

전산 유체 역학을 이용한 휘발성 유기 화합물의 축열식 소각에 관한 모사

최병석 · 이종협
서울대학교 화학공학과

Simulation for Regenerative Incineration of the Volatile Organic Compounds by Computational Fluid Dynamics

Byung-Seok Choi and Jongheop Yi

Department of Chemical Engineering, Seoul National University

서론

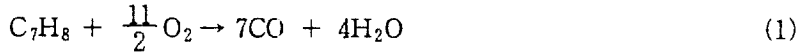
휘발성 유기 화합물(Volatile Organic Compounds : VOCs)은 대기 중으로 쉽게 증발하며 태양 광선에 의해 질소 산화물(NOx)등과 광화학적 산화 반응을 일으켜 지표면의 오존 농도를 증가시키고 스모그 현상을 야기시키는 인체에 유해한 유기 화합물을 일컫는다[1]. 이러한 VOCs에 포함되는 유기 물질들로는 지방족 화합물, 방향족 화합물, 염소화탄화수소, 알데히드류, 케톤류, 산 및 알콜류 등이 있다[2]. 대기로 방출되는 VOCs는 크게 나누어 자동차 등에서와 같은 이동성(Mobile) 발생원과 각종 용제 사용처, 석유 화학 산업, 유기 화학 산업, 철강 산업, 식품 산업, 폐수 및 폐기물 처리 산업, 농업 등 사업 활동에서 발생하는 고정상(Stationary) 발생원으로 크게 분류할 수 있다[2]. 이러한 VOCs를 처리하는 방법으로 응축, 막분리, 활성탄을 이용한 흡착, 소각 등이 이용되고 있으며 현재, 이들 VOCs의 농도를 배출원에서부터 폭발하한(Lower Explosion Limits)의 25% 이하로 희석하여 처리하여야 하는 규제 때문에 처리시 이들의 농도가 저농도일 수밖에 없어 희수하여 재이용하기 보다는 그 독성을 짧은 시간에 현저히 감소시키기 위한 방법으로써 주로 소각에 의해 처리되고 있는 실정이다[3]. 소각은 크게 열소각과 촉매 소각으로 분류된다. 이 중 열소각은 열교환 체계를 기준으로 열교환을 하지 않는 단순 열소각과 주입 라인을 바꾸어 주면서 다공성 세라믹 축열 체계를 이용하여 축열과 기체 예열을 동시에 하는 축열식(regenerative) 소각, 그리고 2중관형 열교환 체계를 이용하는 회복식(recuperative) 소각이 있다. 이에 비해 촉매 소각은 촉매가 지닌 활성을 이용하여 소각 온도를 낮출 수 있어 보조 연료 사용량을 줄일 수 있지만 불순물 등에 의한 촉매 피독 현상으로 인하여 적용 범위가 제한된다[3]. 본 연구에서는 처리 대상 VOCs 모델 물질로 톨루엔을 선정하고 보조 연료로 메탄을 주입하는 3-Duct형 축열식 소각로에서의 전열 현상과 유동 현상을 전산 유체 역학 코드를 이용하여 해석하였다. 또, 톨루엔의 불완전 연소 반응에 관한 반응 기구를 도입함으로써 톨루엔의 기상 연소시 발생하는 대기 오염 물질인 CO의 양을 정량적으로 예측하였다. 이번 연구를 통하여 최적화된 기상 톨루엔 연소용 축열식 소각 시스템 설계를 위한 기본 개념을 이해하고자 하였다.

