

화학장치설비의 유해독성가스 누출에 대한 분산모델링 방법론

송덕만
울산대학교 화학공학과

Dispersion Modeling Methodology for Hazardous/Toxic Gas Releases from Chemical Plant Facilities

D.M. Song
Dept. of Chem. Eng., University of Ulsan

1. 서론

대부분의 화학공장에서의 누출사고는 화학장치설비중 저장탱크나 파이프라인의 파손에 의하여 내부 물질이 누출되는 경우이며, 유해독성가스의 누출은 누출가스가 비가연성인 경우 화재/폭발 위험은 없지만 장시간 대량으로 누출되는 경우 풍하방향으로의 분산 및 확산에 의하여 누출원 주위에 독성피해를 주는 유해위험성을 내포하고 있다.

본 연구는 화학장치설비중 저장탱크나 파이프라인에서 누출된 유해독성가스인 염소의 풍하거리에 따른 10분 평균, 30분 평균 및 1시간 평균 최대 지표면 농도를 산출하여 염소가스의 법적 규정농도인 IDLH 및 ERPG-3 농도들과 비교함으로써 유해위험거리 (Hazard Distance) 또는 독성완충거리 (Toxic Buffer Distance)를 정량적으로 예측하는 분산모델링 방법론을 개발하고자 수행되었다.

2. 이론 : 분산모델링 방법론의 개발

2-1. 유해독성가스 누출의 Threshold 양과 한계농도

USEPA의 유해독성가스 누출에 따른 염소 및 암모니아의 대기중 독성농도기준 및 Threshold 양을 요약하여 다음의 Table 1에 비교하여 나타내었다.

Table 1. The USEPA's Toxicity and Threshold Quantity for Cl₂ and NH₃.

Chemical	Toxicity (ppm)					Threshold Quantity lbs (kg)
	STEL	IDLH	ERPG-2	ERPG-3	LC ₅₀	
Ammonia	35	500	200	1,000	3,000/5min	10,000 (4,540)
Chlorine	1	30	3	20	1,000/30min	2,500 (1,135)

(STEL : 15 min, IDLH : 30 min, ERPG : 1 hr)

유해위험거리 즉, 독성완충거리를 평가하기 위하여 최대농도, 평균농도, 증기 구름의 높이, 증기구름의 폭 등 증기구름의 특성을 사용하는데, 특히 이들 증기 구름의 특성중 최대농도가 가연성증기의 유해위험성을 평가하는데 있어서 가장 보편적으로 이용되고 있다. 유해위험성평가를 위한 독성농도기준은 IDLH 농도와 ERPG-3 농도가 추천되고 있는데, 특히 IDLH 농도를 사용하는 경우에는 안전인자를 고려하여 IDLH값을 10으로 나눈 값을 사용하도록 권고되고 있다.

2-2. 모델의 선정

분산모델링을 수행하기 위하여 스크리닝 절차 (Screening Procedure)로는 USEPA가 공인하는 TSCREEN 모델을, 보다 정교한 해석 (Refined Analysis)을 위하여 USEPA가 공인하는 모델들을 상용화한 Arthur D. Little, Inc.의 SuperChems™(V.2) 모델을 사용하였다.

2-3. 누출원 모델링 및 분산 모델링

유해독성물질의 누출에 대한 분산 모델링에서 첫 단계인 누출원 모델링은 누출원에서 유해독성물질의 대기중으로 누출되는 누출속도를 평가하며, 누출물의 상태(기상, 액상, 2상) 및 조건(온도, 압력), 누출물의 물리·화학적 특성, 지형 및 기상조건은에 따라 다양하게 수행될 수 있다. 유해독성물질인 염소증기가 수평 실린더형 저장탱크 (Horizontal Cylindrical Tank)로부터 2상 흐름 (Two-phase Flow)으로 연속누출 및 순간누출되는 경우의 분산모델링을 수행하였다.

2-3-1. TSCREEN Model

공기보다 무거운 가스의 연속누출이나 순간누출의 경우, TSCREEN 모델은 자체 프로그램 내에서 누출이 수직상승제트(Vertically-directed Jet)이면 RVD 모델을, 기타 다른 모든 유형의 누출에 대해서는 Britter-McQuaid (B-M) 모델을 사용한다. 한편, 누출물이 공기보다 가벼운 가스에 대해서는 TSCREEN Model은 연속누출의 경우에 대해서는 SCREEN Model을, 순간누출의 경우에 대해서는 PUFF Model을 사용한다.

