Korean Chem. Eng. Res., 54(3), 350-359 (2016)
http://dx.doi.org/10.9713/kcer.2016.54.3.350
PISSN 0304-128X, EISSN 2233-9558

기체 블로우 다운의 동적 모델링 및 분석

김경운 · 서지원 · 황성원† · 이윤주* · 문영식*

인하대학교 화학·화학공학 융합대학원
22212 인천광역시 남구 인하로 100
*대우조선해양 공정시스템연구 그룹
04539 서울특별시 중구 을지로 5길 26
(2015년 9월 12일 접수, 2015년 12월 29일 수정본 접수, 2016년 2월 2일 채택)

Dynamic Modeling & Analysis of Vapor Phase Blowdown of Depressurized Vessel

Kyungwoon Kim, Ji Won Seo, Sungwon Hwang†, Yun Ju Lee* and Young Sik Moon*

Graduate school of Chemistry and Chemical Engineering, Inha University, 100, Inha-ro, Nam-gu, Incheon, 22212, Korea
**Process System R&D group, Daewoo Shipbuilding & Marine Engineering Co. LTD, 26, Eulji-ro 5-gil, Jung-gu, Seoul, 04539, Korea*
(Received 12 September 2015; Received in revised form 29 December 2015; accepted 2 February 2016)

요 약

본 연구는 vessel blowdown 시 발생하는 온도와 압력 변화를 보다 정확히 예측하기 위하여 기존에 개발된 dynamic model을 기반으로 새로운 모델을 개발하고, 개발한 모델의 정확도를 높이기 위하여 vessel 내부의 흐름이 층류일 때와 난류일 때를 모두 고려하여 vessel 벽면으로부터 기체로의 열 전달량을 계산하였다. 효율적인 열역학 계산을 위해 일체의 계산식은 압력이 감소하는 단계 별로 나누어 진행하였으며 계산의 부담을 덜어주면서 계산의 정확도를 유지하기 위한 압력변화 size를 결정하였다. 개발한 모델에 Peng-Robinson equation과 Soave-Redlich-Kwong equation을 적용하여 각각의 경우에 따른 결과의 차이를 비교하였다. 마지막으로 모델의 검증을 위해 Haque et al.의 실험조건을 동일하게 적용하여 실험 결과와 시뮬레이션 결과를 비교 하였으며, 이를 통해 모델의 정확도를 입증하였다.

Abstract – For accurate estimation over the change of pressure and temperature of the vessel during blowdown period, a new dynamic blowdown model was developed in this work. In particular, heat transfer from the vessel wall to discharge gas at both laminar or turbulent flow in the vessel was embedded to the model to increase the accuracy of blowdown estimation. For thermodynamics, the whole blowdown period was discretized into finite pressure decrement steps, and the step size was adjusted so that the calculation can be more efficiently carried out, while maintaining the model's accuracy. Both Peng-Robinson and Soave-Redlich-Kwong equation of states were applied to the model, and the results were compared each other. Finally, the simulation results was compared with Haque and coworkers' experimental results, and it proved high accuracy of the model.

Key words: Dynamic blowdown modeling, Vessel blowdown, One-phase fluid, Empirical correlation

1. 서 론

최근 심해저 플랜트 및 극한해양 지역의 플랜트설비 기술 개발 등 건설 조건이 까다로운 플랜트 설계 기술이 요구되고 있으며, 이러한 추세에 따라 플랜트 안전설비에 관한 요구사항도 같이 증가하고 있다.

Blowdown은 플랜트에서 화재나 장치의 결함 등으로 인한 비정상적인 운영 상태에 따른 사고방지를 위하여, 장치 내부의 가연성 기체 등을 단 시간에 밖으로 배출하여 안전한 장소로 이송시키는 운전으로 플랜트 안전을 위해 일반적으로 사용하는 방법이다[1-3]. 그러나 blowdown 시 vessel 내부 기체의 급격한 배출로 인하여 vessel 내부의 압력과 온도가 낮아지고, 이에 따라 배출기체의 액화가 진행될 수 있다. 액체의 높은 열 전달 계수는 vessel 벽 면의 온도를 급격하게 떨어뜨리고, 이로 인해 vessel 벽 면의 온도가 ductile-brittle point 이하로 낮아져서 vessel의 재질이 상당히 약해지게 되며, 외부 충격 시 파손되는 경향이 있다[2,3]. 즉 blowdown은 플랜트의 안정적인 운용을 위하여 필수적이지만 그 자체로 위험한 운전 방법이다. 따라서 안정적인 blowdown 운전을 위해서는 정상상태 기반 시뮬레이션(steady-state simulation) 대비 정확도가 높은 동적 시뮬레이션(dynamic simulation) 기술을 통해 blowdown 시 온도 변화를 예측하

†To whom correspondence should be addressed.
E-mail: sungwon.hwang@inha.ac.kr
This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

고 이를 설계에 반영할 필요가 있다.

기존에 개발된 blowdown 모델은 Haque 등의 'BLOWDOWN' 모델, Overa 등의 'Split Fluid' 모델, Wong의 'BLOWSIM' 모델, 등 다양하게 개발되었다[4]. Haque 등은 연구실 규모 및 실제 공정에서 실험을 기반으로 모델링을 진행하였고, 그 모델링의 정확도가 매우 높지만 모델링 방법에 대한 설명이 완전하게 기록되어 있지 않다[1,5]. Overa 등은 blowdown 시 기상과 액상을 개별적으로 모델링 함으로써, 기상과 액상의 비 평형 상태를 고려하였다[6]. 그러나 이에 대한 시뮬레이션 결과는 기체와 액체의 최소 온도만을 비교하며, 기체 또는 액체와 접촉한 벽면의 최소 온도는 공개되지 않았다. 또한 실험 결과와 비교 했을 때, 모델링의 정확도가 많이 낮았다. Wong의 BLOWSIM모델은 위에서 소개된 Haque 등의 BLOWDOWN 모델에서 적용된 empirical correlation과, Overa et al. 의 BLOWSIM 모델의 기상과 액상을 분리하여 계산 하는 방식을 융합한 모델로 모델링 방법이 상대적으로 명확하게 설명되어 있고, 다양한 상태 방정식(PR, SRK, TCC)을 적용하여 분석하였다. 그러나 BLOWSIM 모델의 정확도는 BLOWDOWN 모델에 비해서는 다소 낮은 편이며, simulation 알고리즘이 실제로 적용하기엔 다소 복잡한 단점이 있다. 이와 같이 기존 연구는 BLOWDOWN 모델을 제외하면 정확도가 낮거나, 모델링 방법이 명확하게 기록되어 있지 않거나, 복잡하여 실제로 모델링에 적용하기 어려운 경우가 많다. 또한 위에서 언급된 모든 모델링이 vessel 내부의 기체흐름이 층류일 때만을 가정하여, vessel로부터 내부 기체의 열 전달량이 실제보다 낮게 계산되었다.

따라서 본 연구에서는 Wong의 BLOWSIM 모델의 계산 알고리즘을 변형하여 모델과 시뮬레이션의 효율성을 증가시키고, BLOWSIM 모델의 적용된 empirical correlation과 vessel 내부의 흐름이 층류 뿐만 아니라 난류일 때도 고려하여 정확성을 한층 높였다. 또한 구축한 모델을 이용한 시뮬레이션 분석을 통해 기체 blowdown 시 vessel의 압력, 기체의 온도 및 양, 벽 면의 온도 변화, 배출기체의 유량과 온도를 분석하였다. 마지막으로, 시뮬레이션 결과를 Haque 등의 experiment I의 결과와 비교하여, 정확도를 분석하였다.

