

화학장치설비의 유해독성가스 누출에 대한 분산모델링 방법론

송 덕 만

울산대학교 화학공학과
(1997년 11월 3일 접수, 1997년 11월 20일 채택)

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

Duk-Man Song

Department of Chemical Engineering, University of Ulsan
(Received 3 November 1997; accepted 20 November 1997)

요 약

본 연구는 화학장치설비중 저장탱크에서 누출된 유해독성가스인 염소의 풍하거리에 따른 10분 평균, 30분 평균 및 1시간 평균 최대 지표면 농도를 산출하여 염소가스의 법적 규제농도인 IDLH 및 ERPG-3 농도들과 비교함으로써 유해위험거리 (hazard distance) 또는 독성완충거리 (toxic buffer distance)를 정량적으로 예측하는 분산모델링 방법론을 개발하고자 수행되었다. 본 분산모델링을 위하여 누출원모델, 분산모델, 기상 및 지형자료들이 SuperChems 모델에 입력자료로 사용되었으며, 대기의 안정도, 풍속, 표면거칠기 길이의 변화에 따른 지표면 농도의 영향이 평가되었다.

Abstract-This study was performed to develop the dispersion modeling methodology for quantitative prediction of the hazard distance or toxic buffer distance by comparing 10-min average, 30-min average, and 1-hr average maximum ground-level concentration with Cl_2 regulation concentration, IDLH and ERPG-3 concentration for hazardous toxic gas, Cl_2 releases from the storage tank of the chemical plant facilities. For this dispersion modeling, the source term model, dispersion model, meteorological and topographical data are incorporated into the SuperChems model, and then the effects of the atmospheric stability, wind speed, and surface roughness length changes on the maximum ground-level concentration were estimated.

1. 서 론

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[1,2].

본 연구는 화학장치설비중 저장탱크나 파이프라인에서 누출된 유해독성가스인 염소의 풍하거리에 따른 10분 평균, 30분 평균 및 1시간 평균 최대 지표면 농도를 산출하여 염소가스의 법적 규제농도인 IDLH (30 ppm) 및 ERPG-3 (20 ppm) 농도들과 비교함으로써[1,3,4] 유해위험거리 또는 독성완충거리를 정량적으로 예측하는 분산모델링 방법론을 개발하고자 수행되었다[4]. 본 분산모델링을 위하여 누출원모델, 분산모델, 기상 및 지형자료들이 SuperChems

Table 1. The USEPA's toxicity and threshold quantity criteria for Cl₂ and NH₃ [1,3]

Chemical	Toxicity (ppm)						Threshold Quantity lbs (kg)
	STEL	IDLH	ERPG-1	ERPG-2	ERPG-3	LC ₅₀	
Ammonia	35	500	25	200	1,000	3,000/5min	10,000 (4,540)
Chlorine	1	30	1	3	20	1,000/30min	2,500 (1,135)

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

모델 [5]에 입력자료로 사용되었으며, 대기의 안정도, 풍속, 표면거칠기 길이의 변화에 따른 지표면 농도의 영향이 고찰되었다.

2. 이론 : 분산모델링 방법론의 개발

2.1. 유해독성가스 누출의 Threshold 양과 한계농도

미 환경보호국 (USEPA) 의 유해독성가스 누출에 따른 염소 및 암모니아의 대기중 독성 기준농도 및 threshold 양을 요약하여 다음의 Table 1 에 비교하여 나타내었다[1,3].

유해위험거리 즉, 독성완충거리를 평가하기 위하여 최대농도, 평균농도, 증기구름의 높이, 증기구름의 폭 등 증기구름의 특성을 사용하는데, 특히 이들 증기구름의 특성중 최대농도가 가연성증기의 유해위험성을 평가하는데 있어서 가장 보편적으로 이용되고 있다[4,5]. 유해위험성평가를 위한 독성기준농도는 IDLH 농도와 ERPG-3 농도가 추천되고 있다[1-5]. 특히 USEPA 는 유해위험성평가에 IDLH 농도를 사용하는 경우에는 안전인자를 고려하여 IDLH 값을 10으로 나눈 값을 사용하도록 권고하고 있으며, ERPG-3 농도는 비상대응체제계획 가이드라인 (emergency response planning guideline ; ERPG) 수립시 현재 전세계적으로 가장 광범위하게 사용되고 있다[4,5].