분산모델링은 2개의 시나리오에 대하여 수행되었다 : SCENARIO 1은 저장탱크 (6.8 atm, 320 K)의 파열로 생긴 구멍(ϕ 2.8cm)을 통한 Cl_2 가스의 연속 및 순간누출 시나리오이며, SCENARIO 2는 압력이 $2.586 \times 10^6 Pa$ 에서 개방되도록 설계된 Pressure Relief Valve (ϕ 10.16cm)를 통한 포화 Cl_2 가스의 연속 및 순간누출 시나리오이다.

2-3-2. SuperChems™ Model

분산모델링에 필요한 시나리오, 누출원 모델, 분산모델에 필요한 입력자료들과 또한 IDLH 및 ERPG-3 독성농도와 관련된풍하거리에 따른 농도분포 및 증기 구름의 형상을 알아보기 위하여 가상적으로 선정한 세종류의 시나리오들에 대한 입력자료들을 요약하여 Table 3에 나타내었다.

Table 3. User Defined Inputs for Dispersion Modeling in SuperChems™

SCENARIO <i>Defined</i> INPUT				SOURCE TERM MODEL INPUT			
<ul style="list-style-type: none"> • Duration of Scenario (hours) : 0.167, 0.5, 1.0 • Ambient temperature, (K) : 287 • Ambient pressure, (Pa) : 101600 • Relative humidity, (%) : 66.6 • Roughness length (m) : 1, 3 • Wind speed, (m/s) : 2.14 • Wind speed reference height, (m) : 10 • Stability class (A=0/B=1/C=2/D=3/E=4/F=5) : 3 • Cloud cover, (%) : 40 • Vessel length (m) : 7.5 • Vessel Inside diameter (m) : 0.762 m • Limiting concentration (ppm) : 1, 20, 30 • Averaging time (s) : 600 • Receptor elevation (m) : 0.001 • Chemical Identification Number : 968 • Soluble in water? : N 				TWO-PHASE FLOW <ul style="list-style-type: none"> • Initial Temperature (K) : 290 • Initial Pressure (Pa) : 200000 			
				DISPERSION MODEL INPUT			
INSTANTANEOUS HEAVY GAS							
<ul style="list-style-type: none"> • Release temp. (K) : 353.5 • Chemical vapor to liquid ratio : 0.5 • Initial mass of chemical (kg) : 1135 • Initial height to radius ratio : 2 • Water vapor to liquid ratio : 0 • Limiting concentration (ppm) : 1, 20, 30 • Upper conc. limit(ppm) : 1000 							
CONTINUOUS HEAVY GAS							
<ul style="list-style-type: none"> • Release temp. (K) : 353.5 • Vapor to liquid molar ratio : 0.5 • Mass flow rate (kg/s) : 100 • Discharge duration (s) : 900, 1800, 3600 • Initial height to semi-width ratio : 2 • Water vapor to liquid molar ratio : 0 • Limiting concentration (ppm) : 1, 20, 30 							
Selected SCENARIO <i>Defined</i> INPUT							
SCENARIO	1	2	3				
Duration of Scenario (hours)	0.167	0.5	1.0				
Limiting concentration (ppm)	1	20	30				

3. 결과 및 고찰

3-1. TSCREEN Model

SCENARIO 1의 경우, 연속누출시 1-시간 평균 최대지표면 농도는 풍속 3 m/s일 때 풍하거리 50 m 지점에서 26,200 ppm, 순간누출시 1-시간 평균 최대지표면 농도는 풍속 3 m/s일 때 풍하거리 50 m, 100 m 지점에서 각각 30,000 및 8,280 ppm으로 산출되었다. SCENARIO 2의 경우, 풍속 1 m/s, 가장 불안정한 (A 등급) 대기안정도 조건에서 연속누출시 1-시간 평균 최대지표면 농도는 풍하거리 112.3 m 지점에서 201.4435 ppm, 순간누출시 1-시간 평균 최대지표면 농도는 풍하거리 112.3 m 지점에서 3,021.652 ppm으로 산출되었다.

3-2. SuperChems™ Model

저장탱크의 균열로 염소가 누출되는 가상적인 시나리오로부터 모델링을 수행한 결과는 Table 4~Table 5에 나타내었다.

