청정환경기술

과산화수소 혼합냉각기 내의 노즐배치 및 가스분사 방식 변화에 따른 혼합율 개선에 대한 전산해석적 연구

구성모, 장혁상*

영남대학교 환경공학과 38541 경상북도 경산시 대학로 280

(2016년 10월 11일 접수; 2016년 12월 19일 수정본 접수; 2016년 12월 31일 채택)

CFD Analysis on the Effect of the Nozzle Arrays and Spray Types in the Hydrogen Peroxide Mixing Quencher to Improve the Mixing Efficiency

Seongmo Koo, and Hyuksang Chang*

Department of Environmental Engineering, Yeungnam University 280 Daehakro Gyeongsansi Gyeongsangbukdo 38541, Korea

(Received for review October 11, 2016; Revision received December 19, 2016; Accepted December 31, 2016)

요 약

탈질과 탈황을 동시에 수행하는 과산화수소(H₂O₂) 수용액 세정탑의 반응효율을 증가시키기 위해 예혼합이 이루어지는 혼합 냉각기(mixing quencher) 영역 내부의 유체유동에 대한 수치해석이 수행되었다. 산업공정에서 상용화되고 있는 세정탑 전단 부의 혼합냉각기에서 과산화수소 수용액이 주입되는 노즐의 분사방식은 배기가스와 과산화수소 수용액의 혼합에 중요한 역 할을 하며, 혼합냉각기에서의 혼합도는 세정탑 의 효율을 결정하는 중요 요소가 된다. 본 연구에서는 혼합냉각기 내부유체의 농도분포 개선을 목적으로 하여 혼합냉각기 내의 노즐 관의 배열을 조절하거나 노즐 팁 각도를 변경하며 유체혼합을 최적화 하였다. 전산해석은 이 냉각기영역의 내부유동 및 각 유체 농도에 대한 RMS (root mean square) 값을 계산하여 내부유체의 혼 합도의 개선을 확인하였다. 세부적으로는 노즐 관의 위치를 조절할 때 변경되는 냉각기 영역 후단의 농도 RMS 값을 확인하 여 난류형성위치에 따른 최적화된 혼합도를 확인하였으며 기본형상 대비 난류형성방향을 조절하는 목적의 노즐 팁 각도를 증감하여 농도분포의 균질화를 비교하였다. 노즐 관의 배열에 따라 난류형성위치와 그에 따른 유체혼합이 해석되었다. 또한 노즐 팁 각도를 조절하는 경우에는 유동방향과의 각도에 따라, 흐름이 병류와 향류에 따라 혼합도의 최적화를 확인할 수 있 었다. 노즐 관의 위치는 0.3 m, 노즐 팁은 병류의 15°일 때 최적의 조건을 가지며 가장 낮은 RMS 값인 12.4%를 가졌다.

주제어: 탈질, 탈황, 최적화, 전산유체역학

Abstract : Numerical analysis was done to evaluate the fluid distribution inside of the mixing quencher to increase the reaction efficiency of the aqueous hydrogen peroxide solution in the scrubbing column which is used for simultaneous desulfurization and denitrification. Effective injection of the aqueous hydrogen peroxide (H_2O_2) solution in the mixing quencher has major effects for improving the reaction efficiency in the scrubbing column by enhancing the mixing of the aqueous H_2O_2 solution with the exhaust gas. The current study is to optimize the array of nozzles and the spray angles of the aqueous H_2O_2 solution in the mixing quencher by using the computational method. Main concerns of the analysis are how to enhance the uniformity of the H_2O_2 concentration distribution in the internal flow. Numerical analysis was done to check the distribution of the internal flow in the mixing quencher in terms of RMS values of the H_2O_2 concentration at the end of quencher. The concentration distribution of H_2O_2 at the end of is evaluated with respect to the different array of the nozzle pipes and the nozzle tip angles, and we also analyzed the turbulence formation and fluid mixing in the zone. The effect of the spray angle was evaluated with respect to the mixing efficiency in different flow directions. The optimized mixing quencher had the nozzle array at location of 0.3 m from the inlet duct surface and the spray angle is 15° with the co-current flow. The RMS value of the H_2O_2 concentration at the end of the mixing analysis at the end of the mixing quencher was 12.4%.

Keywords : Desulfurization, Denitrification, Optimization, Computational fluid dynamics

* To whom correspondence should be addressed.

E-mail: hschang@yu.ac.kr; Tel: +82-53-810-2547; Fax: +82-053-813-5288

doi: 10.7464/ksct.2017.23.1.042 pISSN 1598-9712 eISSN 2288-0690

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/licences/ by-nc/3.0) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. 서 론

차량 및 석탄 화력발전소에서 배출되는 질소산화물(NO_X) 과 황산화물(SO_x)은 심각한 환경오염을 초래할 뿐만 아니라 인간의 건강을 위협하는 물질이다. 따라서 배기가스를 정화 하기 위한 기술개발에 많은 노력이 이루어지고 있다. 개별 가 스에 대한 처리방법으로는 탈황의 경우 흡수제로서 나트륨, 칼슘, 및 마그네슘 화합물을 포함하는 알칼리성 용액을 이용 하는 습식배연탈황(wet flue gas desulfurization, WFGD)이 가 장 효과적이고 널리 활용되고 있다[1]. 탈질의 경우 크게 건 식 및 습식기술로 나누어지는데 건식기술은 300~500 ℃에서 암모니아(NH3)에 의한 선택적 촉매 환원법(selective catalytic reduction, SCR) [2], 선택적 무촉매 환원법(selective non catalytic reduction, SNCR) [3], 흡착[4]과 전자선 조사[5]로 분류 된다. 습식기술은 흡수제에 의해 질소산화물이 흡수되는 세 정탑에서 사용된다. 탈질기술 중 선택적 촉매 환원법은 질소 산화물 제거를 위한 가장 효과적인 방법으로 여겨지지만 배 기가스의 재 함량이 높거나, 고온조건에서는 촉매의 성능과 수명이 감소한다[6,7]. 이 문제점을 해결하기 위해 전기집진 기 하류에서 선택적 촉매 환원장치를 배치하거나, 저온의 선 택적 촉매 환원장치에서 활용 가능한 마그네슘계 촉매를 적 용하는 방법이 있다. 그러나 마그네슘계 촉매는 황산화물이 발생하는 공정에서 적용이 제한된다[8]. 따라서 저온에서 탈 질과 탈황이 동시에 이루어지는 기술이 연구되어왔다. Khan and Adewuyi [9]는 기포탑 반응기에서 과황산나트륨(Na₂S₂O₈) 수용액에 의한 질소산화물의 산화 제거를 연구하였고, Wang et al.[10]은 오존 주입으로 산화 흡수를 적용했다. 그러나 과 황산나트륨은 재활용이 어려우며, 오존은 고비용으로 경제적 으로 적용이 어렵다. 따라서 탈질과 탈황에 대해 저비용 고효 율 기술을 개발하는 것이 바람직하다.

