

고밀도 가스 확산 예측을 위한 라그랑지안 입자 모델

고석을[†] · 이창훈^{*}

Lagrangian Particle Model for Dense Gas Dispersion

S. Ko and C. Lee

Key Words: Lagrangian particle dispersion model(라그랑지안 입자 확산 모델), Dense gas(고밀도 가스), Gravity Slumping(중력에 의한 하강), Air Entrainment(주변공기와 동조)

Abstract

A new model for dense gas dispersion is formulated within the Lagrangian framework. In several accidental released situations, denser-than-air vapour clouds are formed which exhibit dispersion behavior markedly different from that observed for passive atmospheric pollutants. For relevant prediction of dense gas dispersion, the gravity and entrainment effects need to be implemented. The model deals with negative buoyancy which is affected by gravity. Also, the model is subjected to entrainment. The mean downward motion of each particle was accounted for by considering the Langevin equation with buoyancy correction term.

1. 서론

최근 수십 년 동안 급격하게 증가한 위험물질의 사용에 따라 야기될 수 있는 누출사고의 위험 또한 증가하고 있다. 1976년 이탈리아 Seveso에서 발생한 Dioxin 누출 사건, 1984년 인도의 Bhopal에서의 methyl isocyanate 누출사건 등에서 볼 수 있듯이 농축되어있던 위험물질이 누출되면 짧은 시간에 많은 피해를 가져오고 인간에게도 치명적이다.

일반적으로 우리가 알고있는 위험한 산업 물질은 대기 중에 방출되었을 때 가연성을 가지고있고 유독하며 연무를 만들어 낸다. 이러한 유독한

물질이 사고로 방출될 때 그것들이 가지고 있는 밀도는 주변환경과 다르다. 방출되는 가스의 밀도가 주변보다 낮다면 이 물질이 직접적인 영향을 받는 지표면에서의 농도는 일반적으로 낮고, 방출되는 가스의 밀도가 주변보다 높다면 가스는 지표면으로 가라앉기 때문에 지면에서의 농도가 높아진다.

고밀도 가스의 확산은 매우 다양한 외형과 방출형태를 가지고 있고 가스가 유출되는 부피 또한 매우 크다. 초기 모델들은 순간적인 방출에 대하여 평평한 지형에 대하여 integral 방법으로 연구되어졌다. Webber(1993)는 integral 방법으로 바람속도가 0이고 주변의 공기와 혼합이 없는 경우의 해를 구했고, Tickle(1996)은 공기와의 동조에 의해 구름 덩어리가 희석되어지는 좀더 통계적인 모델을 만들어냈다. 초기에는 Simple box 모델이나 Puff 모델이 주로 개발되었다. 이러한 연구는 오랫동안 부력에 의한 영향이 없는 경우에만하여 적용이 가능했다. Lamb(1986), Reid(1979)와 Thomson(1984)등에 의해 부력의 영향이 없는

[†] 연세대학교 대학원

^{*} 연세대학교 기계공학과

E-mail : clee@yonsei.ac.kr

TEL : (02)2123-2846 FAX : (02)312-2159

확산 모델이 연구되어졌고, 이후에 고밀도 입자에 대하여 적용하기 위해 Walklate (1986), Sawford와 Guest(1991)가 연구를 하였다. Cogan(1985)과 Anfossi(1993)은 부력의 효과를 추가하였다.

최근 들어, 컴퓨터의 발달로 계산 속도가 빨라지면서 기존의 가우시안 방법대신 좀더 정교한 접근 방법인 라그랑지안 방법의 연구가 활발하게 진행되고 있다. S.G.Gopalakrishnan(1997)은 라그랑지안 모델을 이용하여 인도 Bhopal에서의 methyl isocyanate 누출사건에 대한 모델을 개발하였다. 라그랑지안 입자 모델링은 포인트 소스로부터 방출되어지는 가스의 확산 정도를 예측하는데 점점 효과적으로 접근하고 있다.

본 연구에서는 초기단계로서 라그랑지안 모델에서 중력에 의한 영향과 Entrainment의 효과를 고려하고자 한다. 그러나 라그랑지안 입자모델에서 고밀도 가스의 효과를 제대로 모델링하는 것은 그리 쉬운 일이 아니다.

2. 2장 Model Formulation

2.1 라그랑지안 입자 모델

라그랑지안 모델은 방출된 가스를 입자로 취급하여 방출지점부터 움직임을 추적한다.

