

## CFD모사기법을 이용한 가스 여과기 성능 해석

전략영\* · 권기현\*\* · 윤순민\*\* · 박명규\*\*\* · 이창하\*\*\*\* · 오민\*†

\*한밭대학교 화학생명공학과  
34158 대전광역시 유성구 동서대로 125  
\*\*SG생활안전  
17878 경기도 평택시 신평로 28  
\*\*\*국방과학연구소 제5기술연구본부 3부  
34186 대전광역시 유성우체국 사서함 35호  
\*\*\*\*연세대학교 화공생명공학과  
03722 서울특별시 서대문구 연세로 50  
(2019년 2월 28일 접수, 2019년 4월 16일 수정본 접수, 2019년 4월 17일 채택)

## Analysis of a Gas Mask Using CFD Simulation

Rakyong Jeon\*, Kihyun Kwon\*\*, Soonmin Yoon\*\*, Myungkyu Park\*\*\*, Changha Lee\*\*\*\* and Min Oh\*†

\*Department of Biological and Chemical Engineering, Hanbat National University, 125, Dongseo-daero, Yuseong-gu, Daejeon, 34158, Korea  
\*\*SG Safety Corporation, 28, Sinpyeong-ro, Pyeongtaek-si, Gyeonggi-do, 17878, Korea  
\*\*\*Agency for Defense Development - The 5<sup>th</sup> R&D institute 3<sup>rd</sup> directorate, Yuseong P.O.Box 35, Daejeon, 34186, Korea  
\*\*\*\*Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Yonsei University, 50, Yonsei-ro, Seodaemun-gu, Seoul, 03722, Korea  
(Received 28 February 2019; Received in revised form 16 April 2019; accepted 17 April 2019)

### 요약

화학적 무기 중 혈액작용제는 전자전달계 내 효소의 철 이온과 반응하고 세포호흡을 정지시켜 사망을 초래한다. 혈액작용제는 활성탄의 미세공보다 분자크기가 작아 화학적 흡착이 유일한 제독방법이다. 본 연구는 SG 생활안전에서 개발한 SG-1 가스 여과기를 이용하여 혈액작용제 시아노젠 클로라이드(CK) 가스의 유입에 따른 유동해석을 수행하였다. 구리, 은, 아연 및 몰리브덴 이온이 침착된 ASZM TEDA 활성탄을 적용하여 가스 여과기 제작 시험 규정에 따라 화학적 흡착 모사를 수행하였으며 흡착 Kinetic을 적용하기 위해 선 수행된 흡착 베드에서 CK 가스 흡착 실험 결과를 분석하였다. 화학적 흡착을 통해 발생하는 가스 여과기 내부 압력강하 및 가스 흡착 질량 등 주요 변수의 동적 거동을 예측하였다. CFD에서 다공성 물질을 적용할 때 사용하는 Ergun 방정식 대신 Granular와 Packed bed를 사용하여 활성탄 적용 가능 결과를 확인하였으며 시간에 따른 흡착 및 유속에 따른 흡착의 유동 해석에 대한 동적 모사를 수행하였다.

**Abstract** – Special chemical warfare agents are lethal gases that attack the human respiratory system. One of such gases are blood agents that react with the irons present in the electron transfer system of the human body. This reaction stops internal respiration and eventually causes death. The molecular sizes of these agents are smaller than the pores of an activated carbon, making chemical adsorption the only alternative method for removing them. In this study, we carried out a Computational Fluid Dynamics simulation by passing a blood agent: cyanogen chloride gas through an SG-1 gas mask canister developed by SG Safety Corporation. The adsorption bed consisted of a Silver-Zinc-Molybdenum-Triethylenediamine activated carbon impregnated with copper, silver, zinc and molybdenum ions. The kinetic analysis of the chemical adsorption was performed in accordance with the test procedure for the gas mask canister and was validated by the kinetic data obtained from experimental results. We predicted the dynamic behaviors of the main variables such as the pressure drop inside the canister and the amount of gas adsorbed by chemisorption. By using a

† To whom correspondence should be addressed.

E-mail: minoh@hanbat.ac.kr

‡ 이 논문은 연세대학교 설용건 교수님의 정년을 기념하여 투고되었습니다.  
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.

granular packed bed instead of the Ergun equation that is used to model porous materials in Computational Fluid Dynamics, applicable results of the activated carbon were obtained. Dynamic simulations and flow analyses of the chemical adsorption with varying gas flow rates were also executed.

Key words: CFD simulation, Gas mask, Chemisorption

## 1. 서 론

신경작용제, 수포작용제, 질식작용제, 혈액작용제 등을 포함한 화학무기의 사용은 국제법에 의해 엄격히 금지된다. 화학무기는 사람을 살상하는 것이 목적이며 극소량으로도 대량의 인원을 살상할 수 있는 독성가지고 있다[1]. 부교감 신경계에 영향을 주는 신경작용제는 자극 전달 물질 아세틸콜린의 분해를 저하시켜 신경계를 흥분상태로 만든다. 이로 인해 구토 및 동공축소를 발생시키며 호흡 근육을 움직이는 교감신경 차단으로 인해 호흡기를 마비시켜 호흡장애를 수반한다[2]. 수포작용제는 피부와 접촉 시 심한 발작과 수포를 형성하여 피부조직의 손상과 2차적인 세균감염을 발생시킨다[3]. 질식작용제는 흡입 시 폐와 반응하여 이산화탄소(CO<sub>2</sub>)와 염산(HCl) 등이 생성되며 이산화탄소의 갑작스러운 증가로 인해 호흡곤란을 야기하며 염산으로 인해 폐의 기능을 잃게 된다[4]. 산소 운반을 하는 헤모글로빈을 마비시켜 산소부족을 일으켜 호흡곤란을 발생시키는 혈액작용제는 흡입 즉시 증상이 나타나 15분 이내로 사람을 사망에 이르게 한다. 혈액작용제는 분자의 크기가 활성탄의 미세공보다 작아 가스 여과기의 활성탄으로는 흡착이 매우 힘들며 일반적인 방독면 가스 여과기로는 확실히 걸러낼 수 없다[5]. 활성탄 표면에 혈액작용제와 선택적으로 반응하는 물질을 침착시켜 화학적 흡착을 하는 것이 유일한 방법이며 대표적 혈액작용제 종류는 시안화수소(AC), 시아노젠 클로라이드(CK), 아르신(AS) 등이 있다[6].

방독면은 전쟁 시 일어날 수 있는 화생방전에 사용되는 화학무기에 대해 군인과 민간인들의 얼굴, 눈 및 호흡기 계통을 보호할 수 있는 유일한 장비이다. 방독면은 안면부, 가스 여과기, 휴대주머니, 보호두건 등으로 구성된다. 안면부는 사용자의 얼굴과 접촉하여 주변 공기를 차단하며 방독면의 핵심 요소 가스 여과기는 사용자가 흡입하는 오염된 공기를 통과시켜 오염원을 제거한다[7]. 일반적으로 가스 여과기는 유기화합물용, 할로젠가스용, 유기가스용 등으로 나뉘어 용도에 맞게 사용되도록 구분되어진다. 그러나 군용방독면은 산업에서 사용되는 가스 여과기와 달리 제조 공정에 화학무기를 여과하기 위한 금속 침착공정에 중점을 두어 화학적 활성 기능이 뛰어나도록 제조하여 사용된다[8].

