

컴퓨터 모의실험에 의한 혼합공정 설계 : Internal 혼합기 중심으로

김 진 국

서 론

Internal 혼합기 20세기의 고무산업 발달과 함께 발전을 해왔다. 특히 1916년 Banbury 혼합기는 이 분야에 괄목할 만한 발달을 초래하였다. 그러나 혼합기내의 고분자 흐름의 복잡성과 기기의 복잡성으로 인하여 흐름 메카니즘(flow mechanism)과 혼합 거동에 관한 연구가 어려운 실정이다. 최근 산업의 발달과 함께 요구의 다양도에 따라 혼합기에 대한

디자인도 이러한 요구를 충족시키기 위한 특성에 맞는 혼합기의 개발에 힘쓰고자 한다. 지금까지 개발된 혼합기를 특허를 중심으로 조사하여 보면 1915년에 스크류형 로우터(screw type rotor)¹를 비롯하여 (Fig. 1) Banbury 로우터²(Fig. 2)를 비롯한 독일을 중심으로 발달된 시그마형 로우터³(Fig. 3)이 대표적이고 1960년대에 들어 로우터 날이 4개 달린 로우터(4wing형) 혼합기가 개발되었다⁴(Fig. 4). 현재 시그마형 로우터, Banbury형 로우터, 4wing형 로우터 혼합기가 혼합 목적과 용도에 따라 산업계에서 쓰이고 있는 실정이다. Internal 혼합기는 짧은 시간에 점도가 높은 고분자 물질을 혼합하기 위한 기계로서 혼합기 로우터의 고안에 많은 노력을 기울이고 있다.

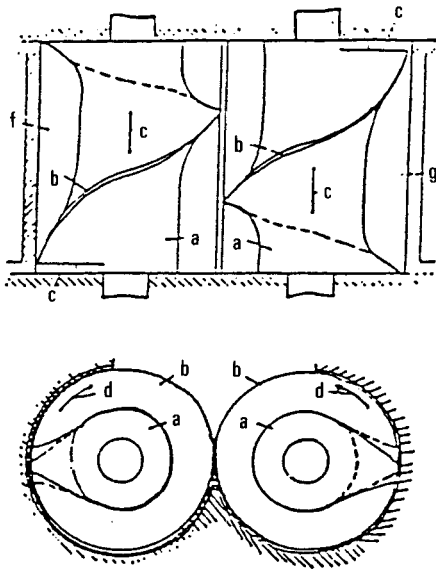
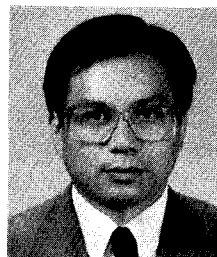


Fig. 1. Pointon's internal mixer with two screw elements.



김 진 국
1978 연세대 화학공학과 (공학사)
1981 연세대 화학공학과 (공학석사)
1990 미국 Univ. of Akron 고분자공학과 (공학박사)
1989 국립 경상대학교
현재 고분자공학과 교수

Mixing Process Design by Computer Simulation : On the Internal Mixer

경상대학교 고분자공학과 (Jin Kuk Kim, Dept. of Polymer Science and Engineering, Gyeongsang National Univ., Jinju 660-701, Korea)