철산화물(FeOx)과 지르코늄 산화물과 같은 일부 전이금속 산화물은 과산화수소(H₂O₂)를 촉매반응으로 OH 라디칼을 포 함한 강한 산화성물질로 분해하는 것이 보고되어왔다[11]. OH라디칼은 저온에서도 비 선택적으로 질소산화물 및 황산 화물과 즉각적으로 산화한다. 이 산화 반응에서 생성된 생성 물은 유리로 만든 암모니아계 세정탑(glass made ammoniabased washing tower)에서 흡수되어지는 것과 같다. 또한 전이 금속 산화물과 과산화수소의 가격이 저렴하며 탈질 및 탈황 에 의한 생성물이 농업비료 및 산업원료로 사용되고 있어 경 제적이라고 할 수 있다.

과산화수소를 포함하는 산성용액을 흡수하여 산소연료연 소에 의한 배기가스 중의 질소산화물과 황산화물을 감소시키 는 이론이 있는데, 이 강한 산화제는 시스템에 유일하게 산소 와 물을 첨가시킨다는 장점을 갖고 있다. 질산과 황산은 자연 스럽게 흡수용액을 산성화하는 액상반응물로서, 흡수탑에서 이 용액의 재순환에 의해 과산화수소가 고갈된 조건에서 산 업용 산과 같이 농축된 산은 가격이 정해지거나 순수 산으로 정화될 수 있다. 이 청정기술을 통해, 어떤 액체 폐기물로서 수산화나트륨(NaOH)이나 탄산나트륨(Na₂CO₃)을 사용하는 경 우와 같이 환경으로 배출 전에 전처리가 필요 없어진다. 전술한 내용을 토대로 세정탑에서 질소산화물과 황산화물 을 포함한 배기가스와 과산화수소 수용액의 산화반응에 의한 경제적인 탈질, 탈황 반응이 이루어짐을 이해하고, 세정탑 전 단에서 두 유체가 각각 유입되어 혼합(mixing)이 시작되는 냉 각기(quencher)영역을 모델링한다. 이 냉각기 내부에서 배기 가스는 과산화수소 수용액을 주입하는 노즐 관의 위치를 지 나며 난류가 형성되어 혼합하게 되는데, 두 유체의 반응은 각 유체가 혼합하여 위치에 따른 농도분포가 고른 정도와 비례 한다. 본 연구에서는 난류에 의한 혼합으로 각 유체의 고른 분포를 목적으로 전산해석을 이용하여 노즐관의 위치와 과산 화수소 수용액이 분사되는 노즐 팁의 각도를 조절하여 난류 가 형성되는 지점을 변화시켜 냉각기후단에서의 각 유체의 농도분포를 파악하여 최적화된 혼합을 위한 형상을 확인하고 평가한다.

2. 실험방법

질소산화물과 황산화물을 포함한 배기가스와 과산화수소 수용액의 혼합으로 인한 냉각기 내부에서 일어나는 탈질, 탈 황효과, 난류유동, 열전달 및 화학반응을 예측하기 위해서는 실제 형상을 제작하고 배기가스와 과산화수소 수용액을 주입 하여 후단의 조성을 측정하여 결과 값을 얻어내는 실험적인 방법이 있다. 그러나 이러한 방법은 배기가스 및 과산화수소 수용액을 제작하기 위한 공간 확보 및 실험비용이 요구되며 냉각기영역 내부의 일어나는 난류유동과 특정 영역의 농도분 포를 확인하는데 제약이 있기 때문에 본 연구에서는 컴퓨터 를 이용한 전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 을 이용하였다. 전산유체역학을 통한 이론적 계산은 물리적 현상을 해석하기 위한 적절한 모델과 경계조건이 만족될 경 우 실제 상황과 높은 일치성을 보이는 결과를 도출할 수 있 다. 그렇기 때문에 형상의 크기, 압력, 온도 및 농도 등의 경계 조건의 변화와 같은 변수에 대하여 제약 받지 않고 실험할 수 있으며 위와 같은 제약을 극복할 수 있는 장점을 가지고 있다.

전산유체역학은 해석 대상에 지배방정식을 적용할 수 있도 록 전체 형상을 수많은 격자로 나누어 제어체적을 생성하여 해석하는 방식이다. 하나의 제어체적은 하나의 격자점(node) 을 포함하며 지배방정식을 이산화하여 수치적인 계산이 이루 어진다. 즉 격자의 수(element)가 증가할수록 해의 정확성을 높일 수 있다. 그러나 너무 많은 격자의 수는 필요이상의 계 산시간을 유발하기 때문에 적절한 격자의 수가 요구된다[12].