2. 모델 구축

Blowdown 시 일어나는 변화와 현상은 유체역학, 열 전달 및 물질 전달 그리고 열역학 등 다양한 이론과 수식을 이용하여 분석한다. 특히, blowdown이 상 변화를 동반하고, 임계 조건(critical condition) 근처에서 변화를 나타낸다는 점에서 열역학적으로 계산이 복잡하다[7].

Vessel 내부를 차지하는 기체는 blowdown을 시작하면, 초기에는 기체의 온도가 빠르게 감소하므로 등 엔트로피 팽창일 경우와 유사한 온도 변화를 나타낸다. 기체의 온도가 어느 정도 감소하면, vessel 벽면으로부터 기체로의 열 전달이 발생하게 되므로 기체의 온도 변화가 더 이상 등 엔트로피 팽창일 때 변화를 따르지 않고 다른 양상을 보인다. 한편, 벽 면의 온도 변화는 기체로의 열 전달 때문에 온도가 감소하다가 더 이상 감소하지 않는 추세를 보이는데, 이는 vessel 벽 면의 열 용량(heat capacity)이 상대적으로 기체의 열 전달 계수(heat transfer coefficient) 보다 크기 때문이다. 따라서, 이와 같은 현상을 수식으로 검증하고자, 배출 기체의 열 전달 계수를 계산하는데 필요한 Chuchill & Chu's correlation, McAdam correlation 등을 검토하고, 벽 내부의 열전도량, 기체의 배출속도 계산을 위한 속도식, 배출기체의 열역학적인 계산을 위한 상태방정식(CEOS; Cubic Equation Of State), 등을 살펴보았다. 본 연구에서 활용하는 시뮬레이션 알고리즘 및 수식은 Wong의 BLOWSIM 모델과 Overa 등의 'SPLIT FLUID MODEL'을 참조하여 진행하였다.

2-1. 열 전달 계수 및 열 전달량

Blowdown 시 vessel 벽 면으로부터 배출 기체로의 열 전달은 다음과 같이 두 구역으로 나누어 계산을 진행하게 된다. 각 구역은 벽면의 형태, 유체의 열역학적 성질에 따라 분류되며, 각 구역의 열 전달 계수는 각각의 경험식을 이용하여 계산한다.

· 측벽으로부터의 열 전달
· 상부 및 하부 벽면으로부터의 열 전달

기체의 액화가 진행될 경우, 다음과 같이 네 영역으로 나뉜다.

· 기체와 접촉한 측벽으로부터 기체로의 열 전달
· 액체와 접촉한 측벽으로부터 액체로의 열 전달
· 상부 벽면으로부터 기체로의 열 전달
· 하부 벽면으로부터 액체로의 열 전달.

Vessel 벽 면으로부터 기체로의 열 전달 속도(q)는 벽 면의 온도(T_W)와 기체의 온도(T_{Z1}) 차에 비례하며, 이 때 전달된 총 열량(Q)는 다음과 같이 기체의 총괄 열 전달 계수(U), 기체의 열 전달 면적(A_{Z1})과 시간 변화량(Δt)를 이용하여 구할 수 있다.

$$q = UA_{Z1}\Delta T = UA_{Z1}(T_W - T_{Z1}) \tag{1}$$

$$Q = UA_{Z1}\Delta T\Delta t \tag{2}$$

총괄 열 전달계수는 기체가 접촉한 벽면의 전체 면적에 대한 상부와 하부의 면적(A_{end})과 측면부의 면적(A_{cyl})의 비와 각각의 경막 열 전달 계수(h)로 나타낸다[2].

$$U = (h'_{top} + h'_{btim})\left(\frac{2A_{end}}{A_{Z1}}\right) + h_{cyl}\left(\frac{A_{cyl}}{A_{Z1}}\right) \tag{3}$$

$$A_{Z1} = 2*A_{end} + A_{cyl}$$

기체의 경막 열 전달 계수는 각각의 경우에 대한 standard correlation을 통해서 구한 Nusselt number (Nu) 값을 이용하여 찾아낸다.

$$Nu = \frac{hL}{k} \tag{4}$$

Churchill and Chu's correlation은 원통형 베셀의 측벽에 접촉한 기체에 적용할 수 있다[2].

$$Nu_{cyl,V} = \left\{0.835 + \frac{0.387Ra_{cyl,V}^{1/6}}{\left[1+\left(\frac{0.492}{Pr_V}\right)^{9/16}\right]^{8/27}}\right\}^2 \tag{5}$$

$$Ra_{cyl,V} = Gr_{cyl,V}Pr_V \tag{6}$$

$$Gr_{cyl,V} = \frac{L_{cyl}^3\rho_V^2 g\beta_V(T_{W,Z1} - T_{Z1})}{\mu_V^2} \tag{7}$$

$$Pr_V = \frac{c_{pV}\mu_V}{k_V} \tag{8}$$

$$Nu_{cyl,V} = \frac{h'_{cyl,V}L_{cyl,V}}{kV} \tag{9}$$

측벽의 특성길이($L_{cyl,V}$)는 기체와 접촉하고 있는 원통형 측벽의 길이로, 보통 vessel의 높이와 같다. 기체의 액화가 진행될 경우, 측벽의 특성길이는 vessel의 높이에서 액체의 높이를 뺀 값이 된다.

Vessel의 양끝 면의 열 전달을 고려할 경우에는 McAdam's correlation을 적용한다. McAdam's correlation은 무차원수인 Rayleigh number (Ra)로 나타낸다. Rayleigh number의 정의는 Grashof number (Gr)와 Prandtl number (Pr)의 곱이다[2].

$$Nu_{end,V} = dRa_{end,V}^{b} \tag{10}$$

$$Ra_{end,V} = Gr_{end,V}Pr_{V} \tag{11}$$

$$Gr_{end,V} = \frac{L_{end}^{3}\rho_{V}^{2}g\beta_{V}(T_{W,Z1}-T_{Z1})}{\mu_{V}^{2}} \tag{12}$$

$$Nu_{end,V} = \frac{h'_{end,V}L_{end,V}}{k_{V}} \tag{13}$$

기체의 열전도도, 밀도, 점도 등의 열역학적 물성치는 온도와 압력 그리고 조성에 영향을 받는다[8]. 따라서 각 단계 별로 온도와 압력을 이용한 TP Flash를 계산하였다[9,10].

양 단의 특성길이는 vessel의 형태에 따라 달리 적용된다. Vessel의 형태가 평평한 형태일 경우, vessel 양 단의 특성길이($L_{end,V}$)는 다음과 같다.

$$L_{end,V} = \frac{D_{vessel}}{4} \tag{14}$$

Vessel 양쪽 끝 단의 형태가 돔 형태일 경우, (13) 식에 vessel의 직경(D_{vessel}) 대신 돔의 상당직경(D_{dome}; equivalent diameter)을 적용한다.

$$D_{dome} = \sqrt{\frac{A_{dome}}{\pi}} \tag{15}$$

McAdam's parameter b, d값은 표면이 향한 방향에 따라, Rayleigh number (Ra) 값에 따라 결정되며, Wong의 BLOWSIM 모델에서는 아래 Table 1과 같이 적용하였다[2,4].