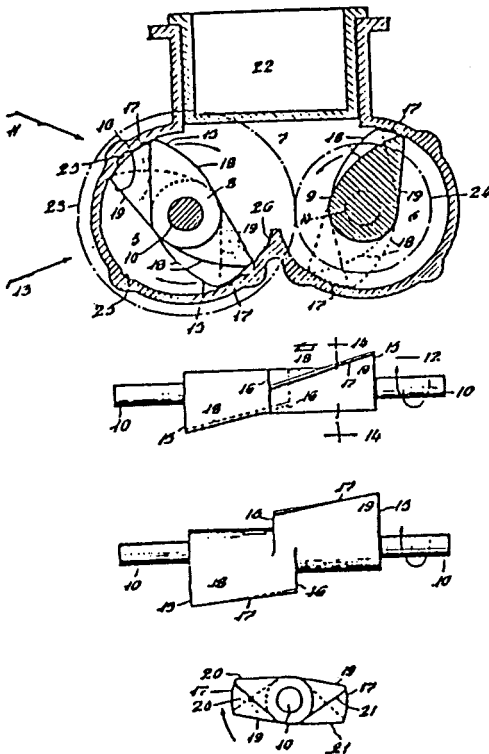


Fig. 2. Banbury's internal mixer design.

혼합기 구조와 디자인에 고려되어야 할 요소들

혼합기 구조

혼합기의 목적은 무엇보다도 혼합이 효율적으로 되어야 한다는 점이다. 이러한 혼합을 위하여 혼합기의 구조를 살펴보면(Fig. 5) 재료를 넣는 호퍼(hopper)와 두개의 로우터와 로우터를 감싸고 있는 체임버와 가열과 냉각장치가 체임버에 부착되어있다. 혼합기안의 두개의 로우터는 서로 반대방향으로 돌고 있다(counter-rotating).

설계에 고려되어야 할 인자

혼합기의 심장부는 로우터이다. 이 로우터의 형상에 따라 혼합효과를 좌우한다. 특히 로우터 날의 모양에 따라 로우터 형상이 구분된다. Table 1에 특허를 중심으로 고찰한 로우터날의 형태를 종합하여 보았다. 여기서 나타난 특징은 날이 로우터 축을 중심

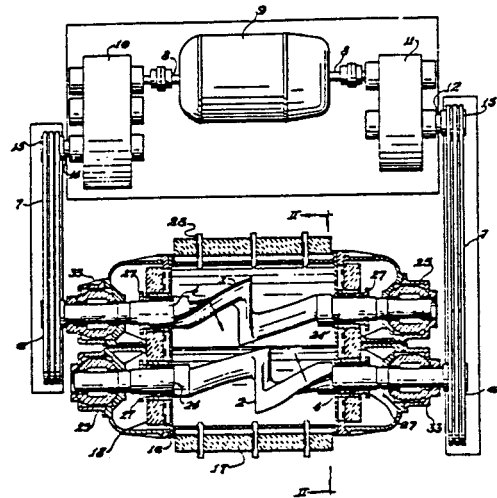


Fig. 3. Signa type rotor internal mixer(1956).

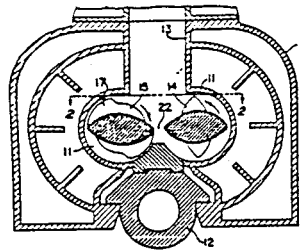


Fig. 4. 4wing type rotor internal mixer.

으로 하여 $15^{\circ} \sim 45^{\circ}$ 상에 있고 로우터 날의 비는 각 특성에 따라 조금씩 다르게 나타났다. 여기서 고려된 사항은 로우터 날의 각도, 날의 길이, 날의 갯수로 로우터의 지름과 길이의 비이다. 이러한 설계인자들은 사용되는 물질의 점도 즉 물질의 유변학적 성질과 조작 요건; 로우터 도는 속도, 로우터 가열 온도를 고려하여 효율적인 혼합기를 설계할 수 있다.

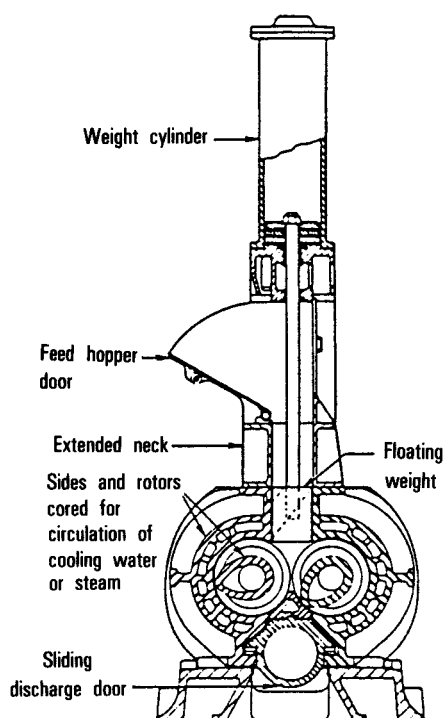


Fig. 5. Internal mixer.