모의 시간 ($t+dt$)때의 각 입자의 위치는

$$x_i(t+dt) = x_i(t) + [\bar{u}_i(t) + u_i'(t)]dt \quad (1)$$

($i = 1, 2, 3$)

로 주어진다. 여기서 $\bar{u}_i(t)$ 는 각 방향의 평균 속도를 나타내고 $u_i'(t)$ 는 각 방향의 난류속도를 나타낸다. 각 방향의 난류속도는 Langevin 방정식으로 산출한다.

Langevin 방정식은 다음과 같다.

$$du_i' = a_i dt + \sqrt{C_0 \epsilon} dW_i \quad (2)$$

여기서 a_i 는 가속항, ϵ 은 난류 운동에너지의 소산율, C_0 는 상수로 본 모델에서는 2.0을 사용하였고, dW_i 는 Gaussian 분포를 하는 무작위 경우의 수이다. 가속항 a_i 는 Fokker-Plank 방정식 (Thomson, 1987)을 이용하여 산출한다.

$$\frac{\partial a_i P_E}{\partial u_i'} = -\frac{\partial u_i' P_E}{\partial x_i} + \frac{1}{2} C_0 \epsilon \frac{\partial^2 P_E}{\partial u_i'^2} - \frac{\partial P_E}{\partial t} \quad (3)$$

위 식의 경계조건은 $|u_i'| \rightarrow \infty$ 일때, $a_i P_E \rightarrow \infty$ 이다. 각 변수들은 대기 안정도에 따라 좌우되므로 대기가 불안정 및 안정한 경우로 분리하여 산출한다. 여기서 P_E 는 난류를 표현하는 확률밀도 함수이다.

$$P_E = \frac{p}{\sqrt{2\pi\sigma_+}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{w' - m_+}{\sigma_+}\right)^2\right) + \frac{1-p}{\sqrt{2\pi\sigma_-}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{w' - m_-}{\sigma_-}\right)^2\right) \quad (4)$$

여기서, σ_+ 는 상승방향 표준편차, σ_- 는 하강방향 표준 편차, m_+ 는 상승방향 평균 속도 기준, m_- 는 하강방향 평균속도 기준이다.

2.2 중력의 효과

식 (1)은 고밀도 가스가 아닌 일반적인 가스에 타당하게 적용된다. 고밀도 가스의 확산을 예측하는데 매우 중요한 역할을 하는 중력의 효과를 설명하기 위해서는 속도의 수직 방향 성분에 중력에 의한 영향을 나타낼 수 있는 항을 추가하여야 한다. 우리는 3번째 속도항을 추가함으로써 중력에 의한 효과를 나타낼 수 있다.

$$Z(t+dt) = Z(t) + [\bar{w}(t) + w'(t) + w_b]dt \quad (5)$$

여기서 w_b 는 부력에 의한 속도를 나타내는 항이다. 부력에 연관된 하강 방향 가속도는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{dw_b}{dt} = \left[\frac{\rho_{air} - \rho_i}{\rho_i} \right] g - \frac{w_b}{T_L} \quad (6)$$

여기서, ρ_{air} 는 대기의 밀도, ρ_i 는 i 번째 입자의 혼합농도이고 g 는 중력 가속도이다. 식 (5)에서 보여지는 중력에 의한 연직방향 속도는 식(6)을 매 수치적으로 매 단계 적분하면서 얻어진다.

2.3 주변 공기와의 Entrainment

방출 위치에서는 i 번째 입자의 농도는 초기농도 ρ_i^0 와 같다. 하지만, 고밀도 가스와 주변 공기와의 밀도차이로 인하여 고밀도 입자가 확산하면서 주변의 공기와 혼합하게 된다. 이러한 과정이 진행되면서 고밀도 가스는 점점 농도가 낮아지게

되어 최종적으로는 주변공기와 농도가 같게된다.

매 단계에서 한 개의 입자가 가지고 있는 질량은 항상 같다. 공기와의 혼합으로 인해 전체 체적이 증가하면서 중력의 효과가 점점 줄어든다. 즉, 한 개의 입자는 항상 동일한 질량을 가지고 있고 이 입자가 점점 넓은 범위에 영향을 주기 때문에 확산이 진행될수록 중력의 효과가 감소하는 것이다.