가스 여과기는 오염물질을 제거할 수 있는 입자필터와 가스필터로 구성되어져 있다. 외부로부터 유입되는 오염가스의 액체나 고체 입자는 입자필터를 통하여 여과되며 가스필터에서는 충전 물질의 특성에 따라 물리적 흡착과 금속이온 침착을 통한 가스의 화학반응을 이용한 화학적 흡착이 이루어진다[9]. 가스필터에는 미세공이 잘 발달되어 흡착력이 뛰어난 활성탄이 사용되며 흡착성능은 비표면적, 기공크기 및 분포, 입자크기 등에 따라 결정된다[10]. 또한 촉매 반응에 의한 오염물질 제거를 위하여, 제거하고자 하는 물질과 화학적으로 반응을 하는 금속이 담지된 침착활성탄을 사용해야한다. 1983년부터 한국 군에서 구리, 은, 크롬 이온이 침착된 활성탄을 사용하였으나 최근 제조되고 있는 군용 방독면 여과기에는 크롬이온을 사용하지 않은 ASZM TEDA 활성탄을 적용하여 제조하고 있다. ASZM TEDA 활성탄은 은, 구리, 아연, 몰리브데늄 이온과 함께

TEDA(Triethylenediamine) 화합물이 침착되어 있다[11].

가스 여과기는 오염가스에 노출된 시점부터 흡착이 진행되어 흡착 잔여 성능이 감소된다. 가스 여과기 성능이 모두 소진되어 수명이 다 하기 이전에 새 것으로 교환해 주는 것이 사용자에게 중요하며, 수명이 다한 여과기를 사용 시 오염가스로부터 보호를 받지 못하고 마스크 외부의 오염가스가 여과기를 통과하여 사용자의 호흡기를 통해 인체로 흡입될 수 있다[12]. 가스 여과기의 올바른 교체주기를 인지하기 위해 가스 여과기의 파괴시간 예측은 중요시 여겨지며, 가스 여과기 설계에 있어 가장 중요한 조건 중의 하나로 인식된다.

활성탄의 물리적 흡착 특성 평가 연구는 활성탄 기공의 크기, 표면적 및 흡착과정의 열역학적 성질 등 활성탄의 특성과 관련된 정적 흡착법[13], 고정된 활성탄 층에 강제적으로 가스를 통과시켜 활성탄의 동적 흡착용량 및 흡착속도 등 활성탄의 적용분야를 연구한 동적흡착법이 있다[14]. 오염가스의 농도가 증가하면 파괴시간은 반비례하여 감소하고, 대기온도가 10 °C 증가할 때 오염가스의 종류에 따라 1~10% 파괴시간이 감소하며 대기중 상대습도가 50% 이하에서 파괴시간은 영향이 없으나 65% 이상에서 흡착성능이 급격히 감소한다[15]. 가스 유량 증가에 따라 파괴시간은 감소하며 활성탄 충전량이 2배로 증가 시 파괴시간이 2배로 증가하는 연구 결과가 보고된 바 있다[16]. 시아노탄소의 농도(200 ppm~1000 ppm) 및 습도(20~80%) 변화에 따라 ACF 활성탄의 흡착 평형 특성 측정 및 이를 통한 흡착 특성 분석에 대한 연구 결과가 보고된 바 있다[17].

흡착 속도론에 관한 많은 연구가 발표되고 있으나 대부분 물리적 흡착에 관한 것이며 화학적 흡착의 경우 물리적 흡착 연구에 기반하여 흡착속도식이 유도되었다[18]. 그러나 CK 가스, AS 가스 등 혈액작용제의 분자크기는 활성탄의 미세공보다 작아 물리적 흡착의 영향보다 화학적 흡착의 영향이 지배적인 것으로 나타났다[5]. 또한 화학적 흡착은 실험적인 어려움과 이론의 부재, 가스 독성에 의해 제한됨으로 연구에 어려움을 갖고 있어 CFD 모사를 이용한 흡착 실험 연구가 필요로 된다. 하지만 가스 흡착에 대한 CFD 모사는 가스 여과기 구조에 따른 유동해석에 대한 연구가 주를 이루고 있다. 최근 수행된 CFD 가스 여과기 관련 연구로 스페이서 디자인에 따른 유동현상 해석을 통하여 가스 여과기 내 가스 가스흐름이 균일하게 형성되어 쏠림 현상을 방지하는 디자인을 제안하였다[19]. 또한 활성탄 입자 조건에 따라 가스 여과기의 압력강하를 연구하여 가스 유속, 활성탄의 입자 크기 및 공극률과 압력강하의 상관관계를 밝힌 연구가 진행되었다[20].

본 연구에서는, 소형 흡착베드를 이용하여 ASZM TEDA 활성탄에 대한 CK 가스 흡착 실험을 수행하였고 흡착제 충전량과 가스 유입농도, 유량과 함께 흡착베드에서의 가스 통과거동을 분석하여 착체에 대한 CK 흡착 속도식을 유추하였다. 흡착 실험으로부터 얻은 활성탄 흡착제에 대한 흡착특성 정보와 SG-1 가스 여과기 구조에 대한 유동해석 모델링을 바탕으로 3차원 CFD 모델링을 통하여 동적 가스흡착 거동을 예측하였다.

본 연구에서의 주요 수행내용은 1) CK가스 흡착베드 실험 2) CFD를 이용한 활성탄 유무에 따른 여과기 내부 유동 결과 비교 3)

SG-1 방독면 가스 여과기의 CK 가스 통과시간 예측 4) CK 가스 유입 속도에 따른 흡착거동 결과 비교를 수행하였다. 또한 나타난 결과와 SG-1 방독면 가스 여과기 성능요구 조건과 비교하여 본 연구의 타당성을 입증하였다.

## 2. 이론적 배경

### 2-1. 가스 흡착 실험

본 연구에서 사용된 시험장치 개략도는 Fig. 1과 같다. 실험에 사용한 흡착제는 Calgon 사 제품의 60~70 mesh 입자 크기의 펠릿형 활성탄이다. CK 가스는 20,000 mg/m<sup>3</sup> 농도로 농축되어 있는 CK 충전용기로부터 희석하여 사용하였는데, 국과연에서 제조한 99% 이상 순도의 CK를 고순도 질소와 혼합 및 40 psig의 가압 가스를 제조하여 사용하였다. 실험 가스는, 농축 CK 가스를 습도가 조절된 공기와 혼합하여 4,000 mg/m<sup>3</sup>의 농도가 되도록 하여 사용하였고, 실험 공기의 습도는 60%RH이다. 흡착 베드는 내경 4 mm, 길이 8 mm의 유리관으로서 흡착제의 손실을 방지하기 위해 석영 섬유를 충전된 흡착제 상, 하에 채워 사용하였다. 흡착 베드 충전 활성탄 양은 54.7 mg이며 충전 밀도는 0.55 g/ml이다. 실험에 사용된 CK 가스의 유량은 20 ml/min이다. 흡착 베드 입구농도(C<sub>0</sub>)와 출구농도(C) 분석에는 FID 검출기가 장착된 HP 6890 Gas Chromatograph가 사용되었다.

활성탄에 흡착베드에서의 CK 흡착 실험 결과는 Fig. 2와 같다. 실험 결과로서 Fig. 2와 같은 흡착 파과곡선을 얻었으며, 이로부터 흡착 재료, 가스 및 시험 조건 자료를 바탕으로 Fig. 3에서의 흡착공정 분석을 통하여 총 가스 흡착량 및 가스 흡착 속도식을 산출하였다.

