

**에너지·환경 諸般 시스템에 關한 수치 해석식 研究(I) :
LPG 확산, 호소 유동, 일차침전소, 국소 환기용 후두,
싸이클론 연소로, Dow 화학 반응로**

**A Numerical Study On Various Energy and Environmental
Systems(I) :**

**LPG dispersion, Lake flow, Primary clarifier, Hood ventilation,
Cyclone combustor, Dow chlorination reactor.**

장 동순¹, 김 경미², 이 안주³, 박 병수⁴, 김 복순⁵

This paper describes several computational results 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, buoyancy-driven flow in a lake, primary clarifier for water and waste water treatment, hood ventilation in workplace, cyclone combustor 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 RNG k-ε models. A nonequilibrium turbulent reaction model is developed for the application of the chlorination process in the Dow thermal 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 operating condition of various environmental engineering system of interest.

1. 서론

최근 컴퓨터 성능의 현격한 성장과 난류 반응에 대한 현상학적 모델의 발전은 산업 전반에 나타나는 열 유동 및 화학 반응문제를 해결하는데 있어 수학적 모델과 컴퓨터 묘사의 역할을 크게 증대시켰다[1]. 본 논문은 in-house 컴퓨터 프로그램 개발에 의한 환경분야 시스템 해석에 관한 다양한 응용 예를 제시함으로써 수치 해석적 방법이 이 분야의 概念 및 구체 設計의 중요한 도구로 사용될 수 있음을 보이고자 함이다.

이는 특히 국내 환경 분야가 외국기술의 의존도가 높고 전산 유체 공학의 응용이 비교적 저조한 사정을 감안할 때 매우 필요한 일로 생각된다.

-
1. 충남대학교 환경공학과 305-764, 대전광역시 유성구 중동 220 Tel : (042) 823-8361
 2. 충남대학교 환경공학과 대학원 305-764, 대전광역시 유성구 중동 220, Tel: (042) 821-6677
 3. 한국 전력 주식회사, 환경기술처, 서울특별시 강남구 삼성동 87번지 Tel : (02) 510-5091
 4. 대우 고등 기술 연구원, 전력 에너지 연구실, 경기도 용인군 의사면 교안리 633-2 Tel : (0335) 30-7493
 5. LG 기계, 환경 에너지사업부 개발팀, 경기도 군포시 당정동 200번지, Tel : (0313) 59 1201-2

본 논문에 포함된 주제는 대부분 충남 대학교 환경공학과 전산열유체 실험실에서 수행했던 연구 과제로서 오염 물질의 대기 확산, 수체 유동, 후드에 의한 局所(국소) 환기, 싸이클론 연소로 그리고 화학 반응로에 대한 결과를 나타내었다.

본 연구에서 고려한 첫 번째 대상은 난류 대기경계층에서 고상 또는 기상 오염 물질의 短期 대기확산으로 이는 대기오염 물질의 확산이나 화생방 등의 관점에서 매우 중요한 사항이다. 이러한 난류경계층내에서 스칼라 물질의 확산에 대한 연구는 Gaussian모델이 광범위하게 사용되고 있다. 그러나 Gaussian모델은 'homogeneous turbulence'의 가정 외에도 분산이 장기간에 걸쳐 이루어진 경우나 비산 분진의 입경이 $10 \mu\text{m}$ 이하로 작은 경우에 적합하다. 그러나 짧은 시간동안에 분산이 이루어지고 지형지물이 있는 난류경계층에 대한 적용에는 여러 제약이 따른다[2]. 그러므로 단기간의 대기경계층에서의 오염물질의 확산 거동 파악을 위해서는 수치해석적 방법이 상호보완의 도구로서 필요하다. 본 연구에서는 이차원 수직평면 Fig. 1에서 오염물질의 확산 거동을 분자량, 온도 등의 중요 변수에 대해 고려하였다. 계산영역은 지상 400m, 풍향 하류 방향으로 200m 를 고려하였다. 지표면의 전단력의 영향이 소멸되어 지균풍이 나타나는 고도는 지상 1000m 정도이나 본 연구에서는 격자수 증가에 따른 계산시간의 증가 등을 고려하여 고도를 400m 로 한정하였다.

두 번째 문제는 밀폐된 지하공간(Fig. 2) 내에서 가연성 연료인 LNG 와 LPG 등의 확산 거동에 대한 것이다. 이 문제는 도시 가스로 사용되고 있는 LPG와 LNG의 누출 사고에 따른 산업 안전재해가 빈번한 시점에서 도시가스 등의 물리적 특성에 따른

폭발 농도영역과 같은 확산 특성을 규명하는 점에서 의미가 있다. 특히 대표적인 예가 1995년 4월 28일 대구 달서구 상인동 지하철 공사장 내에서 LPG 폭발과 1994년 12월 서울시 아현동 LNG 폭발 사건이다 [3,4]. 그러므로 연료의 비중이나 온도에 따른 가연성 물질의 확산 특성에 따른 폭발 농도영역에 대한 정량적 해석능력은 산업안전재해 방지 관점에서 매우 중요하다. Fig. 2는 대구 지하철 공사장에 대한 수직 2차원 계산영역을 나타낸 것이다. 참고로 LNG 와 LPG의 주성분인 메탄(CH_4) 과 프로판(C_3H_8)을 포함한 주요 화학물질의 폭발 부피 % 를 아래에 나타내었다.

Table1. Flammability limits of various gaseous fuel

Chemical Component	Lower limit (%)	Upper limit (%)	Stoichiometric volume % of fuel in air
Methane (CH_4)	5.0	15.0	9.5
Heptane (C_7H_{16})	1.0	6.0	1.9
Hydrogen (H_2)	4.0	74.2	29.2
Propane (C_3H_8)	2.0	11.4	4.0

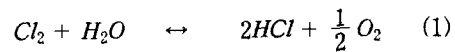
세 번째 문제는 호소와 같은 수역에 밀도 (또는 온도)가 다른 냉각수, 공장의 폐수, 가정의 하수 등이 유입되면 유입 유체와 수용수역 유체의 온도차로 인해 밀도류가 형성되며 이는 호소의 혼합과 순환 등 유동 특성에 변화를 야기시킨다. 따라서 호소의 전도나 성층화가 예상되며 오염물질의 확산이나 용존산소의 농도 변화, 조류 발생 등 생태계 전반에 영향을 미치게 된다. 본 주제에서는 유입수와 수용수역과의 온도(밀도)差, 유입수의 유량, 호소의 기하학적 형상 등에 따른 유동 특성을 규명하였다[5]. Fig. 3에 본 연구에서 고려

한 대표적인 소형 호소의 2차원 단면을 나타내었다.

