

회의실 카페트에서 방출되는 Ethylbenzene과 1, 2, 3-Trimethylbenzene의 거동특성에 관한 수치해석적 연구

이 창근[†], 정진, 김창녕^{*}

경희대학교 대학원 기계공학과, ^{*}경희대학교 테크노공학대학

A Numerical Study on the Behavior Characteristics of Ethylbenzene and 1, 2, 3-Trimethylbenzene in a Conference Room

Chang Geun Lee[†], Jin Jeong, Chang Nyung Kim^{*}

Department of Mechanical Engineering, Graduate School, Kyunghee University, Yongin 449-701, Korea

^{*}College of Advanced Technology, Kyunghee University, Yongin 449-701, Korea

(Received August 16, 2005; revision received December 27, 2005)

ABSTRACT: This study has been conducted to quantify the emissions of Volatile Organic Compounds (VOCs) in a conference room. The carpet has emitted a variety of VOCs, but in this study, 2 VOCs compounds have been considered: Ethylbenzene and 1, 2, 3-Trimethylbenzene. In this study, a three dimensional numerical analysis has been carried out to investigate the emission and behavior characteristics of Ethylbenzene and 1, 2, 3-Trimethylbenzene emitted from the carpet in the conference room. The mass diffusion coefficient and the initial concentrations of VOCs in the carpet have been obtained from experimental data with non-linear regression. It has been found that the concentrations and emission factors of VOCs have exponentially decayed with time and that the concentration gradients and emission factors of VOCs are different from each other for various components. This study may supply fundamental understandings for the emission and behavior characteristics of VOCs.

Key words: Volatile organic compounds(VOCs, 휘발성 유기화합물), Emission factor(방출계수), Indoor air quality(IAQ, 실내공기질)

기 호 설 명

- A : 방출원의 면적 [m^2]
- C : 농도 [$\mu g/m^3$]
- EF : 방출계수 [$\mu g/(m^2 \cdot h)$]
- ER : 방출률 [$\mu g/h$]
- k : 일차 감소율 상수 [1/h]

- L : 부하율 [m^2/m^3]
- N : 공기교환율 [1/h]

하첨자

- A : 공기층(air phase)
- 0 : 초기값

[†] Corresponding author

Tel.: +82-31-201-2069; fax: +82-31-202-9715

E-mail address: cnkim@khu.ac.kr

1. 서 론

경제성장과 더불어 에너지절약을 위하여 실내공

간이 점차 밀폐되어 실내오염이라는 새로운 환경 문제가 대두되게 되었다. 특히 하루 중의 많은 시간을 실내에서 보내고 있는 현대인들에게 휘발성 유기화합물(Volatile Organic Compounds, 이하 VOCs)로 인한 실내공기질(Indoor Air Quality, 이하 IAQ라 칭함)의 저하는 건강에 부정적인 영향을 미치게 되었다.

최근 이러한 IAQ를 저하시키는 주요한 오염물질 중 VOCs에 대한 관심이 높아지고 있다. 실내 내장재에서 방출되는 VOCs 물질에 관한 기존의 연구를 살펴보면 다음과 같다. Molhave⁽¹⁾는 비산업 빌딩에서 50~300가지의 VOCs 물질들이 존재한다고 보고하였으며, Sack et al.⁽²⁾은 1,159가지의 실내물질들에서 31가지의 VOCs가 방출되어 실내를 오염시키는 것으로 보고한 바 있다. Gue and Tichenor⁽³⁾은 Fick의 확산식에 기반을 둔 물리적 모델을 개발하였으며, Spark et al.⁽⁴⁾과 Guo et al.^(5,6)은 주위의 유체 유동조건에 바탕을 둔 기체상의 물질전달을 평가하는 방법을 제시하였다. Kim et al.⁽⁷⁾은 챔버실험을 통하여 가구에서 방출되는 VOCs와 포름알데히드의 농도를 측정하였다.