이론

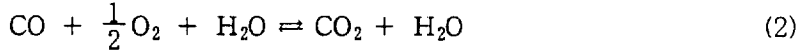
축열식 소각로는 단순 열소각로와는 달리 내장되어 있는 축열체를 이용하여 오염 기체의 온도를 산화 온도까지 예열할 수 있고 그 온도를 유지하면서 오염 가스를 CO₂와 H₂O로 분해한다. 일반적으로 축열식 소각로내에 존재하는 세라믹 축열체의 열효율은 95%정도로 알려져 있다[3]. 열소각에서 난류 강도에 의한 기체 혼합, 조업 온도, 체류 시간 등의 3가지 주요 인자에 의해 불완전 연소 화합

물과 유해 물질이 발생하게 되며 본 연구에서는 CO발생 기구를 사용하여 이를 정량적으로 예측하고자 하였다. 사용한 반응 기구는 다음과 같다[4].

- 톨루엔(C₇H₈)의 불완전 연소 반응



- CO와 CO₂의 평형 반응



톨루엔 연소를 위한 보조 연료로는 메탄/공기의 혼합 기체를 버너로 주입하였으며 메탄의 공기 중 연소는 다음의 완전 연소 반응 기구를 적용하였다.

- 메탄(CH₄)의 완전 연소 반응



위의 (1)~(3)에 나타난 반응 기구는 3차원 유동과 관련된 일반적인 유동 방정식과 동시에 고려되어 계산되어 졌으며 전달계에서의 물리량 Φ 에 대한 일반적인 형태의 보존 방정식은 다음과 같은 단일한 형태의 수학적 표현으로 나타낼 수 있다[5].

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot \Phi)}_{\text{transient}} + \underbrace{\text{div}\{(\rho \vec{v} \cdot \Phi)}_{\text{convection}} - \Gamma_{\Phi} \text{grad } \Phi}_{\text{diffusion}} = \underbrace{S_{\Phi}}_{\text{source}} \quad (4)$$

여기서 ρ , \vec{v} , Γ_{Φ} 와 S_{Φ} 는 각각 밀도, 속도 벡터, Φ 의 유효 교환 계수와 단위 부피당 Φ 의 발생 속도를 나타내며 (4)에 나와 있는 바와 같이 보존 방정식은 전이항, 대류항, 확산항, 발생항으로 구성된다. Fluent V. 4. 3을 이용하여 위의 식에 대한 해(Solution)를 구함으로써 소각로내의 속도장, 온도장, 및 기체 성분의 농도 분포를 얻었다. 이 때, 압력과 속도 관계는 SIMPLEC 알고리즘을 사용하였고 난류 점성 계수는 Reynolds 응력항의 방향성을 고려한 Reynolds Stress 모델(RSM)을 사용하였으며 이 모델은 복잡한 형태의 흐름에 잘 적용될 수 있다[6]. 또 고온 연소 반응 모사의 신뢰도를 높이기 위해 Discrete Radiation Model을 사용하였다.

결과 및 토론

본 연구에서는 모델 VOC인 톨루엔의 축열식 소각에 관한 데이터를 제시하고 최적화된 소각로를 설계하기 위한 기초 자료를 얻기 위하여, 모델 시스템으로 가로, 세로, 높이가 모두 1m인 Duct 3개로 구성된 축열식 소각로를 선정하였으며 이 계에서의 연소 현상을 전산 모사 하였다. 본 연구에서는 이러한 모델 시스템을 14091개의 격자로 구분한 유한 체적법(FVM)으로 계산을 수행하였다.(Fig. 1) 중간에 위치한 Duct 위에 반경 30cm의 버너가 있으며 각 Duct는 40cm 두께의 열교환 세라믹 층을 중간에 지니고 있다. 모사 결과, 정상 상태에서의 유동은 버너로 주입되는 메탄/공기 혼합 연료의 속도가 증가함에 따라 Fig. 2에서와 같이 출구 쪽 Duct 우측 상단부에서의 와류가 사라지고 좌측 상단부에 와류가 발생하는 것을 볼 수 있었다. Fig. 3에서와 같이 톨루엔의 주입 속도와 메탄의 주입 속도가 각각 0.875, 1.75 m/s일 때 1290K의 고온 영역은 출구 쪽 Duct 우측 상단부였으며 이 경우의 와류 발생 영역과 일치하였다. 주입 연료 속도를 증가시켜 혼합을 개선함으로써 와류 영역을 제거하고 온도 분포를 고르게 할 수 있음을 알 수 있다. 같은 경우의 CO 발생 경향은 Fig. 4에서 처럼 온도 경향과 일치하였으며 1290K 고온 영역에서 최대 발생 분율인 1.69×10^{-2} 값을 나타내었다. 소각 조

