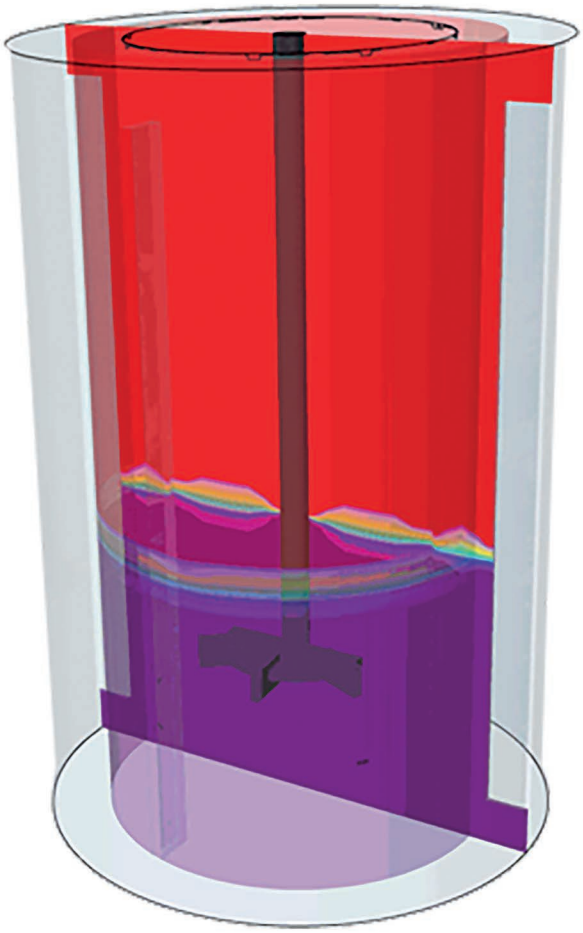
아이를 키워 본 사람이면 알겠지만, 육아는 확장 문제입니다. 아이들은 저마다 상호작용하는 여러 복잡한 변수를 가진 존재입니다. 호불호, 기질, 학습 선호도, 감정적, 사회적, 실질적 요구사항 등 명확한 특성을 갖는 부분들이 있습니다. 이들은 영구적이지 않고 아이가 성장하면서 변화합니다. 사람들은 대부분 경험자로부터 조언을 듣거나 양육에 대한 책을 읽고 시행착오를 통해 이러한 문제를 해결해 나갑니다.

아이를 하나의 시스템으로 본다면 (제가 이렇게 비유했다는 건 아내에겐 비밀입니다) 시스템 행동을 이해하는 것부터 시작해야 합니다. 안타깝게도 산업 현장과는 달리 이 시스템은 어떤 물리 법칙도 따르지 않습니다. 되려 예측 가능성이 적은 심리학 법칙을 따른다고 봐야 합니다.

아이가 자라서 어떻게 될 지 상상하는 것과 마찬가지로 어느 쪽이든 공정에서 예상한 결과에 기반해 확장된 시스템의 행동을 예상해 볼 수 있습니다. 이 행동은 이 시스템을 관리하는 물리적 특성과 본질적으로 연관돼 있습니다. 그러나 시스템을 관장하는 변수 간 관계를 구축하려는 시도보다는 행동을 파악하기 위한 시행착오 절차를 수행하는 경우가 일반적입니다. 이는 인간을 대상으로는 할 수 없지만, 산업 시스템에는 가능합니다. 아이가 읽고 쓰는 법을 배우면 의사소통을 할 수 있듯 1D 모델로 시스템의 어느 한 물리적 특성을 고려해 나머지를 가늠해 보는 것처럼 다양한 방식으로 할 수 있습니다.

혹은 보다 상세한 3D 모델로 하는 것도 가능합니다. 예를 들어 읽고 쓰는 법을 배우면 다양한 사람들과 효과적으로 의사소통하는 방법을 파악하는 것처럼 말입니다.

위 예시는 두 개의 스트림이 추가되는 장비 설계와 동일하게 볼 수 있습니다. 1D 반응 모델에 기반해 반응을 수행하도록 설계할 수 있습니다. 기본 가정은 스트림이 이상적인 방식으로 혼합돼야 한다는 점입니다. 이것이 현실과는 거리가 있다는 걸 알게 될 겁니다.



아이가 읽고 쓰는 법을 배웠다고 해서 의사소통을 잘 할거라고 막연히 기대하듯 말입니다. 이를 한층 높은 수준의 복잡성에 대입해 보겠습니다. 읽고 쓰는 능력은 마이크로 스케일 현상입니다. 의사소통 능력은 매크로 스케일 현상입니다. 매크로 스케일에서의 의사소통 수준은 필요한 수준의 마이크로 스케일 변수/능력을 결정합니다. 우리는 결정 형성이 마이크로 스케일에서의 농도, 전단 및 그 외 변수에 의존하는 산업용 결정화 시스템에서의 결정화 공정을 상상해 볼 수 있습니다. 매크로 스케일에서의 전체 흐름과 열 전달은 마이크로 스케일에서 필요한 변수가 관리되는 방식에 영향을 미칩니다. 화학 및 관련 산업의 모든 공정는 매크로 및 마이크로 수준의 현상으로 구성되며, 이들은 거의 대부분 랩 환경에서 플랜트 환경으로 확장돼야 합니다. 기업은 이 플랜트에서 달성해야 하는 결과를 알려줍니다. 연구는 특정 공정에서 마이크로 스케일이 영향을 미치고 관리하는 방식을 개발합니다. 시뮬레이션은 확장 간 간극을 해소합니다.

특히 파악하기 어려운 공정과 아이를 대상으로 성공적으로 사용된 예시와 방식이 있습니다. 부모 역할을 하는 모양입니다.

Simcenter STAR-CCM+을 사용한 가상 플랜트

CFD (Computational fluid dynamics)는 장비 및 플랜트 상세 설계에 사용하는 검증된 툴입니다. 수치 시뮬레이션의 주요 장점은 3차원 유동 정보를 생성해 최적화 가능성을 탐색해 볼 수 있다는 점입니다. Tetra Pak CPS는 Simcenter STAR-CCM+ 소프트웨어를 사용해 이 공정을 수행합니다.

가상 플랜트

특수 엔지니어링 및 시뮬레이션 소프트웨어는 혁신에 중요한 툴입니다. 현재 Tetra Pak CPS에서는 기본 엔지니어링 (중요한 공정 데이터 수집)과 상세 엔지니어링 (플랜트 내 파이프라인 및 개별 컴포넌트 설계 및 최적화)을 CAE (Computer-Aided Engineering)를 통해 수행합니다. 이를 통해 3D CAD 모델로 된 디지털 표현이 탄생합니다.

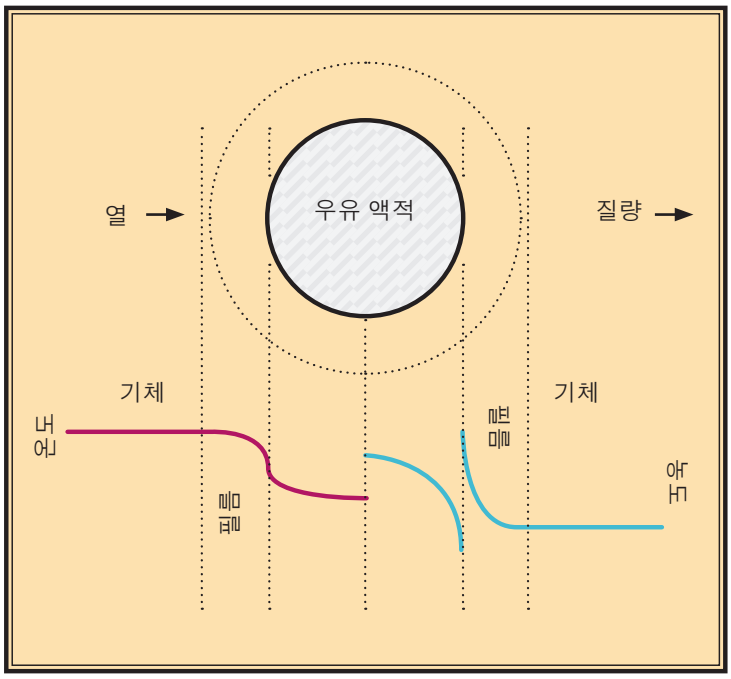
CAE를 사용해 정교한 랩이나 파일럿 플랜트가 있어야 가능했던 실험을 가상으로 수행할 수 있어 대안을 비교하고 한계 해석을 수행하기 훨씬 수월하며, 이를 통해 최적화 공정을 지원합니다. 이는 아이디어가 제품이 되는 사이클을 상당 부분 가속화 해 물리적 실험에 드는 비용과 시간을 대폭 절감하는 효과를 가져다 줍니다.

현장에서 사용하는 CAE

CAE가 장비와 플랜트를 최적화하는 효율적이며 비용 효과적인 방법을 제공한다는 점은 Tetra Pak이 이 제품을 사용하게 된 결정적인 계기였습니다. Tetra Pak의 고객은 식품 산업 쪽이라 지속적인 개선에 상당한 가치를 두고 있기 때문입니다. 이들의 목표는 플랜트 규모를 축소하면서 더 나은 제품을 생산하고, 생산, 운영 및 서비스 비용을 절감하는 것입니다.

Tetra Pak CPS가 사용하는 툴 중 하나가 바로 Siemens Digital Industries Software의 Simcenter STAR-CCM+입니다. Tetra Pak CPS의 R&D 매니저 Alfred Jongsma는 다음과 같이

*Simcenter STAR-CCM+*만의 고유한 설정 방식은 단 시간에 쉽게 배워 사용할 수 있음을 의미합니다.



분무 건조기 내 건조 공정 (열 및 질량 전달).

말합니다: "우리는 Simcenter STAR-CCM+를 적극적으로 사용해 설계를 최적화하고 문제를 해결하며 연구 개발 프로젝트를 수행합니다."

Tetra Pak CPS는 증발 시 비 뉴턴 유체 유동 탐색, 강하막식 증발기에서의 압력 강하 최소화, 분리기의 분리 효율 최적화, 분무 건조기의 공기 흐름 최적화, 분무기 배출구의 폐열 회수 해석 등과 같은 다양한 영역에 Simcenter STAR-CCM+를 사용한 경험이 풍부합니다.

분무 건조기: 목표는 분유

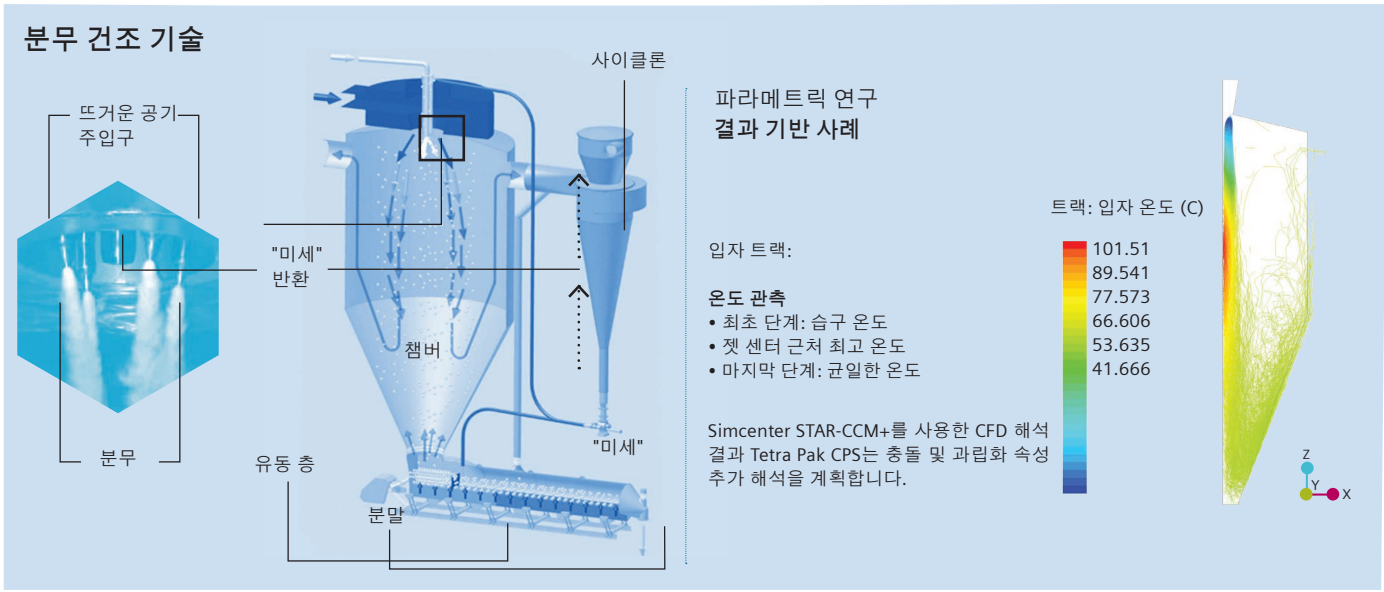
분무 건조기는 우유나 유청 같은 액체가 150~250°C의 뜨거운 공기 흐름을 통해 미세 액적화되는 표면 확대 원리에 기반합니다. 낙하하면서 건조되는 이들 액적이 공기 흐름에 노출되는 시간은 불과 0.5~1초 입니다.

액적 크기 분포를 최소화해야 작은 입자 크기가 유지되는 고품질 고형품을 얻을 수 있습니다. 분무 건조기의 크기는 건조 시간 (낙하 시간)과 필요한 액적/입자 크기에 따라 달라집니다. Jongsma는 다음과 같이 설명합니다: "일반적인 분무 건조기는 부피 700m³, 직경: 8.5m, 높이: 20m이며, 시간 당 5톤의 우유 또는 유청을 처리하며, 5MW 전력을 사용합니다. 에너지 효율은 40~65%로, 최적화를 위한 노력이 상당한 가치를 냅니다!" 분무 건조기에 중요한 매개변수는 다음과 같습니다:

- 화학 성분과 초기 농도
- 열풍 온도
- 액적과 공기의 혼합 특성
- 비행 경로 및 응집 속성

저출력 분무 건조기 시간 당 1,000 (kg/h). 일반적인 플랜트의 출력 5MW, 처리량은 5 t/h입니다.

Tetra Pak CPS:
Tetra Pak Cheese and Powder Systems는 치즈 제조 장비 전문 기업으로, 검증된 증류 및 분말 기술 솔루션을 제공합니다. Tetra Pak CPS는 세계 최고의 식품 가공 및 패키징 솔루션 기업인 Tetra Pak의 산하 기업입니다. Tetra Pak CPS는 전 세계 고객사 및 공급업체와 긴밀히 협력해 전 세계 170여개 국의 수 억명의 사람들의 요구사항을 충족하는 안전하고 혁신적이며 환경 친화적인 제품을 제공합니다. 85개국에 약 22,000명의 직원을 두고 있으며, 업계를 주도하고 지속가능한 방식으로 비즈니스를 영위하려는 책임감을 갖고 있습니다. "PROTECTS WHAT'S GOOD™" 이라는 모토는 안전하게, 어디서나 이용할 수 있는 제품을 제조하고자 하는 비전을 반영합니다.



분무 건조 설계.

시뮬레이션의 질을 결정하는 것은 기본 모델의 정확성입니다. 관련한 물리적, 화학적 및 기술적 공정의 수치적 묘사가 얼마나 현실적으로 이뤄졌는가에 달렸습니다. 또한 빠른 전환을 위해 시뮬레이션 설정과 실행이 쉽고 직관적이며 효율적이어야합니다. 독보적인 메싱 기술과 고 충실도 물리적 특성, 사용자 친화적인 인터페이스를 갖춘 Simcenter STAR-CCM+는 이 모든 요구사항을 충족합니다. Jongsma는 약속한 바와 현실이 잘 맞아 떨어졌다며, 이렇게 말합니다. "이걸 구체적인 숫자로 나타낼 순 없지만 이 제품과 워크플로, 이를 통한 지원에 상당히 만족합니다. 현재 CFD를 통해 물리적 특성을 나타내는 데는 제한이 있지만 Simcenter STAR-CCM+ 기능은 지속적으로 발전하고 있습니다. 이는 전 세계 여러 연구소에서 이뤄진 노력 덕분이며, 이러한 추세는 앞으로도 계속될 것으로 보입니다." Jongsma는 또한 이렇게 덧붙였습니다: "전반적으로 CFD를 적극 활용해 분무 건조기의 복잡한 물리적 특성에 대한 이해를 대폭 향상시켰습니다. 이제 분무 건조기 작동에 유리한 조건에 대해 더 잘 알게 됐습니다. 목표는 분무 건조기 작동을 최적화하고 파울링을 최소화하는 것이었습니다. 파울링은 분무 건조기 작동 시간에 지장을 줍니다. 몇 주에 한 번씩 이를 제거해야 하기 때문입니다. 파울링을 최소화하는 요소는 용량에도 긍정적인 영향을 미치는 것으로 나타났습니다. 최적화된 요소는 시스템으로의 공기 흐름과 액체가 고압 분사 노즐로 주입되는 방법이었습니다." Tetra Pak CPS가 경험한 이점은 생산 용량 증대, 분말 품질 향상 및 분무 건조기 청소 주기 연장으로 정리할 수 있습니다.

사용한 툴: Simcenter STAR-CCM+

Simcenter STAR-CCM+는 포괄적인 엔지니어링 시뮬레이션을 단일 통합 패키지로 제공합니다. Simcenter STAR-CCM+는 CFD 솔버 뿐만 아니라 고체나 유체 유동, 열 전달 및 응력 관련 문제를 해결하는 포괄적 엔지니어링 공정입니다. 설명은 다소 복잡하게 들리지만 사실 매우 기능적이며 배우기 쉽다고 Jongsma는 말합니다: "Simcenter STAR-CCM+는 또 한 번 그 저력을 보여줬습니다. 비교적 간단 모델에 기반해서도 컴퓨터로 제어하는 시뮬레이션이 놀라운 결과를 도출합니다. Simcenter STAR-CCM+만의 고유한 설정 방식은 단 시간에 쉽게 배워 사용할 수 있음을 의미합니다. 메시 생성, 시뮬레이션 수행 및 결과 해석이 단일 인터페이스에서 이뤄집니다. 시뮬레이션 실행 중에 포스트프로세싱을 수행할 수 있다는 점은 통합 솔루션의 면모를 드러내는 데 매우 도움이 됩니다."

시뮬레이션을 사용한 다층-폴리 에스테르 필름 레이어 제어 향상

들어가는 말

책, 태양광 패널, 신선 식품 및 냉동 식품, 운전면허증의 공통점은 무엇일까요? 우리 일상에 완전히 스며들어 그 존재 자체를 새삼 인지하지 않는 것과 관련이 있습니다. 정답은 폴리에스테르 필름입니다. 20세기에 등장한 가장 유용하고 다재다능한 혁신 기술 중 하나이지요. 폴리에스테르 필름은 광전지, 패키징, 건설, 보건, 이미징 및 전자 제품에 이르는 다양한 분야에 사용됩니다. DTF (DuPont Teijin Films)는 1920년~1930년대에 혁신적인 연구를 시작하며 폴리에스테르 필름을 대중에 보급하려는 시도에 앞장 섰으며, 이를 통해 나일론과 폴리에스테르 필름을 발견하고 개발하게 됐습니다. 현재 DTF는 폴리에스테르 필름 제품과 공정 혁신을 지속적으로 주도하는 PET (Plain Polyethylene Terephthalate)과 PEN (Polyethylene Naphthalate) 폴리에스터 필름을 생산하는 세계적 기업입니다.

이 글은 DTF가 층 구성 및 다층 필름 (MLF) 제어에 수치 시뮬레이션을 사용하며, 이 결과를 생산 스케일 플랜트로 바로 전달하는 방법을 간략히 소개합니다. DTF는 버밍엄 대학교 화학공학과와 협력해 MLF 생산에 사용되는 공압출 공정에 대한 이해를 돕기 위해 수치 시뮬레이션을 사용했습니다. MLF는 다양한 폴리머 용융 층이 i)end fed다이에 연결된 인젝터 블록 또는 ii) MMD (multi-manifold die) 중 하나에 대해 최초로 통합될 때 형성됩니다. EPSSRC (Engineering and Physical Sciences Research Council)는 본 연구가 업계에 미치는 광범위한 파급 효과와 이점을 감안해 후원했습니다.

폴리에스테르 필름 생산

일반적으로 폴리에스테르 필름은 폴리머를 냉각 성형 드럼으로 압출해 폴리머 필름을 제조하는 압출 공정으로 제조한 후 연신 공정을 사용해 연신됩니다. 그 다음 고온 인장 하에서 결정화 해 최종 형태와 분자 배향을 수득합니다. 폴리에스테르 기반 MLF는 DTF 제품 포트폴리오의 주를 이룹니다. MLF는 유리/결정화 온도 이상에서 폴리머 액체인 여러 폴리에스테르 용해물이 공압출 공정에서 함께 존재할 때 형성됩니다. MLF는 반사 필름, 데이터 스토리지, 카드 및 광전지에 사용됩니다. DTF에서는 대조되는 폴리머 용융 층이 다이 또는 MMD에 연결된 인젝터 블록에서 단일 MLF 구조를 형성합니다. 인젝터 블록에서 용해물은 MMD에서 다이 전반으로 확산되기 전에 결합되며, 용해물은 확산된 후 결합됩니다. DTF로 생성된 일반적인 MLF 구조는 그림 1에 나타나 있으며, 여기서 A, B 또는 C는 MLF 내 개별 폴리머 층을 나타냅니다. 이 MLF를 처리하는 과정에서 주요 기준은 다이 전반으로 확산되는 것입니다. 그 다음

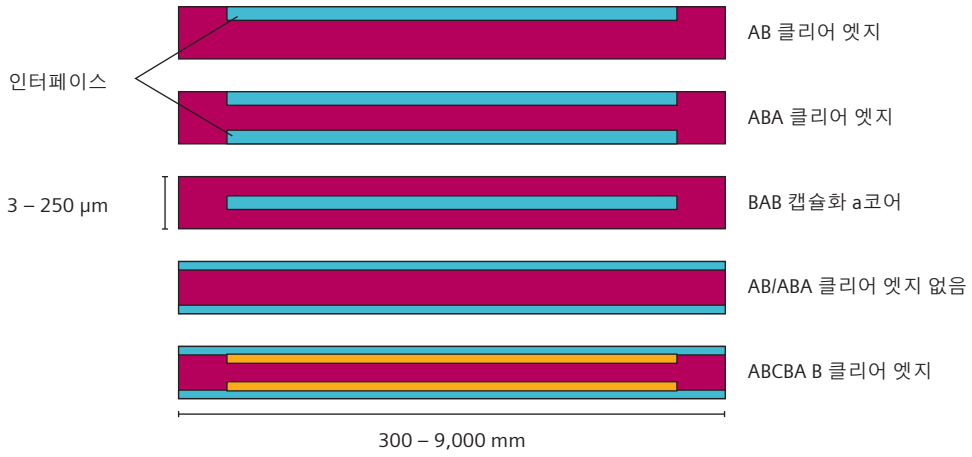


그림1: 일반적인 MLF 구조.

필름을 냉각시키고 전방 및 횡방으로 연신해 최종 폴리에스테르 필름을 형성합니다. MLF는 보통 두께가 3~250µm이며, 길이는 약 300~9,000mm입니다.

일반적인 생산 공정에서 엣지는 배분 전 트리밍되며, 더 얇은 2차 층 트리밍 작업에는 더 많은 비용이 듭니다. 또한 2차 층은 트리밍 클립을 오염시켜 비용 부담이 큰 수리로 이어지기도 합니다. 그러므로 엔드에서 명확한 주 층 엣지를 확보하는 것이 바림직합니다. 다양한 용융 층 두께 용융 흐름 특성, 개별 용융 층의 폭 및 두께를 제어하고 엣지가 점점 어려워지면서 적절한 층 제어, 제품 성능을 높이고 비용이 많이 드는 실험을 줄이는 것이 관건입니다.

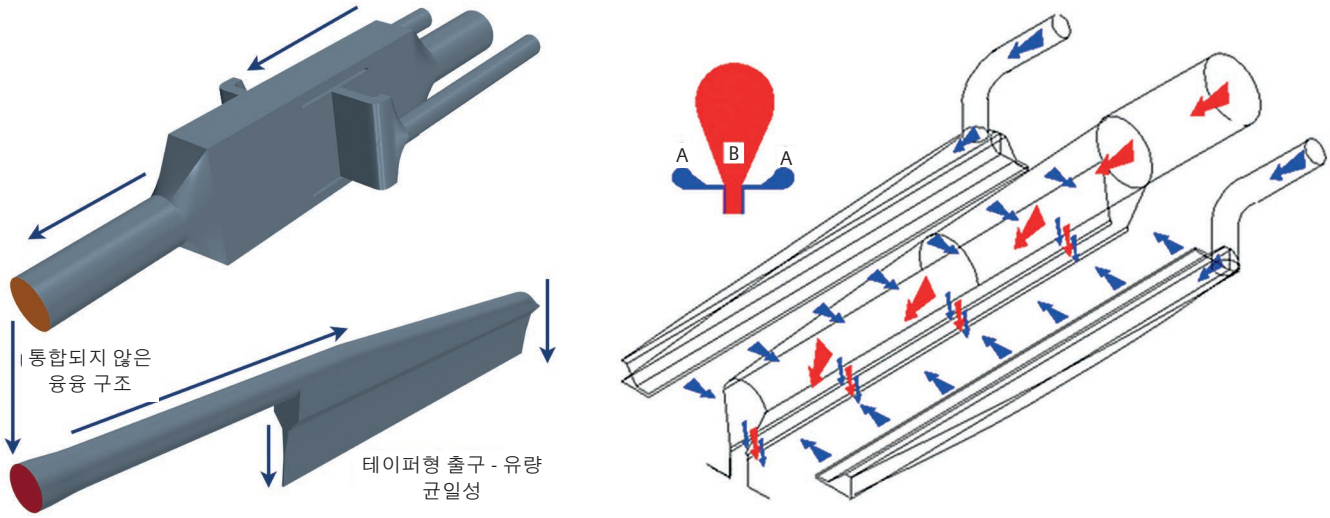


그림 2: 일반적인 DTF 공압출 구조: 인젝터 블록 및 end fed 다이 (상단) 및 다중 매니폴드 다이 (하단).

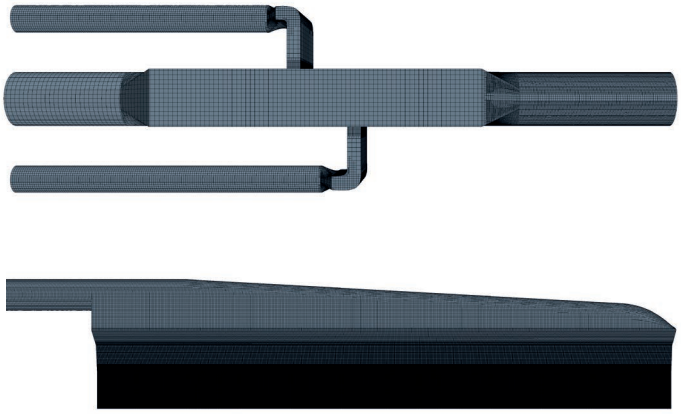


그림 3: 인젝터 블록 메시와 end fed 다이.

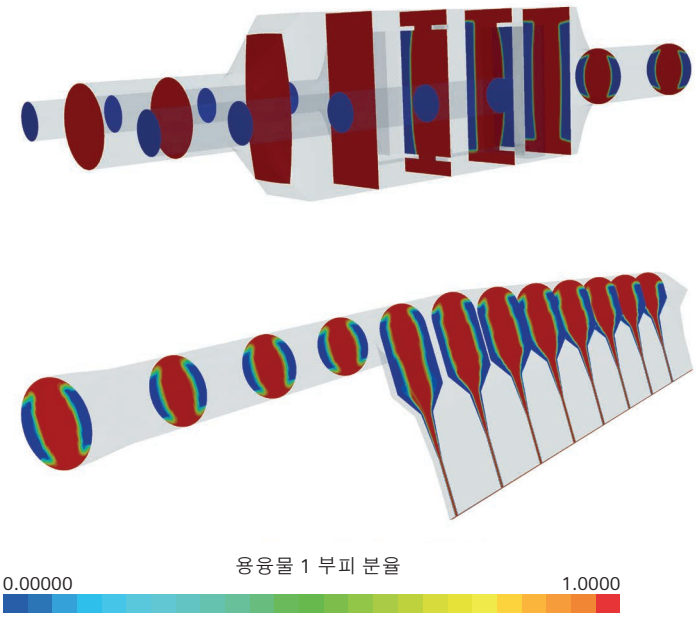


그림 4: 섹션에서의 점진적 부피 분율 : 인젝터 블록 (위)과 end fed 다이 (아래).

CFD 모델링 - End Fed 다이

DTF에 사용된 두 개의 공압출 구조가 아래 그림에 나타나 있습니다. 첫 번째 경우에서는 폴리머 용융물이 인젝터 블록으로 공급되며, 통합된 용융물 구조가 흐름 균일성 및 균일한 최종 필름 구조로 테이퍼형 출구를 통해 나옵니다. MMD에서 1차 층은 메인 블록으로 들어가며, 2차 층은 측면 채널을 통해 들어가고 통합된 용융물은 테이퍼형 다이 배출구를 통해 빠져 나갑니다. DTF에 사용된 두 개의 공압출 공정에 대한 비교 계산 연구가 여기에 나타나 있습니다. Simcenter STAR-CCM+는 이 용도에 부합하는 여러 계산 툴을 평가한 후 가장 사용자들이 선호하는 플랫폼으로 선정됐습니다.

우선 인젝터 블록과 end fed 다이에서 공압출 공정의 EMP (Eulerian Multiphase) 시뮬레이션이 수행됐습니다. Simcenter STAR-CCM+의 VOF (Volume of Fluid) 기능을 사용해 다양한 폴리머 용융물 사이의 인터페이스를 모델링하고 추적할 수 있었으며 EMP 모델을 사용하면 둘 이상의 상을 완벽하게 시뮬레이션 할 수 있습니다. 이 흐름은 층류, 뉴턴식 및 비압축성인 것으로 가정했습니다. 두 용융물은 처음엔 동일했지만 이후 시뮬레이션에서는 2차 용융물 점도가 증가했습니다. 이 도메인은 Simcenter STAR-CCM+에서 트리밍된 육면체 세포를 사용해 이산화 됐습니다. 인젝터 블록은 150만 개 부피 셀을 포함했으며, end fed 다이는 145만 개 셀을

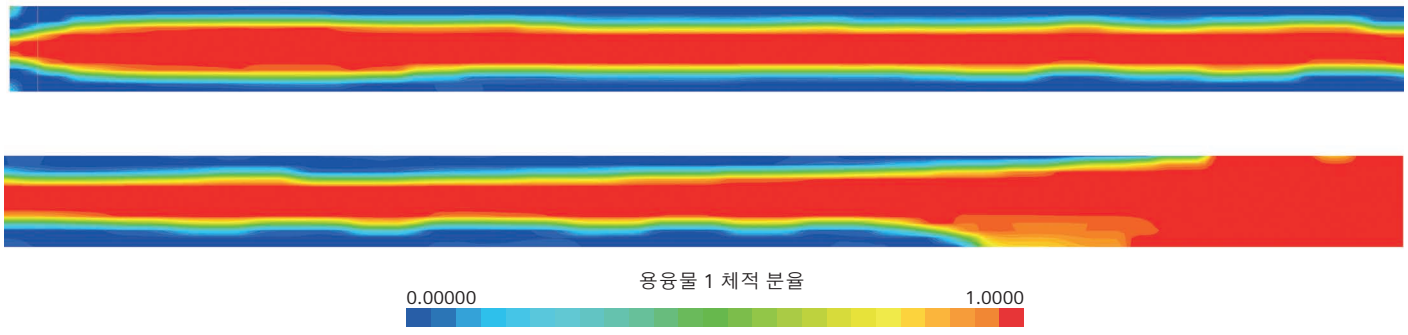
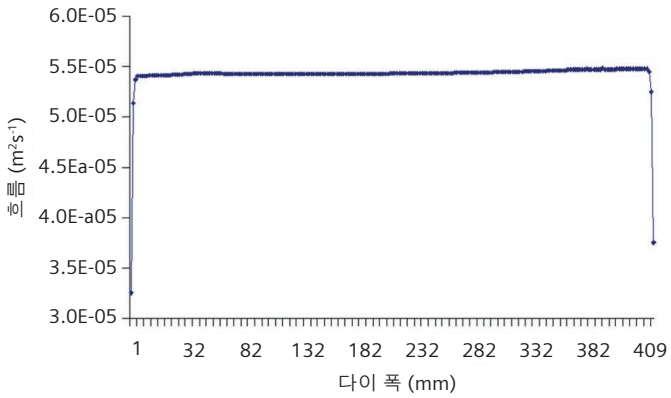


그림 5: 인젝터 블록 및 end fed 다이 출구에서의 부피 분율.



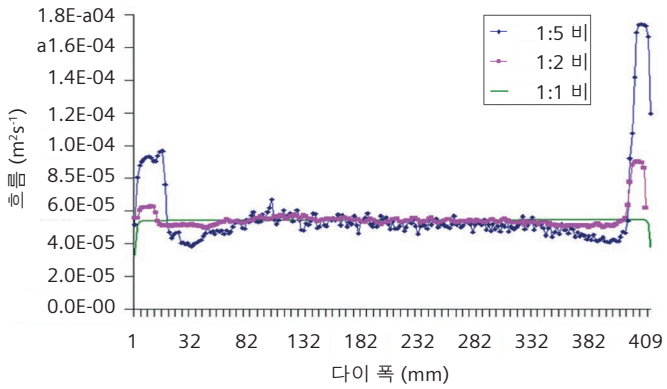


그림 6: 1:1 점도 비율에 대한 출구 전반의 흐름 (왼쪽) 증가하는 비율에 대한 출구 전반의 흐름 (오른쪽).

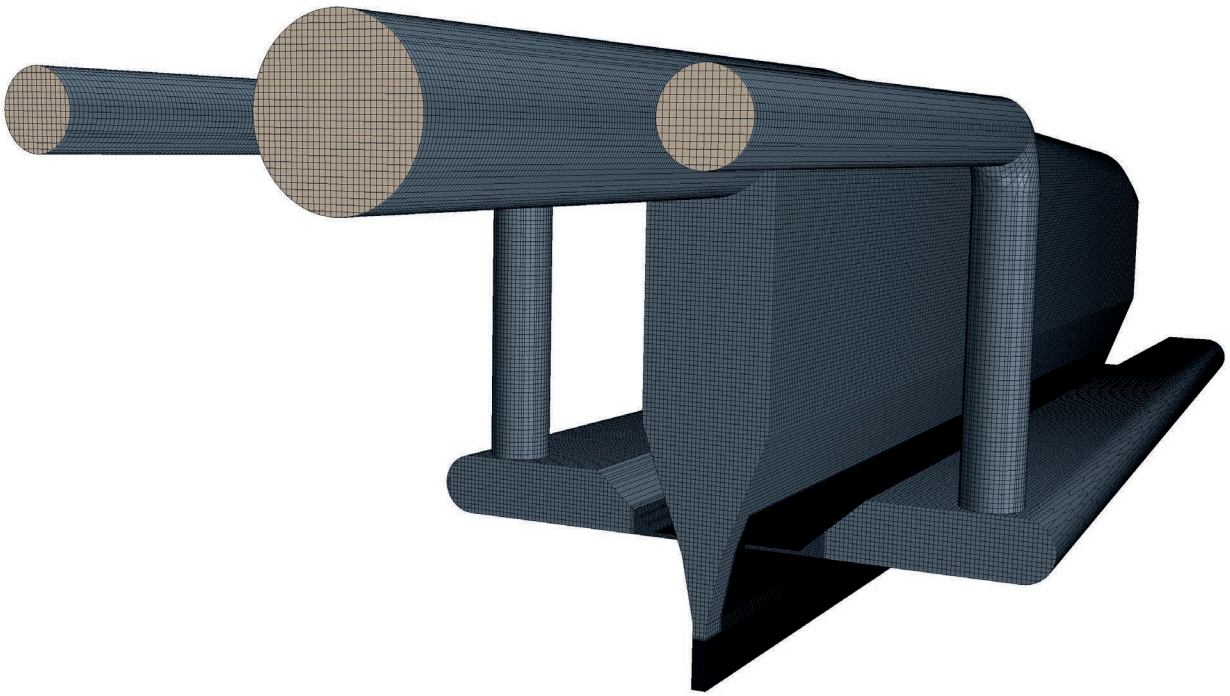


그림 7: 다중 매니폴드 다이 메시 (MMD).

점성 (용융물 1:용융물 2, Pa s)	블랭크 엔드, 에어면 클리어 엣지 폭 (mm)	흐름 차이 (%)
170:170	7.2	0.73
170:340	7.2	4.14
170:850	9.8	9.56

표 1: 출구에서의 흐름 차이.

점성 (용융물 1:용융물 2, Pa s)	클리어 엣지 너비 (mm)	흐름 차이 (%)
170:170	11.0	5.04
170:340a	10.9	3.11
170:850	10.7	2.66
170:850	10.1	2.18
170:1,700	9.7	2.00

표 2: MMD 출구에서의 흐름 차이.

포함했습니다. 두 용융물을 온도 285℃, 밀도 1,250 kg/m3, 용융 점도 170 Pa-s 및 열 전도도 0.2 W/m/K로 초기화 됐습니다. 1차 용융물 1의 질량 유속은 시간당 80 킬로그램 (kg/hr)이며, 2차 용융물 2는 20kg/hr이었고, 각각 상응하는 부피 분율은 80%, 20%이었습니다. 모든 시뮬레이션은 32GB 메모리가 장착된 Dell Precision 워크스테이션에서 실행됐습니다.

아래 이미지는 인젝터 블록 및 end fed 다이를 통한 용융물의 점진적 부피 분율을 보여줍니다. 배출구에서의 통합 용융물 구조는 ABA 유형이며, 중앙에 용융물 1이 빨간색이고 양쪽에 용융물 2가 측면에 있습a니다. 점진적 부피 분율 플롯은 ABA 구조가 인젝터 블록과 end fed 다이 모두에서 부드러운 인터페이스로 유지됨을 보여줍니다. 인젝터 블록 지오메트리는 좌측 용융물(2)이 우측 용융물(2)보다 먼저 들어가는 비대칭입니다. 두 번째 이미지는 end fed 다이에서의 출구 부피 분율을 보여줍니다. 시뮬레이션은 0mm 가장자리에서 용융 2 층 중 어느 곳에도 클리어 엣지가 존재하지 않음을 보여줍니다. 클리어 엣지가 있음을 시사하는 실험적 작업이 있음에도 이런 결과가 나왔습니다. 시뮬레이션에서 클리어 엣지가 부족한 것은 미세 메시로 다이에서 수평 흐름에서 수직 흐름으로의 전이 영역이 제대로 해석되지 않았기 때문일 수 있습니다. 시뮬레이션에서 410 mm 엣지에서 상단 용융 2 층이 하단 용융 2 층보다 넓게 퍼졌습니다 (그림 5). 최종 end fed 다이 출구에서 균일한 최종 두께가 생성됩니다. 출구 너비를 가로 지르는 유량 플롯은 근소한 유량 차이를 보이며, 넓은 테이퍼로 인한 균일한 최종 두께를 보입니다 (그림 6).

또한 2차 용융층 점도를 1차 용융층 점도의 2배, 5배로 증가시켜 시뮬레이션을 수행했습니다. 세 가지 사례의 출구 너비를 가로 지르는 흐름 플롯은 제 2차 점도가 증가하면 출구 전반의 유동 균일성이 적어짐을 보여주며, 최종 용융층 균일성이 감소함을 시사합니다. 첨부 표는 end fed 다이 출구 410mm 끝에서 클리어 엣지 너비와 모든 용융 비율에 대한 출구 너비 상의 흐름 차이를 보여줍니다.