일시에 방출된 고밀도 가스를 local grid를 사용하여 매 단계마다 격자를 구성한다. 각 방향으로 동일한 격자 수를 가지고 고밀도의 효과가 상쇄될 때까지 공기와의 혼합되면서 격자의 체적은 증가하게된다. 즉, 각 단계에서 각각의 입자의 개수와 격자의 체적을 초기값과 비교함으로써 공기의 혼합 정도를 계산하게 되는 것이다.

각 단계에서 입자의 격자의 농도는 다음과 같이 나타낸다.

$$\rho_k = \frac{N_k}{N_0} \frac{V_0}{V_k} (\rho_0 - \rho_{air}) + \rho_{air} \quad (7)$$

여기서 N_k 는 k번째 단계에서 입자의 격자 안의 입자의 개수, N_0 는 방출지점에서 격자 안의 입자의 개수, V_k 는 k번째 단계에서 입자의 격자 체적이고 V_0 는 방출지점에서 격자 체적을 나타낸다.

매 단계에서 Entrainment된 입자들의 농도는 먼저 각 격자의 농도는 주변 6개의 격자와의 평균값을 가지고 각 입자의 농도는 내삽법에 의해 결정된다.

2.4 계산 격자 구성

사고가 일어나 위험물질이 누출되었을 경우 순간적인 방출은 매우 커다란 체적을 가지고있고 초기 밀도는 방출 물질의 밀도와 같다. 확산 계산을 위하여 3차원 바람장에 대한 격자가 이미 존재한다. 고밀도 가스의 경우 중력과 주변공기와의 혼합 현상이 확산에 매우 중요한 역할을 한다. 모든 입자를 다 고려하는 것은 아니고 가스의 농도가 공기 농도보다 0.0001배 이상의 값을 갖는 입자에 한하여 또 다른 격자를 구성하여 혼합정도 및 혼합정도에 따른 중력의 효과를 계산한다.

2.5 농도 계산

각 격자점 또는 입자의 지점에서의 오염농도 $C(x,y,z)$ 는 아래의 2가지 방법을 구한다.

2.5.1 격자 안에 존재하는 입자의 기여량의 합
격자점 또는 지점을 중심으로한 box 안(크기 = $\Delta x \Delta y \Delta z$)에 들어있는 입자의 농도 기여량의 합으로 산출한다. 농도 산출식은 다음과 같다

$$\Delta c = \frac{\Delta m}{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad (8)$$

여기서 $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 는 box dimension 이고 Δm 은 입자의 질량이다.

2.5.2 Parpuff 접근 방법

격자점 또는 입자의 지점에서의 오염 농도는 격자점을 중심으로 하여 반경 $r = 2.5 \sigma_y$, 높이 Δz 에 포함되어있는 모든 입자의 기여도의 합으로 농도를 산출한다.

$$\Delta c = \frac{\Delta m}{2\pi\sigma_y^2 \Delta z} \exp[-0.5(\frac{r}{\sigma_y})^2] \quad (9)$$

$$\sigma_y^2(t + \Delta t) = \sigma_y^2(t) +$$

$$2\sigma_u^2 T_{L,u} (1 - \exp[-\frac{(t + \Delta t/2)}{T_{L,u}}]) \Delta t \quad (10)$$

여기서, σ_y 는 표준편차이다.

3. 결과 및 고찰

3.1 밀도 계산의 정확성 조사

우선 균질 조건에 대하여 중력의 효과를 고려하지 않은 상태에서 확산 모델에 의해 발생하는 농도의 불균질성을 조사하였다.

위험물질이 방출되었을 때, 단위 체적당 얼마나 많은 입자들을 분포시켜야 하는지, 제어체적을 얼마나 해야 신뢰할만한 예측이 가능한지 결정하기 위하여 단위체적과 제어체적을 변화시켜가면서 오차를 계산하였다. 결과는 그림 1과 같다. 가로축은 1m³당 입자의 개수이고 세로축은 제어체적은 부피이다.

처음에는 각각의 격자에 입자들이 균일하게 분포하나 고밀도 가스가 주변공기와 혼합이 되면 가스 덩어리의 체적이 점점 증가하게 된다. 우리 모델은 고밀도 가스가 분포되어있는 범위를 항상 균일한 개수의 격자로 구분하여 체적과 입자수의 관계로써 공기와 혼합 정도를 계산한다.

