

전산유체역학을 이용한 화학공정 수소가스 누출 사고 시뮬레이션

송인호¹ · 한상일^{2,†} · 황규석^{1,†}

¹부산대학교 화공생명공학부

²창원대학교 화공시스템공학과

(2019년 9월 11일 접수: 2019년 12월 6일 수정: 2019년 12월 10일 채택)

Simulation of Hydrogen Gas Leak in Petrochemical Process using Computational Fluid Dynamics (CFD)

Inho Song¹ · Sangil Han^{2,†} · Kyu-Suk Hwang^{1,†}

¹*School of Chemical & biomolecular Engineering, Pusan National University,
Busan 609-735, Korea*

²*Department of Chemical Engineering, Changwon National University,
Gyeongnam 641-773, Korea*

(Received September 11, 2019; Revised December 6, 2019; Accepted December 10, 2019)

요약 : 화학물질 취급공정에서 발생하는 화학사고를 예방하기 위해 기본적으로 요구되는 위험성 분석 (Risk Analysis)시 공정의 특성을 잘 반영하는 것이 매우 중요하다. 본 연구에서는 CFD (computational fluid dynamics) 언어를 활용하여 화학공장의 고위험 공정을 대상으로 신뢰성 있는 사고 피해 결과를 분석하고 안전확보 방안을 제시하였다. 이를 위한 방법론적 사례로 화학공장의 RHDS (잔사유수첨탈황공정) 공정을 대상으로 실제공정의 운전조건, 설비 및 장치의 형태와 밀집도, 대기상태, 바람의 영향 등 여러 복합적 변수를 고려하여 FEA (Finite Element Analysis)와 CFD 시뮬레이션을 수행하여 확산, 폭발 시뮬레이션을 수행하였으며, 3D Scanning 기술, 누출공 크기 산정, 누출량 산정을 위한 CFD 적용 가능성을 검토하였다.

주제어 : 위험성 평가, 전산유체역학, 누출공, 시뮬레이션, 화학공정

Abstract : For a risk analysis in a chemical process, it is important to reflect correctly the characteristic properties of the target process. In this study, computational fluid dynamics (CFD) was adopted for the advanced risk analysis in a residual hydro desulfurization (RHDS) process by considering operation condition, layout of instruments and facilities, atmospheric condition, and wind direction. Release and explosion simulations for the RHDS by using FEA (Finite Element

[†]Corresponding author

(E-mail: sangilh@changwon.ac.kr, kshwang@pusan.ac.kr)

Analysis) and CFD showed the applicability of 3D scanning methods for estimation of release hole size and release amount.

Keywords : Risk assessment, CFD, leak hole, simulation, chemical process

1. 서론

화학물질로 인한 화재, 폭발, 누출사고등의 위험성은 점점 증가하고 있다 [1,2]. 이러한 화학물질의 국내사용 및 취급 규모는 IT제품 및 신소재 등과 같은 첨단산업이 급격하게 발전함에 따라, 2006년 1억 1816만 ton에서 2008년 1억 2934만 ton, 2010년 1억 4301 ton, 2011년 1억 5051 ton으로 현재 꾸준히 증가하고 있다.

산업발전 속도를 고려할 때 화학물질의 사용 및 취급량은 앞으로 더욱 더 증가할 것이며, 고온고압의 화학적 반응을 통해 제품이 생산되는 장치산업인 화학공정의 특성상 경제불황에 따른 투자보류로 인한 화학설비의 심각한 노후화는 작업자 부주의에 의한 번수등과 맞물릴 경우 국내 화학사고의 발생 위험을 더욱더 증가시킬 것으로 예상된다 [3].

따라서, 기업의 자율적인 안전활동이 요구되고 있는 현 상황에서 사고예방을 위해 기업이 수행하고 있는 리스크 관리 (Risk Management)가 매우 중요하다. 실질적이며 효율적인 리스크 관리는 일차적으로, 신뢰할 수 있는 리스크 분석을 기반으로 적절한 의사결정 과정인 위험성 평가가 이루어 질 때 잘 운영 될 수 있다. 그러나, 대부분의 화학공장에서 이루어지는 리스크 분석은 제출된 PSM(공정안전관리) 보고서를 볼 때 상당부분이 공정현실을 반영하지 못하는 수치해석 결과를 도출하고 있다 [4].