다중 매니폴드 다이의 CFD 모델링

인젝터 블록 및 end fed 다이 모델링과 비슷하게 MMD 개념에 기반해 시뮬레이션을 수행해 최종 레이어 구조와 두께를 비교했습니다. 1,200만 개의 체적 셀이 있는 잘 다듬어진 육면체 요소 메쉬가 영상에 그림에서 볼 수 있듯 테이퍼 끝을 따라 충분히 정교하게 만들어졌습니다. 시뮬레이션은 인젝터 블록 및 end fed 다이와 동일한 조건으로 수행했습니다. MMD를 통한 점진적 체적 분율의 등고선 플롯은 용융층 사이에 매끄러운 인터페이스가 있는 ABA 구조 형성을 보여줍니다. 유동장 속도 벡터는 용융물 2가 처음 유입돼 용융 1 변형을 유발하는 효과를 보여줍니다. 출구 부피 분율 플롯은 최종 통합 필름의 구조를 보여주며, end fed 다이에 비해 더 균일합니다. 흐름은 MMD에서 더 대칭적이며, 양쪽에 동일한 너비의 클리어 엣지가 있습다. 따라서 MMD는 최종 필름의 2차 용용 2층이 가진 균일한 특성과 출구 양쪽에 클리어 엣지가 존재한다는 점 때문에 가공에 더 유리합니다. 2차 층 점도는 1차 층 점도의 2, 3, 5, 10배 수준으로 증가했습니다. 시뮬레이션을 통해 출구 너비 전반에 걸쳐 통합 구조의 핵심 파트는 선형이며 두께가 균일한 반면, 엣지는

수치 시뮬레이션은 폴리에스테르 필름 공압출 공정과 한층 클리어한 엣지를 얻는 데 도움이 됩니다. 이는 클리어 엣지를 사용해 한층 쉽게 처리하고 처리 비용을 낮출 수 있는 이점을 제공합니다.

점성이 적은 1차 용융 1층이 있는 극한의 피크만 나타냈습니다. 증가한 2차 층 점성에서 흐름 차이가 감소한 것은 MMD가 2차 층 점성이 더 크고 계산상 더 효율적인 구조물에 사용하기 더 좋음을 의미합니다.

결론

End fed 다이에 연결된 인젝터 블록과 MMD를 통한 다층 폴리에스테르 필름 형성의 수치 시뮬레이션을 비교한 결과 MMD에서 생산에 유리한 한층 클리어한 엣지가 나온다는 점을 보여줍니다. 또한 MMD는 얇기가 한층 균일한 최종 필름과 한층 폭넓은 점도 비율이 있는 부드러운 용융 인터페이스를 생성했습니다. 수치 시뮬레이션은 한층 방대하게 산업 규모 지오메트리로 확장해 폴리에스테르 필름 공압출 공정과 한층 클리어한 엣지를 얻는 방법을 명확하게 파악한다면 상당히 도움이 될 겁니다. 또한 시뮬레이션은 폴리에스테르 기반 MLF 형성에 대한 점도가 더 작은 2차 층 영향을 조명하며, 이는 클리어 엣지를 사용해 한층 쉽게 처리하고 처리 비용을 낮출 수 있는 이점을 제공합니다.

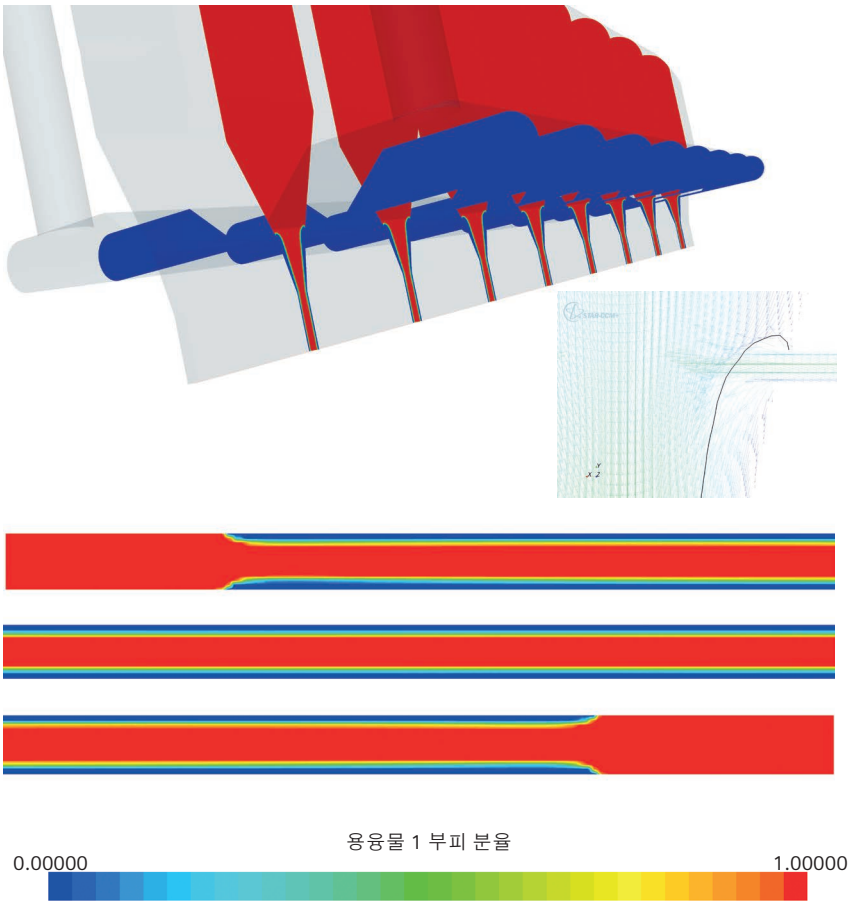


그림 8: MMD에서의 점진적 부피 분율 (상단)과 출구 부피 분율 (하단).

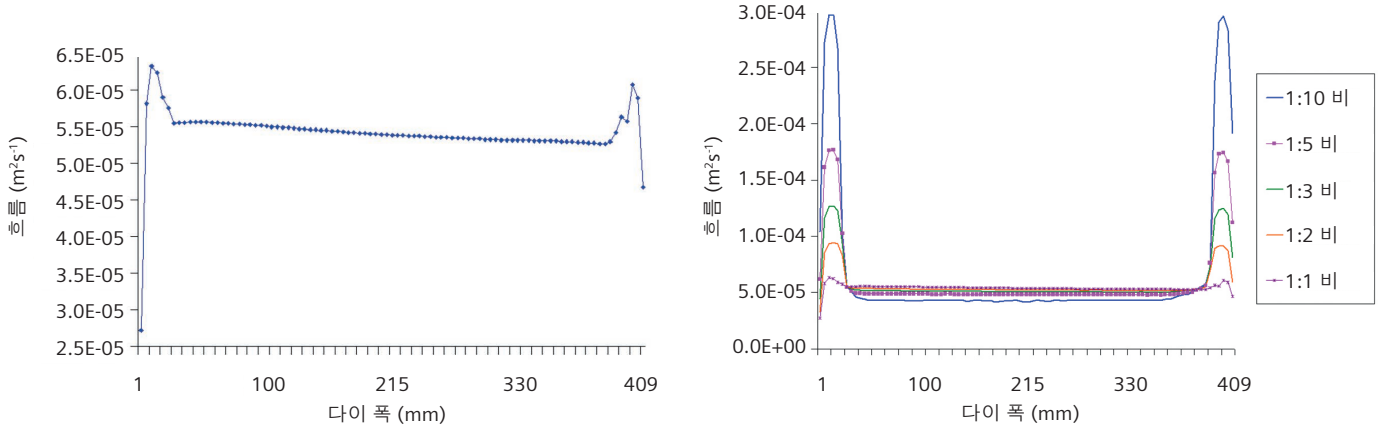


그림 9: MMD에 대한 1:1 점도 비율 (왼쪽)에 출구 전반의 흐름과 증가하는 비율에 대한 출구 전반의 흐름 (오른쪽).

원료 의약품 연속 제조를 위한 수치 시뮬레이션

전례 없는 경제적 압력과 글로벌 경쟁이 심화되면서 제약 제조사는 공정 효율과 제품 품질을 개선해 지속적으로 경쟁 우위를 확보하려고 합니다. 배치 공정인 기존 제조 공정은 더 이상 지속가능하지 않습니다. 이제는 연속 제조가 더욱 간결한 공정으로 나아가는 확실한 경로임이 분명합니다. 다중 물리 수치 시뮬레이션은 전체 시스템 가상 프로토타이핑, 최적화 및 모델링을 통해 원료 의약품 (API)의 연속 제조를 실현할 수 있는 획기적 기술로 부상하고 있습니다.

배치에서 연속 공정으로

제약 산업은 생산성 감소 문제를 겪고 있으며, 이 문제의 근본 원인은 바로 구식 배치 공정입니다. 현재의 배치 기반 시스템은 여러 시설을 거치고 배치 시작 및 중지, 사이트 간 전송, 창고 스토리지가 필요한 여러 단계가 있어 비효율적입니다. 샘플링 작업이 있고 포스트 프로덕션에서 수행되는 제품 품질 평가도 번거로워 리드 타임이 길어지고 낭비를 유발합니다.

논스톱 엔드-투-엔드 제조 공정인 연속 제조는 산업을 현대화하고 생산성 위기를 해결할 수 있습니다. 노바티스 CEO Joseph Jimenez는 최근 MIT (Massachusetts Institute of Technology) 컨퍼런스에서 배치 생산에서 연속 생산으로 전환하면 전 세계 의약품 제조 방식을 혁신하고 개발에서 출시에 이르는 시간을 절반으로 단축할 수 있다고 말했습니다 [1]. 연속 제조 공정을 구현하면 생산 플랜트 규모를 축소하고 재고 비용을 낮추며 탄소 발자국을 줄이고 제품 품질을 향상시킬 수 있습니다 [2].

규제 기관은 또한 여러가지 이니셔티브 [3, 4]와 PAT (Process Analytical Technology) 및 QbD (Quality by Design)와 같은 규제 프레임워크를 통해 연속 제조를 위한 토대를 마련하기 시작했습니다. 이는 공정에 품질을 구축하고 과학 기반의 정량화된 위험 방식을 사용해 새로운 제조 기술 개발을 장려합니다.

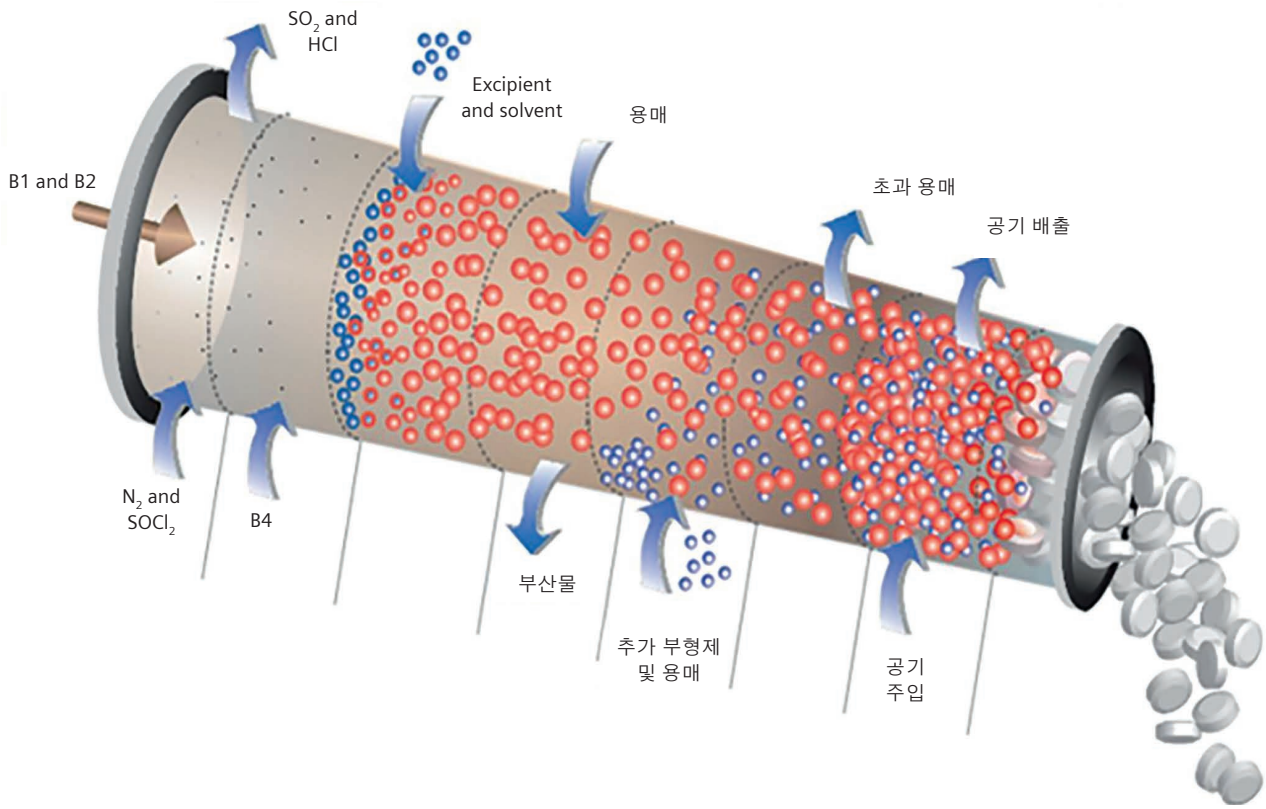


그림 1: 화학 합성 시작부터 최종 투약 형태에 이르는 초 간결 제조 (Novartis-MIT Center for Continuous Manufacturing 제공).

화학 및 식품 처리 산업 모두 연속 제조를 플랜트에 성공적으로 통합해 생산성을 향상시켰습니다. 규제 제약과 제약 산업의 보수적 사고는 의약품 제조를 21세기에 맞게 혁신하지 않으려는 변명으로 사용할 수 없습니다.

수치 시뮬레이션 및 연속 제조

연속 제조가 주류로 자리잡을 수 있으려면 적합한 후보 공정을 파악해 설계해야 하며, 위험 분석과 완화도 이뤄져야 합니다. 이는 규제 준수를 관리하고 구현용 비즈니스 사례를 형성하는 데 도움이 됩니다. 열 및 질량 전달을 비롯해 유체, 가스 및 입자 흐름의 통합 거동을 예측할 수 있는 수치적 방식인 다중 물리 CFD (computingal fluid dynamics)는 이러한 새로운 공정에 대한 이해와 설계를 향상시킬 수 있는 솔루션을 제공합니다.

가상 프로토타이핑

전통적인 제조 공정은 설계 변경이 미치는 영향을 실제 프로토타입을 사용한 실험 테스트로 파악하는 "설계-빌드-테스트" 방식을 기반으로 합니다. 현재 연속 제조에 맞는 통합 시스템을 개발하는 공급업체가 거의 없어 물리적 프로토타입을 제작에 많은 비용이 소요될 것으로 예상됩니다. 엔지니어는 수치 시뮬레이션을 통해 테스트 수행 전 제품 성능에 대한 인사이트를 제공하는 가상 실험실을 만들 수 있습니다. 이는 주요 공정과 장비 변경에 따른 불확실한 결과를 미리 평가할 수 있어 위험와 비용을 대폭 완화하는 데 도움이 됩니다.

다중 물리 CFD 및 최첨단 시각화 툴은 랩이나 실험 테스트에서 언제나 쉽게 사용할 수 있는 것이 아닌 상세 정보를 풍부히 제공합니다. 이를 통해 공정 내부 진행 상황을 자세히 알 수 있을 뿐만 아니라 혁신도 이룰 수 있습니다. 예를

사례 연구 1:
알약 코팅을 위한 DEM (Direct element modeling)

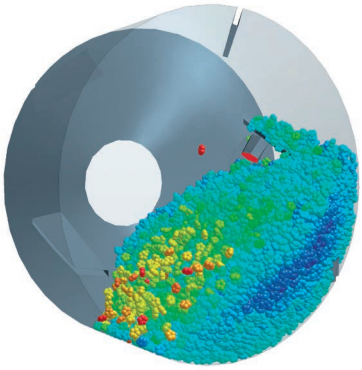


그림 2: Simcenter STAR-CCM+를 사용한 DEM 시뮬레이션은 코팅 팬에서 회전 시 알약 분포도를 보여줍니다.

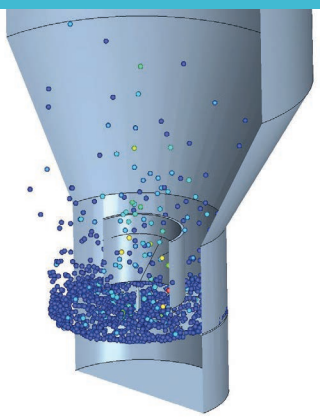


그림 3: 유동층에서 알약 코팅 두께를 보여주는 Simcenter STARCCM+를 사용한 알약 코팅용 DEM 시뮬레이션.

DEM은 상호작용하는 다수 입자의 움직임을 시뮬레이션하고 입자 간 충돌 및 열 전달로 인한 접촉력과 에너지 전달을 모델링해 수치상 효율적인 방식으로 이들을 추적합니다. DEM은 연속 코팅 공정 설계 및 최적화에서 특히 중요한데, 스프레이 선 개수와 같은 장비 설계의 중요한 요소를 파악하고 입구 온도와 같은 최적의 장비 작동 조건을 결정하는데 도움이 되기 때문입니다.

그림 2와 3은 현재 실제 알약 코팅에 사용되는 두 가지 유형의 장비인 코팅 팬 (회전 드럼)과 유동층에 대해 Simcenter STAR-CCM+가 생성한 솔루션을 보여줍니다. 이 시뮬레이션에서 DEM은 코팅층이 적용 시 입자의 무작위적 움직임을 해석하는 데 사용됩니다. 알약 코팅 균일성을 평가하고 향상시킬 수 있도록 입자 속도, 잔류 시간 및 코팅 두께 등과 같은 매개변수를 추적합니다. 알약 코팅 외에도 DEM은 충전, 필터링, 컨베이어 공정 등 제조의 다른 단계를 시뮬레이션하는 데에도 사용할 수 있습니다.

들어, 다중 물리 CFD는 연속 공정으로 제조된 의약품에 대한 새로운 반응과 분자를 탐색할 수 있습니다.

설계 탐색 및 최적화

최근 몇 년간 컴퓨팅 성능이 획기적으로 향상되고 강력한 시뮬레이션 툴이 등장하면서 생산 환경에서 수치 설계 최적화를 사용할 수 있는 길이 열렸습니다. 매개변수 연구 및 최적화는 연속 제조에 필요한 새로운, 소형화된 장비의 설계 및 튜닝에 매우 중요하며, 이 작업이 빠른 반응을 효율적으로 처리하고 유연하게 유지할 수 있도록 보장합니다.

또한 – 다양한 작동 조건과 장비 설계 매개변수에 대해 실험 설계를 통해 얻은 – CFD 생성 응답을 통계 모델과 결합해 위험을 식별하고 강력한 실시간 공정 제어를 구현할 수 있습니다. 이를 통해 가변성이 줄고 일관적이며 반복 가능한 공정이 탄생합니다. HEEDS™ 소프트웨어를 사용하는 Simcenter STAR-CCM+의 모듈인 Optimate™는 지능형 설계 탐색을 통해 가상 시나리오를 쉽게 고려하고 품질을 정의하는 중요한 제조 지점을 파악할 수 있는 툴입니다. 연속 제조에 사용하는 피드 장치는 모든 다운스트림 작업에 영향을 미치며, 피드 속도와 같은 매개변수의 설계 탐색으로 최종 혼합 균일성에 미치는 영향을 파악할 수 있습니다.

시스템 시뮬레이션

복잡한 실제 문제를 해결하려면 전체 시스템을 시뮬레이션할 수 있는 정확하고 사용하기 쉬운 포괄적인 방식이 필요합니다. Simcenter STAR-CCM+와 같은 CFD 중심 다중 물리 공학 시뮬레이션 툴은 전체 스펙트럼 엔지니어링 결과를 정확하게 전달하는 데 사용할 수 있으며, 제약 산업은 연속 제조 공정 개발을 지원하는 데 이런 도구를 최대한 활용해야 합니다. 지금까지는 생산 환경에서 수치 시뮬레이션을 통합하려면 전문 지식이 많이 필요했지만, 더 이상 이건 문제가 되지 않습니다. 자동화 및 사용 편의성으로 복잡한 다중 물리 애플리케이션에 CFD를 적용할 수 있습니다.

Simcenter STAR-CCM+의 경우 단이 통합 환경에서 최첨단 메싱, CAD와의 완벽한 통합 및 복잡한 이동 부품을 모두 간편히 모델링할 수 있습니다. 이를 통해 엔지니어는 시뮬레이션을

사례 연구 2:
혼합용 EMP (Eulerian multiphase) 모델링

그림 4: Simcenter STAR-CCM+를 사용해 가스 주입 속도 증가 효과를 보여주는 혼합기 모델.

EMP 모델링은 다상 흐름에서 상호작용하는 스트림과 무작위로 분산된 상에 대해 알아볼 수 있는 효과적인 수단을 제공합니다. Simcenter STAR-CCM+의 EMP 모델에는 기포 및 액적에 대한 분해 및 유착 모델, 입자에 대한 세부 흐름 모델과 같은 다양한 하위 모델이 포함돼 있습니다. 그림 4는 세 개의 회전 임펠러가 있는 기액 혼합기의 EMP 시뮬레이션을 보여줍니다. 가스 주입 속도가 가스에 미치는 영향이 나타나 있습니다. 상 전반에 걸친 질량 전달과 그에 따른 반응 속도를 제어하는 매개변수인 가스 홀드업을 예측하는 능력은 이러한 반응기 설계를 가능케 하는 핵심 요소입니다. 이 방식은 연속 제조의 혼합 및 여러 공정에 사용할 수 있는 실용적 솔루션을 개발하기 위한 의사 결정 기준을 파악할 수 있는 중요한 과학적 근거를 제공합니다.

준비하고 설정하는 대신, 데이터를 해석하는데 더 많은 시간을 할애해 성공적인 엔지니어링 작업을 할 수 있습니다. 연속 제조를 큰 그림에서 보려면 문제 해결에 다중 물리 방식을 적용해야 합니다. 혼합, 코팅, 건조, 다상 흐름 등은 의약품 처리 산업의 핵심에 있습니다. 다수의 소입자 상호 작용을 계산하는 수치 방식인 DEM (discrete element modeling)과 시스템의 여러 단계를 시뮬레이션하기 위한 수치 방식인 EMP (Eulerian multiphase modeling)와 같은 기능은 API (application programming interfaces) 연속 제조를 구현하는 데 중요한 역할을 합니다. 본 자료에 소개된 두 건의 사례 연구가 이러한 기능을 잘 보여줍니다.

결론

경쟁이 치열한 오늘날의 환경에서 제조는 공정에 품질을 반영하는데 주력하며 한층 간결한 형태로 나아가야 합니다. 제약 산업을 위한 연속 제조는 의약품 제조 방식을 혁신할 것이며, 다중 물리 CFD 시뮬레이션은 새로운 장비 및 공정의 설계를 위해 빠른 프로토타이핑을 수행할 수 있는 비용 효율적인 방식을 제공합니다. 특히, 설계 최적화 툴과 DEM, EMP와 같은 강력한 다상 모델이 중요한 역할을 하며, 제약 산업은 이러한 최신 기술을 활용해 연속 제조 공정을 설계하고 구현해야 합니다.

참조

1. "A Defining Moment : The Future of Manufacturing in the US," Presented at The Future of Manufacturing in the US Conference, MIT, May 8-9, 2012.
2. Plumb, K. Continuous Processing in the Pharmaceutical Industry: Changing the Mindset, Chemical Engineering Research and Design, 2005, 83, 730-738.
3. "The FDA Critical Path Initiative and its Influence on New Drug Development," Woodcock J., Woosley, R. , Annu. Rev. Med. 2008. 59:1–12.
4. "Pharmaceutical cGMPS for the 21st century" - A Risk Based Approach (http://www.fda.gov/ohrms/dockets/ac/03/briefing/3951B1_02_Pharmaceutical%20cGMPs.pdf).

알약 및 코팅을 위한 수치 시뮬레이션

고형 알약 제조 공정은 생산 시 오류와 공정 제어 미흡으로 인해 안정성과 견고성이 부족한 경우가 많습니다. 전례 없는 경제적 압박을 마주한 제약 제조사는 제품 품질과 공정 생산성을 향상시키기 위한 방법을 지속적으로 탐색하고 있습니다. 다중 물리 수치 시뮬레이션은 가상 프로토타이핑 및 최적화를 통해 효율성을 높이고 품질을 향상시키며 출시 시간을 단축할 수 있는 획기적 기술로 부상하고 있습니다.

고형 알약 제조에 따르는 과제

분말을 고형 알약 형태로 압축하는 정제화와 알약 코팅은 알약 제조 공정에서 알약의 무게와 두께, 밀도, 경도, 최종 고형 코팅을 결정하는 중요한 두 단계입니다. 이들 속성이 조금이라도 달라지면 릴리스 프로파일과 약효에 부정적 영향을 미칠 뿐만 아니라 알약의 붕해 및 용해 특성을 변화시켜 알약 결함 및 벌크 패키징 및 운송 과정 중 파손을 유발합니다.

논스톱 엔드-투-엔드 공정과 같은 새로운 제조 공정 채택 및 품질과 효율성을 생산성에 적용해야 하는 압력을 받는 고형 알약 제조사는 강력하며 반복 가능한 공정으로 한층 우수한 제품을 선보일 수 있는 주요 요소와 요구사항을 정확히 파악해야 하는 과제를 마주하고 있습니다.

왜 수치 시뮬레이션일까요?

다중 물리 CFD (computingal fluid dynamics)는 열 및 질량 전달을 비롯해 유체, 가스 및 입자 흐름의 통합 거동을 예측할 수 있는 수치적 방식입니다. 수치 시뮬레이션을 사용하면 물리적 테스트를 수행하기 전에 설계나 공정을 검증할 수 있는 장점이 있습니다. 새로운 정제 형태나 코팅 재료를 개발하는 경우 예상치 못한 변수를 방지하고 예기치 못한 공정 매개변수를 파악하며 확장 문제를 해결하기 위해 시간과 비용이 많이 드는 실험을 여러 차례 수행해야 합니다. 수치 시뮬레이션을 사용해 이러한 영향을 연구하면 시간과 재료, 개발 비용을 크게 줄일 수 있습니다. 또한 수치 시각화 툴은 실험 테스트에서 언제나 쉽게 사용할 수 있는 것이 아닌 상세 정보를 풍부히 제공합니다. 이를 통해 공정 내부 진행 상황을 자세히 알 수 있을 뿐만 아니라 혁신도 이룰 수 있습니다.

Simcenter STAR-CCM+™ 는 이 솔루션을 제공합니다.

Simcenter™ STAR-CCM+™ 소프트웨어는 자동화된 다면체 메시 기술과 포괄적 물리 모델을 제공해 제약 산업이 다양하게 응용할 수 있는 완벽한 다분야 시뮬레이션 툴킷입니다. 알약 제조 공정 시뮬레이션에 특히 적합한 Simcenter STAR-CCM+의 기능은 수치 흐름 시뮬레이션과 완전히 결합돼 단일 소프트웨어 환경에서 제공되는 DEM (discrete element modeling)입니다.

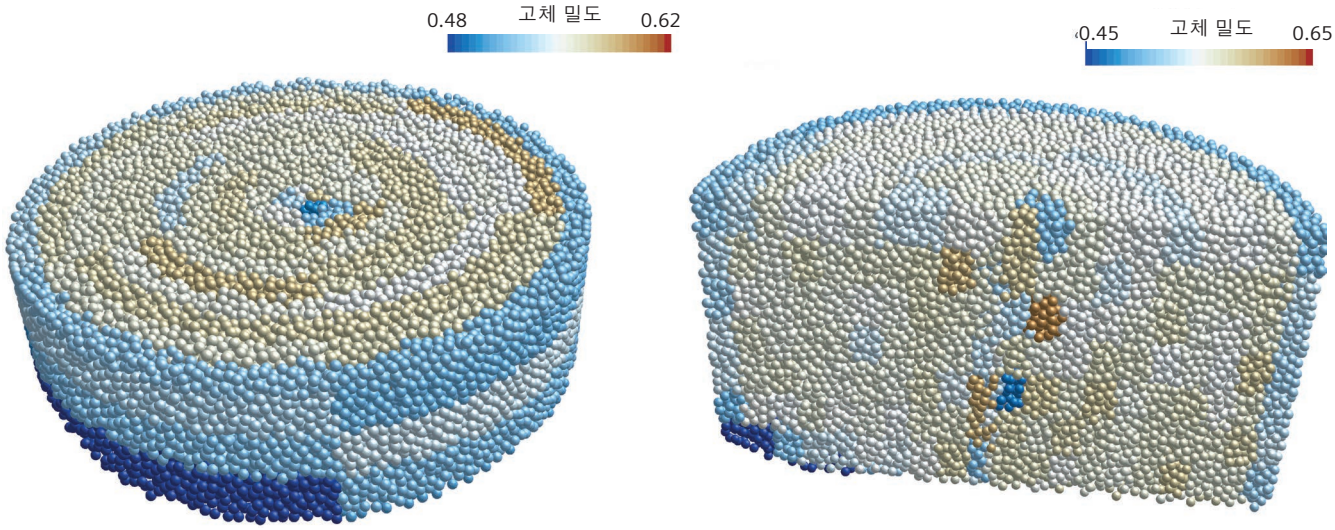


그림 1: DEM을 사용한 Simcenter STAR-CCM+ 시뮬레이션은 정제 다이 내부에 포장 및 압축된 의약품 분말을 보여줍니다. 색상 변화는 과립 분포 불균일성을 나타냅니다.

정제와 코팅 작업에는 서로 상호작용하는 다수의 개별 입자와 이를 둘러싼 유체가 포함됩니다. DEM은 이러한 상호작용을 정확하게 추적하고 입자와 유체 간 충돌과 열 전달로 인한 접촉력과 에너지 전달을 모델링 합니다.Simcenter STAR-CCM+의 DEM 기능은 합리적인 시간 내에 백만 개 이상의 입자로 치밀한 입자 흐름을 예측할 수 있어 충전, 압축/압착, 코팅 및 건조와 같은 실제 알약 제조 공정을 해석하는 데 유용합니다.

그림 1은 태블릿 프레스에서 Simcenter STAR-CCM+ 프리컴프레션 시뮬레이션을 통해 얻은 결과이며, 이를 활용해 압축 과정에서 공기 포집과 미세 입자 이동에 따라 발생할 수 있는 캡핑 (capping)과 같은 흔한 문제를 해결할 방법을 찾을 수 있습니다. DEM은 입자가 프리컴프레션 중에 빈 공간으로 재배치 및 이동될 때 입자 간/다이와의 상호작용을 추적하는 데 사용됩니다. 이 시뮬레이션은 과립 분포의 균일성을 자세히 살펴보고 압축 시작 전 미세 입자가 제자리에 고정되게 하는 데 필요한 최적의 프리컴프레션 성능과 체류 시간을 결정할 수 있어 흔히 발생하는 정제 작업 시 오류가 크게 줄어 듭니다.

입자-유체 상호 작용을 사용한 DEM 시뮬레이션은 정제 품질을 가늠하는 중요한 매개변수인 필름 코팅 두께의 균일성을 평가하는 실용적 솔루션을 제공합니다. 그림 2는 DEM을 사용해 코팅 층이 적용되는 동안 궤적이 변하는 과정에서 입자의 무작위 이동을 분석하기 위해 유동층에서 코팅 공정에 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 실시한 시뮬레이션을 보여줍니다. 입자 속도, 체류 시간 및 코팅 두께와 같은 매개변수는 시뮬레이션 중에 모니터링됩니다. 이 기능은 지능형 설계 지원하는 Simcenter STAR-CCM+의 모듈인 Optimate™에 목적 함수로 피드해 노즐 간격 같은 장비 설계에 중요한 요소를 파악하고 최적의 장비 작동 조건을 결정할 수 있습니다.

Simcenter STAR-CCM+에는 새로운 라그랑지안 패시브 스칼라 기능이 있어 코팅 두께와 그 외 정제 특징을 쉽게 모니터링 할 수 있습니다. 그림 3은 70,000개 이상의 정제가 공업용 코터에서 회전하는 모습을 보여줍니다. 이 연구의 목표는 텀블러 내 최적의 분사 장비 설정을 결정해 입자 간 코팅 균일성을 향상시키는 것입니다. 코팅 두께를 나타내는 두 개의 라그랑지안 패시브 스칼라가 정의됩니다:

경쟁이 치열한 오늘날의 환경에서 고형 알약 제조는 공정에 효율성과 품질을 갖추는 데 주력해 이뤄져야 합니다. 이는 다중 물리 시뮬레이션을 사용한 신속한 프로토타이핑과 최적화로 달성할 수 있습니다.

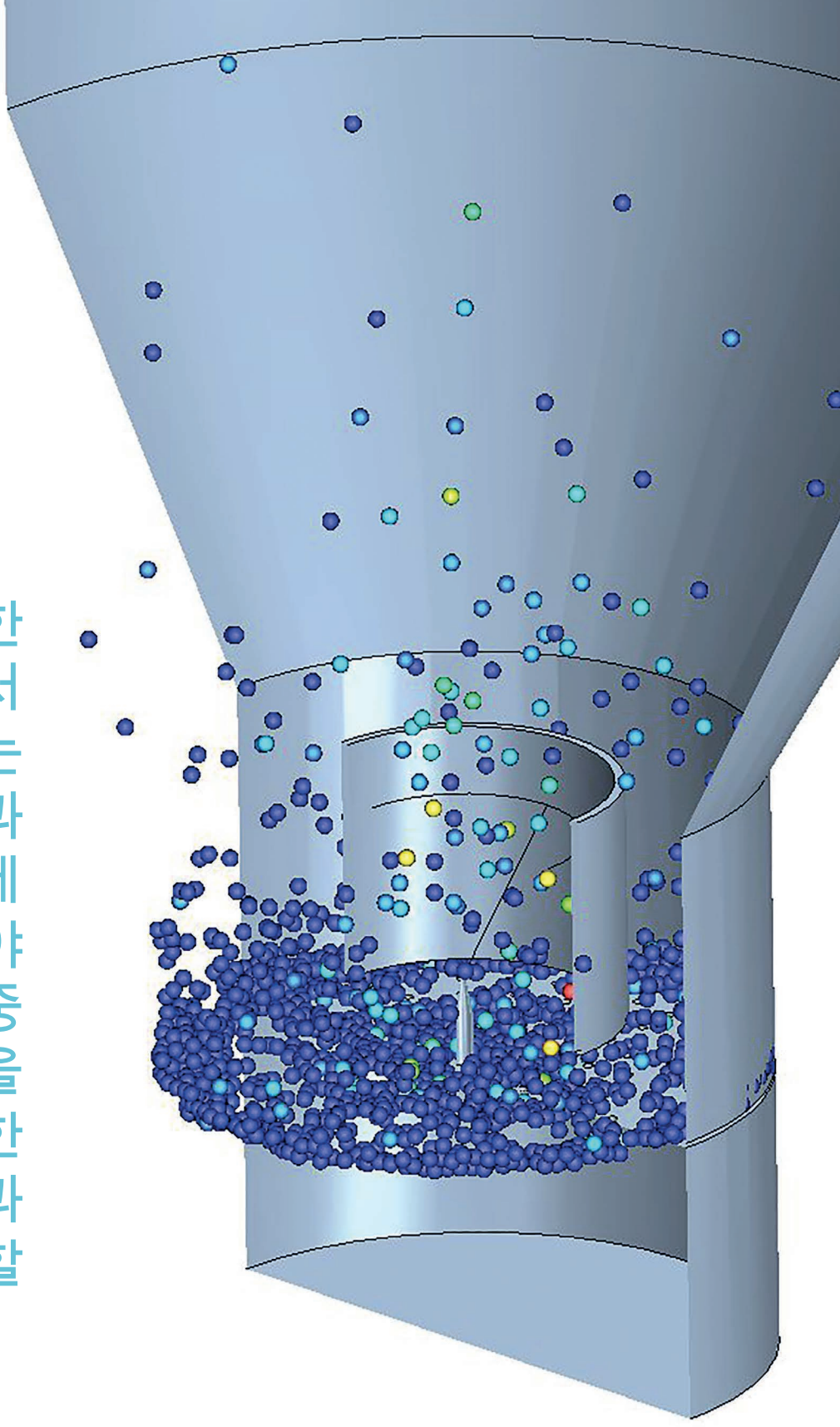
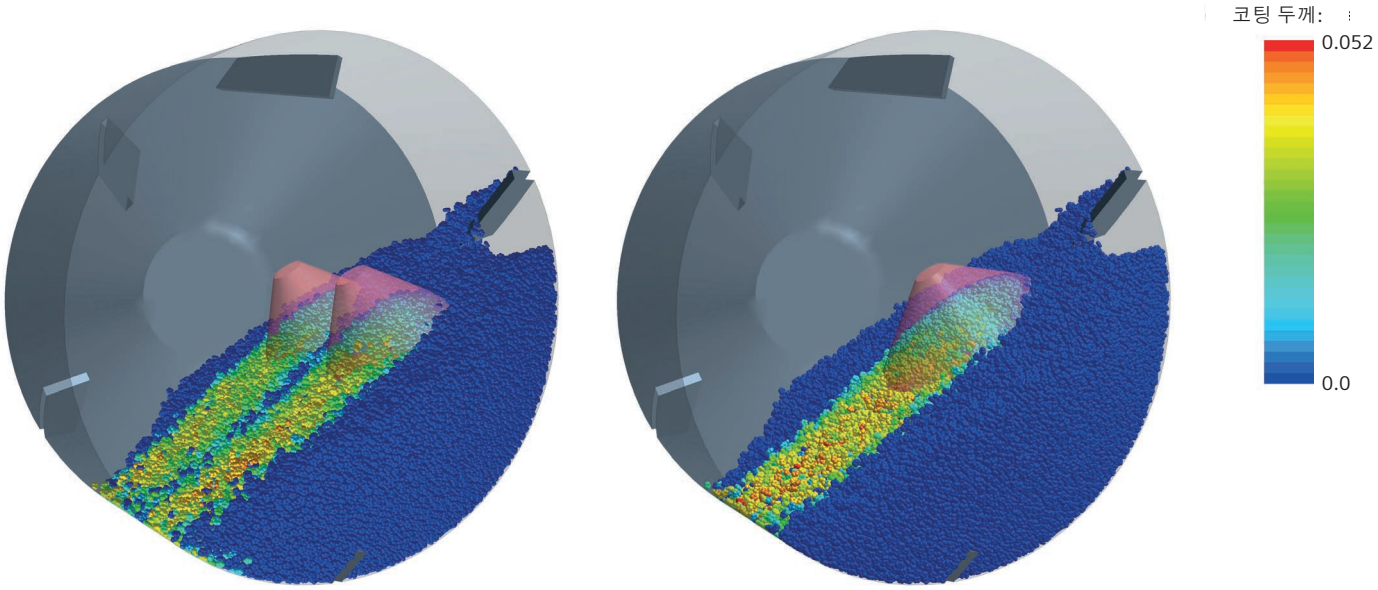


그림 2: 유동층에서 수행되는 코팅 공정의 Simcenter STAR-CCM+ 시뮬레이션.



하나에는 표면 상의 하나의 원뿔에 한정된 소스 부피가 있으며, 다른 하나에는 두 개의 원뿔에 한정된 소스 부피와 첫 번째 패시브 스칼라와 동일한 효과적인 분사 영역이 있습니다. 이 방법을 사용하면 단일 시뮬레이션으로 두 가지 다른 분사 영역에 대한 입자 간 코팅 균일성을 비교할 수 있으며, 결과적으로 2-분사 구성으로 한층 균일하게 코팅할 수 있음을 알 수 있습니다.

결론

경쟁이 치열한 오늘날의 환경에서 고형 알약 제조는 공정에 효율성과 품질을 갖추는 데 주력해 이뤄져야 합니다. 다중 물리 CFD 시뮬레이션은 신속한 프로토타이핑과 최적화로 이러한 목표를 달성할 수 있는 비용 효과적인 방법을 제공합니다.

강력한 DEM 및 새로운 패시브 스칼라 기능을 비롯해 Simcenter STAR-CCM+이 제공하는 고급 물리 모델을 사용하면 정제 및 코팅과 관련된 복잡한 유동장을 쉽게 처리할 수 있습니다. 제약 업계 사용자는 이 최신 기술을 최대한 활용해 품질을 향상시키고 비용을 절감하며 출시 시간을 단축할 수 있는 혁신적인 방안을 모색할 수 있습니다.

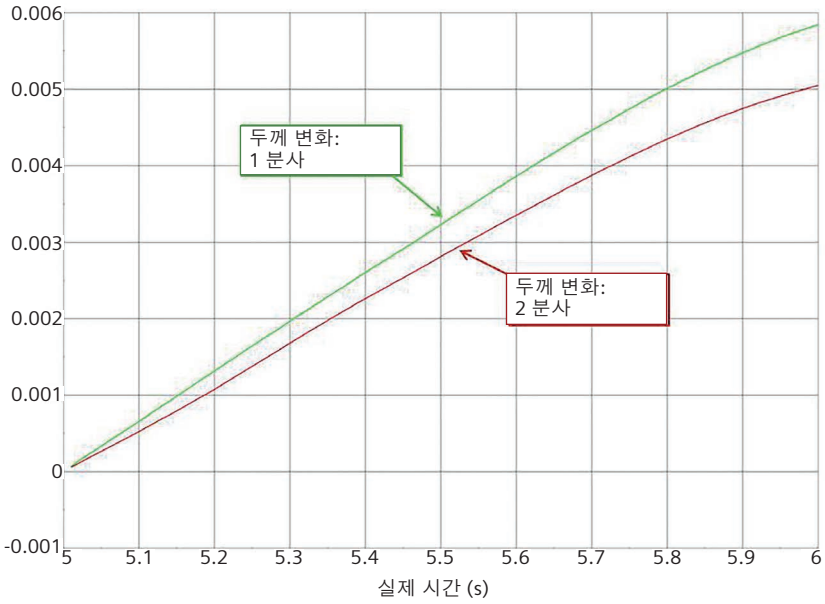


그림 3: 텀블러에서 1과 2 분사의 코팅 두께 변화를 비교하는 Simcenter STAR-CCM+ 시뮬레이션.

