

전산유체역학을 이용한 비산배출량의 산정기법

박영근, 문정우, 고민수, 박현수¹, 홍승철², 김화용, 이종협*

서울대학교 응용화학부

1. (주) TO21

2. 한국환경기술진흥원

* Corresponding author

Estimation of Fugitive Emission by Computational Fluid Dynamics

Younggeun Park, Jungwoo Moon, Min-Su Ko, Hyeonsoo Park¹, Seung-Cheol Hong²,

Hwayong Kim and Jongheop Yi

School of Chemical Engineering, Seoul National University

1. TO21 Co.*

2. Korea Institute of Environmental Science and Technology

1. 서론

전세계적으로 매년 휘발성유기화합물질(Volatile Organic Compounds; VOCs)이 포함된 원료와 제품을 대규모로 취급하고 있고, 그 중 많은 부분이 대기로 배출되어 환경과 인체에 직, 간접적으로 위해를 끼치고 있다[1-3]. 우리나라에서도 최근 공단지역을 중심으로 VOCs로 인한 인근 주민의 건강상 피해가 가시화 됨에 따라 이러한 대기오염물질에 대한 관심이 증대되고 있는 실정이다. 초기 VOCs 문제는 주로 지역적인 오염물질로 다루어져 왔다. 그러나, 풍향, 풍속 등의 기후조건에 따라 한 지역에서 발생된 VOCs가 다른 지역으로 이동하거나, 국가간 무역이 활발해지면서 제품에 함유된 형태로 VOCs가 주변국에도 영향을 초래함에 따라 VOCs는 점차 장거리 월경 오염물질로서 국제문제화 되고 있다[4]. 이에 따라, 세계 각국에서 VOCs 배출 저감방안을 주요한 국가환경정책문제로 제시하고, 그 해결방안에 관하여 논의하여 왔다. 국내에서는 1995년 12월에 개정된대기환경보전법에 대기환경규제지역에서의 VOCs 배출시설관리를 1999년 1월부터 시행토록 규정하였고, 1996년 9월에는 여천공단을 특별대책지역으로 지정하면서 공단지역에서의 VOCs 규제관리가 시작되었다[4]. VOCs 규제법 시행이후 VOCs 저감을 위한 여러 가지 기술이 개발되어 왔으며, 그 결과 스택, 저장탱크

등 점오염원으로부터 배출되는 오염물질의 상당량을 줄일 수 있었다. 그러나, 반면에 그동안 간과해왔던 플랜지, 밸브 등의 비산배출원으로부터의 배출량이 상대적으로 증가된 것을 알 수 있었다[5]. 즉, 오늘날에 들어서는 비산배출원으로부터의 VOCs 관리의 중요성이 새로이 부각되었다.

비산배출원으로부터 배출되는 VOCs의 관리를 위해서는 배출원의 종류와 수 및 각 배출원으로부터의 배출량에 대한 정보를 파악하는 것이 선행되어야 한다. 정확한 배출량의 측정을 위해서는 각 장치로부터 배출되는 오염물질을 포집하여 분석하는 것이 가장 좋은 방법이다. 그러나, 일반적으로 수천, 수만개의 장치로 구성되어 있는 공장(특히, 석유정제 또는 석유화학공장)의 모든 장치로부터의 배출량을 실측한다는 것은 현실적으로 불가능한 일이다. 또한, 개수가 적다 하더라도 측정자의 안전상 측정이 불가능한 경우(고온, 고압, 고충등)도 있다. 이러한 경우 간접적인 방법으로 전체를 대표할 수 있는 표본집단을 선정하여 배출량을 측정 후 해당 장치로부터의 배출량을 예측하기 위한 표준화모델을 개발하는 방법이 제안되고 있다[6,7]. 국내의 경우 VOCs 배출 저감에 대한 기술은 비교적 활발히 연구되어 왔지만, 배출량을 정확히 예측할 수 있는 방법론이나 프로그램, 장치 등의 개발은 부족한 실정이다. 국내의 배출량 산정프로그램으로는 지난 1999년 이 등[8]에 의하여 개발된 TRICALC프로그램이 있다.