리스크 분석은 많은 수학적 기술과 공학적 평가가 요구되는 어려운 분야로서 특히, 화학사고의 원인조사나 위험공정의 리스크 분석시 누출량을 산정함에 있어 실제 공 정운전 조건과 설비(배관, 펌프, 탱크 등)의 설치규격 등 주요변수를 고려하지 않은 단순 식을 적용함에 따라 실제 누출량과 차이가 발생하여 계산된 결과 값이 신뢰받지 못하고 있으며 큰 오류 발생의 시발점으로 지적되고 있다 [5,6].

또한, 사고결과 분석에서 고압으로 저장되어 있는 탱크, 용기, 배관에서 가연성 가스가 누출

될 경우 누출된 가스의 확산과 증기운 폭발(VCE, vapor cloud explosion)에 의한 과압(overpressure)을 예측하기 위해 여러 모델들이 활용되고 있으나 이러한 모델들은 지형, 장애물, 건물 등과 같은 완화인자 (Mitigation Factor)가 미치는 영향을 고려하지 않아 원거리의 경우 결과 값이 과대하고, 근거리의 경우 과소하게 계산되는 문제점을 가진다. 따라서, 리스크 분석에 적용되는 모델의 제한적인 요건을 고려할 때 화학사고의 조사나 예방을 위한 리스크 분석을 위해서는 더욱 더 정밀한 사고결과 예측방법이 요구되며 특히, 근거리에 대한 사고결과 영향평가는 더욱더 중요하다 [7].

본 연구에서는 화학사고에 대한 과학적 조사와 위험공정에 대한 리스크 분석을 위해 공정과 관련된 운전조건, 설비 및 장치의 형태와 밀집도, 누출된 물질의 연소형태, 난류, 대기 상태, 장애물, 바람의 영향 등 여러 변수를 고려하여 신뢰할 수 있는 기반조건을 갖춘 CFD 분석방법을 도입하였다. 정유화학공장을 대상으로 하여 화재, 폭발 CFD 를 수행하고 화학물질 누출량을 계산하였으며 이를 기반으로 누출물질의 확산거동과 피해결과를 분석하였다.

2. 누출원 모델링 방법

화재, 폭발, 누출에 의한 사고시 피해예측에 필요한 누출량, 누출되는 기간 및 누출되는 위험물질의 상태 등을 예측하는 방법을 누출원 모델링 (source term modeling) 이라 하며, 일반적으로 용기 파손, 오조작에 의한 밸브의 열림, 비상 배출등의 원인에 의해 위험물질이 누출된다.

사고피해 결과 분석에 필요한 누출량은 결과 값에 크게 영향을 미치며, 누출공 크기 예측은 CCPS, API, KOSHA [8,9,10]기술 기준에 따라 수행되고 있으며 과학적인 예측은 아직 부족하다.

2.1. 누출량 산정 이론

화학설비 및 배관으로부터 누출되는 누출량은 물질의 성상, 누출속도에 따라 각기 다른 식을 적용하여 계산한다 [11]. 누출량을 산정하기 위해 누출공의 전, 후 압력비 (외부압력/운전압력) 값을 임계흐름압력 비 (P_{CF}/P_1) 값과 대조한 후 임계흐름 여부를 판단하여 최종 누출량 계산식에 대입하게 된다. 여기서 임계 압력이란 압축성 유체의 유동에서 발생하는 현상으로 누출공을 통과하는 유체의 유속이 음속과 동일해지는 압력을 말한다. 누출공을 지나는 압축성 유체의 유동에서 하류측의 압력이 임계 압력에 도달하기 전까지 하류측 압력을 낮출수록 유량이 증가한다. 하지만, 일단 하류측 압력이 임계 압력에 도달하면 압력을 낮추어도 유량은 증가하지 않는데, 하류측 압력이 임계 압력 보다 낮은 상태에서의 유동을 질식 유동 (Choked Flow)이라고 하며, 이때의 하류 압력을 임계흐름압력 (P_{CF}) 이라고 한다.