2.2. 모델의 선정

본 연구에서는 대기분산모델링을 개발함에 있어 스크리닝 절차로는 현재 USEPA 에서 유해대기독성물질의 인체의 건강, 환경 및 안전에 미치는 영향을 정량적으로 평가하기 위하여 유해위험성평가의 일환으로 개발한 최대 단기 지표면 농도를 예측하는 TSCREEN 모델을 사용하였다[6].

본 연구에서 스크리닝 목적으로 TSCREEN 모델을 선정한 이유는 TSCREEN 모델이 현재 미 환경보호국에서 사용하고 있는 3개의 스크리닝 모델인 SCREEN 모델, RVD 모델, PUFF 모델과 Britter-McQuaid 모델 (B-M 모델) 을

자체 내에 포함하고 있어[6] 유해독성가스의 사고영향 평가시 스크리닝 절차로는 가장 적절한 모델이라고 사료되었기 때문이다.

한편, 보다 정교한 해석 (refined analysis)[3] 을 위해서는 USEPA 가 공인하는 모델들을 상용화한 Arthur D. Little, Inc. 의 SuperChems (V.2) 모델을 사용하였다[6].

2.3. 누출원 모델링 및 분산 모델링

유해독성물질의 누출에 대한 분산모델링에서 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 기상조건에 따라 다양하게 수행될 수 있다. 유해대기독성물질인 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

TSCREEN 모델 내에서의 각 모델의 적용에 대한 개요는 다음의 Table 2 에 나타내었다[6].

Table 2 에 나타낸 바와 같이 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[6]. 한편, 누출물이 공기보다 가벼운 가스에 대해서는 TSCREEN 모델은 연속누출의 경우에 대해서는 SCREEN 모델을, 순간누출의 경우에 대해서는 PUFF 모델을 사용한다[6].

TSCREEN 모델에 의한 분산모델링은 2개 시나리오에 대하여 수행되었다 : SCENARIO 1 은 저장탱크 (6.8 atm, 320 K) 의 파열로 생긴 구멍 (φ 2.8 cm) 을 통한 Cl₂ 가스의 연속 및 순간누출 시나리오이며, SCENARIO 2 는 압력이 2.586×10⁶ Pa 에서 개방되도록 설계된 pressure relief valve (φ 10.16 cm) 를 통한 포화 Cl₂ 가스의 연속 및 순간누출 시나리오이다.

Table 2. The selection of the model used for TSCREEN model [6]

Continuous Release	Instantaneous Release
<Step 1> Bouyancy Check $\rho_2/\rho_{air} > 1$, Negative Bouyancy (→ Go to Steps 2. or 3.) $\rho_2/\rho_{air} \leq 1$, Neutral or Positive Bouyancy (→ SCREEN Model)	<Step 1> Bouyancy Check $\rho_2/\rho_{air} > 1$, Negative Bouyancy (→ Go to Steps 2. or 3.) $\rho_2/\rho_{air} \leq 1$, Neutral or Positive Bouyancy (→ PUFF Model)
<Step 2> Vertically-directed Jet $R_i > 30$: Dense (→ RVD Model) $R_i < 30$: Non-Dense (Passive) (→ SCREEN Model)	<Step 2> Vertically-directed Jet $R_i > 30$: Dense (→ RVD Model) $R_i < 30$: Non-Dense (Passive) (→ PUFF Model)
<Step 3> Other Release Mode $R_i < (1/6)^3$: Dense (→ B-M 모델) $R_i > (1/6)^3$: Non-Dense (Passive) (→ SCREEN Model)	<Step 3> Other Release Mode BM Criteria > 0.2 : Dense (→ B-M Model) BM Criteria ≤ 0.2 : Non-Dense (Passive) (→ PUFF Model)

2.3.2. SuperChems Model

분산모델링에 필요한 시나리오, 누출원 모델, 분산모델에 필요한 입력자료들과 또한 IDLH 및 ERPG-3 독성농도와 관련된 풍하거리에 따른 농도분포 및 증기구름의 형상을 알아보기 위하여 가상적으로 선정된 새종류의 시나리오들에 대한 입력자료들을 요약하여 Table 3 에 나타내었다.

