

# 에너지·환경 諸般 시스템에 關한 수치해석적 研究

## A Numerical Study On Various Energy and Environmental Systems

장 동순<sup>1</sup>, 송 우영<sup>2</sup>, 나 혜령<sup>2</sup>, 박 병수<sup>2</sup>, 이 은주<sup>2</sup>, 김 복순<sup>2</sup>

D.S. Jang, W.Y. Song, H.R. Na, B.S. Park, E.J. Lee, B.S. Kim

This paper describes computational efforts on the various energy and environmental problems using Patankar's SIMPLE method. The specific problems included in this study are : pollutant and flammable material dispersions in open and confined areas, aerator-induced flow in a lake for DO(dissolved oxygen) concentration, primary clarifier for water and waste water treatment, hood ventilation in workplace, cyclone and LNG combustors and Dow chlorination reactor.

A control-volume based finite-difference method is employed together with the power-law scheme. The pressure-velocity coupling is resolved by the use of the revised version of SIMPLE, says SIMPLER and SIMPLEC. The Reynolds stresses are closed using the standard or the RNG  $k-\epsilon$  models. Turbulent reaction is modeled using two fast chemistry methods such as eddy breakup and conserved scalar models. Further, a nonequilibrium model is developed for the application of the chlorination process in the Dow reactor. Other important empirical models and physical insights appeared in this study are presented and discussed in a brief note. The computational method developed in this study is considered, in general, as a viable tool for the design and determination of the optimal condition of various engineering system of interest.

### 1. 서론

최근 컴퓨터 성능의 현격한 신장은 산업 전반에 걸친 열유동 및 화학반응의 복잡한 문제를 해결하는데 있어 수학적 모델과 컴퓨터 모사에 의한 역할을 크게 증대시켰다.<sup>[1]</sup> 본 논문은 컴퓨터 프로그램 개발에 의한 에너지·환경 분야의 시스템 해석에 관한 다양한 응용예를 제시함으로써 수치해석적 방법이 이 분야의 高度設計의 중요한 도구로 사용될 수 있음을 보이고자 함이다. 이는 특히 이 분야에서 전산유체공학의 응용 수준이 비교적 낙후된 국내 사정을 감안할 때 매우 고무적인 일로 생각된다.

---

1. 충남대학교 환경공학과 (305-764, 대전시 유성구 궁동 220 Tel: 042-823-8361)

2. 충남대학교 환경공학과 대학원 (305-764, 대전시 유성구 궁동 220, Tel: 042-821-6677)

본 연구에서 고려한 대상은 첫째로 난류 대기 경계층에서 고상 또는 기상 오염물질의 단기 대기 확산으로 이는 대기오염이나 화재방 등의 관점에서 매우 중요한 사항이다. 이차원 수직 평면으로 이루어진 계산영역에서 오염물질의 확산거동을 분자량, 농도 등의 중요 변수에 대해 고려하였다. 두번째 문제는 밀폐된 지하공간 내에서 가연성 연료인 LNG와 LPG 등의 확산 거동을 나타내었다. 이 문제는 도시가스로 사용되고 있는 LPG와 LNG의 산업안전 재해가 빈번한 시점에서 LPG 등의 물리적 특성에 따른 폭발 한계영역과 같은 확산 농도를 규명하는 점에서 의미가 있다.

세 번째 문제는 湖沼에서의 오염물질 생성과 소멸에 중요한 인자인 용존산소(DO)농도의 예측을 위한 유동계산을 수행하였다. 특히 DO나 온도 성층화 파괴에 의한 혼합 증가를 위해 폭기조 시스템이 연계된 호소유동 문제를 다루었다. 다음은 같은 수체유동 문제로서 폐수나 용수처리공정 비용의 30%정도를 차지하는 일차침전조에서 유동특성에 따른 부유고형물질(SS, suspended solids)의 침전효율을 계산하였다. 이 경우에는 일차침전조의 기하학적 형상, 운전조건 그리고 SS의 크기나 입도 분포가 중요 인자로 고려된다.