CFD로 백신 제조 공정 보안 구축

Creaform은 실내 지오메트리의 3D 재구성을 완벽히 수행하고 이를 사용해 상세 CFD 시뮬레이션을 수행해 클린룸 설계를 지원해 달라는 요청을 받았습니다. 이 클린룸은 독감 백신 제조에 사용되며, 이 연구의 목표는 오염 위험을 완화할 수 있는 효율적인 공기역학적 장벽을 설계하는 것이었습니다. 이 데모는 효과적이었으며, CFD 시뮬레이션은 의약품 규제 준수에 여전히 사용되는 기존 스모크 테스트로는 해결할 수 없었던 현상을 조명했습니다.

들어가는 말

이 연구에서 의약품 클린룸은 높은 수준의 오염 방지에 필요한 중요한 환경입니다. 이 클린룸은 B 등급 환경이지만, RABS (Restricted Access Barrier System) 내부는 차폐 장벽과 HEPA (high-efficiency particulate air) 공기 청정 필터 기능으로 보호되므로 A 등급 영역으로 구분됩니다. 백신 충전 기계는 RABS에 통합돼야 하는데, 이는 설치 전 제조사나 통합업체가 예측할 수 없는 여러 특정 흐름 상호작용을 발생시킵니다. 이에 기계의 비멸균성 구성요소를 둘러싼 적절한 흐름 경로가 확보되도록 유체 흐름 거동을 완벽히 파악해야 합니다. 클린룸 관련 규제 준수도 중요하지만 분당 수 백 개 바이알 충전이 진행되는 놀라운 생산 속도를 고려하면 오염은 상당한 재정적 손실 뿐만 아니라 백신 낭비를 불러올 수 있습니다. 이런 맥락에서 Creaform의 3D 모델링 및 CFD 솔루션이 상당히 유용했습니다. Creaform의 엔지니어링 팀은 3D 스캐너로 생성한 것과 같은 기본 STL 파일을 사용해 CAD 소프트웨어에서 클린룸을 수치적으로 재현하고 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 CFD 시뮬레이션을 수행했습니다.

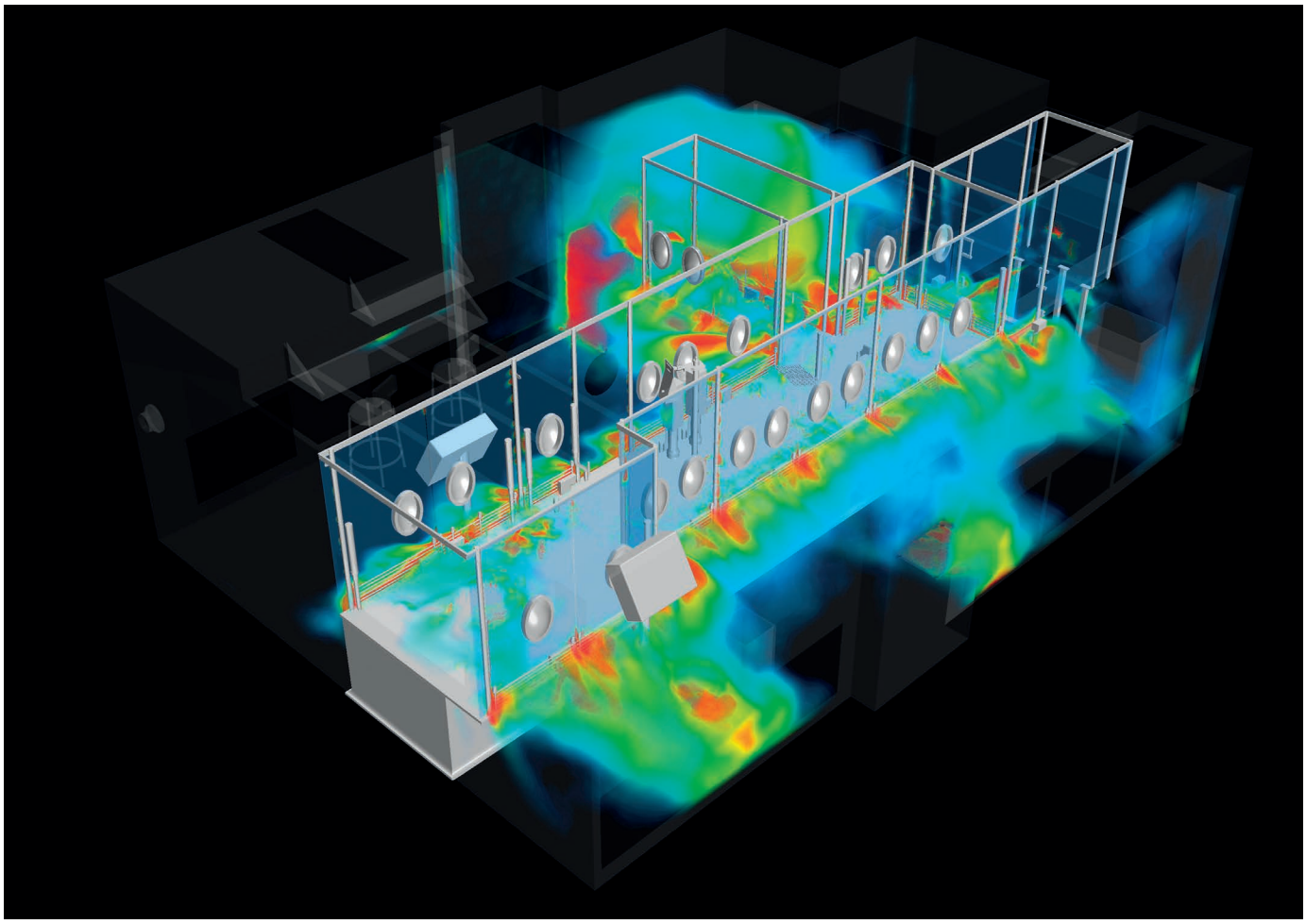
이해관계자

Creaform

Creaform의 사명은 생산성을 향상시키는 최첨단 휴대용 3D 측정 및 해석 기술을 개발하고 제조하며 시장에 선보이는 것입니다. Creaform은 전문성 및 임직원의 열정과 헌신으로 제조 기업들이 3D에서 원활히 제품을 생성하고 시뮬레이션하며 검증 및 협업할 수 있도록 지원해 소요 시간과 수익성을 크게 향상시킵니다. Creaform은 3D 엔지니어링 서비스 부서와 더불어 운송, 에너지, 환경, 토목, 전자 및 난방, 환기 및 공조 (HVAC) 등 여러 분야에서 CFD 시뮬레이션 기술을 개발합니다. 여기에 소개된 프로젝트에서 Creaform은 전체 의약품 생산 라인과 주변 클린룸을 CAD로 표현하고 작동 중인 RABS 및 HVAC 시스템 공기 흐름의 CFD 시뮬레이션을 수행하며 공기역학 디플렉터를 평가해 흐름 거동과 비멸균성 구성요소를 최적화 했습니다.

Laporte consultants Inc.

Laporte는 바이오 제약, 식음료 및 산업 공학을 전문으로하는 컨설팅 기업입니다. 임직원들은 공정, 건축 및 인프라, 자동화, 패키징 및 규제 준수 등 다양한 분야에 서비스를 제공해 온 경험을 갖추고 있습니다. 이 프로젝트에서 Laporte는 의약품 제조 시설 업그레이드를 위한 공정 설계, 설치 및 시운전을 담당했습니다. 이 작업에는 HVAC 설계와 RABS 시스템에 충전



기계를 통합하는 작업이 포함됩니다. Laporte는 또한 규제 준수에 사용되는 사전 스모크 테스트도 진행했습니다.

계산 기하학

CFD 해석 수행 시 가장 골치 아픈 점은 사용할 수 있는 지오메트리가 없다는 점입니다. 제작된 도면이 미완성이거나 지오메트리가 시간이 지남에 따라 변경되기 때문에 수치 지오메트리를 신뢰할 수 없다는 점은 더욱 골치 아픈 점입니다. 이런 상황에서 엔지니어는 CFD 결과에 계속 의문을 품게 됩니다. Creaform은 효율적인 3D 스캐닝 솔루션을 제공해 고품질 수치 표현을 보장합니다. 또한 Creaform은 또한 계측 등급 정확도와 해상도를 제공하는 사용하기 쉽고 빠른 휴대용 스캐너를 제조합니다. HVAC 산업의 CFD 애플리케이션의 경우 Creaform 엔지니어는 미드레인지 스캐너로 작업한 실내 전체 스캔을 자체 핸드헬드 스캐너 중 하나를 사용한 특정 파트의 정밀 스캔을 통합합니다. 이를 통해 의약품 클린룸 용으로 제작된 것과 같은 클린 STL 파일이 생성됩니다.

클린룸 계산 기하학에는 벽과 가구, HEPA 필터, HVAC 시스템, 글러브드 액세스가 있는 물리적 장벽 (생산 라인 주변 창), 제어 패널 및 바이얼 누적 테이블이 있는 RABS, 컨베이어, 충전용 바늘, 캡핑 기계 및 여러 계측 기계 등이 포함돼 있으며, 이들 모두 Simcenter STAR-CCM+의 래핑 기능 덕분에 CFD 시뮬레이션에서 사용할 수 있습니다.

그림 2: Creaform의 핸드헬드 MetraSCAN을 사용한 실내 스캔.

시뮬레이션:

클린룸 시뮬레이션에는 정확하며 제대로 표현된 경계 조건이 중요합니다. 가장 최근의 데이터를 수집해 신중하게 경계 조건을 결정했습니다.

- HEPA 여과 시스템의 각 디퓨저에 대한 풍속 프로파일을 제공하는 층류 장비 성능 평가
- 환기 덕트를 포함한 HVAC 시스템의 환기 균형 측정
- 컨베이어 벽 구멍 및 도어 윤곽을 통한 2차 공기 흐름에 대해 인접한 실내에서 정확한 압력 측정.

난류 모델링은 RANS 방식, 즉 SST (Menter) k-omega 모델을 사용해 이뤄져 결과를 정상 상태로 제한합니다. 많은 벽 근처 셀이 경계 층의 완충 영역에 들어가 All y + Wall Treatment가 사용됐습니다. 점성 저층 해석을 강제하기 위한 전체 표면 제어는 계산 비용이 많이 들고 불필요하다는 판단이 이뤄졌습니다. 실제로 점성력 계산이 필요하지 않으며, 절삭 에지에서 흐름 분리가 발생해 예측이 큰 소용이 없었습니다. 결과적으로 이 메시는 다면체이며 프리즘 레이어를 사용하지 않습니다. 우선 순위화된 셀 세분화는 기계 구성요소의 상세 표면을 캡처한 것으로, 초기 실행 (설정 확인 및 초기 솔루션)에서는 560만, 최종 실행에서는 1,860만 셀 수를 기록했습니다. 시뮬레이션은 2차 이산화와 결합된 유동 모델을 사용했습니다.

결과

전체 압력 분포

컨베이어 레벨 바로 위의 이상 유량 조건은 완벽한 수직 유량으로 구성됩니다. 그러므로 수평면에서의 압력 분포가 매우 중요하며, RABS 내에서 최대한 균등해야 합니다. 첫 번째 클린룸 CFD 시뮬레이션은 RABS 내부의 속도 벡터에 종 방향 구성요소를 유도하기에 충분한 작은 압력 구배를 보여줬습니다. Laporte 엔지니어들은 캡핑 섹션의 압력을 재분배하기 위해 디플렉터를 설계했으며, 바이알 축적 부분의 압력 증가를 유발하는 칸막이를 제거했습니다. HEPA 여과 모듈식 조정과 더불어 이 수정으로 RABS의 압력 분포가 크게 향상됐습니다 (그림 5 참조). CFD 시뮬레이션은 새로운 설계로 수행한 스모크 테스트와 연관되며, 개선 효율성이 확인됐습니다.

횡 방향 흐름

Laporte와 Creaform은 종 방향 흐름이 수정된 상태에서 비멸균 기계 구성요소 부근 횡 방향 속도 구성요소를 집중적으로 살펴봤습니다. CFD 시뮬레이션은 바늘 홀더 주변과 캡핑 암 주변의 두 가지 바람직하지 않은 상황을 강조해 나타냈습니다. 두 구성요소는 모두 비멸균이며, 물리적 장벽 아래 공기 구배는 상당한 종 방향 속도 구성요소를 유도합니다. 그림 6 (a)에서 볼 수 있듯 이 현상은 암과 접촉하는 입자를 톱니형 판 레벨에서 전달되는 바이알 쪽으로 보냅니다. 그림 6 (b)에서 볼 수 있는

그림 3: 바이알 컨베이어의 육면체 메시.

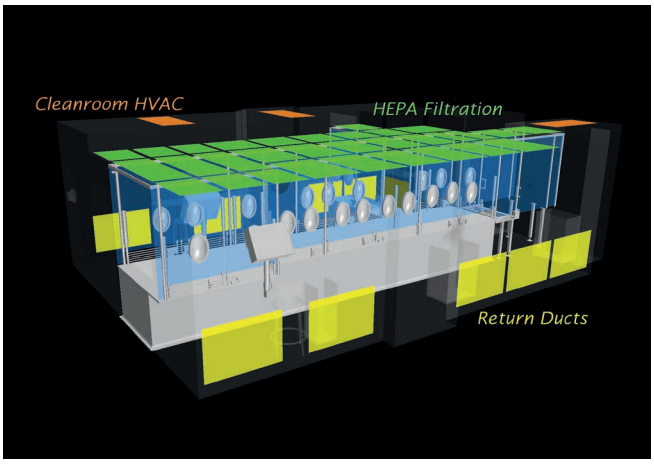


그림 4: 주요 경계 조건.

공기역학 디플렉터는 시뮬레이션으로 테스트 했으며, 공기 구배가 기계 바닥으로 이동하는 현상을 촉발했습니다. 이로 인해 암 근처 흐름선이 컨베이어 하부에 도달하게 해 오염된 입자가 바이알에서 멀리 떨어뜨렸습니다. 바늘 홀더 레벨에서 비슷한 디펙터가 사용됐습니다. Laporte가 설계해 가공을 위해 아웃소싱한 후 이 디플렉터는 현장에서 스모크 테스트를 거쳤으며, CFD 해석이 예측한 대로 상당히 우수한 성능을 보였습니다.

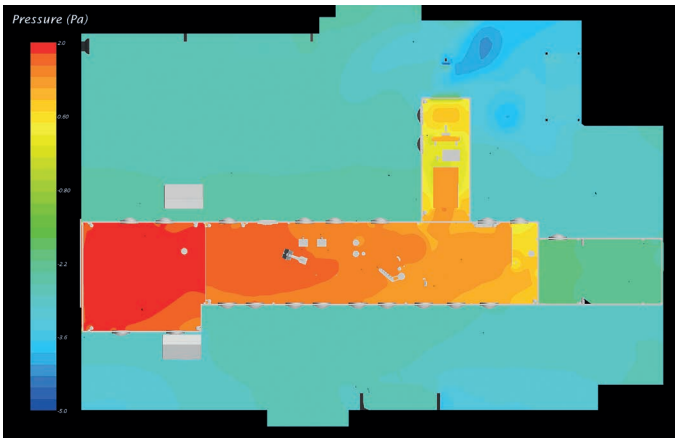
충돌 흐름

CFD 시뮬레이션으로 해결하는 세 번째 부정적 상황은 비멸균 표면의 흐름 방행로 인해 발생하는 축적 테이블과 컨베이어 디스크 상황입니다. 두 경우 모두 파트는 수평 표면을 수직 흐름에 직접 노출시켜 정체 지점과 바람직하지 않은 소용돌이를 유발합니다.

생산 라인 시작 부분에 있는 테이블에서 열린 바이알이 축적돼 테이블 외부 엣지 인근에 원형 패턴이 형성됩니다. 이 테이블에는 중앙에 구멍을 설계해 일부 충돌 흐름이 바이알에 닿지 않고 배출되게 했습니다. 그럼에도 일부 흐름선은 외부 엣지를 통해 대피해 그림 7에서 볼 수 있듯 연속 바이알을 통과합니다. 중앙의 구멍을 통과하는 흐름에 대한 헤드 손실을 감소시키기 위한 여러 수정 사항을 시뮬레이션으로 테스트 했으며, 결과는 일부 성공적이었습니다. 그 다음 외부 엣지를 통한 대피에 대해 실제 오염 위험을 파악하는 데 주력했으며, 바이알 주변의 흐름에 대한 특정 시뮬레이션을 수행했습니다. 실제 바이알을 모델링 한 이 상세 시뮬레이션은 전역 시뮬레이션 필드를 사용하여 경계 조건을 결정했습니다. 정상 상태에서는 테이블과 접촉하는 전체 흐름이 바이알 숄더를 통해 대피해 (그림 8 참조) 오염 위험이 제한되는 것으로 나타났습니다. Laporte는 축적 테이블에 대한 구체적인 클리닝 절차를 제안했습니다.

비멸균 컨베이어 디스크의 경우 와류로 둘러싸인 정체 지점을 유도해 결과적으로 바이알 경로를 통해 입자를 운반합니다. Laporte는 솔리드 디스크로서의 초기 설계에 대해 의문을 제기했으며, 디스크를 다시 제조해 구멍을 추가해 기계 하부로의 대피를 수월하게 했습니다. 이 변경 사항은 CFD

Creaform은 수치 시뮬레이션 상담 서비스를 제공하며, 소프트웨어 스캔에서 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 원시 스캔을 포함한 모든지 지오메트리를 신속히 처리할 수 있습니다. Siemens 전문가는 스캔과 다른 가용 데이터를 사용해 지오메트리를 수치적으로 재구성한 후 CFD 시뮬레이션을 수행해 비용과 중간 작업을 줄일 수 있습니다.



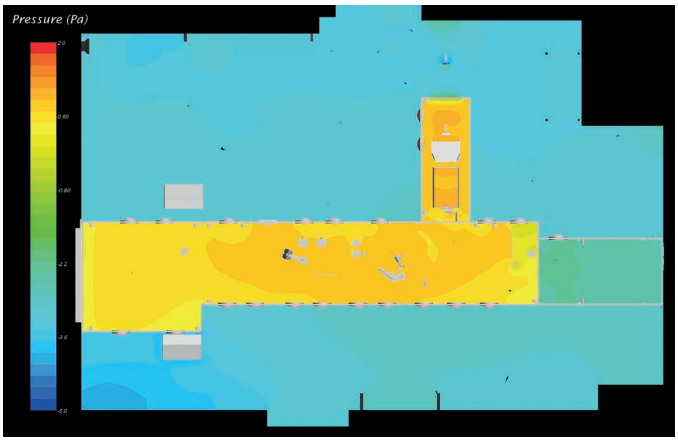
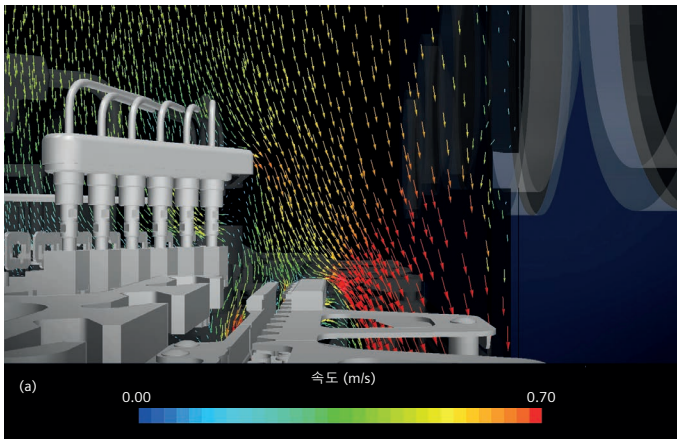


그림 5: 수평면에서의 압력 분포 – 설계 조정 전 (위) 및 이후 (아래).



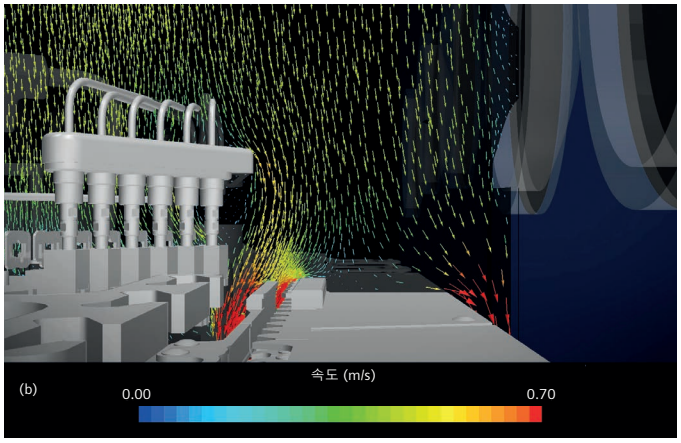


그림 6: 캡핑 암 엘보의 section plane에서의 속도 벡터 - 원본 설계 (위), 공기역학적 디플렉터로 수정된 설계 (아래).

모델과 스모크 배출로 테스트 했으며, 두 방법 모두 문제를 억제시킨다는 점이 확인됐습니다.

결론

이 프로젝트는 Simcenter STAR-CCM+를 사용하는 Creaform 엔지니어링 서비스 팀의 리버스 엔지니어링 솔루션과 CFD 기능의 상호 보완적 측면을 설득력 있게 보여주는 사례였습니다. 또한 기존 스모크 테스트를 보완하기 위해 예측 인사이트를 얻기 위해 클린룸 커미셔닝에 CFD를 사용한 Laporte의 혁신적인 방식을 분명히 보여줬습니다. 여기 나타난 CFD 결과는 현재 스모크 테스트 영상과 함께 규제 기관에 공기역학적 장벽의 효과를 입증하는 데 사용됩니다. CFD는 사용자가 흐름 기능을 시각화하는 데 도움이 되므로 현재까지의 피드백은 매우 긍정적입니다. CFD를 미래 의약품 생산 라인에서 서 폭 넓게 사용되는 툴로 만들고자 하는 것이 Creaform의 바람입니다 이를 위해서는 기계의 비멸균 구성요소 주변의 적절한 흐름 경로를 보장할 수 있도록 유체 흐름 거동을 완벽히 이해해야 했습니다. 클린룸 관련 규제 준수도 중요하지만 분당 수 백 개 바이알 충전이 진행되는 놀라운 생산 속도를 고려하면 오염은 상당한 재정적 손실 뿐만 아니라 백신 낭비를 불러올 수 있습니다. 이런 맥락에서 Creaform의 3D 모델링 및 CFD 솔루션이 상당히 유용했습니다. Creaform의 엔지니어링 팀은 3D 스캐너로 생성한 것과 같은 기본 STL 파일을 사용해 CAD 소프트웨어에서 클린룸을 수치적으로 재현하고 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 CFD 시뮬레이션을 수행했습니다.

그림 7: 누적 테이블 상의 충돌 흐름.

스캔, *CAD* 재구성 및 *CFD* 해석을 위한 *Creaform*의 통합 솔루션은 무형 공기 흐름과 관련한 의문점에 정확한 시각적 답변을 제공했습니다.

그림 8: 테이블과 밀착해 바이알 숄더를 통해 탈출하는 흐름선.

여기가 점점 뜨거워집니다! Zeeco, Simcenter STAR-CCM+을 사용해 히터 오작동 미스터리 해결

들어가는 말

엔지니어링 컨설팅에서 시의 적절하게 효율적으로 고객의 당면 과제를 해결하는 것은 비즈니스의 핵심입니다. 그러므로 문제를 해결할 유능한 엔지니어를 확보하는 것과 더불어 알맞은 툴을 갖추는 것도 중요합니다. 이 글에서는 유능한 엔지니어가 최신 수치 시뮬레이션 소프트웨어 솔루션과 만나면 효율적이며 효과적인 가상 문제해결 툴이 탄생하는 예시를 보여줍니다. Zeeco Inc.는 버너, 플레어 및 소각로 엔지니어링 설계 및 제조에 사용되는 연소 및 환경 솔루션을 제공하는 업체입니다. 또한 고객에 엔지니어링 컨설팅도 제공합니다. 컨설팅 고객 중 하나는 히터 성능이 저하되는 문제로 Zeeco를 찾았습니다. 이 글에서는 Zeeco가 Simcenter STAR-CCM+ 소프트웨어를 사용해 이 히터 문제를 해결하고 비효율적 작동을 일으킨 원인을 파악한 사례를 소개합니다.

산업용 히터 문제

문제의 산업용 히터가 그림 1에 나타나 있습니다. 모델링된 시스템에 포함된 건 바닥 양쪽의 버너, 상단의 복사 섹션 및 폭과 길이에 따라 설치된 프로세스 튜브입니다. 대류 섹션과 스택은 모델에 포함되지 않았습니다. 프로세스 튜브는 상단에서 히터로 들어오고 하단에서 빠져나가는 가공된 유체를 운반합니다. 연소용 공기 분배 덕트가 버너에 부착돼 연소를 위해 각 버너에 공기를 동일하게 분배합니다. 히터 벽은 내화 벽돌과 세라믹 섬유 모듈로 만들어집니다.

이 히터는 작동 중 다음과 같은 문제를 겪었습니다. Zeeco는 근본 원인을 찾고 해법을 제공하는 작업을 맡았습니다: 코킹: 코킹은 히터 튜브 내부에 코크스를 형성하는 것으로, 열 전달 용량을 줄입니다. 프로세스 튜브는 탄화수소 유체를 운반했으며, 유체 내에 있는 무거운 종은 코킹되기 쉽습니다. 작동 중에 프로세스 튜브 내에 코킹이 있다는 점이 파악됐습니다. 실행 기간: 이 히터는 처음에 약 10개월 간 작동하도록 설계됐습니다. 그러나 코킹 문제가 발생해 3~4개월 밖에 사용하지 못했으며, 튜브 내부의 코크스를 청소하기 위해 사용 중단해야 했습니다.

열 거동: 튜브 금속의 온도 측정값은 튜브 표면에서 불균일한 온도와 열 유속 분포를 보였습니다. 히터와 다양한 구성요소를 시각적으로 해결하는 건 정말 어려웠고 현실적이지도 않았는데, 시스템 내부에 액세스할 쉬운 방법이 없기 때문입니다. Zeeco는 히터 성능에 대한 자세한 정보를 얻기 위해 가상 시뮬레이션을 사용하기로 했습니다. Siemens의 다중 물리 시뮬레이션 소프트웨어인 Simcenter STAR-CCM+가 이 목적에 맞는 문제해결 툴로 사용됐습니다.

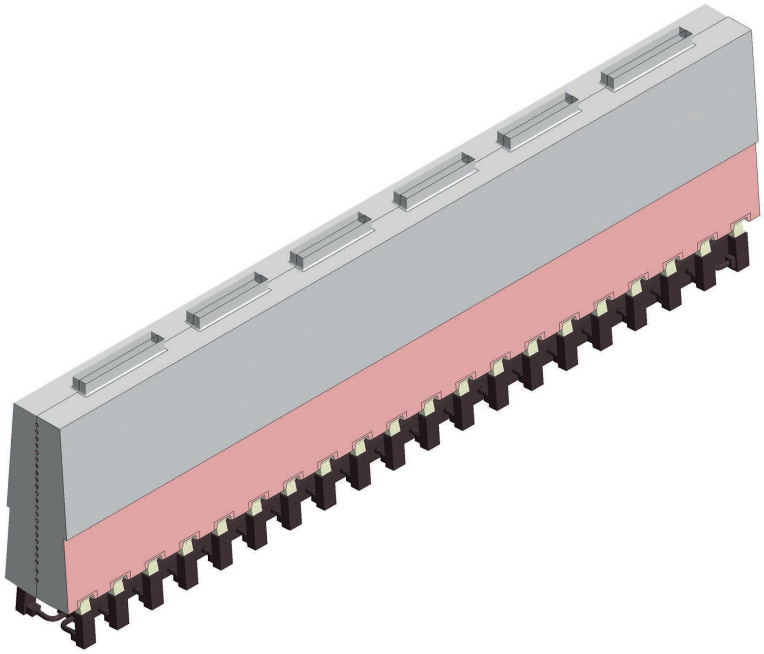


그림 1: 모델 메시를 상세히 보여주는 기어 하우징을 통한 X-컷 평면 섹션.

히터 CFD 설정

Solidworks® 소프트웨어를 사용해 히터 지오메트리의 CAD 모델 해석을 준비했습니다. 계산 모델에는 프로세스 튜브와 버너, 공기 분배 덕트가 있는 히터 복사 섹션이 포함됐습니다. 이 도메인을 트리밍된 육면체 셀 (그림 2)을 사용해 Simcenter STAR-CCM+에서 이산화했으며, 이 셀에서 나비에 스토크 (Navier-Stokes) 방정식을 풀었습니다. 약 13,000개 셀로 히터의 절반만 모델링 했으며, 나머지 절반에 대해서는 대칭 조건을 가정했습니다. 유동장과 연소를 정확하게 해석하기 위해 버너 주변에서 계산 메시를 충분히 세분화 했습니다. 히터 길이는 약 26m, 높이는 약7.6m, 너비는 약 3m이며, 비율에 맞게 모델링 됐습니다.

Simcenter STAR-CCM+의 분리된 흐름 솔버는 저속 흐름에 이상적이며, 이 사례에 사용됐습니다. 히터 내 연료 가스 혼합물은 수소와 메탄 및 프로판 같은 탄화수소를 포함하는 정제 연료 가스였습니다. Simcenter STAR-CCM+는 다양한 연소 현상을 시뮬레이션할 수 있는 완벽한 연소 모델을 제공합니다. 다성분 종 모델을 사용해 다양한 연료-가스 성분을 히터에 적용했습니다. Simcenter STAR-CCM+의 EBU (Eddy Break-Up) 모델을 사용해 계산 메시에서 평균 종에 대한 개별 수송 방정식을 풀어 이 종의 비예혼합 연소를 모델링했습니다. 히터 화염 특성을 기반으로 한 점화는 고려하지 않았으며, 표준 EBU 모델은 실현 가능한 k-ε 난류 모델과 함께 연소를 모델링하기에 충분한 것으로

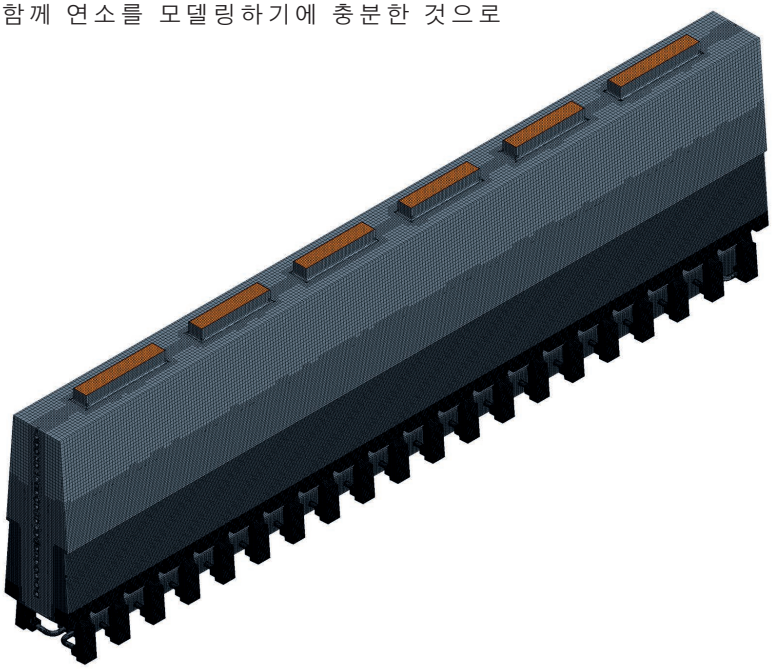


그림 2: 세 가지 오일 충전 레벨의 초기 분배.

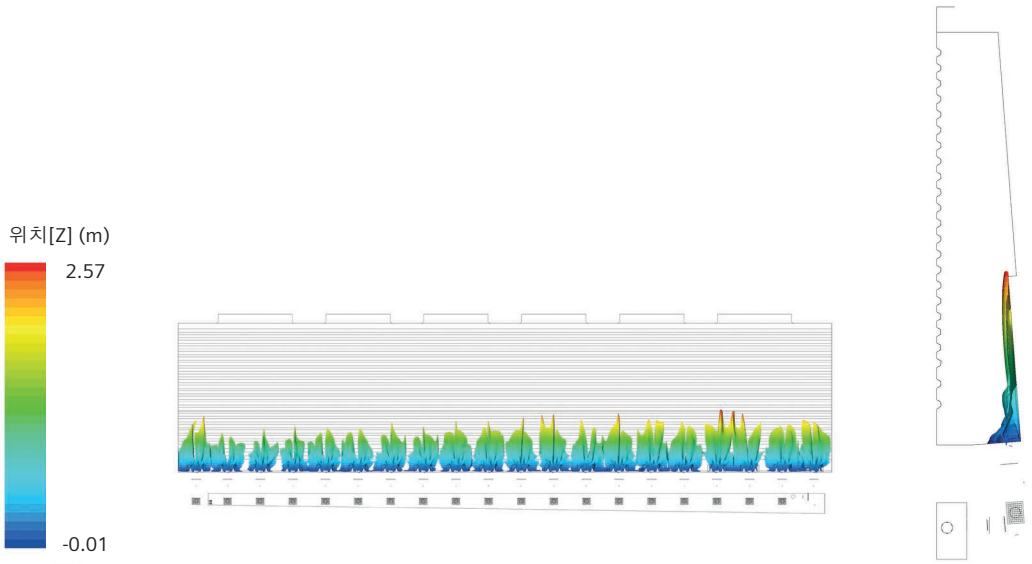


그림 3: 중간 오일 레벨에 대한 시간에 따른 오일 분배 변화.

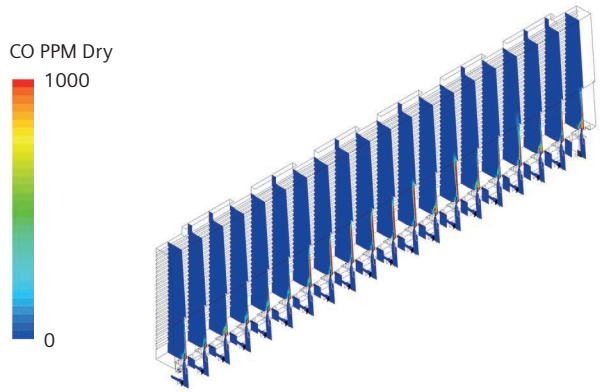


그림 4: (a) 인터메싱 기어와 (b) 기어 박스의 과도 속도 유동장 변화 간 과도 흐름 특성을 흐름선.

간주했습니다. Simcenter STAR-CCM+에서 Gray Thermal Radiation 모델을 선택해 복사를 설명했습니다.

시뮬레이션으로 히터 문제 파악

그림 3은 연소 출력 종의 등위면으로 묘사한 연소 화염 프로파일을 보여줍니다. 연소 공기는 오른쪽에서 왼쪽으로 분배 덕트로 유입되며, 연소 가능한 공기가 감소하면서 화염 높이가 오른쪽에서 왼쪽으로 감소합니다. 맨 왼쪽 버너는 맨 왼쪽 특수 덕트 설계로 불꽃 높이를 높여 비정상적인 동작을 나타냅니다. 히터 관찰 구멍을 통해 화염 (측면도)이 측벽에 근접한 것을 육안으로 확인했습니다. 그림 4는 각 버너의 중앙 평면에서의 일산화탄소 (CO, 왼쪽)와 미연소 탄화수소 (오른쪽) 농도를 나타내며, CO가 빠르게 연소되는 모습을 보여줍니다. 연소 완료가 문제가 아니란 걸 알 수 있습니다. 그림 5는 각 버너의 중앙 평면에서의 산소 레벨을 보여줍니다. 산소 농도 정량

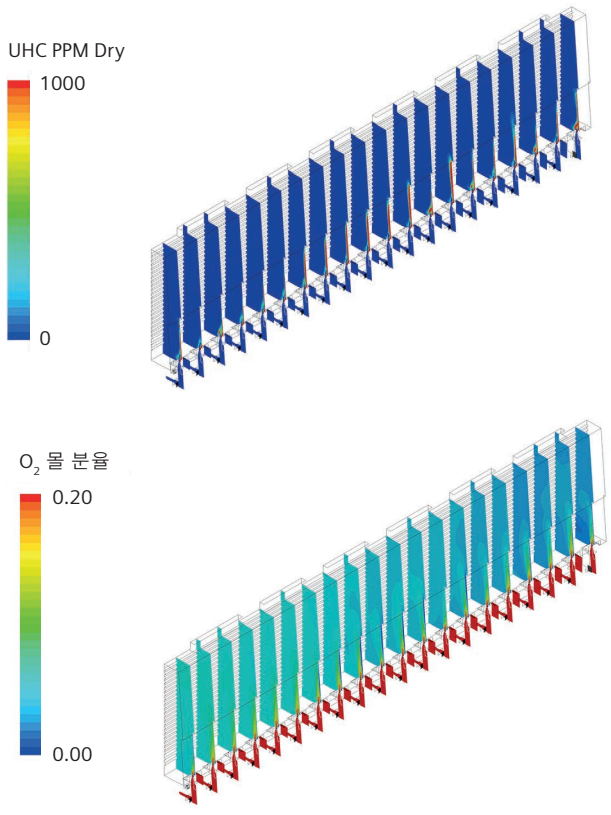


그림 5: 기어 박스에서 시간에 따른 압력 조건 변화.

해석은 과잉 산소가 약 5%임을 보여주며, 이는 히터 설계에 따른 것입니다.

프로세스 유체가 상단에서 히터로 들어가고 하단에서 빠져

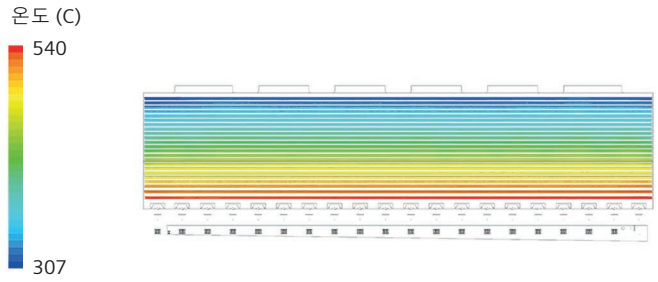


그림 6: 인터메싱 기어 간 및 1/3 r에서 (추가적으로 1/2 r 충전 레벨에 대한) 세 가지 오일 충전 레벨에 대한 부피 분율.

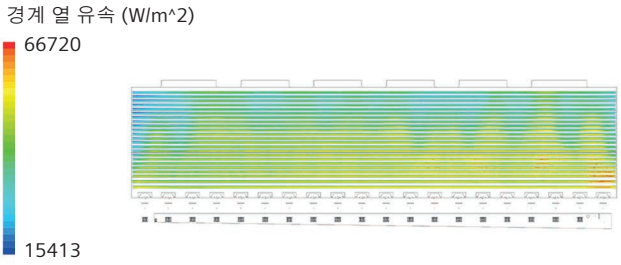


그림 7: a) 기어 박스 내 오일과 b) 1/3 r, 1 r 후 기어 측면의 부피 분율.

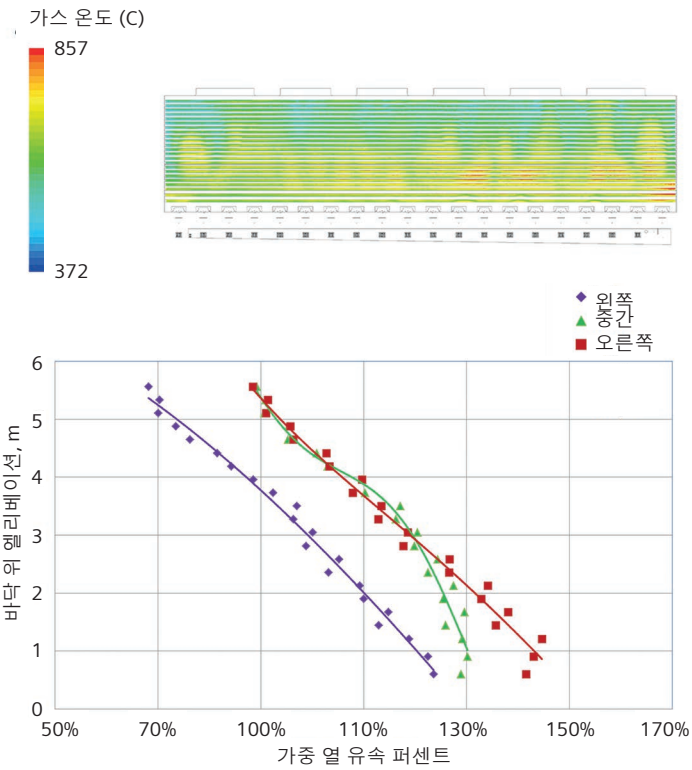


그림 8: 기어 1과 기어 2 측면에서 오일의 부피 분율의 일시적 증가.