네 번째 主題는 수치리 장치에서 발생하는 수체의 유동 문제이다. 폐수나 용수처리 공정비용의 30%정도를 차지하는 일차 침전조의 유동 특성에 따른 부유 고형물질(SS, Suspended Solids)의 침전효율이나 오염물질의 배출 특성인 FTC(Flow-Through-Curve)를 파악하였다[3,6]. 이러한 일차침전조의 유동의 기본적인 특성은 유동이 큰 渦(와)가 없는 'plug-flow' 형태를 유지하여 중력에 의해 일단 침전된 오염물질이 재부유 하지 않도록 해야 한다. 이를 위해 일차 침전조 입구 쪽에 차폐판을 設置하여 유동이 폐쇄 회로나 재순환이 생기지 않도록 하는 것이 균일 유동장 형성을 위한 방법으로 사용된다. 구체적으로 입구 쪽에 차폐판의 위치와 형상을 조절함으로써 압력이 높고 바닥벽의 전단력에 의해 재순환이 야기될 가능성이 높은 하류 바닥 쪽으로 유량을 증가시키는 것이다. 본 연구에서는 장방형 일차침전조 SS 침전효율 및 SS의 배출특성 규명을 위해 Fig. 4와 같은 수직 2차원 침전조에 대한 수치모사를 시도하였다.

다섯 번째로 고려한 대상은 사이클론 연소로이다. 사이클론 연소로의 유동 특성은 강한 접선 방향의 선회유동에 의해 축방향으로 축방향 主流動이 3회 왕복 운동을 하여 체류 시간의 극대화와 강력한 난류 混摻을 달성한다는 것이다. 이 때 접선 방향의 속도는 60~140 m/s 정도가 되어야 하는 것으로 보고되고 있다[7]. 이러한 유동 특성에 의해 사이클론 연소로는 같은 연소 용량의 다른 연소로에 비해 1/5 정도의 크기로 소형화가 가능하며 기름을 사용하는 보일러를 장치 보수에 의해 손쉽게 석탄 보일러로 전환 할 수 있다는 데서 높

이 評價된다(Fig.5). 이러한 연소기술은 ICGC (Integrated Coal Gasification Cycle) 나 유동층 연소 등과 함께 차세대 환경 오염을 저감시킬 수 있는 유망한 직접연소 기술 중의 하나로 평가되고 있다. 또한 싸이클론 연소방법은 석탄이나 폐기물 연료의 경우 고품입자를 원심력에 의해 벽쪽으로 이동시키며 회분을 용융 슬래그로 처리하는 슬래깅 연소로로 이용할 수 있다. 고온, 긴 체류 시간, 강한 난류혼합의 특징을 가지는 싸이클론 연소로는 PCB (polychlorinated biphenyl) 와 같이 잉여공기를 사용하여 처리하기에는 문제가 많은 毒性 할로겐 함유물질의 소각처리에 적합하다. 독성 할로겐 化合物 소각 처리에 잉여공기를 사용할 수 없는 이유는 PCB와 같은 CHCs(Chlorinated Hydrocarbons)의 소각 처리 시에는 최종 반응물로 HCl, CO₂, H₂O가 발생한다. 이 중 HCl은 온도가 낮은 후류영역에서 잉여 공기의 존재에 의해 아래 Deacon Reaction에 최종 생성물 중의 하나인 HCl이 Cl₂ 로 평형 상태가 이전한다는 점이다. 이 때 발생하는 Cl₂는 부식성이 강하고 세정제거가 어려우며 비산 분진을 촉매로 하여 다이옥신을 생성하는 것으로 알려져 있다. 그러므로 대기오염 제어관점에서 Cl₂는 반응로내에서 생성되어서는 안되는 물질이다.



본 연구에서는 싸이클론 연소로의 3회 반복 유동 특성을 수치 해석적으로 재현하였다.

여섯 번째 문제는 후드를 이용한 局所배기 문제이다. 분진이나 미립자 형태의 액적을 흡 후드를 이용하여 제거하는데 기본적인 원칙은 가능한 한 고농도로 농축된 오염공기를 처리하는 것이다. 전기 집진기를 제외한 대부분의 제진 장치의 처리

비용이 분진농도에 비례하지 않고 공기량에 따라 좌우되기 때문이다. 작업장에서 발생한 분진을 제거하는 데에 고농도의 농축이 이루어지지 않으면 후드나 덕트에서 제어속도(control velocity)이상으로 공기가 흡입됨으로써 동력소모가 증가하게 된다. 후드에 의한 분진 제거를 위한 제어속도는 후드의 크기와 형상, 공기 속도 그리고 오염 물질의 성질 등에 관계되며 많은 경험식이 제기되었다. 경험식에 대한 예 중에서 포집속도(capture velocity)는 덕트 입구에서 덕트 직경만큼 떨어진 곳에 있는 분진이 흡입되기 위한 속도는 덕트 입구의 유속에 10% 가 되어야 하며 덕트 입구에서 직경에 2배만큼 떨어진 거리에서는 이 속도의 1% 가 되어야 하는 것으로 알려져 있다. 한편 Dalle Valle는 덕트에서 떨어진 거리와 속도간에 아래와 같은 경험식을 제시하였다[8].

$$\frac{y_r}{100 - y_x} = \frac{0.1A}{x^2} \quad (2)$$

이식에서 x 는 덕트 중심에서 떨어진 거리를 나타내며 A 는 덕트의 개구부 면적(ft^2) 그리고 y_x 는 x 위치에서 덕트 속도에 대한 %를 나타낸다. 위에서 제시한 여러 경험적인 덕트 설계식에서도 알 수 있듯이 덕트 설계에 관한 신뢰성 있는 자료 확보를 위해서는 보다 一般的인 연구 방법이 필요함을 알 수 있다. Fig. 6에 본 연구에서 고려한 덕트형 후드에 대한 도식도를 나타내었다.

일곱 번째로 고려한 시스템은 Dow社의 'thermal chlorination reactor'에 대한 난류 반응 프로그램의 개발에 관한 것이다. LNG나 석탄 연소의 경우에는 화학반응의 속도가 난류 에디의 붕괴에 의한 혼합 속도에 비해 매우 빠르므로 화학반응 속도효과는 난류모델에서 보통 고려되지

않는다.

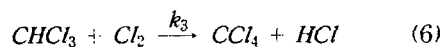
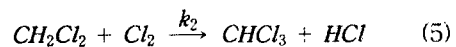
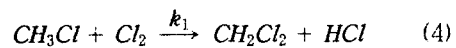
그러나 일반적으로 화학 반응속도와 난류 혼합 속도가 비슷한 Damkohler 수가 '1'의 크기의 경우에는 난류 전체 반응속도는 난류 혼합속도와 화학 반응속도를 모두 고려하여야 한다. 그리고 이와 같이 일련의 현상이 연달아 일어나는 경우 전체 반응속도는 아래와 같이 각각의 속도의 조화 평균의 형태의 경험식으로 주어짐이 일반적이다.