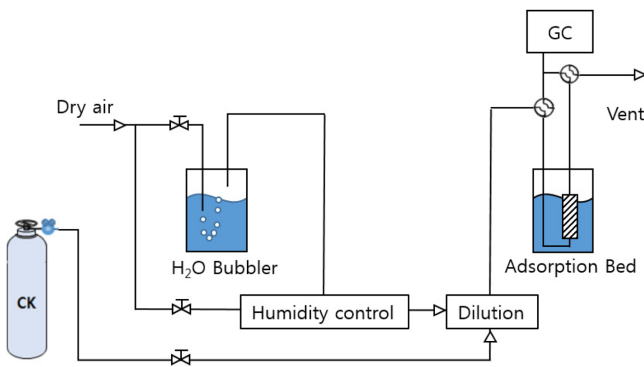


Fig. 1. CK gas adsorption experiment equipment.

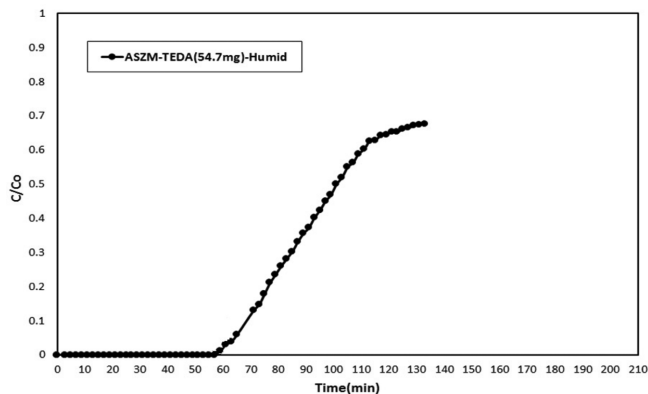


Fig. 2. CK gas adsorption breakthrough curve.

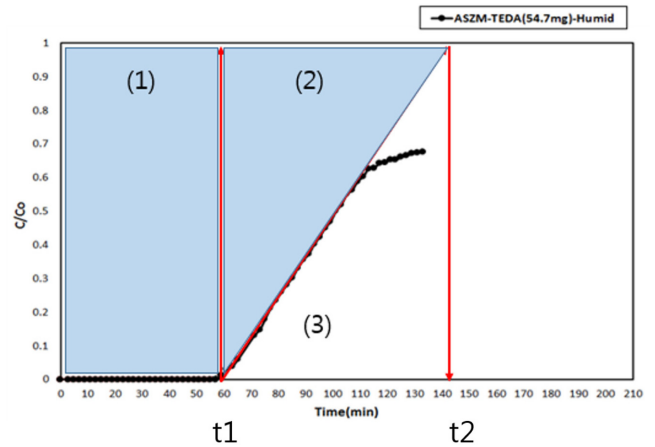


Fig. 3. The amount of CK gas adsorbed according to the time in the adsorption bed.

흡착베드에서 C/C<sub>0</sub> 값이 0이 아닌 값이 측정되는 시점을 파과시간으로 정의한다. 진행된 CK 가스 흡착 실험은 59분(t<sub>1</sub>)에서 C/C<sub>0</sub> 값이 0.0148으로 계산되어 활성탄 파과시간이 측정되었으며 흡착 bed 포화시간은 142분(t<sub>2</sub>)으로 간주하였다. 흡착베드에서의 CK 파과 결과는, 파과 이후 시험시작 약 110분 시점에서 C/C<sub>0</sub> 곡선 추세가 시간에 따라 선형에서 벗어나는 경향을 보이고 있으나 계산의 편의성과 활성탄의 흡착용량을 축소한 가혹조건으로 가정하여 파과농도 추세를 선형으로 가정하여 142분(t<sub>2</sub>)에서 흡착베드가 포화되는 것으로 가정하였다.

이 때, 베드에 흡착되는 총 CK 가스의 질량을 다음 식 (1)-(8)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\text{흡착 Bed 총 흡착량}(m) = m(1) + m(2) \quad (1)$$

$$m(1) = C_0 \left( \frac{m}{V} \right) \times \text{Flow rate} \left( \frac{V}{t} \right) \times [\text{time}(t_1) \times 1.0] \quad (2)$$

$$m(2) = C_0 \left( \frac{m}{V} \right) \times \text{Flow rate} \left( \frac{V}{t} \right) \times \left[ \frac{1}{2} (\text{time}(t_2) - \text{time}(t_1)) \times 1.0 \right] \quad (3)$$

$$m(1) = \text{CK 흡착량 for } 0 \sim t_1 \quad (4)$$

$$m(2) = \text{CK 흡착량 for } t_1 \sim t_2 \quad (5)$$

$$m(1) = C_0 \left( \frac{m}{V} \right) \times \text{Flow rate} \left( \frac{V}{t} \right) \times [\text{time}(t_1) \times 1.0] =$$

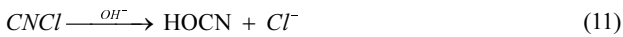
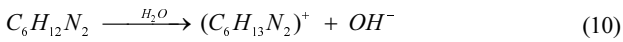
$$4000 \text{ mg} / \text{m}^3 \times 20 \text{ ml} / \text{min} \times 59 \text{ min} = 4.7 \text{ mg} \quad (6)$$

$$m(2) = C_0 \left( \frac{m}{V} \right) \times \text{Flow rate} \left( \frac{V}{t} \right) \times \left[ \frac{1}{2} (\text{time}(t_2) - \text{time}(t_1)) \times 1.0 \right] = 3.3 \text{ mg} \quad (7)$$

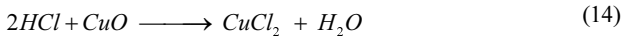
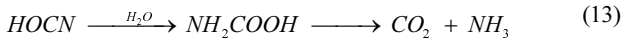
$$\text{흡착 Bed 총 흡착량}(m) = m(1) + m(2) = 4.7 \text{ mg} + 3.3 \text{ mg} = 8.0 \text{ mg} \quad (8)$$

### 2-2. CK 가스 화학적 흡착 메커니즘

CK 가스는 가스 여과기에 충전된 활성탄에 약한 결합의 형태인 물리적 흡착이 일어나나, CK 가스를 효과적으로 제거하기위해서 화학적 흡착이 필요하다. 구리, 은, 아연 및 물리브데늄 이온이 침착된 있는 ASZM TEDA 활성탄에 화학흡착을 하는 CK 가스의 반응 메커니즘은 식 (9)-(11)과 같다. 활성탄에서 CK 가스 흡착의 첫 단계는 구리이온과 TEDA(C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>)에 의해 가수분해가 진행된다 [21,22].



유입되는 CK 가스는 구리이온을 촉매로 사용하면서 대기 중의 수분과 반응하여 HCl과 HOCN을 생성한다. 배출되어지는 HCl 가스는 침착된 금속 물질과 반응하여 분해된다. TEDA는 대기 중의 수분과 양성자화가 이루어지며 ( $\text{C}_6\text{H}_{13}\text{N}_2^+$ )와  $\text{OH}^-$ 를 생성하여 CK 가스를 가수분해 하기위한  $\text{OH}^-$  생성의 공급원 역할을 한다. 생성된  $\text{OH}^-$ 는 CK 가스를 HOCN로 가수분해하고 생성되는 HOCN 가스는 연속적으로 수분과 반응하여 이산화탄소와 암모니아 가스를 배출한다. 반응 메커니즘은 식 (12)-(14)와 같다.



식 (12)-(14)의 결과를 통해 구리 이온과 TEDA를 통해 CK 가스를 분해할 수 있는 것으로 확인되었다. 또한 CK 가스의 화학적 흡착성은 침착된 구리이온과 TEDA이온의 양에 결정됨을 알 수 있다[23].