나오면서 온도가 상단에서 하단으로 갈수록 증가합니다. 그림 6과 같이 튜브 금속 온도의 시각적 해석으로 이 동작이 확인됩니다. 튜브의 연도 가스 온는 오른쪽이 더 뜨겁고 왼편은 더 낮은 온도임을 보여줍니다.

어떤 히터든 최적으로 작동하려면 튜브 표면에 적절한, 균일한 열 유속 분포가 필요합니다. 열 유속 분포가 불균등하면 가열 성능이 떨어지며 히터 내부의 탄화수소가 코킹되기 쉽습니다. 그림 7은 튜브 표면의 열 유속 분포를 보여줍니다. 열 유속 분포를 해석하기 위해 히터의 왼쪽과 오른쪽, 중간 부분을 조사합니다. 다양한 위치에서의 가중 열 유속은 플롯 1의 세 개 섹션에 대해 비교됩니다. 가중 열 유속은 모든 튜브 표면의 전체 평균 열 유속 대비 로컬 열 유속 비율을 나타냅니다. 왼쪽 튜브 표면이 오른쪽 표면보다 열을 덜 흡수함을 알 수 있습니다.

히터 문제와 제언

공정 히터의 경우 열 전달과 열 유속이 적은 히터 내부의 높은 엘리베이션과 달리 연소 화염이 히터에 들어가는 낮은 레벨에서 높은 열 유속을 볼 수 있는 것이 일반적입니다. 엘리베이션이 낮아 보이는 플롯 1을 보면 왼쪽은 가중 열 유속이 125%인 반면, 오른쪽은 145%입니다. 이것은 오른쪽 튜브 표면이 왼쪽보다 20% 더 많은 열을 흡수해 이 높은 온도에서 탄화수소가 코킹되는 것을 보여줍니다. 따라서 히터 기능이 저조한 이유는 이 튜브 표면의 열 전달 분포 때문인 것으로 파악됩니다. 흐름 패턴을 변경하기 위해 연소 공기 분배 덕트 내부에 더 많은 배플 플레이트와 터닝 베인을 적용하는 것을 권장합니다. 이는 모든 버너에 한층 균일하게 공기를 분배해 어느 한 쪽이 과다하게 가열되는 현상을 줄여줍니다.

Zeeco는 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 히터 작동을 성공적으로 시뮬레이션하고 히터 오작동의 원인을 파악했습니다. 성능을 향상시키기 위한 제언은 수치 시뮬레이션에 기반해 이뤄졌습니다. Zeeco는 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 고객의 엔지니어링 문제를 시의 적절하게 비용 효율적인 방식으로 해결했으며, Simcenter STAR-CCM+의 기능을 모든 엔지니어링 컨설팅 조직의 핵심 무기로 사용할 수 있는 역량을 강화했습니다.

불량 진동 파악: Porter McGuffie, 히터 진동 문제 해결

대부분의 엔지니어에게 골칫거리는 설계 과정에서 고려하지 않은 물리를 처리하고 이로 인해 발생하는 문제를 해결하는 일입니다. 이 현상은 엔지니어링 분야에서 만연하며, 장비 운영 문제는 갖가지 다른 방식으로 발생합니다. 일부 예상치 못한 물리적 거동은 쉽게 수용하고 바로잡을 수 있습니다. Porter McGuffie가 자주 경험하는 문제들처럼 진단하고 해결하기가 훨씬 더 어려운 것들도 있습니다.

미국 텍사스 캔자스주 로렌스 소재 계산 역학 및 엔지니어링 측정 서비스 기업인 PMI (Porter McGuffie, Inc.)는 다양한 분야에 FEA 및 CFD 해석을 지원하는 엔지니어링 솔루션을 제공합니다. 이들이 해석을 요청 받는 한 가지 특정 설계 문제로는 히터 유닛 내부 배관이 요란한 소리를 내며 육안으로 식별할 수 있는 수준으로 흔들려 작업자를 놀라게 하는 현상입니다. 히터 배관이 흔들리는 이 문제의 원인 (그림 1)을 알 수 없었습니다. 진동 변위는 특정 작동 조건에서 각 방향으로 약 1인치였습니다. 이 정도 진동은 안전한 작동 수준으로 보기엔 너무 높은 것으로 간주됐습니다. 진동을 줄이기 위해 단위 처리량을 크게 낮춰야했습니다.

PMI는 해석 작업에 착수하기 위해 히터가 설치된 현장을 방문했습니다. 파이프 진동을 정확하게 측정하기 위해 가속도계를 히터 배관에 부착했습니다. 측정 결과 (그림 2에 표시된 위치에서 얻은)를 보면 그림 3에 나타난 것처럼 10Hz 및 9Hz 주파수에서 가장 큰 진동이 발생했음을 알 수 있습니다. 이후 해석을 통해 이 주파수는 시스템 내 두 개의 개별 루프의 기계적 공진 주파수로 파악됐습니다. 진동 데이터를 추가 해석해 진동 진폭의 엔벨로프에 주기성이 있다는 점을 알 수 있었습니다. 1차 주기의 지속 시간은 약 27초이며, 2차 주기의 지속 시간은 약 13.5초입니다 (그림 4 참조). 이 진폭 변동은 히터 내 두 루프 사이를 앞뒤로 오가며, 한 루프는 ~10Hz에서, 다른 하나는 ~9Hz입니다. 이 진폭 변동은 두 루프 사이에서 약 180도 위상차를 보였습니다.

이 데이터를 사용해 PMI는 진동 수준 변화를 2상 증류 스트림의 수소 흐름과 연관시킬 수 있었습니다. 수소 유량이 변화하는 원인을 파악하기 위해 PMI는 히터 배관 시스템에서 CFD 해석을 수행해 Simcenter STAR-CCM+에서 전체 유량 체계를 재현했습니다. 설정에서는 Simcenter STAR-CCM+ 오일러 다상 모델을 사용해 파이프의 가스 및 액체상 종을 추적하고 S-감마 서브모델을 사용해 개별 액적의 크기를 추적했습니다.

이 모델의 섹션 내에서 다양한 수량을 추적할 수 있도록 입구 파이프, 대류 섹션, 교차 섹션, 복사 섹션 및 출구 티의 다섯 개 영역을 생성했습니다. 히터 조건을 정확하게 파악하기 위해 PMI는 시뮬레이션 내의 모든 엘보와 파이프에 상당한 수의 3D 포스 모니터를 설정하고 액체와 가스 모두에 대해 각 섹션

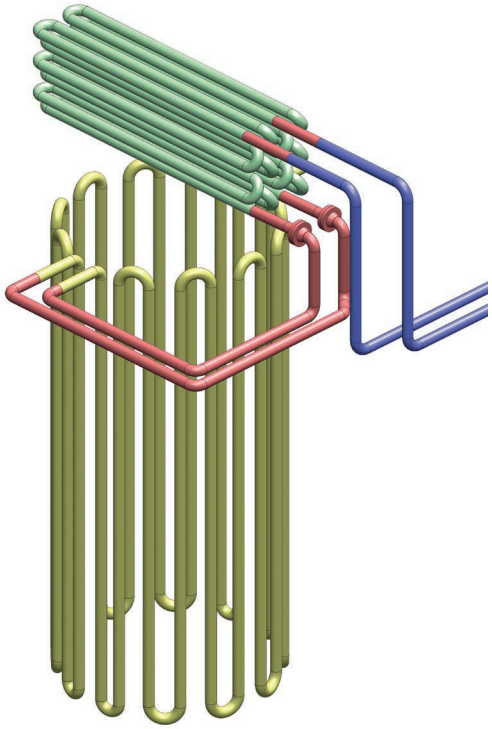


그림 1: 섹션별로 색상이 지정된 배관 형상.

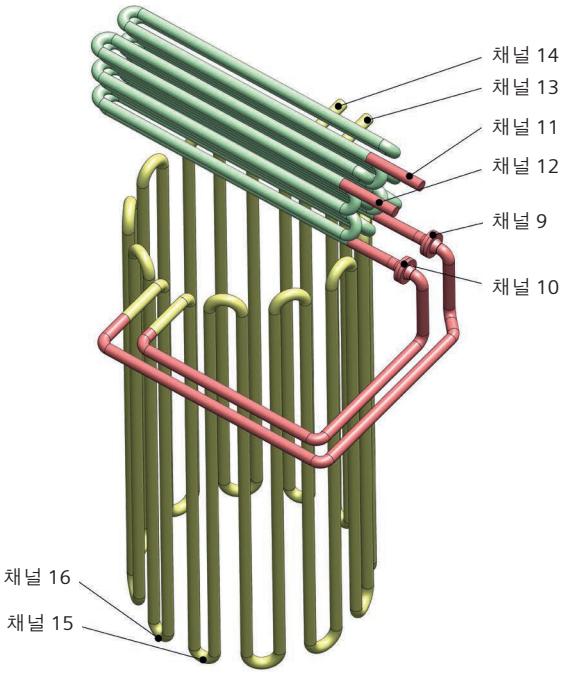


그림 2: 테스트 시스템에서 가속도계 위치.

입구 압력과 질량 유량 모니터를 설정했습니다. 스틸 이미지와 애니메이션을 육안을 확인해 시뮬레이션 내에서 흐름 영역을 파악했습니다. 그림 5A는 압력의 피크주기 진동이 표시된 하나의 압력 그래프의 빠른 푸리에 변환(FFT)을 보여줍니다. 그림 5B는 각 흐름 구성에 대해 복사와 대류 섹션을 통해 측정하고 시뮬레이션한 압력 펄스 주기를 보여줍니다. 명확히 볼 수 있듯 시뮬레이션하고 측정한 주파수 계산이 일치해 모델에서 쿼리한 시간 도메인 압력과 포스 이동을 신뢰할 수 있습니다.

시뮬레이션 결과를 통해 층화 흐름으로 특징화된 대류 영역의 흐름 패턴의 진동이 없다는 점을 확인할 수 있습니다. 반면 복사 섹션의 흐름 체계를 보면 매우 불안정한 유동 패턴을 유발하는 상당한 환형 슬러깅 (액상이 가스 중심 코어로 벽을 따라 흐르는 것)이 나타났습니다 (그림 6). 형성된 슬러깅 패턴은 배관 진동 주파수와 일치합니다. 이러한 슬러그 패턴은 복사, 교차 및 대류 섹션에서 측정한 압력 펄스와도 관련이 있습니다. 이는 진동 원인을 규명할 수 있는 정황 증거를 제공하기에 충분하지만, Porter McGuffie는 이에 만족하지 않고 PMI 자체 커플링 소프트웨어를 사용해 Simcenter STAR-CCM+ 실행을 유한 요소 해석 코드인 Algor와 결합해 조사를 이어 나갔습니다. PMI는 CFD 시뮬레이션의 FL (force load) 데이터를 적용해 파이프 변위를 예측할 수 있었습니다 (그림 7). 빨간색 하이라이트 된 부분은 히터에서 가장 진동이 심한 부분을 나타냅니다. 그림 8은 FEA 예측 가속도에 중첩된 측정 가속도를 비교한 것이며, 명백한 상관관계를 확인할 수 있습니다.

이를 통해 Porter McGuffie는 히터 진동 진폭이 그렇게 높았던 이유에 대해 고객에 상세히 설명할 수 있었습니다. 복사 섹션의 2상 흐름이 시뮬레이션의 복사 섹션에 상당한 압력 변화를 발생시켜 H2 라인에서 질량 흐름 변동이

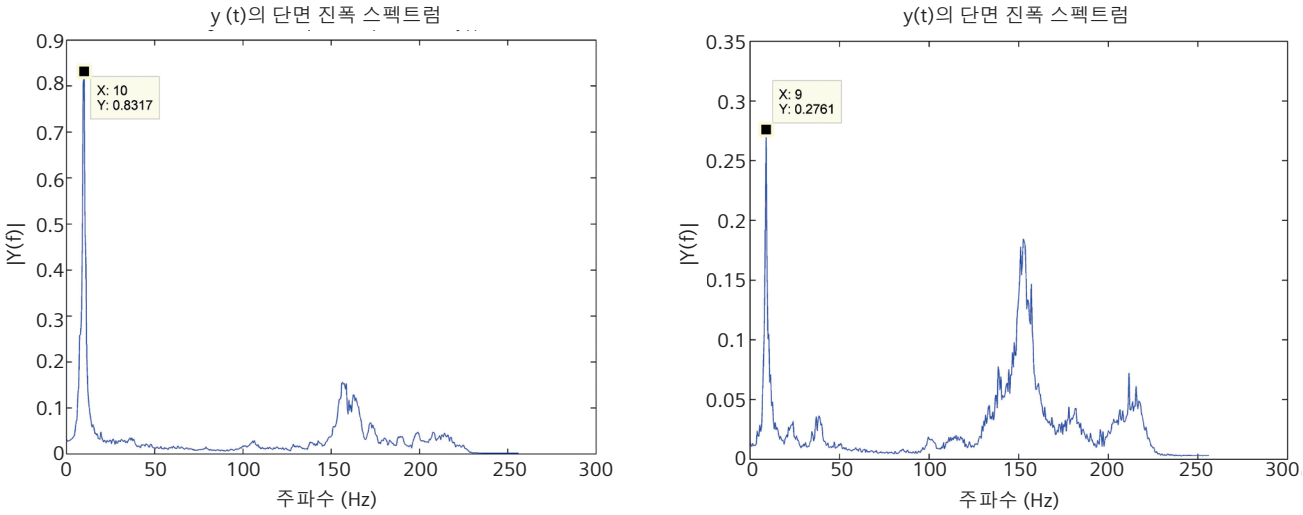


그림 3: 9와 10 위치에서 측정한 진동 주파수.

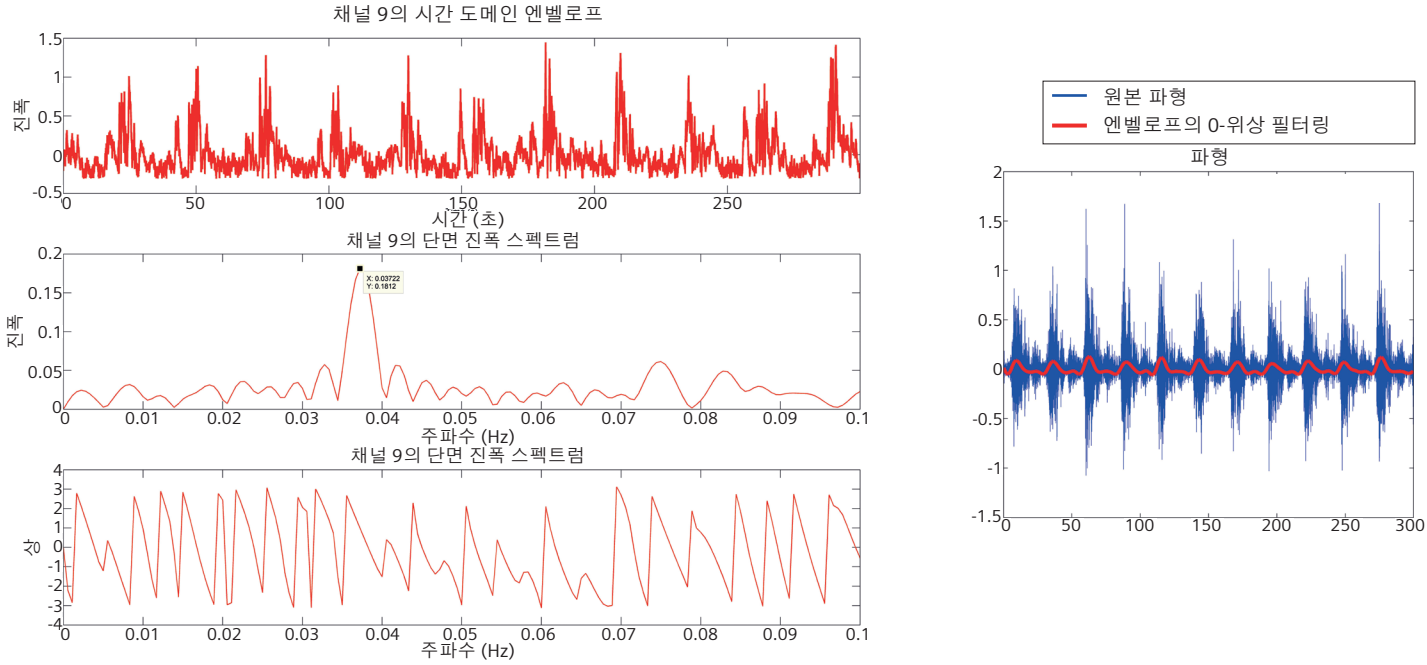


그림 4: 진동 진폭의 주기성 해석.

일어났습니다. 압력 변화는 현장에서 측정한 수소 흐름 진동 주파수와 질적으로 일치했습니다. CFD 시뮬레이션과 구조적 진동 해석에서 예측한 힘 크기도 측정 데이터와 일치했습니다. 추가로 진행한 실험과 시뮬레이션을 통해 맥동 유동의 진폭은 전체 처리량에 따라 다르지만 배관 진동 주파수는 일정하게 유지됨을 알 수 있었습니다. 이것 역시 측정 데이터와 일치했습니다. 이를 통해 배관의 공진 모드가 여기됐다는 점을 확실히 알 수 있습니다.

PMI는 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 몇 주 만에 측정과 시뮬레이션을 완료할 수 있었습니다. S-감마 서브모델과 오일러 다상 모델로 12개 프로세서 코어에서 수 백만 셀을 사용해 약 일주일 만에 대규모 2상 시스템 해석을 완료할 수 있었습니다. 정확한 격자 밀도를 사용하는 기존의 VOF (volume of fluid) 모델 방식을 사용했다면 시뮬레이션 당 500억 개 이상의 셀이 필요하고 실행에 몇 주가 소요됐을 것입니다.

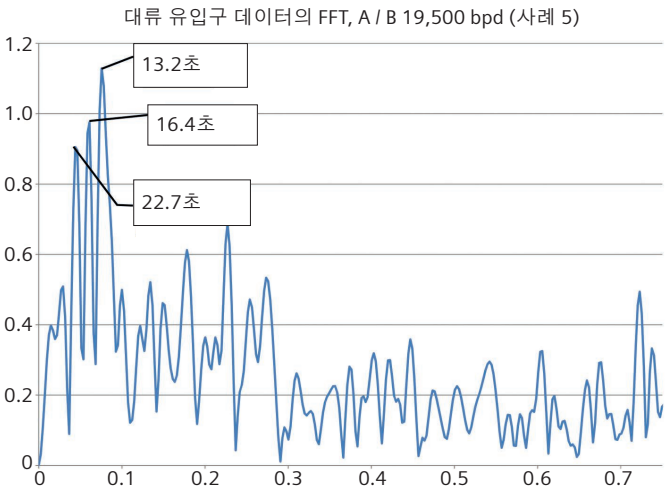


그림 5A: 시간에서 주파수 영역까지 압력의 FFT.

사례 #	입구 구성	흐름 구성	근사 측정 지속 시간 (s)	1차 CFD 계산 지속 시간 (s)
1	감소	A/B 14,500	13.3	11
2		A/B 19,500	27	23
3		C/D 14,500	13.3	14
4		C/D 19,500	27	29
5	교환기 출구까지	A/B 19,500	27	27
7		A/B 24,500	24.5	22
8		A/B 35,000	N/A	19

그림 5B: 측정한 실험 데이터와 CFD 결과 비교.

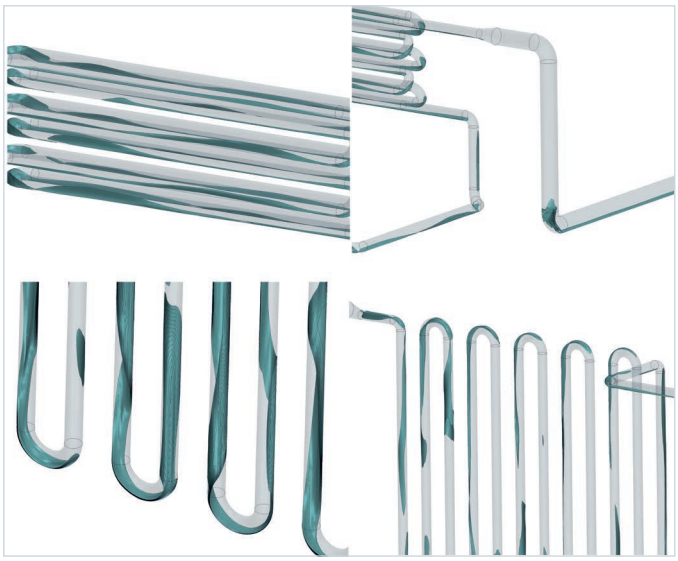


그림 6: CFD로 계산한 파이프 액체 흐름, 심한 슬러깅을 보여줌.

PMI 수석 엔지니어 Mike Porter는 Simcenter STAR-CCM+를 사용한 시뮬레이션 없었다면 파이프 내 유체 흐름을 볼 수 없었을 것이며, 문제를 진단하고 바로잡기 위한 해석과 연구에 몇 달이 걸렸을 것이라고 말했습니다. 결과적으로 Porter McGuffie는 전체 테스트와 해석을 수행하고 제언을 토대로 몇 주 내에 재설계할 수 있었으며, 기존 방식과 툴을 사용했다면 이 작업을 다 하는 데 몇 달이 걸렸을 겁니다.

오는 10월에 PMI가 제시한 변경사항이 반영되면 문제의 히터는 제대로 작동할 수 있게 됩니다. Porter McGuffie는 해석 및 설계 솔루션 성공률 100%를 이어나갈 것이며, 이는 대부분의 엔지니어링 기업과 대기업 엔지니어링 부서가 부러워 할 점일 것입니다.

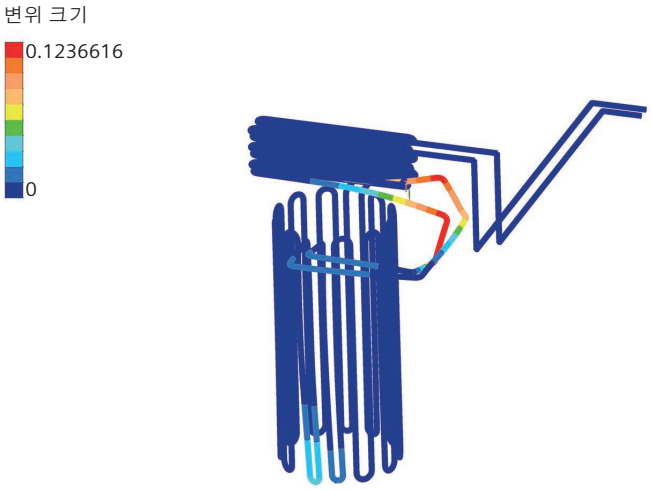


그림 7:CFD로 계산한 유량 파이프 변위, 가장 큰 진동의 위치를 정확히 예측.

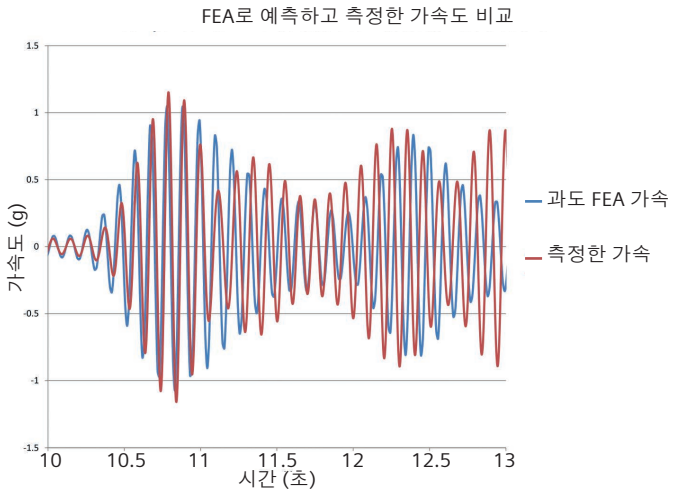


그림 8: FEA로 예측하고 측정한 가속도 비교.

연소 엔지니어 Jane이 보낸 어느 한 주

디젤 엔진 승용차의 배기 성능과 드라이브 사이클 측정 문제는 최근 언론을 뜨겁게 장식한 사안입니다. 이는 배출 가스 감축과 성능의 중요성을 집중 조명하며, 이 작업이 얼마나 어려운지를 고스란히 드러냅니다. 세계 최대 자동차 제조사들이 배출 가스를 감축하기 위해 고군분투하고 있다는 점은 이를 해결할 쉬운 해법은 없다는 걸 잘 알 수 있습니다.

배출 가스는 화학 공정의 부산물이며, 배출 가스 규제에 부합하는 차량을 파악하고 예측 및 설계하려면 우선 기본적인 화학 공정부터 제대로 이해해야 합니다. 이 글의 목적은 이러한 화학 공정을 이해하고 예측하는 작업을 보다 쉽고 간단하게 할 수 있는 툴을 소개하는 것입니다. 연소실 설계 엔지니어 Jane의 사례를 소개하고, Jane이 일상적으로 마주하는 과제를 살펴보겠습니다.

Jane을 소개합니다!

Jane은 CombustionCorp에 새로 합류한 설계 엔지니어입니다. 이 회사는 개발 프로젝트 주요 부분에 CFD를 막 사용하기 시작했으며, 연소실 설계도 그 중 하나입니다. 천연 가스 연소기 설계를 탐구하고 향상시키는 것이 Jane의 첫 과제입니다. Jane은 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 표준 EBU (Eddy Break Up) 연소 모델을 선택하고 지오메트리와 물리를 빠르게 설정할 수 있습니다. 경영진으로부터 작업을 빠르게 진행하라는 압박을 받고 있는 상황이라 하나의 전체 반응만 모델링해 간단하게 유지하는 것이 시작점으로 좋다고 Jane은 말합니다. 흐름과 온도 필드를 얻고 결과가 정확한지 확인합니다. 그 다음 Optimate+™로 설계 작업을 시작하고 연료 노즐 배치를 최적화 해 설계를 자동으로 빠르게 개선할 수 있습니다.

며칠 후 실험실의 한 과학자가 Jane이 설계한 연소기가 천연 가스 품질에 따라 다르게 반응한다는 피드백을 줍니다. 이에 Jane은 더 복잡한 방법을 고려해야 할지 고민하며, 다음과 같은 궁금증이 생깁니다.

연소기가 천연 가스 품질에 따라 다르게 반응하는 이유는 무엇인가?

천연 가스 품질이 다르면 포함된 탄화수소의 양과 정도도 달라집니다. 고품질 천연 가스의 주성분은 메탄이며, 저품질 천연 가스에는 에탄과 프로판, 부탄 일정량 포함됩니다. 탄화수소 양이 많을수록 메탄보다 쉽게 분해되므로 저품질 천연 가스가 더 빨리 점화됩니다.

조기 점화는 전체 연소 거동에 어떤 영향을 미치나?

이를 이해하기 위해 Jane은 유동장의 영향을 제거하는 격리 환경에서의 화학적 영향을 알아봤습니다. DARS를 사용해 이 작업을 수행할 수 있다는 점을 알게 됐습니다.

DARS는 Siemens Digital Industries Software가 제공하는 0D 및 1D에 이상적인 반응기에서의 화학 반응을 해석하는 툴입니다. 이 툴을 사용해 후처리 시스템에서의 탄화수소 연소 및 촉매 공정과 같은 화학 반응 체계를 읽고 해석할 수 있습니다.

Jane은 DARS를 열고 이와 함께 제공되는 표준 천연 가스 화학 물질을 파악합니다. 그 다음 몇 개의 여러 반응기를 판독 메커니즘 모듈에 연결합니다 (그림 1).

- 자유 전파 화염 : 이 모듈은 화염 전파와 연소기 내 연소 거동에 중요한 특성인 층류 화염 속도를 계산합니다. 이 모듈은 화염 내 종 프로파일과 온도 역시 계산합니다
- 정압: 이 모듈은 균등하고 정압 조건에서 자동 점화 시 종 프로파일과 열역학적 특성 뿐만 아니라 점화 지연 시간을 계산합니다. 또한 배출 가스 생산량을 계산하는 데 사용할 수 있습니다
- 화염 라이브러리: 이 모듈은 확산 화염의 화학종과 온도 프로파일을 계산합니다. 더불어 소화 한계도 계산합니다
- 평형 : 이 모듈은 평형 종과 온도를 계산합니다. Jane은 각 모듈에 대해 DARS에서 두 가지 연료 품질을 적용했습니다.
- 고품질의 천연 가스를 시뮬레이션하기 위한 순수한 메탄
- 일정 비중의 탄화수소 (C2-C4)가 혼합된 메탄

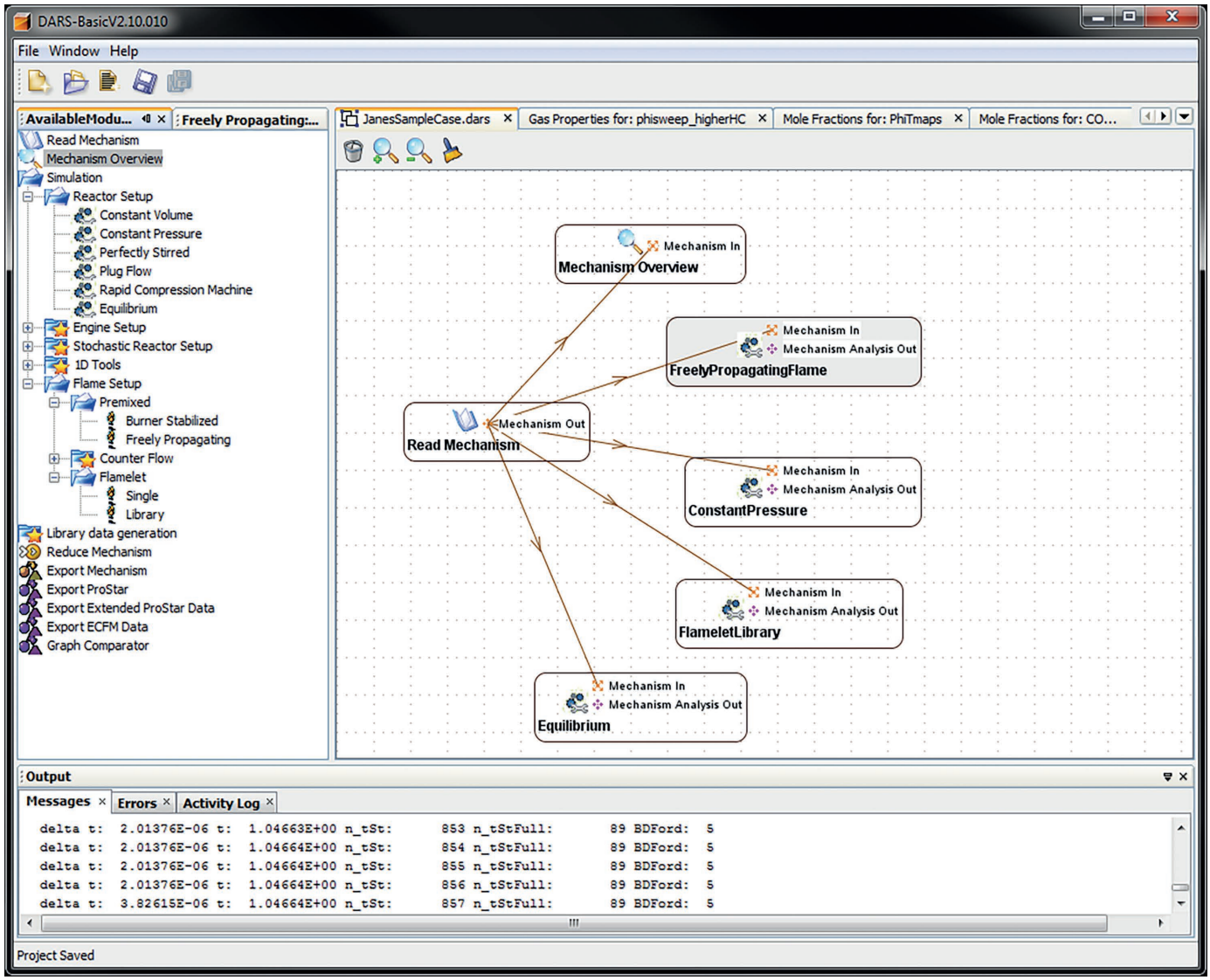


그림 1: DARS에서의 화학 해석을 위한 케이스 설정.

Jane은 우선 등가 비율 범위에 대한 층류 화염 속도를 계산했습니다. 층류 화염 속도는 예혼합된 조건 하에서 자유롭게 전파되는 화염의 속도를 말합니다. 이를 통해 저품질 혼합 메탄의 화염 속도가 초당 약 1cm 더 빠른 것을 알 수 있었습니다. Jane은 이것이 설계에 중요한 지 여부에 대해 생각했습니다.

연소기에 화염 속도가 더 빠르다는 건 어떤 의미일까?

Jane은 이 점이 연소기의 역화 위험을 높인다는 결론을 내렸습니다. 또한 매우 희박한 조건에서 순수 메탄 연료 속도가 저품질 연료보다 약 14% 느려 고품질 천연 가스가 희박 연소되기 쉽다는 점도 알 수 있었습니다 (그림 2).

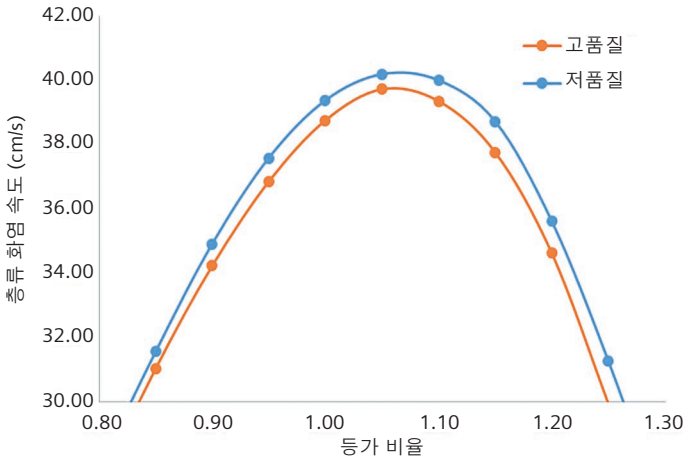


그림 2: 고품질 대 저품질 천연 가스에 대한 층류 화염 속도.

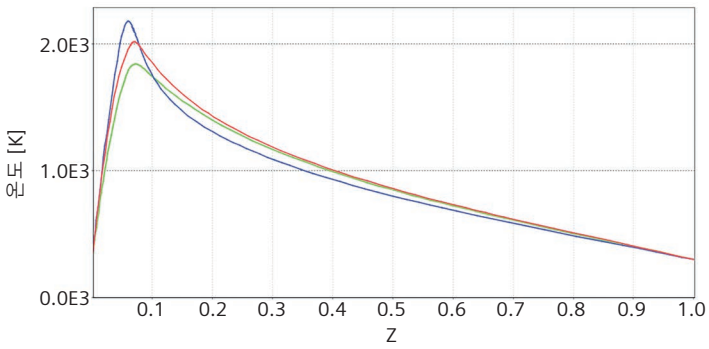


그림 3: 다양한 스칼라 소실률에 대한 저품질 천연 가스의 화염편 온도. (녹색 라인: 매우 낮은 스칼라 소실률; 청색 라인: 매우 낮은 스칼라 소실률; 적색 라인: 중간 스칼라 소실률; 녹색 라인: 소멸에 매우 가까운 스칼라 소실률)

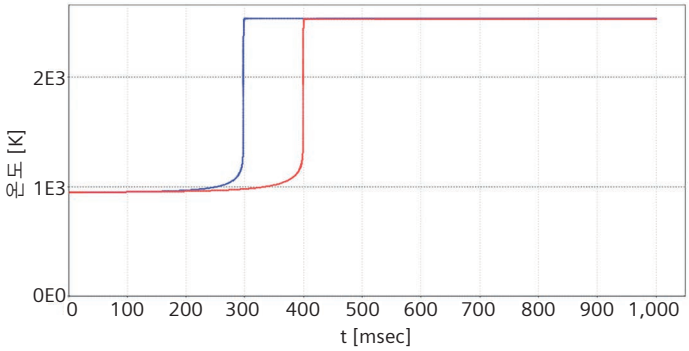


그림 4: 초기 온도 950K에서 다양한 천연 가스 품질의 점화성 (빨간 선: 고품질, 파란 선: 저품질).

확산 연소 중 연소 거동을 파악하기 위해 Jane은 각 연료 구성에 대한 화염편 라이브러리를 계산했습니다. 화염편은은 이상화된 층류 확산 화염이며, 화염편 라이브러리는 다양한 스칼라 소산 (혼합) 속도에 대한 화염편 세트를 말합니다. Jane은 높은 스칼라 소산 속도에서 저품질 연료의 화염 최대 온도가 약 30,000 더 높게 나오는 것을 확인했습니다. 이는 고품질 천연 가스 화염의 소화 경향을 강화시킵니다. 소화 스칼라 소실률이 저품질 연료는 41/s, 고품질 연료는 35/s임을 파악했습니다. 소화 스칼라 소실률은 확산 화염이 꺼지는 혼합 속도를 말합니다. 이는 고품질 천연 가스에서 소화가 더 자주 일어난다는 점을 보여줍니다 (그림 3).

Jane은 점화 지연 시간을 계산해 발화성을 파악하고 연소기의 혼합 영역에서 점화 경향을 평가했습니다. 메탄을 연료로 사용해 매개변수 스윕 (DARS에서는 다중 실행이라고 칭함)을 생성해 주어진 입구 온도와 주변 압력 하에서 전체 범위의 공연비를 스윕했습니다. 몇 초 만에 계산이 완료돼 혼합물 점화를 볼 수 있었습니다. Jane은 저품질 천연 가스는 점화 시간이 약 25% 단축돼 혼합 영역에서 조기 점화 위험이 증가한다는 점을 파악했습니다 (그림 4). 평형 계산에서 저품질 천연 가스의 단열 화염 온도가 고품질 천연 가스보다 약 5,000 높은 현상이 관측됐습니다. Jane은 연료 조성이 조금만 변경돼도 연소 거동에 영향을 미치는 점을 파악하고 연소기 거동에 미치는 영향을 정량화하기 위해 CFD 시뮬레이션에서 연구를 계속해야 한다고 생각했습니다. 이제 몇 가지 문제를 해결해야 합니다.

CFD 계산에서 다양한 연료 혼합을 어떻게 설명해야 할까?

Jane은 실행 속도를 그대로 유지하면서 상세 유한 화학 반응이 포함된 Simcenter STAR-CCM+의 FGM (flamelet generated manifold) 모델을 사용해 이 작업을 할 수 있다는 점을 알게 됐습니다. 다양한 연료 혼합의 효과는 각 연료 혼합에 대한 하나의 FGM 라이브러리를 생성해 설명할 수 있었습니다. FGM 라이브러리는 상세 화학 반응을 통해 생성됩니다.

Simcenter STAR-CCM+의 연소기 조건에 맞는 FGM 라이브러리를 얻으려면 어떻게 해야 할까?

Jane은 이 작업에도 DARS를 사용할 수 있다는 점을 발견했습니다. DARS 프로젝트를 열고 FGM 라이브러리 생성 모듈을 워크벤치로 끌어와 계산을 설정하고 라이브러리 생성을 실행했습니다. 다양한 천연 가스 혼합물에 사용할 FGM 라이브러리 세트를 만들고 CFD 계산에 이를 사용했으며, Optimate+ 최적화에 여러 연료 품질을 추가했습니다. 저품질 천연 가스에 적합한 설계를 찾아 실험실 엔지니어가 테스트에 사용할 수 있도록 전달했습니다. 이제 Jane의 동료들은 다양한 연소 거동에 관심을 갖고 왜 이런 현상이 벌어지는지 파악하고자 했습니다.

다양한 연료 혼합물의 영향을 어떻게 파악할 수 있을까?