업중의 압력 강하는 2700 Pa이었으며 충전층을 통과하면서 압력 손실이 크게 일어난 것을 Fig. 5를 통하여 알 수 있었다. 입·출구쪽의 물질 수지 계산을 통하여 만족할 만한 수준의 톨루엔의 분해 제거 효율을 얻기 위한 조업 조건을 제시하는 연구도 병행하였다. 정상 상태 조업에 관한 연구 이외에, 본 연구를 통해 주입 Duct를 교체한 후의 비정상 상태 계산을 통한 전열 현상에 관한 모사를 수행함으로써 소각로 전반에 관한 조업 데이터와 효율적 열교환을 위한 주입 Duct 교체 시간을 제시할 수 있었다.

참고 문헌

1. Jenning, M., et al: "Catalytic Incineration for Control of Volatile Organic Compound Emission", Noyes Data Corp., New Jersey, U.S.A.(1985).
2. 탁현기 : 첨단 환경 기술, Jan., 124(1996)
3. 이시훈, 손용권: 화학공업과 기술, 12, 128(1994).
4. Richard C. Flagan and John H. Seinfeld: "Fundamentals of Air Pollution Engineering", Prentice-Hall, New Jersey, U.S.A.(1988).
5. Gouvalias, G. S. and Markatos, N. C.: *AICHE J.*, 39, 1799(1993).
6. Vivek V. Ranade: Computational Fluid Dynamics for Reactor Engineering, *Reviews in Chem. Eng.*, 11, 229(1995)

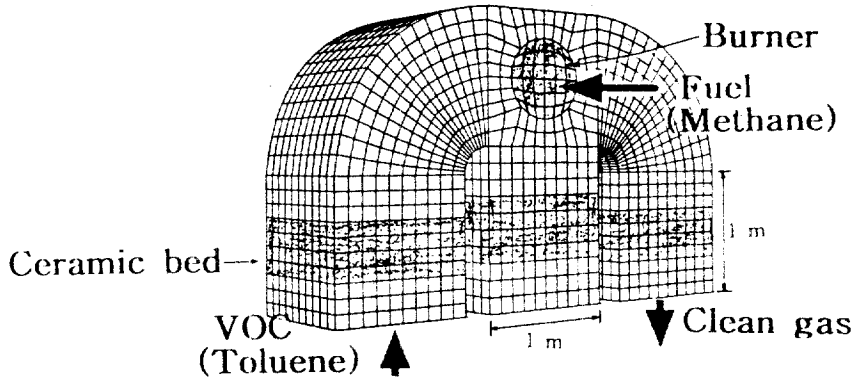


Fig. 1. Calculation grid and incineration system.