분산모델링을 수행한 결과, 염소 공급물 1 kmol 당 증기의 분율은 0.017141, 액체공간의 질량 및 부피는 각각 1116 kg 및 0.7346 m³, 증기공간의 질량 및 부피는 각각 19.46 kg 및 2.917 m³ 로 산출되었다.

누출 염소증기와 대기와의 밀도차가 작게 되어 수동적분산 (Passive Dispersion)이 일어나는 전이지점이 산출되었다. 순간누출 및 연속누출의 경우에 있어서 수동적분산이 일어나는 전이지점에서의 누출 염소증기의 밀도는 각각 1.251 kg/m³, 1.257 kg/m³ 으로 산출되었다 (대기의 밀도=1.253 kg/m³).

Table 4. Modeling Results for Instantaneous Heavy Gas Dispersion

Scenario 1				Scenario 2				Scenario 3			
t (s)	C (ppm)	X (m)	R (m)	t (s)	C (ppm)	X (m)	R (m)	t (s)	C (ppm)	X (m)	R (m)
0	999900	0	3.226	0	999900	0	3.226	0	999900	0	3.226
24.6	117800	21.33	42.51	24.6	117800	21.33	42.51	24.6	117800	21.33	42.51
41.84	49296	35.66	57.11	41.84	49296	35.66	57.11	41.84	49296	35.66	57.11
51.53	30057	43.71	64.44	51.53	30057	43.71	64.44	51.53	30057	43.71	64.44
59.94	20244	50.76	70.43	59.94	20244	50.76	70.43	59.94	20244	50.76	70.43
66.99	15054	56.98	74.96	66.99	15054	56.98	74.96	66.99	15054	56.98	74.96
72.09	12357	61.69	77.97	72.09	12357	61.69	77.97	72.09	12357	61.69	77.97
77.52	10145	66.9	80.96	77.52	10145	66.9	80.96	77.52	10145	66.9	80.96
83.31	8330	72.66	83.93	83.31	8352	72.66	83.93	83.31	8352	72.66	83.93
83.31	8352	72.66	83.93	83.31	8330	72.66	83.93	83.31	8330	72.66	83.93
800.4	152.6	1607	154.7	258.1	488.6	446.8	93.22	292.7	431.6	520.8	96.59
1517	45.81	3142	203.7	432.9	301.9	820.9	96.24	502.2	263.9	969	102.0
2235	18.81	4676	241.8	607.8	217.6	1195	96.86	711.6	179.9	1417	104.7
2952	9.571	6211	268.2	782.6	157.7	1569	95.84	921	122.2	1865	105.6
3659	5.583	7745	282.7	957.4	114.4	1943	93.39	1130	84.32	2314	104.7
4386	3.57	9280	284.7	1132	84.06	2317	89.18	1340	59.84	2762	101.4
5103	2.438	10815	272.6	1307	63.02	2691	82.38	1549	43.77	3210	94.61
5820	1.748	12349	242.8	1482	48.25	3066	71.58	1759	32.92	3658	82.81
6537	1.302	13884	185.4	1657	37.70	3440	53.70	1968	25.39	4106	62.45
7254	1	15418	0	1831	30.00	3814	0	2178	20	4554	0