화학 반응속도를 계산하기 위해서 Arrhenius 반응식이 사용되며 충돌빈도상수와 활성화에너지의 값이 필요로 된다. 하지만 유입되는 CK 가스와 활성탄에 침착되어진 구리이온, TEDA이온의 충돌빈도상수와 활성화에너지 값은 정확히 밝혀진 바가 없어 본 연구에서는 Fig. 3과 식 (1)-(8)에 나타난 실험결과를 바탕으로 CK 가스 흡착 Kinetic 분석을 통해 CFD에 적용하였다.

### 3. CFD 모델링 및 모사

본 연구에서는 SG-1 가스 여과기 입자필터로 HEPA 필터를 사용하였으며 CK 가스의 화학 흡착을 위하여 은, 구리, 아연, 몰리브덴 이온이 침착되어져 있는 ASZM TEDA 활성탄을 가스필터로 사용하여 모사에 적용하였다. 혈액 작용제중 대표적인 독가스로 사용되는 CK 가스를 대상으로 모사를 진행하였으며 가스 주입으로 발생되는 압력강하, 과과시간 측정 및 가스 여과기 내 유동형상에 대한 연구를 진행하였다.

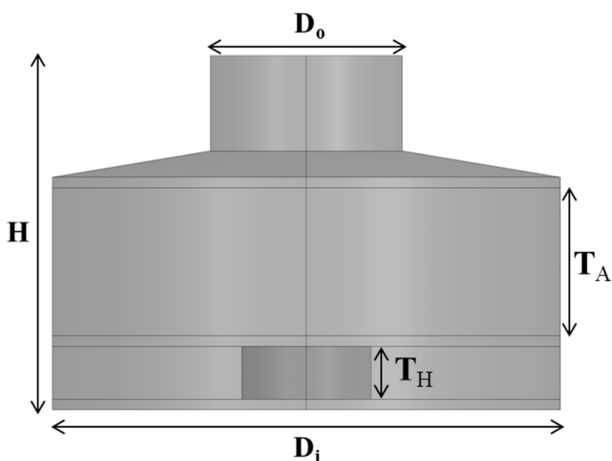


Fig. 4. SG-1 gas mask geometry.

Table 1. Design conditions of SG-1 gas mask

Parameters	Value	
Canister height, H	66 mm	
Inlet diameter, $D_i$	78 mm	
Outlet diameter, $D_o$	10 mm	
HEPA filter thickness, $T_H$	10 mm	
Activated carbon thickness, $T_A$	28 mm	
Quality	Max skewness	0.54944
	Min orthogonal quality	0.50913

#### 3-1. CFD 모델링

방동면 가스 여과기 과과시간 측정, 압력강하 및 유동해석을 위한 형상을 Fig. 4에 나타냈다. 모델링 대상 가스 여과기는 SG 생활안전에서 제조한 SG-1 가스 여과기를 대상으로 모델링하였으며 설계 조건을 Table 1에 나타냈다. 형상의 크기는 실제 SG-1 가스 여과기와 동일하게 적용하였으며 HEPA 필터 부분과 활성탄 상부와 하부에 위치한 공간은 활성탄을 고정 유지하는 스페이서를 입체공간으로 설정하였다.

SG-1 가스 여과기 CFD 해석을 위한 격자는 대칭 기법을 사용하여 4등분하여 해석하였으며 격자의 형상은 격자 품질 향상을 위해 415,682개의 육면체 격자를 사용하였다. 3차원 형상에서의 격자는 크게 사면체 격자와 육면체 격자로 나뉘며 육면체 격자는 정렬격자, 사면체 격자는 비정렬격자에 해당한다. 정렬격자는 비정렬격자에 비해 적은 요소의 수를 유지하며 더 많은 격자를 생성할 수 있으며 적은 해석시간과 좋은 품질의 격자를 생성할 수 있어 육면체 격자를 사용하여 CFD를 진행하였다.

#### 3-2. CFD 모사 방법

CFD 해석을 위해 ANSYS Fluent[24]을 사용하였으며 격자 생성부터 과과시간 측정, 압력강하 및 유동 해석을 수행하였다. 활성탄과 같은 다공성 매체의 유동해석 방법은 표준 유체 유동방정식에 점성 손실과 관성손실을 더한 압력변화 계산식인 Ergun 방정식과 고체상 표현을 위한 해석 방법인 Granular 기법과 Packed bed 기법이 있다. Ergun 방정식을 사용할 경우 유입 속도에 따른 압력강하 실험 데이터가 추가로 요구된다. 반면 Granular 기법과 Packed bed 기법은 적용하여 활성탄의 직경 및 Packing limit를 이용하여 다공성 매체를 표현할 수 있다. CFD 모델링 및 모사에 사용된 요소를 Table 2에 나타내었다.

실험을 통하여 구한 흡착 kinetics는 C 언어 매크로로 구성된 UDF (User Defined Function)를 이용하여 CFD 모사에 사용된다. Fluent에서 계산된 기본 변수의 값(온도, 압력, 질량분율, 질량유속) 등이 UDF에 전달되며, UDF routine에서는 이 값을 흡착 kinetics에 사용하여 가스 상에서 질량 변화 양을 계산하여 Fluent에 전달한다.

Table 2. Simulation method for SG-1 gas mask

Method	Models
Multiphase	· Eulerian model
Viscosity	· Realizable K-epsilon model
Species	· Species transport model
Packed bed	· Particle size
	· Packing limit
User define function	· Chemisorption

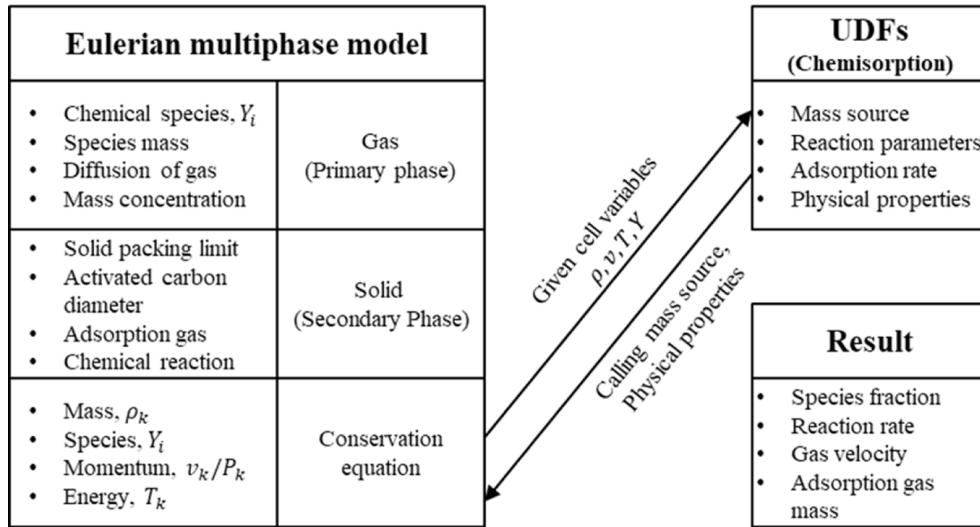


Fig. 5. CFD simulation framework with UDF.

CFD 모사와 UDF 간의 정보 교환에 대한 흐름도를 Fig. 5에 나타내었다.