따라서, 본 연구에서는 전산모사방법을 이용하여 비산배출원으로부터의 배출량을 정확히 예측하고자 하였다. 이를 위해 밸브, 플랜지 등 대표적인 비산배출원으로 구성된 실험장치를 고안하여, 내부를 흐르는 유체의 조건에 따른 배출량을 각 장치로부터 측정하고 전산모사를 통해 구한 값과 비교 분석하였다.

2. 배출계수

실험을 통하여 얻은 각 비산배출원으로부터의 데이터를 식(1)에 대입하여 장치별 배출계수를 산정할 수 있었다[9, 10].

$$C = 1.607 \times 10^{-10} \times M \times \frac{V_s}{t} \times (C_s - C_a) \quad (1)$$

C 는 해당배출원의 배출계수 [kg/hr/source], M 은 채취한 시료의 평균분자량 [kg/kg_mole], V_s 는 0°C, 1기압에서의 총 건조가스유량 [l], t 는 총 진공펌프 운전시간 [sec], C_s 는 채취한 시료의 화학물질 농도 [ppb-volume] 그리고 C_a 는 주변대기의 화학물질 농도 [ppb-volume]를 의미한다.

3. 이론

비산배출원으로부터의 VOCs 배출현상은 VOCs가 장치내 미세한 틈을 통해 밖으로 나올 때 발생하는 현상이다. 따라서 이러한 현상을 전산모사를 이용하여 해석하기 위하여 질량 보존식, 운동량 보존식, 엔탈피 보존식과 같이 유체의 흐름과 관련된 문제를 해석할 때 사용되는 기본 지배방정식과 미세한 틈을 고려하기 위한 다공성매질 방정식이 필요하다.

(1) 일반적 지배방정식

일반적인 지배방정식으로는 식(2) ~ 식(4)에서 나타난 것과 같이 질량 보존식, 운동량 보존식, 엔탈피 보존식이 사용된다.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i v_j) = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + F_i \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu + \mu_t}{\delta_h} \right) \left(\frac{\partial h}{\partial x_i} \right) \right] + S_h \quad (4)$$

여기서, ρ 는 내부 유체의 평균 밀도, μ 는 점도, v 는 속도, x 는 i 방향으로의 길이, i 는 구성요소, g 는 중력 가속도, τ 는 면이 받는 전단응력, F 는 외부에서 주어지는 힘, h 는 엔탈피, S_h 는 화학 반응에 의한 열 발생량과 계면에서의 열교환을 포함한 생성항을 의미한다.

(2) 다공성매질 (porous media)

각 장치의 유관으로 보이지 않는 틈으로부터 VOCs가 누출되는 현상을 고려하기 위하여 이 부분을 다공성매질(porous media)로 가정하고, 이 부분의 투과율을 조절함으로써 실제 배출되는 현상을 해석하고자 하였다. 이러한 적용에 관한 운동량 소멸은 식(5)로 표현된다[11].

$$F_i = \frac{\mu}{\alpha} v + C_2 \left(\frac{1}{2} \rho v |v| \right) \quad (5)$$

여기서, α 와 C_2 는 매질에 따른 상수로 각각 투과율(permeability)과 관성저항계수(inertial resistance factor)를 의미하며, ρ 는 내부 유체의 평균 밀도, μ 는 점도, v 는 속도를 의미한다.