BLOWSIM 모델에서는 위와 같이 vessel 내부의 기체 흐름이 층류일 때만을 가정한다. 하지만 시뮬레이션 결과 Rayleigh number 가 난류인 값이 나타나므로, 본 연구는 vessel 내부 흐름이 난류일 경우도 같이 고려하여 모사하였다. 또한 Winters 등에 따르면 vessel 내부의 기체 흐름이 층류일 때와 난류일 때 McAdams parameter 값이 각각 다음과 같을 때 정확도가 높았다고 제시 되었다[5].

$$\text{Laminar flow } (Ra < 1.24*10^{8}) : d = 0.933,\ b = 0.25 \tag{16}$$

$$\text{Turbulent flow } (Ra > 1.24*10^{8}) : d = 0.168,\ b = 0.33 \tag{17}$$

Table 1. McAdam's parameters for laminar flow [2]

Type of flow	d	b	Ra
Hot surface facing down (Laminar flow)	0.27	1/4	10^{5}~10^{10}
Hot surface facing up (Laminar flow)	0.54	1/4	10^{4}~10^{7}

위의 Churchill & Chu's correlation과 McAdams correlation 등을 이용하면, vessel의 측면과 양 단에 대한 각각의 경막 계수 값을 찾아낼 수 있다. 이를 식 (3)에 적용하여 총괄 열 전달 계수를 구한다. 이 때 벽 면의 온도는 전체적으로 균일하다고 가정한다.

2-2. 열 전도 및 내벽의 온도

Vessel 내부 벽면으로부터 기체로의 열 전달로 인해 vessel 내부 벽면의 온도(T_W)가 낮아지면 vessel 외벽에서 내벽으로 열 전달이 발생한다. 외벽에서 내벽으로의 열 전달은 주로 열전도를 통해 진행되며, T_{OW}가 외벽의 온도이고, k가 vessel의 열전도도 그리고 x가 벽의 두께일 때 열 전도 식은 정의에 따라 다음과 같다.

$$q_{c} = k\frac{A_{Z1}(T_{OW}-T_{W})}{x} \tag{18}$$

따라서 vessel 내벽의 온도는 식 (1)의 내벽에서 기체로의 열 전달 속도(q)와 식 (16)에서 구한 벽면 내부의 열전도 속도(q_c) 그리고 vessel의 질량과 비열 등을 이용하여 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$(q_{c}-q)\Delta t = mCp\Delta T = mCp(T_{W}^{i}-T_{W}^{i-1}) \tag{19}$$

이 때 vessel의 열역학적 물성은 Haque 등의 실험에서 공개된 바가 없어서 stainless steel 303의 정보를 사용하였고, 그 값은 다음과 같다.

2-3. 기체 배출 속도

Fig. 1과 같이 오리피스를 중심으로 상부의 압력(P_1)과 하부의 압력(P_2)이 같다면 유체의 흐름은 존재하지 않는다. 만약 P_1이 점점 증가하고 P_2는 일정하게 유지된다면 오리피스로 배출되는 기체의 속도는 P_1값에 따라 증가하게 된다. 그러나, P_2와 P_1의 압력비(P_2/P_1)가 일정한 값 이하로 작아지면 P_1이 증가하여도 기체의 배출 속도(discharge velocity)가 증가하지 않는 구간이 발생하는데 이러한 흐름을 choke flow 또는 critical flow라고 한다[11-13]. 이 때 배출 속도는 음속과 같고 배출 질량 유속($\dot{m}$; discharge mass rate)는 다음과 같으며[2,5,14], 식 (20)의 γ는 기체의 C_p 값과 C_V 값의 비를 나타내고, C_d는 오리피스의 배출 계수이다.

$$\dot{m} = C_{d}A_{O}\sqrt{\gamma P_{1}\rho_{vap}\left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{(\gamma+1)/(\gamma-1)}} \tag{20}$$

식 (18)에서 기체의 밀도(ρ_{vap})은 상부 압력(P_1)에 비례한다. 따라서 choke 상태일 때 배출 질량 유속은 P_1이 증가함에 따라 거의 선형적으로 증가한다. 또한 choke 상태일 때 배출 질량 유속은 오리피스 상부의 압력에만 영향을 받고, 하부의 압력은 영향이 없다.

Bird 등에 따르면 choke flow가 아닐 때 질량 유속은 다음과 같이 계산할 수 있다[15]. 이 때 기체 흐름이 오리피스에 서서히 접근한 후, 출구에서 급격히 가속하여 등 엔트로피 팽창 한다고 가정한다.

$$\dot{m} = C_{d}A_{O}\sqrt{2P_{1}\rho_{vap}\left(\frac{\gamma}{\gamma-1}\right)\left[\left(\frac{P_{o}}{P}\right)^{2/\gamma}-\left(\frac{P_{o}}{P}\right)^{\gamma+1/\gamma}\right]} \tag{21}$$

Table 2. Thermo-physical properties of stainless steel

Type	Specific gravity (g/cm^3)	Thermal conductivity (W/mK)		Specific heat capacity (J/kgK)	Electrical resistivity (μΩ/cm)
		100 °C	500 °C		
303	8.0	16.2	21.5	500	72

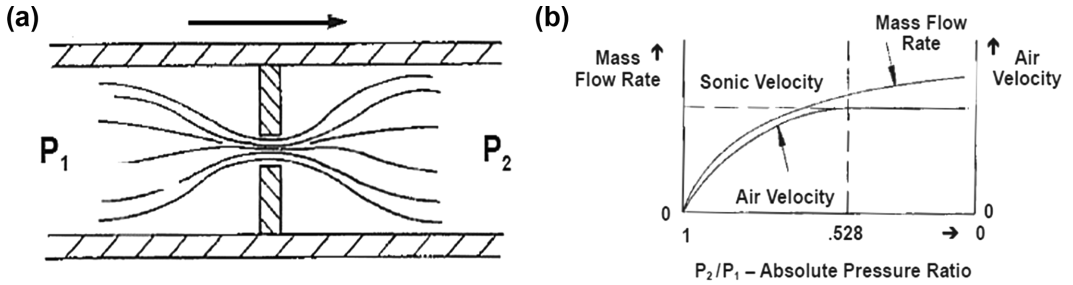

Fig. 1. (A) Discharged air flow from an orifice at speed of sound. (B) Mass flowrate and velocity of air over P2/P1.

배출 기체의 흐름이 choke flow인지 여부를 확인하기 위해서, 다음과 같이 choke 압력(P_C)이 오리피스 하부의 압력(P_d)보다 큰 경우 choke flow로 간주한다. 본 연구에서는 오리피스 하부의 압력은 대기압과 같다고 가정하였고, 또한 blowdown이 진행중인 대부분의 영역에서 기체의 배출 흐름은 choke flow라고 여겼다.

$$P_C \geq P_d \tag{22}$$

파이프로부터 오리피스로 빠져 나가는 기체흐름으로의 열전달이 없다고 가정하면, 오리피스를 전후로 vessel 내부의 에너지(질량당 엔트로피, 운동에너지, 위치에너지의 합)는 오리피스를 빠져나가는 흐름에도 보존된다. 따라서 오리피스의 상부와 오리피스를 빠져나가는 기체 흐름에 대하여 다음과 같은 에너지 밸런스 식을 도출할 수 있다.

$$h_u + \frac{1}{2}v_u^2 + gz_u = h_o + \frac{1}{2}v_o^2 + gz_o \tag{23}$$

이 때 vessel 내부의 유속 v_u 값은 오리피스에서의 유속 v_o에 비해 무시할 만하고, vessel과 오리피스 간의 높이 차가 크지 않다면 수식이 다음과 같이 간단해진다.

$$h_u = h_o + \frac{1}{2}v_o^2 \tag{24}$$

위 (24)식에서 오리피스를 빠져나가는 배출기체의 엔탈피는 배출기체의 압력과 엔트로피를 이용하여 그 값을 찾아낸다. 따라서 (24)식이 성립하도록 하기 위한 배출기체의 압력은 반복계산을 통해 찾아낼 수 있으며, 배출기체의 압력은 위에서 언급한 바와 같이 choke flow일 경우는 choke 압력과 동일하고, choke flow가 아닐 경우에는 오리피스의 하부 압력(보통 대기압과 같다) 동일하다.