대기분산해석을 위해 양의 부력물질 (positively bouyant material), 중립의 부력물질 (neutral bouyant material), 음의 부력물질 (negatively bouyant material) 등 세가지 유형의 물질등급이 고려될 수 있다[4,5]. 공기보다 무거운 가스의 분산 (heavy gas dispersion)은 멀리 떨어진 풍하거리보다는 누출원 근처에서 발생하기 때문에, 가압·가연성물질의 다량누출시에는 대단히 중요하며, 특히 증기구름의 위치에너지가 주위 대기에 의하여 형성된 난류운동에너지보다 클 때, 누출원에서의 무거운 가스의 영향 (heavy-gas effect)은 대단히 중요하다[4,5]. 공기보다 무거운 가스의 분산에 있어서 초기분산 속도는 대단히 중요하며 유효평균증기밀도 (effective mean vapor density)와 공기의 밀도 차에 의존하게 되며, 이러한 메카니즘의 상대적 영향을 비교하는 척도는 Richardson Number 에 의하여 제공된다[4,5].

또한, 대기분산해석은 누출유형의 함수이며 순간누출 (instantaneous release)는 puff 로, 연속누출 (continuous release)는 plume 으로, 운동량지배 연속누출 (momentum-dominated continuous release)은 jet 로, 시간의존 연속누출 (time-dependent continuous release)은

jet/plume 으로 분산모델링을 수행할 수 있다 [4,5].

대기분산해석에 영향을 미치는 인자들로서는 초기누출밀도 (initial release density), 에어로졸의 존재 (the presence of aerosols), 누출속도 및 누출량 (release rate/quantity), 누출기간 (release duration), 누출유형 (release mode), 기상조건 (prevailing atmospheric conditions), 한계농도 (limiting concentration), 누출원의 상승 (elevation of source), 지형조건 (surrounding terrain), 누출원 구조특성 (source geometry) 등을 들 수 있다[4,5].

3. 결과 및 고찰

3.1. TSCREEN Model

SCENARIO 1 의 경우, 연속누출시 1-시간 평균 최대지표면 농도는 풍속 3 m/s 일 때 풍하거리 50 m 지점에서 26,200 ppm, 순간누출시 1-시간 평균 최대지표면 농도는 풍속 3 m/s 일 때 풍하거리 50 m, 100 m 지점에서 각각 30,000 및 8,280 ppm 으로 산출되었다. SCENARIO 2 의 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 ppm 으로 산출되었다.

3.2. SuperChems Model

저장탱크의 균열로 염소가 누출되는 가상적인 시나리오로부터 모델링을 수행한 결과, 염소

Table 3. User defined inputs for dispersion modeling in SuperChems model[4,5]

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 · 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 temperature (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 concentration limit (ppm) : 1000 CONTINUOUS HEAVY GAS <ul style="list-style-type: none"> · Release temperature (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	30	20				

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. 모델링을 수행한 결과, 누출 염소증기와 대기와의 밀도차가 작게 되어 수동적분산 (passive dispersion)이 일어나는 전이지점 (transition)에서의 풍하거리 및 지표면농도가 산출되었으며, 아울러 법적 독성기준농도인 IDLH (30 ppm) 및 ERPG-3 (20 ppm) 농도에 상당하는 풍하거리가 산출되었다. 모델링 결과들을 요약하여 Table 4 에 나타내었다.

Table 4 에 나타낸 바와 같이, 순간누출 및 연속누출의 경우에 있어서 수동적분산이 일어나는 전이지점에서의 누출 염소증기의 밀도는 각각 1.251 kg/m³, 1.257 kg/m³ 으로 산출되었

다 (대기의 밀도=1.253 kg/m³). 수동적분산으로의 전이는 연속누출의 경우는 누출후 196 초, 풍하거리 286 m 지점에서 발생하였으며, 전이지점에서의 지표면농도는 6474.7 ppm 으로 나타났다. 반면, 순간누출의 경우는 수동적분산으로의 전이가 누출후 83 초, 풍하거리 72 m 지점에서 발생하였으며, 전이지점에서의 지표면농도는 8329.6 ppm 으로 나타났다.