Table 5. Modeling Results for Continuous Heavy Gas Dispersion

Scenario 1				Scenario 2				Scenario 3			
t (s)	C (ppm)	X (m)	W (m)	t (s)	C(ppm)	X (m)	W (m)	t (s)	C (ppm)	X (m)	W (m)
0	999800	0	1.913	0	999800	0	1.913	0	999800	0	1.913
80.79	41863	141.4	143.3	80.79	41863	141.4	143.3	80.79	41863	141.4	143.3
116.8	23084	184.3	186.2	116.8	23084	184.3	186.2	116.8	23084	184.3	186.2
138.2	16208	209.4	211.1	138.2	16208	209.4	211.1	138.2	16208	209.4	211.1
157.1	11947	232.7	233.0	157.1	11947	232.7	233.0	157.1	11947	232.7	233
172.8	9334	253.3	251.3	172.8	9334	253.3	251.3	172.8	9334	253.3	251.3
184.1	7846	268.8	264.4	184.1	7846	268.8	264.4	184.1	7846	268.8	264.4
196.2	6475	286.0	278.3	196.2	6475	286.0	278.3	196.2	6475	286	278.3
202.6	5867	295.3	285.2	642.8	769.1	941.1	363.9	770.6	644.7	1129	390.2
				1083	474.5	1587	413.1	1339	394	1962	458.2
				1523	350.2	2233	451.7	1907	279.5	2796	513
				1963	270.8	2879	483.3	2475	206.4	3629	559.3
				2403	214.1	3525	509.7	3043	157.5	4463	599.2
				2843	172.6	4170	531.7	3611	123.9	5296	633.3
				3284	141.8	4816	549.8	4179	99.97	6130	661.9
				3724	118.5	5462	563.8	4747	82.48	6963	684.6
				4164	100.5	6108	573.6	5315	69.32	7797	701.2
				4604	86.4	6754	578.7	5883	59.17	8630	711.2
				5044	75.14	7400	578.8	6450	51.17	9464	714.4
				5484	66.02	8045	573.4	7018	44.75	10297	710.1
				5924	58.51	8691	561.8	7586	39.52	11130	697.7
				6364	52.27	9337	543.4	8154	35.2	11964	676.3
				6805	47.01	9983	516.9	8722	31.58	12797	644.5
				7245	42.55	10629	480.6	9290	28.53	13631	600.2
				7685	38.72	11275	431.8	9858	25.91	14464	540
				8125	35.41	11921	365.1	10426	23.66	15298	457
				8565	32.53	12566	266.9	10994	21.71	16131	334.4
				9005	30.00	13212	0	11562	20	16965	0

Table 4와 Table 5에 나타난 바와같이 수동적분산으로의 전이는 연속누출의 경우는 누출후 196 초, 풍하거리 286 m 지점에서, 순간누출의 경우는 누출후 83 초, 풍하거리 72 m 지점에서 발생하였으며, 그때의 농도는 각각 6474.7 ppm 및

8329.6 ppm 으로 나타났다. 30 ppm 및 20 ppm을 나타내는 풍하거리는 순간누출의 경우는 각각 13212 m, 16965 m 지점에서 나타났으며, 연속누출의 경우는 각각 3814 m, 4554 m 지점에서 나타났다. 분산모델링 결과에 대한 풍하거리에 따른 증기구름의 농도분포 및 등농도선 (Isoleth)은 Fig. 1 ~ Fig. 2에 나타내었다.

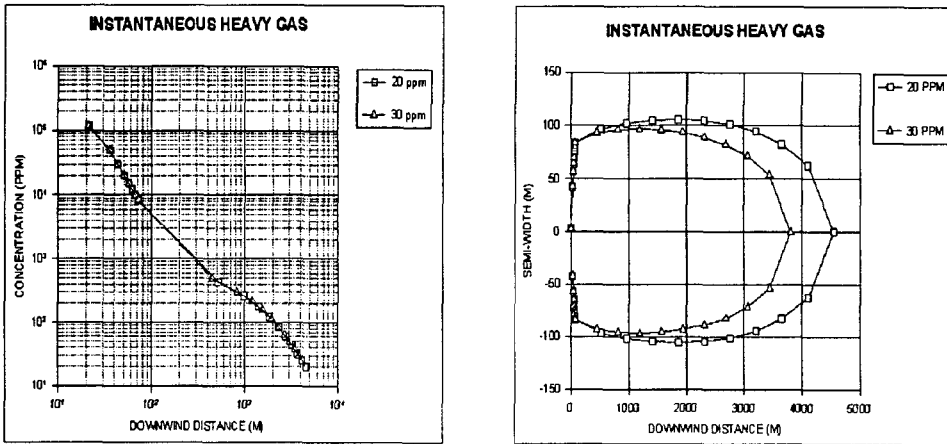


Fig. 1. Instantaneous heavy gas dispersion modeling results (stability : D).