가) 임계흐름압력비

$$\frac{P_{CF}}{P_1} = \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \tag{1}$$

P_{CF} : 임계흐름압력비(kgf/cm², lbf/cm²)
 P_1 : 화학설비의 운전압력(kgf/cm², lbf/cm²)
 γ : 비열계수 (C_p/C_v)

나) 누출량 (누출속도가 음속 이상인 경우)

$$Q = C_D A P_1 \sqrt{\frac{\gamma g_c M_W}{RT_1} \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}} \tag{2}$$

P_a : 대기압력 (kg f/cm², lbf/ft²)
 Q : 누출량 (kg/s, lb/s)
 C_D : 누출계수
 g_c : 중력상수

다) 누출량 (누출속도가 음속 미만인 경우)

$$Q = C_D A P_1 \sqrt{\frac{2g_c M_W}{RT_1} \frac{\gamma}{\gamma-1} \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right]} \tag{3}$$

M_W : 분자량 (kg/kg-mole, lb/lb-mole)
 A : 누출원 면적 (m², ft²)
 T_1 : 화학설비의 운전온도(K, R)
 R : 기체 상수

3. 대상공정 선정

정유공장은 화학공장을 대표하는 업종으로 고온고압의 운전조건과 화학적 반응에 의해 운전되고 있으며 그동안 수많은 화학사고가 발생하였으며 크고 작은 재해와 환경피해 그리고 경제적 손실의 잠재적 위험이 상존해 있다.

본 연구에서는 수소를 대량으로 취급하는 고위험 공정인 RHDS (잔사유수첨탈황공정, Residue-Hydro-De-Sulfurization) [12]공정 (Fig. 1)을 선정하여 CFD 시뮬레이션을 적용하였다. 감압증류탑에서 나오는 잔사유 (VR), VGO (Vacuum Gas Oil), 상압증류탑 (CDU, crude distillation unit) 하단에서 나오는 잔사유 (AR)에 포함된 metal, asphaltenes, nitrogen, sulfur의 함량을 감소시키는 공정으로 수소를 첨가하여 화학반응을 일으켜 HDT (Hydro-treated residue)를 생산한다. 또한, 고온, 고압의 화학반응으로 naphtha, gas oil 등 일부 경질유도 생산되며, 온도 370~430 °C, 압력 160~170 kgf/cm²에서 가동되는 고위험 공정 중 하나이다.

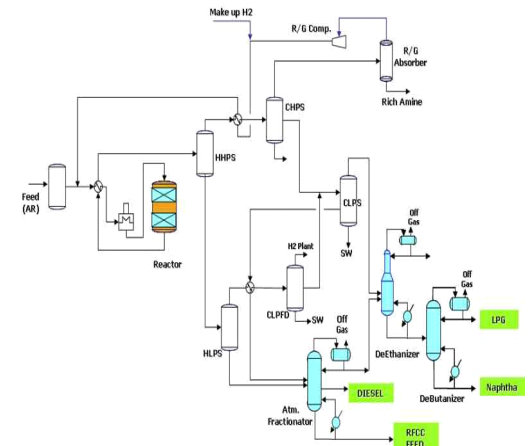


Fig. 1. RHDS process flow.

4. 사고 시나리오 선정

4.1. 누출공 크기

화학사고 피해 결과 분석 시(Consequence Analysis) 누출량은 결과 값에 절대적인 영향을 미치는 요소이지만, 누출공의 크기를 정확히 예측하는 방법은 아직 제시되지 않았다. 발생 가능한

사고에 대한 누출공 크기를 예측하는 일은 사고 조건에 따라 다양하므로, 본 연구에서는 RHDS 공정의 사고 지점 파이프 (Fig. 2)에서 누출공 크기 예측을 위해 유한요소해석 (FEA, Finite Element Analysis) 기법 [13]을 적용하여 유체의 유동 응력에 의한 피로도 집중 지점을 분석하였으며 (Fig. 3), 이 결과를 토대로 CCPS와 KOSHA 가이드 [9,10]에서 제공하는 방법에 따라, 배관누출일 경우 공정압력이 50 kgf/cm² 초과시 내경의 20% 적용 기준에 따라 누출공 크기 (100 mm X 20 mm)를 산정하였다 (Fig. 4).