난류 반응속도

$$\frac{1}{\text{난류혼합속도}} + \frac{1}{\text{화학반응속도}} \quad (3)$$

이식에서 보듯이 화학 반응속도가 의미를 가지는 경우는 화학 반응의 속도에 따른 특성시간이 난류에서의 특성시간과 크기가 비슷한 경우이다. 구체적인 예를 들면 NO_x 와 같은 오염 물질이 생성되는 경우와 같이 반응물질의 농도가 매우 낮아 반응 특성시간이 길어진 경우나, 산화제와 연료의 혼합속도가 매우 빨라 연소 반응 속도가 혼합속도에 못 미치는 경우이다. 이 경우 화염이 노즐 팁에서 'lift-off'하거나 'blow-off' 하는 현상이 발생한다.

본 연구에서 다루고자 하는 반응로의 경우도 화학 반응속도가 난류 혼합속도와 비슷하여 화학 반응속도를 고려해야 된다. $CH_3Cl - CH_2Cl_2 - Cl_2$ 혼합기체에 대한 반응로 도식도를 Fig.6에 나타내었다. 이 반응은 아래와 같이 CH_3Cl , CH_2Cl_2 , $CHCl_3$ 에 대한 3개의 평행한 2차 반응식으로 주어진다.



식에 대한 화학 반응속도는 아래와 같이

주어진다.

$$-\bar{w}_i = \rho^2 k_i Y_i Y_{Cl_i} \quad i=1, 2, 3 \quad (7)$$

위 식에서 Y_i 는 CH_3Cl , CH_2Cl_2 , $CHCl_3$ 등의 화학 반응물을 각각 나타낸다.

난류에서 식(5)에 대한 평균 반응속도를 구하기 위해서는 아래와 같은 Favre 평균식에 나타나는 난류 상관항에 대한 모델 정립이 요구된다. 식(6)에서 k_i 는 각각의 반응식에 대한 속도상수를 나타낸다.

$$\begin{aligned} -\bar{w}_i &= \bar{\rho} \bar{k}_i (\bar{\rho} \bar{Y}_i \bar{Y}_{Cl_i} + \bar{\rho} \bar{Y}_i'' \bar{Y}_{Cl_i}'') \\ &+ \overline{\rho(\rho k_i) Y_{Cl_i} Y_i} + \overline{\rho(\rho k_i) Y_i'' Y_{Cl_i}''} \\ &+ \overline{\rho(\rho k_i) Y_i'' Y_{Cl_i}''} \end{aligned} \quad (8)$$

본 연구에서는 위에 나타난 화학 반응식의 특성에 의해 난류에서의 밀도 변동을 무시했으며 반응온도와 활성화 에너지의 크기에 대한 상관관계를 고려하여 화학 반응속도 또한 평균온도에 의해서만 영향을 받는다고 가정하였다. 이 경우 난류의 영향은 아래와 같은 화학종의 난류 변동에만 의존한다고 간략화 하였다.

$$-\bar{w}_i = \rho^2 \bar{k}_i (\bar{Y}_i \bar{Y}_{Cl_i} + \bar{Y}_i'' \bar{Y}_{Cl_i}'') \quad (9)$$

그러나 농도 변동에 따른 난류 변동 상관항 $\overline{Y_i'' Y_{Cl_i}''}$ 의 현상학적 모델 또한 'moment closure'를 위한 긴 수학적 계산 절차와 구체적인 화학반응 속도에 대한 자료가 요구된다[9].

위에서 언급한 제반 에너지·환경 시스템에 대해 본 논문에서는 전산 유체역학적인 수치모사를 통해 다양한 문제의 설계 및 운전조건 설정에 효율적으로 대처할 수 있었다. 특히 컴퓨터 용량과 속도가 요구되는 3차원 난류 반응 문제나 미분탄 연소로와 같은 多相에 熱 복사가 關한 연소 문제와 같이 큰 메모리를 요구하는 문제를 제외하고는 대부분의 경우가 486 또는 586 級의 PC를 통해 손쉽게 문제 해결이

가능하다. 이런 점에서 본 논문에서 제시한 수치모사 방법은 산업 현장엔지니어가 공히 이용할 수 있는 高度 設計의 도구로서 가능성을 보였다 할 수 있다.

2. 지배 방정식과 수학적 모델

본 연구에서 사용한 기상 지배 방정식은 단위질량당 일반 종속변수 ϕ 에 대해 아래와 같은 표준형으로 나타내어진다[10].

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{u}\phi) = \nabla(\Gamma_\phi\nabla\phi) + S_\phi \quad (10)$$

식 (10)은 검사체적에 기초한 유한 차분 방법에 의해 형식적으로 선형인 이산화 방정식을 유도할 수 있으며 이 이산화 방정식의 해는 line-by-line TDMA와 반복 계산에 의해 구할 수 있다. 유동항의 이산화를 위해 power-law scheme을 사용했으며 운동량 방정식에서 압력과 속도의 연계 문제는 SIMPLE (Semi-Implicit Method Pressure-Linked Equation)의 개량형의 SIMPLEC [11]나 SIMPLER [10]를 각각 사용했다. 한편 Reynolds 전단력의 모델을 위해서는 표준 $k-\epsilon$ 모델이나 필요에 따라서 RNG $k-\epsilon$ 모델[12]을 사용하였다. 화학 반응로에 대한 난류 반응 모델은 앞에서 언급한 바와 같이 'moment closure' 방법에 의한 비평형 난류 반응 모델을 사용하였다.

3. 응용예

본 절에서는 에너지·환경문제에 관련된 7가지의 적용례를 나타내었다.

3.1 오염물질 대기 확산

Fig. 1에는 오염물질에 대기경계층에 확산되는 양상을 나타내는 도식도로서 주변 공기보다 온도가 높고 속도가 큰 固-氣相 오염 물질의 短期 확산 거동을 파악하고자 함이다. Fig. 8에는 오염물질의 분자량에

다른 LNG, LPG, NH₃ 와 CH₂Cl₂ 인 경우에 온도에 따른 확산 거동을 나타내었으며 오염물질의 확산 양상은 오염물질의 초기 속도, 온도, 분자량에 크게 영향을 받았다. 그러나 본 연구에서와 같이 오염물질의 초기속도가 1m/s 이상이고 단기 대기확산의 경우 氣相의 안정조건 (stability criteria) 즉 고도에 따른 온도분포 등에는 거의 영향을 받지 않았다. 공기의 속도가 5m/s 이상으로 큰 경우에는 부력과 관성의 상대적인 효과를 나타내는 Richardson 수 ($= \frac{\overline{Cr}}{Re^2}$)의 감소로 온도나 분자량 차이에 의한 부력 영향은 현저히 감소되었다.