다섯 번째는 보통 연소로에 비해 체류시간이 매우 길고 같은 연소용량에 대해 1/5정도 크기인 사이클론 연소로의 유동특성을 수치해석적으로 규명하였으며, 이어서 LNG연소로의 연소특성을 두 종류의 'fast chemistry' 난류반응 모델에 의해 수치모사하였다. 그 다음은 화학공정의 예로서 화학반응로 설계용 컴퓨터 프로그램 개발예를 Dow chlorination 화학반응로의 경우를 제시하였다. 이 경우에 난류반응은 난류와 화학반응의 특성시간의 크기가 비슷하므로 난류와 화학반응이 모두 고려된 'nonequilibrium' 모델이 사용되어야 한다.

위에서 언급한 제반 에너지·환경 시스템에 대해 본 논문에서는 전산유체역학적인 수치모사를 통해 다양한 문제의 설계 및 운전조건 설정에 효율적으로 대처할 수 있었다. 특히 컴퓨터 용량과 속도가 요구되는 3차원 난류반응문제나 미분탄연소로와 같은 多相에 熱복사가 관여한 종합적인 문제를 제외하고는 대부분의 경우가 486級의 PC를 통해 손쉽게 문제해결이 가능하다. 이런 점에서 본 논문에서 제시한 수치모사 방법은 산업현장에서도 공히 이용할수 있는 高度設計의 도구로서 가능성을 보였다고 할 수 있다.

## 2. 지배방정식과 수학적 모델

본 연구에서 사용한 기상 지배방정식은 단위질량당 일반종속변수  $\phi$ 에 대해 아래와 같은 표준형으로 나타내어진다<sup>[2]</sup>.

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{u}\phi) = \nabla(\Gamma_\phi\nabla\phi) + S_\phi \quad (1)$$

식 (1)은 검사체적에 기초한 유한차분 방법에 의해 형식적으로 선형인 이산화방정식을 유도할 수 있으며 이 이산화방정식의 해는 line-by-line TDMA와 반복계산에 의해 구할 수 있다. 유동항의 이산화를 위해 power-law scheme 을 사용했으며 운동량 방정식에서 압력과 속도의 연계문제는 SIMPLE<sup>[2]</sup> (semi-Implicit Method Pressure-Linked Equation)의 개량형의 SIMPLER<sup>[3]</sup> 나

SIMPLER를 각각 사용했다. 한편 Reynolds 전단력의 모델을 위해서는 표준  $k - \epsilon$  모델이나 필요에 따라서 RNG  $k - \epsilon$ <sup>[4]</sup> 모델을 사용하였다. 난류반응모델은 주로 화학반응이 난류혼합에 의해 빠르다는 가정 하에 'fast chemistry' 모델을 사용하였으며 구체적으로 'conserved scalar method'<sup>[5]</sup>와 'eddy breakup'<sup>[6]</sup> 모델을 사용하였다.

### 3. 응용예

본 절에서는 에너지·환경문제에 관련된 8가지의 적용 예를 나타내었다.

#### 3.1 오염물질 대기확산

Fig. 1(a)에는 오염물질에 대기경계층에 확산되는 양상을 나타내는 도식도로서 주변공기보다 온도가 높고 속도가 큰 固-氣相 오염물질의 短期 확산거동을 파악하고자 함이다. Fig. 1(b)에는 오염물질이 NH<sub>3</sub>와 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>인 경우에 온도에 따른 확산거동을 나타내었으며 오염물질의 확산양상은 오염물질의 초기속도, 온도, 분자량에 크게 관련되나 오염물질의 초기속도가 큰 경우 (例 1m/s)에는 氣相의 안정조건(stability criteria)등에는 거의 영향을 받지 않는 것으로 나타났다.<sup>[7]</sup>

#### 3.2 LPG 밀폐공간 확산

Fig. 2(a)에는 밀폐공간으로 LPG가 유출될 경우에 확산되는 양상을 수치해석하기 위한 도식도이다. Fig. 2(b)에서는 시간에 따른 LPG의 확산농도를 나타내는 것으로서 시간에 따라 공기보다 무거운 LPG가 바닥으로 침강하면서 확산되는 양상을 잘 나타내 주고 있다. 특히 LPG의 폭발 영역인 부피농도 2.5~9.5 % 영역이 시간에 따라 급격히 변하는 것으로 나타났다.<sup>[8]</sup>