Table 1. The Geometry Functions of The Rotors

Inventor	Year	θ	L_2/L_1	Number
POINTON ¹	1915	$55^\circ \pm 5^\circ$	0	1
BANBURY ²	1916	$15^\circ \pm 5^\circ$	1	2
FORD ⁷	1951	$25^\circ \pm 10^\circ$	0.3	2
GRUBENMANN ⁸	1961	30°	1	2
TYSON ⁴	1966	$30^\circ \pm 5^\circ$	0.5	4
MATSUOKA ⁹	1968	$25^\circ \pm 5^\circ$	17/26	4
KOCH ¹⁰	1969	$45^\circ \pm 5^\circ$	1	2
CRIXELL ¹¹	1972	30°	2/3	2
WIEDMANN ¹²	1980	$35^\circ \pm 5^\circ$	2/5	4
SATO ¹³	1981	$20^\circ \pm 5^\circ$	0.1-0.48	4

로우터 디자인

컴퓨터 프로그래밍

위에 소개한 인사들을 고려하여 어떻게 컴퓨터 디자인을 할 것인가? 이러한 단계를 Fig. 6에 나타내

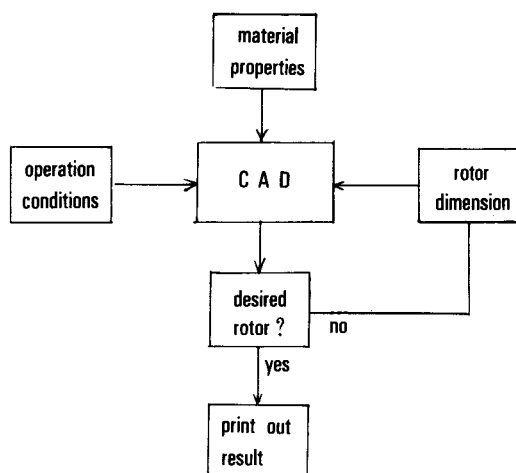


Fig. 6. Flow diagram of rotor design.

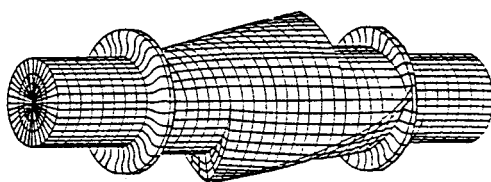


Fig. 7. Rotor geometry for numerical calculation(FEM).

었다. 이러한 전체적인 개념을 통하여 하나하나 소개하기로 하자. 먼저 로우터 형상을 모의 실험하려는 mesh로 나누어야 한다. Fig. 7에 FEM(Finite Element Method)을 사용하는 mesh를 나타내었고 Fig. 8에는 FDM(Finite Difference Method)을 사용하는 mesh를 나타내었다. 또 Fig. 9에는 로우터형상 뿐만 아니라 전체적인 체임버에서 비교적 전단속도가 낮은 지역(로우터와 로우터) 사이의 흐름을 나타내기 위하여 mesh를 나누어 보았다. 다음에 착수할 단계는 물질의 유변학적 점도를 위한 정보를 얻는 일이다. 이를 위하여 유변학적 식들을 선정하여 실험을 통하여 모델에 필요한 변수(parameter)를 구하는 일이라 하겠다. 다음 단계는 앞의 설계인자에서 조작 조건들(로우터 도는 속도, 설정 온도, 냉각 수량 등)을 선정하여 프로그램을 운용하면 되는 일이다. 이와 같이 운용하여 정보를 얻으면 그 로우터가 과연 우리가 원하는 로우터 형상인가 하는 평가를 해야한다.