3.2 LPG 밀폐공간 확산

Fig. 2는 밀폐공간에서 LPG, LNG, 공기가 유출될 경우에 확산되는 양상을 수치 해석하기 위한 도식도 이다. Fig. 9의 (a)에서는 시간에 따른 LPG의 확산 농도를 나타내는 것으로서 시간에 따라 공기보다 무거운 LPG가 바닥으로 침강하면서 확산되는 양상을 잘 나타내 주고 있다. 특히 LPG의 폭발 영역인 부피 농도 2.5~9.5 % 영역이 시간에 따라 급격히 변하는 것으로 나타났다. 이것은 LPG 누출에 따른 확산시에 폭발이 일어나기 위해서는 적절한 시간에 점화가 이루어져야 함을 의미한다. 이와 유사한 예로 걸프戰에 사용된 FAE (Fel-Air Explosive)를 들 수 있다. FAE는 연료를 넓은 영역에 순간적으로 분산시켜 지뢰 지대를 제거하는 무기로서 분산이 이루어진 후 점화의 시기가 FAE의 성능에 중요하다고 보고되고 있다. Fig. 9의 (b)에는 주변공기보다 밀도가 큰 LPG, 밀도가 작은 LNG 그리고 밀도가 같은 유체인 air가 확산되는 특성을 잘 나타내어 주고 있다.

3.3 호소유동

Fig. 3에는 2 차원 수직 호소에서 유입 유체와 수용유역 유체의 온도차이와 유입 유체의 속도에 따른 유동특성을 파악하기 위한 도식도를 나타낸다. Fig. 10의 (a)에는 유입류와 수용유역의 온도차이가 없는 경우 유입류의 속도변화에 따른 유동 양상을 나타내었다. 온도나 밀도차가 없는 경우에 유동장은 쥘의 단순 확산하는 양상을 나타내고 있다. Fig. 10의 (b)에는 유입류의 밀도가 수용영역의 밀도보다 높은 경우와 낮은 경우에 대한 결과를 각각 나타내었다. 유입류의 밀도가 큰 경우에는 일정 거리를 전진한 후 수직으로 침강하는 양상을 뚜렷이 보이고 있으나 밀도가 작은 경우에는 유동층과 영역 하부에는 수직 방향 유동이 전혀 일어나지 않고 있다.

3.4 일차침전조

일차침전조의 유동은 SS의 효율적인 침강이 이루어지도록 short-circuiting(flow recirculation)이 배제되어야 한다. 이 목적을 위해서는 침전조의 종횡비, baffle의 형상 및 위치, overflow rate 등이 부유물질의 밀도, 직경 및 입도 분포 등과 함께 중요한 변수이다. Fig. 4는 본 연구에서 사용한 캐나다 온타리오주의 장방형 일차침전조의 도식도이며 Fig. 11은 일차침전조 입구에 차폐판이 없는 경우의 short-circuiting 을 나타내는 유동장 형태와 속도에 대한 실험치와의 비교를 각각 나타내었다. 이러한 수치해석의 결과로서 일차침전조의 기하학적 형상, 운전 용량 그리고 SS의 크기 및 입도 분포에 따른 조직적인 자료 도출이 가능하였다[15].

3.5 싸이클론 연소로

싸이클론 연소로는 Fig. 5에 나타낸 바와 같이 강력한 선회유동에 의해 연소로 내의 유동이 로벽의 접선 방향으로 유입되

며 로벽 원주를 따라 나선형으로 진행하다가 반사되어 반경이 축소된 형태의 나선형 흐름이 형성, 다시 반복된다[7]. 이러한 싸이클론 연소로는 연료의 체류시간이 보통 10배 이상으로 길며, 난류 혼합이 강력하여 같은 용량의 연소기에 1/5 정도로 소형화할 수 있는 장점이 있다. Fig. 12에는 이와 같은 싸이클론 연소로 내의 유동을 수치 해석적으로 설명한 것으로서 접선방향 속도 150m/s 에서는 문헌에 나타난 조건과 일치하는 속도 영역으로 싸이클론 내의 3회 반복 왕복 유동의 결과가 가시적으로 나타났다. 그러나 접선 방향 속도 50 m/s 로 낮은 영역에서는 위에서 언급한 3회 반복 유동이 나타나지 않았다[13]. 이러한 싸이클론 연소로는 연소나 소각에 필요한 3'T' 즉, Turbulence, Residence Time, Temperature 를 잘 만족할 수 있어 난연성 폐기물 소각이나 이차 연소로에 적용 가능성이 높은 것으로 주목받고 있다.

3.6 환기용 후드

Fig. 6에는 축대칭 형태를 지닌 환기용 후드를 나타내는 것으로서 후드의 설계 및 운전 조건은 좁은 영역에서 성립하는 경험식에 의하여 주어진다. 본 연구에서 수행한 수치 해석 결과를 Fig. 13에 나타내었다. Fig. 13의 (a)는 문헌에 나타난 실험결과와 본 계산값과의 비교치이며 (b)는 대표적인 속도장을 보여준다[14].

3.7 화학 반응로

Fig. 7은 Dow Chemical Co.(LA division)의 chlorination 반응로의 도식도로서 CH₃Cl과 CH₂Cl₂를 원료로 하고 Cl₂를 산화제로 하여 CH₂Cl₂를 생성하는 공정이다. 그러나 'hair spray'의 원료인 CH₂Cl₂가 오존층 파괴 등의 理由로 美國에서 90년을 기해 생산 금지되었다. 이에 반응로에 대

한 근본적인 구조 개조 없이 단지 운전 조건 등의 변경에 의해 CH₂Cl₂의 생산을 줄이고 CH₃Cl의 생산을 늘리고자 하는 시도가 수행되었다. 그러나 生成物중에 CH₂Cl₂의 분율을 늘이기 위해서는 산화제인 Cl₂의 투입이 증가되어야 한다. 이는 반응증가에 따른 폭발위험과 미반응의 경우에는 대표적인 독성 물질인 Cl₂가스 배출에 따른 심각한 부식이나 공해 문제가 예상된다. 이에 신뢰성 있는 설계용 컴퓨터 프로그램 개발이 선행되어야 하며 본 연구에서는 비평형 난류 반응 모델의 개발과 실험치와 비교가 이루어졌다 [16].

4. 결론

Patankar의 SIMPLE 알고리즘을 근간으로 한 컴퓨터 프로그램 개발에 의해 에너지·환경에 관련된 7가지 시스템에 대한 적용 예를 나타내었다. 각 문제에 대한 중요한 물리적 관점에 대한 토의와 함께 수치해석 결과를 나타내었다. 이와 같은 결과를 토대로 586 PC 와 대학원 석사과정의 전산 열유동 해석에 의해 에너지·환경에 관련된 제반 문제에 대한 개념설계의 가능성을 보였다.