기존 연구의 대부분은 실험을 통하여 실내 내장재의 VOCs 방출특성에 대하여 연구하였으며, 수치해석을 이용한 연구에서는 실험데이터를 고려하지 않고 1차원 혹은 2차원 형태의 단순한 문제로 해석되었기 때문에 실제적으로 사용하기에는 어려운 점이 많다. 따라서 실내공간에서의 VOCs에 관한 거동특성을 정확하게 파악하기 위해서는 실험결과를 바탕으로 하는 수치해석이 필요하다.

본 연구에서는 Shin et al.⁽⁸⁾의 실험결과를 바탕으로 농도가 측정된 VOCs 성분 중 그 농도가 비교적 높게 나타난 Ethylbenzene과 1,2,3-Trimethylbenzene을 선택하여 회의실 카페트에서 방출되는 이들 물질에 대한 농도와 총방출질량을 산출하였으며, 이를 정량적으로 평가하여 VOCs의 방출특성을 확인하고자 한다. 방출계수산출은 ASTM D5116-97⁽⁹⁾에 제시된 방법을 기준으로 수행하였으며, 이러한 방출계수를 바탕으로 3차원 수치해

석을 수행하여 실내공간에서의 VOCs 거동특성을 파악하고자 한다.

2. 연구방법

2.1 방출계수

방출률(emission rate)과 방출계수(emission factor)는 카페트의 VOCs 방출특성을 나타내기 위하여 일반적으로 사용되는 척도이다. 방출률과 방출계수 사이의 관계는 식(1)과 같다.

$$ER = A \cdot (EF) \quad (1)$$

여기서, ER 은 방출률을 나타내며, A 는 방출원의 면적, EF 는 방출계수를 나타낸다.

카페트의 VOCs 방출경향을 지수함수 형태로 표현하는 것이 가능하므로, 카페트에서 방출되는 VOCs는 지수함수를 이용한 일차감소방출원(first order decay source)이라 가정할 수 있다. 이러한 가정 하에 방출계수를 산출하는 방법이 일차감소 모델이며, 방출계수는 식(2)와 같다.

$$EF = (EF_0)e^{-k \cdot t} \quad (2)$$

여기서, EF_0 는 초기 방출계수를 나타내며, k 는 일차감소율 상수, t 는 시간을 나타낸다.

방출계수가 산출되기 위해서는 식(2)에서 EF_0 와 k 가 결정되어야 한다. 이를 위해서 실내 내장재의 VOCs 방출에 대한 챔버모델(corresponding chamber model)인 식(3)의 형태로 각 성분의 농도에 대하여 비선형회귀분석이 실시되면 EF_0 와 k 가 얻어진다. 이렇게 산출된 EF_0 와 k 를 Table 1에 나타내었다.⁽⁹⁾

$$C_A = \frac{L(EF_0)(e^{-k \cdot t} - e^{-N \cdot t})}{N - k} \quad (3)$$

여기서, C_A 는 공기층(air phase) 농도, L 은 부하

Table 1 Coefficient for 1st order method⁽⁸⁾

Substance name	EF_0 [$\mu\text{g m}^{-2} \text{h}^{-1}$]	k	R^2
Ethylbenzene	6.6869	0.1285	0.9987
1, 2, 3-Trimethylbenzene	5.2476	0.1933	0.9971

을, 그리고 N 은 공기 교환율을 나타낸다.

일차감소모델에서는 식(3)의 비선형회귀분석과정에서 결정계수 R^2 가 고려되는데, 모든 성분들에 대해 결정계수가 0.99 이상으로 높아 본 실험 결과가 위의 일차감소모델로 잘 설명됨을 보이고 있다.