#### 3.3 폭기조에 의한 湖沼유동 및 DO 농도예측

Fig. 3(a)에는 2차원 수직호소에서 수체유동 특성과 온도 및 용존산소 농도분포를 파악하기 위한 도식도를 나타낸다. 호소에서 사용되는 폭기조는 산소의 원활한 공급과 온도 및 기타물질의 성층화를 파괴하기 위해 사용된다. 본 연구에서 사용되어진 DO농도 모델로는 재폭기와 광합성에 의한 산소의 생성과 호흡에 의한 산소의 소모 등을 고려하여 실제 측정치와 비교하였다. Fig. 3(b)는 측정에 의한 DO의 농도와 본 계산에 의한 DO의 농도의 비교를 나타내었다. 계산농도는 실험치와 비교적 그 영향이 잘 일치함을 알 수 있다.<sup>[9]</sup>

#### 3.4 일차침전조

일차침전조의 유동은 SS의 효율적인 침강이 이루어지도록 short-circuiting(flow recirculation)이 배제되어야 한다. 이 목적을 위해서는 침전조의 총횡비, baffle의 형상 및 위치, overflow rate 등이 부유물질의 밀도, 직경 및 입도분포 등과 함께 중요한 변수이다. Fig. 4(a)에는 본 연구에서 사용한 캐나다 온타리오주의 장방형 일차침전조의 도식도이며, Fig. 4(b)는 표준  $k - \epsilon$ , RNG  $k - \epsilon$ 을

사용한 수치해석 결과와 문헌에 나타난 실험적/수치해석적 자료와의 비교를 각각 나타내었다. 이러한 수치해석의 결과로서 일차침전조의 기하학적 형상, 운전용량 그리고 SS의 크기 및 입도 분포에 따른 조직적인 자료 도출이 가능하였다<sup>[10]</sup>

### 3.5 싸이클론 연소로

싸이클론 연소로는 Fig. 5(a)에 나타낸 바와 같이 강력한 선회유동에 의해 연소로 내의 유동이 로백의 접선방향으로 유입되며 로백 원주를 따라 나선형으로 진행하다가 반사되어 반경이 축소된 형태의 나선형 흐름이 형성, 다시 반복된다<sup>[11]</sup>. 이러한 싸이클론 연소로는 연료의 체류시간이 보통 10배 이상으로 길며, 난류혼합이 강력하여 같은 용량의 연소기에 1/5정도로 소형화할 수 있는 장점이 있다. Fig. 5(b)에는 이와 같은 싸이클론 연소로 내의 유동을 수치해석적으로 설명한 것으로서 문헌에 나타난 유동조건과 일치하는 속도영역에서 싸이클론 내의 3회 반복 왕복유동의 결과가 가시적으로 나타났다. 이러한 싸이클론 연소로는 연소나 소각에 필요한 3'T' 즉, Turbulence, Residence Time, Temperature를 잘 만족할수있어 난연성 폐기물 소각이나 이차 연소로에 적용 가능성이 높은 것으로 주목받고 있다.

### 3.6 환기용 후드

Fig. 6(a)에는 축대칭 형태를 지닌 환기용 후드를 나타내는 것으로서 후드의 설계 및 운전조건은 좁은 영역에서 제한적으로 성립하며, 때로는 서로 상충되는 많은 경험식에 의하여 주어진다. Fig. 6(b)는 본 연구에서 수행한 수치해석결과이며 문헌에 나타난 여러 경험식과 비교검토 하였다.

### 3.7 LNG 연소로

CH<sub>4</sub>가 주성분인 LNG는 대표적인 청정 기체연료로서 산업용 또는 가정용 응용의 난방이나 발전 그리고 폐기물 소각 처리에서 hydrogen radical과 열량 공급을 위한 보조연료로서 광범위하게 사용되고 있다. 그러므로 이에 대한 신뢰성있는 수치해석 예측 프로그램 개발은 중요하며 본 연구에서는 전통적으로 많이 사용되고 있는 두 종류의 'fast chemistry' 모델을 실험치<sup>[12]</sup>와 각각 비교하였다.