Fig. 2. Damaged reducer in RHDS process.

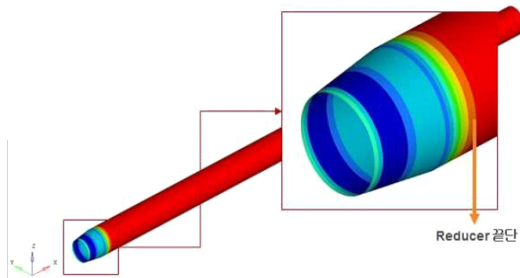


Fig. 3. Stress distribution in a damaged reducer.

4.2. 누출량 추산

화학물질 누출사고 시 누출량을 산정함에 있어 적용 가능한 이론과 수치적 계산방법은 AIChE/CCPS (Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers) 에서 출간한 가이드라인을 따른다 [9]. 그러나, 이러한 수치 계산 방법은 실제 공정에서의 누출

사고 시 압력차에 의한 유체의 역유량 (Back Flow), 누출 압력차(ΔP)에 의해 제어되는 주변밸브, 펌프 등 장치들의 오작동을 고려하지 않는 한계를 가진다. 따라서 본 연구에서는 누출량을 정밀하게 산정하기 위해 공정내 배관, 탱크, 밸브, 열교환기, 증발기 등의 설비와 부속장치 등에서 누출이 발생할 경우, 여러 공정조건을 반영하여 유체의 정확한 유동해석을 수행할 수 있는 CFD Code가 적용된 Flownex 시뮬레이터를 이용하여 누출량을 산정하였다 (Fig. 5) [11].

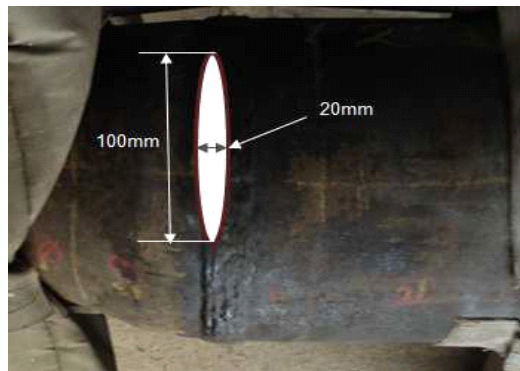


Fig. 4. Release hole obtained by using FEA simulation and technical guideline.

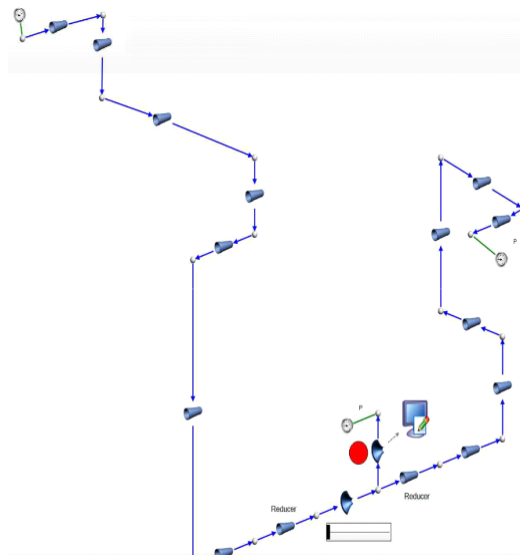


Fig. 5. Flownex component simulation diagram.