이를 위해 저품질 천연 가스와 메탄만 사용해 균일한 정압 반응기를 재실행 했으며, 종 민감도 해석을 확인했습니다. 순수 메탄 연소에 대한 결과가 그림 5에 나타나 있습니다.

예상대로 메탄과 산소가 연소 과정에서 가장 두드러진 종이었습니다. 그 다음 그림 6과 같이 저품질 천연 가스에 대해 동일한 민감도 해석을 실행했습니다.

프로판은 연료 혼합물의 1.5% 비중에 불과하지만 영향력은 메탄과 비슷합니다. 혼합물의 0.3%을 차지하는 부탄도 연소에 상당한 영향을 미칩니다. 이는 큰 탄화수소가 미치는 영향이 그만큼 크다는 점을 나타냅니다. Jane은 이 거동 이면의 반응을 파악하기 위해 민감도를 검사했습니다. 산화 반응과 더불어 프로판 및 부탄 해리가 두 가지 중요한 과정임을 알 수 있었습니다 (그림 7).

Jane은 민감도 해석, 점화 지연 시간 플롯 및 CFD 시뮬레이션을 사용해 연소 중 발생하는 현상을 동료에 설명할 수 있는 충분한 자료를 확보할 수 있었습니다. 며칠 후 실험실 엔지니어가 다시 Jane을 찾고 배출 가스에 대해 물었습니다. 일부 로드 포인트의 경우 CO 배출이 허용치를 넘는 수준으로 높았습니다. Jane은 이제 다음 문제를 해결할 준비가 됐을까요?

배출 가스 성능을 향상시키는 방법은 무엇일까요?

Jane은 CO 배출에 대한 이해도를 높이기 위해 DARS를 시작하고 일정한 온도에서 균일한 정압 반응기 세트를 실행해 배출 가스 맵을 생성했습니다 (그림 8).

이 맵에서 공연비에 대한 CO 발생량과 여러 온도를 확인할 수 있었습니다. CFD에서의 혼합물 분율 및 온도 유동장과 비교해 Jane은 연소기가 동료가 지정한 로드 범위에 대해 연료 배출구에 가까운 연료가 풍부한 일부 영역에 있는 CO 수율 영역으로 들어가는 것을 확인했습니다. 이 영역에서의 혼합을 향상시켜야 했고, 다음 최적화 루프를 위해 이 영역의 최대 등가 비율에 대한 제한을 설정했습니다. 그녀는 효율성이 다소 저하된 대신 CO를 줄였으며, 이를 통해 CO 배출과 효율성 간 트레이드 오프를 파악할 수 있었습니다. CO 수율을 더 이해하기 위해 FGM 라이브러리 생성에 있는 포스트프로세싱 종에 CO를 추가하고 FGM 라이브러리를 재생성 했습니다. 그러자 CFD 시뮬레이션에서 CO 수율을 바로 알아볼 수 있었습니다 (그림 9).

마지막으 상세 화학의 영향을 충분히 이해하기 위해 Simcenter STAR-CCM+에서 사례 중 하나를 선택하고 복합 화학 물질을 적용해 DARS에 사용된 화학 메커니즘으로 전체 CFD 시뮬레이션을 수행했습니다. 이는 다른 연소 모델에 좋은 벤치마크 역할을 합니다. Jane은 매니저에 이 시뮬레이션은 완료하는 데 시간이 더 오래 걸리지만 정확성 면에서는 한층 낫다는 점을 피력합니다. 이 회사는 규정 미준수로 인한 부정적 결과를 원치 않는 것이 이 회사의 궁극적 입장입니다. 계산 시간이 길다는 점은 사실 대수가 아닐 수 있습니다.

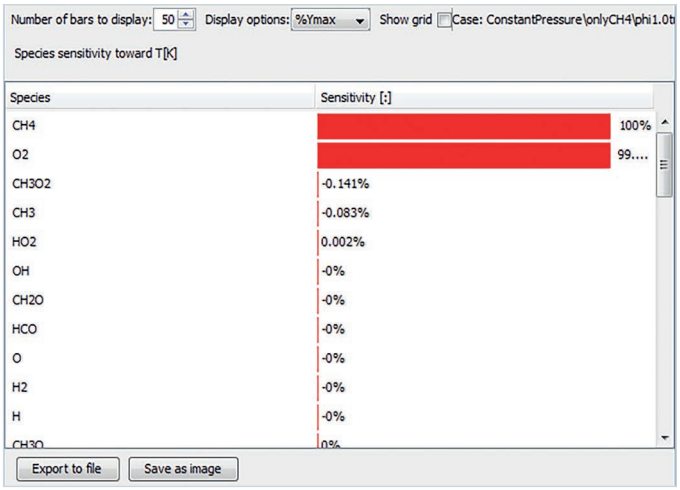


그림 5: 고품질 천연 가스 연소에 대한 종 감도.

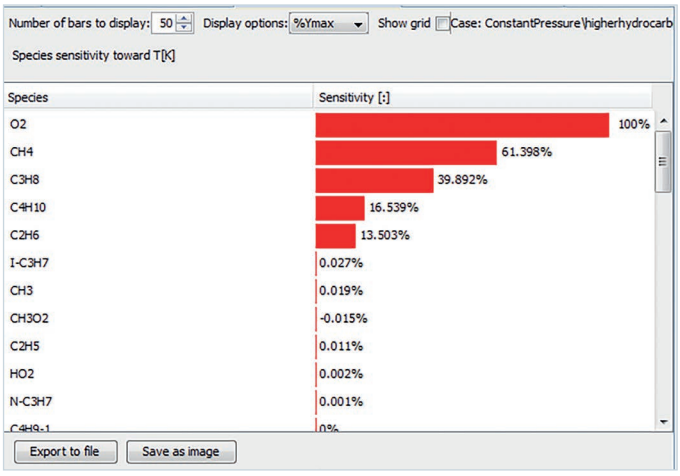


그림 6: 저품질 천연 가스 연소에 대한 종 감도.

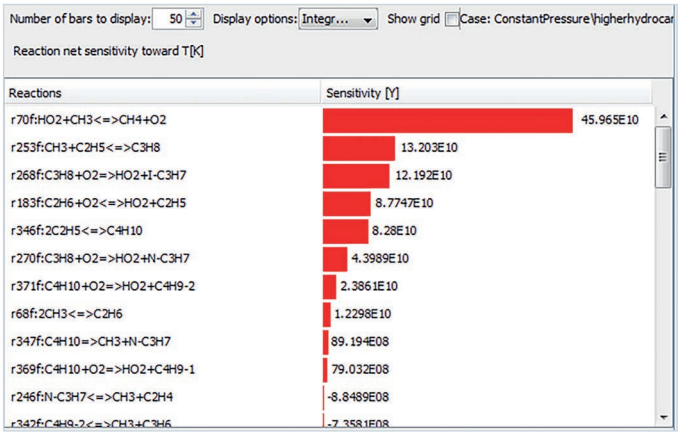


그림 7:저품질 천연 가스 연소에 대한 반응 감도.

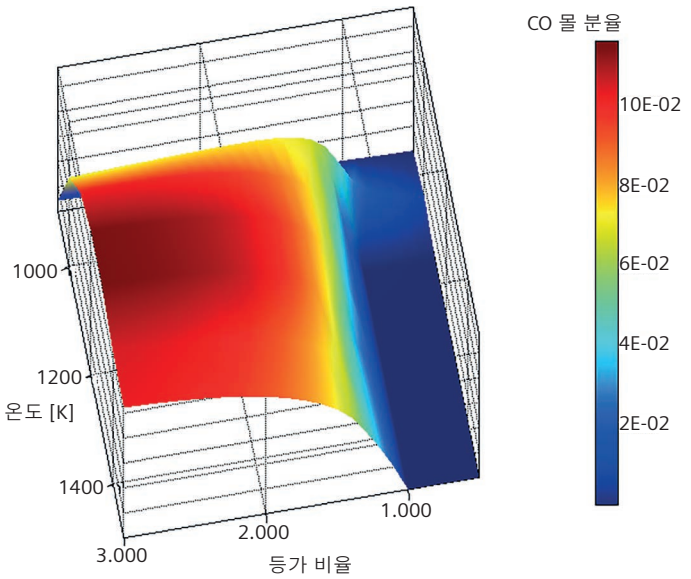


그림 8: 온도 및 등가 비율 함수로서의 CO 배출.

DARS에 대한 추가 정보

여기서 설명한 복잡한 화학 계산을 수행하는 것 외에도 DARS는 다음 작업에도 사용할 수 있습니다:

- 실린더 내 연소를 위한 연소 및 배출 라이브러리 생성:
  - ECFM-3Z TKI
  - ECFM-CLEH TKI + 평형
  - PVM-MF
  - 그을음
- 층류 화염 두께 계산
- 촉매 (DOC, TWC, DPF 등) 표면 및 기상 화학 계산
- 감소 메커니즘
- 확률적 반응기 모델을 사용한 실린더 내 연소 계산

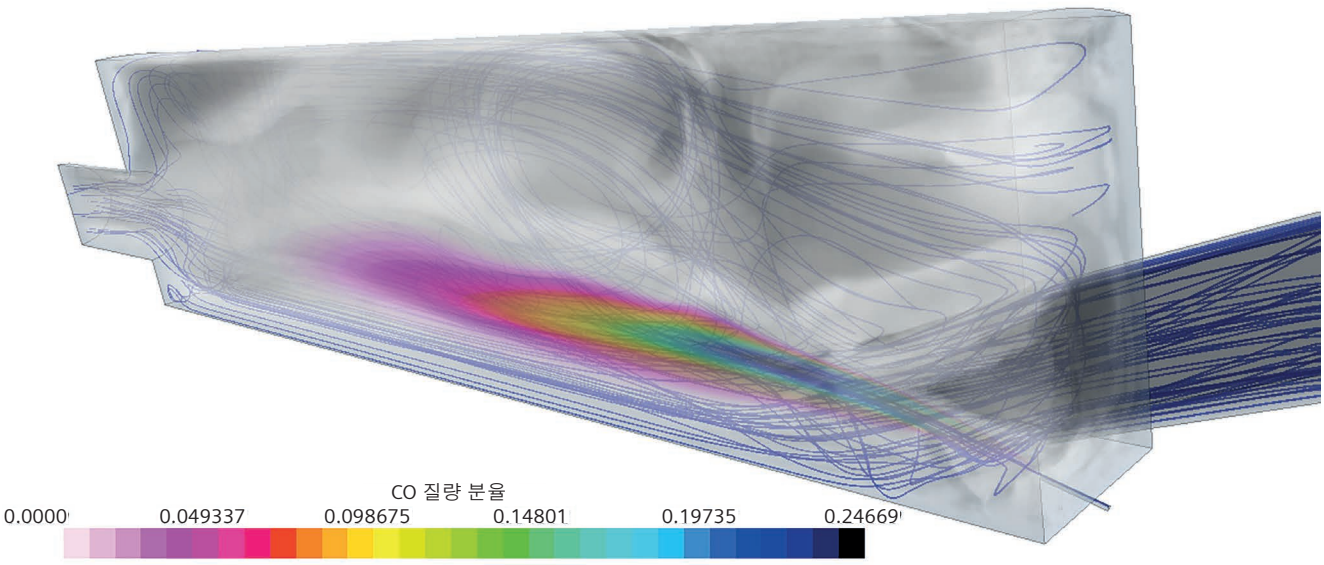


그림 9: FGM 연소 모델을 사용한 유리로 시뮬레이션에서의 CO 질량 분율 필드.

유리 덩어리에서 유리병이 되는 과정: Bottero, 전체 유리 성형 공정 시뮬레이션

들어가는 말

유리 용기 생산은 운영하기 쉬운 공정이 아니며, 기업은 합당한 품질을 갖춘 제품을 제공하기 위해 상당한 시간과 비용을 투자해야 하는 경우가 많습니다. 실제로 유리는 극도로 복잡한 거동을 보이는 재료로, 제조 중 예측하기가 어려운 경우가 많습니다. 지금까지는 생산 매개변수 조정은 철저히 작업자 경험에 국한됐습니다.

이런 불편한 상황을 극복하기 위해 전 세계 유리 기계 분야에서 활약하는 공정 중심 기업 Bottero는 대학 연구실 및 생산 전문가와 협력해 시뮬레이션 기반 방식을 개발했습니다. 이 개발의 목적은 유리 제조 플랜트가 공정을 시작하는 데 소요하는 시간을 대폭 단축할 수 있는 제조 지원 툴을 제공하는 것입니다.

컴퓨터 시뮬레이션은 더 나은 인사이트를 얻고 최적의 용기 형태를 설계하는 데 도움이 되며, 공장에서 흔히 경험하는 시간 소요가 많고 비용 부담이 큰 시행착오 방식에 훌륭한 대안을 제공합니다. 대표 수치 시뮬레이션은 원치 않는 용기 벽 두께 변동을 최소화하고 강도를 그대로 유지하면서 무게를 줄이는 데 도움이 됩니다. 또한 시뮬레이션은 냉각 조건을 최적화하고 생산 속도를 높이는 데도 중요한 역할을 합니다. 이 모든 개선을 통해 유리 제조 공정 비용을 현저히 낮출 수 있습니다.

유리 용기 성형 공정

공정 중에 용기는 우선 패리손 (parison)이라고 부르는 중간 형태가 된 후 최종 형태로 성형됩니다. 패리손 성형 방식에 따라 두 가지 유리 공정이 존재합니다: 압축 공기를 사용해 패리손을 성형하는 블로우-앤-블로우 (blow-and-blow)와 플런저를 사용해 패리손을 기계 성형하는 프레스-앤-블로우 (press-and-blow) 입니다. 여기서는 프레스-앤-블로우 공정을 연구하고 시뮬레이션 했습니다.

용융된 유리가 용광로에서 나올 때 온도는 1,400°C 이상이며, 전로와 공급로를 거치며 전단 및 분배 시스템으로 균일한 유리 덩어리로 절단됩니다. 그 다음 각 유리 덩어리는 개별 섹션 성형 기계로 보내지며, 여기서는 온도가 1,200°C 이하로 떨어집니다. 유리 덩어리는 금형 형상을 갖게 됩니다. 성형 기계는 블랭크 금형과 블로우 금형이라고 부르는 두 가지 금형 세트로 구성돼 있습니다.

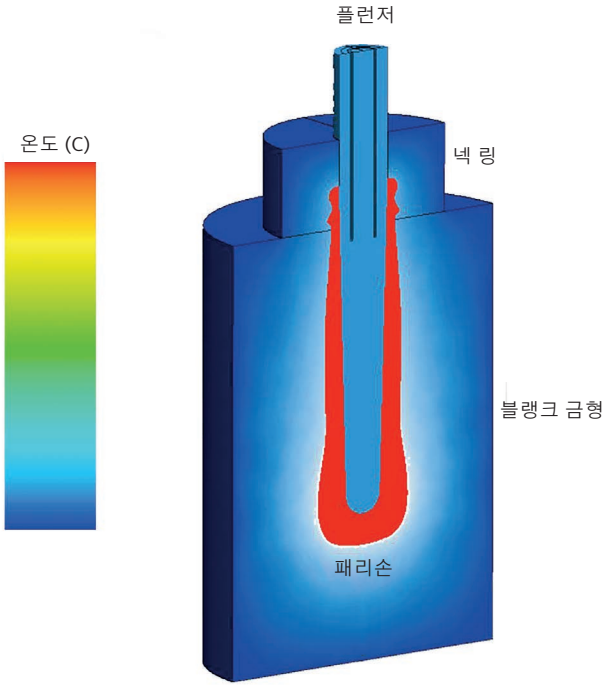


그림 1: 블랭크 금형에서 생성된 패리손의 3차원 온도 분포.

우선 블랭크 금형에서는 유리 덩어리를 위에서 아래로 주입한 후 금형 형상으로 압축해 두꺼운 벽 형태의 프리폼이나 패리손으로 만듭니다. 그러면 로봇 팔이 이 패리손을 블랭크 금형에서 들어 올려 위아래를 뒤집은 후 2차(블로우) 금형으로 전달합니다. 이때 프리폼은 중력으로 인해 금형 하단으로 늘어지기 시작합니다. 마지막으로 가압 공기를 주입하고 진공을 생성해 패리손을 최종 병 형상으로 팽창시킵니다. 이후 이 용기는 어닐링 오븐으로 옮겨져 재가열을 통해 성형 중 생성된 응력을 제거합니다. 그 후 제어 조건 하에서 냉각이 이뤄지면 모든 공정이 완료됩니다.

유리 성형에 시뮬레이션이 필요한 이유

유리 성형 공정에는 고온 처리가 포함되며, 이는 기계 타이밍, 유리 구성, 환경 조건 변화에 극도로 민감합니다. 각 단계 중 금형 내부 작업을 물리적으로 시각화하기란 거의 불가능에 가깝기 때문에 수치 시뮬레이션은 공정 중 발생하는 물리적 상황을 상세히 파악할 수 있는 유일한 툴입니다. 이번 연구에서 시뮬레이션 결과는 유리와 장비 모두의 적외선 표면 온도 측정을 비교하고 최종 용기와 유리 분포 (벽 두께), 결함 발생 가능성 여부를 검수해 실험적으로 검증됐습니다. 시뮬레이션 방식을 구축 시 가장 현실적인 모델이 사용되도록 각별한 주의를 기울였습니다. 이 말은 시뮬레이션에서 근사치가 제한됐고, 유리 성형 공정은 타이트 커플링된 열유체역학 공정으로 모델링 됐음을 의미합니다. 공정에서 고온 유리는 전도와 복사를 통해 금형에 열을 생성하며, 유리는 적외선을 부분적으로만 방출/흡수합니다. 또한 대류와 복사를 통해 유리와 환경 간 열 교환이 이뤄집니다. 이러한 열 교환 인터페이스는 기하학적으로 복잡하며, 병 성형 중 시간의 흐름에 따라 크게 달라집니다.

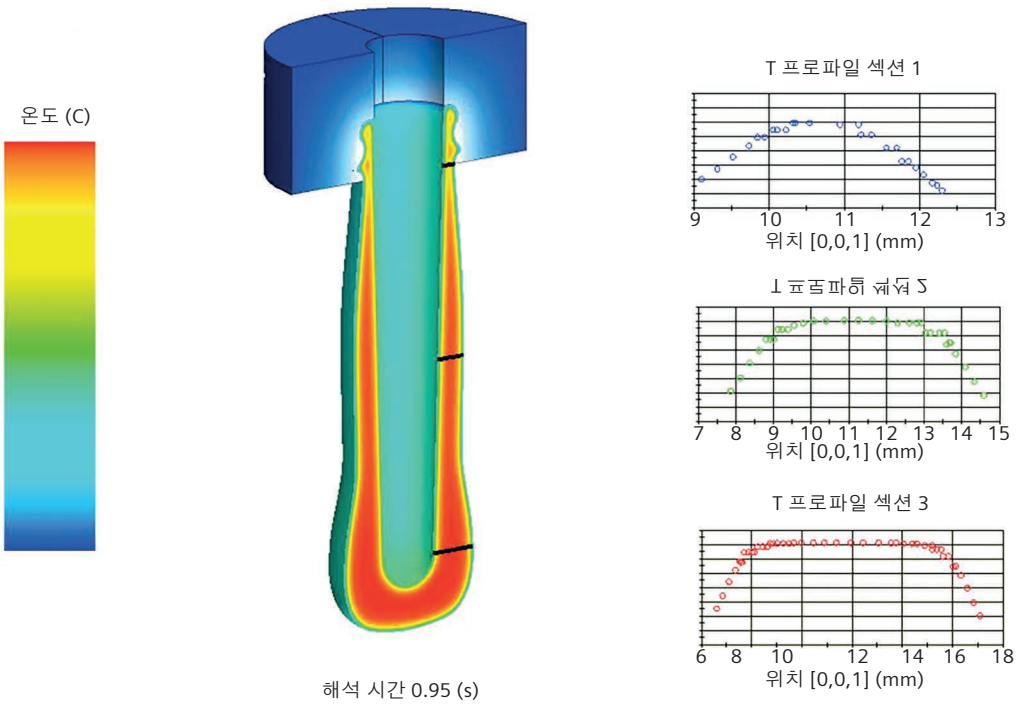


그림 2: 실질적인 수직 온도 추세를 보여주는 상세 3D 패리손 온도 모델.

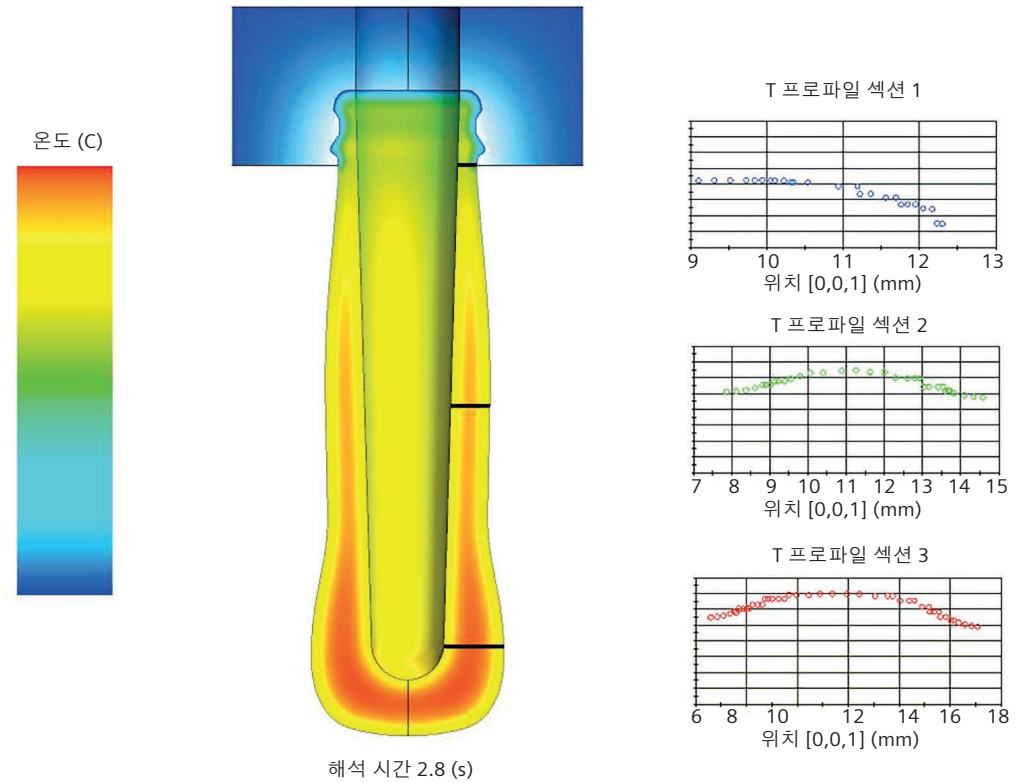


그림 3: 온도 재분포를 보여주는 재가열 중 패리손 온도.

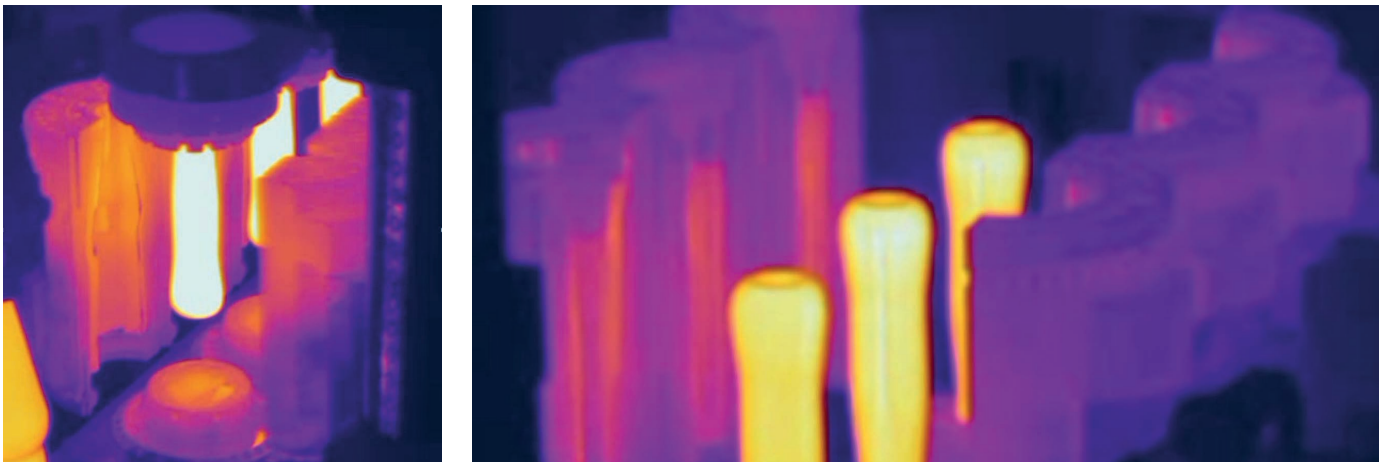


그림 4: 유리에 실험 테스트 수행 및 시뮬레이션과 우수한 상관관계 확인

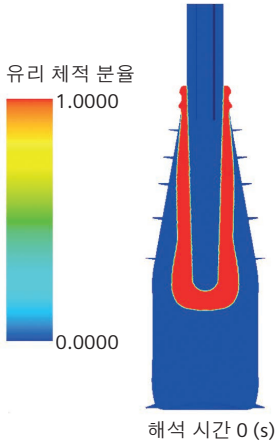


그림 5: 형상 변화 시뮬레이션을 위한 패리손 동적 모델에서의 유리 체적 분율.

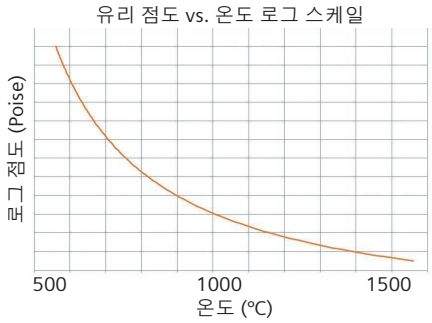


그림 6: 유리 성형 공정 중 온도에 따른 유리 점도 변화.

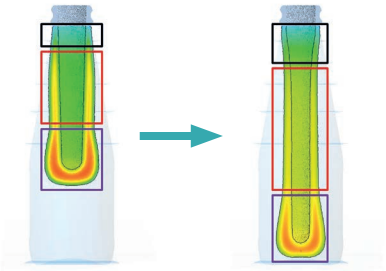


그림 7: 블로우 금형에서 패리손 형상 변화를 보여주는 Simcenter STAR-CCM+를 사용한 시뮬레이션.

모델링 방식

Simcenter STAR-CCM+의 모델링 방식을 사용하면 고온 유리 덩어리부터 완성품 유리병에 이르는 실제 생산 사이클 시스템 전체를 시뮬레이션 할 수 있습니다. 450개 이상의 코어가 있는 고성능 컴퓨팅 클러스터에서 동시에 운영되는 25개 가용 서버를 갖춘 이탈리아 쿠네오 (Cuneo) 소재 슈퍼 컴퓨팅 시설에서는 매우 미세한 볼륨 메시를 사용한 CFD 시뮬레이션을 할 수 있으며, 이를 통해 많은 요소를 생성하고 성형 공정을 정확하게 포착할 수 있는 공간 해상도를 보장합니다.

공정 개발의 첫 단계는 비정상 시뮬레이션을 수행해 유리 덩어리를 블랭크 금형으로 압착해 생성한 패리손의 3차원 온도 분포를 얻는 것입니다 (그림 1). 온도 프로파일과 같은 실험 조건을 사용해 초기화한 수치 모델에는 모든 장비 상세 정보가 포함돼 있으며, DOM (discrete ordinate model) 복사 및 전도에 대해 해석됐습니다. 유리와 주철 간 인터페이스에서의 접촉 열 전달 계수는 온도 함수일 뿐만 아니라 여러 다른 매개변수 (시간, 압력, 금형 거칠기, 윤활유 여부)에 따라 달라지므로 이는 이상적 계수로 간주할 수 없습니다. 시뮬레이션에 사용한 열 전달 계수는 실험으로 결정했습니다.

과도 시뮬레이션을 통해 상세 패리손 3D 온도 모델이 나왔고, 패리손 벽이 두꺼울 수록 유리가 뜨겁다는 예측한 대로 현실적인 온도 추세를 보였습니다. 이런 전형적인 수직 온도 추세는 우수한 최종 제품을 성형하는 데 필요하며, 실험에서 제어하기가 매우 까다로울 수 있습니다. 예상대로 유리 점도는 온도에 따라 달라지므로 콜드 넥 (cold neck) 영역은 고체 유리처럼 움직이지만 고온인 패리손 하부는 여전히 부드럽고 작업하기 쉽습니다. 금형을 열고 패리손 온도가 두께를 따라 2초 간 재분배될 때 패리손 재가열을 시뮬레이션하는 데에도 비슷한 방식이 사용됐습니다 (그림 3).

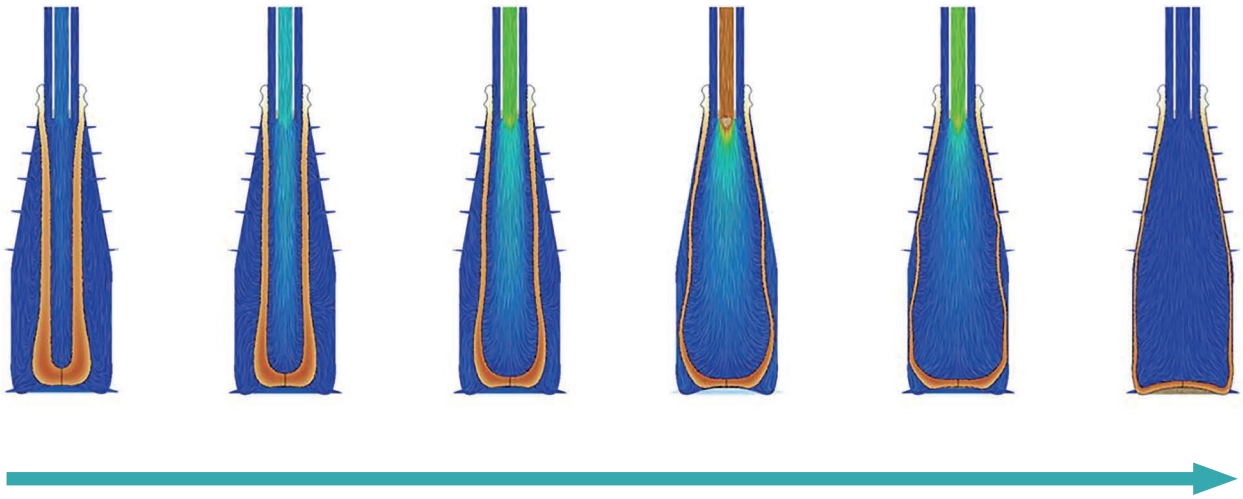


그림 8: Simcenter STAR-CCM+을 사용한 초기 유리 덩어리에서 최종 형상에 이르는 전체 유리 성형 공정 시뮬레이션.

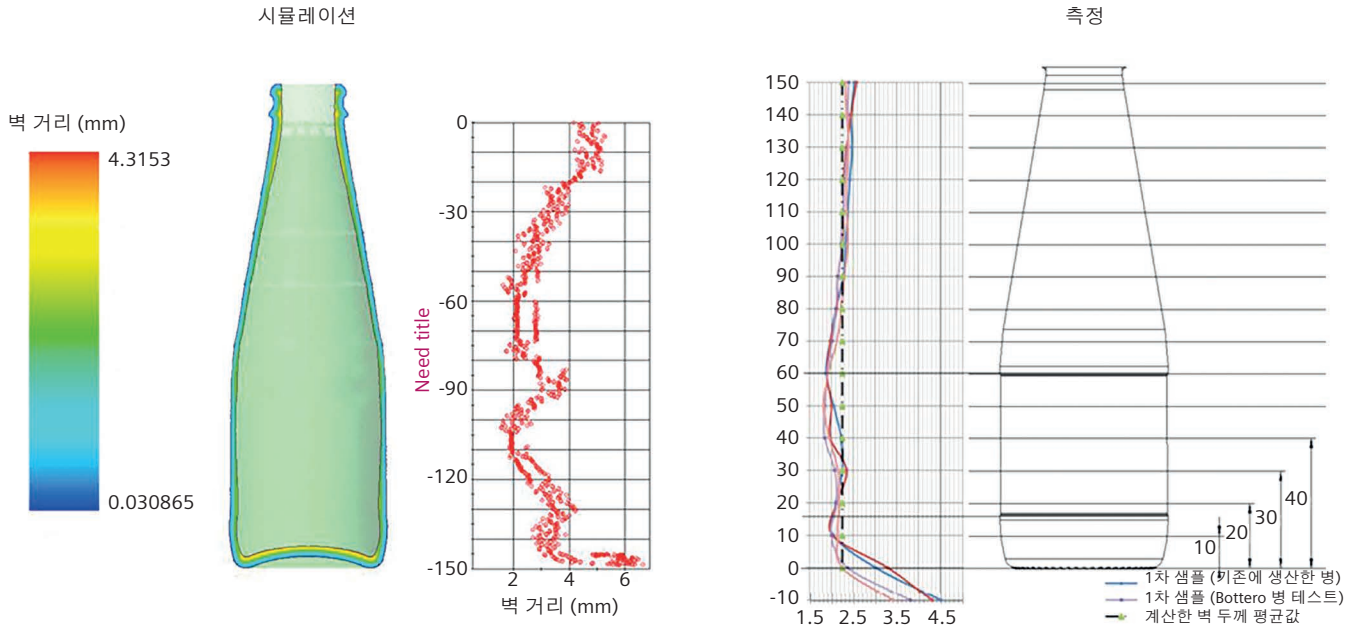


그림 9: 벽 두께와 실제 병 비교 시 우수한 비교를 보여주는 Simcenter STAR-CCM+를 사용한 수치 시뮬레이션 검증.

Simcenter STAR-CCM+를 사용한 시뮬레이션은 패리손 내부가 아닌 표면에 대한 정보만 제공하므로 전체 체적 온도 (표면과 내부) 계산 뿐만 아니라 사용 가능한 유리 및 금형의 열 적외선 측정을 더 잘 파악하는 데 유용했습니다. 유리 실험 테스트를 수행해 (그림 4) 시뮬레이션 결과를 검증했으며, 시뮬레이션과 실험 데이터 간의 우수한 상관관계를 확인할 수 있었습니다.

다음으로 블로우 금형에서 발생하는 형상 변화를 예측하기 위한 패리손 동적 모델을 만들었으며, 이전 단계에서 얻은 초기 온도 분포에서 시뮬레이션을 시작했습니다. 이는 최종 병 형상에 큰 영향을 미치므로 유리 성형 공정에서 가장 중요한 단계 중 하나입니다. Simcenter STAR-CCM+의 VOF (Volume of Fluid) 모델을 사용해 시뮬레이션에 사용된 유리 (고밀도 및 점성)와 패리손 주변 공기에 해당하는 유체 모두를 모델링 했습니다 (그림 5).

VOF 방식을 통해 제대로 정의된 인터페이스 (자유 표면)로 분리한 유리와 공기 흐름의 상세 사항을 정확히 모델링하고 모든 타임 스텝에서 정확한 시간 위치에 대해 해석할 수 있었습니다. 점도, 밀도, 전도도, 비열 등 재료의 기계적, 열적 특성을 고려했습니다. 또한 유리 점도는 온도에 따라 달라지며, 온도는 시간에 따라 변하므로 시뮬레이션에서 열 유속과 온도 분포는 인터페이스의 움직임을 사용해 동시에 해석했습니다.

이전 단계에서 얻은 온도 함수로써의 특정 유리 점도와 온도 프로파일의 실험 측정치를 사용해 블로우 금형에서 생성된 패리손의 기계적 거동 (형상 변화)를 성공적으로 시뮬레이션 했습니다. 이 모델은 최종 병 모양과 일치하는 몰드 내부 표면으로 구성됐습니다.

공기가 주입된 압력 유입이 상단에 포함됐고, 공정 마지막 단계에서 진공을 생성하기 위해 측면에 여러 압력 유출이 나타났습니다.

블로우 금형에서 최초 2.2초 동안 패리손은 중력에 의해서만 바닥까지 연신됐으므로 공기 주입은 없었습니다. 연신 (stretching)이라고 부르는 이 공정은 올바른 병 벽 두께를 얻기 위해 상당히 중요한 작업이며, 유리 점도에 영향을 미치므로 패리손 온도에 극도로 민감하게 반응합니다.

그림 7을 보면 시뮬레이션을 통해 넥 영역의 패리슨 상단부터 시작해 유리가 차가워 현재 이하의 높은 중력 하중에서도 연신에 저항하는 모습을 볼 수 있습니다. 뿐만 아니라 패리손 중심 부분이 연신에 가장 결정적 역할을 하며, 유리가 부드러운 상태여도 중력 하중이 가장 낮은 하단은 연신되지 않는다는 점이 분명해졌습니다.

Simcenter STAR-CCM+ 모델의 동적 및 열적 특성 모두를 동시에 예측한 덕분에 실제 공정 시뮬레이션이 성공적으로 이뤄졌습니다. 이를 통해 연신이 진행되는 와중에 재가열 중 유리 온도 재분배와 시간적으로 정확한 국지적 점도 변화를 고려할 수 있게 됐습니다.

유리 성형 공정 시뮬레이션 최종 단계에서는 상단으로부터 공기가 주입되고 측면 구멍에서 진공이 생성돼 최종 병으로 형상을 블로우 했으며, 그림 8에서 이를 확인할 수 있습니다. 이렇게 빠르게 진행되지만 결코 사소한 작업이 아니고 나름의 어려움이 있으며, 솔버는 시뮬레이션 전반에 걸쳐 안정적으로 유지됐습니다.

실제 병의 벽 두께를 공정 시뮬레이션을 통해 얻은 값과 비교해 시뮬레이션 결과를 검증했습니다 (그림 9). 상관관계가 매우 좋았으며, 이것이 여러 연속 단계의 최종 결과라는 점을 감안하면 수치 모델이 강력하다는 점을 확인할 수 있었습니다. 수치 모델이 현실적인 공정을 표현할 수 있게 유리 (그 특성이 온도에 큰 영향을 받음)와 공기, 금형 및 모든 생산 장비를 고려해 각별한 주의를 기울였기에 당연한 일이겠습니다. 유리 데이터는 특수 랩에서 실험으로 측정했으며, 실험 기계 타이밍도 고려했습니다.

결론

이 연구에서 우리는 현실적인 제조 여건으로 기존에 테스트한 유리 용기 성형 공정의 수치 구현을 소개했습니다. 성형 공정의 프레스/블로우 단계 모두 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 모델링 했습니다. 현실적인 불균일한 패리손 온도 분포를 계산하고 최종 제품의 최종 형상을 표현 및 해석했습니다.

모든 계산은 3차원으로 이뤄져 회전 대칭이 아닌 패리손을 연구할 수 있었으며, 초기 패리손이 가진 특정 결함이 시간이 지남에 따라 어떻게 발생하는지 평가할 수 있었습니다. 현재 모델은 점성 유체에 유효하지만 점탄성 유체와 같은 것으로 수정할 수 있습니다.

여기서 소개한 수치 시뮬레이션은 물리적 상세 사항에 대한 인사이트를 제공해 생산 시설 최적화를 가능하게 하며 제조 시간과 비용을 상당 부분을 절감할 수 있어 유리 제조 산업에 대단히 중요합니다.

Owens Corning의 레이저 용접 시뮬레이션으로 설계주기 단축 및 부품 설계 최적화

그건 일상적으로 하는 작업이 아니었습니다. Owens Corning의 선임 연구원 Byron Bemis와 팀원들은 기존 제조 공정으로는 제작할 수 없었던 차세대 제조 컴포넌트를 설계해 달라는 요청을 받았습니다. Owens Corning은 단열재, 지붕 싱글과 같은 주거용 및 상업용 건축 자재, 자동차, 보트, 윈드 블레이드, 스마트폰 등의 제품에 사용되는 유리-섬유 보강재, 복합 시스템용 엔지니어링 자재를 생산하는 세계적 기업입니다. Bemis가 속한 과학기술센터는 Owens Corning의 R&D 작업이 이뤄지는 곳으로, 미국 오하이오주 그랜빌 (Granville)에 있습니다.