### 3.8 화학반응로

Fig. 7(a)는 Dow Chemical Co.(LA division)의 chlorination 반응로의 도식도로서 CH<sub>3</sub>Cl과 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>를 원료로 하고 Cl<sub>2</sub>를 산화제로 하여 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>를 생성하는 공정이다. 그러나 'hair spray'의 원료인 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>가 오존층 파괴 등의 이유로 美國에서 90년을 기해 생산 금지되었다. 이에 반응로에 대한 근본적인 구조 개조없이 단지 운전조건 등의 변경에 의해 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>의 생산을 줄이고 CH<sub>3</sub>Cl<sub>2</sub>의 생산을 늘리고자하는 시도가 수행되었다. 그러나 生成物중 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>의 분율을 늘이기 위해서는 산화제인 Cl<sub>2</sub>의 투입이 증가되어야 한다. 이는 반응증가에 따른 폭발위험과 미반응의 경우에는 대표적인 독성물질인 Cl<sub>2</sub>가스 배출에 따른 심각한 부식이나 공해문제가 예상된다. 이에 신뢰성있

는 설계용 컴퓨터 프로그램 개발이 선행되어야 하며 본 연구에서는 비평형 난류반응 모델의 개발과 실험치와 비교가 이루어졌다<sup>[13]</sup>.

#### 4. 결론

Patankar의 SIMPLE 알고리즘을 근간으로한 컴퓨터프로그램 개발에 의해 에너지·환경에 관련된 8가지 시스템에 대한 적용 예를 나타내었다. 각 문제에 대한 중요한 물리적 관점 제시와 함께 수치해석 결과를 나타내었다. 이와 같은 결과를 토대로 486 PC와 대학원 석사과정의 전산 열유동해석에 의해 에너지·환경에 관련된 제반 문제에 대한 개념 설계의 가능성을 보였다.

#### 5. 참고 문헌

- [1] Heppenheimer, T.A., (1980) "Aviation Aerodynamic Duo," High Technology p.62.
- [2] Patankar, S.V., (1980) "Numerical Heat Transfer and Fluid Flows," Hemisphere, Washington D.C.
- [3] Van Doormaal, J.P. and G.D. Raithby, (1984) "Numerical Heat Transfer," Vol.7, p.147.
- [4] Choudhury, D. and S.E. Kim, (1993) "TN44, ASME Fluids Engineer Conference".
- [5] Bilger, R.W., (1976) "Prog. Energy Combustion Sci.," Vol.1, p.87.
- [6] Magnussen, B.F. and H. Hjertager, (1976) "16th Int'l Symp. on Combustion," The Combustion Institute, p.719.
- [7] 나혜령, 이은주, 장동순, 서영태, (1995) "固-氣相 毒性 오염물질 短期 대기 확산 고도 수치해석: 화학종, 온도, 상대속도," 산업안전공학회 게재 확정.
- [8] 권오현, 김팔규, 이승준, 장동순, 이은주, 박병수, (1995. 9) "LPG 유동과 확산에 관한 고도 실험 및 수치해석적 연구," 법무법인 화백 및 충남대 보고서.
- [9] 권오현, 장동순, 서동일, 부성민, (1994. 12) "수중 폭기조에 따른 장래 수질변화 예측 및 효과 규명에 관한 연구," 한국수자원공사 제출 보고서.
- [10] 이상일, 김창원, 장동순, 서인석, 박지영, 나혜령, (1994. 11) "난분해성 특정 산업폐수 처리기술," 충북 대학교 G7 선도과제 보고서.
- [11] Syred, N., Claypole, T.C. and S.A. MacGregor, (1987) "Cyclone Combustor, Ch.5" in Principle of Combustion Engineering for Boiler.
- [12] Lewis, M.H. and L.D. Smoot, (1981) "Combustion & Flame," No. 42, p.183.
- [13] Archarya, S., D.S. Jang, D.H. West and L.A. Hebert, (April 9, 1991) "A Moment Closure Method for Modeling a Multistep Chlorination Reaction," AIChE 1991 Spring National Meeting.