한편, 법적 독성기준농도인 IDLH 및 ERPG-3 농도를 나타내는 풍하거리는 연속누출의 경우는 각각 13212 m, 16965 m 지점에서 나타났으며, 순간누출의 경우는 각각 3814 m, 4554 m 지점에서 나타났다. 결과로부터, 순간누출의 경우가 연속누출의 경우에 비하여 훨씬 짧은 시간내에 또는 짧은 풍하거리에서 고농도의 지표면 농도를 나타내면서 수동적분산에 도달함을 알 수 있다. 연속누출 및 순간누출의 분산 모델링 결과에 대한 풍하거리에 따른 증기구름의 농도분포 및 등농도선 (Isopleth)은 Fig. 1(a) 와 Fig. 1(b) 에 나타내었다.

또한, 기상변화 및 지형조건에 따른 지표면 농도의 영향을 고찰하기 위하여, 대기안정도, 풍속 및 표면거칠기 길이를 변화시켜 IDLH 및 ERPG-3 농도에 상당하는 한계농도를 갖는 경우에 대하여 순간누출 및 연속누출시 무거운 가스의 분산모델링을 수행하였다.

ERPG-3 (20 ppm)에 상당하는 한계농도인 경우에 대한 모델링 결과들은 증기구름의 농도

Table 4. Modeling results for passive dispersion transition and regulation concentration

	Continuous Release	Instantaneous Release
Passive Dispersion Transition · cloud density · downwind distance · arrival time · ground-level concentration	1.257kg/m ³ 286 m 196 sec 6474.7 ppm	1.251kg/m ³ 72 m 83 sec 8329.6 ppm
Regulation Concentration · IDLH (30 ppm) · ERPG-3 (20 ppm)	13212 m 16965 m	3814 m 4554 m

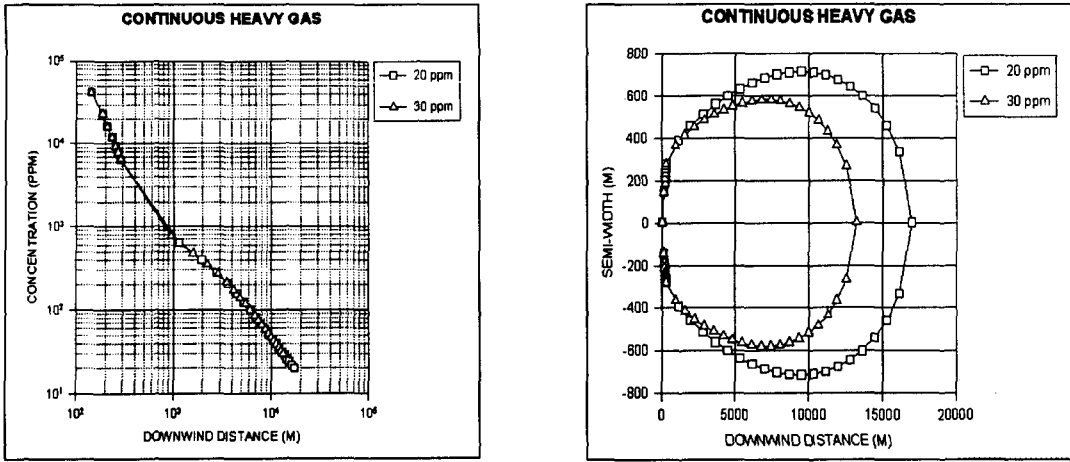


Fig. 1(a). Continuous heavy gas dispersion modeling results (stability : D).