본 연구에서는 전산해석을 실시하기 위해 상용코드인 ANSYS Fluent v15.0을 사용하였으며, 이 프로그램은 난류현상해석 을 위한 많은 난류모델이 존재하며, 유체의 유동뿐만 아니라 화학반응, 액적의 궤도추적 등의 다양한 기능을 보유하고 있 으므로 항공, 조선, 화학 공학 등에서 광범위하게 사용되고 있다[13].

2.1. 기본 해석형상 및 격자

상용화되고 있는 배기가스 처리장치 중 냉각기영역만을 이 용하였다. 본 논문에서는 배기가스와 과산화수소 수용액이 혼합되는 냉각기영역을 나타내기 위해 ANSYS사의 Design-Modeler를 사용하였다[14]. 냉각기의 형상은 Figure 1에 나타 내었다. 형상의 본체는 0.5 m 직경의 원통이며, 0.25 m의 직 경의 입구를 통해 배기가스가 유입된다. 냉각기의 총길이는 1.0 m인데, 전, 후단에서 유입 관의 직경인 0.25 m에서 본체 직경 0.5 m로 0.1 m길이 동안 타원형으로 확장 및 축소된다. 냉각기중앙으로부터 입구방향으로 0.2 m 지점에서 내경 0.032 m, 외경 0.038 m의 노즐 관이 상단 0.05 m에서 부터 0.1 m 간격으로 5개가 꽂혀있다. 이 관에 직경 6 mm의 노즐 팁이 위에서부터 7, 9, 10, 9, 7개씩 유동 방향으로 15° 각도로 상, 하를 반복하며 동일한 간격으로 위치해있다. 이 노즐 팁을 통 해 과산화수소수가 주입된다. Figure 2에 각 노즐의 위치를 나타내었다.

Figure 1로 작성된 형상에 대하여 ANSYS사의 ANSYS Meshing 프로그램을 사용하여 격자를 생성하였다. 3D현상에 대한 격자는 크게 육면체 격자와 사면체 격자가 있다. 이 중 사면 체 격자의 경우, 동일한 부피 내에 비교적 많은 수의 격자를 형성하여 계산 시간이 길다는 단점이 있으나, 본 해석과 같은



Figure 1. Schematic of the reference quencher.



Figure 2. Location of nozzle tips.



Figure 3. Mesh of the reference quencher.

곡면이 존재하거나 복잡한 형상에 대한 해석 시 격자를 생성 하기에 훨씬 적합하다[12,14]. 또한 본 연구에서는 노즐 관의 외벽을 지나며 유동변화에 의해서 난류가 발생될 것을 예상 하고 있기 때문에 형상의 벽면에 얇은 오면체의 프리즘 격자 를 5겹으로 생성하여 공기 입구, 과산화수소수용액 입구와 출 구를 제외한 모든 면에 적용되어 점착조건에 의한 속도변화에 대해 해석을 시도하였다. 냉각기의 격자점(node)은 430,191 개이며, 격자의 수(element)는 1,544,654 개로 구성된다. 이때 격자의 품질(quality)은 격자의 비대칭도(skewness)로 나타낼 수 있는데 비대칭도는 격자 크기 분포가 좌우로 치우친 정도 를 나타낸다. 비대칭도는 0~1 사이의 값으로 0에 가까울수록 격자의 품질이 좋다고 할 수 있다[14]. 해석에 사용된 냉각기 의 격자 비대칭도는 0.231이다. 또한 벽면에서 생성되는 유동 의 경계층에서의 변화를 반영하기 위해 Y+ 값을 이용했으며 Y+의 최대값은 약 20.91을 가지며 평균값은 약 5.35이다. 전 산해석에 활용된 격자는 Figure 3에 나타내었다. 또 Figure 3 의 우측 하단에 출구면의 격자를 나타내어 외벽에 얇은 육면 체 격자가 형성된 것을 확인할 수 있다.

2.2. 경계조건

상용화되고 있는 냉각기는 전단에 사이클론 등의 집진 장 치를 통해 입자상 물질이 제거된 배기가스와 과산화수소 수 용액을 혼합하여 산화반응에 의한 탈질, 탈황 효과를 유도하 고 있기 때문에, 전산해석에 이용되는 유체는 연소반응 후에 입자가 제거된 배기가스가 사용되어야 한다. 그러나 본 논문에 서는 냉각기 내부에서 유입된 유체가 노즐 관에서 분사되는 과산화수소 수용액과 혼합하고 반응되므로 직접적 반응 정도 가 아닌 두 유체의 혼합도가 반응에 높은 영향을 기여하고 있음을 예측하고, 분사되는 유체가 냉각기 출구 영역에서 분 포된 정도 파악을 통해 그에 따른 반응을 예측하는 것을 주제 로 하며, 노즐 관에서 과산화수소 수용액이 분사되는 방식에 따라 혼합도가 다를 것으로 예상된다. 따라서 전산해석에서 사용된 유체는 공기, 과산화수소, 수증기(water vapor)의 혼합 물(mixture)을 만들어 입구에서의 질량분율을 공기를 100%로 주입하며, 노즐에서 질량분율을 과산화수소 33%, 수증기 66% 로 정의하여 유입하였다. 여기서 과산화수소와 수증기는 전 단의 기화설비에서 이미 고온에서 기화되어 주입되므로 기체 상으로 정의된다. 혼합물의 밀도와 비열은 혼합법칙을 따라 자동으로 계산되어 주입되며 열전도도는 0.0454 W mK⁻¹, 질 량 확산도는 2.88xe⁻⁵ m² s⁻¹으로 주입하였다. 경계조건을 입력 할 때, 입구에서는 유체가 온도 300 ℃, 질량 유량 386 kg hr⁻¹ (0.107 kg s⁻¹)로 유입되며 난류강도는 5%를 가지며 수리학적 직경 0.25 m 값을 이용하여 난류를 계산하였다. 노즐에서 분 사되는 유체는 온도 340 ℃에 질량 유량 11.6 kg hr⁻¹ (0.003 kg s⁻¹)로 주입한다. 노즐 입구의 난류 또한 난류강도를 5%, 수리학적 직경을 0.1 m를 이용한다. 벽면의 온도조건은 따로 입력하지 않고 단열 조건으로 설정하였으며, 출구의 온도는 역유입이 발생하는 경우 적용하기 위한 온도로서 300 K (Fluent default)으로 설정하였다. 출구는 대기압 조건으로 하였으며, 출구 쪽에 측정 면(plane)을 설정하여 각 면에서의 과산화수 소 농도분포 정도를 파악하여 가스처리효율을 파악한다.