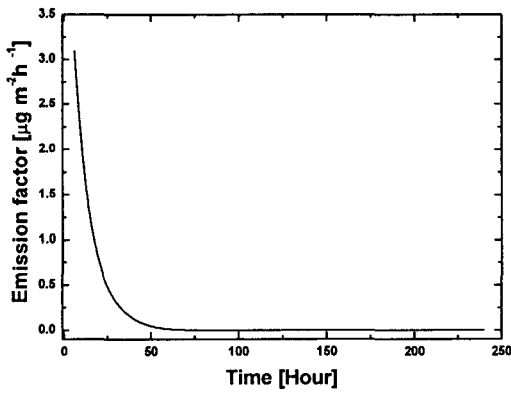
2.2 VOCs의 방출특성

방출계수는 방출실험챔버 출구에서 측정된 VOCs 농도로부터 산출되므로, 농도변화는 방출계수 산출에 직접적으로 영향을 미친다. 따라서, 전반적인 방출계수의 경향 역시 농도변화의 특성과 유사하게 지수 감소하는 경향을 나타내고 있다. 이러한 방출특성은 각 VOCs 물질의 일차감소모델 방출계수(EF)를 통하여 나타낼 수 있다. Table 1에

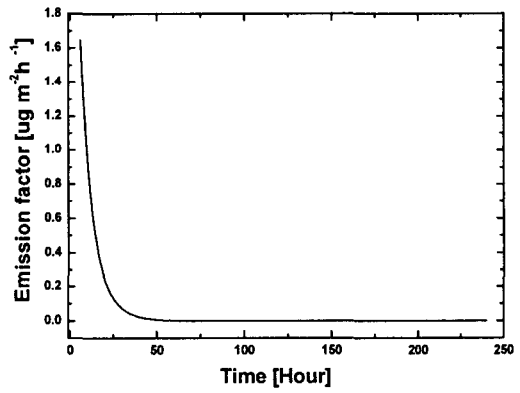
서 제시된 EF_0 와 k 값을 이용하여 시간에 따른 일차감소모델에서의 방출계수를 Fig. 1에 나타내었다. 초기에 높은 농도로 방출되는 Ethylbenzene과 1,2,3-Trimethylbenzene의 경우 6시간이 경과할 때에 방출계수값이 각각 $3.093 [\mu\text{g m}^{-2} \text{h}^{-1}]$, $1.6454 [\mu\text{g m}^{-2} \text{h}^{-1}]$ 이었다.

2.3 수치해석

일차감소모델로 산출된 방출계수를 이용하여 실내공간에서의 VOCs의 농도특성을 상용 CFD 코드인 FLUENT를 이용하여 해석하였다. Fig. 2에 나타낸 바와 같이, 천정취출방식을 사용하는 사무실의 형상에 기초하여 가로 4.5 m, 세로 3.3 m, 높이 2.7 m의 형상을 모델링하였다. 천정부 취출구의 크기는 각각 가로 0.2 m, 세로 0.2 m이며 벽



(a) Ethylbenzene



(b) 1,2,3-Trimethylbenzene

Fig. 1 Emission factor of each VOC for first order decay model.

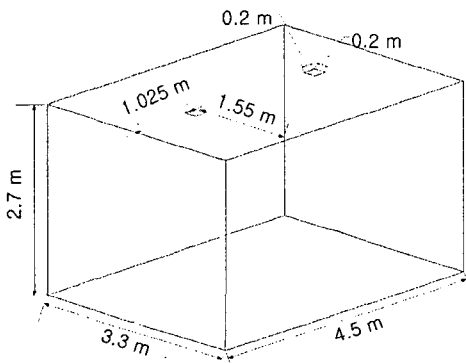


Fig. 2 Schematic diagram of the room.

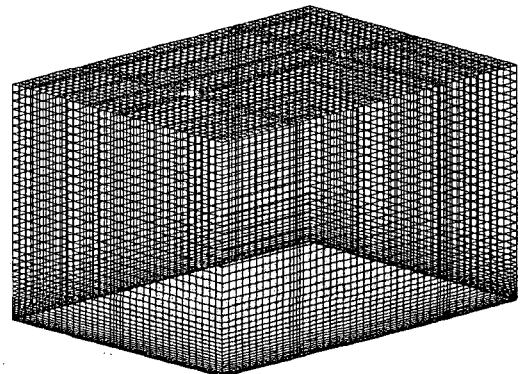


Fig. 3 Grid system for the room.