5. 참고 문헌

[1] Heppenheimer, T.A., "Aviation Aero-dynamic Duo", High Technology p. 62. (1980).
 [2] 나해령, 이은주, 장동순, 서영태, "固-氣相 毒性 오염 물질 短期 대기 확산 고도 실험 및 수치해석 : 화학종, 온도, 상대속도", 산업 안전 공학회 Vol.10, No. 3, p. 68~80 (1995).
 [3] 이은주, "열유체 수치 해석에 의한 환경·에너지 시스템 고도 설계 연구 : 전기 싸이클론, 일차침전조, LPG/LNG 확산", 충남대학교 석사학위논문

- (1997. 2).
- [4] 권오현, 김팔규, 이승준, 장동순, 이은주, 박병수, "LPG 유동과 확산에 관한 고도 실험 및 수치 해석적 연구", 법무법인 화백에 제출한 및 충남대학 보고서 (1995.9).
- [5] 박병수, 김경미, 송우영, 장동순, 권오현 "水體 熱流動 數值解析 프로그램 개발 및 응용 : 湖昭, 일차 침전조", 한국 수자원 학회지 제29권 6호 p. 141~154(1996).
- [6] 이은주, 박병수, 박지영, 장동순, 이상일 "일차 침전조와 설계를 위한 수치 해석적 연구 : SS와 FTC", 대한환경 공학회지 제18권 11호 (1996).
- [7] Syred, N., Claypole, T.C. and S.A. MacGregor, "Ch.5 Cyclone Combustor", in Principle of Combustion Engineering for Boiler (1987).
- [8] Wark & Warner, "Air Pollution", 2nd ed., p.175 (1981).
- [9] Acharya, S., D.S. Jang, D.H. West and L.A. Hebert, "A Moment Closure Method for Modeling a Multistep Chlorination Reaction", AIChE 1991 Spring National Meeting, Houston, Texas, April 9 (1991).
- [10] Patankar, S.V. "Numerical Heat Transfer and Fluid Flows", Hemisphere, Washington D.C. (1980).
- [11] Van Doormaal, J.P. and G.D. Raithby, "Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows", "Numerical Heat Transfer", Vol. 7, p.147~163 (1984).
- [12] Choudhury, D., S.E. Kim, W.S. Fiannery, "Calculation of Turbulent Separated Flows using a Renormalization Group based $k - \epsilon$ Turbulence Model", TN-044, ASME Fluids Engineering Conference, March 2 (1993).
- [13] 나혜령, "열유체 수치해석에 의한 환경·에너지 시스템 고도 설계 연구 : 毒性 물질 대기 확산, 싸이클론 연소로, 싸이클론형 전기집진기", 충남대학교 석사학위논문 (1996.2).
- [14] 김복순, "열유체 수치해석에 의한 환경·에너지 시스템 고도 설계 연구 : 폐유 소각로, 열저장조, 원통형 후드", 충남대학교 석사학위논문 (1996.2).
- [15] 박병수, "열유체 수치해석에 의한 환경·에너지 시스템 고도 설계 연구 : 일차 침전조내 SS 농도, 싸이클론 후 연소로, 슬래깅 연소로", 충남대학교 석사학위논문 (1996.2).
- [16] Jang D.S & S.Acharya., "Parametric calculation of the thermal chlorination process in the Louisiana reactor, a report submitted to the Dow Chemical Co. Plaquemine", LA. Dept. of Mech. Engr. LSU(1988).

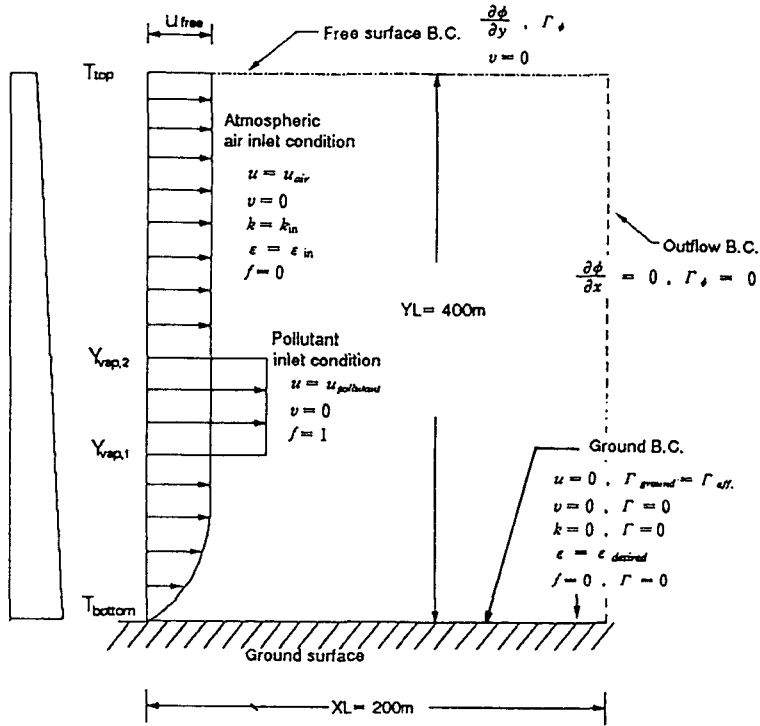


Fig. 1 Schematic diagram of pollutant dispersion and boundary condition in an open atmosphere