2.3. 모델

본 전산해석에 사용된 지배방정식으로는 연속방정식과 운 동량방정식이 이용되었다. 난류현상을 해석하기위한 모델로 는 standard $k-\epsilon$ 모델을 사용하였다. standard $k-\epsilon$ 모델은 난류현상을 해석하는데 가장 대표적으로 사용되고 있으며, 전술한 바와 같이 벽면에서의 유동변화에 의한 난류정도를 관찰하기 때문에 벽면강화처리(enhanced wall treatment)를 사 용하였다[13].

2.3.1. 연속방정식

비압축성 유동에 적용되는 연속방정식(continuity equation) 은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_{j}\right)}{\partial x_{i}} = 0 \tag{1}$$

2.3.2. 운동량방정식

관성의 법칙이 성립되는 관성기준계에서 *i*방향에 대한 운 동량방정식(momentum equation)은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \left(\rho u_{j}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_{i} u_{j}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial P}{\partial x_{i}} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_{i}} + \rho g_{i} + F_{i} \qquad (2)$$

여기서 *i*는 정압, ρg_i는 중력, *i*는 외력이며, *i*는 전단응력을 나타낸다. 전단응력은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\tau_{ij} = \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}$$
(3)

Equation (2)의 운동방정식은 *i*모델을 활용할 때 점성 항 *i*에 대해 유효점성도 *i*를 이용하여 재해석된다[13]. 이는 다 음 절에서 나타낸다.

2.3.3. 난류방정식

점성유체의 흐름은 무차원수인 레이놀즈수를 기준으로 하 여 흐름이 층류(laminar) 또는 난류(turbulence)로 나타낸다. 레 이놀즈수는 다음과 같다.

$$Re = \frac{\rho u D}{\mu} \tag{4}$$

여기서 μ는 유체의 점성, *i*는 유체의 밀도, *U*는 유체의 속도, *D*는 유체가 흐르는 관의 직경이다. 또한 내부유동인 경우, 레 이놀즈수가 4,400 이상일 경우 흐름이 난류유동이 된다[15]. 본 논문에서는 냉각기에서 평균 입구속도는 3.497 m s⁻¹이며 입구직경이 0.25 m이다. 내부유체를 공기로 둔 기준으로 계 산할 때 레이놀즈수는 약 62,752을 가짐으로 해석대상의 흐 름은 난류유동이 된다. 난류유동방정식은 유체가 해석영역 내에서 불규칙한 운동을 한다는 가정을 바탕으로 평균화된 방정식으로 표현된다.

본 논문에서 장치 내부의 난류는 standard $k - \varepsilon$ 모델을 통해 해석 및 설명된다. standard i모델은 관내유동 해석에서 적합 한 것으로 알려져 있으며, 복잡한 흐름에 대해서 정확한 예측 이 가능한 모델이다[13,14]. 여기서, k는 난류운동에너지(turbulent kinetic energy)로 속도변동의 차이로 정의되며 차원은 L^2T^2 이다. ε 은 난류에디소실(turbulence eddy dissipation)으로 정의되고 차원은 L^2T^3 이다. $k - \varepsilon$ 모델은 방정식에 두 개의 새로운 변수를 나타낸다[14]. 먼저 Equation (2)와 Equation (3)을 정리하여 나타낸 운동량방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \left(\rho u_{j}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_{i} u_{j}\right)}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial P}{\partial x_{j}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ \left[\mu \left(\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{i}} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_{k}}{\partial x_{k}} \right) \delta_{ij} \right\} + \rho g_{i} + F_{i}$$
(5)

 Equation (5)에서 점성 항 μ 를 유효점성도 μ_{eff} 로 정리하고

 정압 P를 다음과 같이 변형된 압력 P'로 정의한다.

$$P' = P + \frac{2}{3}\rho k + \frac{2}{3}\mu_{eff}\frac{\partial U_k}{\partial x_k} \tag{6}$$

Equation (6)를 이용해서 Equation (5)는 다음과 같이 정리 된다.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_i u_j \right) = -\frac{\partial P'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_M \tag{7}$$

여기서, S_M은 체적력의 합이다. 체적력이란 전체 영역에 걸쳐 분포하는 하중으로 지구 중력에 의한 자중(self weight), 회전 운동에 따른 원심력 등이 있다. 전산해석 과정에 있어 체적력 은 물체의 밀도와 가속도의 크기 및 방향을 입력함으로써 정 의되어진다. 본 연구에서 사용된 유체는 모두 기체로 밀도가 낮아 압력 및 속도 변동에 비해 체적력의 합이 매우 적어 무 시할 수 있다. 여기서 사용된 난류에 대한 유효점성도 μ_{eff} 는 다음과 같이 정의된다.