4. 전산모사

전산모사를 수행하기 위하여 Fig. 2와 같이 각 장치(플랜지, 게이트밸브, 글로브밸브, 개방식라인)의 내부 그리드를 작성하였다. 그리드는 좌우 대칭성을 고려하여 2차원 직교 좌표계 구조적 그리드(structured grid)로 완성하였으며, 각 장치의 격자수는 플랜지 5,775개, 게이트밸브 7,235개, 글로브밸브 7,336개, 개방식라인 6,125개로 구성되었다. VOCs가 배출에 영향을 미치는 인자로서 온도, 내부압력, 대기조건 등의 여러 인자가 존재하나, 현재까지의 연구에 따르면 장치내부 압력이 VOCs배출에 가장 큰 영향을 미치는 것으로 나타났다[10]. 따라서, 이러한 현상을 반영하기 위하여 압력 경계 조건(pressure boundary)을 적용하였다. 입구부분의 압력은 높고, 출구부분의 압력은 그보다 낮아 장치 내부로 VOCs 유체가 흐르게 된다. 외부 대기는 1.0 bar이므로 장치 내부의 압력과 큰 차이가 생기며, 압력의 차이에 의하여 장치 내부를 흐르는 VOCs가 외부로 누출되는 현상에 대한 전산모사를 수행하였다. 앞에서 언급한 바와 같이 각 장치에서 VOCs가 배출되는 경로는 다공성매질로 구성되어 있다고 가정하였으며, 배출조건은 투과율과 관성저항을 제어함으로써 결정하였다. 투과율과 관성저항의 결정은 실험치와의 비교를 통해 수행하였는데, 먼저 장치 내부조건이 25 °C, 1 bar인 경우 발생하는 VOCs 배출량을 측정된 후, 실험값과 같은 조건하에서 전산모사를 수행한 후 그 결과를 비교함으로써 다공성매질 제어인자(투과율, 관성저항)를 결정하였다.

다공성매질 제어인자가 결정되면, 이 조건하에 유체의 종류, 농도, 장치내부 압력조건을 변화시키면서 계산을 수행함으로써 각 장치별, 물질별, 압력별 배출량을 계산할 수 있었으며, 계산된 값을 위의 실험결과와 비교함으로써 검증하였다. VOCs의 종류에는 여러 가지가 있으나, 그 대표물질로 현재 우리나라 현장에서 가장 많이 유통되고 있는 벤젠과 톨루엔을 대상으로 위 결과를 비교 분석하였다. 전산모사를 통한 모든 계산은 상용 전산유체역학 코드인 Fluent ver. 4.5.2을 이용하여 수행하였다.

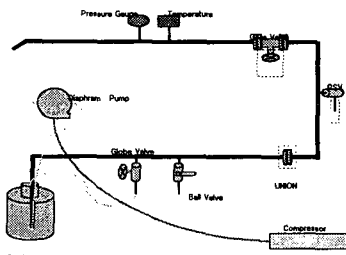


Fig.1. Experimental apparatus.

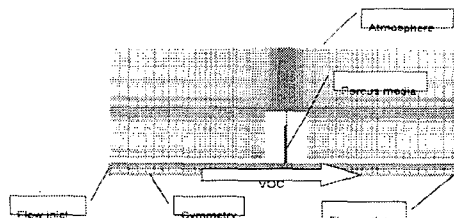


Fig.2. Computational grid of flange.

5. 결과 및 토론

전산모사를 통하여 비산배출부의 VOCs의 압력장의 변화와 농도분포를 확인하였다. 밝은 색으로 갈수록 농도가 높아지고 있음을 의미한다. 배출된 벤젠은 등방으로 퍼지고 있는 형태를 나타낸다. 배출장치 주변에 유동변화와 온도조건을 경계조건으로서 설정해 주지 않았기 때문에 배출장치의 기하학적인 요소에 의하여 농도분포가 영향을 받을 것으로 판단된다[10]. 개방식라인의 경우는 장치 내부의 배출 틈에서 농도분포가 나타나며 벤젠이 배출된 후 농도구배가 미약하게 존재한다.