3-3. CFD 모사 조건

방독면 가스 여과기에 사용되는 활성탄은 보통 60~70 mesh이며 본 모사연구에 적용된 활성탄 입자 크기는 60~70 mesh의 중간 값인 65 mesh를 선택하였다. 활성탄은 미국 Calgon사에서 제공되는 ASZM TEDA 활성탄을 사용하였으며 충전 밀도는 0.55 g/ml이다. 가스 여과기 수명은 활성탄의 충전량 및 유입 속도에 따라 결정된다. 유입속도 즉, 사용자의 호흡 속도는 방독면을 착용한 사용자의 상황과 환경에 따라 달라진다. 따라서 본 연구에서는 사용자의 호흡 속도에 따라 달라지는 결과를 비교하기 위하여 3 가지의 다른 유입속

Table 3. Simulation condition of SG-1 gas mask

Condition	Value
CK gas flow rate	Case 1: 0.04 m/s
	Case 2: 0.0947 m/s
	Case 3: 0.2 m/s
Materials	Air, CK gas, Activated carbon
AC diameter	65 mesh
Bulk density	0.55 g/ml
Breakthrough time	More than 1800 s
Max. adsorbed CK mass	Base on 1800s: 6000 mg
AC packing mass	144.9 g

도에 대한 모사를 수행하였다(Fig. 6). 모사 전략은 Base case인 Fig. 6(b)에 대한 모사를 선 수행하여 CFD 모델링 및 모사의 신뢰성과 정확도를 검증하며, 이를 기반으로 가스 유입속도가 Base case의 0.5 배(Fig. 6(a))와 2배 (Fig. 6(c))에 대한 사례연구를 수행하였다. 또한, Base case (Fig. 6(b))의 경우 활성탄이 충전된 경우와 미충전 경우에 대한 모사를 수행하여 활성탄에 의한 압력강하에 대한 영향을 고찰하였다. CFD에 적용한 가스 여과기 운전조건을 Table 3에 나타내었다.

4. 결과 및 고찰

4-1. 활성탄 충전 유무에 따른 결과

기존 다공성 물질을 CFD에 적용 시 사용하는 Ergun 방정식은 매체의 투과율과 관성저항계수의 값이 필요로 된다. 하지만 두 변수를 구하기 위해서는 해당 다공성 물질에서 유입속도에 따른 압력강하 데이터가 필요로 된다. 이러한 한계점을 보완하기위해 본 연구에서는 활성탄의 물리적 특성을 통한 Granular 기법과 Packed bed 기법을 사용하여 다공성 물질을 CFD에 적용하였다.

Fig. 7는 SG-1 가스 여과기에 활성탄의 충전 유무에 따라 달라지는 속도분포를 벡터로 나타내었다. 활성탄이 미충전된 경우(Fig. 7(a)) 가스는 출구 부분으로 집중되어 가스 여과기 외벽 부분에 가스가 도달하지 않아 사각지대가 발생할 수 있다. 활성탄이 충전된 경우(Fig. 7(b)) 내부 유동이 고르게 분산되어 활성탄 전체로

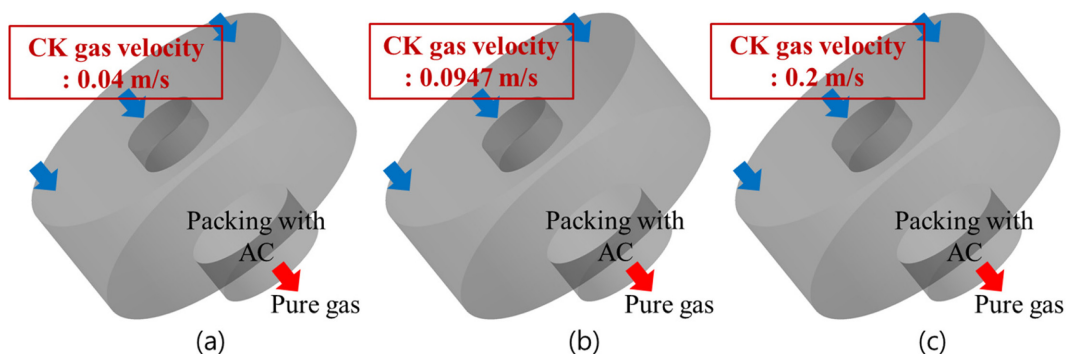


Fig. 6. Simulation with different inlet flow rate (a) 0.04 m/s (b) 0.0947 m/s (c) 0.2 m/s.

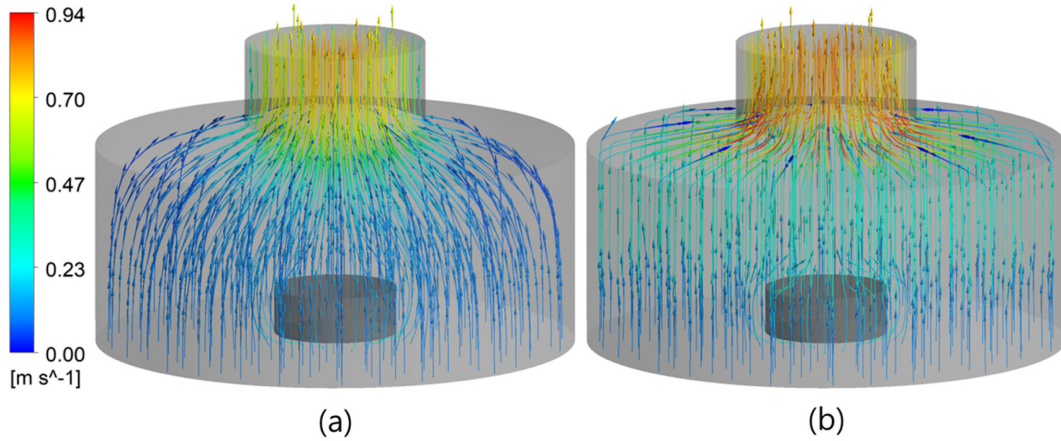


Fig. 7. SG-1 gas mask internal velocity distribution (a) No activated carbon (b) Activated carbon.

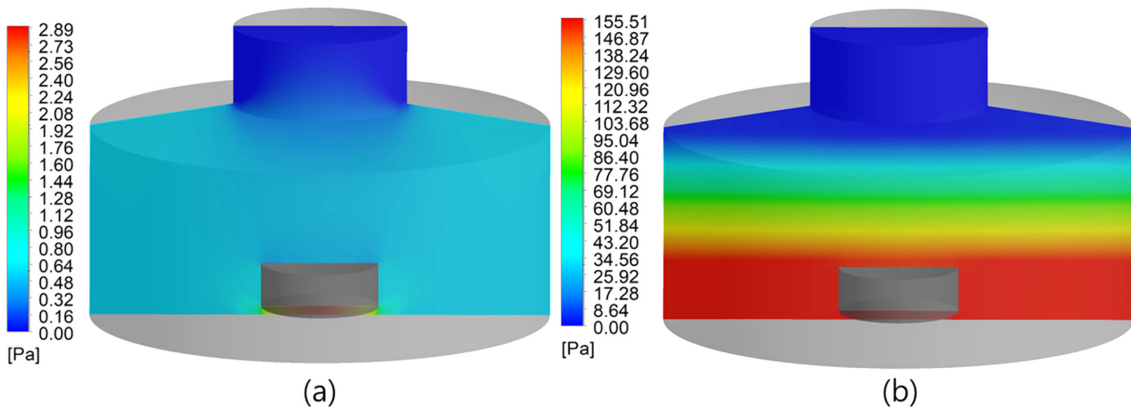


Fig. 8. SG-1 gas mask internal pressure drop (a) No activated carbon (b) Activated carbon.

퍼지는 것을 확인하였으며 50 L/min으로 주입되는 CK가스는 가스 여과기 내부에서 최대 0.94 m/s로 계산되었다. 이를 통해 Granular 기법과 Packed bed 기법을 사용하여 활성탄 모사가 가능함을 검증할 수 있다.