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \tag{8}$$

이 때, μ_t는 난류점성이다. k-ε 모델에서는 난류점성이 난 류운동에너지와 소실과 관계를 가진다고 가정하였다.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{9}$$

*C*_μ는 상수이다. *k*와 ε의 값은 난류운동에너지와 난류에디 소실에 대한 미분수송방정식으로 직접 나타내었다.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb}$$
(10)

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \varepsilon) = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} \left(C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{\epsilon b} \right) \quad (11)$$

 $C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, \sigma_k$ 와 σ_{ε} 은 상수이다. P_{kb} 와 $P_{\varepsilon b}$ 는 부력의 영향을 나타낸다. P_k 는 점성력에 의한 난류증가로 다음과 같이 나타 낸다.

$$P_{k} = \mu_{t} \left(\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{i}} \right) \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{j}} \left(3 \,\mu_{t} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{k}} + \rho \,k \right) \quad (12)$$

standard $k - \epsilon$ 모델에서 위의 상수들은 실험적인 값으로 가 장 널리 사용되는 아래의 값을 적용하여 해석하였다[13].

$$C_{\!\mu}=0.09, \ C_{\!\varepsilon 1}=1.44, C_{\!\varepsilon 2}=1.92, \sigma_k=1.0, \ \sigma_{\!\varepsilon}=1.3$$

2.3.4. 종 수송 방정식

 m_i 를 통해 화학종의 질량분율을 표현할 수 있다. m_i 의 보 존방정식은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial(\rho m_i)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{U} m_i\right) = -\nabla \cdot J_i + R_i + S_i \qquad (13)$$

 $\partial(\rho m_i)/\partial t$ 는 단위체적당 화학종의 질량의 변화 속도이며, $\overrightarrow{\rho Um}_i$ 의 값은 화학종 i의 대류로서 일반 유동장 U에 의해 수송되는 플럭스를 나타낸다. J_i 는 일반적으로 m_i 의 구배에 의해 발생하는 확산플럭스를 나타낸다. R_i 값은 단위체적당 화학종의 생성속도를 나타내며, 이 생성은 화학반응에 의해 발생한다. R_i 는 반응이 실제로 화학종을 생성하느냐 소멸시 키느냐에 따라 양수 또는 음수의 값을 가지며 반응하는 화학 종이 없을 때에는 0의 값을 갖는다. S_i 는 분산상으로부터 추 가적인 생성 속도이다. 확산플럭스 J_i 는 Fick의 확산법칙을 사용하여 표현되어 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$J_i = -\Gamma_i \nabla m_i \tag{14}$$

여기서 *I*는 확산계수이고, Equation (14)를 (13)에 대입하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial(\rho m_i)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{U} m_i\right) = \nabla \cdot \left(\Gamma_i \nabla m_i\right) + R_i + S_i \quad (15)$$

3. 결과 및 고찰

본 논문에서 전산해석은 총 세 단계로 진행하였다. 첫 번째 로 상용화되고 있는 냉각기의 기본 형태를 해석하여 후단에 서 과산화수소의 농도분포를 관찰하여, 반응 정도를 예상하 였다. 두 번째로 노즐 관의 위치를 냉각기 중앙으로부터 입구 방향으로 0.2 m 지점에서 0.1 m지점과 0.3 m지점으로 조절하 여 분사위치에 따른 과산화수소의 농도분포를 나타낸다. 마 지막으로 노즐 관의 위치는 기본 형상의 노즐 관 위치로 고정 하고 과산화수소 수용액이 분사되는 노즐 팁의 각도를 유동 방향에 대해 상하 15°에서 45, 90, 135°로 조절하여 과산화수 소의 농도분포를 비교하였다.

3.1. 기본형상의 전산해석 결과

냉각기에 대한 계산처리의 반복(iteration)은 총 500번 수행 하였으며, 해의 잔차(residual)를 나타내는 그래프가 일정한 값에서 진동을 나타내어 해가 수렴되었다고 판단하였다. 전 산해석 결과를 Figure 4와 Figure 6으로 나타내었다. Figure 4 는 흐름 라인을 통해 입구로부터 유입되는 배기가스와 측면

Figure 4. Pathlines in the reference quencher.

의 노즐 관 입구영역에서 주입되어 노즐 팁으로 분사되는 과 산화수소 수용액의 유동을 확인했다. Figure 4를 통해 입구에 서 유입되는 배기가스가 냉각기로 유입되며 유동의 변화가 발생하며 파이프 영역을 지나치며 불규칙 유동이 되며 과산 화수소수 수용액과 혼합되는 것을 확인할 수 있다. 또한 이 불규칙한 유동은 출구 영역에서 다시 안정을 찾으며 약해지 는 것을 볼 수 있다. 냉각기의 직경이 좁아지는 위치를 plane 1, 다시 직경이 0.25 m가 되는 출구 영역에 plane 2로 각각 정 의하였으며 plane의 위치를 Figure 5에 나타내었으며, 각 plane



Figure 5. Plane position of the reference quencher.







Figure 6. Mass fraction of H₂O₂ distribution on each plane of the reference quencher

Table 1. Root mean square of mass fraction of H_2O_2 on each plane in
the reference quencher

Location	RMS
Plane 1	18.46%
Plane 2	12.39%

에서의 과산화수소의 농도분포를 Figure 6에 나타내었다.

Figure 6에서는 유동방향에 따라 plane 1에서 plane 2로 진 행될수록 유체의 농도분포의 범위가 좁아지는 것을 확인할 수 있다. 농도 분포 범위가 좁아지는 것은 유동방향에 따라 혼합이 잘 되고있음을 의미하며 이를 정확한 수치로 표현하 기 위해 각 plane 에서의 과산화수소에 대한 농도 RMS를 이 용하였다. 농도에 대한 RMS (%)는 Equation (16)과 같이 표현 할 수 있다.

$$RMS = \frac{\sqrt{\frac{\int (c-\bar{c})^2}{A}}}{\bar{c}} \tag{16}$$

여기서 c는 평균 농도이며 c는 해당 영역의 농도, A는 해당 영역의 면적이다. RMS(%)는 전체 영역 중 특정영역으로 농 도가 집중되는 경우 100%에 가까운 값을 나타내며 균일한 농도분포를 가질 경우 0%에 가까운 값을 나타낸다. 농도 RMS 를 계산하였을 때 결과는 Table 1에 나타내었다.