배출 기체 흐름이 choke flow라면 기체의 유속은 음속(speed of sound)과 같다. 이 때 기체가 오리피스에서 빠르게 팽창하므로 배출기체의 응축이 일어날 수 있다. Haque 등은 choke 상태의 기체는 준안정상태(metastable state) 또는 상평형 상태일 것으로 예상하였고[1], 실험을 통해 choke 상태의 배출 기체와 응축 액체는 상평형 상태라고 가정할 때 정확도가 더 높았음을 확인하였다. 따라서 동일한 가정을 모델링에 적용 하였으며, 배출 흐름이 choke flow 인지 여부에 따라 오리피스에서 엔탈피(h_O)값을 다르게 적용하였다.

Choke flow 일 때 기체의 유속은 음속과 같다. 음속은 기체 상태방정식(Equation of state)을 기체의 밀도에 대하여 미분하여 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$a = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\bigg|_S\right)^{1/2} = \left(\gamma\frac{\partial P}{\partial \rho}\bigg|_T\right)^{1/2} \tag{25}$$

따라서 식 (23)을 이상기체 상태방정식에 적용하여 음속을 구하면 다음과 같다.

$$a = \sqrt{\frac{\gamma RT}{Mw}} \tag{26}$$

본 연구는 이상기체 상태방정식을 이용하여 음속을 구하는 경우에 계산 정확도가 실제와 크게 차이가 나지 않으므로 이상기체 상태방정식을 이용해도 무방한 것으로 간주하였다[16,17].

2-4. Cubic Equation of State (CEOS)

CEOS는 blowdown 모델링을 진행 함에 있어서 열역학적인 물성치와 온도 등을 도출해내기 위해 이용된다. 다양한 CEOS 중 Peng-Robinson CEOS (PR CEOS)와 Soave-Redlich-Kwong CEOS (SRK CEOS)는 간편하고, 비극성 물질의 기-액 평형과 물성치를 예측하는 정확도가 높아 화학공정 분야에서 자주 사용된다[2,18]. 두 CEOS는 다음과 같다.

· Peng-Robinson

$$P = \frac{RT}{V_m - \beta} - \frac{\alpha}{V_m(V_m+\beta)+\beta(V_m-\beta)} \tag{27}$$

· Soave-Redlich-Kwong

$$P = \frac{RT}{V_m - \beta} - \frac{\alpha}{V_m(V_m+\beta)} \tag{28}$$

For PR

$$\alpha = 0.45724 \times \frac{(RT_C)^2}{P_C} \times (1 + m(1 - T_R^{0.5}))^2 \tag{29}$$

$$\beta = 0.0778 \times \frac{RT_C}{P_C} \tag{30}$$

$$m = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \tag{31}$$

For SRK

$$\alpha = 0.427480 \times \frac{(RT_C)^2}{P_C} \times (1 + m(1 - T_R^{0.5}))^2 \tag{32}$$

$$\beta = 0.08664 \times \frac{RT_C}{P_C} \tag{33}$$

$$m = 0.48508 + 1.55171\omega - 0.15613\omega^2 \tag{34}$$

PR과 SRK CEOS는 van der Waals CEOS를 기반으로 하고 있고, 상수 α와 β는 각각 분자의 인력과 척력을 나타낸다. 이들은 critical temperature (T_C)와 critical pressure (P_C), reduced temperature (T_R) 값에 따라 결정된다. 또한 m은 분자의 이심인자(Acentric factor)에 의해 결정된다.

2-5. 공정모사 알고리즘

이전의 관련 연구들을 통하여, vessel blowdown의 동적 모사는 시간의 변화에 따라 모사하는 것보다 압력의 변화에 따라 모사하는 방법이 열역학적으로 효율적임이 밝혀졌다[2,5,17,19]. 따라서 본 연구에서도 기체팽창에 따른 압력 변화를 단계 별로 나누어 각 단계의 열역학적인 변수(압력, 온도, 기체의 열역학적 물성치 등) 및 기체의 배출 속도 등이 각 단계에서 일정하다고 가정하고 계산을 전개하였다. 계산 알고리즘은 Wong의 BLOWSIM 모델의 알고리즘을 변형하여 적용함으로써 계산 과정과 정확도를 유지하면서 시뮬레이션 시간의 효율성을 높였다.

기체상만 존재하는 blowdown의 모델 알고리즘은 압력 변화와 엔트로피 변화를 축으로 각 단계 별로 계산을 진행한다. 단계 간 압력이 감소하는 비율은 이전 단계의 압력의 0.05배로 지정하였으며, 기체의 엔트로피는 이전 단계의 엔트로피 값으로 가정한다. 참고로 0.05는 사용자가 임의로 정한 값이며 계산의 정확도를 높이기 위해서는 이 수치를 낮게 설정할 수 있으나, 계산효율은 떨어지게 된다. 위와 같이 결정된 압력과 엔트로피로 PSFlash 계산을 하여 현재 단계의 온도와 엔탈피 그리고 배출 기체의 밀도 등의 값을 찾아낸다. 초기 단계의 엔트로피, 엔탈피, 밀도, 점도 등은 초기 압력과 기체 온도 및 초기 조성(w)을 이용하여 TPFlash 계산을 통해 찾아내었다. 초기 기체의 양은 이상기체 상태방정식을 이용하여 계산하였다. 상세한 계산 알고리즘은 Fig. 2와 3에 도시하였다.

$$P_i = (1-r)P_{i-1} \quad (35)$$
$$r = 0.05$$

각 단계의 시간 변화량 Δt_i를 계산하기 위하여 Haque 등은 다음과 같은 방법을 사용하였다[16,17].

1. 위와 같은 방법으로 PSFlash 계산을 통해 기체의 부피와 밀도를 얻는다.

2. 단위 압력 단계 동안 기체가 팽창한 부피는 기체의 부피에서 vessel의 부피를 빼서 구한다.

3. 기체의 팽창부피에 밀도를 곱하여 배출된 기체의 양(M_D)를 계산하고 식 (20) 또는 식 (21)을 이용하여 Δt_i를 구한다.

이후, 식 (1)~(19)을 이용하여 vessel 벽 면으로부터 기체로의 열

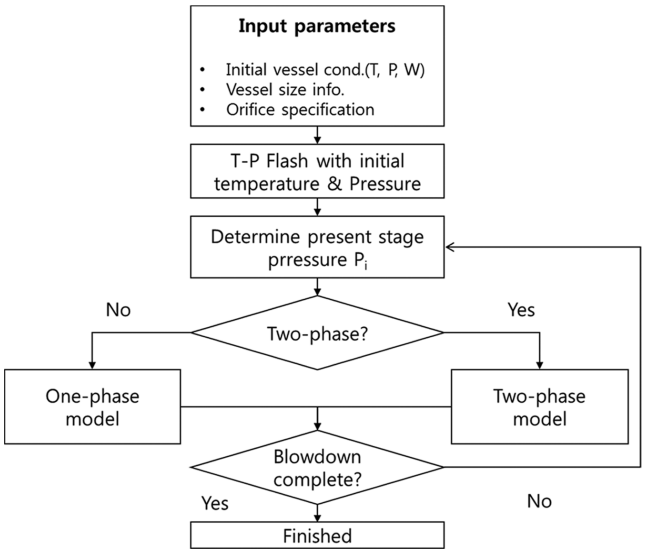

Fig. 2. Overall calculation procedure of Blowdown model [2].