누출시간은 최악의 누출 조건을 가정하여 600 초, 밸브작동 시간 60초, 총 660초를 적용하여 누출량을 시뮬레이션 하였으며, 역유량이 초당 -7.995 kg 발생하여 배관내의 upstream 유동과 함께 누출량에 포함되어 상당히 큰 영향을 미치고 있음을 알 수 있다 (Table 1). 이를 바탕으로 화재폭발 시뮬레이션을 위한 누출유량비는 15.0 kg/s를 적용하였다.

Table 1. Release amount by using Flownex.

Simulation	Average flow rate (MFR, kg/s)	Average velocity (m/s)	Average back flow rate (BFR, kg/s)	Total release amount (kg)
Results	14.996	1280.429	-7.995	9912.534

4.3. 사고 시나리오

시뮬레이션 대상으로 선정된 누출사고 시나리오 구성을 위해 누출공 크기, 누출량에 대한 계산 결과를 바탕으로 다음과 같이 사고 조건이 구성되었다 (Table 2). 장치 및 설비가 복잡하게 설치 운영되고 있는 화학공장의 경우 누출되는 방향에 따라 사고피해 결과가 크게 달라 질 수 있다. 이에 본 연구의 대상공정인 RHDS 공정에서 reducer와 배관에서 다른 방향(±X, ±Z)에 대해 확산 및 폭발 시뮬레이션을 적용하였다.

Table 2. Accident condition

Incident Number	Incident	Incidents Outcome	Incident Outcome Case
S-12	Hydrogen gas release from	Explosion/Jet Fire	2.03 m/s, wind Stability Class F Wind Direction Temperature

Table 3. Leak description

Direction	Leak Description			Duration (s)	Rate (kg/s)
	X	Y	Z		
+X	28.6	67	0.8	660	15
-X	26.8	67	0.8		
+Z	26	67	1.2		
-Z	26	67	1.2		

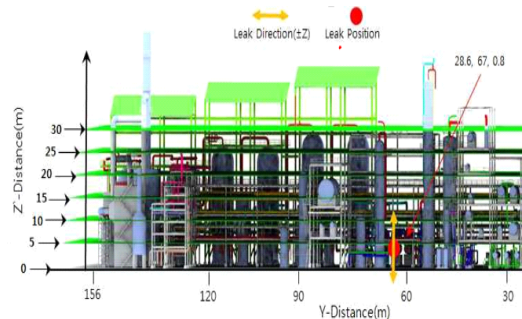
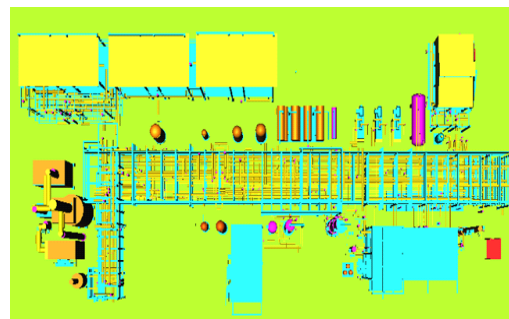


Fig. 6. Release position in ±X and ±Z.

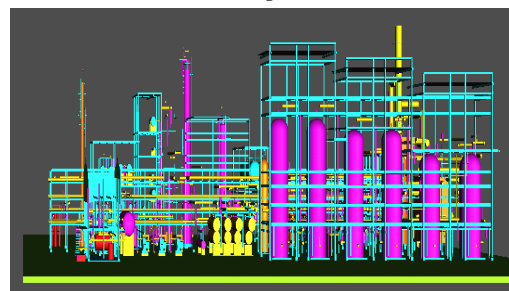
5. 피해영향 분석

5.1. 확산 시뮬레이션

사고 상황을 가정하고 CFD 시뮬레이션을 위해 Microstation CAD 프로그램을 이용하여 3D 캐드 파일을 완성하고 FLACS CFD [14]시뮬레이터에 적용하였다 (Fig. 7). RHDS 공정의 S-12 사고에 대한 누출확산 시뮬레이션을 위해 FLACS에서 요구되는 입력 값들은 Table 3과 같으며, 바람의 방향은 Fig. 8과 같다.



(a) Top view



(b) Side view

Fig. 7. 3D images of RHDS process for FLACS simulation.