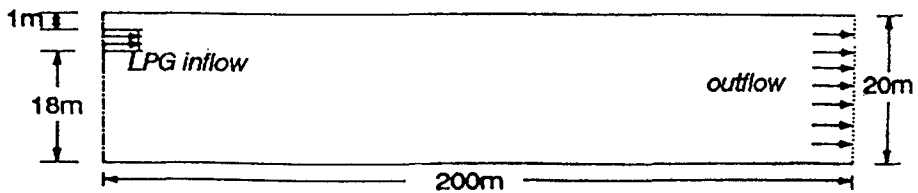


Fig. 2 Schematic diagram of the LPG dispersion in a subway construction area

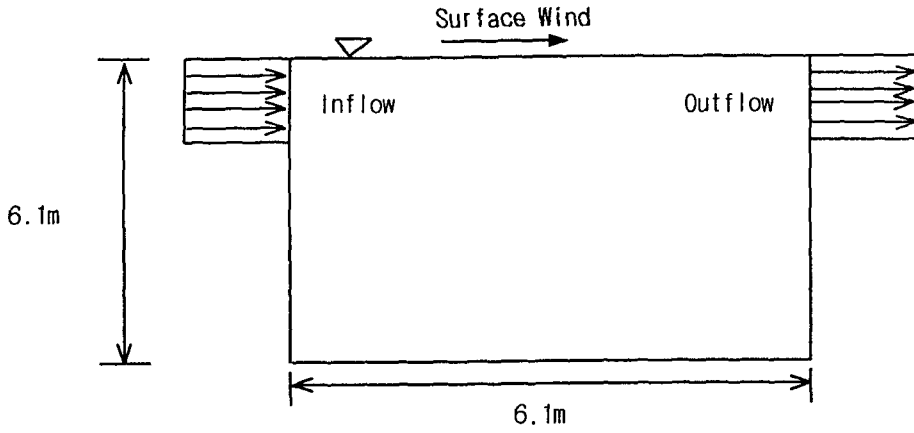


Fig. 3 Schematic diagram of cooling water discharge in a lake

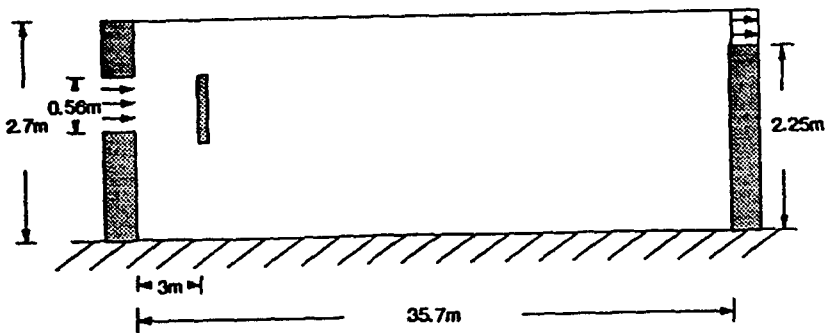


Fig. 4 Schematic diagram and dimension of primary clarifier

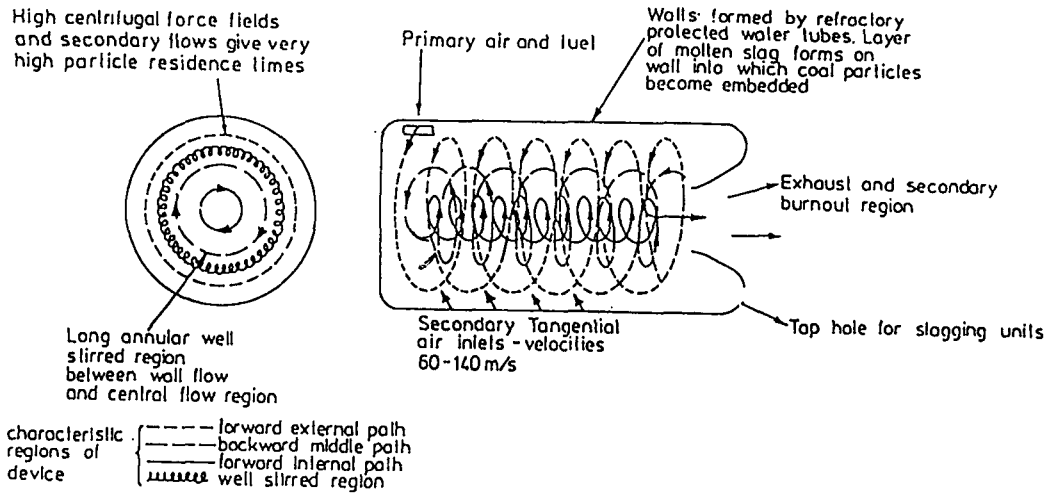


Fig. 5 Typical flow characteristics in a cyclone combustor[7]

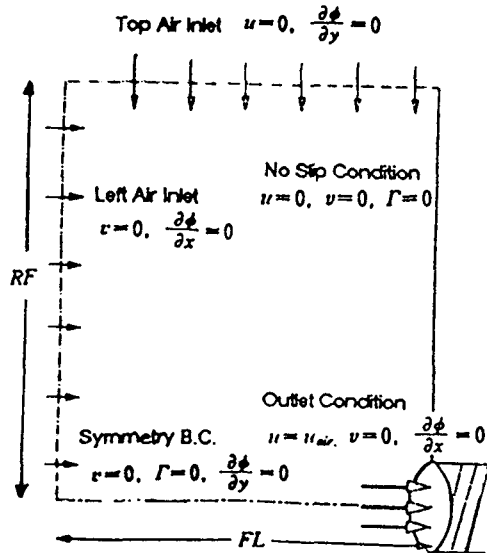


Fig. 6 Computational domain and boundary condition for workspace ventilation

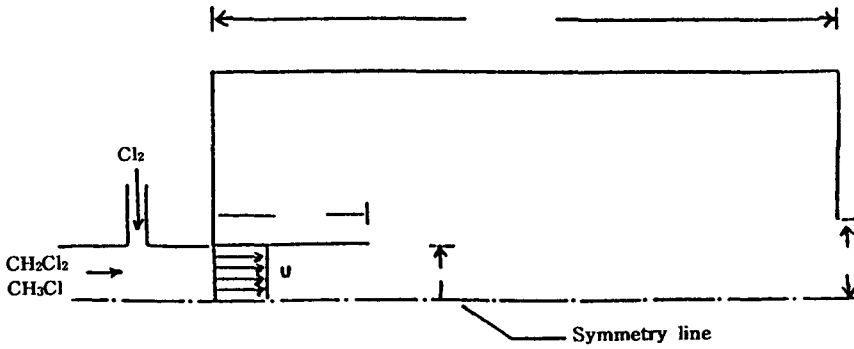


Fig. 7 Schematic of Dow chlorination reactor (scale is not shown due to company confidential)