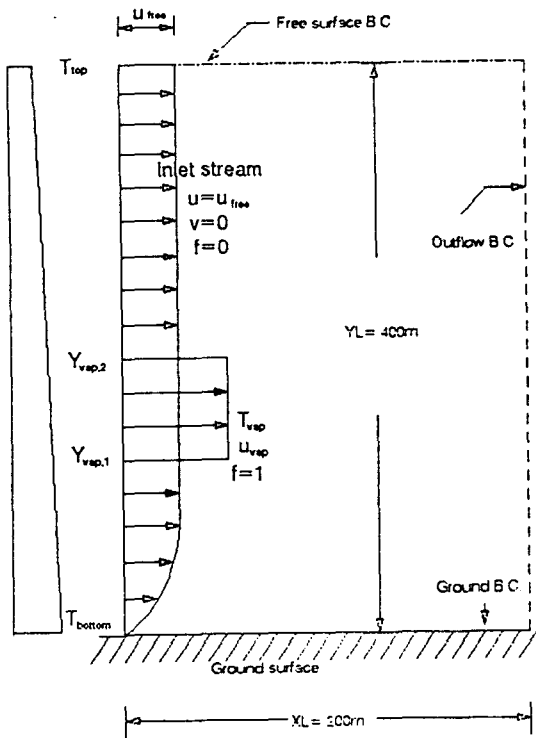
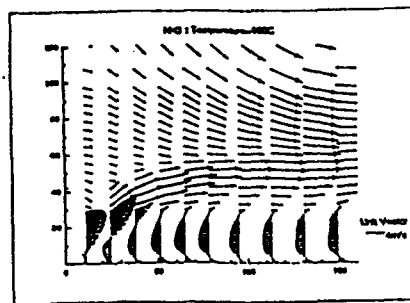
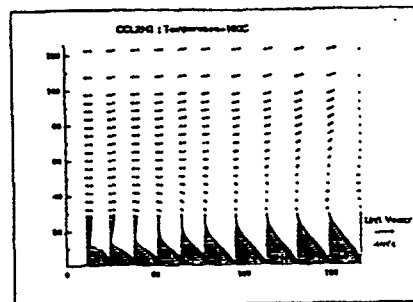


Fig 1(a) Schematic of pollutant dispersion in an open atmosphere



(a)  $NH_3$



(b)  $CH_2Cl_2$

Fig 1(b) Velocity vector plots for the case of  $NH_3$  and  $CH_2Cl_2$

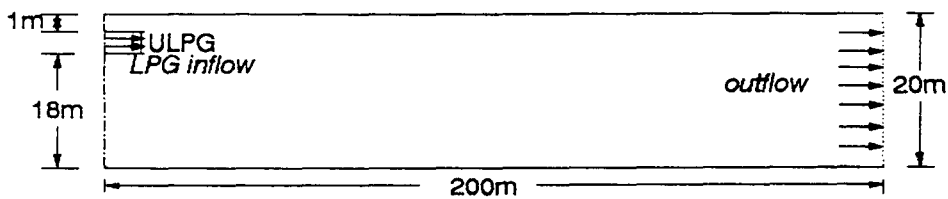


Fig 2(a) Schematic of LPG dispersion in a confined box

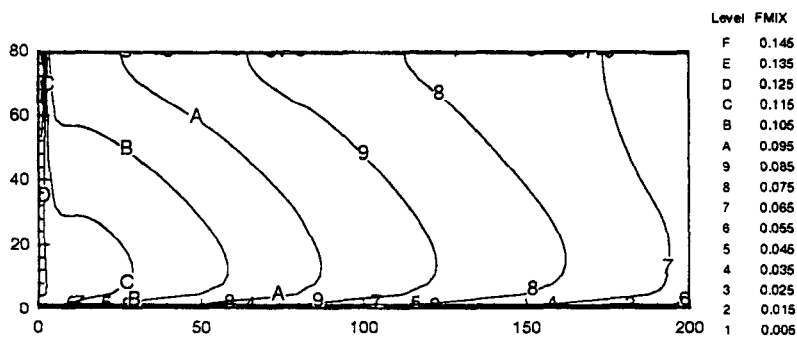


Fig 2(b) LPG concentration contour after 5 hours ( $U_{LPG}=0.05m/s$ ,  $T_{LPG}=13^{\circ}C$ )