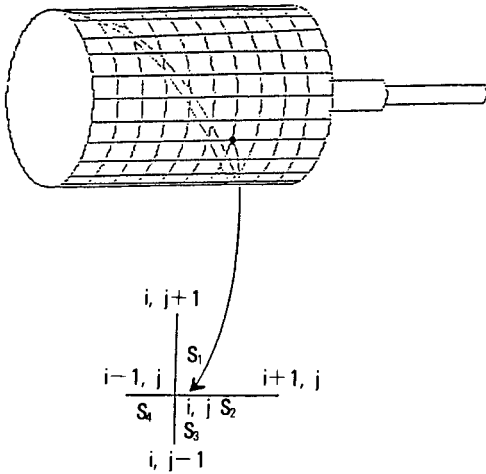


Fig. 8. Rotor geometry for numerical calculation(FDM).

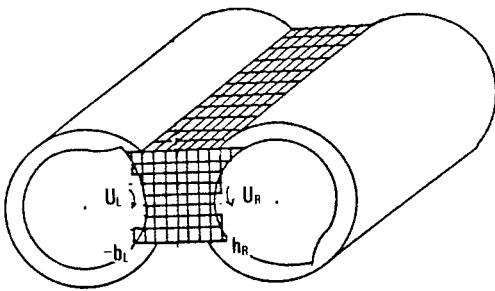


Fig. 9. Flow geometry of inter-rotor region.

이를 위하여는 평가기준을 설정하기 위하여 어떠한 로우터가 과연 만족할만한 효율을 나타내는 로우터인가를 고려하여야 한다. 먼저 좋은 혼합현상을 나타내기 위하여는 혼합기내에 고분자 물질의 원활한 흐름이 필요하다. 이는 분배혼합(distributive mixing)을 좋게 해줄 뿐더러 로우터의 온도를 고르게 분산시켜주기 때문이다. 이를 위하여 로우터를 1바퀴 도는 시간을 순환시간이라고 규정하고 순환시간으로서 분배혼합을 평가하여 보는 것이 바람직하고 또 분산효과를 규명하기 위하여는 실험을 통하여 분결과 대개의 분산 혼합을 낳 부근의 전단 응력(shear stress)이 분산응력(rupture stress) 보다 커야 한다. 그러므로 낳 부근의 전단 응력이 평가 기준으로 할 수 있다. Fig. 10에 실험용 internal 혼합기에서의

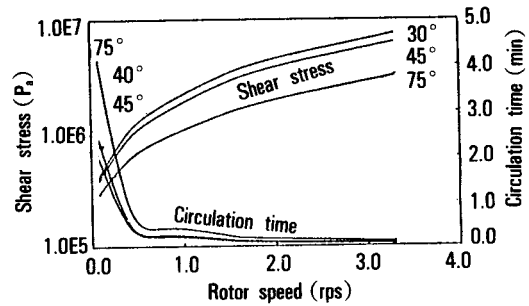


Fig. 10. Shear stress and circulation time vs. rotor speed.

평가 기준으로 하여 계산결과를 나타내었다. 이러한 평가 기준을 통하여 혼합정도를 규명하고 고안한 로우터의 만족도를 평가한 다음 고려된 요소만 바뀌어서 모양을 만들어 가면 실제로 만들어서 실험을 하지 않고도 합리적인 효율 높은 로우터를 컴퓨터를 사용하여 고안할 수 있다. 이는 시간 절약 뿐만 아니라 원가 절감의 효과를 가져올 수 있다는 장점이 있다.

이론적 배경

Internal 혼합기내의 흐름을 분석하기 위하여 정상 상태와 비압축성 유체라는 가정하에 물질수지와 모멘텀 수지식을 사용하면 다음과 같은 연속의 식으로 표현된다.