면에서 취출구까지의 거리는 각각 1.025 m, 1.55 m이며, 천정의 왼쪽에 공기유입구가, 오른쪽에 공기유출구가 각각 설치되어 있다. 해석에 사용된 격자계는 약 86,000개의 정렬격자로 구성되었으며, 이를 Fig. 3에 나타내었다. 수치해석을 수행하면서 사용된 시간간격 Δt 는 초기 24시간 동안은 1 초에서 진행되었으며 시간이 진행됨에 따라 점차 증가시켰다.

공기영역의 유체 유동을 지배하는 방정식인 연속방정식, 운동량방정식 및 공기영역의 VOCs 전달현상을 지배하는 물질전달방정식이 아래에 제시되었다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\tau_{ij}) \quad (5)$$

식(5)의 τ_{ijk} 는 전단변형률을 나타내며 식(6)으로 표현된다.

$$\tau_{ij} = \mu(\nabla \vec{v}) \quad (6)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla C_A = D_A \nabla^2 C_A \quad (7)$$

여기서, C_A 는 공기층(air phase) 농도를 나타내며, D_A 는 공기층(air phase)에서의 휘발성 유기화합물의 확산계수를 나타낸다.

공기영역의 농도 초기조건은 "0"으로 설정하였다. 이러한 조건이 식(8)에 제시되었다.

$$C_A(x_i, 0) = 0 \quad (8)$$

해석영역 벽면의 유동 경계조건을 위하여 점착조건이 사용되었으며, 농도 경계조건을 위해서 벽면을 통한 VOCs의 유출입이 없는 조건인 식(9)가 사용되었다.

$$\frac{\partial C_{A,c}}{\partial x_i} = 0 \quad (9)$$

입구를 통한 공기유입량은 해석영역이 Shin et al.⁽⁸⁾의 실험과 동일한 공기교환율을 갖도록 설정

하였으며(공기교환율 $1 [h^{-1}]$, 질량유량 $0.005433 [kg s^{-1}]$), 출구는 대기압 상태로 주어졌다. 또한 입구를 통한 유입공기에 대해 $C_A=0$ 의 조건이 사용되었고, 출구를 통한 유출 공기에 대해서는 $\partial C_A / \partial y = 0$ 의 조건이 사용되었다.

3. 연구결과 및 고찰

3.1 실내공간에서의 공기 유동특성

실험을 통하여 산출된 데이터를 바탕으로 Fig. 2에 제시된 형태의 실내공간에 대하여 수치해석을 수행하여 유동특성을 파악하였다. Fig. 4에 제시된 바와 같이 왼쪽 상단부에서 유입된 공기는 바닥을 향해 하강하여 좌측 하단부와 우측 하단부로 바닥 면을 따라 유동하며 출구 쪽으로 상승된다. 출구 쪽으로 상승된 공기의 일부는 우측 상단부에서 좌측 상단부로 유동하며 나머지는 출구로 배출된다. 또한, 정체영역을 의미하는 재순환영역들이 각 모서리 부분에서는 작은 규모로, 중앙부분에서는 큰 규모로 형성되었다.

3.2 실내공간에서의 VOCs 거동특성

실내공간에서의 VOCs 거동특성을 파악하기 위해 모델링의 결과로 얻은 데이터를 이용하여 Ethylbenzene과 1, 2, 3-Trimethylbenzene의 시간에 따른 농도분포에 대해 수치 시뮬레이션을 수행하였다.

Figs. 5~6에 나타난 바와 같이, 시간이 진행될

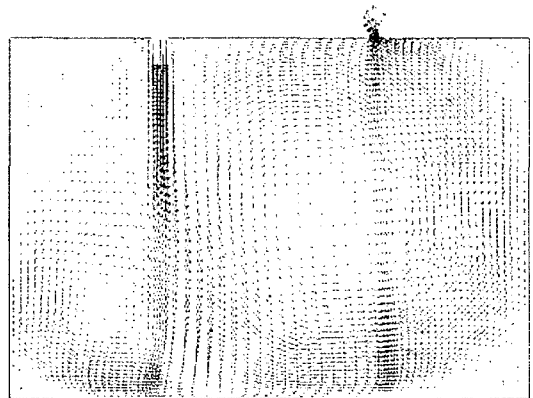


Fig. 4 Velocity vectors in the middle plane of the room considered ($t=24$ h).