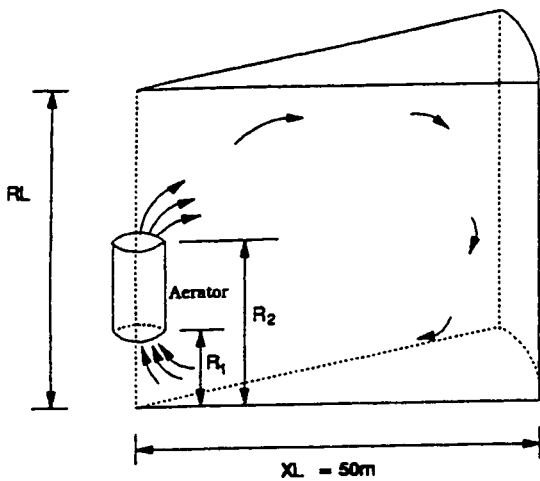


Fig 3(a) Schematic of single aerator in a lake

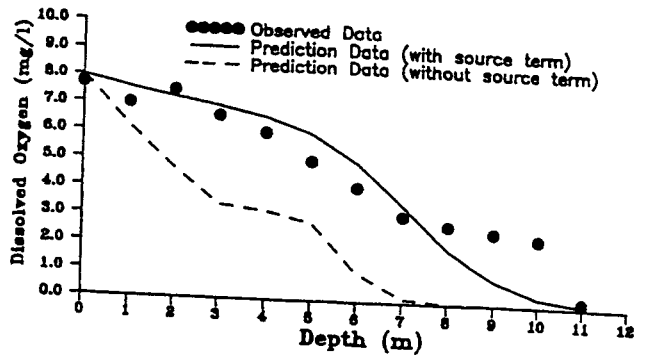


Fig 3(b) Comparison of DO prediction and experimental data

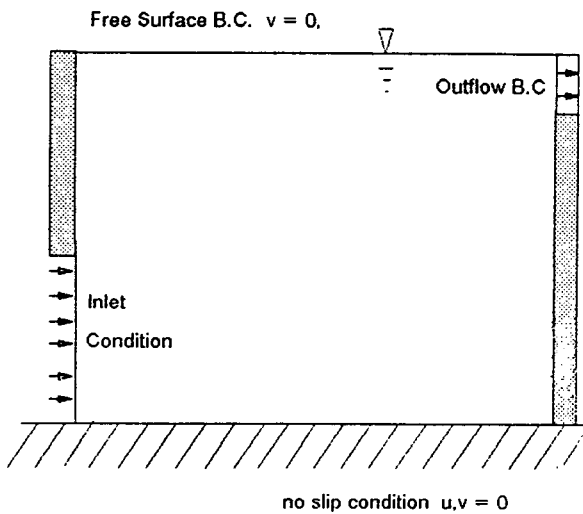


Fig 4(a) Schematic and boundary condition of primary clarifier

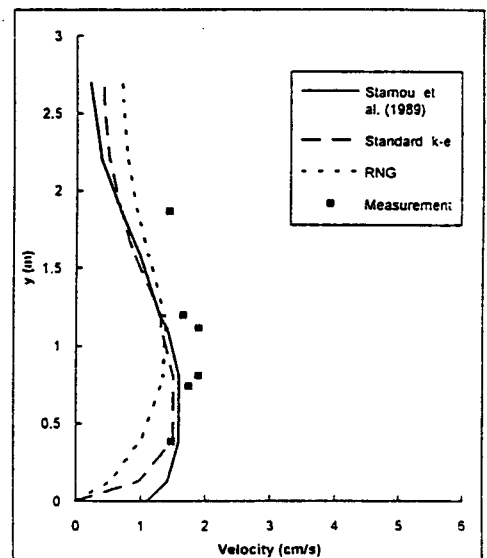
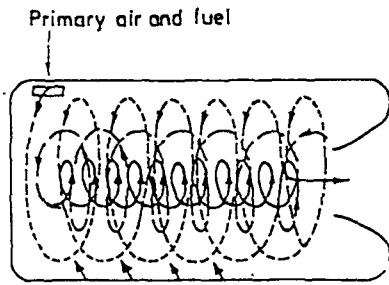
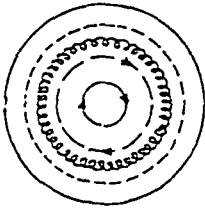