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (1)$$

여기서 $\mathbf{v}$ 는 속도 벡터이다.

또 inertia 힘과 중력힘을 무시하고 힘의 균형식을 세우면

$$0 = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2)$$

여기서 $\boldsymbol{\sigma}$ 는 응력 텐서이다.

만약 뉴우톤 유체라 가정하고 응력식을 표현하면

$$\boldsymbol{\sigma} = -P\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{d} \quad (3)$$

여기서 $\mathbf{I}$ 는 identity 텐서이고 $\mathbf{d}$ 는 변형텐서(deformation tensor)이며 η 는 점도이다. Internal 혼합기의 흐름분석을 위하여 hydrodynamic lubrica-

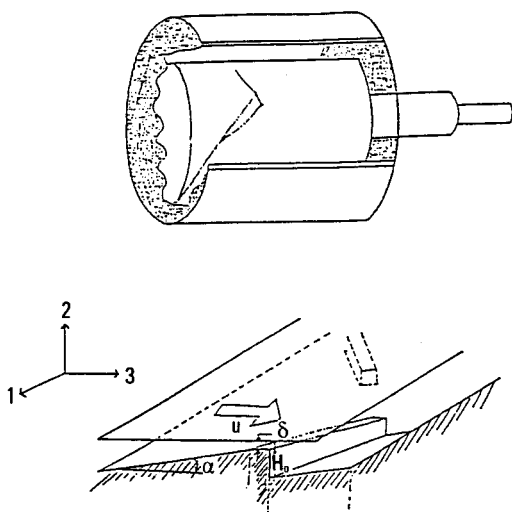


Fig. 11. Flow geometry for internal mixer.

tion theory를 적용하면 속도에 대한 식은 다음과 같다(Fig. 11).

$$\vec{V} = V_1(x_2) \vec{e}_1 + 0\vec{e}_2 + V_3(x_2) \vec{e}_3 \quad (4)$$

여기서 '1'은 로우터 축을 따라 평행인 방향(longitudinal direction), '2'는 로우터 축에 수직 방향 '3'은 원둘레 방향을 의미한다. 그러므로 응력 σ 를 뉴우톤 유체에 대한 반응은 다음과 같다.

$$\sigma = \begin{vmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{vmatrix} + \eta \begin{vmatrix} 0 & \frac{\partial v_1}{\partial x_2} & 0 \\ \frac{\partial v_1}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial v_3}{\partial x_2} \\ 0 & \frac{\partial v_3}{\partial x_2} & 0 \end{vmatrix} \quad (5)$$

식(5)을 식(2)에 대입하면 운동방정식은 다음과 같이 정리된다.

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x_1} + \eta \frac{\partial^2 V_1}{\partial x_2^2} \quad (6-a)$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x_3} + \eta \frac{\partial^2 V_3}{\partial x_2^2} \quad (6-b)$$

여기서 톨리는 가만히 있는 평면이고 체임버가 U의 속도로 움직인다고 생각하면 경계면 조건은 다음과 같다.

$$V_1(0) = 0; V_3(0) = 0 \quad (7-a)$$

$$V_1(H) = 0; V_3(H) = U \quad (7-b)$$

여기서 H는 체임버와 로우터 사이의 간격(clearance)를 의미한다.

속도에 대한 해는

$$V_1 = -\frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial p}{\partial x_1} \right) [Hx_2 - x_2^2] \quad (8-a)$$

$$V_3 = U \frac{x_2}{H} - \frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial p}{\partial x_3} \right) [Hx_2 - x_2^2] \quad (8-b)$$

여기서 평균 속도를 구하면

$$\bar{V}_1 = 1/H \int_0^H V_1 dx_2 = -\frac{H^2}{12\eta} \frac{dp}{dx_1} \quad (9-a)$$

$$\bar{V}_3 = 1/H \int_0^H V_3 dx_2 = \frac{1}{2} U - \frac{H^2}{12\eta} \frac{dp}{dx_3} \quad (9-b)$$