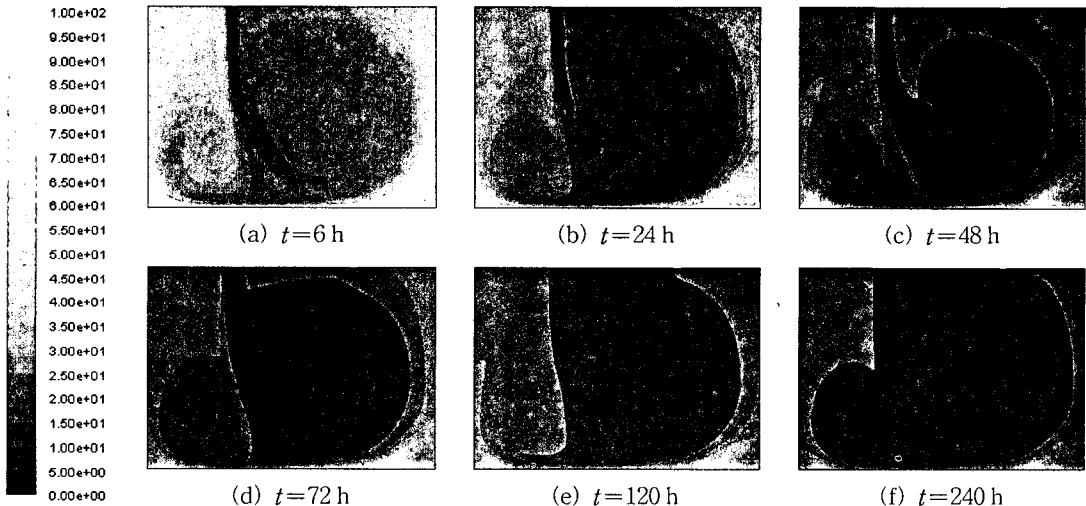


Fig. 5 Transient concentration of Ethylbenzene in a middle plane of the room considered ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

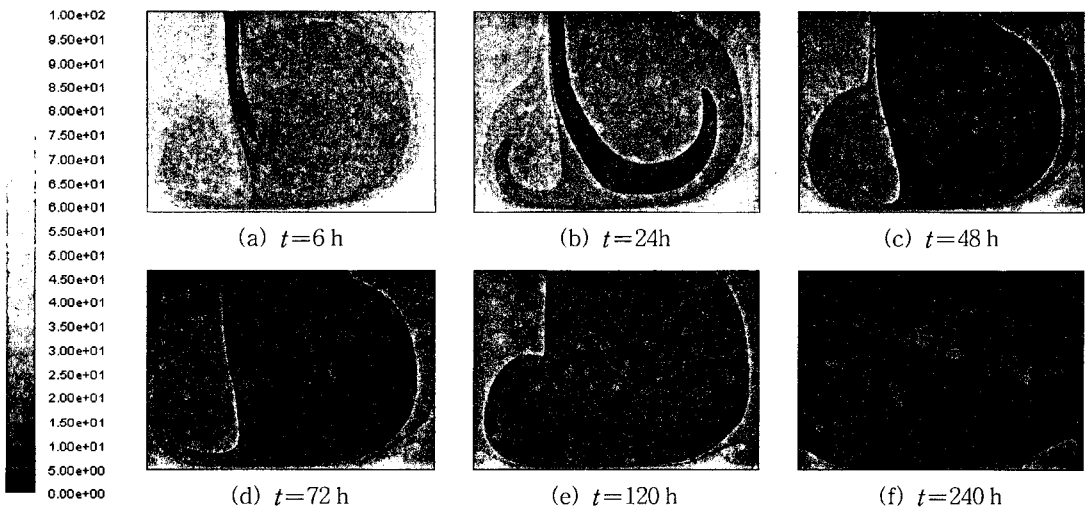
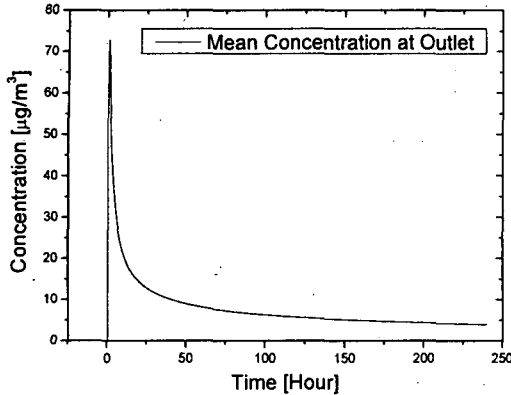