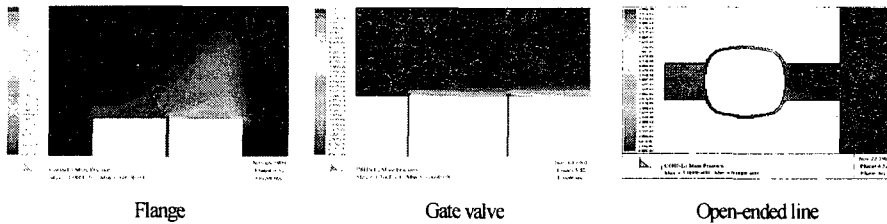


Fig.3. Benzene concentration profiles

전산모사를 통하여 플랜지에서 벤젠과 톨루엔을 대상으로 물질의 종류에 따른 배출계수 차이를 비교하였다. EPA에서 제안 한 바와 같이[13] 배출계수는 선형적인 형태로 정리되었으며 본 연구에서도 확보된 결과의 선형화를 수행하였다. Fig. 4에서 플랜지의 경우, 두 물질 모두에 대하여 내부압력 증가에 따른 누출량이 증가하는 경향을 나타냈

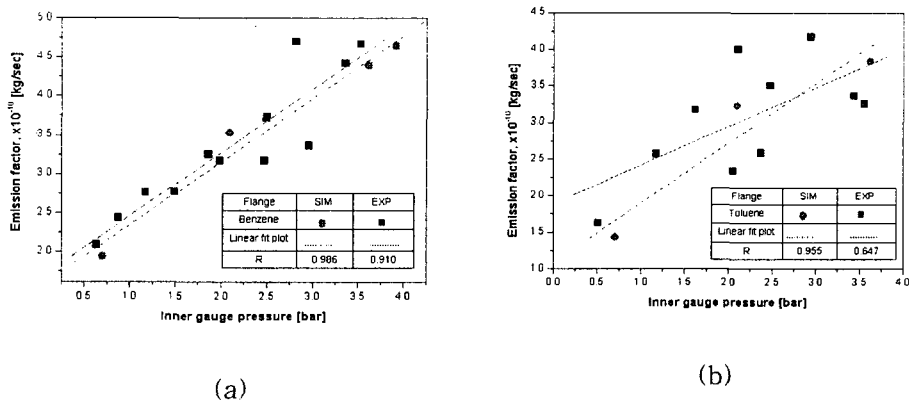
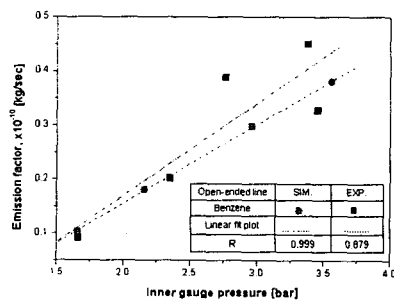


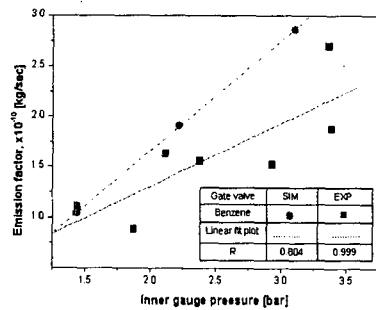
Fig. 4. CFD simulation data of (a) fugitive emission of benzene from flange and (b) fugitive emission of toluene from flange.