이 해는 연속의 식(Equation of Continuity)을 만족해야 하므로

$$\frac{\partial H \bar{V}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial H \bar{V}_3}{\partial x_3} = 0 \quad (10)$$

식(9)과 식(10)에서 다음과 같은 식을 유도할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(H^3 \frac{\partial p}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(H^3 \frac{\partial p}{\partial x_3} \right) = 6\eta \frac{\partial HU}{\partial x_3} \quad (11)$$

식(11)은 'Reynolds Equation'으로 알려져 있다. 이 Reynolds 식으로 부터 압력 분포를 구하고 평균 속도를 구하면 혼합기내의 흐름을 분석할 수 있다.

수치해석

이 'Reynolds Equation'은 경계면 조건과 함께 컴퓨터로 푸는 방법중의 하나로 FDM 방법을 소개하면 식(11)은 self-adjointed elliptical 식으로 다음과 같이 정리된다.⁵

$$\frac{\partial}{\partial x_1} (H^3 \frac{\partial p}{\partial x_1}) + \frac{\partial}{\partial x_3} (H^3 \frac{\partial p}{\partial x_3}) = 6\eta \frac{\partial}{\partial x_3} (HU) \quad (12-a)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} (H^3 \frac{\partial p}{\partial x_1}) = \frac{H_{i+(1/2)S_1,j}^3 \frac{P_{i+S_1,j} - P_{i,j}}{S_1} - H_{i-(1/2)S_3,j}^3 \frac{P_{i,j} - P_{i-S_3,j}}{S_3}}{1/2(S_1 + S_3)} \quad (12-b)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_3} (H^3 \frac{\partial p}{\partial x_3}) = \frac{H_{i,j+(1/2)S_2}^3 \frac{P_{i,j+S_2} - P_{i,j}}{S_2} - H_{i,j-(1/2)S_4}^3 \frac{P_{i,j} - P_{i,j-S_4}}{S_4}}{1/2(S_2 + S_4)} \quad (12-c)$$

$$6\eta U \frac{\partial H}{\partial x_3} = 6\eta U \frac{H_{i,j+(1/2)S_2} - H_{i,j-(1/2)S_4}}{1/2(S_2 + S_4)} \quad (12-d)$$

여기서 notation S_1, S_2, S_3 와 S_4 는 adjacent mode 사이의 간격(Fig. 8참조)이다. 만약 S_1, S_2, S_3, S_4 가 1이라면 가장 간단한 형으로 되나 여기서는 날의 위치가 복잡하기 때문에 $0 < S_1, S_2, S_3, S_4 < 1$ 로 된다. Subscript i 와 j 는 (X_1, X_3) mesh의 (i, j) 위치를 가리킨다. 식(12-b)를 (12-a)위에 대입하면 다음과 같이 표현된다.

$$\beta_{1i,j} P_{i+S_1,j} + \beta_{2i,j} P_{i,j+S_2} + \beta_{3i,j} P_{i-S_3,j} + \beta_{4i,j} P_{i,j-S_4} - \sum_1^4 \beta_{ni,j} P_{i,j} = 6\eta U \beta_{5i,j} \quad (13)$$

여기서

$$\beta_{1i,j} = \frac{H_{i+(1/2)S_1,j}^3}{S_1(S_1 + S_3)}$$

$$\beta_{2i,j} = \frac{H_{i,j+(1/2)S_2}^3}{S_2(S_2 + S_4)}$$

$$\beta_{3i,j} = \frac{H_{i-(1/2)S_3,j}^3}{S_3(S_1 + S_3)}$$

$$\beta_{4i,j} = \frac{H_{i,j-(1/2)S_4}^3}{S_2(S_2 + S_4)}$$

$$\beta_{5i,j} = \frac{H_{i,j+(1/2)S_2} - H_{i,j-(1/2)S_4}}{(S_2 + S_4)} \quad (14)$$