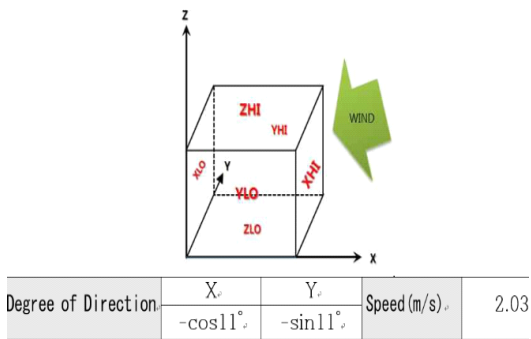


Fig. 8. Wind description for FLACS simulation

확산 시뮬레이션 결과에 따르면(Fig. 9), 누출 시 폭발범위 체적은 약 100s 이후부터 체적평형상태가 존재하며, 누출시간이 약 100s를 초과 할 경우, 이후부터 누출이 정지되기까지 일정한 폭발범위 체적이 유지되었다. 따라서, 폭발범위 체적의 경우 100s 이상의 시간동안 누출이 지속될 경우, 300s나 600s 에서의 누출결과와 동일하다는 의미로 해석 된다.

또한, 폭발범위는 +X 방향의 누출 (Fig. 10)이 가장 큰 폭발범위 체적 값을 나타내었으며, 동일한 지점에서 누출이 발생하더라도 누출방향에 따라 폭발결과가 다르게 나타날 수 있음을 예측할 수 있다.

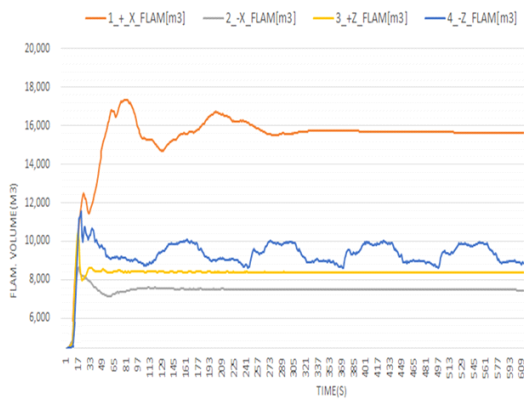


Fig. 9. Volumes of released H₂ in ±X and ±Z directions.

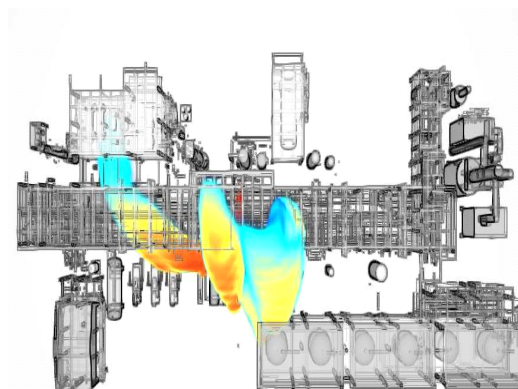


Fig. 10. Release area of H₂ in +X direction.

5.2. 폭발 시뮬레이션

수소가스 확산 시뮬레이션 결과를 통해 얻어진 폭발범위 체적을 이용하여 폭발 시뮬레이션을 실시하였으며, RHDS 공정의 S-12 사고에 대한 폭발 시뮬레이션을 위해 FLACS에서 요구되는 입력 값들은 Table 4에 제시되어 있다. 폭발범위 체적은 누출 발생 후 약 100s 이후의 체적 평형상태 값으로 누출이 지속되는 중간 값인 300s에서의 체적을 적용하였다. 폭발 시뮬레이션을 실행한 결과, 누출방향에 따른 최대 폭발 압력을 Table 5에 제시하였다. +Z 방향의 누출에서 가장 큰 폭발 압력이 발생되었으며, 이는 +Z 방향의 누출시 화학설비, 장치들의 밀집 도가 다른 방향보다 크기 때문으로 분석된다 (Fig. 11).

Table 4. FLACS condition for explosion simulation.