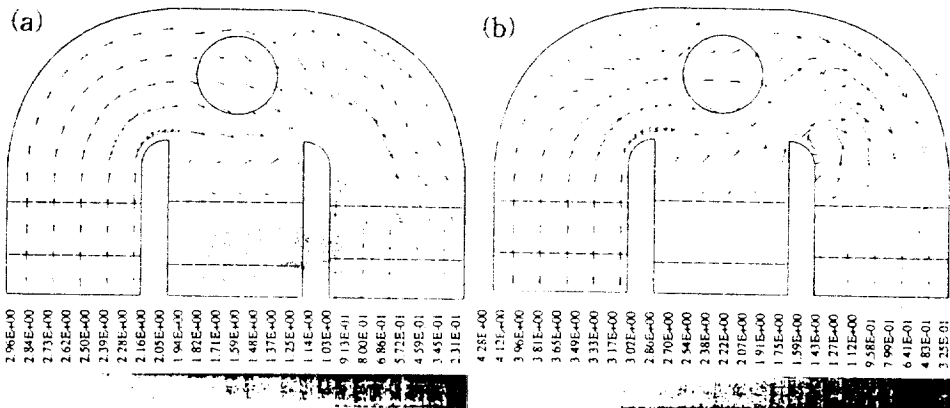


Fig. 2. Velocity vector (m/s)

; Flow rate of VOC/fuel is (a) 0.875/1.75(m/s), (b) 0.875/7(m/s).

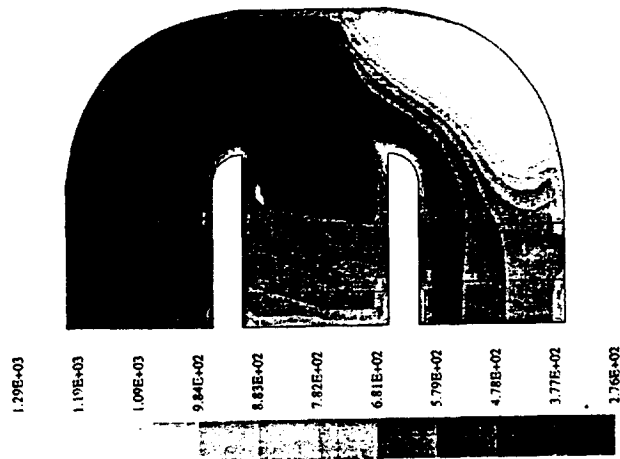


Fig. 3. Temperature contour for 0.875/1.75(m/s) (K).

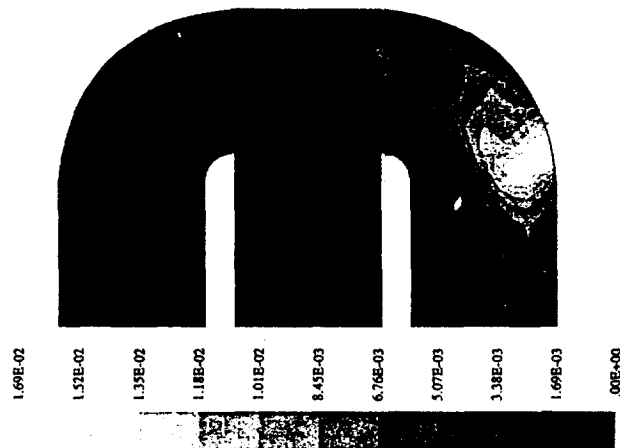


Fig. 4. CO mole fraction contour for 0.875/1.75(m/s).

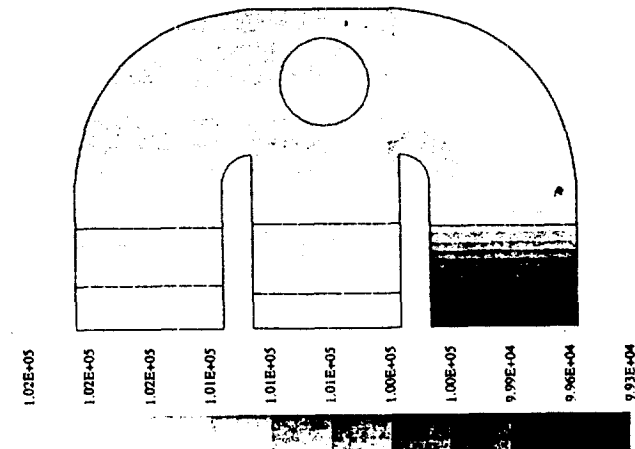


Fig. 5. Absolute static pressure contour for 0.875/1.75(m/s) (Pa).