가스 여과기 흡착제로 활성탄을 사용하기 위해서는 사용자의 호흡에 영향을 주는 압력강하를 측정하여야 한다. 동일한 유속 50 L/min에 대하여 활성탄 미충진과 충전의 경우 압력강하는 2.89 Pa와 155.51 Pa로 각각 나타났다(Fig. 8). 압력분포는 가스 여과기 입구에서 가장 높고 출구에서 가장 낮은 값으로 계산되었다. 이 결과는 활성탄과 가스의 마찰로 인해 지속적으로 압력강하가 나타남을 보여준다. 또한 활성탄이 충전된 가스 여과기 압력강하 155.51 Pa은 SG-1 가스 여과기 제작 기준 압력강하 735.50 Pa 이하로 기준에 적합함을 알 수 있다[25].

4-2. CK 가스 흡착 결과

과과시간은 가스 여과기 내의 흡착제가 제독능력을 상실하여 유해가스를 그대로 통과시키기까지의 시간을 말한다. 따라서 가스 별 과과시간 측정 실험은 가스 여과기 설계의 중요한 인자이다. 본 연구는 혈액작용제 CK 가스에 대한 가스 여과기의 과과시간을 CFD 모사를 통하여 예측하였다.

CK 가스가 주입됨에 따라 활성탄에 접촉하는 시점부터 흡착은 진행됨을 알 수 있다. Fig. 9을 통해 CK 가스가 활성탄에 접촉함에 따라 화학 흡착이 진행됨을 볼 수 있으며 부피분율이 0%에서 94%가

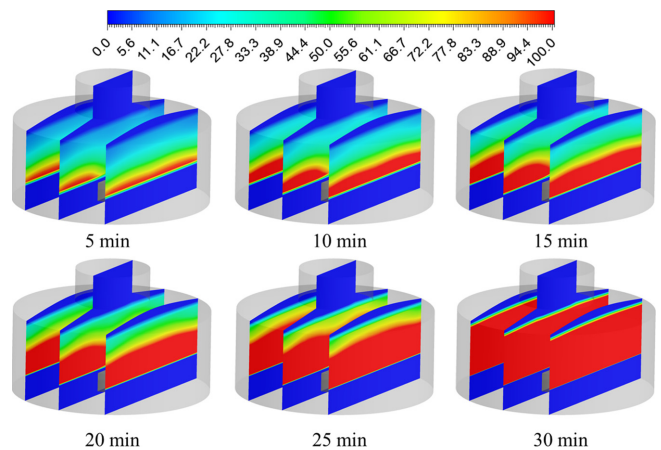


Fig. 9. Volume fraction of CK gas adsorbed at different simulation time.

지 변화하는 결과를 볼 수 있다. 이와 같은 현상은 가스와 먼저 접촉하는 앞 부분은 먼저 흡착이 완료됨에 따라서 부피분율이 100%가 되어 더 이상의 흡착이 진행되지 않으며 CK 가스가 가스 여과기의 후단 부분으로 흘러가 나머지 활성탄에 점차적으로 흡착되는 결과를 보여준다. 결과는 30분의 활성탄에서 흡착은 대부분 완료되어(94%) Fig. 9의 결과를 나타낸다.

Fig. 10에서는 시간 경과에 따라 활성탄 부분에 흡착되는 CK 가스의 질량이 증가하는 결과를 보여준다. 모사 결과 측정된 과과시간

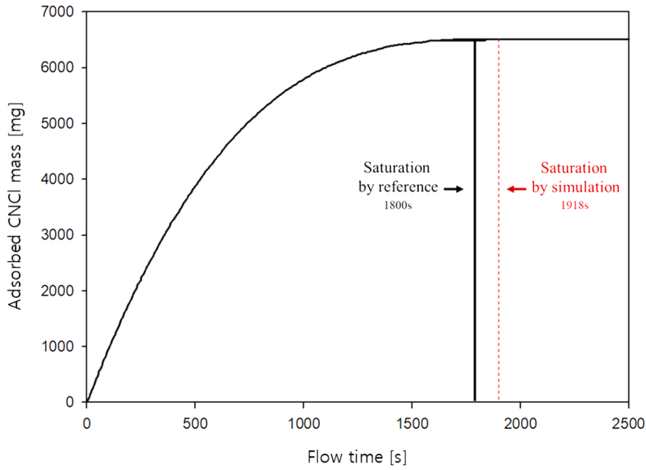


Fig. 10. Amount CK gas adsorbed on activated carbon over time: mg.

Table 4. Comparison of SG-1 gas mask simulation results with reference

	Reference	SG-1 simulation
Materials	Air, CK gas, Activated carbon	
AC diameter	60~70 mesh (ave: 65 mesh)	
Velocity	50 L/min → 0.0947 m/s	
Breakthrough time	More than 1800s	1918 s
Max adsorbed CK mass	Base on 1800 s: 6000 mg	6515.6 mg
Pressure drop	160 Pa	154.74 Pa

과 흡착된 전체 CK 가스 질량은 각각 1918초와 6515.6 mg으로 계산되었으며 파괴시간 이후 가스 유입에 의한 화학적 흡착은 발생하지 않는 것으로 확인되었다. SG-1 가스 여과기 제원에 따른 CK 가스 파괴시간의 요구성능은 1800초 이상으로 정해져 있다[25]. 또한 CK 가스 시험규정 농도와 시험 유량은 각각 4000 mg/m<sup>3</sup>과 50 L/min이다. 요구성능과 시험 규정에 따라 계산되는 가스 여과기 내 CK 가스 흡착 질량은 4000 mg/m<sup>3</sup> × 50 L/min × 1800 s = 6000 mg으로 계산된다. 본 연구에서 측정된 1918초의 파괴시간은 가스 여과기 요구성능 1800초 이상에 적합함을 검증할 수 있으며 흡착된 가스 질량은 오차 2% 범위 내로 차이를 보이고 있다. SG-1 가스 여과기 모사 결과와 오차율 계산 과정을 Table 4와 식 (15)~(19)에 정리하였다.

$$\text{오차율 공식: } \frac{\text{이론값} - \text{측정값}}{\text{이론값}} \times 100\% \quad (15)$$

$$\text{이론값: } 4000 \text{ mg/m}^3 \times 50 \text{ L/min} \times 1918 \text{ mg} = 6393.3 \text{ mg} \quad (16)$$

$$\text{측정값: } 6515.6 \text{ mg} \quad (17)$$

$$\text{이론값} - \text{측정값: } 6393.3 \text{ mg} - 6515.6 \text{ mg} = |-122.3| \text{ mg} \quad (18)$$

$$\text{오차율 공식: } \frac{122.3 \text{ mg}}{6393.3 \text{ mg}} \times 100\% = 1.91\% \quad (19)$$

4-3. 유입 속도에 따른 사례 연구 결과

물리적 흡착은 흡착용량이 유속과 무관한 것으로 알려져 있다[34]. 하지만 CK 가스는 물리적 흡착보다 화학적 흡착에 의존하고 있어 유속과 흡착용량의 경향성이 달라질 것으로 판단된다. 따라서 본 연구에서는 유입 속도에 따른 가스 여과기 내 유량변화, 압력강하 및 흡착되는 가스 부피분율의 변화를 통해 유입 속도와 파괴시간의 관계를 나타내었다.

Fig. 11는 3가지 유입속도에 따른 가스 여과기 내 가스 속도분포를 벡터로 나타낸다. 유속 증가에 따라 가스 체류시간이 짧아짐을 볼 수 있다. Fig. 11(a)의 경우 내부 유속은 출구에서 최대 0.57 m/s, Fig. 11(b)와 Fig. 11(c)는 각각 1.08 m/s, 2.24 m/s로 계산되었다. 이를 통하여 유입속도를 빠르게 주입할수록 흡입구에서 빠르게 유속이 움직임을 알 수 있으며 유입속도의 증가는 사용자의 흡입속도 증가로 나타난다.