Explosion Description							
Direction	Fuel Region Position			Volume (m ³) - 300s			
	X	Y	Z	+X	-X	+Z	-Z
+X	42	66	3	1.74 *10 ⁴	8.67 *10 ³	1.06 *10 ⁴	1.17 *10 ⁴
	7m*10m*4.9m						
-X	-10	65	0.5	1.74 *10 ⁴	8.67 *10 ³	1.06 *10 ⁴	1.17 *10 ⁴
	25.625m*2m*4m						
+Z	23	64	5	1.74 *10 ⁴	8.67 *10 ³	1.06 *10 ⁴	1.17 *10 ⁴
	6.05m*6.05m*14.343m						
-Z	17	66	3	1.74 *10 ⁴	8.67 *10 ³	1.06 *10 ⁴	1.17 *10 ⁴
	5m*5m*25.8m						
Boundary Condition				EULER			

Table 5. Maximum pressure in leak direction

Leak Direction	+X	-X	+Z	-Z
Time (s)	0.171	0.157	0.202	0.393
P _{max} (barg)	0.078	0.047	0.125	0.074

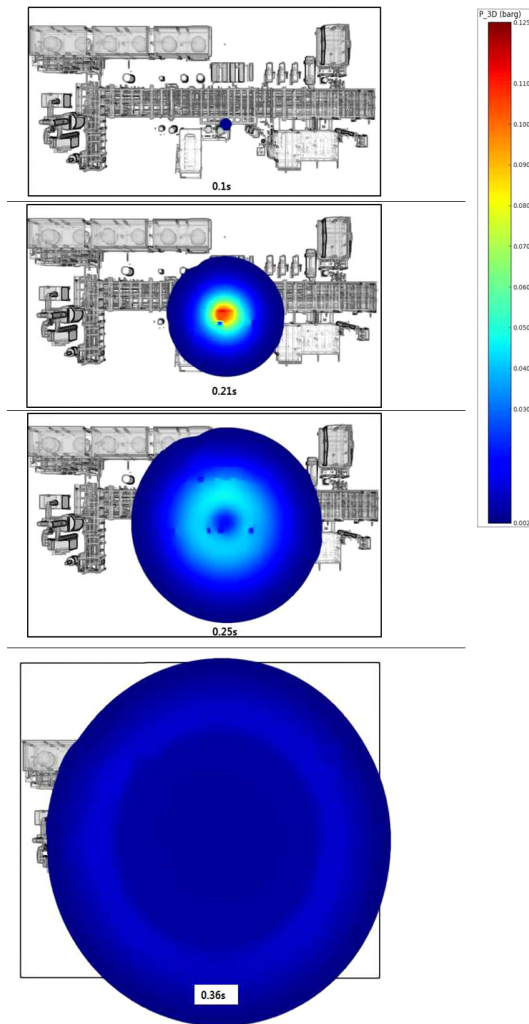


Fig. 11. Explosion simulation in +Z direction.

6. 결론

화학사고시 CFD 시뮬레이션을 도입하여 누출공 크기, 누출량을 계산하여 확산시뮬레이션, 폭발시뮬레이션을 수행하였다. 화학공장의 신뢰성 있는 리스크 분석 방법을 제시하기 위해, RHDS 공정을 대상으로 실제공정과 운전조건, 설비 및