Table 1을 통해 냉각기 내부유체가 유동방향에 따라 각 plane에서의 과산화수소의 농도 RMS 값이 점차 낮아짐을 확 인할 수 있으며, 이는 냉각기 내의 유체혼합이 후단으로 진행 됨에 따라 잘 이루어지고 있음을 나타낸다. 본 연구에서는 전 술한 결과를 토대로 상용화되고 있는 냉각기에서 과산화수소 의 농도분포 확인하였으며, 상용화되고 있는 냉각기내에 노 즐 관의 위치 및 분사 방식이 적절한지를 해석하기위해 노즐 관의 위치를 수정하고 과산화수소가 분사되는 노즐 팁의 각 도를 조절하여 동일한 해석을 진행하였다. 각 해석의 결과는 각각 3.2와 3.3절에 나타내었다.

3.2. 노즐 관 위치가 변형된 형상의 전산해석 결과

전술한 바와 같이 상용화되고 있는 냉각기가 유동방향에 따라 과산화수소의 농도 RMS가 낮아지며 혼합이 잘 이루어 짐을 예상하였다. 본 절에서는 노즐 관 영역에서부터 혼합이 시작됨을 확인하여 다른 영역의 조건을 유지한 채 노즐 관의 위치를 냉각기 중앙으로부터 입구방향으로 0.2 m 지점에서 0.1 m지점과 0.3 m지점으로 조절하여 혼합이 이루어지는 거 리를 증감하여 그에 따른 각 plane의 RMS를 확인하여 과산화 수소의 혼합을 예측하였다. Figure 7을 통해 노즐 관의 위치 가 조절된 냉각기를 나타내었다. 기본 형상에 대하여 Figure 1로 나타냈지만 비교를 위해 Figure 7에 포함하였으며 중앙으 로부터의 거리순으로 기본형상을 case 2로 두었다.



Figure 7. Schematic of nozzle pipe in the testing quenchers. (1) 0.1 m, (2) 0.2 m, (3) 0.3 m.

Table 2. The number of element, node and mesh quality in each case of nozzle pipe in the testing quenchers

Case	Node	Element	Skewness	Max Y plus
Case 1	429,634	1,541,573	0.232	20.90640
Case 2 (reference quencher)	431,908	1,549,437	0.232	20.90715
Case 3	430,191	1,544,654	0.231	20.90707

각 해석에 따라 노즐 관의 위치가 달라 형상의 모양이 달라 지므로 격자를 새로 생성해야하지만 총 도메인의 크기는 유 지되기 때문에 각 격자들의 크기 수준은 같으며 격자점 및 격자의 수는 유사한 값을 보인다. 각 형상에 대해 생성된 격 자의 수, 격자점, 비대칭도와 Y+의 최대값은 Table 2를 통해 나타내었다.

유량 및 벽면의 조건 등의 모든 경계조건은 일정하게 유지 하고, 노즐 관의 위치가 조절된 각 냉각기에 대한 계산은 총 500번을 수행하였으며, 위의 경우와 마찬가지로 해의 잔차를 나타낸 그래프가 일정한 진동을 나타내어 해가 수렴되었다고 판단했다. Figure 8을 통해 각 형상에서의 흐름 라인을 확인 하여 내부유체의 유동을 나타내었다.

Case	RMS		
	Plane 1	Plane 2	
Case 1	21.48%	13.18%	
Case 2 (reference quencher)	18.46%	12.39%	
Case 3	21.29%	17.51%	

Figure 8을 통해 입구에서 유입되는 유체가 노즐 관 영역을 지나며 난류가 형성되어 혼합이 이루어지는 것을 확인할 수 있었다. 그러나 흐름 라인을 통해 유체의 이동을 확인할 수 있으나, 두 유체의 혼합을 정확한 수치로 식별하기 어렵기 때 문에 기본 형상과 동일한 지점에 plane 1, 2를 제작하였으며, 각 plane에서의 과산화수소의 농도분포를 Figure 9에 나타내 고, 그 RMS 값을 Table 3에 나타내었다.

Figure 9와 Table 3을 통해 유체가 유동방향으로 진행함에 따라 농도분포는 고르게 혼합되어짐을 알 수 있었으며, 이 데 이터를 사용하여 노즐 관 위치에 따른 plane 2의 과산화수소 농도 RMS 값을 Figure 10에 나타내었다.



Case 1 Case 2 Figure 8. Pathlines from the nozzle pipe in the testing quenchers. (1) 0.1 m, (2) 0.2 m, (3) 0.3 m.

Case 3



Figure 9. Mass fraction of H₂O₂ distribution on each plane of nozzle pipe in the testing quenchers. (1) 0.1 m, (2) 0.2 m, (3) 0.3 m.



Figure 10. Root mean square of mass fraction of H_2O_2 of nozzle pipe in the testing quenchers.

Figure 10을 통해 노즐 관을 입구로부터 더 먼 위치에 설정 한 case 1의 경우, 난류가 시작되는 지점이 늦어져 혼합할 수 있는 충분한 시간을 얻지 못하여 case 2에 비해 높은 RMS 값을 예측할 수 있었다. 또 case 3의 경우 노즐 관을 입구에 근접하게 설치하여 난류형성을 시작점을 당겨 혼합에 충분한 시간을 얻었으나, 후단으로 진행될수록 난류강도가 약해져 case 2에 비해 높은 RMS 값을 갖는 것을 확인할 수 있었다. case 2에서 가장 낮은 RMS 값을 가짐으로 가장 높은 혼합효 율을 갖는 것을 예측할 수 있으나 상용화를 위해 압력손실 또한 확인할 필요가 있었다. 각 case에 따른 압력 손실을 Figure



Figure 11. Pressure drop across nozzle pipe in the testing quenchers.

11에 나타내었다.