유입속도에 따른 내부 압력강하를 Fig. 12에 나타내었다. 가스 여과기 시험 유속 50 L/min(0.0947 m/s)으로 모사한 Fig. 12(b)의 압력강하는 154.74 Pa로 계산되었다. 0.04 m/s와 0.2 m/s로 가스 주입된 Fig. 12(a)와 Fig. 12(c)의 압력강하는 각각 76.51 Pa, 352.66 Pa로 계산되며 주입 가스 유속 증가에 따라 압력강하가 함께 증가하는 것을 알 수 있다. 이와 같은 현상은 CK 가스 유입 속도가 증가함에 따라 활성탄과 가스의 마찰력이 커지는 것에 기인한다. 따라서 유입 속도가 빨라질수록 즉 흡입속도가 빨라질수록 사용자가 느끼는 호흡의 불편함은 증가하게 된다.

Fig. 13에서는 CK 가스 유입속도 변화에 따른 흡착량의 변화를 나타내었다. 가스 유속 증가는 흡착된 CK 가스 부피분율 증가로 나타났으며 흡착된 가스 질량도 함께 각각 2.59 mg, 6.28 mg, 12.95 mg으로 증가하는 것을 알 수 있다. 따라서 유입속도 증가에

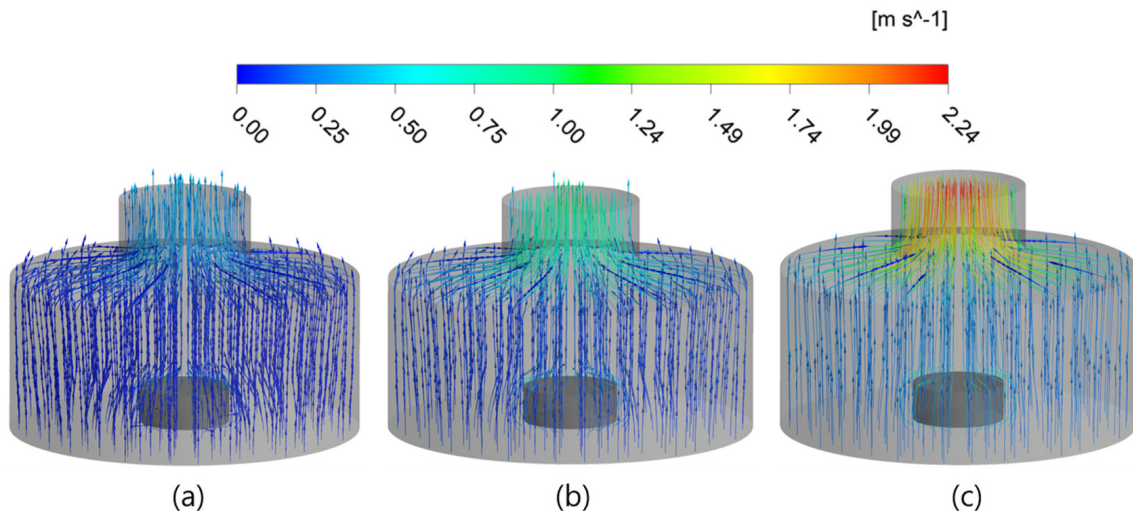


Fig. 11. Velocity distribution for different inlet flow rate: (a) 0.04 m/s (b) 0.0947 m/s (c) 0.2 m/s.

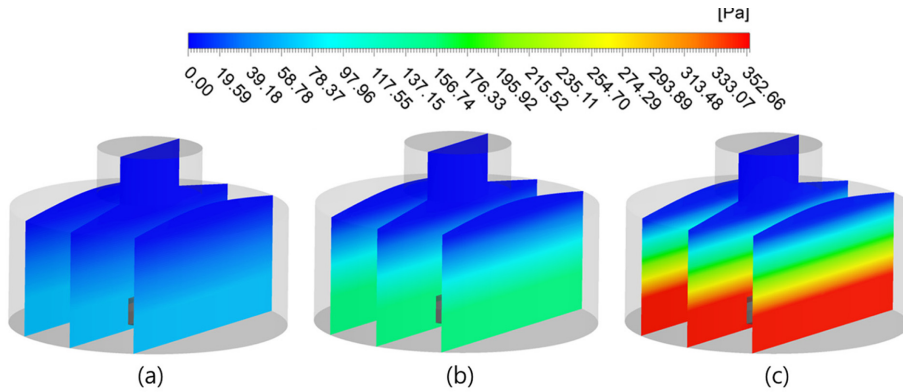


Fig. 12. Pressure drop for different inlet flow rate: (a) 0.04 m/s (b) 0.0947 m/s (c) 0.2 m/s.

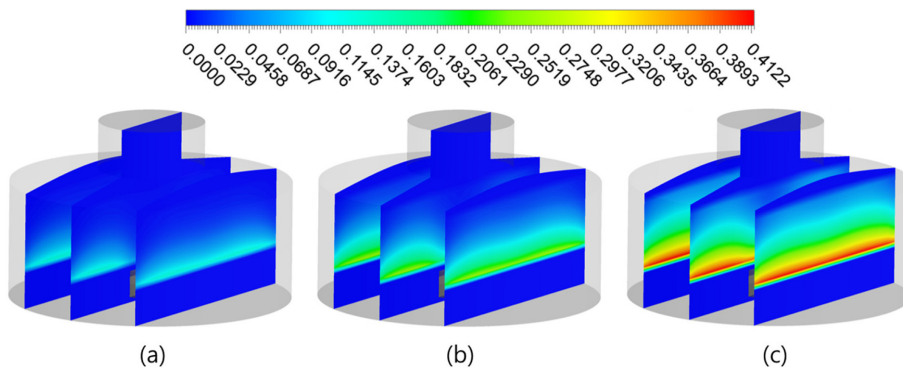


Fig. 13. CK gas volume fraction for different inlet flow rate: (a) 0.04 m/s (b) 0.0947 m/s (c) 0.2 m/s.

따라 활성탄에 흡착되는 CK 가스의 부피분율과 질량이 증가됨을 알 수 있으며 사용자의 흡입속도 증가는 활성탄 파괴시간 감소로 나타난다.

### 5. 결 론

본 연구에서는 혈액 작용제 계통 화학가스인 CK 가스의 유입 속도 변화 따른 방독면 가스 여과기에 대한 3차원 유동해석을 수행하였다. 흡착 속도를 구하기 위해 흡착 베드에서 ASZM TEDA 활성탄을 이용한 흡착수명 예측 실험을 진행하여 흡착 베드 출구에서  $C_0/C$ 를 측정, 가혹 조건으로 가정하여 파괴농도 추세를 선형으로 가정하였다. 유동해석을 위해 상용 CFD 소프트웨어인 ANSYS Fluent를 사용하였으며 SG-1 방독면 가스 여과기에서의 압력강하 및 화학적 흡착 모사를 수행하였다. 또한 공정 모사는 CK 가스 흡착 Kinetic 분석 결과에 따라 주요 변수를 C언어 기반의 UDF를 적용하여 화학적 흡착을 모사하였다.

공정 모사를 통해 본 연구는 고체상 표현을 위한 해석 방법인 Granular 기법과 Packed bed 기법을 사용하여 활성탄의 물성치를 적용한 CFD 공정 모사를 수행하였으며 동적거동에 대한 정확한 예측이 가능하였다. 이를 통하여 활성탄 유무에 따른 속도장과 압력장 예측 결과를 확인할 수 있다.