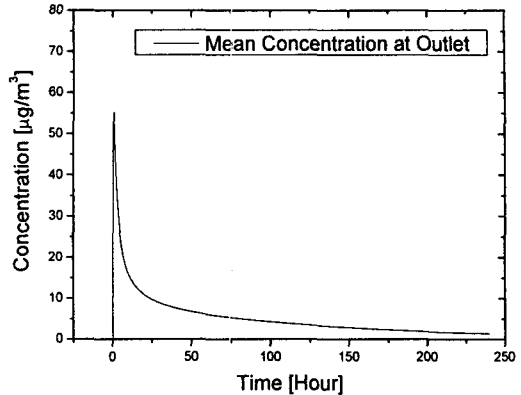
Fig. 6 Transient concentration of 1,2,3-Trimethylbenzene in the middle plane of the room considered ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

수록 실내공간 내의 두 성분의 저농도 영역은 확장되고 바닥면 근처에서는 상대적으로 고농도 영역이 나타난다. 시뮬레이션 초기에 1,2,3-Trimethylbenzene에 비해 높은 농도를 나타내는 Ethylbenzene은 72시간 이후로는 농도가 급감하였으며 240시간이 경과할 때에 실내공간의 구석부분을 제외한 영역에서 매우 낮은 농도분포를 보이고 있다. 그러나 초기에 Ethylbenzene보다 낮은 농도분포를 보인 1,2,3-Trimethylbenzene은 240시간

이 경과할 때에 바닥면 좌측 하단과 우측 하단의 정체영역에서 비교적 낮은 농도를 나타내었으며, 실내의 중앙부에서는 매우 낮은 농도를 보이고 있다. 이러한 결과는 Lee et al.⁽¹⁰⁾ Murakami et al.⁽¹¹⁾의 연구결과와 유사한 경향을 보이고 있다. 또한, Fig. 7에 나타난 바와 같이, Ethylbenzene과 1,2,3-Trimethylbenzene의 시간에 따른 출구에서의 평균 농도는 지수함수 형태로 감소하는 것으로 나타났다. 이는 실험에서의 방출특성 형태와 거



(a) Ethylbenzene



(b) 1,2,3-Trimethylbenzene

Fig. 7 Concentrations at the outlet in the room.

의 유사한 결과를 보여준다.⁽⁸⁾

4. 결 론

본 연구에서는 카페트에서 방출되는 VOCs의 방출특성을 파악하기 위한 실험을 통하여 얻어진 VOCs의 방출특성으로부터 비선형 회귀분석을 실시하여 Ethylbenzene과 1,2,3-Trimethylbenzene의 방출계수를 산출하였다. 또한 산출된 VOCs의 방출계수를 이용하여 실내공간에서 카페트로부터 방출되는 VOCs의 거동특성을 파악하기 위한 비정상 3차원 수치해석을 수행하였다.