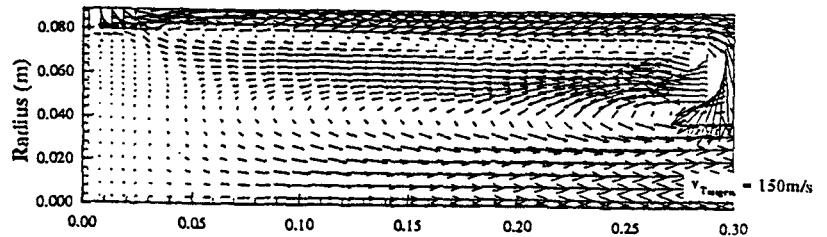
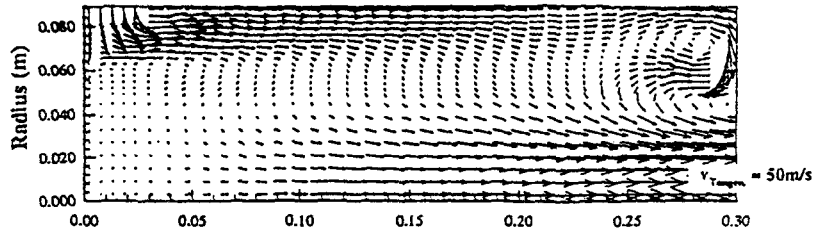
Fig 4(b) Comparison of axial velocity prediction and experiment at  $x=9m$



Secondary Tangential air inlets - velocities 60-140 m/s



- - - forward external path  
 - - - backward middle path  
 - - - forward internal path  
 well stirred region



Axial Distance (m)

Fig 5(a) Typical flow characteristics in a cyclone combustor

Fig 5(b) Two flow patterns occurring in a hypothetical combustor for  $v_{\theta} = 50$  and  $100 \text{ m/s}$