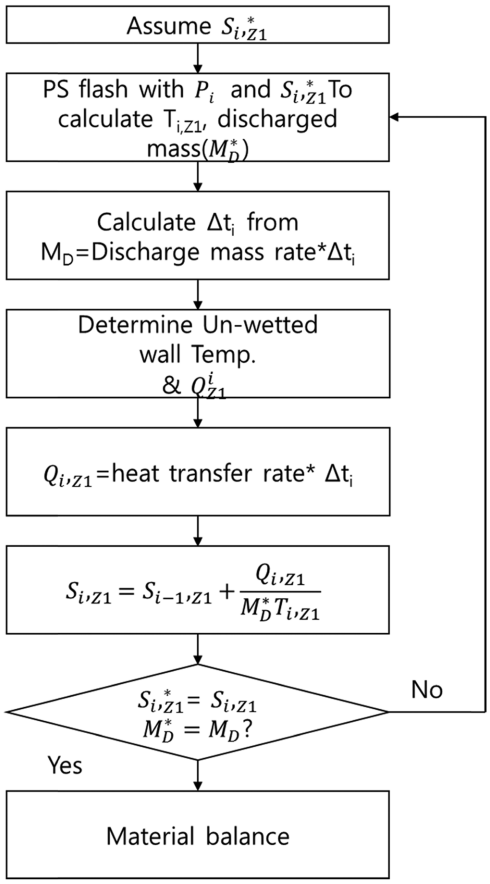

Fig. 3. Simulation algorithm of one phase model.

전달 속도 및 전달량 그리고 벽 내부의 열전도를 계산한다. 위와 같은 방법으로 얻은 값들을 이용하여 가정한 엔트로피 값이 식 (36)와 같이 계산된 엔트로피의 정의에 부합하는지를 확인함으로써 각각의 압력 단계에 대한 엔트로피 값을 찾을 수 있다.

$$S_{i,Z1} = S_{i-1,Z1} + \frac{Q_{i,Z1}}{M_D * T_{i,Z1}} \quad (36)$$

가정한 엔트로피 값이 식 (36)에 부합하면, 물질 밸런스와 다음 단계에 적용할 벽 면의 온도를 계산한다. 가정한 엔트로피 값이 식 (36)에 부합하지 않는다면, 새로운 엔트로피 값을 가정한 후 위의 과정을 반복한다.

한편 오리피스에서 기체의 질량 유속은 오리피스에서 배출되는 기체와 vessel 내부의 기체간 에너지 밸런스를 통해 choke 압력을 계산하며, 배출 흐름의 압력이choke 압력보다 큰지 여부에 따라 식 (20) 또는 식 (21)를 적용하여 찾아낸다. 상세한 방법은 다음과 같다.

1. Choke 압력 값을 가정한다.

2. 가정한 choke 압력과 vessel의 엔트로피로 flash 계산을 하여 choke 엔탈피(H_c)를 얻는다.

3. 다음과 같이 vessel 내부의 엔탈피와 choke 엔탈피의 에너지 밸런스가 성립하는 지 확인한다.

$$h_u = h_c + \frac{1}{2}a^2 \quad (37)$$

4. Vessel 내부 엔탈피와 choke 엔탈피 간의 에너지 밸런스가 성립하지 않는 경우 1번 과정부터 다시 진행한다.

3. 시뮬레이션 결과 및 비교

Rayleigh number는 유체의 흐름에 따라 유체의 열 전달이 주로 대류를 통해 열 전달이 일어나는지, 열 전도를 통해 열 전달이 주로 일어나는지를 판별하는 무 차원의 값 이다. 하지만 Clark, Charton 등 Winters 등은 Rayleigh number 값을 기준으로 층류 흐름과 난류 흐름으로 나누는 기준으로 삼기도 하였다[5,21,22]. 앞서 언급하였듯이, Winters 등은 층류와 난류를 나누는 기준으로 각각 Rayleigh number가 1.24×10^8 보다 작을 때와 클 때로 보았다.

Fig. 4에는 각각 PR equation과 SRK equation을 사용했을 때 양단의 Rayleigh number를 나타내었다. Winters 등의 기준에 따르면 blowdown 초반인 0~70초 사이는 난류 흐름으로 볼 수 있다. 전체적인 변화의 추세는 두 상태 방정식에서 비슷하게 나타났으나, PR equation에서 최대값이 더 크게 계산됨을 확인할 수 있었다.

계산에 적용된 상태 방정식에 따른 차이를 비교하기 위해, 석유화학 제품에 주로 사용되는 PR equation과 SRK equation을 적용하여 결과를 비교해 보았다. Fig. 5는 시간에 따른 압력 변화를 나타낸다. 압력의 경우는 상태방정식에 따른 차이가 없으므로 한 가지 결과만 나타내었다. Fig. 6와 7에는 기체의 온도와 기체와 접촉한 vessel 벽면의 온도를 나타내었다. 시뮬레이션에 필요한 기본 정보는 Haque 등의 실험과 동일한 조건을 적용하였고, 실험조건에서 공개되지 않은 vessel의 열전도도, 비열 등의 물성치는 Stainless steel 303의 정보를 이용하였다. 해당 정보는 Table 3에 정리 하였다.

Fig. 5에서와 같이 압력은 blowdown이 시작하고 초반에는 급격하게 감소하다가, 이후엔 vessel 내부의 기체 양이 감소함에 따라 압력이 감소하는 속도가 줄어들어 완만하게 줄어드는 것을 확인하였다. 이는 배출이 지속될수록 vessel 내부의 압력이 감소함에 따라 식 (18)과 식 (19)와 같이 배출 유량이 감소하기 때문이다. 압력이 150 bar에서 1 bar까지 낮아지는데 약 100초 정도가 소요되었다. 개발한 모델의 시뮬레이션 결과와 실험의 실험결과가 잘 부합하는 것을 확인 하였으며, 오리피스의 팽창 계수(Cd)가 0.66~0.67일 때 실험결과와 가장 유사한 결과를 얻을 수 있었다.

Table 3. Experiment condition of Haque et al. and specifications of a vessel with SUS 303

Variables	Values
Initial Pressure	150 bar
Initial Temperature	290.15 K
Mole fraction (“NITROGEN”)	1
Vessel type	Flat end
Vessel height	1.524 m
Vessel Diameter	0.273 m
Wall thickness	25 mm
Orifice diameter	6.35 mm
Heat capacity of vessel	500 J/K
Density of vessel	8000 kg/m^3

Fig. 5의 파란색 선은 Haque 등의 실험 결과이고, 주황색 선은 시뮬레이션 결과를 나타낸다. 그림과 같이 시간에 따른 압력의 변화에 대한 시뮬레이션 결과가 실험 결과에 부합함을 확인 하였다.