위의 식을 정리하여 풀면 다음과 같은 행렬식(matrix)으로 표현된다.

$$[A][P] = [R] \quad (15)$$

우리가 원하는 것은 압력 분포이기 때문에 inverse $[A]$ 를 이용하여 다음과 같이 정리하여 압력분포를 푼다.

$$[P] = [A]^{-1}[R] \quad (16)$$

압력 분포로부터 평균속도를 식(9)에 넣어 구하

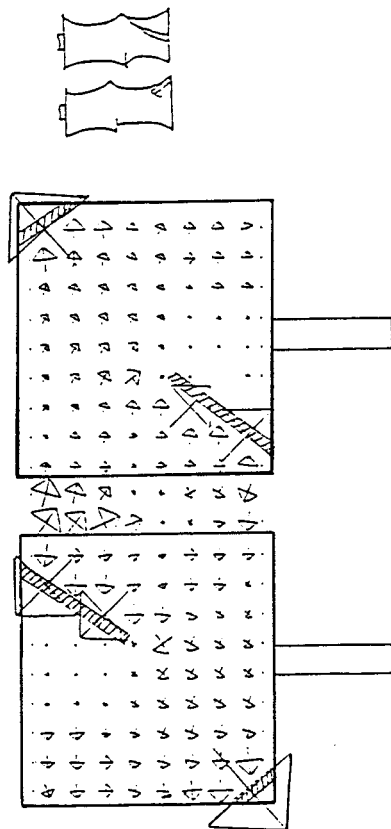


Fig. 12. Flow behavior in internal mixer.

면 속도장의 해가 나와 혼합기 속의 흐름을 알 수 있다. Fig. 12에 혼합기내의 흐름을 컴퓨터 모의실험에 의하여 나타내었다.⁶

결 론

컴퓨터를 사용하여 로우터 형상을 디자인 하기 위하여는 고려되는 인자들을 설정해야 한다. 보통 조작성으로서 로우터 회전속도, 설정온도(setting temperature), 냉각수량을 설정하고 유변학적 성질(rheological property)로서 물질의 점도를 설정하여 고안된 로우터 형상을 집어 넣어 흐름과 혼합효과를 평가한다. 평가기준으로는 혼합기내를 회전하는 시간(circulation time)으로 하고 날 위에서는 전단 응력(shear stress)를 기준으로 하여 로우터의 만족도를 평가하여 만족할 만한 로우터 형상이 디자인 될 때까지 반복 계산한다. 이러한 CAD(Computer Aided Design)를 이용함으로써 시간과 가격을 절약할 수 있다.

참 고 문 헌

1. J. E. Pointon, U. S. Patent, 1,138,410 (1915).
2. F. H. Banbury, U. S. Patent, 1,200,070 (1916).
3. G. A. Webb, U. S. Patent, 2,736,574 (1956).
4. D. Z. Tyson and L. Comper, U. S. Patent, 3,230,581 (1968).
5. A. R. Mitchell, "Computational Method in Partial Differential Equations", John Wiley and Sons, N. Y., 1977.
6. J. K. Kim, Ph. D. Dissertation, University of Akron, 1989.
7. E. H. Ford, U. S. Patent, 2,559,418 (1951).
8. W. Grubenmann and R. Schloeff, U. S. Patent, 2,987,760 (1961).
9. J. T. Matsuoka and J. P. Koziatsek, U. S. Patent, 3,403,894 (1968).
10. H. Koch, U. S. Patent, 3,468,518 (1969).
11. A. R. Crixell, U. S. Patent, 3,672,644 (1972).
12. W. Wiedmann and M. M. Schmid, U. S. Patent, 4,234,259 (1980).
13. N. Sato, M. Miynoko, K. Inoue, and K. Nakagawa, U. S. Patent, 4,234,358 (1981).