카페트에서 방출되는 VOCs의 농도와 방출계수는 초기에 상대적으로 높은 값에서 시작되어 시간이 진행됨에 따라 점차 지수형태로 감소하였으며, 농도 및 방출계수의 감소경향은 각 성분마다 차이가 있음을 알 수 있었다. 또한, 실내공간에 대한 수치해석 결과를 살펴보면, 입구와 출구를 통한 공기환기 효과로 인하여 시간이 진행될수록 카페트에서 방출되는 VOCs 물질들의 실내공간에서의 농도는 낮아진다. 초기에 상대적으로 높은 농도분포를 보이던 Ethylbenzene의 경우 240시간이 경과할 때 구석을 제외한 영역에서 매우 낮은 농도분포를 보이고 있으며, 초기에 Ethylbenzene에 비해 낮은 농도분포를 보이던 1,2,3-Trimethylbenzene의 경우 120시간이 경과한 이후에는 농도가 급격히 감소하여 240시간이 경과할 때 바닥면 부근에서만 비교적 낮은 농도분포를 보이고 실내의 중앙부분에서는 매우 낮은 농도가 나타났다.

본 논문의 연구방법을 통하여 다른 실내 내장재에 대한 방출특성이 연구되어야 할 것이며, 본 연구결과는 효과적인 실내공기질 개선방안의 수립에 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

후 기

이 논문은 2003년도 한국학술진흥재단(과제번호 : KRF-2003-D00015)의 지원에 의하여 연구되었으며, 이에 감사 드립니다.

참고문헌

1. Molhave, L., 1990, Volatile organic compounds, indoor air quality and health, Proceeding of the Fifth International Conference on Indoor Air Quality and Climate, Toronto Canada, Vol. 5, pp.15-33.
2. Sack, T. M., Steele, D. H., Hammerstrom, K. and Remmers, J., 1992, A survey of household products for volatile organic compounds, Atmospheric Environmental, Vol. 26, No. 6, pp. 1063-1070.
3. Gue, Z. and Tichenor, B. A., 1992, Proceeding of EPA/ AWMA Symposium, Durham, NC.
4. Sparks, L. E., Tichenor, B. A., Chang, J. C. S. and Guo, Z., 1996, Indoor Air, Vol. 6, pp. 31-40.
5. Guo, Z., Sparks, L. E., Tichenor, B. A. and

- Chang, J. C. S., 1998, Atmospheric Environment, Vol. 32, pp. 231-237.
6. Guo, Z., Chang, J. C. S., Sparks, L. E. and Fortmann, R. C., 1999, Atmospheric Environment, Vol. 33, pp. 1205-1215.
 7. Kim, S. D., Seo, B. R. and Yoon, J. S., 2001, A study on volatile organic compounds (VOCs) and formaldehyde (HCHO) emission characteristics from furniture, Proceeding of the 32nd Meeting of KOSAE, pp. 163-164.
 8. Shin, D. M., Kim, C. N. and Kim, D. S., 2002, Emission characteristics of volatile organic compounds (VOCs) from a carpet, Korean Journal of Air-Conditioning and Refrigeration Engineering, Vol. 15, pp. 177-178.
 9. ASTM D5116-97, 1997, Standard guide for small-scale environmental chamber determination of organic emissions from indoor materials/products, ASTM D5116-97, ASTM (American Society for Testing and Materials).
 10. Lee, S. C., Choi, C. R. and Kim, C. N., 2001, Mathematical modeling and analysis on the behavior of VOC, Korean Journal of Air-Conditioning and Refrigeration Engineering, Vol. 7, pp. 627-636.
 11. Murakami, S., Kato, S., Kondo, Y., Ito, K. and Yamamoto, A., 2000, VOC Proceedings of the Seventh International Conference on Air Distribution in Rooms, Vol. 1, pp. 473-178.
 12. USEPA (United States Environmental Protection Agency), 1995, Inside Story: A Guide to Indoor Air Quality, EPA 402-K-93-007, USEPA, Washington DC.
 13. USEPA (United States Environmental Protection Agency), 1991, Sick Building Syndrome, EPA 402-F-94-004, USEPA, Washington DC.