압력손실의 경우 case 3에서 가장 낮은 값을 갖지만 반응효 율에서 적절하지 못하다고 판단된다. case 1의 경우 압력손실 의 값이 case 2에 비해 낮으나 그 차가 약 0.15 Pa로 매우 적다 고 판단되기 때문에 현재 상용화되고 있는 냉각기 노즐 관의 위치인 case 2가 혼합을 시작하여 충분한 혼합시간을 제공하 고 난류강도가 약해지는 단계에서 혼합을 마치고 있는 적절 한 위치임을 확인할 수 있다.

3.3. 노즐 팁의 각도가 조절된 형상의 전산해석 결과3.2절에서는 노즐 관 위치조절에 따른 혼합이 시작되는 시



Figure 12. Schematic of nozzle tip in the testing quenchers. (a) 15°, (b) 45°, (c) 90°, (d) 135°.

간을 증감시켜 농도분포를 확인하였다면, 본 절에서는 노즐 관에서 과산화수소의 분사하는 노즐 팁의 각도를 조절하여 농도분포를 확인하였다. 이는 노즐 팁 각도조절을 통해 유체 혼합이 시작되는 시간도 조절할 수 있으며 생성되는 난류방 향이 달라져, 위치 조절과는 또 다른 효과를 기대했다. 노즐 관의 위치는 기본 형상과 동일한 위치로 냉각기 중앙으로부 터 0.2 m에 위치해 있으며 최초 유체 진행방향에 따라 상하로 15°으로 벌어진 노즐 팁의 각도를 45°, 90°, 135°로 조절하여 유체의 혼합도를 비교하였다. Figure 12을 노즐 팁의 각도를 나타내었다. 또한 노즐 팁의 각도 크기에 따라서 기본 형상의 15°를 case a로 두어 비교하였다.

3.2 절과 마찬가지로 각 해석에 따라 노즐 팁의 각도가 달 라지므로 격자를 새로 생성해야하며, 전체 도메인의 크기는 달라지지 않음으로 크기 수준은 같으며, 격자점과 격자의 수 는 유사한 값을 갖는다. 노즐 팁의 각도를 변경한 각 형상에 대해 생성된 격자의 수, 격자점, 비대칭도와 Y+값의 최대값 은 Table 4에 나타내었다.

Table 4. The number of element, node and mesh quality in each case of nozzle tip in the testing quenchers

Case	Node	Element	Skewness	Max Y plus
Case a (reference quencher)	431,908	1,549,437	0.232	20.90715
Case b	430,772	1,548,424	0.232	20.90796
Case c	428,010	1,534,163	0.231	20.90630
Case d	430,960	1,548,180	0.232	20.90756

경계조건을 일정하게 유지하여 노즐 팁의 각도가 변경된 냉각기에 대한 계산은 총 500번을 수행하였다. Figure 13을 통해 형상에서의 흐름 라인을 확인하여 내부유체의 유동을 나타내었다.

Figure 13에서 내부유체의 난류가 노즐 파이프영역보다 앞 에서 형성되어 혼합이 빨리 시작됨을 예측할 수 있다. 그러나 흐름 라인만으로는 유체의 이동을 확인할 수 있으나, 두 유체



Figure 13. Pathlines from the nozzle tip in the testing quenchers. (a) 15°, (b) 45°, (c) 90°, (d) 135°.

의 혼합을 정확한 수치로 식별하기 어렵기 때문에 기본 형상 과 동일한 지점에 plane 1, 2를 제작하였으며, 각 plane에서의 과산화수소의 농도분포를 Figure 14에 나타내고, 그 RMS 값 을 Table 5에 나타내었다.

Figure 14와 Table 5에서 유체가 유동방향으로 진행함에 따 라 과산화수소의 농도는 혼합이 이루어져 분포가 고르게 전





Case	RMS		
	Plane 1	Plane 2	
Case a (reference quencher)	18.46%	12.39%	
Case b	19.78%	14.34%	
Case c	20.18%	15.60%	
Case d	21.58%	14.68%	

 Table 5. Root mean square of mass fraction of H₂O₂ in each plane of nozzle tip in the testing quenchers



Figure 15. Root mean square of mass fraction of H_2O_2 of nozzle tip in the testing quenchers.



Figure 16. Pressure drop across nozzle tip in the testing quenchers.

환되는 것을 알 수 있으나, 각 plane에서의 과산화수소 농도 RMS 값을 확인하였을 때, 유동방향과 수직이 되는 case c가 가장 높은 값을 갖고, 유동방향과 평행에 도달할수록 낮은 RMS 값을 갖는 것을 알 수 있었다. 유동방향과 평행에 도달 할수록 낮은 RMS 값을 갖는 것에 대한 신뢰성을 얻고, 병류 (co-current flow)와 향류(counter flow)에 따른 값 비교를 위해 15°의 역방향이 되는 165°를 추가적으로 계산하고 또, 0°와 180°로 유동방향에 완전 평행한 노즐 팁의 각도에 대해 계산 하여 노즐 팁의 분사각도에 따른 plane 2의 과산화수소 농도 RMS 값을 Figure 15에 나타내고 또 압력손실의 값을 Figure 16에 나타내었다.