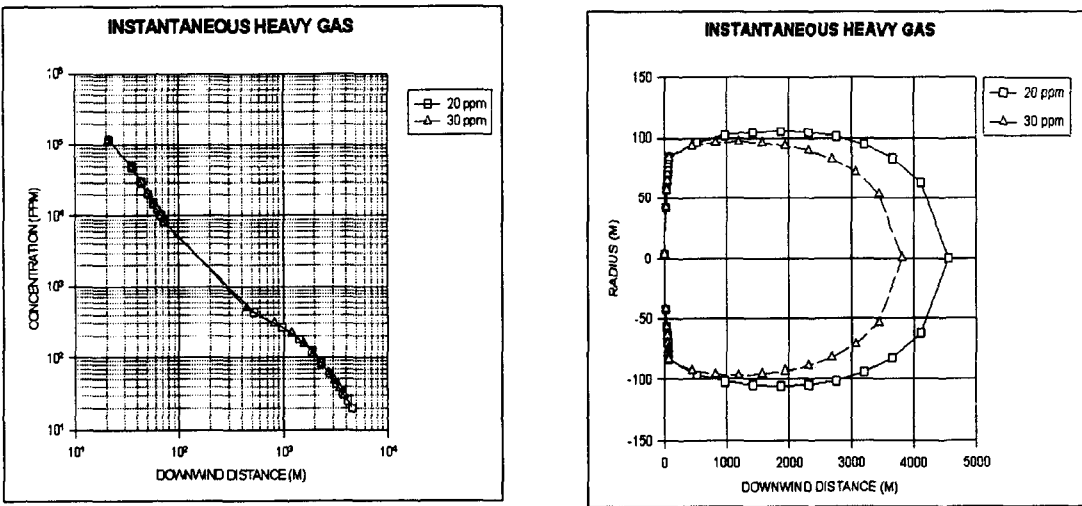


Fig. 1(b). Instantaneous heavy gas dispersion modeling results (stability : D).

분포 및 등농도선 (isopleth)으로 Fig. 2(a) ~ Fig. 4(b)에 나타내었다.

대기안정도, 풍속 및 표면거칠기 길이를 변화시켜 기상변화 및 지형조건에 따른 지표면 농도의 영향을 고찰한 결과, 대기안정도, 풍속 및 표면거칠기 길이의 변화는 다른 인자들에 비하여 지표면 농도에 큰 영향을 미치고 있음을 알 수 있다.

순간누출 및 연속누출시 무거운가스의 분산 유형은 대기안정도가 불안정할수록, 풍속이 빠를수록, 표면거칠기 길이가 증가할수록 짧은 시간동안에 짧은 풍하거리에서 고농도로 나타나

고 있으며, 대기가 안정화됨에 따라, 풍속이 감소함에 따라, 표면거칠기 길이가 감소함에 따라 긴시간동안 긴 풍하거리에 걸쳐 점차 분산·희석되고 있음을 알 수 있다.

특히 순간누출의 경우 ERPG-3 (20 ppm)을 나타내는 지표면농도는 연속누출의 경우에 비하여 훨씬 짧은 시간동안에, 짧은 풍하거리에서 나타나고 있으므로, 순간누출의 경우 유해위험 거리 또는 독성완충거리는 연속누출의 경우에 비하여 약 4 ~ 5 배 정도 짧은 풍하거리에서 결정되어야 한다고 예측된다.

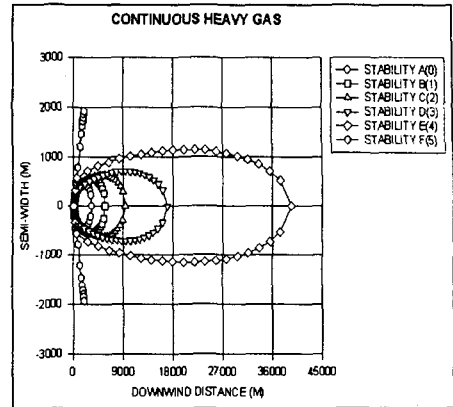
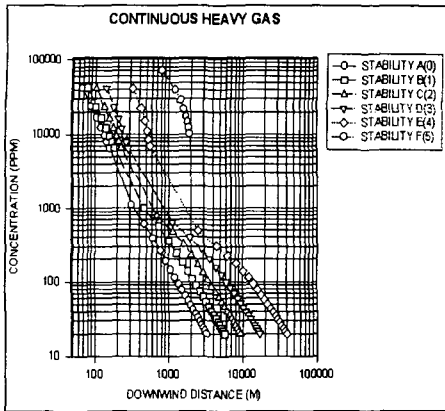


Fig. 2(a). Continuous heavy gas dispersion modeling results for stability variation.