Top Air Inlet  $u=0, \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$

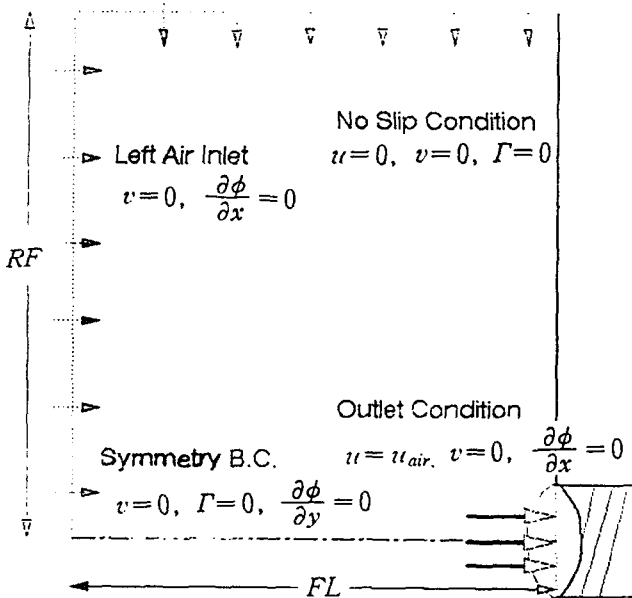


Fig 6(a) Computational domain and boundary condition for workspace ventilation

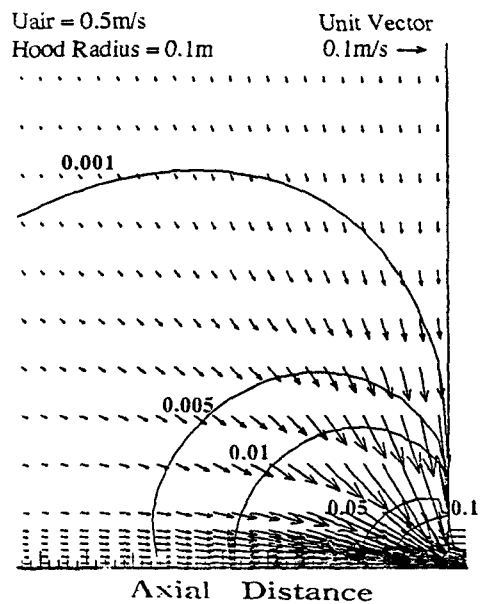


Fig 6(b) Axial velocity vector plot and isovelocity contour



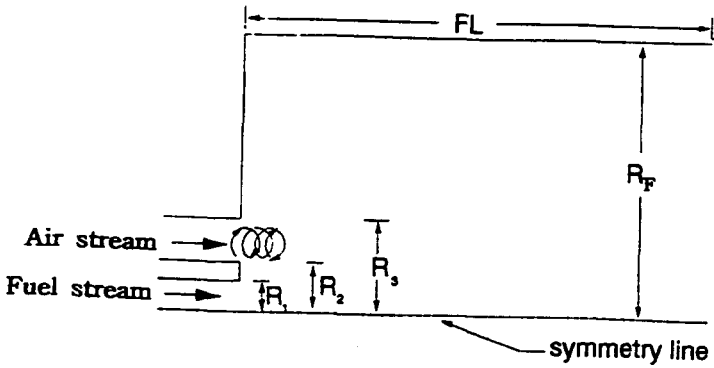


Fig 7(a) LNG and combustor by Lewis and Smoot

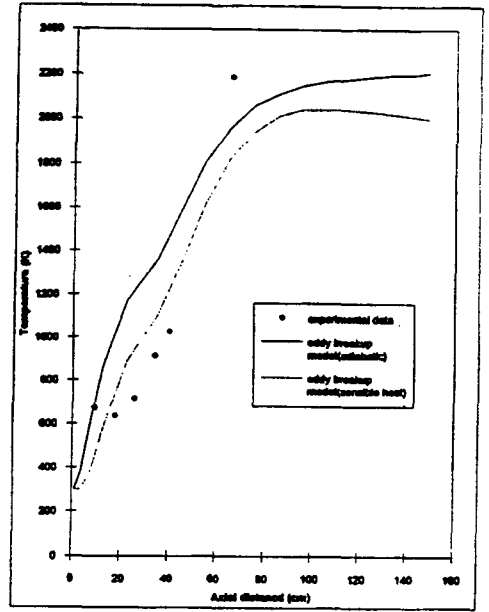


Fig 7(b) Comparison of temperature profile between this study and experiment

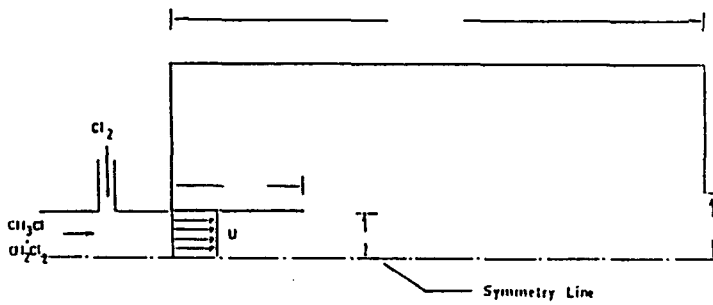


Fig 8(a) Schematic of Dow chlorination reactor

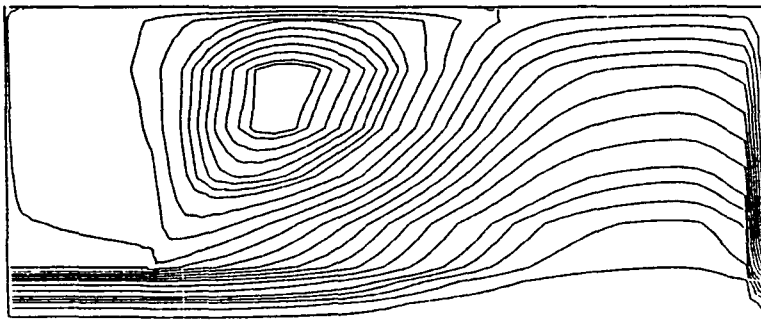


Fig 8(b) Typical stream line plot showing a strong corner recirculation