기체의 온도는 Fig. 6와 7에서와 같이 초기 290 K에서 시작해서 40초 부근에서 온도가 190 K까지 낮아졌고, 이후엔 서서히 증가하는 것을 확인하였다. 온도가 다시 상승하는 이유는 시간이 흐를수록 vessel의 압력이 감소하는 속도가 줄어들어 팽창에 의한 열 손실 보다 벽면으로부터 기체로의 열 전달량이 커지기 때문인 것으로 해석된다. 반면 벽 면의 온도는 5 K에서 10 K 정도로 상대적으로 온도감소가 작았다. 이는 벽 면에서 기체로의 열 전달 속도보다 벽 내부에서 열 전도 속도가 더 빠르기 때문이다. 전반적으로 상태방정식에 따른 온도의 차이는 거의 없이 PR을 적용한 경우 SRK를 적용한 결과가 매우 유사하였다. 압력에 대한 실험결과와 시뮬레이션 결과의 Average Absolute Deviation (AAD)은 1.70으로 나타났다.

위의 Fig. 6와 7에서 빨간 빗금으로 나타낸 면적과 파란 빗금으로

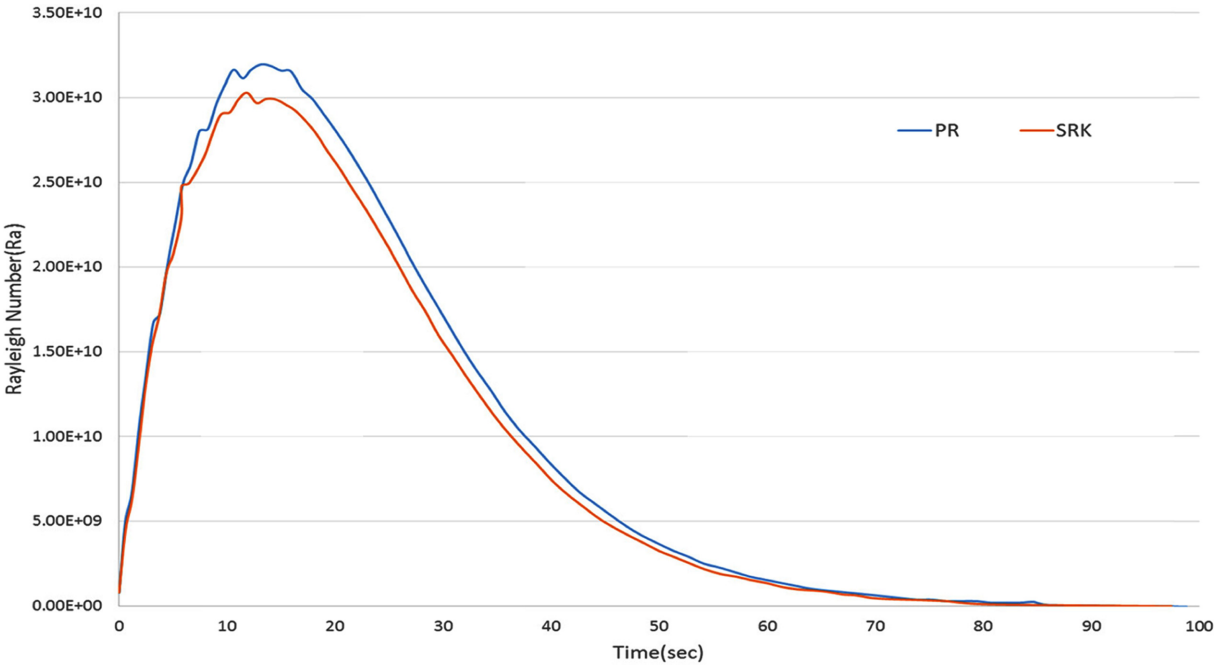

Fig. 4. Estimation of Rayleigh numbers (Ra) for vessel top and bottom based on PR and SRK equations.

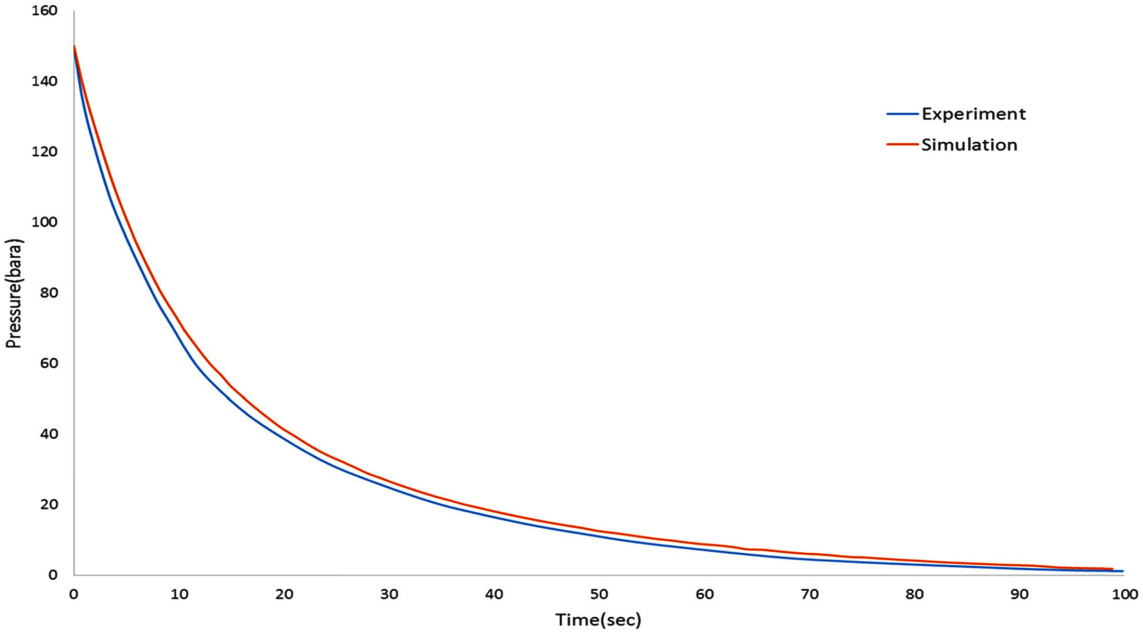

Fig. 5. Experiment and simulation results for pressure change over blowdown time.

Table 4. Analysis of Average Absolute Deviation (AAD) for pressure change over blowdown time

Time (sec)	0.03	10	19.99	29.99	39.99	49.99	59.98	69.98	79.98	89.97	99.97
Experiment (bar)	155.05	72.84	41.5	26.76	18.18	12.59	8.87	6.15	4.15	3.01	1.72
Simulation (bar)	150.05	67.55	38.86	24.97	16.53	11.16	7.37	4.43	3.08	1.86	1.21
Deviation	0	5.29	2.64	1.79	1.65	1.43	1.5	1.71	1.01	1.15	0.5
										AAD	1.70