장치의 형태와 밀집도, 대기상태, 바람의 영향 등 여러 복합적 변수를 고려하여 FEA와 CFD 시뮬레이션을 수행하였으며, 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 본 연구에서 활용한 3D Scanning 기술을 적용한다면 빠른 시간 내에 대상공정의 정확한 형상을 취득하여 실제 공정과 가장 유사하게 시뮬레이션을 수행할 수 있다.
- 2) 위험성 분석을 위한 초기단계에서 필요한 누출공의 크기를 예측하기 FEA 기법을 활용하여 현실적인 누출공 크기를 예측하였다.
- 3) 누출량 산정을 위해 Flownex Code를 이용하여 유체유동 시뮬레이션을 수행 하였으며 이론적 수치계산에서 다루지 않는 역유량(Back Flow)과 압력차에 의해 작동되는 주변 밸브, 펌프 장치들의 작동을 고려하여, 훨씬 더 신뢰할 만한 정밀한 결과 값을 도출하였다.
- 4) 확산 및 폭발 시뮬레이션을 FLACS code를 이용하여 수행해 지형, 장애물 등의 폭발변수를 고려하였으므로, 기존 예측 모델 (TNT-Equivalent, TNO-Multi Energy, Baker-Strehlow Model)에 비해 신뢰한 만한 결과를 도출할 수 있었다. 화학사고 원인조사에 있어서 이러한 시뮬레이션을 방법을 활용할 경우 과학적으로 원인 분석이 가능하며 위험성 분석에 활용할 경우 효과적으로 화학사고 예방을 할 수 있을 것으로 판단된다.

감사의 글

이 과제는 부산대학교 기본연구지원사업(2년)에 의하여 연구되었음.

References

1. Ivings MJ, Klsey A. *Technical Input on Ventilation Effectiveness for Area Classification Guidance EI15*, Health and Safety Executive, (2014).
2. J. P. Yim, C. B. Chung, "A Study on Classification of Explosion Hazardous using Lighter than Air Gases", *Journal of the Korean Society of Safety*, Vol.29, No.2, pp. 24-30, (2014).

3. Kwon, J. *A Study on the Establishing of the Explosion-hazardous Area of Boiler Room on the City Gas-using Facility*. M.S. Thesis, Seoul National University of Technology, (2014).
4. S. Dharmavaram, S. R. Hanna, O. R. Hansen, "Consequence Analysis—Using a CFD Model for Industrial Sites", *Process Safety Progress*, Vol.24, No.4, pp. 272–316, (2005).
5. S. Han, D. Lee, K. S. Hwang, "A Study on the Prediction of Explosion Risk for the Low Pressure Natural Gas Facilities with Different Explosion Conditions", *Journal of the Korean Institute of Gas*, Vol.20, No.3, pp. 59–65, (2016).
6. S. Han, D. Lee, K. S. Hwang, "Prediction of Explosion Risk for Natural Gas Facilities using Computational Fluid Dynamics (CFD)", *Journal of Oil & Applied Science*, Vol.35, No.3, pp. 606–611, (2018).
7. Daniel AC, Joseph FL. *Chemical Process Safety Fundamentals with Applications*. Prentice Hall, (2011).
8. API RP 505, *Classification of locations for electrical installations at petroleum facilities classified as class 1, zone 0, zone 1 and zone 2*. American Petroleum Institute, (1997).
9. CCPS/AIChE, *Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis*. Wiley, New York, (2000).
10. Ha DM et al. *Code for explosion-proof electrical equipment of gas facilities*, Korea Gas Safety Corporation, (2018).
11. A. Qial, S. Zhang, "Advanced CFD modeling on vapor dispersion and vapor cloud explosion", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol.23, pp. 843–848, (2010).
12. J. Baek, H. Lee, C. B. Jang, "A Methodology for Determination of the Safety Distance in Chemical Plants using CFD Modeling", *Journal of the Korean Society of Safety*, Vol.31, No.3, pp. 162–167, (2016).
13. J. Lee, M. Kim, K. Shin, J. Park, "Strength Evaluation of A Failed A53B Carbon Steel Pipe with Small Punch Test and Finite Element Analysis", *Journal of the KOSOS*, Vol.23, No.1, pp. 1–11, (2008).
14. J. Baek, H. Lee, C. B. Jang, "Comparison of H₂, LNG, and LPG explosion characteristics in a limited space using CFD Simulation", *Journal of the Korean Institute of Gas*, Vol.20, No.3, pp. 21–21, (2016).
15. S. Han, B. Yoo, C. Tae, C. K. Chae, J. W. Ko, "A Study on Fire Protection of Chemical Plants Using FRA(Fire Risk Assessment) Method", *Journal of the Korean Institute of Gas*, Vol.20, No.5, pp. 17–26, (2016).