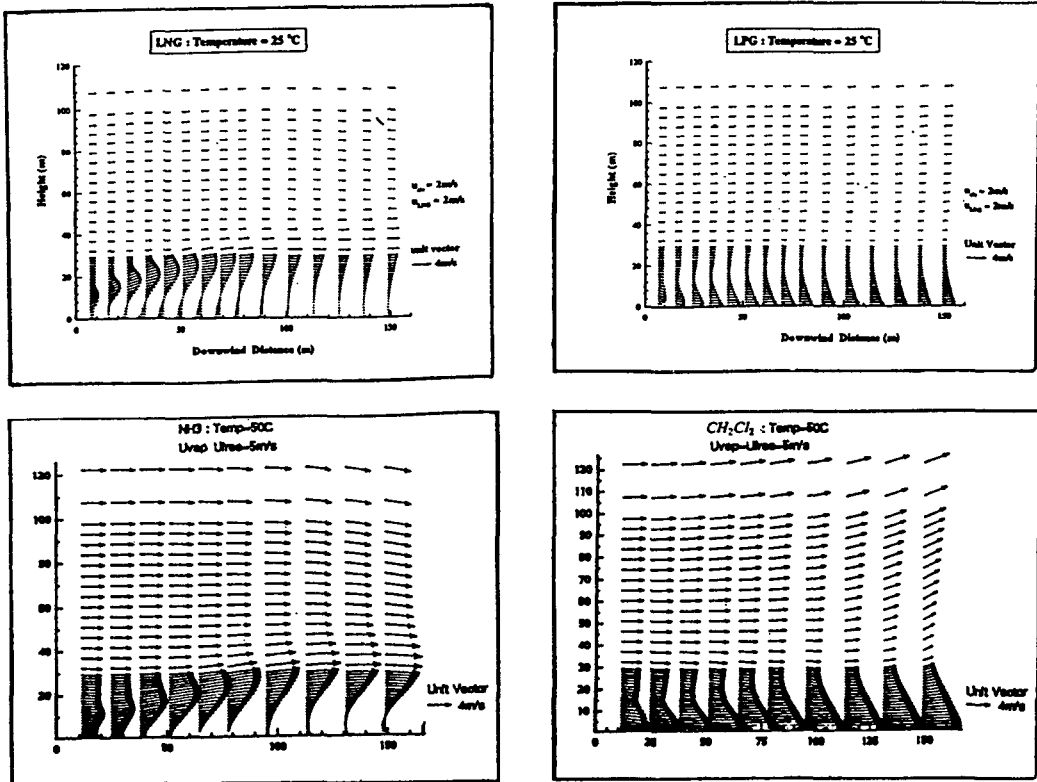


Fig. 8 Velocity vector plots for the case of LNG, LPG, NH₃ and CH₂Cl₂

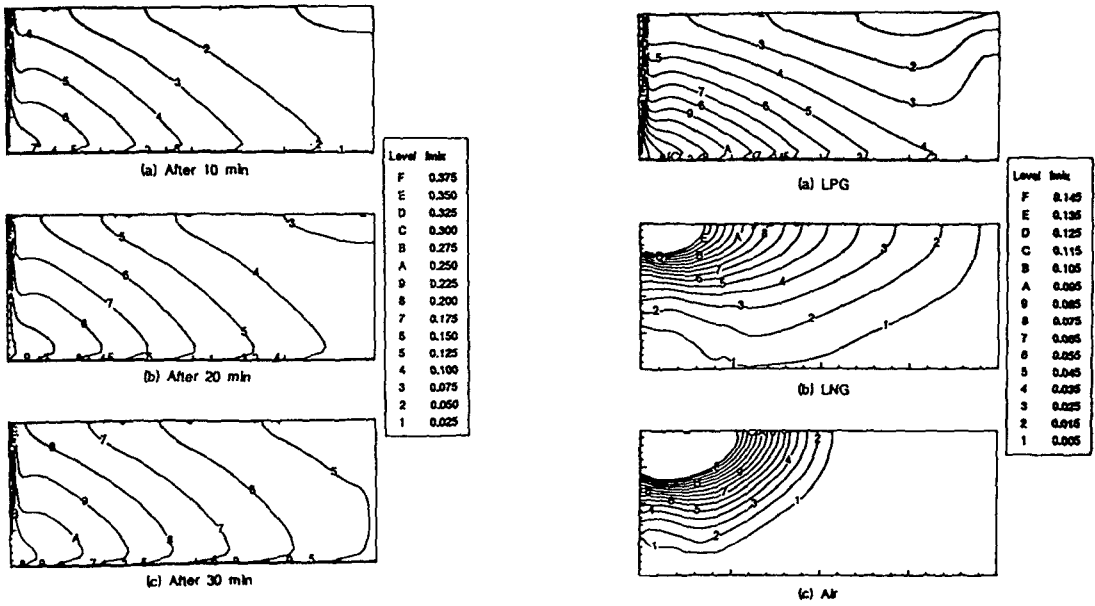


Fig. 9 (a) Comparison of concentration distribution of LPG as a function of time for $U_{in} = 0.5m/s$

(b) Comparison of concentration distribution of LPG, LNG and Air with $U_{in} = 0.5m/s$ after 5min

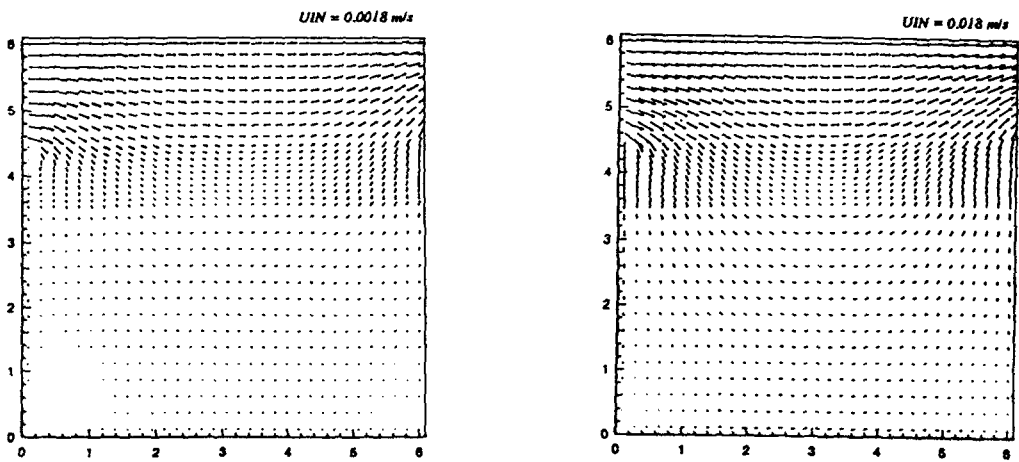


Fig. 10 (a) Velocity vector plot according to inlet velocity without buoyancy effect

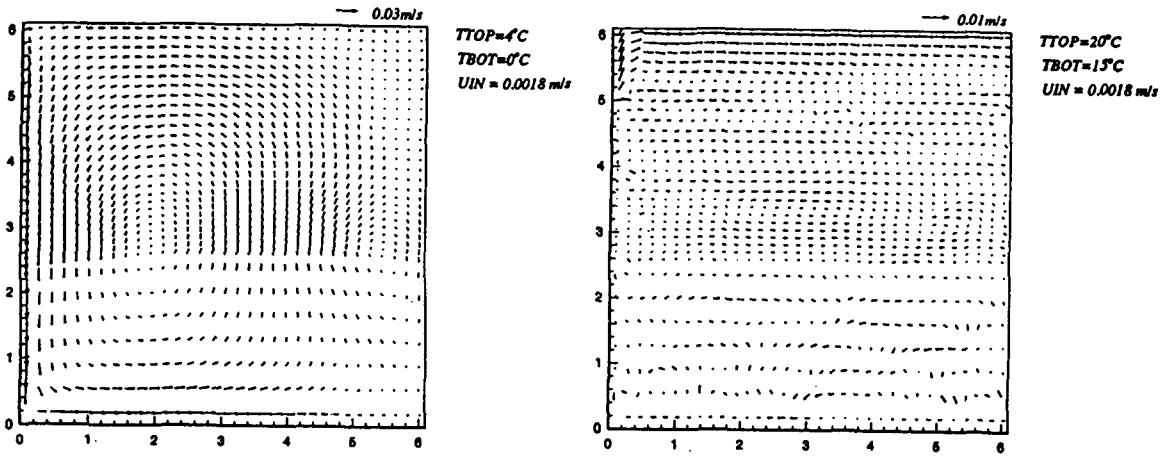


Fig. 10 (b) Velocity vector plot for higher density inlet flow and lower density inlet flow than that of the lake