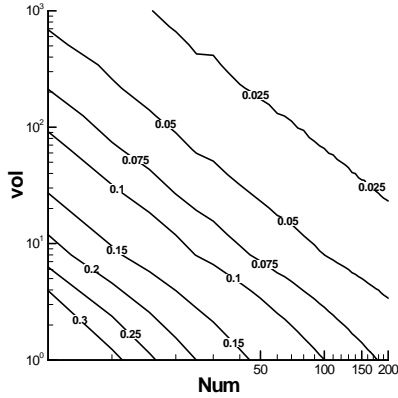


Fig. 1 Error rate between Particle numbers and Control Volume of each grid point

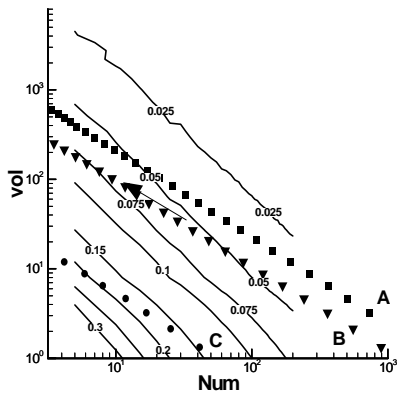


Fig. 2 Particle numbers and Control Volume's change of each grid point during the calculation

고밀도 가스는 바람에 의해 이동하고 주변 공기와의 혼합하여 제어 체적이 변하기 때문에 고밀도 가스의 확산을 계산하기 위해서 매 단계마다 새로운 격자를 구성하여 공기와의 혼합정도 및 중력의 영향을 계산하였다. 고밀도 가스 덩어리의 외곽부분은 공기와의 혼합이 매우 활발하기 때문에 공기와의 혼합 정도가 높고 중심부에서는 공기와의 혼합이 거의 일어나지 않는다.

시간이 흐르면서 계산 격자의 체적과 격자 안에 존재하는 입자의 개수는 변한다. 확산이 계산되면서 격자의 체적과 입자수의 변화를 그림2에 나타내었다. 그림에서 볼 수 있듯이 중심부근에 존재하는 격자에서는 오차가 적고 바깥쪽은 오차가 상대적으로 큰 것을 확인할 수 있다. 또한, 각

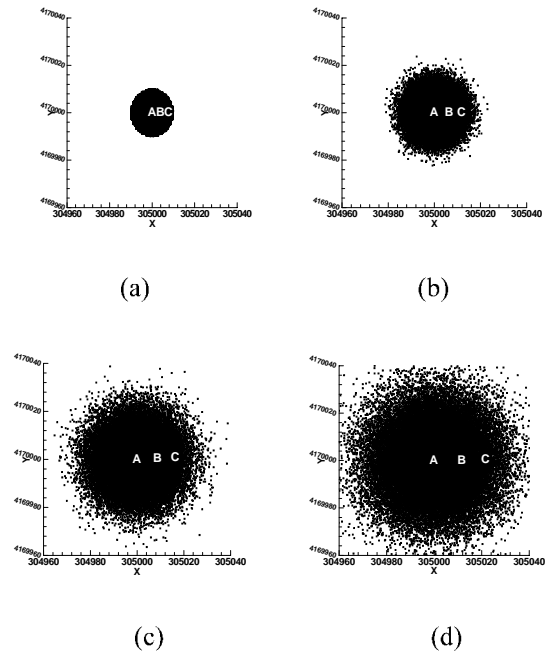


Fig. 3 The position of observed point

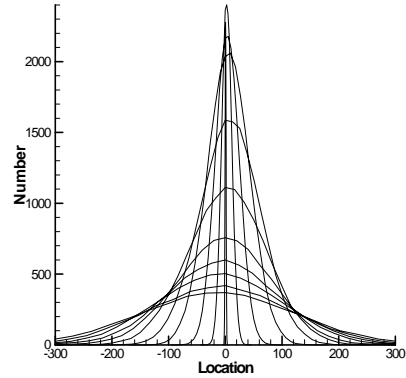


Fig. 4 Dense Particle's distribution shape of some time steps

각 단계에서 격자의 오차정도는 변화가 크지 않고 일정하게 유지된다는 것을 확인할 수 있다.