다. 압력의 증가에 변화는 두 물질 모두 플랜지에서 동일한 값의 범위 (0.0 ~ 0.5610-10

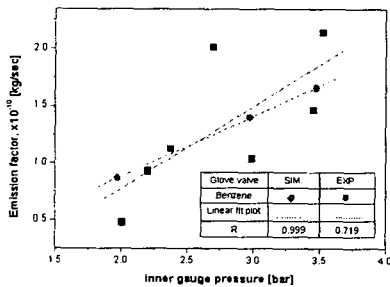
kg/sec)를 가졌으나, 장치내부의 압력차이가 0인 지점에서 벤젠의 누출량이 높게 나타났다. 이러한 배출 농도의 차이는 벤젠의 증기압이 상온에서 약 0.132 bar, 톨루엔의 증기압이 상온에서 약 0.039 bar로 벤젠의 증기압이 높은 것이 원인으로 판단된다. 톨루엔을 대상으로 한 Fig. 4의 (b)에 의하면 실험과 전산모사의 결과 사이의 선형성의 차이가 벤젠과 비교하여 크게 나타난다. 즉, 전산모사의 경우는 장치내부의 압력이 증가하여도 배출계수 증가의 선형성이 높게 유지되지만 배출실험결과에 의하면 내부압력 증가에 따른 배출계수증가의 선형성이 감소된다. 톨루엔의 경우는 CH_3 - 작용기를 가지고 있기 때문에 벤젠과 비교하여 상대적으로 분자의 형태나 작용기에 의하여 작용하는 인력이 다르다[10]. 물질이동과 열역학 물성값 만을 고려한 본 전산모사 연구에서는 분자크기 단위에서의 분자의 모양 및 작용기와 관련된 여러 힘들을 고려할 수 없었기 때문에 이러한 차이가 발생하는 것이라 고려된다. 정밀하고 정확한 배출계수를 확보하기 위해서 분자크기에서의 여러 인자들을 고려하는 계산이 수반되어야 한다.



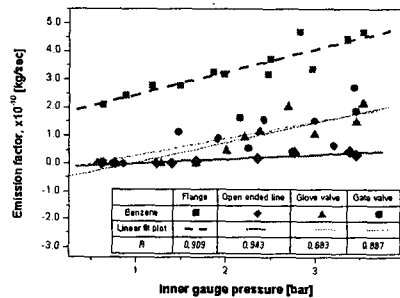
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig.5. The fugitive emission of benzene from (a) open ended line in CFD, (b) gate valve in CFD, (c) glove valve in CFD and (d) experiment data.

이러한 형태의 계산에는 본 연구에서 대상으로 하고 있는 전산모사와 달리 많은 경제적, 시간적 수고가 요구되며, 현장에서의 적용성도 줄어들 수 있는 단점이 있다. 따라서 본 연구에서 대상으로 하는 전산모사에 의한 접근이 현 상황에서의 최적의 방법일 것으로 판단된다.

전산모사를 통한 벤젠의 각 장치별 배출량 비교에 의하면 플랜지, 게이트밸브, 글로브밸브, 개방식 라인 순으로 많은 양의 VOCs가 배출되었다. 장치 내 압력증가에 따른 배출량의 증가되는 정도는 글로브밸브, 게이트밸브, 플랜지, 개방식 라인 순서대로 높았다. 전산모사의 결과를 선형화한 하였다. 이러한 경향은 실험결과와 유사하다. 게이트 밸브를 대상으로 한 전산모사 결과에서는 내부압력 증가에 따라 실험결과와 비교하면 배출량 영역차이가 존재하였다(Fig. 5). 삼차원으로 복잡한 구조특성을 가지는 게이트 밸브를 2차원의 계산격자로 적용한 것이 결과차이의 원인으로 판단된다. 누출

관계식의 기울기와 절편 모두 플랜지에 상대적으로 적은 누출량을 가지는 것으로 나타났다. 글로브밸브의 경우도 게이트밸브와 유사하게 내부압력 증가에 따라 전산모사($0.8310 \cdot 10^{-10} \sim 1.3810 \cdot 10^{-10}$ kg/sec)와 실험결과($0.4210 \cdot 10^{-10} \sim 1.9410 \cdot 10^{-10}$ kg/sec) 사이의 차이가 존재한다. 이러한 특성에 의하여 2차원과 3차원을 연관시키는 부분이 보강이 되어야 보다 정밀한 배출계수로의 접근이 가능할 것으로 판단된다. 개방식 라인의 경우도 실험결과 유사한 배출량과 배출경향을 나타냈다($0.1110 \cdot 10^{-10} \sim 0.4410 \cdot 10^{-10}$ kg/sec). Fig. 5 (d) 는 배출실험을 통하여 각 장치에서의 내부 압력변화에 따른 벤젠의 비산배출량을 나타낸 것이다.