Figure 15와 Figure 16을 통해 노즐 팁의 방향이 유동방향 과 수직할수록 높은 RMS 값을 가지며 0°의 경우 가장 낮은 RMS 값을 가지며, 압력손실의 경우 노즐 팁과 유동방향이 수직 또는 향류가 될 때 배기가스의 유동을 방해하여 높은 값을 갖는 것을 확인할 수 있었다. 그러나 Figure 2에서 최상 단 및 최하단의 노즐 관의 좌우 노즐 팁의 위치를 확인해보면 15° 이하와 165° 이상의 각도는 적절하지 않다. 노즐의 개수 및 간격을 조절하지 않는 조건하에서 0°의 활용은 불가능함 으로 최적의 각도는 15°임을 확인할 수 있었다. 따라서 상용 화되고 있는 냉각기는 배기가스와 과산화수소수의 최대 혼합 효율을 갖는 형상이라고 할 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 전산유체역학을 통해 과산화수소 수용액을 이용하여 산화 탈질, 탈황 반응이 이루어지는 세정탑 전단의 냉각기 내에서 유체유동을 분석하고 내부유체의 혼합도에 대 하여 해석하였다. 해석대상으로는 상용화되고 있는 세정탑 전 단의 냉각기를 모델링하였으며 실제 운전되는 질량유량을 사 용하여 해석이 시행되었다. 해석결과, 냉각기 내부유체는 노 즐 관을 지나며 난류가 생성되어 혼합이 진행되는 것이 확인 되었다. 상용화되고 있는 냉각기의 노즐 관 위치 및 노즐 팁 의 각도가 최적의 효율을 갖는지 확인하기 위해 이 변수들을 조절하여 냉각기 후단에서 유체의 혼합도를 제어할 수 있는 것으로 평가되었다. 난류생성지점을 증감하기위해 노즐 관 위치를 조절 했을 때에는 노즐 관의 위치가 입구 영역에서 가까워지는 경우에는 난류가 빨리 형성되고 혼합에 충분한 시간이 주어졌으나 유동방향으로 진행됨에 따라 난류강도가 감소하여 충분한 혼합이 이루어지지 못하며, 멀어지는 경우 에는 난류의 형성이 늦어져 혼합에 충분한 시간을 주어지지 못했다. 난류 생성방향에 따른 해석을 위해 노즐 팁의 각도를 증감시켰을 때에는 노즐 팁의 각도가 유동방향에 평행할수록 향류보다는 병류에서 더 높은 효율을 보였는데 유동방향에 가장 완전히 평행한 경우 노즐 팁의 개수 또는 간격을 조절해 야했다. 노즐 팁의 개수와 간격을 조절하지 않는 조건하에서 는 15°의 각도가 평행에 가장 가까운 위치이며 이 값은 상용 화되고 있는 냉각기의 조건과 같다. 본 연구를 통해 상용화되 고 있는 냉각기의 조건이 배기가스와 과산화수소 수용액의 혼합에 가장 최적화된 설계임을 알 수 있었다.

References

 Zhao, Y., Guo, T., and Chen, Z., "Experimental Study on Simultaneous Desulfurization and Denitrification from Flue Gas with Composite Absorbent," *Environ. Progress & Sustainable Energy*, **30**(2), 216-220 (2011).

- Topsoe, N. Y., Topsoe, H., and Dumesic, J. A., "Vanadia/ Titania Catalysts for Selective Cataytic Reduction (SCR) of Nitric-Oxid by Ammonia: I. Combined Temperature-Programmed in situ FTIR and On-line Mass- Spectroscopy Studies," *J. Catal.*, **151**(1), 226-240 (1995).
- Leckner, B., Karisson, M., Dam-Johansen, K., Weinell, C. E., Kilpinen, P., and Hupa, M., "Influence of Additives on Selective Non-catalytic Reduction of NO with NH₃ in Circulating Fluidized Bed Boilers," *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30** (11), 2396-2404 (1991).
- Huang, H. Y. and Yang, R. T., "Removal of NO by Reversible Adsorption on Fe-. Mn Based Transition Metal Oxides," *Langmuir*, 17(16), 4997-5003 (2001).
- Ighigeanu, D., Martin, D., Zissulescu, E., Macarie, R., Oproiu, C., Cirstes, E., Iovu, H., Calinescu, I., and Iacob, N., "SO₂ and NO_X Removal by Electron Beam and Electrical Discharge Induced Non-thermal Plasmas," *Vaccum*, 77(4), 493-500 (2005).
- Busca, G., Lietti, L., Ramis, G., and Berti, F., "Chemical and Mechanistic Aspects of Selective Catalytic Reduction of NO_X by Ammonia over Catalysts," *A Rev. Appl. Catal. B Environ.*, 18(1), 1-36 (1988).
- 7. Long, R. Q., Yang, R. T., and Chang, R., "Low Temperature Selective Catalytic Reduction of NO and NH₃ over Fe-, Mn

based catalysts," Chem. Commun., 7(5), 452-453 (2002).

- Serra, J. M., Chica, A., and Corma, A., "Development of a Low Temperature Light Paraffin Isomerization Cataysts with Improved Resistance to Water and Sulphur by Combinatorial Method," *Appl. Catal. A General*, 239(1-2), 35-42 (2003).
- Khan, N. E., and Adewuyi, Y. G., "Abosorption and Oxidation of Nitric Oxide (NO) by Aqueous Solution of Sodium Persulfate in a Bubble Column Reactor," *Ind. Eng. Chem. Res.*, 49(18), 8749-8760 (2010).
- Wang, Z., Zhou, J., Zhu, Y., Wen, Z., Liu, J., and Cen, K., "Simultaneous Removal of NO_X, SO₂ and Hg in Nitrogen Flow in a Narrow Reactor by Ozone Injection: Experimental Results," *Fuel Proc. Technol.*, **88**(8), 817-823 (2007).
- Lousada, C. M., and Jonsson, M., "Kinetic, Mechanism, and Activation Energy of H₂O₂ Decomposition on the Surface of ZrO₂," *J. Phys. Chem. C*, **114**(25), 11202-11208 (2010).
- Patankar, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, 1st ed., McGraw-Hill, New York, Chap.3 1980.
- 13. ANSYS, ANSYS Fluent User's Guide, ANSYS Inc. 2013.
- 14. ANSYS, ANSYS Fluent Theory Guide, ANSYS Inc. 2013.
- Wark, K., Warner, C. F. and Davis, W. T., Air Pollution: Its Origin and Control, 3rd ed., Prentice Hall, New York, Chap 5. 1998.