그림3은 그림2에서 A,B,C로 표시한 관측 지점들을 나타낸다. 그림3은 수평 방향을 나타낸 것으로 그림과 같이 주변공기와 혼합되면서 제어체적과 제어체적 안에 존재하는 입자의 수는 그림2에서 나타낸 그래프를 따라서 변한다.

그림4에서 볼 수 있듯이 시간이 흘러가도 확산 계산을 위해 구성한 격자에 존재하는 입자의 분포 형태는 가우시안 분포 형태를 나타낸다.

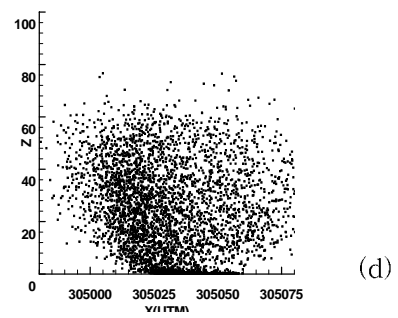
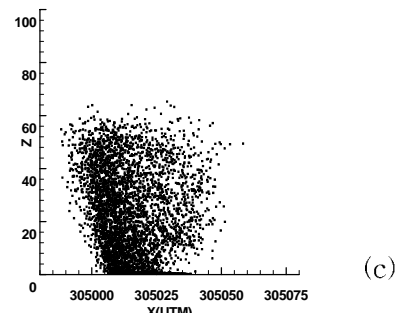
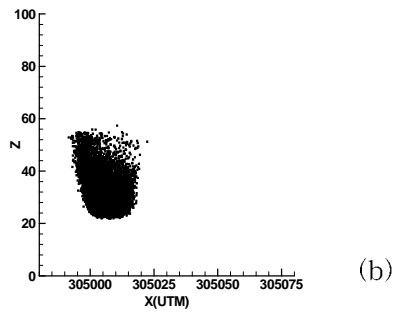
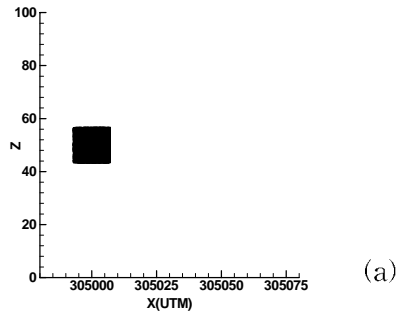


Fig. 5 Instantaneous position of the dense gas particles in the X-Z plane, at (a) 0s, (b) 3s, (c) 10s and (d) 20s after release.

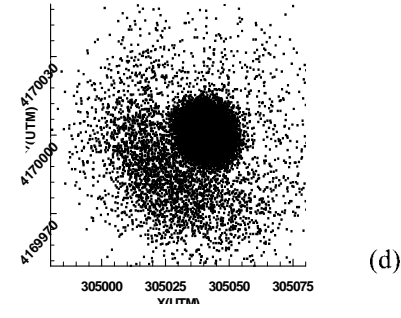
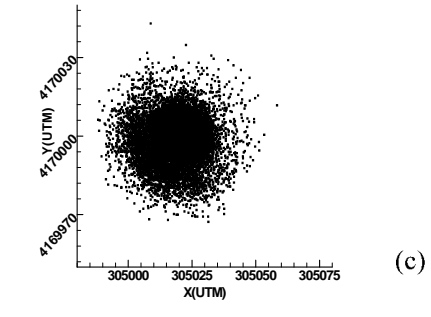
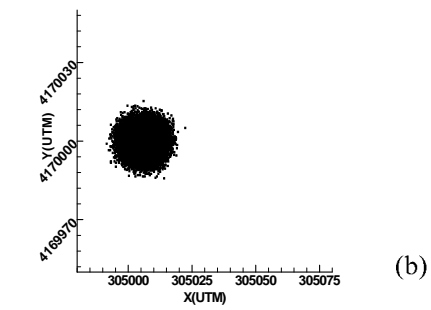
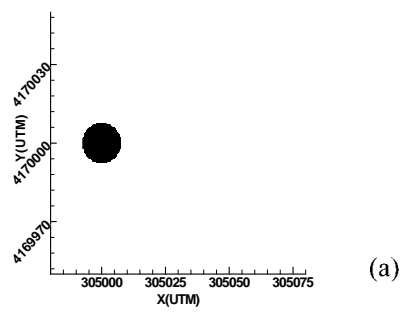


Fig. 6 Instantaneous position of the dense gas particles in the X-Y plane, at (a) 0s, (b) 3s, (c) 10s and (d) 20s after release.