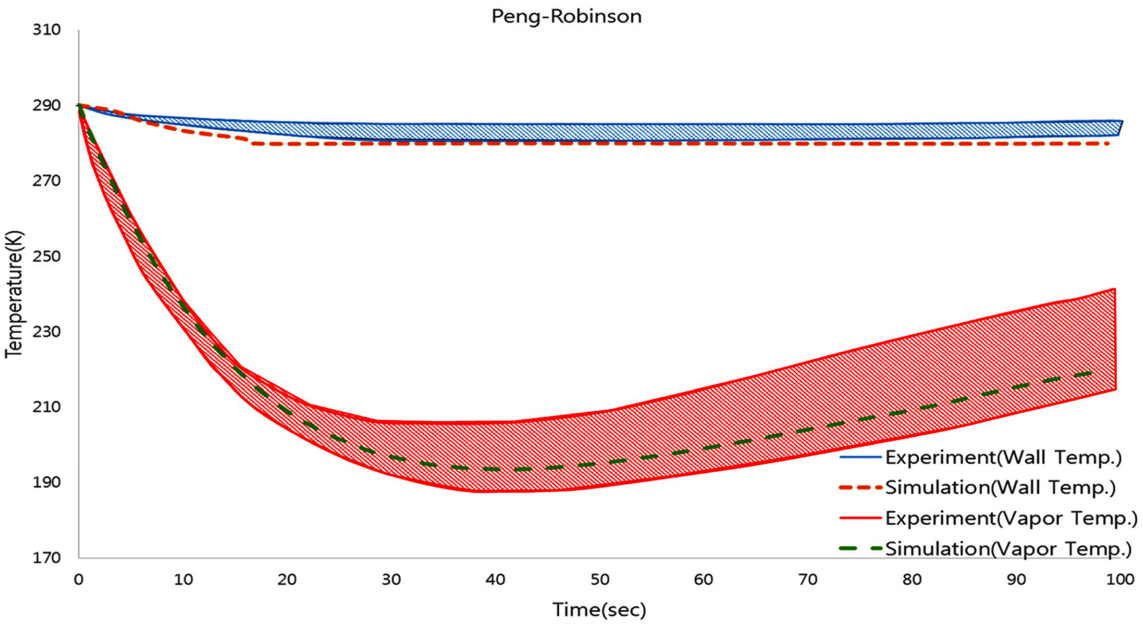

Fig. 6. Experiment and simulation results for vessel wall temperature and vapor temperature change over blowdown time based on PR equation.

나타낸 면적은 각각 블로우 다운 시 시간에 따른 배출 기체와 벽면의 온도 변화에 대한 실험결과를 나타낸다. 또한 초록 점선과 주황색 점선은 이에 대한 시뮬레이션 결과를 나타내며, 기체의 온도와 벽면의 온도에 대한 시뮬레이션 결과도 실험결과에 잘 부합하는 것을 확인 하였다.

4. 결 론

본 연구는 최적의 blowdown 용량을 산정하고자 dynamic modeling을 통해 vessel blow-down 시 기체의 온도와 압력 그리고 vessel 벽 면의 온도 변화를 예측하였고, 그 결과를 기존의 실험결과와 비교 분석하

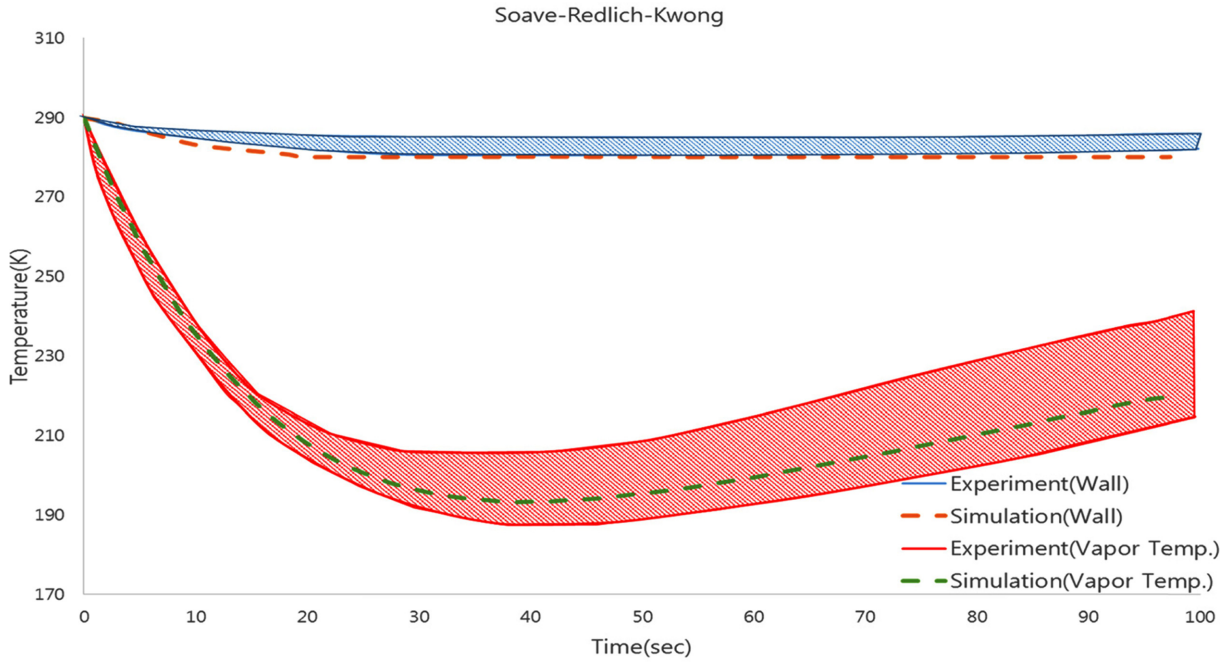

Fig. 7. Experiment and simulation results for vessel wall temperature and vapor temperature change over blowdown time based on SRK equation.

였다. 모델링은 배출 기체의 액화가 진행되지 않는 조건을 이용하였으며, 모델링의 효율성을 높이기 위하여 압력 변화를 기준으로 단계별로 나누어 각 단계 내에서는 모든 변수들이 일정하게 유지된다는 가정하에 모델링을 진행하였다. Vessel 벽 면으로부터 기체로의 열전달을 예측하기 위하여, Churchill & Chu's correlation, McAdams' correlation, 등을 이용하여 기체와 접촉한 벽 면의 형태에 따라 각각의 경막 열전달 계수를 구했고, 배출기체의 온도와 밀도, 점도 등 열역학적인 변화를 예측하기 위해서 Peng-Robinson Equation (PR)과 Soave-Redlich-Kwong Equation (SRK), 두 가지 상태 방정식을 이용하였다. 각각의 상태방정식에 따른 결과는 그래프로 나타내었으며, 기체의 온도와 압력 그리고 기체와 접촉한 벽 면의 온도는 이용한 상태방정식에 따른 차이가 크지 않음을 확인하였다. 단, Rayleigh number (Ra)의 경우 PR equation을 적용하였을 경우에 그 값이 더 큰 것을 확인하였다. Rayleigh number를 통해 blowdown이 시작하고 대부분의 시간대에서 vessel 내부의 흐름이 난류 흐름인 것을 확인 하였으며, 기존의 선행 연구에서는 vessel 내부의 흐름을 층류로 가정하였던 것과는 달리 본 연구에서는 vessel 내부 흐름이 난류인 경우도 고려함으로써 정확도를 높일 수 있었다.

시뮬레이션 알고리즘은 BLOWSIM 모델의 알고리즘을 참조하였다. 단, BLOWSIM의 알고리즘의 경우 두 가지 변수(Δt, S)를 동시에 반복계산 하는 어려움이 있어서, 각각의 변수에 대한 반복계산을 따로 진행하는 방식으로 변형하였다. 이를 통해 계산 알고리즘이 보다 단순해짐으로써 시뮬레이션의 정확도는 유지하면서, 시뮬레이션 구동 효율은 보다 증가시킬 수 있었다.