신규 R&D 프로젝트에 착수한 Bemis와 팀원들은 새로운 지평을 열었습니다. 요청 받은 파트를 설계하고 제조하려면 초기 설계 시 하나의 판금 파트를 통해 다른 파트로 용접하는 블라인드 키홀 (blind keyhole)이 필요했습니다. Bemis는 "이 용접이 안정적으로, 제대로 되게 하기 위한 용접 매개변수를 개발하기 위해 많은 시행착오를 거쳐야 했습니다. 물리적 프로토타입을 사용해 이 작업을 하려면 개발 컴포넌트 파트를 제조한 후 사전 결정된 매개변수 세 를 사용해 레이저 용접해 어떻게 되는지 확인해야 합니다. 올바른 조합이 나올 때까지 이 작업을 계속해야 합니다" 라고 말했습니다. 그는 또한 이 프로젝트에서 가장 까다로운 부분 중 하나는 작은 형상이나 모서리 근처, 엣지 근처에 용접해야 한다는 점이라고 덧붙였습니다. 레이저가 너무 뜨겁거나 너무 느리면 형상이나 엣지가 녹아 파트가 망가지고 맙니다.

이들은 매우 작은 용접으로, 밀리미터부터 서브밀리미터까지 크기가 다양하며, 고정밀 제작이 필요한 초소형 파트로 만들어졌습니다. Bemis에 따르면 이들은 좁은 용접 빔을 사용하고 있으며, 대부분의 경우 개별 지점에 대해 최대 킬로와트 레이저 전력을 사용하는 50 마이크론 용접 스팟을 사용합니다.

사용한 자재는 용융점과 용융 금속 점도가 높으며 표면 장력이 있는 합금이었습니다. 이는 기존과 다른 흥미로운 용접 물리를 위한 것이었습니다.

작은 형상과 엣지, 원형 단면과 같은 복잡한 지오메트리도 사용됐습니다. 파트 제작에 깊은 용임이 필요했으므로 키홀모드가 필요했습니다. 키홀 모드는 레이저와 같은 집중 열원이 공작물을 완전히 관통해 용융된 용접 금속 선단에 구멍을 생성하는 용접 기술입니다. 열원이 진행하면서 용융된 금속이 홀드 뒤에 채워져 용접 비드를 형성합니다. 이렇게 고려사항이 많다는 점, 특히 블라인드 키홀 용접은 시행착오가 많음을 의미합니다. 고가의 합금과 컴포넌트 파트를 사용해 물리적 실험을 수 백번 반복하는 것은 엄청나게 많은 비용과

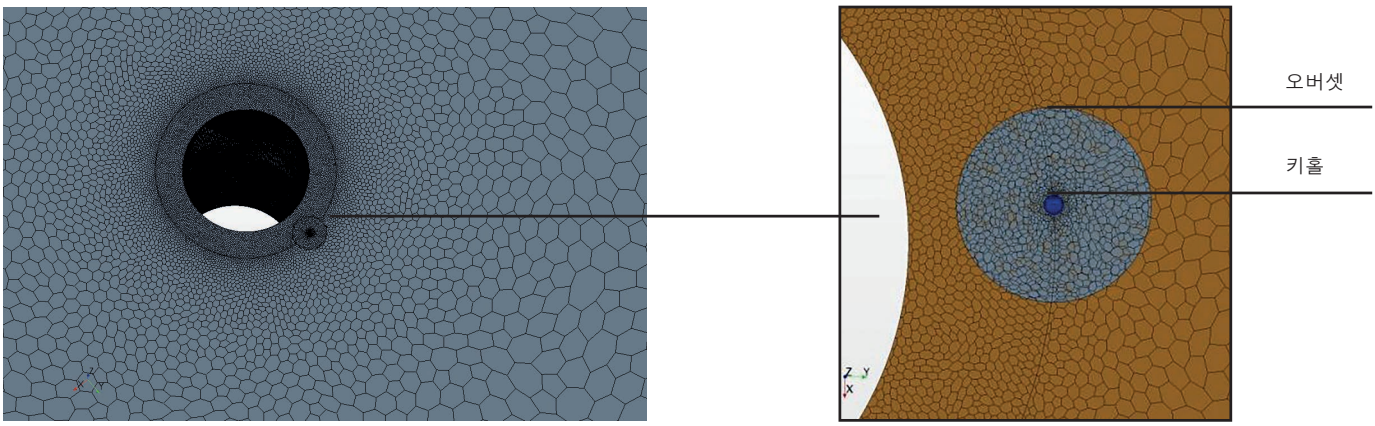


그림 1: Bemis에게 특히 유용했던 Simcenter STAR-CCM+만의 독보적 기능 중 하나는 시뮬레이션을 비약적으로 향상시킨 오버셋 메시입니다.

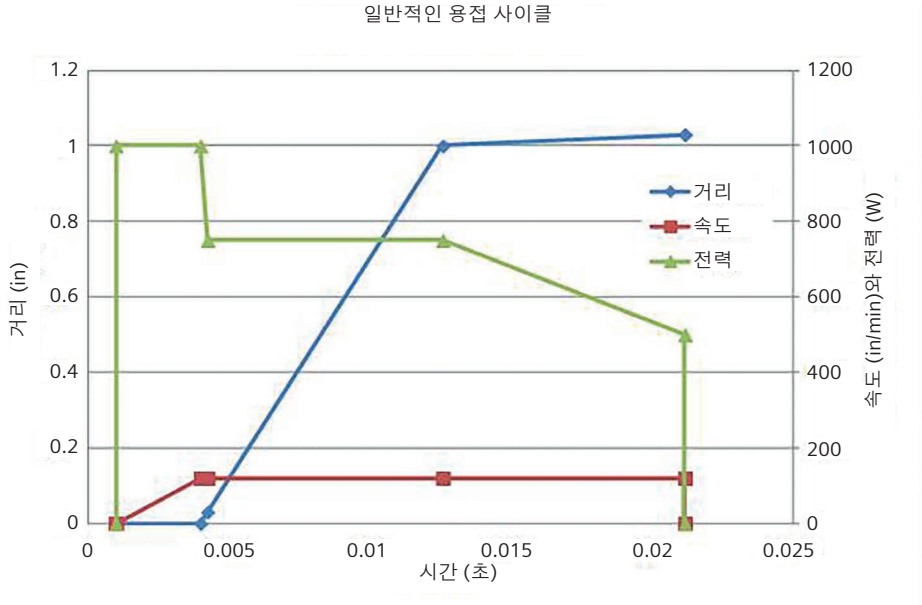


그림 2: 일반적인 용접 사이클.

시간을 소요했습니다. 시뮬레이션이 정답인 건 분명했으나, 전체 키홀 물리를 고충실도 시뮬레이션하는 건 복잡하고 비용이 많이 들며 속도도 느렸습니다. 시뮬레이션은 최적의 레이저 공정 매개변수를 지정하기 위해– 용접 풀 직경과 영역 모양, 용임 깊이 등의– 수치를 적절히 예측해야 했습니다.

해법을 모색하다

Bemis는 당시 프로젝트를 떠올리며 이렇게 말했습니다. "빠르고 강력하면서도 사용하기 쉬운 – 경제적인 솔루션이 필요했습니다." 마땅한 해법을 찾는 과정에서 Bemis는 용접 시뮬레이션 경험이 있는 Siemens Digital Industries Software 지원 엔지니어와 상담했습니다. 상담을 통해 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 시뮬레이션을 수행하기로 결정했습니다.

Simcenter STAR-CCM+는 포괄적인 지오메트리 생성 및 준비 툴로, 메시용 모델을 준비하는데 필요한 수작업 시간을 현저히 줄여줍니다. 또한 Simcenter STAR-CCM+는 복잡한 CAD 모델부터

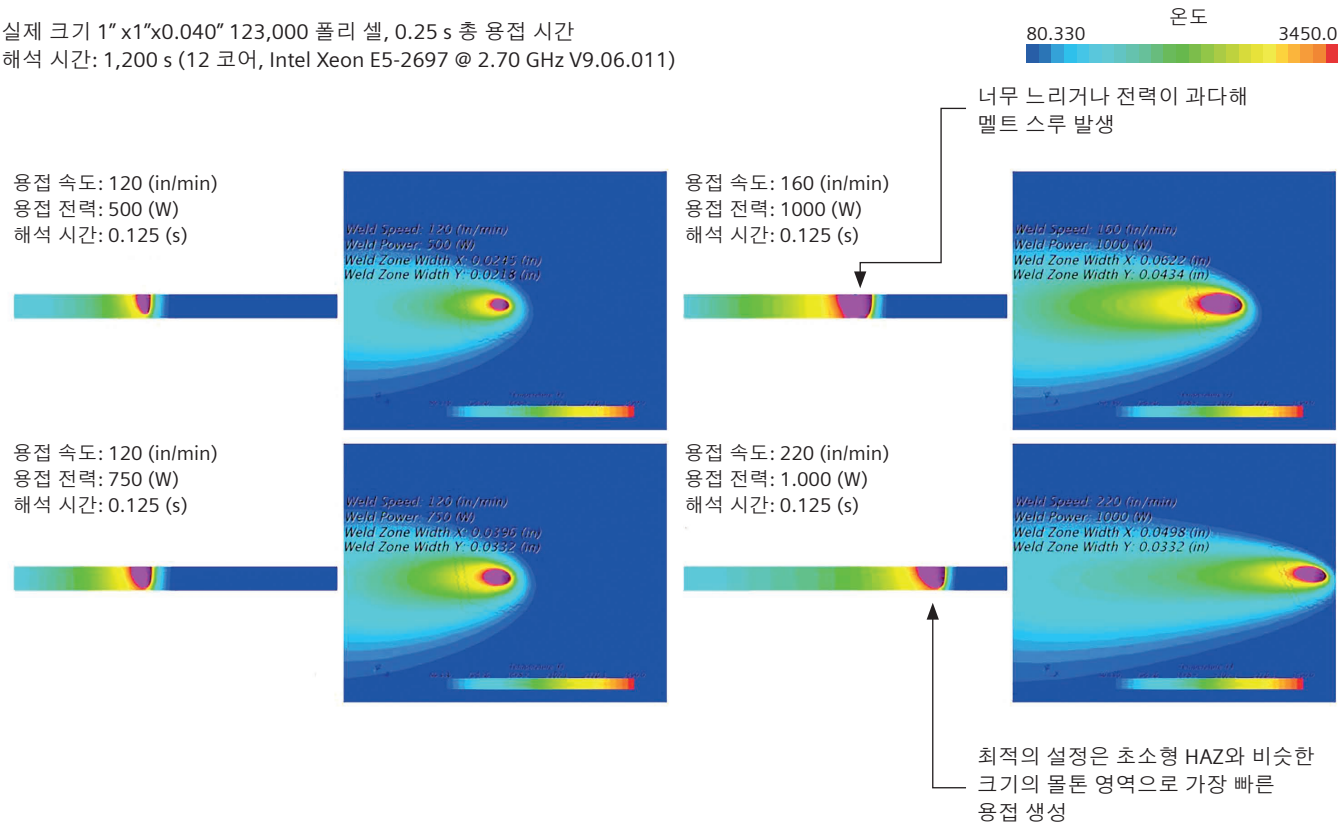


그림 3: Bemis가 컴포넌트 설계에 사용한 MDX 컨셉트 중 하나는 Simcenter STAR-CCM+ / Optimate로 알려진 애드온 모듈이었습니다.

엔지니어링 솔루션에 이르는 가장 빠르고 자동화된 모델을 제공하는 단일 통합 환경을 갖추고 있습니다. 이는 Bemis가 중요하게 생각하는 두 가지 조건인 속도와 강력함을 모두 충족합니다. 사용하기 쉬운 이 소프트웨어의 강력한 메싱 툴은 몇 주, 몇 달 걸리던 지오메트리 준비 및 메싱 시간을 단 몇 시간으로 단축하며, 정교한 지오메트리에 고품질 메시를 제공합니다. 이 모든 기능은 기존에 사용하던 CAD 및 PLM (product lifecycle management) 환경에서 사용할 수 있습니다. Bemis는 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 용접 열 전달 공정을 시뮬레이션 했습니다. 이 솔루션은 용접 폭과 블라인드 용접의 영향을 받는 형상 거동을 예측하는 데 탁월한 것으로 검증됐습니다. 그는 "Simcenter STAR-CCM+는 용접 공정을 시뮬레이션 할 수 있는 독창적 기능을 갖췄으며 용접 중에 경험할 수 있는 열 과도에 대한 인사이트를 실용적이면서도 산업용으로 사용하기에 충분한 수준으로 제공합니다"라고 말했습니다.

오버셋 메싱의 힘

지난 30년간 CFD 시뮬레이션을 시도한 엔지니어는 움직이는 여러 개체 간 상호작용으로 인한 어려움을 겪었습니다. 과거에는 이 작업을 하려면 개체 간에 서로 연결된 메시를 생성해야 했는데, 이는 극히 어렵고 시간도 많이 걸리며 수작업이 많이 들어가는 공정이었습니다. 실제로 이동 범위가 극단적이거나 개체 간 상호작용이 밀접하면 거의 불가능하다고 봐야 했습니다.

Simcenter STAR-CCM+는 오버셋 메싱으로 이 문제를 해결했습니다. 가끔 오버래핑 또는 키메라 메시라고도 불리는 오버셋 메싱은 움직이는 개체가 들어가는 복잡한 물리의 모델링과 시뮬레이션을 처리하는 새롭고 한층 효과적인 방식을 제시합니다. 이 방식은 사용자가 움직이는 개체 주변에 개별 메시를 생성한 후 원하는 대로 배경 메시에 이를 옮길 수 있습니다. Bemis는 "용접 공정에서 열원이나 자재를 옮길 수 있습니다. 오버셋 메싱을 사용하면 열원과 용접되는 파트 간의 상대적

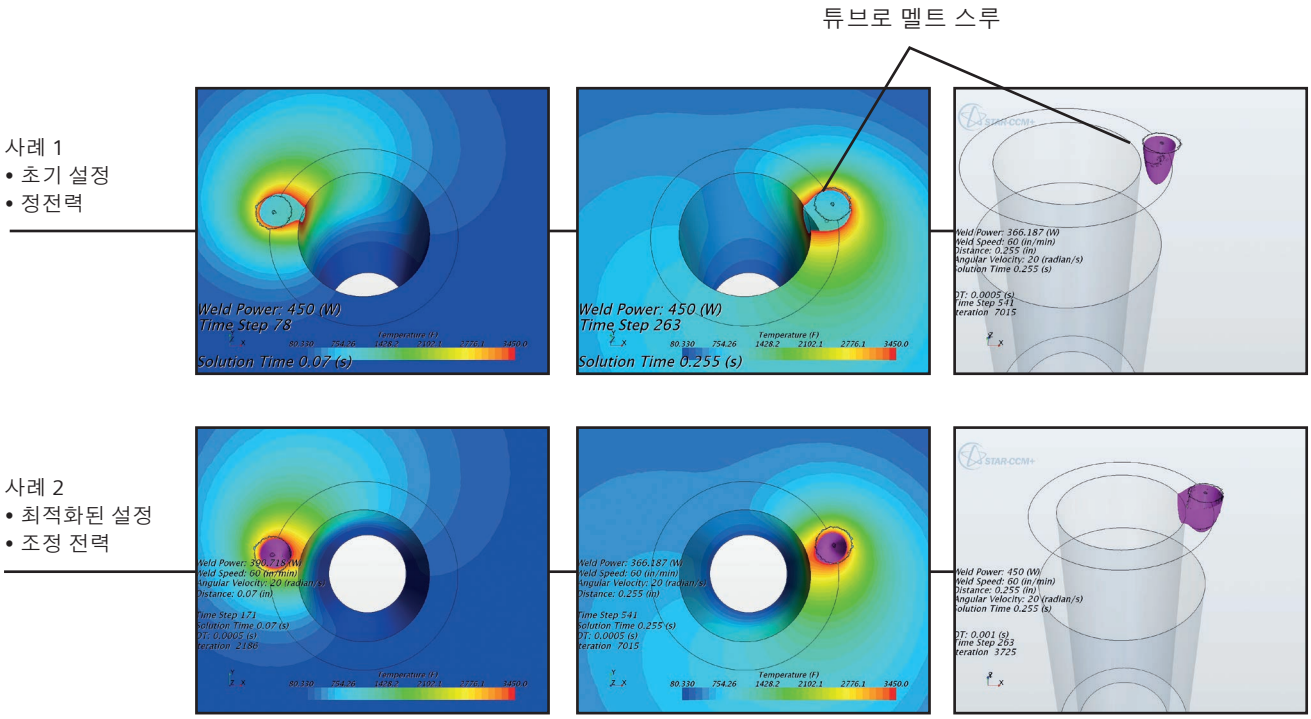


그림 4: 스타트 드웰과 램프를 최적화하면 시작 시 전체 깊이 용접을 수행합니다.원형 용접을 통한 전력 램프 감소는 열 축적 시 용접 크기와 깊이를 유지합니다.

움직임을 시뮬레이션할 수 있습니다. 레이저 파워에 따른 이 움직임은 용접 폭, 용융 영역 크기, 용입 깊이를 결정합니다. 우리는 오버셋 메시를 사용해 상당히 거친 배경 메시와 더불어 미세한 상세 메시를 실행할 수 있었습니다. 배경 메시를 통해 임의로 이동해 원하는 용접 패턴을 생성했습니다. 일부 용접은 길이 100 mm, 두께 ½ mm 였으며, 용접 영역에서 시뮬레이션을 개선할 수 있는 큰 종횡비와 많은 메시가 나왔습니다" 라고 말했습니다.

Bemis는 이동하는 개체로 작업하고 있었습니다. 용접 영역에서는 열이 발생하며, 용접에서 용접으로 이동할 때 매개변수가 변경됩니다. 설계자는 오버셋 메싱을 사용해 컴포넌트의 개별 용접을 시뮬레이션 할 수 있으며, 열 전달로 인해 변화하는 작업 대상 자재의 특성을 고려했습니다. 움직이는 오버셋 메시를 사용한 내재적 비정상 시뮬레이션으로 조인트를 따라 진행하는 용융 영역의 범위와 공작물 온도, 픽스처로의 열 전달을 예측할 수 있습니다. 레이저 힘, 이동 속도, 가속도 및 펄스 주파수와 같은 매개변수를 조정해 원하는 최적의 용접을 제공할 수 있습니다.

새로운 방법

Bemis의 팀은 또한 MDX (Multidisciplinary Design eXploration)로 알려진 방법을 사용했습니다. MDX를 통해 성능에 영향을 줄 수 있는 모든 물리에 대해 컨셉트 단계 초기부터 설계를 자동으로 테스트할 수 있습니다. 이것이 가능했던 것은 엔지니어가 라이프사이클 중 경험할 상황에서 제품 성능을 판단할 수 있도록 지원하는 Simcenter STAR-CCM+와 같은 정교한 시뮬레이션 소프트웨어의 기능이 향상됐기 때문입니다.

Bemis는 "우리는 Optimate을 사용해 매개변수 공간을 먼저 탐색하고 공정과 컴포넌트를 변경해 원하는 최종 결과를 얻었습니다" 라고 말했습니다. "용접 속도와 전력, 필드 함수를 설정해 레이저 제어를 모방할 수 있었습니다. 레이저를 상하로 조절하고 전압 피드와 Optimate이 액세스 할 수 있는 다른 모든

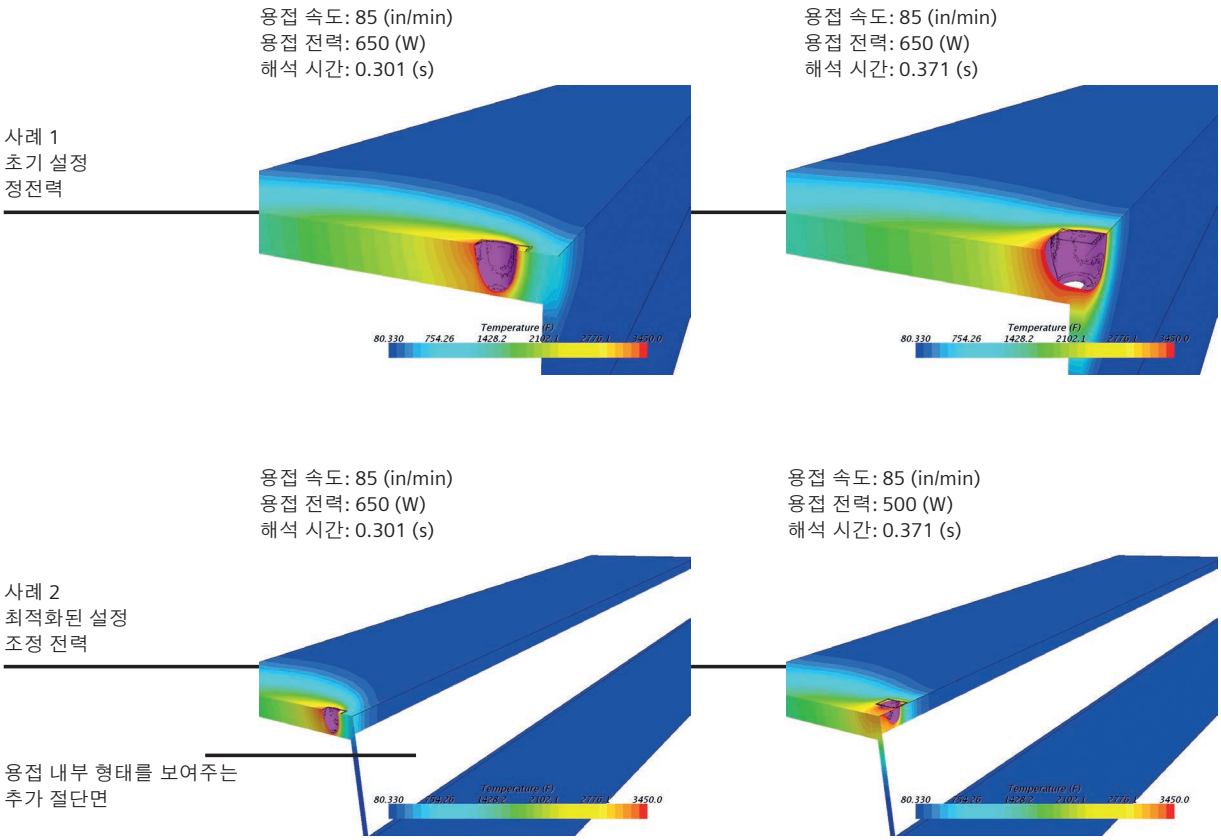


그림 5: 사례 1은 용접 풀이 일정한 힘과 속도로 코너를 통해 녹는 방법을 보여줍니다. 사례 2는 용접 사이클에서 균일한 용접 풀을 사용할 수 있는 최적화 설정을 보여줍니다.

매개변수를 시뮬레이션 할 수 있었습니다. 그 다음 이 소프트웨어를 사용해 케이스를 실행해 속도를 늦추는 데 필요한 코너에서 얼마나 멀리 떨어져 있는지, 기본 자재 컴포넌트에 동일한 열 유효 영역을 유지하면서 날카로운 모서리 주위를 용접하기 위해 레이저 파워를 얼마나 떨어뜨릴지 등을 결정했습니다. 이 시뮬레이션으로 설계 공정 초기에 실험 검증에 필요한 모든 용접 매개변수를 규정할 수 있었습니다."

"충분히 정확"

Bemis는 Simcenter STAR-CCM+ 시뮬레이션 솔루션을 사용한다는 것은 결과가 "충분히 정확" 하다는 것을 의미한다고 말했습니다. 이들은 문제를 완벽히 시뮬레이션하려고 하는 대신, 실제 용접 특성을 정확하게 예측하고 매개변수를 평가하며 어떤 방향을 취할지 결정하기에 충분한 정보를 얻었습니다. Bemis에 따르면 이 과정이 모션 및 오버셋 메싱을 사용하는 완전한 과도 시뮬레이션이라는 점을 감안하면 상당히 빠르다는군요. 그는 Simcenter STAR-CCM+/Optimate이 장착된 고급 워크스테이션에서 충분한 케이스를 실행해 설계 공간 실험과 최적화를 수행할 수 있었습니다. Simcenter STAR-CCM+는 열 입력 필드 함수 인터페이스를 위한 시간 종속적 매개변수에서 복잡한 모션을 시뮬레이션할 수 있을 정도로 유연합니다. Bemis는 "직접 C 코드나 FORTRAN을 쓰지 않고도 이런 기능을 사용할 수 있다는 점은 놀랍습니다"라고 말합니다. "최소 6개월 정도 걸렸던 개발 시행착오, – 6개월 간의 실험 시간을 절약했습니다. – 상당한 성과이지요. 실제로 설계에 더 많은 시간을 할애해 블라인드 용접을 사용하지 않는 방법을 알아내는

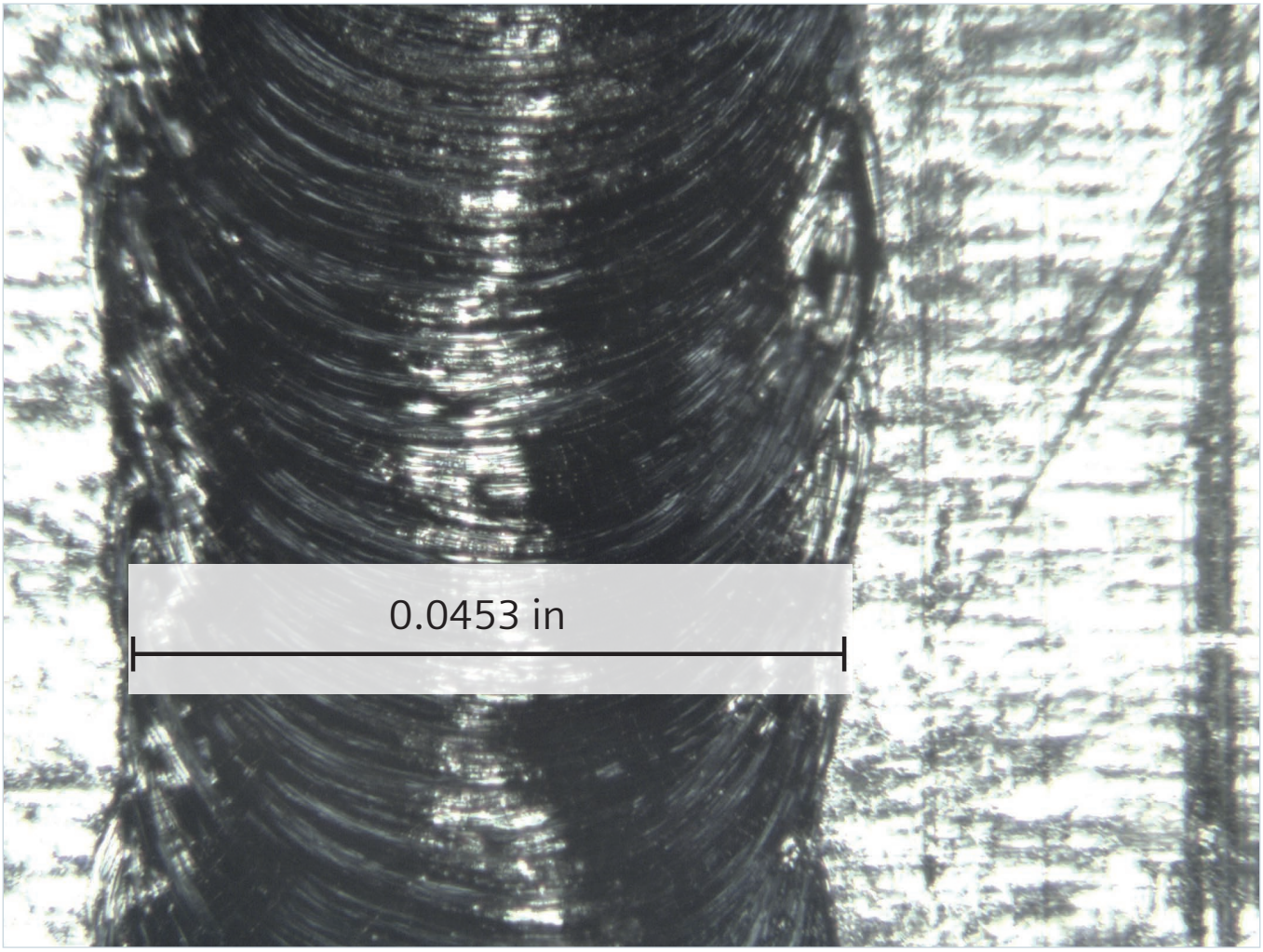


그림 6: 용접 영역 폭과 깊이는 광학 현미경을 사용해 검증했습니다.

쾌거를 이뤘습니다. Simcenter STAR-CCM+와 Optimate을 사용한 고품질 시뮬레이션으로 컴포넌트 연구와 설계는 물론, 제조 공정을 모두 동시에 탐색할 수 있었습니다. 모든 팹 단계와 공정이 갖춰진 제조 시설에 최종 컴포넌트 설계를 보낼 수 있었습니다. 상당히 강력한 작업 방식입니다.

"우리는 Simcenter STAR-CCM+를 매일 사용합니다. 설계와 개발 작업을 하는 데 필수적 부분이 됐습니다."

참조

Praxair Direct: Welding Terms Glossary

JFE 테크노-리서치, 일본식 '모노즈쿠리'에 시뮬레이션 활용

Toshiki Hiruta, CAE 센터장

카토 조지 (중간), 이와사키 카츠히로 (왼쪽), 사토 노리카즈 (오른쪽)

JFE 그룹 내 JFE 테크노-리서치의 역할

한 세기 넘는 세월을 업계에 몸 담아온 JFE Steel Corporation은 세계 5위 규모의 조강 생산량을 자랑합니다. JFE 그룹 계열사인 JEF Techno-Research Corporation은 유체 해석, 구조 해석 및 자재 평가, 조사 및 검사 등 다른 JEF 사업 영역을 수행합니다. 이들은 철강 플랜트, 환경 공학 및 그룹 내 다른 영역을 담당하며, 그룹 외부 비즈니스와도 적극 연계하고 있습니다. 특히 자동차, 기계, 전기 기계, 전자 부품, 건설, 토목 공학 및 연구 기관 등 다양한 산업 영역의 엔지니어링 서비스 프로젝트를 진행합니다. JEF Techno-Research Corporation은 신뢰할 수 있는 해석 및 평가 기술에 기반해 이들 영역에 엔지니어링 솔루션과 컨설팅 서비스를 제공하며,

주력하는 두 영역은 다음과 같습니다:

1. 해석 뿐만 아니라 철강 산업에서 쌓아온 수년간의 경험에 기반해 솔루션을 제시할 수 있는 능력

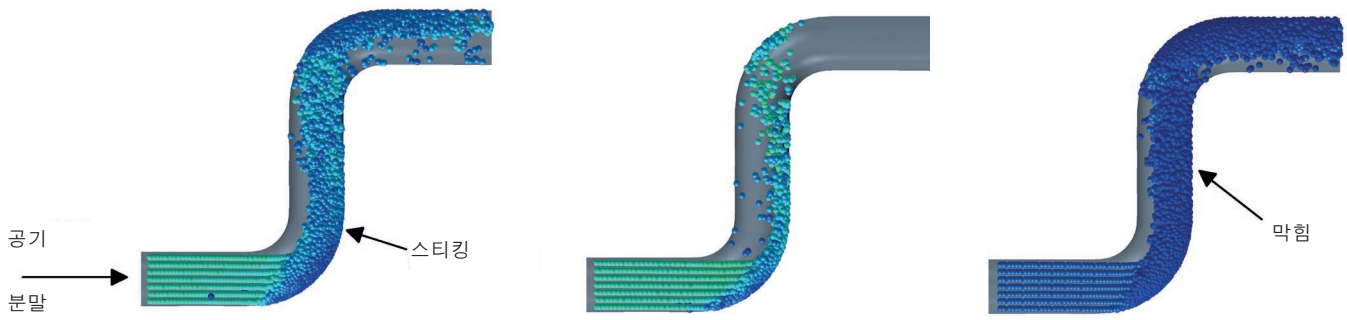


그림 1: Simcenter STAR-CCM+를 사용한 분말 전달에서의 분말 거동 해석.

2. 테스트 결과를 활용하는 제안서 패키징: 솔루션 사업부(가와사키)는 CAE 센터와 센싱 및 시각화 해석 센터, 구조성능부, 재료성능평가부, 장비 및 공정기술부, 그 외 특수 테스트 및 해석 사업부로 구성돼 있으며, 완전한 서비스를 제공합니다.

JFE Techno-Research는 해석 결과와 설계 개선 가이드, 최고의 제품을 만들기 위해 심혈을 기울인다는 일본 사회의 장인 정신을 뜻하는 '모노즈쿠리'와 관련된 모든 측면에 대한 해석을 제공해 안정적인 제품 품질 구현 및 생산비 절감을 지원합니다. 이 글에서는 모노즈쿠리에서 수치 해석이 하는 중요한 역할에 대한 JFE Techno-Research의 CAE 센터 사람들의 이야기를 들어봅니다.

계산 정확성 향상: 측정 사업부와 협업해 수치 결과 확인

엔지니어링 시뮬레이션에서 가장 어려운 부분은 수치 결과를 확인하는 작업입니다. 수치 해석과 실제 테스트의 상관관계는 최종 결과의 정확성을 향상시킵니다. JFE에서 정상 흐름 해석 목표는 테스트 결과와 비교 시 ±3% 정확성입니다. 그러나 화학 반응, 다상 흐름 등과 같은 현상이 포함되는 한층 복잡한 모델의 경우, 해석 정확도는 주로 ±10%로 증가합니다. 히루타 토시키 CAE 센터장은 "목표는 ±3%이지만 어느 정도 경험이 있는 직원이 있어야 결과를 검토해 적절한 지 여부를 파악할 수 있습니다."

선임 연구 엔지니어 이와사키 가츠히로는 이렇게 말했습니다. "고객에 따라 테스트와 해석 모두를 요청하는 경우도 있습니다. 이건 쉽지 않은 작업입니다. 테스트 값이 나오면 다음 단계에서 해석 결과를 조정해야 합니다. 특히 해석이 점점 더 복잡해지면 테스트 값을 해석하고 해석 결과와 비교하는 작업의 중요성도 그만큼 커집니다. 또한 고객이 테스트 결과를 가져와 우리에게 결과가 제시하는 모델에 기반해 커스터마이제이션을 요청하는 경우도 있습니다."

JFE Techno-Research에서는 온도, 유속, 가스 조성 및 기타 매개변수를 실제 측정하는 데 CFD와 더불어 측정 부서를 적극 활용합니다. 이렇게 나온 데이터를 CFD 결과와 비교해 건전성을 확인하고 결과 정확성을 향상시킵니다. 그림 1~3은 JFE Techno-Research에서 실시하는 분말 운송 배관에서의 분말 거동 해석, 주조 파트 유동성 및 응고 해석, 수소 누출 확산 거동 해석 등의 몇몇 시뮬레이션 적용 분야를 보여줍니다.

다양한 CFD 문제 해결: 단상에서 다상 흐름까지

CAD 센터의 CFD 관련 작업을 위해 이와사키는 화학 반응과 연소, 폭발, 기타 열유체 공정 문제 시뮬레이션을 맡고 있습니다. 뿐만 아니라 자체적인 연구와 기본 연구에서 기계 제작에 이르는 다양한 작업을 지원합니다. 사토 노리카즈는 열유체, 열 전달과 입자, 그 외 업무와 관련된 다상 흐름을 전담하는 CFD 기술 지원을 맡고 있습니다. 히루타는 CAE 센터에서 시뮬레이션이 하는 역할과 해석 테마를 이렇게 설명합니다. "여기서 하는 작업은 다양한 분야와 관련돼 있지만 핵심은 구조와 유체, 유체-구조 상호작용 (FS) 해석에 있습니다. 앞서 언급한 작업 외에도 CAD 센터는 새로운 분야에 적용할 수 있는 해석 방식을 개발하는 작업도 맡고 있습니다. 예를 들어 R&D는 유체 해석의 경우 단일 현상을 기반으로 할 뿐만 아니라 다중 물리로 알려진 한층 복잡한 현상에 맞게 구성돼 있습니다. 우리 회사에는 자체 수치 시뮬레이션 코드를 개발하는 부서가 있지만, 상용 CFD 소프트웨어를 활용해 적용 분야를 확장해 나가고 있습니다." JFE Techno-Research와 Siemens Digital Industries Software는 이러한 R&D 노력을 지원하기 위한 모델 구축을 위해 협력하고 있습니다.

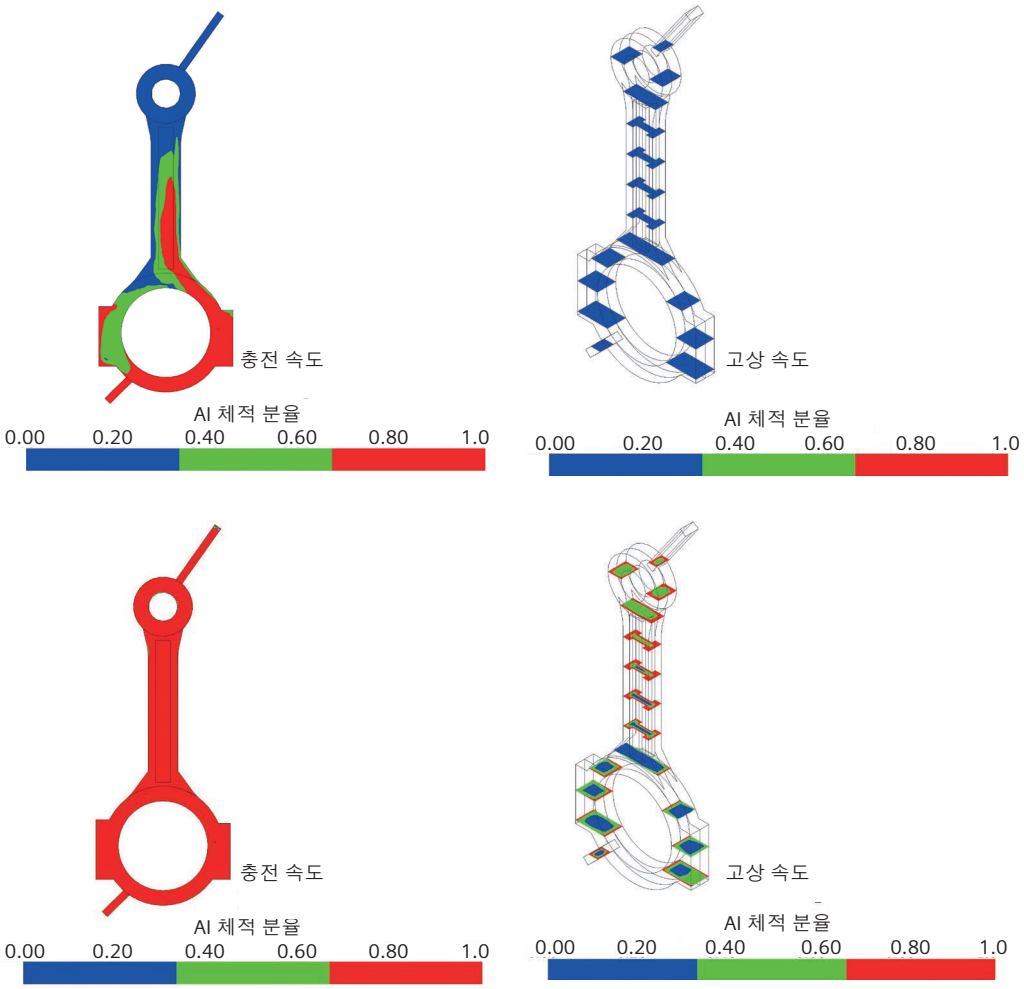


그림 2: 주조 (위) 및 주조 후 고화 (아래) 중 충전 속도와 고상 속도를 보여주는 Simcenter STAR-CCM+를 사용한 주조 파트 유동성 및 응고 해석.

해석 결과 해석 및 평가의 중요성

사토는 해석 작업에 사용하는 시스템에 대해 이렇게 설명합니다. "우리 센터는 ISO9001에 따라 품질 관리 시스템으로 인증을 받았습니다. 해석 수행 시 프로젝트 관리자를 각 엔지니어링 서비스 프로젝트에 할당해 해석이 올바르게 진행되고 사양과 일치하도록 검수 시스템을 효과적으로 적용합니다. 보통 기술 담당자 한 사람이 프로젝트 관리자 역할을 하며, 한 두 명의 젊은 팀원들이 실제 해석을 수행합니다. CFD 코드를 사용해 작업을 진행하는 것은 젊은 팀원들이지만, 해석 유형에 따라 선임 엔지니어가 개입해 해석 소프트웨어를 실행하고 커스터마이제이션과 테스트 계산 등의 작업을 수행하는 경우도 있습니다." 또한 팀으로 해석을 수행할 때 중요한 점과 여러 부서/현장 간 정보를 공유하는 방식과 그 외 난제 등에 대해 물어봤습니다. 이와사키는 커뮤니케이션 방식에 대해 이렇게 설명합니다: "우리는 보고와 연락, 협의를 밀접히 진행하고 기밀을 유지하는 데 각별한 주의를 기울입니다. 젊은 직원들을 대상으로 한 OJT (on-the-job training)은 이들의 잠재력을 높이면서 회사 기술을 전수하는 데 효과적입니다. 효과적인 상호 커뮤니케이션이 없으면 서로 다른 방향으로 나아가며 돌이킬 수 없는 실수를 범할 위험이 발생합니다."