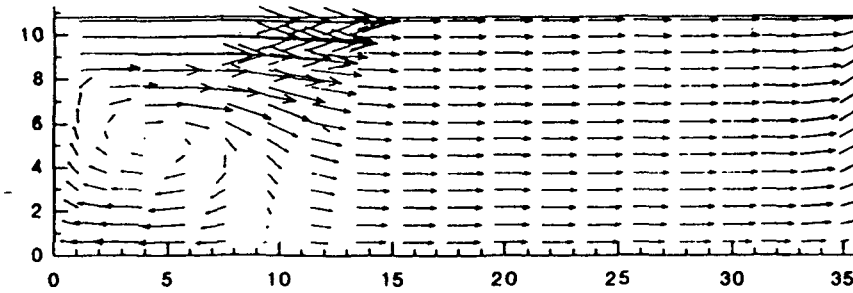


Fig. 11 (a) Velocity vector plot of clarifier without a baffle

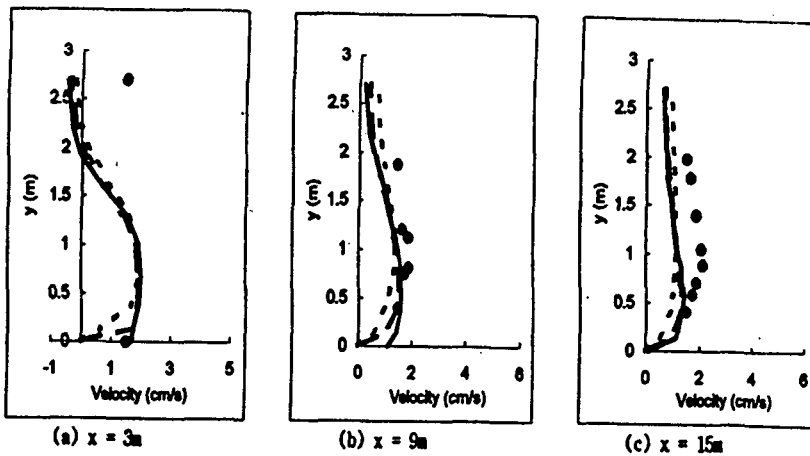


Fig. 11 (b) Comparison between axial velocity prediction and experiment at a few axial locations [15]

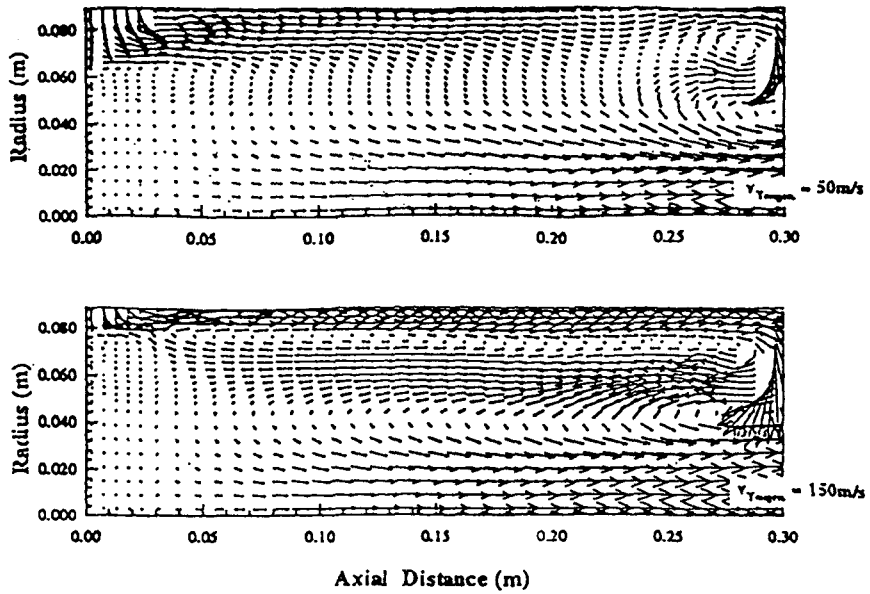


Fig. 12 Two flow patterns occurring in a hypothetical combustor for $v_{\theta} = 50$ and 150 m/s [13]

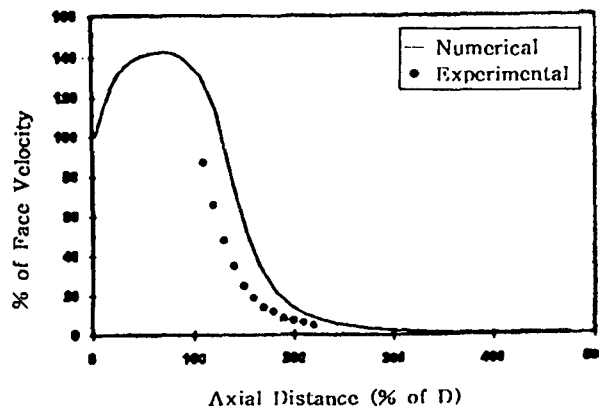


Fig. 13 (a) Velocity profile compared to experimental results [14]

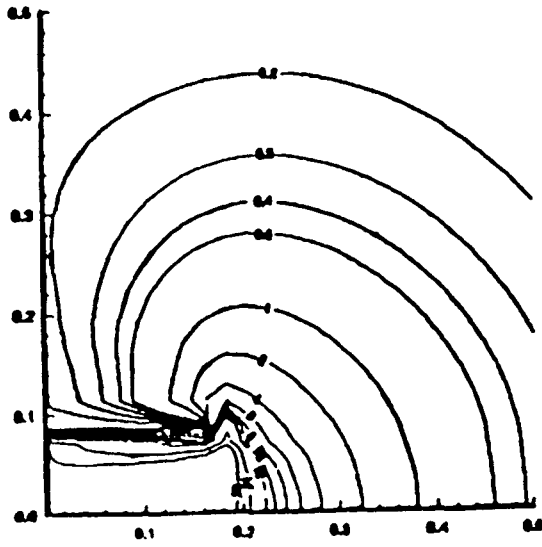


Fig. 13 (b) Velocity contours [14]

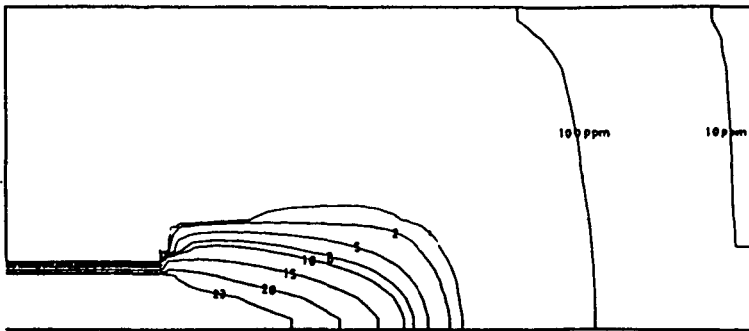


Fig. 14 Cl₂ iso-concentration lines for the case of sparger [16].