시뮬레이션 결과는 모델의 정확도와 타당성 분석을 위해 Haque 등의 실험결과와 비교 분석하였고, 온도와 압력 그리고 vessel의 벽면 온도의 시뮬레이션 결과가 실험 결과와 잘 부합하는 것을 확인하였다. 이 때의 오리피스 팽창계수(Cd) 값은 약 0.66~0.67 값 일 때 실험결과와 매우 흡사한 결과를 얻을 수 있었다.

사용기호

A : Area (m^2)
a : Speed of sound (m/s)
b : McAdam's correlation parameter (–)
Cd : Discharge coefficient (–)
Cp : Specific heat (J/kg·K)
d : McAdam's correlation parameter (–)
D : Vessel Diameter (m)
g : Acceleration of gravity (m/s^2)
Gr : Grashof Number (–)
H : Vessel height
h : Mass specific Enthalpy (J/kg)
h' : Film heat transfer coefficient ($W/m^2 \cdot K$)
k : Heat conductivity (W/m·K)
L : Characteristic length (m)
m : Vessel Mass (kg) / Cubic equation of state coefficient (–)
$\dot{m}$: Mass discharge rate (kg/s)
MD : Discharged vapor mass(kg)
Mw : Molecular weight (kg/kmol)
Nu : Nusselt Number (–)
P : Pressure (pa)
Pr : Prandtl Number (–)
q : Heat transfer rate (J/s)
Q : Transferred heat amount (J)
R : Ideal gas constant ($Pa \cdot m^3/mol \cdot K$)
r : Pressure decrement ratio (–)
Ra : Rayleigh Number (–)
S : Mass specific Entropy (J/kg·K)

T : Temperature (K)
U : Overall heat transfer coefficient ($W/m^2 \cdot K$)
v : Discharge velocity (m/s)
V : Volume (m^3)
w : Composition (molar composition or mass composition)
z : Height (m)
ΔT : Temperature deviation (K)
Δt : time duration (s)

Greek symbol

α : Cubic equation of state coefficient
β : Thermal expansion coefficient (/K)
γ : Heat capacity at constant pressure over at constant volume Cp/Cv (–)
μ : Viscosity (cP)
ρ : Density (kg/m^3)
ω : Acentric factor (–)

Subscript

btm : Vessel bottom
c : Heat conduction
cyl : Vessel cylindrical area
d : Downstream orifice
dome : Dome shaped vessel
i : Stage number
initial : Initial condition of blowdown
m : molar specific value
o : A value at an orifice
OW : Outside of wall
r : Reduced value
top : Top of vessel
u : Upstream of vessel
V : Value of vapor
vap : Value of vapor
Vessel : Value of vessel
W : Value of wall
Z1 : Value of bulk vapor (Zone1)
Z2 : Value of bulk liquid (Zone2)

감 사

이 논문은 산업통상자원부의 재원으로 엔지니어링개발연구센터의 지원을 받아 수행된 연구임(과제번호 : N0000990).

Reference

1. D'Alessandro, V., Giacchetta, G., Leporini, M., Marchetti, B. and Terenzi, A., "Modelling Blowdown of Pressure Vessels Containing Two-phase Hydrocarbons Mixtures with the Partial Phase Equilibrium Approach," *Chemical Engineering Science*, **126**, 719-729(2015).
2. Wong, M. A., "Development of a Mathematical Model for Blowdown of Vessels Containing Multi-component Hydrocarbon Mixtures," Ph.D. Dissertation, the University College London, Torrington Place, London(1998).
3. Chen, J., Richardson, S. and Saville, G., "Modelling of Two-phase Blowdown from Pipelines-I. A Hyperbolic Model Based on Variational Principles," *Chemical Engineering Science*, **50**(4), 695-713(1995).
4. Mahgerefteh, H. and Wong, S. M., "A Numerical Blowdown Simulation Incorporating Cubic Equations of State," *Comput. Chem. Eng.,* **23**(9), 1309-1317(1999).
5. Overa, S. J., Stange, E. and Salater, P., "Determination of Temperatures and Flare Rates During Depressurization and Fire," Proceedings of 72th GPA Annual Convention, 235-235(1993).
6. Mahgerefteh, H., Falope, G. B. and Oke, A. O., "Modeling Blowdown of Cylindrical Vessels Under Fire Attack," *AIChE J.,* **48**(2), 401-410(2002).
7. Standing, M. B., *Volumetric and Phase Behavior of Oil Field Hydrocarbon Systems: PVT for Engineers*, California Research Corp.(1951).
8. Hanley, H. J., McCarty, R. D. and Haynes, W. M., "The Viscosity and Thermal Conductivity Coefficients for Dense Gaseous and Liquid Argon, Krypton, Xenon, Nitrogen, and Oxygen," *Journal of Physical and Chemical Reference Data,* **3**(4), 979-1017(1974).
9. Escobedo, J. and Mansoori, G. A., "Surface Tension Prediction for Pure Fluids," *AIChE J.,* **42**(5), 1425-1433(1996).
10. Winters, W. S., Evans, G. H., Rice, S. F. and Greif, R., "An Experimental and Theoretical Study of Heat and Mass Transfer During the Venting of Gas from Pressure Vessels," *Int. J. Heat Mass Transfer*, **55**(1), 8-18(2012).
11. Green, D. W., *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, McGraw-hill New York(2008).
12. Richardson, S., Saville, G., Fisher, S., Meredith, A. and Dix, M., "Experimental Determination of Two-phase Flow Rates of Hydrocarbons Through Restrictions," *Process Saf. Environ. Prot.,* **84**(1), 40-53(2006).
13. Bird, R. B., "Transport Phenomena," *Appl. Mech. Rev.,* **55**(1), R1-R4(2002).
14. Haque, A., Richardson, S., Saville, G. and Chamberlain, G., "Rapid Depressurization of Pressure Vessels," *J. Loss. Prev. Process. Ind.*, **3**(1), 4-7(1990).
15. Haque, M., Richardson, S. and Saville, G., "Blowdown of Pressure Vessels. I. Computer Model," *Process Saf. Environ. Protect*, **70**(B1), 3-9(1992).
16. Twu, C. H., Sim, W. D. and Tassone, V., "Getting a Handle on Advanced Cubic Equations of State," *Chem. Eng. Prog.*, **98**(11), 58-65(2002).
17. Speranza, A. and Terenzi, A., "Blowdown of Hydrocarbons Pressure Vessel With Partial Phase Separation," *Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences*, **69**, 508(2005).
18. Haque, M., Richardson, S., Saville, G., Chamberlain, G. and Shirvill, L., "Blowdown of Pressure Vessels. II. Experimental Validation of Computer Model and Case Studies," *Trans IChemE, Part B*, *Proc Safe Env Prot,* **70**(B1), 10-17(1992).
19. Clark, G., *Zero-dimensional model of compressible gas flow in networks of pressure vessels: Program TRIC,* (1983).

20. Charton, S., Blet, V. and Corriou, J., "A Simplified Model for Real Gas Expansion Between Two Reservoirs Connected by a Thin Tube," *Chemical Engineering Science*, **51**(2), 295-308(1996).
21. Chen, J., Richardson, S. and Saville, G., "Modelling of Two-phase Blowdown From Pipelines-II. A Simplified Numerical Method for Multi-component Mixtures," *Chemical Engineering Science*, **50**(13), 2173-2187(1995).
22. Dutton, J. C. and Coverdill, R. E., "Experiments to Study the Gaseous Discharge and Filling of Vessels," *International Journal of Engineering Education,* **13**(2), 123-134(1997).