그는 또한 이렇게 말했습니다. "규정된 조건이나 가정을 토대로 해석을 구현할 때 결과 실현 가능성에 대해 고객이 제기할 수 있는 의문점을 가정하고 젊은 팀원들과 아이디어를 공유하며 작업을 진행합니다. 모델 구축 분야에서 해석 목표의 기술적 개념, 결과 평가 방법 및 고객에 결과를 설명하는 방법을 적절히 반영했는지 결정하는 과정에서 젊은 친구들과 긴밀히 소통해야 할 필요성을 절실히 느낍니다. 특히 CFD를 사용해 실제 물리적 현상과 화학 반응 공정, 그 외 조건을 완전히 시뮬레이션하기기

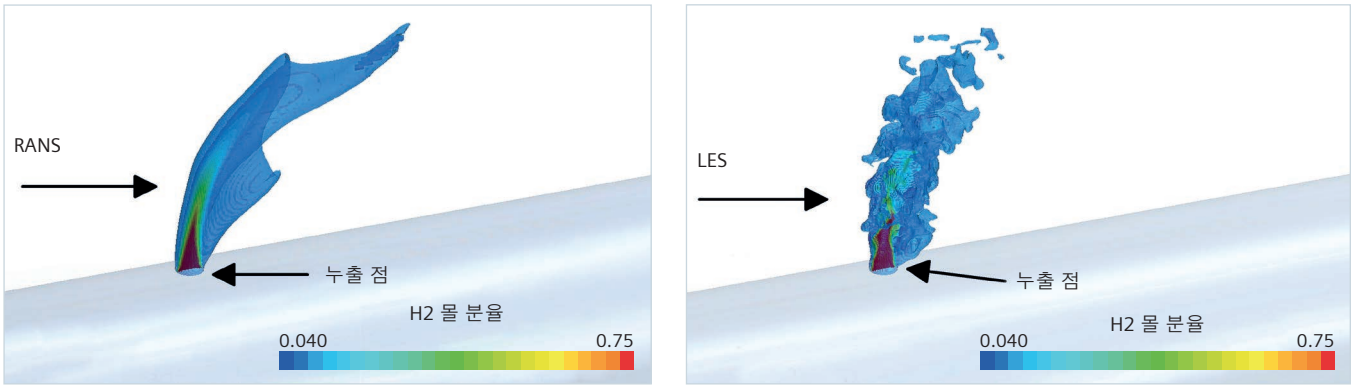


그림 3: Simcenter STAR-CCM+에서 RANS (왼쪽) 및 LES (오른쪽)를 사용한 수소 누출 확산 해석.

불가능하다는 사실 때문에 가설과 예상 방법, 해석 결과 해석과 평가에 각별한 주의를 기울입니다. 젊은 친구들을 위해 특별히 시간과 주의를 들여 고객이 배우고자 하는 것, 고객이 유념하는 것, 그 외 주요 관심사를 파악하는 것의 중요성을 강조합니다.

그 외에도: 고객으로부터 위탁 받은 해석 프로젝트를 수행할 때 우리 팀은 해석을 수행하고 보고서를 작성합니다. 이 보고서를 최종 확인하는 것이 제 임무입니다. 이 과정에서 가장 중요한 것은 결과가 고객의 기대에 미치지 못한 경우, 추후 해석 품질을 향상시킬 방법을 고려하는 것입니다. 결과를 검수하는 것은 당연히 중요하지만, 해석 결과만 놓고 리뷰를 하기란 사실상 상당히 어려움이 있습니다.

CFD를 넘어서는 확장성을 제공하는 Simcenter STAR-CCM+

JFE Techno-Research에서 Simcenter STAR-CCM+는 두 가지 중요한 부분에서 훌륭한 평가를 받았습니다. 첫째, 지오메트리 준비, 메싱, 물리적 모델링, 해석 및 포스트프로세싱을 망라하는 통합 워크플로가 상당히 사용자 친화적인 것으로 간주됐습니다. 둘째, 다분야 소프트웨어 패키지는 코드 내에서 그리고 Abaqus 및 기타 응력 솔버와의 커플링을 통해 선형 응력 해석 옵션을 제공하며, 이는 재료 선택 평가에 쉽게 사용할 수 있습니다. 또한 v10.04부터 FEM 함수를 추가해 FSI 해석 영역이 한층 확장될 것이란 기대감도 있습니다.

사토에 따르면 Simcenter STAR-CCM+는 메시 기능 측면에서 그 탁월함을 인정받았으며, 특히 복잡한 지오메트리로 작업할 때에도 간단한 조작으로 메시를 생성할 수 있는 기능이 우수합니다. 이 기능은 프로토타입을 신속히 해석하기 위한 핵심이라는 것이 그의 설명입니다. 또한 그는 Simcenter STAR-CCM+가 여러 물리적 모델을 쉽게 연결하고 필드 함수와 스크립팅으로 쉽게 커스터마이제이션 하는 등의 여러 이점을 극찬했습니다.

마지막으로 Simcenter STAR-CCM+와 Siemens 서비스에 기대하는 개선점에 대해 물어봤습니다. 이와사키는 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 독립적으로 간이 제조 공정 시뮬레이션 간소화에 대한 연구와 평가를 진행하고 있습니다.

그는 응고 해석, 분산 강화 재료의 2상 분포를 사용해 냉각 속도를 도출하고 재료 속성에 이를 반영하고자 합니다. 이와사키는 이러한 노력의 성과를 Simcenter STAR-CCM+로 보내 선형 응력 해석을 수행해 응력 집중 영역을 파악할 수 있으려면 한층 효율적인 형상과 공정을 실현할 수 있어야 한다고 생각합니다. 사토는 DEM, FSI, 대규모 컴퓨팅 및 최적화 영역의 해석 제안과 엔지니어링 서비스를 맡아 진행하고 있습니다. 그는 높은 수준의 커스터마이제이션을 제공하는 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 전례 없는 수준으로 복잡한 해석 기법을 제안할 수 있게 될 것으로 생각합니다. 또한 히루타는 헬스케어 관련 분야에 이를 적용할 수 있는 가능성에 대해 언급했습니다. 특히 임플란트 구조 해석 분야에 이러한 노력이 집중되고 있습니다. 또한 그는 생명과학 분야에서 유체 해석은 아직 미지의 영역으로 남아있지만, 그러나 성장 가능성이 다분한 영역으로 보고 있습니다.

결론

JFE Techno-Research의 CAE 센터는 JFE 그룹 외부에서 여러 프로젝트를 수행합니다. 이들이 보유한 CAE 경험을 다른 분야에 사용하는 방법에 대한 보고서는 고무적입니다. CFD 해석 외에도 이들은 FSI 해석 및 헬스케어 등의 새로운 분야도 진행해 나갈 것입니다. Siemens는 이들의 노력을 지원하는 데 필요한 모든 리소스를 글로벌 차원에서 총 동원할 준비가 돼 있습니다.

혼합 산업: 미세 조정 또는 설계 탐색을 통한 절감

들어가는 말

여러 성분을 혼합해 단일 제품으로 변형시키는 기술인 혼합은 여러 화학 공정과 의약품 제조 공정에서 중요한 역할을 합니다. 일상에서 사용하는 제품들을 생각해 보면 혼합이 없을 경우 우리 산업과 일상에 얼마나 큰 차질이 빚어질 지 떠올려 볼 수 있습니다. 마트에 있는 식품부터 헬스케어, 의약품, 폴리머, 광물, 페인트, 코팅, 바이오연료 등에 이르는 대부분의 제품은 혼합이라는 중요한 생산 단계를 거쳐야 합니다. 여러 산업이 일정한 입자 크기 분포와 색상, 질감, 반응성 등 필요한 속성을 갖춰 원하는 중량/부피로 균일한 혼합을 제공하고 혼합 불량에 따른 벌금 부담을 방지하려면 혼합 품질을 제어하는 것이 중요합니다.

미흡한 시스템 사용에 따른 비용을 방지하는 것과 더불어 제품 개선에 대한 요구도 거세 최소한의 투자와 운영비로 혼합 시간을 단축하고 혼합 품질을 향상시킬 수 있는 최고의 전략을 찾는 것이 중요합니다. 첨단 시뮬레이션 및 최적화 소프트웨어가 등장하며 더 이상 최적의 설계를 얻기 위해 과거에 사용하던 시행착오 방식을 사용할 필요가 없습니다. 엔지니어가 중요한 혼합 성능 매개변수를 파악하면 수 백 가지 설계 지점을 신속히 시뮬레이션 해 최고의 설계를 찾아 시스템 효율성을 높이고 경쟁력을 확보할 수 있습니다.

교반 탱크 설계 최적화 연구

일반적으로 교반 탱크 반응기 설계 시 목표는 혼합 시간, 혼합 품질, 전력 소비입니다. 혼합 시간은 최소로, 혼합 품질은 최대로, 전력 소비는 특정 값을 달성해야 합니다. 이를 위해서는 기계, 전기 및 화학 부품을 비롯한 설계 공정의 여러 측면을 개선해야 합니다. 기계 관점에서 설계 매개변수는 임펠러 구성, 용기 크기, 용기 유형, 배플 수 등이 될 수 있습니다. 이런 유형의 최적화 문제에서 한 가지 핵심적인 문제는 설계 매개변수와 설계 목표 간 관계는 비선형이라 설계 수정이 시간 소요가 많은 지루한 작업이 된다는 점입니다. 설계 엔지니어가 실험실 규모로 새로운 시스템을 프로토타이핑하고 이를 생산 규모로 확장해 개선해야 하는 경우 상당히 비용과 시간이 많이 소요되는 공정이 됩니다. 바로 이런 상황에 수치 설계 최적화를 사용할 수 있습니다. 실제 프로토타입을 제작하기 전에 최적의 교반 반응기를 생성할 수 있도록 설계 매개변수를 자율적으로 개선할 수 있어 상당한 가치를 얻을 수 있습니다. 수치 혼합기 최적화는 수익성 요구사항을 충족시킬 수 있는 확실한 비즈니스 툴로 간주되며, 더 나은 품질의 제품을 제공하면서 상당한 경쟁력을 가져다 줍니다.

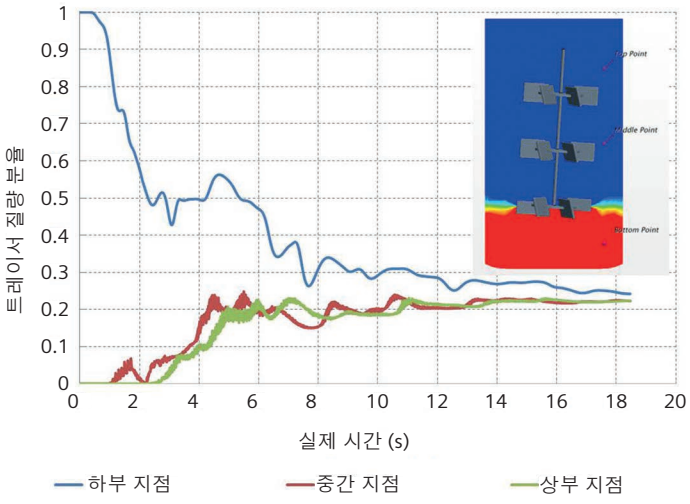


그림 1A: 시간 함수로 국소 농도의 정량적 변화를 보여주는 비활성 트레이서 방법 (널리 사용되는 실험 기법과 유사).

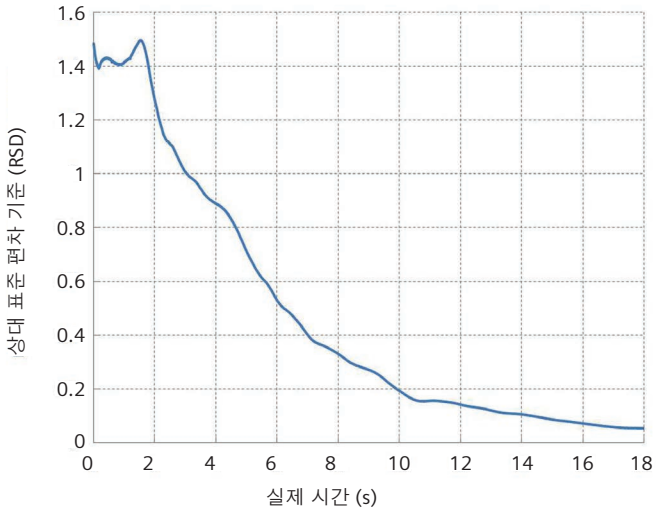


그림 1B: 상대 표준 편차 방법.

최적화 연구는 근본적으로 상충성을 띄는 것이라 어느 한 가지 최적 설계가 있는 것이 아닙니다. 예를 들어 혼합기 설계 엔지니어가 혼합 시간과 전력 소비를 최소화해야 하는 경우, 이 두 목표에 최고의 가치를 제공하는 설계란 없습니다. 혼합 시간 개선은 전력 소비를 희생시켜야만 가능합니다. 이런 시나리오에서 비지배 정렬 알고리즘은 반대 목표의 주어진 값에 대해 한 가지 목표에 최적인 설계를 찾습니다. Pareto 최적화 연구 결과는 이 조건을 만족하는 설계이며, 이는 비지배 설계 조건이라고 부르기도 합니다.

이번 연구에서는 교반 탱크 설계에 대한 조정 매개변수와 서로 겨루는 두 가지 목표를 파악했습니다.

1. 동력 수 vs. 혼합 시간.

2. 임펠러 모먼트 vs. 혼합 품질.

핵심 목표는 각 사례별로 제각각 다른 목표 간에 최적의 균형을 찾는 것이었습니다. 이에 Pareto 최적 설계 세트인 MO-SHERPA를 사용해 혼합을 위한 다목적 혼합 연구를 수행했습니다. 수치 방식을 살펴보기 전에 우선 다음 섹션에서 혼합 기준을 먼저 살펴보겠습니다.

혼합 기준

혼합 시간은 혼합물에서 사전에 정의한 균질성 수준을 달성하는 데 걸리는 시간으로 정의할 수 있습니다. 품질과 시간 면에서 혼합을 수량화할 최상의 방법을 파악하는 것은 어려울 수 있습니다. 탈색, 전기 전도도, pH 측정과 같은 혼합 품질을 평가할 수 있는 몇 가지 실험적 방법이 있습니다. 그러나 이 모든 방법은 혼합물을 트레이서에 주입한 후 육안으로나 다양한 위치에서 프로브를 사용해 농도를 측정하는 방식이라 불확실성이 수반되게 마련입니다. 예를 들어 90% 균질성을 얻는 데 필요한 혼합 시간은 트레이서 농도 변동이 농도의 10% 미만이어야 하며, 완벽한 혼합으로 얻었을 것입니다. 그러나 연구를 통해 알 수 있는 점은 이 값은 프로브 크기나 트레이서 주입 위치의 영향을 많이 받을 수 있다는 점입니다. 또한, 이 방식은 한정된 수의 프로브 위치에서 혼합 품질 지표만 제공하므로 정확한 그림을 얻으려면 더 많은 샘플이 필요한데, 이는 시간이 많이 걸리고 지루하며 비용이 많이 듭니다. 이러한 단점은 수치 기법으로 쉽게 해결할 수 있으며, 최상의 방법은 수치 영역 내 모든 셀에서 혼합 품질에 통계 해석을 사용하는

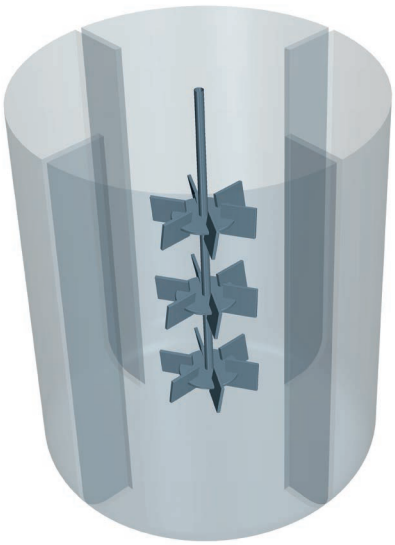


그림 2A: Simcenter STAR-CCM+에서 생성된 혼합 탱크 지오메트리.

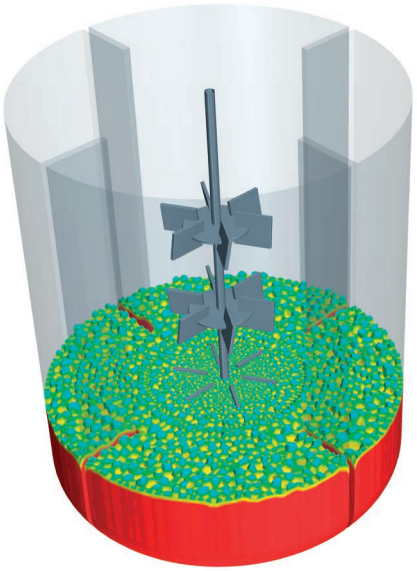


그림 2B: 필드 함수로 정의한 트레이서 초기 조건.

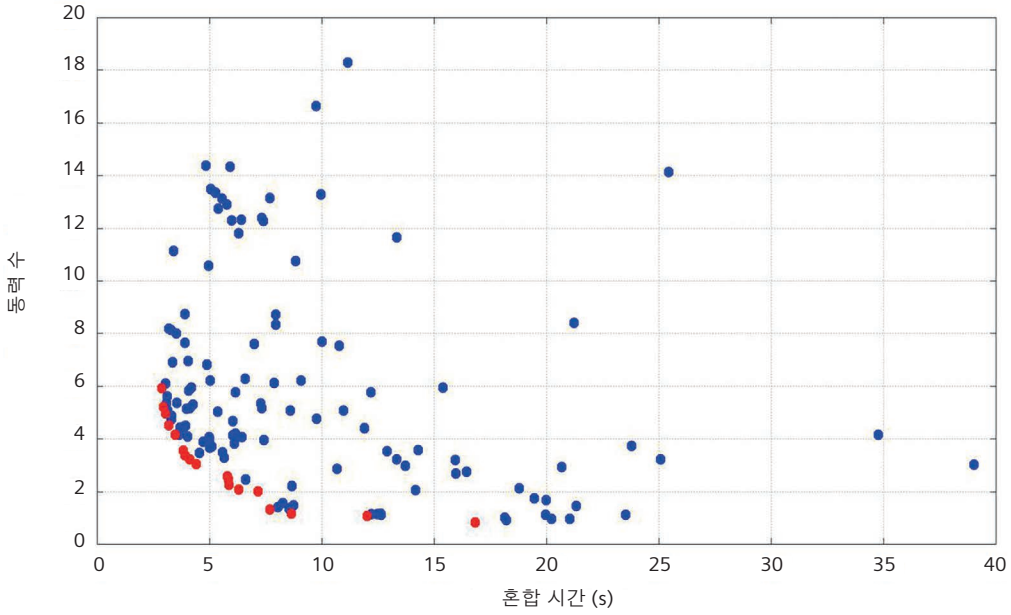
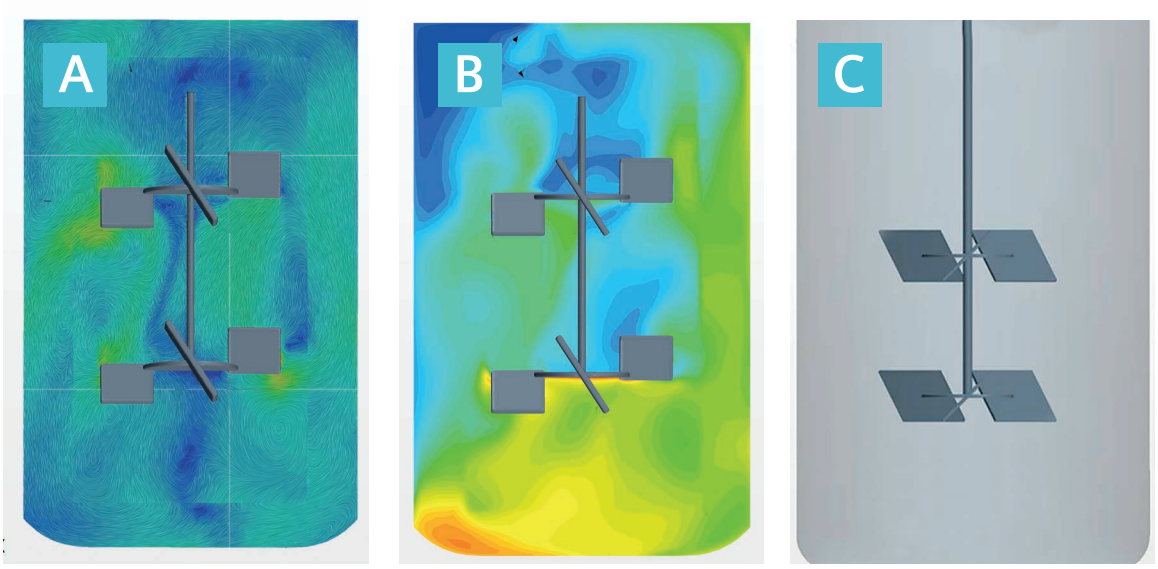


그림 3: 파레토 프런트 결과 (빨간색 점)는 최적의 코너로 최적기를 강제하는 설계를 보여줍니다.

것입니다. 이와 관련해 Simcenter STAR-CCM+는 필드 함수를 통해 혼합 품질을 측정할 수 있도록 원하는 다양한 수학 공식을 정의할 수 있는 기능을 갖추고 있습니다. 또한 Simcenter STAR-CCM+를 사용해 사용자가 혼합 사이클에 걸쳐 저조한 혼합 영역을 시각화 할 수 있는 균질성 임계점을 정의할 수 있습니다.

혼합 품질 평가에 사용할 수 있는 수치 기법 중 하나로 상대 표준 편차 (RSD) 방법이 있으며, 이는 전체 도메인에서 트레이서 질량 분율의 표준 편차와 해당 평균 농도의 비율입니다. RSD는 다음과 같이 공식화 할 수 있습니다:



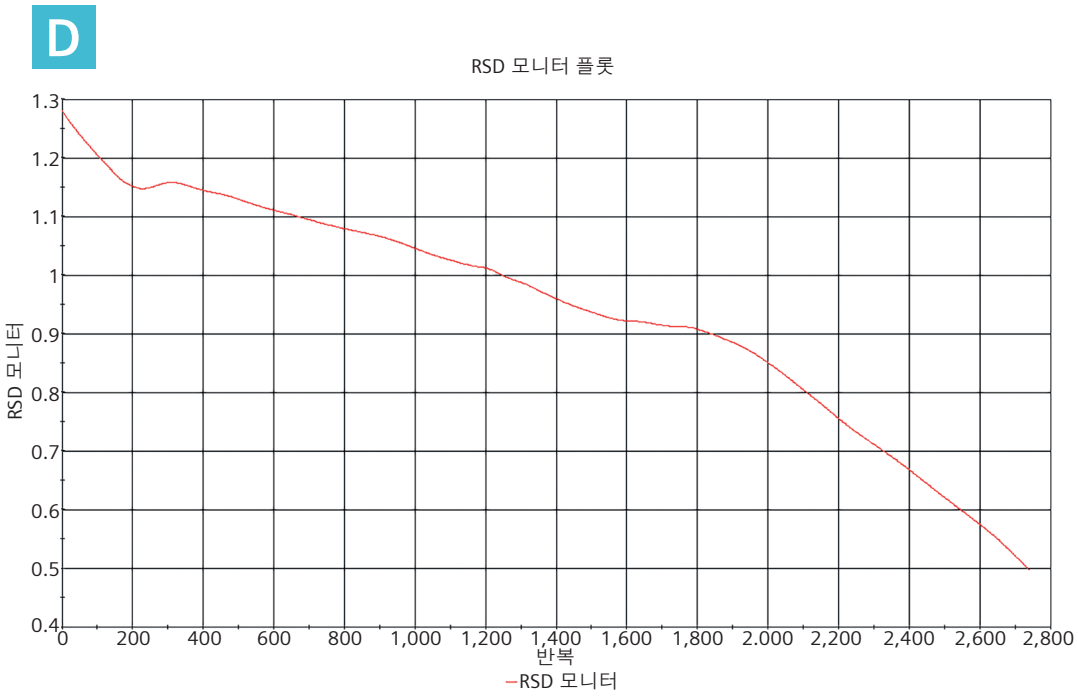


그림 4: 파레토 프런트의 설계 지점 중 하나에 대한 속도 필드 (A), 트레이서 질량 분율 (B), CAD 지오메트리 (C), RSD vs 시간 (D).

$$RSD = \frac{\sigma}{\bar{C}} \quad \text{이 경우,} \quad \sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(C_i - \bar{C}}{n-1}}$$

Ci는 i번째 셀에서의 트레이서 질량 분율이며, C는 전체 도메인에서 트레이서 질량 분율의 부피 평균 값이며, n은 셀 수입니다. 우수한 혼합일수록 RSD 값이 낮습니다. 그림 1은 기존 실험 기법과 유사한 비활성 트레이서 방식을 비교한 것과 (1A) RSD 방법 (1B)을 보여주며, 모두 Simcenter STAR-CCM+를 사용했습니다. 그림에서 볼 수 있듯 이 실험 방법은 시간 함수로써 국소 농도의 정량적 변화를 추적하며,

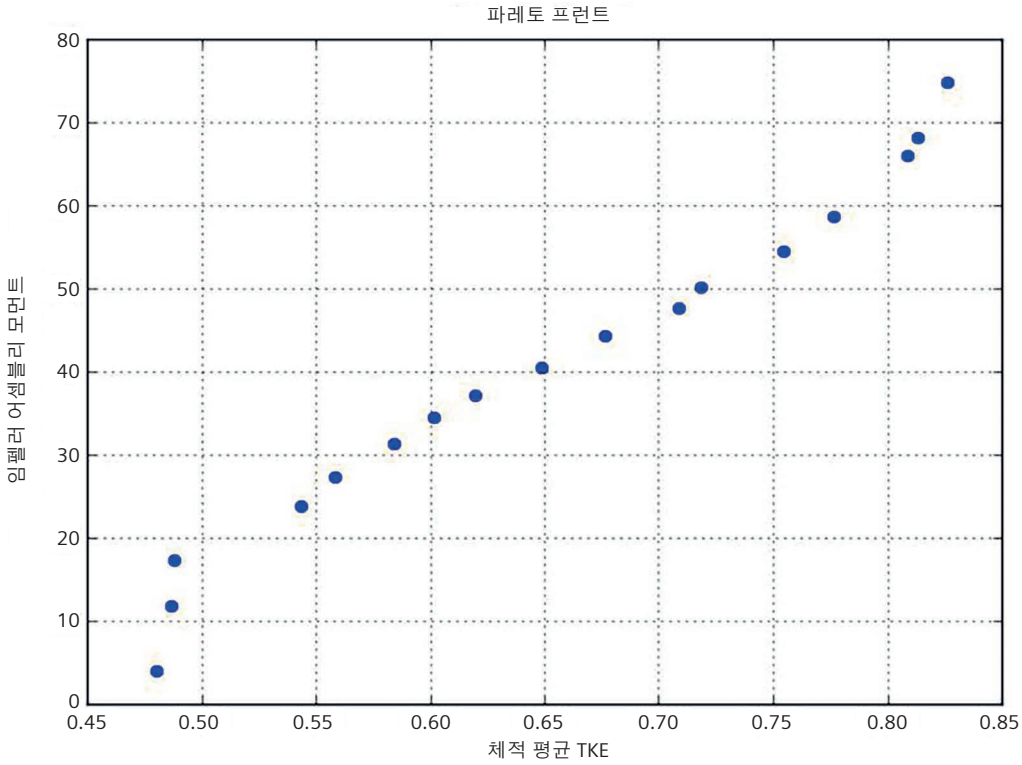


그림 5: 임펠러 어셈블리 모먼트 vs. 체적 평균 TKE에 대한 파레토 프런트.

RSD는 전체 도메인에 걸친 혼합 품질을 보장합니다. 그러므로 RSD는 이 방식이 가진 공간적 편향 문제를 해결할 수 있습니다. 이는 실험과 비교해 CFD가 가진 두드러진 이점 중 하나입니다.

이 연구에서 혼합 품질은 RSD 방법을 사용해 수치화했으며, 혼합 시간은 0.3 RSD 값에 도달하는 시간으로 정의했습니다. 이는 이상적인 혼합을 나타내진 않지만 우수한 혼합으로 볼 수 있는 보편적 값입니다.

수치 방법

3D CAD 모델러를 사용해 Simcenter STAR-CCM+에서 파라메트릭 혼합 탱크 지오메트리를 생성했습니다 (그림 2A). 혼합 액체는 처음에 탱크 하부에 있었던 패시브 스칼라로 추적했습니다 (그림 2B). 이동 참조 프레임 (MRF) 방식을 사용해 과도 시뮬레이션을 수행했습니다. 여기서 두 가지 다른 목표인 1) 동력 수 vs. 혼합 시간, 2) 임펠러 모먼트 vs. 혼합 품질을 논의했습니다.

목표 1: 동력 수 vs. 혼합 시간

사용자는 Simcenter STAR-CCM+ 고급 CAD 모델링 기능을 활용해 모든 설계 특성을 파라메트릭 변수로 정의할 수 있으며, Optimate을 사용해 이를 최적화용 입력 변수로 사용할 수 있습니다. 이 연구에서는 최적화를 위해 일곱 가지 변수를 선택했습니다.

- 임펠러 수 (2/4/3)
- 임펠러 당 블레이드 수 (3/9/7)
- 임펠러 블레이드 각도 (0/45/16)
- 임펠러 블레이드 높이 (0.01/0.06/11)
- 임펠러 반경 분율 (0.2/0.5/21)
- 배플 수 (2/6/5)
- 배플 높이 분율 (0.6/1/21)

(a/b/c) 형식으로 된 숫자 세 개는 시작점, 매개변수 증가를 위한 분할 수, 종료점을 나타냅니다. 분할 수 외에도 Optimate에서는 증분을 지정할 수 있습니다. 예를 들어 임펠러 수 증분은 1이 됩니다 (최소=2, 최대=4, 증분=1). 두 방법 모두 Optimate에서 변수를 미세 조정할 수 있는 범위를 정의합니다. 이

연구에서 이 수치는 총 8,149,680 변수에 해당합니다. 이 설계 공간을 수작업으로 커버하는 건 불가능에 가깝습니다. Optimate은 8백 개 설계 지점을 실행하는 대신 평가 횟수를 설계 변수 당 시간 효율적인 실행 횟수로 줄일 수 있는 Sherpa 최적화 알고리즘을 사용합니다. 이 알고리즘은 진행 과정에서 학습하며, 전략을 수정해 설계 공간을 효과적으로 탐색함으로써 실행 횟수를 크게 줄이고 더 나은 결과를 도출합니다. 이 사례에서는 Optimate를 사용해 단 며칠 만에 최상의 결과를 위한 설계 공간을 탐색하고 수 백 건의 평가를 완료했습니다. 첫 번째 최적화 목표는 다음과 같이 정의했습니다:

- 동력 수 최소화
- 혼합 시간 최소화

최적화를 통해 나온 결과 세트를 파레토 프런트(Pareto front)라고 칭합니다. 그림 3에서 파레토 프런트에 가까운 점의 군집화가 최적 모서리 쪽으로 설계를 강요하는 방법을 보여주며, 이는 낮은 값의 혼합 시간과 동력 수에 해당합니다. 이 플롯은 "특정 혼합 시간에 사용 가능한 최소 전력 수는 무엇인가? 또는 "특정 동력 수에 사용 가능한 최소 혼합 시간은 얼마인가?" 와 같은 질문에 답을 제공합니다. 이는 혼합 산업에서 수백만 달러 가치가 있는 질문들입니다. 그림 4는 설계 지점 중 하나에 대해 Optimate이 계산한 CAD 설계, 트레이서 프로그램의 질량 분율 및 RSD-시간 플롯을 보여줍니다.

목표 2: 임펠러 모먼트 vs. 혼합 품질

이 목표를 연구하기 위해 다음 매개변수를 고려했습니다:

- 임펠러 수 (1/5/5)
- 임펠러 블레이드 각도 (0/90/19)
- 배플 수 (0/9/10)
- 배플 높이 (0.005 m/0.012 m/15)

사용자의 목표에 따라 다른 변수를 지정할 수 있습니다.

최적화 목표는 다음과 같습니다:

- 체적 평균 난류 운동 에너지 (TKE) 최대화
- 임펠러 어셈블리 모먼트 최소화

파레토 프런트 (그림 5)는 임펠러 어셈블리에 주어진 순간 중 가능한 최대 체적 평균 TKE에 도달하는 설계를 보여줍니다.

결론

교반 탱크 설계 엔지니어는 최고의 혼합 효율성에 도달하려는 바람을 언제나 갖고 있으며, 이는 상충하는 목표인 혼합 시간 vs. 동력 수, 임펠러 어셈블리 모먼트 vs. 난류 운동 에너지의 영향을 받습니다. 이들 목표는 탱크와 임펠러의 지오메트리에 의해 크게 좌우되므로 다목적 파라메트릭 연구를 통해 이들 목표 모두를 망라할 수 있는 최상의 설계를 파악해야 합니다.

Simcenter STAR-CCM+는 Optimate 플러그인이 제공하는 강력한 하이브리드 알고리즘 기반 최적화 방법인 SHERPA를 제공하며, 이를 통해 단 시간에 더 큰 설계 공간을 탐색할 수 있습니다. 실험 데이터와 비교해 기본 시뮬레이션을 검증한 후 최적화 연구를 수행하면 사전 설정된 작동 조건에 대한 최상의 설계를 얻을 수 있으며, 이는 수 백만 달러를 절감하는 효과를 가져옵니다.

파레토 프런트 플롯은 "특정 혼합 시간에 사용 가능한 최소 전력 수는 무엇인가?" 또는 "특정 동력 수에 사용 가능한 최소 혼합 시간은 얼마인가?" 와 같은 질문에 답을 제공해 혼합 산업이 수 백만 달러를 절감할 수 있게 해줍니다.

Simcenter STAR-CCM+, Pierre Guerin에 경쟁 우위 제공

들어가는 말

많은 성공한 기업가들이 그렇듯 Pierre Guerin도 소규모 가족 기업으로 시작했습니다. 1949년 설립 당시, 직원 수는 5명이었고 농업 및 유제품 유지관리 장비 사업으로 출발했습니다. 수십여 년간 제품과 브랜드, 헌신, 혁신의 발전이 이뤄지며 스타트업에서 성공적인 기업으로 탈바꿈 했으며, 지금은 화학, 식음료, 제약 산업에 스테인리스 스틸 공정 혼합 용기를 제공하는 유럽 최대 공급업체로 인정 받고 있습니다. 화학, 식음료, 제약 산업에게 혼합은 핵심 단위 작업입니다. 여러 속성을 가진 구성요소를 올바른 속성을 가진 균일한 혼합으로 만들어내는 것이 제품 품질을 좌우하는 중요한 요소이기 때문입니다.

Pierre Guerin이 시장에서 경쟁력을 유지할 수 있으려면 고객이 최고 수준의 혼합 품질을 보장하면서 운영 시간과 비용을 최대한 낮게 유지할 수 있는 장비를 설계하고 제조하는 것이 중요합니다. 이 경우 실험실 규모에서 생산으로 확장하는 기존의 방식을 사용하기가 결코 쉽지 않습니다. 설계 과정에서 새로운 아이디어가 나오면 테스트하고 검증하는 데 시간과 실험이 많이 걸립니다. CFD 시뮬레이션은 연속 공간에서 모든 주요 물리와 필요한 수량을 캡처하며, 설계 공간을 더 빨리 탐색하고 교반 탱크 최적화에 필요한 시험 횟수를 줄이는 시스템을 플랜트 스케일로 모델링할 수 있는 강력한 도구를 제공합니다. 엔지니어는 이 방식을 사용해 가장 가능성이 높은 설계만 추려낼 수 있습니다. 혼합 용기를 적용하는 사례에서 목표로 하는 주요 특성 중에는 펌핑 수, 동력 수 및 혼합 시간이 있습니다. 이 수를 예측할 수 있는 가장 효율적인 CFD 툴을 선택하기 위해 Pierre Guerin은 Simcenter STAR-CCM+를 포함한 여러 CFD 소프트웨어 툴을 사용해 검증 연구를 수행했습니다.

본 글은 Pierre Guerin이 특허 출원한 프로펠러 거동을 검증하기 위해 수행한 Simcenter STAR-CCM+ 수치 결과와 실험을 비교한 내용을 소개합니다. Rushton 터빈에 대한 유사한 검증 연구도 수행해 자료화 됐습니다 [1].

지오메트리와 메시

Simcenter STAR-CCM+는 Pierre Guerin이 제조한 다양한 유형의 임펠러/선박을 모델링하는 데 사용할 수 있습니다 (그림 1). 이 연구에서 지오메트리는 네 개의 배플이 있는 평평한 바닥 용기와 Pierre Guerin HTPG4 임펠러로 구성돼 있습니다 (그림 1A). 선박 지오메트리와 배플은 Simcenter에서 3D CAD 모델러를 사용해 생성했으며, 임펠러는 자동 3D 비정형 다면체 볼륨 메시가 생성되는 폐쇄 볼륨을 만드는 데 사용된 Simcenter STAR-CCM+ 표면 랩핑 기능을 사용한 중립 CAD 파일 형식에서 추출됐습니다. 다면체 메싱 방식의 가장 큰 장점 중 하나는 다면체 셀에 많은 이웃 셀 (일반적으로 10 차수)이 있다는 점입니다. 이를 통해 이웃 셀에 걸쳐 변수를 효율적으로 전달할 수 있습니다. 사면체 메시보다 훨씬 적은 수의 셀로 복잡한 지오메트리를 캡처할 수 있습니다. 셀 수가 적으면 필요한 계산도 줄어듭니다.

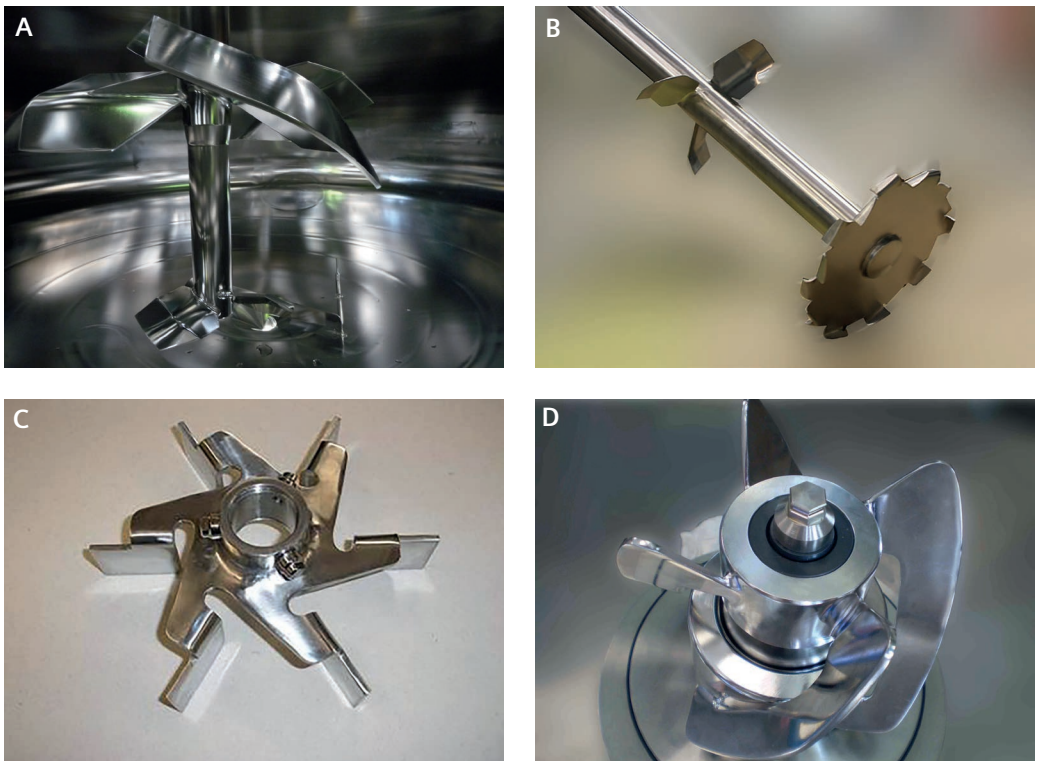


그림 1: Pierre Guerin이 제조한 다양한 유형의 임펠러: (A) 셀 배양을 위한 저 전단 HTPG4 프로펠러; (B) 분말 분산을 위한 Heli Turbo Agitator HTA; (C) 호기성 발효를위한 Rushton 터빈; (D) 보조 선박용 마그네틱 믹서 PG-MAG.