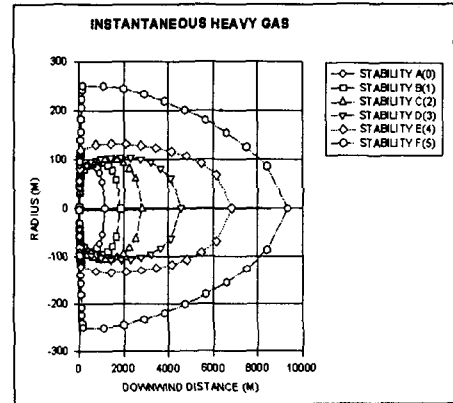
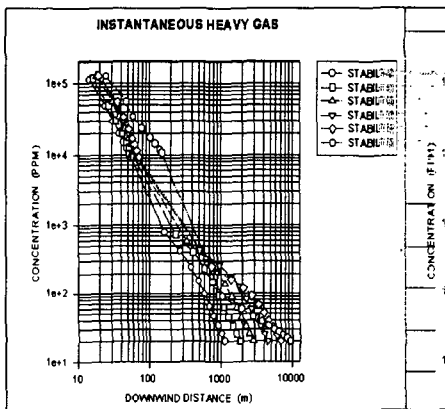


Fig. 2(b). Instantaneous heavy gas dispersion modeling results for stability variation

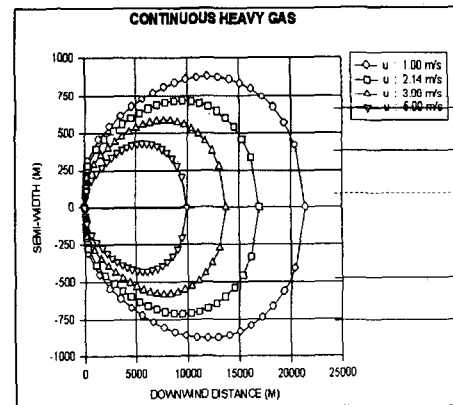
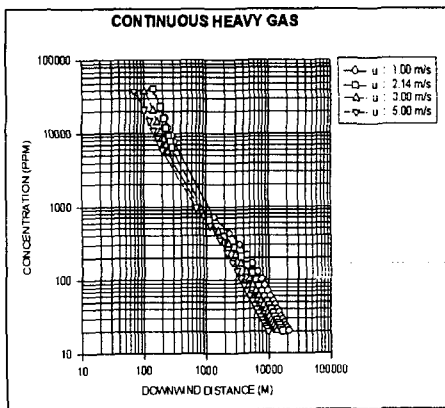


Fig. 3(a). Continuous heavy gas dispersion modeling results for wind speed variation.

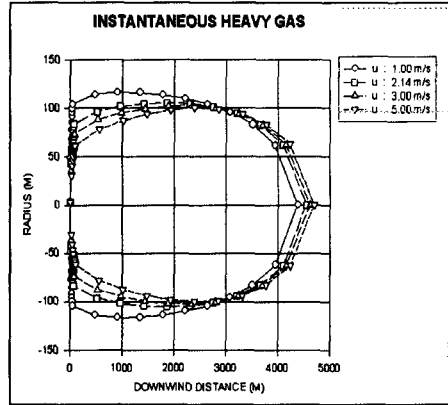
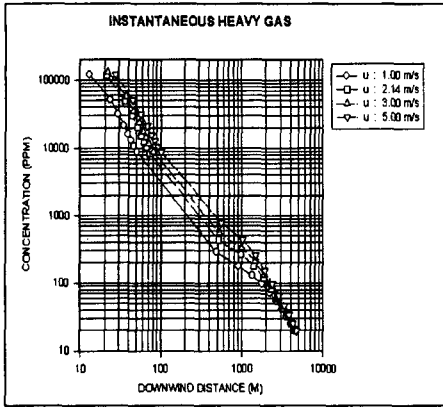


Fig. 3(b). Instantaneous heavy gas dispersion modeling results for wind speed variation.

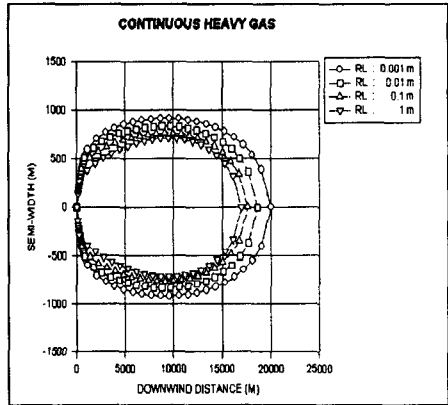
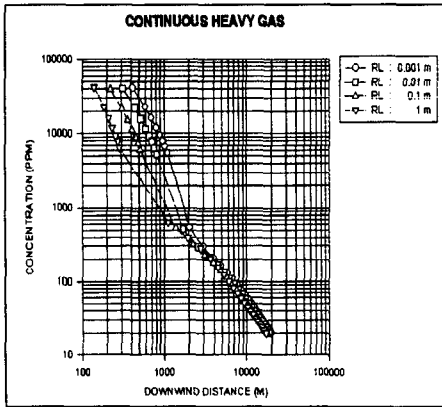


Fig. 4(a). Continuous heavy gas dispersion modeling results for roughness length variation.