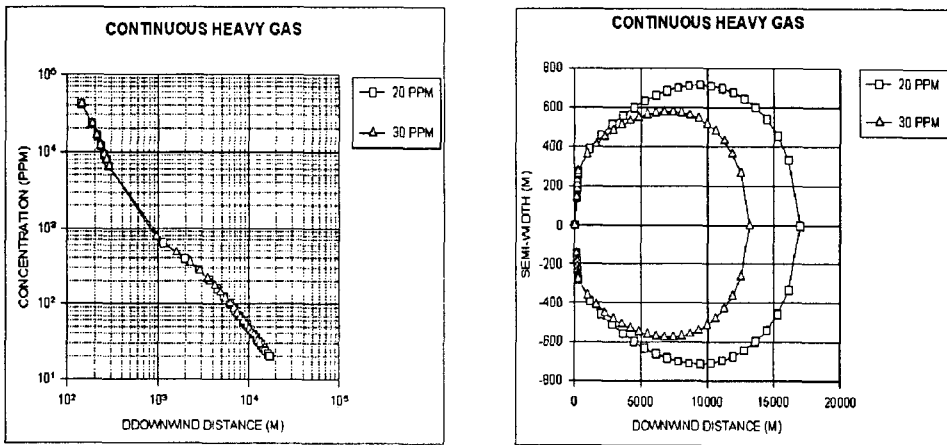


Fig. 2. Continuous heavy gas dispersion modeling results (stability : D).

또한, 기상변화 및 지형조건에 따른 농도의 영향을 고찰하기 위하여, 대기안정도, 풍속 및 지표면 거칠기길이를 변화시켜 한계농도 20 ppm, 30 ppm에 대하여 순간누출 및 연속누출시 무거운가스의 분산모델링을 수행하였다.

예로, 한계농도 20 ppm인 경우, 대기 안정도를 가장 불안정한(A등급) 조건에

서 가정 안정한(F등급) 조건까지 변화시켜 순간누출시 무거운가스의 분산모델링을 수행하였으며, 그 결과를 Fig. 3에 나타내었다. 순간누출시 무거운가스의 풍하거리에 따른 농도분포는 대기안정도가 불안정할수록 짧은 시간동안에 짧은 풍하거리에서 고농도로 나타나며 대기가 안정할수록 긴시간동안 긴 풍하거리에 걸쳐 점차 분산·희석된다고 예측할 수 있다.

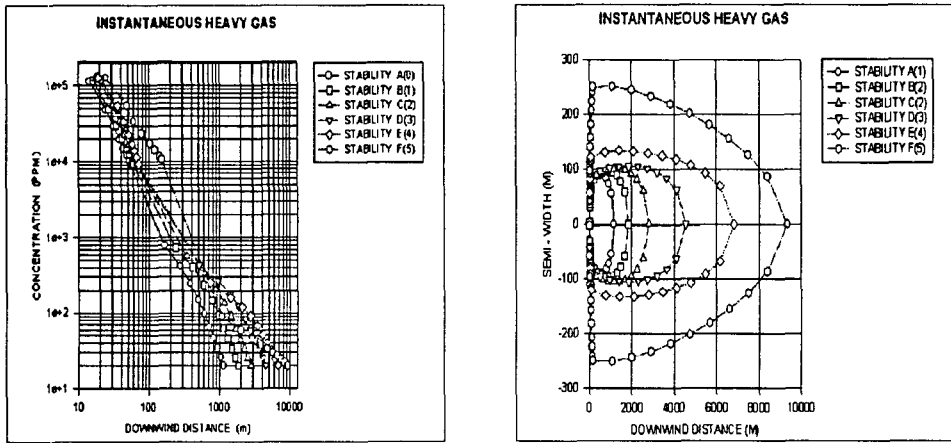


Fig. 3. Instantaneous heavy gas dispersion modeling results (LC : 20 ppm).

4. 결론

본 연구는 유해독성가스인 염소가스 저장탱크에서 누출이 일어났을 때 스크리닝 절차와 보다 적교한 해석모델을 적용하여 예측된 농도를 독성 법적기준농도인 IDLH와 ERPG-3농도와 비교함으로써 독성완충거리를 결정하는 분산모델링 방법론을 개발하였다. 향후 보다 다중·다양한 누출유형에 대하여 적절한 누출원 모델과 분산모델을 선정하여 모델링 방법론이 체계화되면 최적의 Sliding Scale 방법론을 개발하고자 한다. 이와 같이 독성완충거리를 결정하는 분산모델링 방법론과 최적의 Sliding Scale 방법론의 개발은 정량적 유해위험성 평가기술에 대한 가이드라인을 제공하며, 아울러 지역사회 의 비상대응체제 계획 수립시 적절하게 활용할 수 있을 것으로 사료된다.

참고문헌

1. USEPA, "Workbook of Screening Technologies for Assessing Impacts of Toxic Air Pollutants (Revised)", EPA-454/R-92-024, Dec. (1992).
2. G.A. Melhem, "Advanced Consequence Analysis : Emission, Dispersion, Fire, and Explosion Dynamics", Arthur D. Little, Inc. August (1995).