또한 Pierre Guerin의 엔지니어는 경계면의 프리즘 레이어 메셔와 함께 다면체 메시 전역/로컬 세분화 기능을 사용해 정확한 전력 계산에 필요한 임펠러 주변의 흐름을 정확하게 캡처할 수 있었습니다. 그림 2는 벽을 따르는 경계층 뿐만 아니라 임펠러 영역의 미세한 메시를 묘사한 계산 메시를 보여줍니다. 이 영역은 용기 벽에 부착된 외부 고정 프레임과 임펠러 주위의 중앙 회전 부분 사이의 인터페이스를 사용해 분할되며, 이를 통해 이 영역에 40만 개 셀이 생성됐습니다.

가정 및 경계 조건

시뮬레이션을 위한 공정 유체는 일정한 밀도를 가진 단상 액체로 간주됐습니다. MFR (moving reference frame) 방법을 사용해 배플된 교반 탱크 회전을 시뮬레이션 했습니다[2]. 임펠러 모션은 로터-스테이터방식을 사용해 모델링 했습니다. 샤프트 회전을 모델링하기 위해 스테이터 영역 내 샤프트 부분은 반대 방향으로 상대 회전 속도를 갖습니다. 실현 가능한 k-ϵ 2-계층 모델을 사용한 난류 모델링에 RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) 방식이 사용됐습니다. 임펠러 블레이드 근처 흐름 분리를 반드시 알아야 하는 것은 아니며, 그러므로 점성 서브레이어 방정식을 풀 필요가 없습니다. 그러나 경계층은 구배 생성에서 중요한 역할을 하며, 버퍼층을 해석해야 합니다. 이 모델 사용은 임펠러와 샤프트에서 벽 y+를 계산해 확인했습니다. 벽 y+는 1~20 사이입니다. 일정한 밀도 흐름과 비압축 특성으로 인해 부리된 흐름 솔버가 선택됐습니다. Simcenter STAR-CCM+는 혼합을 평가할 수 있는 패시브 스칼라 방식을 제공합니다. 패시브 스칼라는 사용자가 정의한 임의 값 변수로, 질량이나 부피가 적고

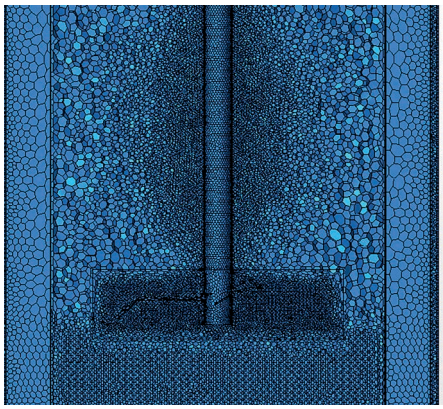


그림 2: Simcenter STAR-CCM+를 사용하는 선박 및 HTPG4 임펠러의 계산 유체 영역 so 다면체 메시.

시뮬레이션의 물리적 속성에 영향을 미치지 않는 개별 입자에 할당됩니다. 영역 내에서 하나 이상의 스칼라를 정의하고 주입할 수도 있습니다. 이 기능은 유동 스트림에 주입된 수치 염료를 추적하며 동일한 특성을 갖는 두 가지 이상의 유체 스트림 혼합을 해석하는 데 유용합니다. 이 연구에서 정상 상태 해석이 완료된 후 유동 솔버가 동결됐으며, 패시브 스칼라 전송 방정식은 내재적 비정상 계산과 강체 운동 솔버를 사용해 풀이했습니다. 내재적 비정상 솔버 방정식은 2차 상류차분법을 사용해 해석했습니다.

결과

10e-4 정도의 수렴은 4-코어 계산 병렬화로 약 17분 만에 이뤄집니다. 그림 3은 벽/배플에 가까운 상향 흐름 방향 임펠러 샤프트에 가까운 하향 흐름 방향이 있는 수치 속도 벡터 필드를 보여줍니다. 속도 필드의 수치 결과는 원하는 단면에서 전체 영역에 걸쳐 사용할 수 있습니다. 실험 측정은 전체 연속 흐름 필드 데이터에서의 측정을 허용하지 않으며, 엔지니어링 해석은 측정이 수행되는 유한 지점 수로 제한됩니다. 이 영역의 속도와 기타 필드에 액세스하면 시스템 내 흐름 패턴과 혼합 거동에 대한 중요한 인사이트를 얻을 수 있습니다.

동력 및 펌핑 수

Simcenter STAR-CCM+의 혼합 성능 예측 정확성을 확인하기 위해 Pierre Guerin 엔지니어는 동력 수, 펌핑 수, 무차원 혼합 시간과 같은 특성 수치를 계산했습니다. 이는 지오메트리 구성과 작동 조건 고유의 수치입니다. 각 임펠러 유형에 고유한 전력 소모를 계산하기 위해 무차원 수는 다음 공식을 사용해 계산한 전력 수 (Mp)로 정의했습니다:

$$N_p = \frac{T\,\omega\,g_c}{\rho\,N^3\,D^5}$$

여기서 τ (N,m)은 나온 토크값이며, ω(rad/s)는 임펠러 각 속도, N (RPM)은 임펠러 회전 속도, ρ (kg/m3)은 밀도, D (m)은 임펠러 직경, gc는 중력 상수입니다.

혼합 임펠러의 각 지오메트리 형상에 고유한 유량이나 펌핑 속도를 계산하는 데 사용되는 또 다른 무차원 수는 펌핑 수 (NQ)입니다. 이는 다음 공식을 사용해 계산할 수 있습니다:

$$N_Q = \frac{Q}{N\,D^3}$$

Q (m3/s)는 임펠러로 생성한 흐름이며, N (RPM)은 임펠러 회전 속도, D (m)은 임펠러 직경입니다. 이들은 수치적으로 계산되며, 표 1의 실험 결과가 비교됩니다. 이 표에서 알 수 있듯 Simcenter STAR-CCM+에서 나온 결과는 실험에서 나온 수치와 놀라운 수준으로 일치하며, 전력 수와 펌핑 수 차이 백분율이 각각 1.94%, 0.92% 정도에 불과합니다.

표 1에서 N.Tm은 무차원 혼합 시간이며, 이는 혼합 시간 Tm과 임펠러 회전 속도 (N)의 곱입니다.

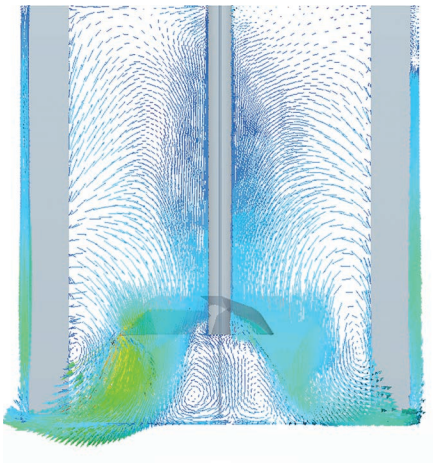


그림 3: 속도 벡터와 동력 수.

혼합 시간

혼합 시간은 작동하는 교반 용기에 주입된 트레이서의 균일성을 일정한 수준으로 달성하는 데 소요되는 시간으로 정의합니다 (여기서는 이상적인 균일성이 95%임) [2]. 이는 혼합 성능을 평가하는 주요 매개변수 중 하나로 사용됩니다. 모든 실험 방식의 기본 개념은 혼합물에 트레이서를 주입한 후 여러 위치에서 시각적으로 또는 다양한 프로브를 사용해 시간의 경과에 따른 농도를 측정하는 것입니다. 이 방법은 전체 영역에 걸쳐 제한적 정보만 제공하므로 공간적 편향이 있긴 하나, 사용 가능한 유일한 실험 툴이라 널리 사용돼 왔습니다. 반면 CFD는 연속 공간에 흐름 및 농도 필드를 제공해 이와 같은 데이터 부족 문제를 쉽게 해결합니다. 이를 통해 수치 영역 내 모든 셀에서 혼합 품질을 고려하고 혼합 시간 특정에 대해 통계적으로 한층 정확한 결과를 정의할 수 있습니다.

Simcenter STAR-CCM+에는 전체 영역에 걸쳐 체적 균일성을 측정할 수 있는 사전 정의된 방정식이 있습니다. 혼합 액체는 패시브 스칼라로 추적했으며, 이는 초반에 용기 바닥에 머물러 있었습니다 (그림 3, 해석 시간 0.1s).

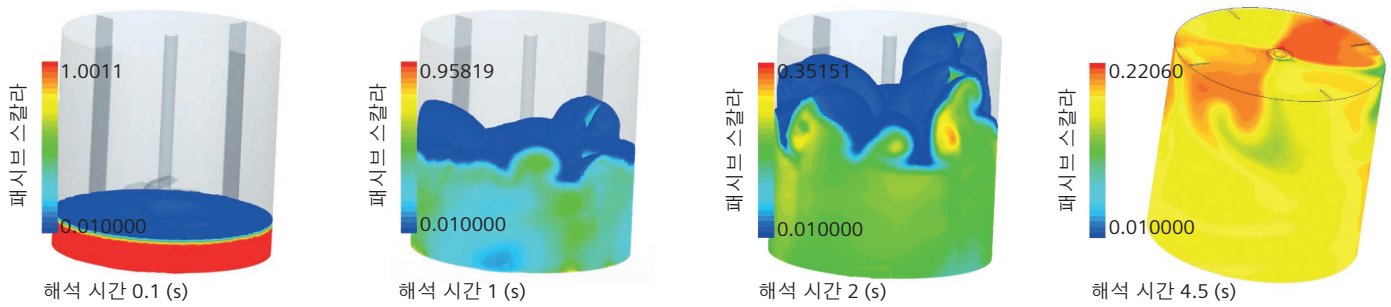


그림 4: 패시브 스칼라의 시간 변화.

이 패시브 스칼라는 시간의 경과에 따라 물과 혼합된 수치 트레이서와 같으며, 이 혼합물은 전체 영역에 걸쳐 균일한 농도를 달성합니다. 그림 3은 시간의 경과에 따른 트레이서 농도의 시각적 변화를 보여줍니다. 그러나 이 균일성을 수량화하기 위해 이 영역 내 몇 개의 지점을 정의하고 시간의 경과에 따른 이 지점에서의 패시브 스칼라 트레이서의 농도를 추적합니다. 그림 5에 그 결과가 나타나 있습니다. 이상적인 균일 혼합을 위해 혼합 시간은 모든 트레이서 지점에서 100% 균일성을 달성하는 데 필요한 시간으로 정의했습니다 (균일성=1). 이 연구에서는 모든 트레이서에 대해 95% 균일성을 얻고자 했으며, 이를 혼합 시간에 대한 기준으로 사용했습니다. 혼합 시간 측정은 표 1에 요약돼 있습니다.

결론

HTPG4 임펠러가 장착된 교반 탱크의 단상 시뮬레이션을 다양한 계산 툴을 사용해 모델링 했습니다. Simcenter STAR-CCM+를 사용한 CFD 시뮬레이션 결과는 동력 수, 펌핑 수 및 기계식 교반 탱크 혼합 시간에 대해 실험을 통해 얻은 값과 비교해 정확한 값을 제공합니다. 비슷한 메시 요소 수가 있는 다른 소프트웨어와 비교했을 때 Simcenter STAR-CCM+는 동일한 수준의 정확성을 유지하면서 가장 빠른 결과를 제공합니다.

또한 사용하기 편리하며 쉬운 설정, 빠른 처리 시간, 그 외 다양한 포스트프로세싱 기능을 갖춘 Simcenter STAR-CCM+는 Pierre Guerin에 시장에서 경쟁사를 능가할 수 있는 두드러진 이점을 제공합니다. 이는 Pierre Guerin이 미래 시뮬레이션에 Simcenter STAR-CCM+를 사용해야겠다는 확신을 갖는 결과로 이어졌습니다.

	실험	Simcenter STAR-CCM+	퍼센트 차이
N_P (동력 수)	0.67	0.657	1.94
NQ (펌핑 수)	0.65	0.644	0.92
N.Tm (무차원 혼합 시간)	13	13.68	5

표 1: 계산 결과와 실험 결과 비교.

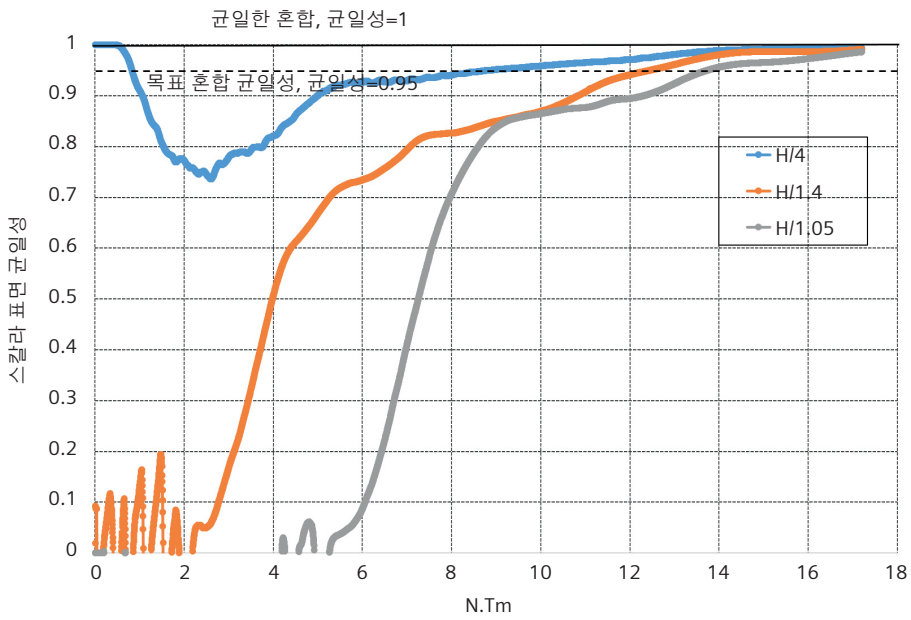


그림 5: 다양한 레벨에서의 패시브 스칼라 트레이서 농도의 시간 변화; 그래프에서 점선은 목표 혼합 균일성을 나타냄 (균일도 = 0.95).

FCC 전산 해석

들어가는 말

제 2차 세계 대전 이전에 발명된 FCC (fluidized catalytic cracker)는 정제 작업의 핵심 공정입니다. 긴 사슬 탄화수소를 휘발유와 같은 한층 가치 있는 제품으로 분해하는 공정이라 정제 작업의 수익성 측면에서 중요한 역할을 합니다.

첨단 기술 시대에도 FCC는 여전히 설계와 운영에서 중요한 연구 주제로 남아 있습니다. 이 글은 CFD (computational fluid dynamics)와 입자 동역학 해석의 역할에 대한 간략한 정보와 FCC 라이저 유동화 모델링, 기체-고체 사이클론 분리기 내 유동에 대한 두 가지 관련 사례 연구를 소개합니다. 두 사례 모두에서 시뮬레이션 결과는 이론 또는 테스트 데이터와 비교해 상당한 일치율을 보였습니다.

FCC에는 일반적으로 라이저, 반응기 섹션과 재생기의 두 구성요소가 있습니다. 라이저 섹션에서는 뜨거운 액체 오일이 주입돼 뜨거운 촉매 입자와 접촉합니다. 이로 인한 반응에 의해 오일이 분해되고 가스가 팽창해 촉매를 반응기 상부와 재생기로 끌어오며, 여기에서 이들은 사이클론식 분리기를 통과합니다. FCC는 복잡한 유체와 입자 동역학, 열 및 물질 전달을 특징으로 합니다. 간단히 살펴보기 위해 고체 촉매 입자 유동화와 사이클론 내 유동 두 가지 구성요소를 집중적으로 살펴볼 것입니다. 유동화 해석은 설계 규모 확대 (테스트 벤치에서 산업용으로) 시에나 오배분 문제를 해결할 때 주로 수행하는 연구 유형입니다. 사이클론 해석은 분리 효율을 향상시키고 성능을 보장하며 침식 피해를 최소화하는 데 사용할 수 있습니다.

전산 유체 역학

CFD는 석유, 가스 및 화학 공정부터 자동차와 항공우주에 이르는 다양한 분야의 엔지니어가 사용하는 해석 방법입니다. 항공우주 및 자동차 산업에서 처음 설계 툴로 사용됐으며, 현재는 상세한 정보를 제공하면서 제품 개발과 관련된 시간과 비용을 절감할 수 있는 설계 평가 툴로 널리 사용됩니다. 실린더 내 연소 엔진의 복잡한 유체 역학, 분사, 열 및 질량 전달 모델링부터 전기 및 하이브리드 전기차 배터리 기술에 이르는 자동차 엔진 효율성을 향상시키는 핵심 기술입니다.

유체 역학, 열 및 물질 전달을 해석하는 것과 더불어 최첨단 CFD 코드에는 입자 운동을 모델링하는 기능도 포함됩니다. 유체 역학과 입자 동역학을 모두 해석해 FCC의 복잡한 거동을 예측할 수 있습니다.

그 한 가지 방법이 바로 DEM (discrete element method) 입니다. 입자는 연질 입자 제형에 기반한 표면 접촉을 통해 서로, 지오메트리 주변과 상호작용하며, 입자는 중첩될 수 있습니다. 이 방식을 사용하면 입자 시스템의 상세 모델링을 할 수 있습니다. 그 다음 CFD 시뮬레이션에 결합해 입자-입자 및 입자-벽 영향과 유체 힘으로 입자 운동을 유도할 수 있습니다.

그간 DEM 시뮬레이션은 FCC와 같은 시스템을 모델링할 때 계산상 금지돼 왔습니다. 해석 계산 비용은 모델링 된 입자 수에 따라 증가하는데 FCC에는 수 십억 개 입자가 포함돼 있기 때문입니다. 최신 모델링 기술 발전으로 입자확대법 (coarse-graining) 이라는 방식이

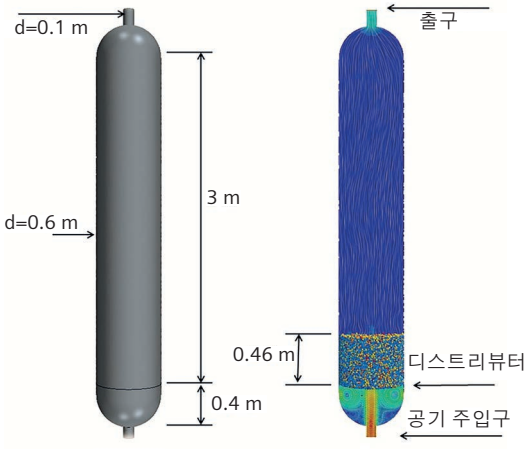


그림 1: 라이저 연구를 위한 지오메트리 및 경계 조건.

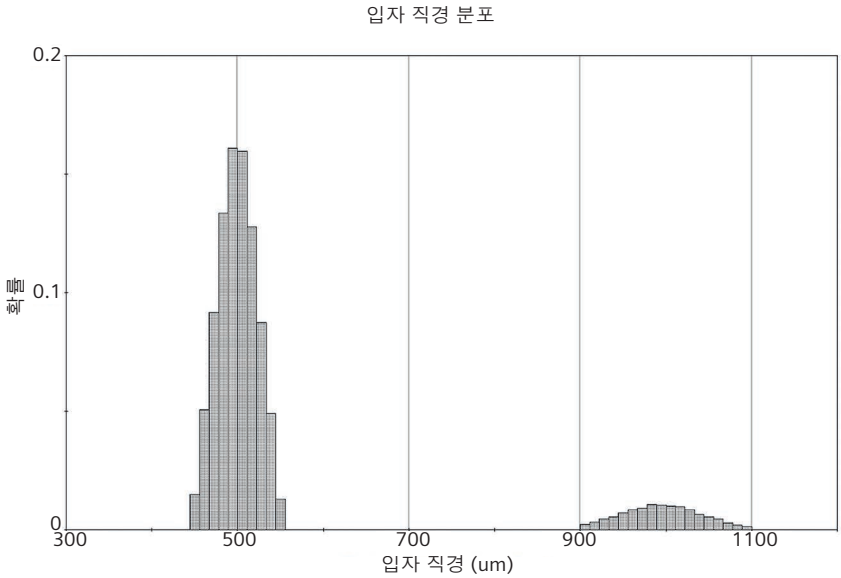


그림 2: 입자의 크기 분포: 약 500 미크론 정도로 분포되고 약 1mm의 거친 입자가 있는 미세 입자.

도입됐습니다. 입자 확대 해석에서는 많은 수의 입자를 하나의 묶음으로 표시합니다. 유체-입자 상호작용을 대표 입자에 대해 계산해 전체 묶음에 적용되는 반면, 접촉 역학은 묶음 스케일에서 계산됩니다. 이 방법은 가변 입자 크기, 열 및 물질 전달을 포함한 FCC의 주요 물리를 포함하도록 확장할 수 있습니다.[1]

연구 1: FCC 라이저 내 유동화 모델링

이 연구의 시스템은 높이 3미터, 지름 0.6미터인 산업 규모 테스트 시설입니다 (그림 1). 유동층은 10억 개 고체 입자를 포함하고 있으며, 직경은 500마이크로미터~밀리미터까지 다양합니다.

이 연구의 목적은 유동화 거동과 그에 따른 압력 강하를 예측하는 이론인 Ergun 예측과 비교해 여러 기류 속도에 대한 유동화 거동을 파악하는 것입니다. 이와 같은 연구는 벤치에서 산업 규모로의 성공적인 확장, 재생기 내 오분배 영역 파악, 촉매 분해로 이어질 수 있는 입자 간에 미치는 힘 파악 등과 같은 FCC 설계에서 수행되는 일반적인 해석 유형입니다.

그림 1에서 회색으로 표시된 것처럼 라이저의 물리적 지오메트리를 정의하는 것으로 해석 공정이 시작됩니다. 이는 보통 파라메트릭 3D CAD 패키지에 내장돼 있습니다. 엔지니어는 CAD 모델이 가진 파라메트릭 특성과 시뮬레이션 패키지와 긴밀히 연결된 점을 활용해 설계를 변경하고 해석을 재실행 해 설계 공간을 쉽고 빠르게 탐색할 수 있습니다.

지오메트리가 만들어진 후 계산 메시가 생성됩니다. 다양한 메시나 셀 유형을 사용할 수 있습니다. 여기서는 육면체 메시가 코어 체적과 벽 근처 경계층에 사용됐으며, 열 전달 효과는 프리즘-층 메시로 알려진 것을

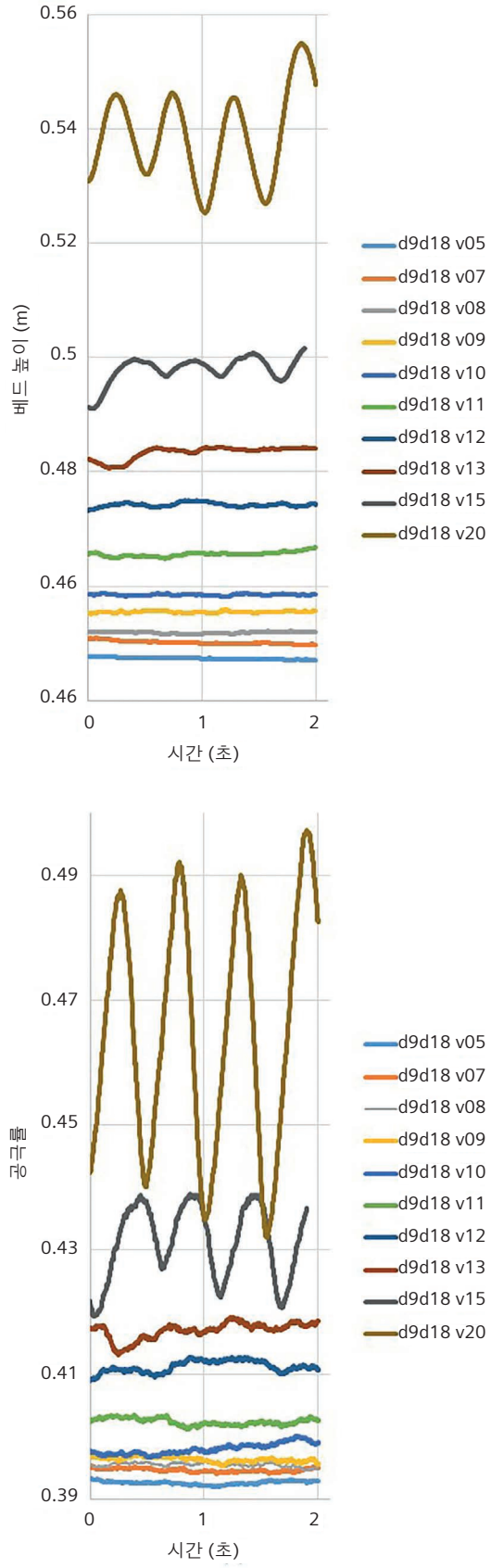


그림 3: 10 표면 속도에 대한 시변 압력 강하 및 베드 높이.

사용해 포착했습니다. 프리즘 셀을 사용해 벽의 정상 구배를 효율적으로 해석하는 바디핏 메시입니다. 육면체 코어는 육면체를 트리밍 해 다면체 셀을 형성해 벽 근처 메시로 전환합니다. 이 방식으로 육면체를 사용할 수 있는데, 이와 같은 복잡한 지오메트리로 작업할 때에도 더 적은 계산 비용으로 더 높은 정확도를 얻을 수 있어 바람직한 방식입니다.

지오메트리와 계산 메시가 만들어진 후 알고자 하는 물리적 특성과 경계 조건이 정의됩니다. 여기서는 표면 속도가 0.139 m/s에서 1.139 m/s가 되는 비압축 공기를 사용했습니다. 다양한 크기의 입자 10억 개를 모델링 했습니다. 이 입자들은 크게 두 가지, 미립자와 조립자로 구분됐습니다. 미립자에는 약 500 마이크론의 로그 정규 분포가 주어졌습니다. 조립자의 평균 직경은 1mm 였습니다. 그 다음 유사 정상 상태에 이를 때까지 시뮬레이션을 실행했으며, 시작 또는 초기 조건 효과가 통과한 것을 확인한 후 마지막 2초 해석 시간 동안 압력 강화와 같은 변수를 평균화 했습니다.[2]

검증 단계로 여러 표면 속도에 대한 베드의 평균 예측 압력 강하 및 공극률은 유동층에 대한 해석 이론인 Ergun 예측과 비교했습니다 (그림 5). 유동화가 일어날 때까지, 평균 압력 강하가 안정화될 때까지 표면 속도가 증가함과 더불어 증가하는 압력 강하 절대값이 상당히 일치하는 것을 알 수 있었습니다.

연구 2: 기체 고체 사이클론 분리기 내 흐름 모델링

두 번째 연구에서는 최근 이탈리아 밀라노에서 개최된 국제 화학 및 공정 공학 컨퍼런스 (ICHeaP)에서 발표된 바 있는, 사이클론에 대한 상세 해석을 수행했습니다. 사이클론은 고체 촉매 입자를 분리하는 데 사용됩니다. 사이클론에서 고체 입자의 소용돌이는 침식 피해를 발생시킵니다. 사이클론 설계나 수행이 잘못되면 심각한 유지보수 문제와 비용 부담이 발생합니다. 사이클론의 입자 흐름을 정확하게 예측하는 기능은 기존 설계 문제를 해결하고 이 문제의 재발을 방지하는 데 사용됩니다. 시뮬레이션 방식의 정확성을 확립하기 위해 표준 사이클론 테스트 사례를 해석했습니다: Stirmand의 사이클론. 여기에 우수한 실험 데이터를 사용할 수 있다는 이점이 있습니다.

또 한 차례 3D CAD 지오메트리를 만들고 트리밍된 육면체 메시를 사용했습니다. 사이클론의 높은 소용돌이는 결과 얻기가 까다롭기로 악명 높은 장치라는 점을 의미하며, 업계에서는 보통 고급 난류 모델인 RSM (Reynolds Stress Model)을 사용해 구조화된, 흐름에 맞는 육면체 메시를 사용하는 것이 관행이었습니다. RSM이 여전히 필요하지만, 이 작업은 자동으로 생성된 육면체 트림 메시를 사용하면서 정확한 결과를 얻을

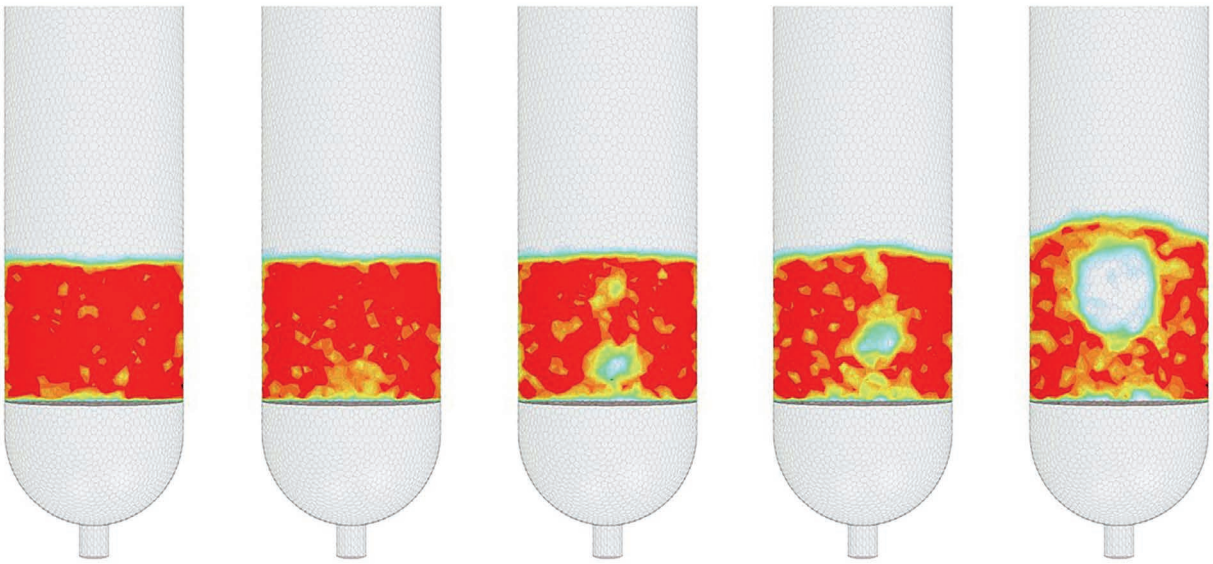


그림 4: 입자의 크기 분포: 약 500 미크론 정도로 분포되고 약 1mm의 거친 입자가 있는 미세 입자.

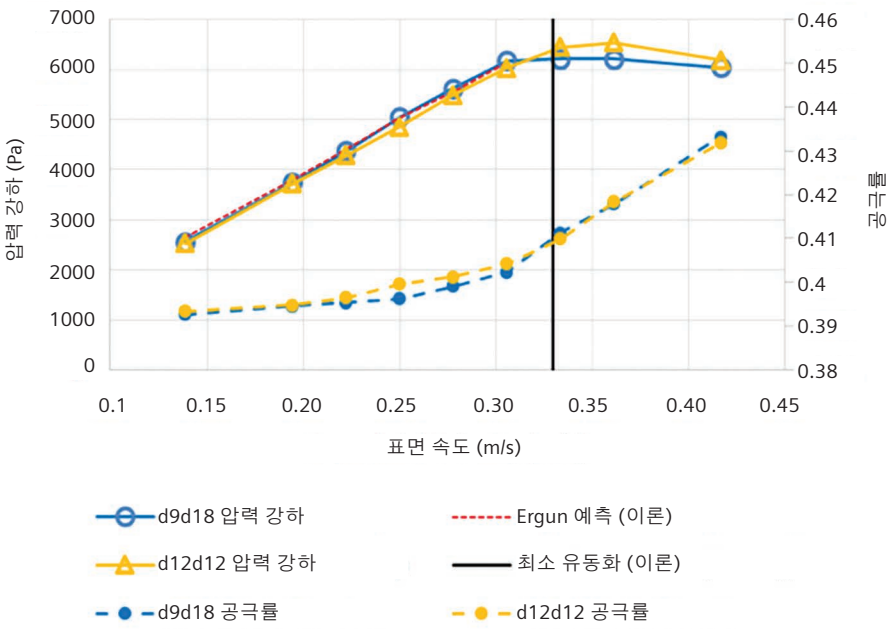


그림 5: 표면 속도에 대한 평균 압력 강하 및 공극률.

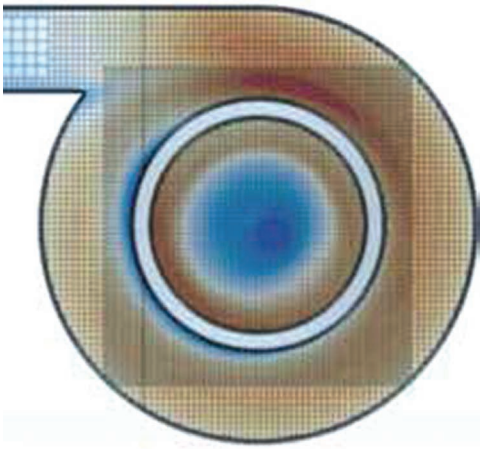


그림 6: 사이클론 지오메트리 단면도, 접선 속도의 메시 및 윤곽

그림 7: 중앙 소용돌이를 통해 무거운 입자 (낮은 배출구)와 가벼운 입자의 분리를 보여주는 간소화.

수 있다는 점을 보여줍니다. 이 프로젝트의 두 번째 결과는 사용된 CFD 패키지 (Simcenter STAR-CCM+) 위에 있는 자동화된 워크플로 툴 (시뮬레이션 지원용)에 시뮬레이션 우수 사례를 통합한 것입니다.

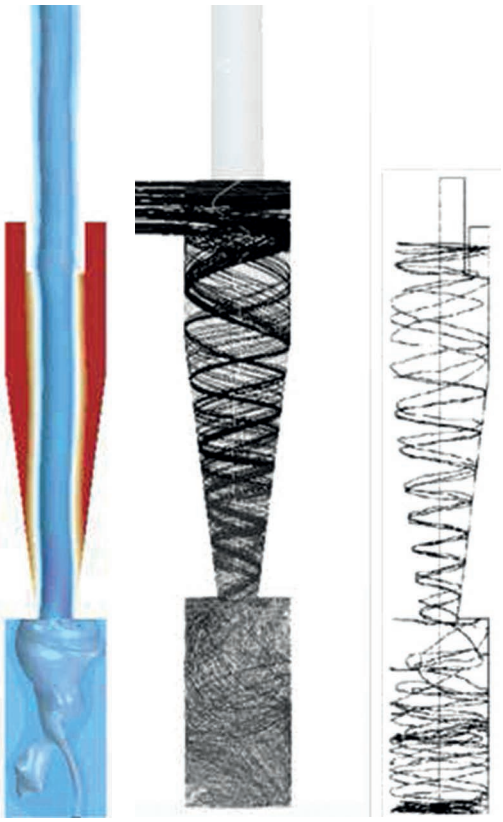


그림 8: 사이클론 중심선 아래 소용돌이 스냅샷과 입자 궤적 - CFD (왼쪽) 및 실험 (중간과 오른쪽).

여기서는 고체 입자가 충분히 희석돼 입자 간 상호작용은 무시할 수 있었으며, 기존 라그랑지안 입자 모델을 사용할 수 있었습니다. 이 방식은 DEM 방식과 마찬가지로 이동 중인 입자 기준 틀에서 입자 경로를 예측하고, 입자 간 상호작용을 무시해 계산에 드는 수고를 줄입니다.입자들은 배경 액체에 단방향 또는 양방향으로 결합될 수 있습니다. 단방향은 입자 운동이 흐름에 의해 좌우되지만 흐름은 입자의 존재를 경험하지 않습니다. 그림 8, 9, 10은 시뮬레이션이 압력 강하 및 분리 효율과 같은 관심사인 적분 값 뿐만 아니라 입자 궤적도 정확하게 잡아낼 수 있음을 보여줍니다. 입자 궤도는 침식 해석에 핵심적으로 필요한 입력 사항입니다: 침식 모델은 입자 궤적과 마모 속도 또는 침식 속도를 서로 연관시킵니다.

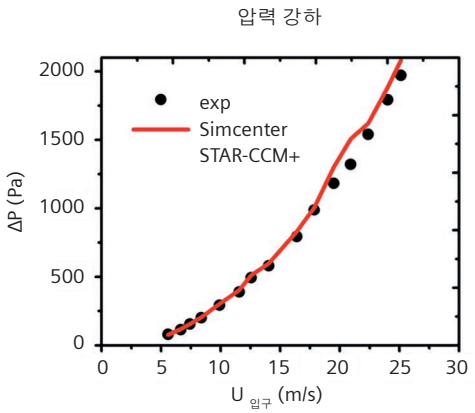


그림 9: 사이클론 전반의 평균 압력 강하 대 입구 속도 CFD 및 실험.

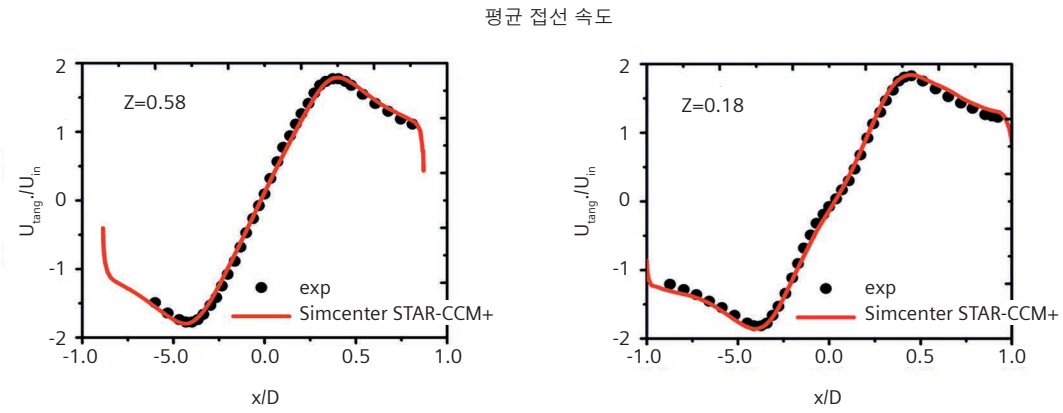


그림 10: 사이클론의 두 단면에서 평균 접선 속도 : 실험과 비교한 CFD

결론

이 글에서는 첨단 계산 유체 및 입자 동역학 툴을 사용해 FCC와 라이저 또는 사이클론과 같은 FCC 구성요소를 설계하거나 문제 해결하는 데 사용하는 방법을 간략히 소개했습니다.

특히 입자확대법으로 알려진 DEM 방법의 발전으로 계산에 큰 수고를 들이지 않고도 대규모 입자 (10억개 이상)가 있는 시스템에 적용하면서 정확한 결과를 얻을 수 있는 방법을 살펴봤습니다.

또한 설명한 트리밍 셀 방식과 같은 고품질 자동 메시 기법을 사용해 사이클론의 유동을 정확하게 예측할 수 있습니다. 이들이 워크플로 자동화 및 시뮬레이션 지원 툴과 같은 우수 사례 사용 툴과 통합되면 사이클론 분리기와 같은 장치 설계 및 문제 해결에 CFD를 훨씬 쉽게 사용할 수 있습니다. 마지막으로 FCC의 유체역학 해석에는 하이브리드 방식이 필요합니다. Simcenter STAR-CCM+와 같은 소프트웨어는 기존 방식으로는 부족한 방대한 첨단 기능을 제공합니다. 유체 흐름과 기본적으로 결합된 DEM 방식은 최첨단 기능입니다.

참조

1. AIChE paper, DEM simulations of industrial size fluidized bed using coarse grain model with particle size distribution, 2014.
2. Presentation by Nunhez et al., AIChE annual meeting, 2012.

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 플래이노에 본사를 둔 Siemens Digital Industries Software는 전 세계 140,000여 고객사를 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 PLM Software 제품과 서비스에 대한 자세한 내용은 www.siemens.com/plm에서 확인할 수 있습니다.

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

아시아 태평양 지역
Suites 4301-4302, 43/F
AIA Kowloon Tower,
Landmark East
100 How Ming Street
Kwun Tong, Kowloon
Hong Kong
+852 2230 3333

Restricted © Siemens 2019. Siemens 및 Siemens 로고는 Siemens AG의 등록 상표입니다. Femap, HEEDS, Simcenter, Simcenter 3D, Simcenter Amesim, Simcenter FLOEFD, 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. SolidWorks는 Dassault Systèmes의 등록 상표입니다. Java는 Oracle 및/또는 계열사의 등록 상표입니다. 기타 모든 상표, 등록 상표 또는 서비스 마크는 해당 소유자에 귀속됩니다.

67143-81976-C4-KO 5/20 LOC