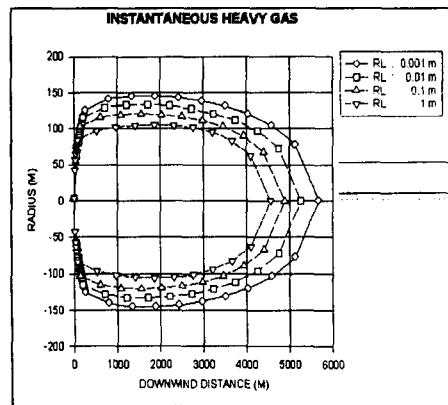
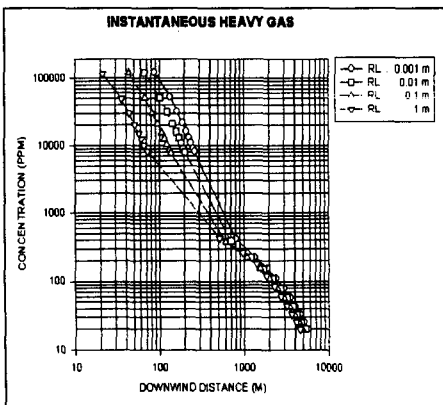


Fig. 4(b). Instantaneous heavy gas dispersion modeling results for roughness length variation.

4. 결 론

본 연구를 수행하여 다음과 같은 결론을 얻었다 :

(1) 유해독성가스의 분산모델링방법론의 개발

본 연구는 액화염소 저장탱크의 균열에 의하여 유해독성가스인 염소가스가 2상으로 연속 및 순간누출될 때, 스크리닝 절차와 보다 정교한 해석모델을 적용하여 예측된 농도를 법적 독성기준농도인 IDLH 및 ERPG-3 농도와 비교함으로써 유해위험거리 또는 독성완충거리를 결정하는 독특한 분산모델링 방법론을 개발하였다.

(2) 분산모델링에 의한 독성완충거리의 예측

· 대기안정도, 풍속 및 표면거칠기 길이의 변화는 지표면 농도에 큰 영향을 미친다.

· ERPG-3 농도에 근거한 유해위험거리 또는 독성완충거리는 순간누출의 경우, 연속누출의 경우에 비하여 약 4 ~ 5 배 정도 짧은 거리에서 결정되어야 한다고 예측된다.

(3) 지역사회의 비상대응체제계획 수립을 위한 가이드라인

보다 다종·다양한 누출유형에 대하여 적절한 누출원 모델과 분산모델을 선정하여 독성완충거리를 결정하는 분산모델링 방법론을 체계화하고 최적의 sliding scale 방법론을 개발함으로써 정량적 유해위험성 평가기술 및 지역사회 비상대응체제 계획 (emergency response planning) 수립에 대한 가이드라인을 제공할 수 있을 것으로 사료된다.

참고문헌

1. Roger Mallet, "Evaluate the Consequence of Incidents", *Chem. Eng. Prog.*, 69, Jan. (1993).
2. Roger Mallet, "Evaluate the Consequence of Incidents - Part 2", *Chem. Eng. Prog.*, 74, Feb. (1993).
3. USEPA, "Guidance on the Application of Refined Dispersion Models to Hazardous Air Pollutants Releases-Appendix B", EPA-454/R-93-002, A-1~A-10, Apr. (1993).
4. G.A. Melhem, "Advanced Consequence Analysis : Emission, Dispersion, Fire, and Explosion Dynamics-Chapter 7. Dispersion Modeling", Arthur D. Little, Inc., 283~455, Aug. (1995).
5. "Superchems, Professional Edition Version 2.0 - User Guide", Arthur D. Little, Inc., Aug. (1996).

6. USEPA, "Workbook of Screening Technologies for Assessing Impacts of Toxic Air Pollutants (Revised)", EPA-454/R-92-024, 1-1~5-34, Dec. (1992).