3.2 고밀도 가스의 확산

부력의 영향을 받지 않는 가스와는 다르게 고밀도 가스는 중력의 영향을 받아서 아래방향으로 하강가속도를 받는다. 중력과 주변공기와의 혼합 효과를 고려하여 계산된 입자의 움직임을 나타내었다. 공기의 밀도를 1.0으로 하였을 때 방출된 가스의 농도를 공기의 1.63배로 하고 방출형태는 지름이 14 μ m이고 높이가 13m인 원통형이다. 방출 높이는 50m이다. 바람의 속도는 X 방향으로 2m/s 이다.

고밀도 입자의 시간에 따른 수직방향 움직임은 그림 5에 수평방향 움직임은 그림 6에 나타내었다. 그림에서 볼 수 있듯이 고밀도 가스는 수직 방향으로 아래방향 가속도를 받기 때문에 지표면으로 가라앉는 것을 확인할 수 있다. 가스 덩어리 주변의 입자는 공기와 혼합되어 공기 입자와 더 이상 고밀도 가스가 아닌 일반적인 입자의 움직임을 보인다.

4. 결 론

고농도 가스가 대기에 방출되었을 경우 위험 범위와 정도를 좀더 정확하게 예측하기 위하여 고밀도 가스의 확산이 지금까지 연구되어진 확산 모델과 다른 점인 중력의 효과와 주변 공기와의 혼합 효과를 중점으로 취급하였다. 현재까지는 주로 이용된 가우시안 모델과 Puff 모델에 비해 우리나라와 같은 복잡한 지형에 더 적합한 라그랑지안 입자모델을 개발함으로써 좀더 정확한 예측이 가능하고 앞으로 응급한 상황이 발생되었을 경우에 본 모델이 좀더 효과적이고 정확한 계산을 하는데 사용될 수 있으리라 생각된다.

참고문헌

(1) Caughey, S. J., Wynggard, J. C. and Kaimal, J. C., 1979, "Turbulence in the evolving stable boundary layer," *J. Atmospheric Science*, Vol. 36, pp. 1041~1052.
 (2) Gogan, J. L., 1985, "Monte Carlo Simulation of Buoyant Dispersion," *Atmospheric environment*, Vol. 19, pp. 867~878.

(3) Gopalakrishnan, S. G. and Sharan, M., 1997, "A Lagrangian Particle model for Marginally Heavy Gas Dispersion," *Atmospheric environment*, Vol. 30, pp. 3369~3382.
 (4) Hurley, P. J., and Manins, P., 1995, "Plume rise and enhanced dispersion in LADM," *CSIRO Division of Atmospheric Research ECRU Technical Note*, No. 14.
 (5) Hurley, P.J. and Manins, P., 1995, "Meteorological modelling on high ozone days in Perth, Western Australia," *J. of Applied Meteor.*, Vol. 34, pp. 1643~1652.
 (6) Hurley, P. J., and Physick, P., 1993b, "Lagrangian particle modelling of buoyant point sources-Plume rise and entrapment in convective conditions," *Atmos. Environ.*, Vol. 27A, pp 1579~1584.
 (7) Hurley, P. J., and Physick, P., 1997, "LADM_P03-Version 03 of LADM's particle model," *CSIRO Division of Atmospheric Research ECRU Technical Note*, No. 11.
 (8) Mohan, M., Panwar, T. S. and Singh, M. P., 1994, "Development of Dense Gas Dispersion Model For Emergency Preparedness," *Atmospheric Environment* Vol. 29, pp. 2075~2087.
 (9) Niewstadt, F. T. M., 1984, "The turbulent structure of the stable, nocturnal boundary layer," *J. Atmos. Sci.*, Vol. 41, pp. 2202~2216.
 (10) Physick, W., 1996, "LADM_P02-Version 02 of LADM's particle model," *CSIRO Division of Atmospheric Research ECRU Technical Note*, No. 10.
 (11) Sykes, R. I., Cerasoil, C. P. and Henn, D. S., 1999, "The Representation of dynamic flow effects in a Lagrangian puff dispersion model." *Journal of Hazardous materials*, Vol. A:(64), pp. 223~247.
 (12) Thomson, D. J., 1987, "Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows," *J. Fluid Mech.*, Vol. 180, pp. 529~556.