6. 결론

본 연구에서는 화학공정에서 VOCs의 주요배출원인 비산배출원(게이트밸브, 글로브밸브, 플랜지, 개방식 라인)에서의 배출량을 파악하기 위하여 VOCs 배출실험 및 전산모사를 수행하였다. 배출실험결과에 의하면 플랜지, 게이트밸브, 글로브밸브, 개방식 라인 순으로 배출량이 높으며, 압력증가에 따른 배출계수의 증가율은 플랜지, 글로브밸브, 게이트밸브, 개방식라인 순으로 높은 경향을 나타냈다. 모든 경우에 있어서 비산배출량은 내부 유체의 압력이 증가할수록 배출계수들은 선형으로 증가하였다.

이러한 경향은 전산모사를 통한 해석결과에서도 일치하였다. 각 장치별로 장치내부 유체의 압력 변화에 따른 비산배출량의 특성은 장치에 따라 다른 배출계수의 영역을 나타냈다. 동일장치를 대상으로 한 다른 종류의 VOCs를 적용한 경우, 비산배출량의 차이가 존재하였는데 물질의 분자크기, 분자량, 형태에 따른 증기압의 차이가 이러한 결과를 나타낸 것으로 판단된다. 전산모사가 실험의 결과를 잘 반영하였으며, 이를 바탕으로 실험실 및 현장의 확장된 조업조건에서 VOCs 배출량을 예측할 수 있는 관계식을 확보할 수 있었다. 전산모사과정에서 VOCs의 누출을 예측하기 위하여 적용된 다공

성매질(porous media)의 인자는 장치의 종류에 관계없이 동일한 값을 가짐으로써 여러 공정에의 높은 확장성 및 적용가능성이 있을 것으로 예상된다. 본 연구 결과는 비산배출원의 종류와 유체 내부압력 등의 조건 변화에 따른 VOCs 배출계수와 배출모델을 확보하였으며, 유체 종류에 따른 배출량의 차이도 예측할 수 있었으며, 이는 화학공정에서의 VOCs의 비산배출을 효과적으로 저감 시킬 수 있는 기준자료가 될 것이다.

7. 참고문헌

1. Yi, J., "Chemical Engineering and Environment", *NICE*, 19, 546 (2001).
2. Chah, S. W., Moon, J. W, Park, H. S., Choi, K. H. and Yi, J., *NICE* 19, 564 (2001).
3. Chah, S. W., Moon, J. W, Park, H. S., Choi, K. H. and Yi, J., *NICE* 19, 569 (2001).
4. Han, W. J., Lee, Y. S. and Yoon, J. Y., *Korea Environment Institute, KEI*, wo-01 (1997).
5. Park, H. S., Chah, S. W., Choi, E., Kim, H. and Yi, J., *Atmospheric Environment* in press (2002).
6. Gordon, S., Mackay, D., Gorecki, T., Cherry, J. A. and Pawliszyn., *Journal of Contaminant Hydrology* 57, 223 (2002).
7. Haghghat, F. and Zhang, Y., *Building and Environment* 34, 377 (1999).
8. <http://prtr.nier.go.kr/>
9. Park, H., Ph. D. Dissertation, Seoul National University, Seoul (2002).
10. Park, Y., Moon, J., Ko, M., Chah, S., Lee, S., Park, H., Hong, S., Kim, H., and Yi J., *Hwahakgonghak*, accepted (2003)
11. *Fluent 4.4 User's Guide*, 2nd ed., Fluent Incorporated, 1 (1997).
12. Launder, B. E. and Spalding, D. B., *Lectures in Mathematical Models of Turbulence.*, Academic Press, London, England, (1972).
13. <http://www.epa.gov/ttn/chief/>