가스 여과기 시험 규정의 CK 가스 유속과 농도에 따라서 SG-1 가스 여과기 CFD 공정모사를 수행하였으며 흡착 CK 가스 부피분율이 0%에서 94%로 증가하는 것을 해석하였다. 흡착 CK 가스 부피분율 증가에 따라 흡착된 최대 CK 가스 질량은 6515.6 mg으로

증가하였으며, 이에 따른 SG-1 가스 여과기의 파괴시간을 확인하였다.

CK 가스 유입 속도 변화를 통해 가스 여과기 내부 유속, 압력강하 및 흡착 CK 가스 부피분율을 해석하였다. CK 가스 유입 속도 증가는 가스 여과기 내부 유속의 증가를 나타내며 활성탄과 가스의 마찰이 커져 압력강하도 함께 증가함을 확인하였다. 또한 가스 유입 속도 증가에 따라 CK 가스 부피분율이 증가함을 보였으며 흡착 CK 가스 질량 증가를 확인하였다. 결과가 SG-1 가스 여과기와 형상이 유사한 K-1 방독면 성능 수준과 유사하게 나타나는 것을 확인하여 본 예측기술에 의한 여과기 성능 예측기술 방법이 실제 설계에 적용 가능한 충분한 효용성을 지니고 있음을 나타내고 있다.

본 연구를 통해, 흡착베드 실험 결과에 따라 총 가스 흡착량 및 가스 흡착 속도식을 산출하였으며 SG-1 방독면 가스 여과기의 내부 유속, 압력강하 및 CK 가스 화학적 흡착의 특성을 CFD를 이용하여 관찰하였다. CK 가스 유입에 따른 화학적 흡착 결과를 모사하고 CK 가스 유입 속도 변화에 따라 달라지는 흡착 특성을 분석하였다. 본 연구는 흡착베드 실험을 통해 유추된 흡착 Kinetic과 CFD 해석 결과를 이용하여 상용 가스 여과기의 구조적 한계점을 찾아내고 새로운 가스 여과기 형상설계 방법론을 제시한다.

### 감 사

본 연구는 ADD (국방과학연구소)와 SG 생활안전의 지원을 받아 수행되었습니다. 이에 감사 드립니다.

## References

1. Evison, D., Hinsley, D. and Rice, P., "Chemical weapons," *Bmj*, **324**(7333), 332-335(2002).
2. Yang, Y.-C., "Chemical Detoxification of Nerve Agent VX," *Accounts of Chemical Research*, **32**(2), 109-115(1999).
3. Anderson, P. D., "Emergency Management of Chemical Weapons Injuries," *Journal of Pharmacy Practice*, **25**(1), 61-68(2012).
4. Chauhan, S., D'cruz, R., Faruqi, S., Singh, K. K., Varma, S., Singh, M. and Karthik, V., "Chemical Warfare Agents," *Environmental Toxicology and Pharmacology*, **26**(2), 113-122(2008).
5. [http://www.dtaq.re.kr/\\_custom/dtaq/\\_common/board/download.jsp?attach\\_no=175106.html](http://www.dtaq.re.kr/_custom/dtaq/_common/board/download.jsp?attach_no=175106.html)
6. Szinicz, L., "History of Chemical And Biological Warfare Agents," *Toxicology*, **214**(3), 167-181(2005).
7. <http://www.dbpia.co.kr/journal/articleDetail?nodeId=NODE02301740.html>.
8. Doughty, D. T. and James, E. G., "Chromium-free Impregnated Activated Carbon for Adsorption of Toxic Gases and/or Vapors," U.S. Patent No. 5,063,196(1991).
9. Kim, M. W., Kim, Y. S. and Park, Y. H., "Pressure Loss in Canisters with Conditions of Activated Carbon Particles," *Fire Science and Engineering*, **31**(4), 7-11(2017).
10. Kloubek, J. and Medek, J., "Porous Structure of Impregnated Active Carbons and Its Significance for the Catalytical Activity," *Carbon*, **24**(4), 501-508(1986).
11. <http://www.dbpia.co.kr/journal/articleDetail?nodeId=NODE02297893.html>.
12. Park, D. Y., Park, J. Y. and Yoon, C. S., "Study on Accuracy and Validity Tests for Various Prediction Models for Gas and Vapor Respirator Cartridge Service Lives," *Korean Ind. Hyg. Assoc. J.*, **9**(2), 19-31(1999).
13. Kloubek, J. and Medek, J., "Porous Structure of Impregnated Active Carbons and Its Significance for the Catalytical Activity," *Carbon*, **24**(4), 501-508(1986).
14. Rehrmann, J. A. and Leonard, A. J., "Dependence of Gas Adsorption Rates on Carbon Granule Size and Linear Flow Velocity," *Carbon*, **16**(1), 47-51(1978).
15. Ruch, W. E., Nelson, G. O. and Lindeken, C. L., "Respirator Cartridge Efficiency Studies. I. Experimental Design," *American Industrial Hygiene Association Journal*, **33**(2), 105-109(1972).
16. Nelson, G. O. and D. J. Hodgkins., "Respirator Cartridge Efficiency Studies. II. Preparation of Test Atmospheres," *American Industrial Hygiene Association Journal*, **33**(2), 110-116(1972).
17. Shin, C. S., Kim, K. H. and Kang, Y. G., "Adsorption Characteristics of a Respirator Cartridge for Organic Vapor Packed with Activated Carbon Fiber," *J. Korean Soc. Saf.*, **15**(2), 84-91(2000).
18. Wheeler, A. and Robell, A. J., "Performance of Fixed-bed Catalytic Reactors with Poison in the Feed," *Journal of Catalysis*, **13**(3), 299-305(1969).
19. Su, Y.-C. and Li, C.-C., "Computational Fluid Dynamics Simulations and Tests for Improving Industrial-grade Gas Mask Canisters," *Advances in Mechanical Engineering*, **7**(8), 1687814015596297(2015).
20. Li, C.-C., "Aerodynamic Behavior of a Gas Mask Canister Containing Two Porous Media," *Chemical Engineering Science*, **64**(8), 1832-1843(2009).
21. Jonas, L. A. and Joseph, A. R., "The Rate of Gas Adsorption by Activated Carbon," *Carbon*, **12**(2), 95-101(1974).
22. Mahle, J. J., Peterson, G. W. and Schindler, B. J., "Role of TEDA as An Activated Carbon Impregnant for the Removal of Cyanogen Chloride from Air Streams: Synergistic Effect with Cu (II)," *The Journal of Physical Chemistry C*, **114**(47), 20083-20090(2010).
23. Tripathi, V. S. and Ramachandran, P. K., "Studies on Metal Impregnated Activated Carbon: Complete Pore Structure Analysis," *Carbon*, **20**(1), 25-27(1982).
24. Fluent, Ansys. "12.0 Theory Guide," *Ansys Inc*, **5**(5), (2009).
25. [http://www.prism.go.kr/homepage/entire/retrieveEntireDetail.do?jsessionId=018BD294EC617D960340A0ADD7E8663E.node02?cond\\_research\\_name=&cond\\_research\\_start\\_date=&cond\\_research\\_end\\_date=&research\\_id=1290000-200400017&pageIndex=3493&leftMenuLevel=160.html](http://www.prism.go.kr/homepage/entire/retrieveEntireDetail.do?jsessionId=018BD294EC617D960340A0ADD7E8663E.node02?cond_research_name=&cond_research_start_date=&cond_research_end_date=&research_id=1290000-200400017&pageIndex=3493&leftMenuLevel=160.html).