

## 더블 베이스 추진제의 비군사화 소각공정

이시황<sup>1</sup>, 백승원<sup>1</sup>, 문일<sup>2</sup>, 박정수<sup>3</sup>, 오민<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>한밭대학교 화학생명공학과  
34158 대전광역시 유성구 동서대로 125

<sup>2</sup>연세대학교 화학생명공학과  
03722 서울특별시 서대문구 연세로 50

<sup>3</sup>국방과학연구소 제 4기술연구본부  
34186 대전광역시 유성구 조치원길 462

(2016년 7월 27일 접수; 2016년 9월 17일 수정본 접수; 2016년 9월 19일 채택)

## Incineration Process of Double Base Propellant for Demilitarization

Si-Hwang Lee<sup>1</sup>, Seung-Won Baek<sup>1</sup>, Il-Moon<sup>2</sup>, Jung-Su Park<sup>3</sup>, and Min Oh<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemical Engineering Hanbat National University

125 Dongseo-daero, Yuseong-gu, Daejeon 34158, Korea

<sup>2</sup>Department of Chemical & Biomolecular Engineering Yonsei National University

50 Yeonsei-ro, Seodaemoon-gu, Seoul 03722, Korea

<sup>3</sup>Agency for Defense Development

462 Jochiwon-gil, Yuseong-gu, Daejeon 34186, Korea

(Received for review July 27, 2016; Revision received September 17, 2016; Accepted September 19, 2016)

### 요약

회전식 소각공정은 고에너지 물질의 폐기처리를 위해 현재 상용화 되고 있는 기술로 열풍을 이용하여 대상물질을 열분해하는 공정이며 TNT, RDX 및 Composition B를 통한 열분해 공정의 사전연구가 진행되었다. 본 연구의 대상물질은 나이트로셀룰로스(nitrocellulose, NC)와 나이트로글리세린(nitroglycerine, NG)의 혼합물인 더블베이스 추진제(M8)로 선정하였다. M8 추진제의 열분해 반응은 응축상 반응(condensed phase reaction, CPR)과 기체상 반응(gas phase reactions, GPRs)로 구성되어 있다. CPR의 경우 흡열반응으로 4가지 화합물을 생성하며, GPRs의 경우 59개의 가스화합물 및 365개의 흡열·발열반응으로 구성되어 있다. 본 연구는 gPROMS 소프트웨어를 이용하여 관형반응기의 수학적 모델링을 완성하였으며, 운전온도 및 유속 변화에 따른 케이스스터디를 진행하였다. 상대적으로 낮은 유속 및 높은 공정온도는 반응기의 내부온도(Case3: 953 K, Case6: 1300 K)를 상승 시켰으며, CO<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O 몰농도 값 상승을 통해 완전연소율이 증가하는 것을 확인할 수 있었다. 본 연구 내열형 소각로 설계, 운전조건을 도출하는데 있어 기초 자료로 활용될 수 있을 것으로 사료된다.

주제어 : 비군사화, 더블 베이스 추진제, 열분해, 회전식 소각로, 동적모사

**Abstract :** The thermal decomposition of waste energetic materials such as TNT, RDX and composition B in a commercial rotary kiln has previously been carried out. As part of the demilitarization process, the thermal decomposition of homogeneous double base propellant (DB) used in M8 and consisting predominantly of nitrocellulose and nitroglycerine is examined with respect to a number of operating conditions. A single condensed phase reaction with 4 species and 365 gas phase reactions and 59 species are considered. Simulation results show the sensitivity of the thermal decomposition of DB with temperature and velocity. At relatively low velocity with constant inlet hot air temperature, temperature in the rotary kiln was found to be highest, 953 K and 1300 K for cases 3 and 6 respectively. Illustrating that optimum operating temperature can be achieved by controlling the inlet velocity without additional cooling systems.

**Keywords :** Demilitarization, Double base propellant, Thermal decomposition, Rotary kiln, Dynamic simulation

\* To whom correspondence should be addressed.

E-mail: minoh@hanbat.ac.kr; Tel: +82-42-821-1535; Fax: +82-10-5428-6865

doi: 10.7464/ksct.2016.22.3.190 pISSN 1598-9712 eISSN 2288-0690

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.

## 1. 서 론

지속적인 평화 정책 및 급격히 발전하는 군사기술에 의한 탄약 사용 감소 및 저장기간의 확대는 탄약의 변질 및 불량탄 약을 증가시켰다. 육군의 경우 군수자산의 약 30%가 탄약 자산으로 측정되며, 탄약 저장 시설이 광범위하고 비축탄약의 순환 사용이 제한되어 폐폭약의 양이 증가하고 있는 추세이다[1]. 야외소각 및 기폭 처리방법과 같은 종래의 처리 방법은 환경오염을 유발하고 안정성이 취약한 문제점을 갖고 있으며, 비 연속공정인 야외소각 및 기폭 처리방법은 폐화약 처리를 자연시켜 탄약고 신축 및 관리비용을 추가적으로 발생시키는 문제점을 갖는다[2]. 즉, 폐폭약 처리의 안전성, 환경 오염 문제 및 경제적 요인으로 인해 비군사화 기술 및 시설의 필요성이 중요시되고 있다[3].

폐폭약 처리를 위해 개발·연구되고 있는 기술 중 효율적이고 안정적이며 친환경적인 방법은 소각공정으로 열분해 방법에 따라 내폭형·내열형 소각로로 구분되며, 소각로 구조에 따라 터널형 소각로, 유동상식 소각로, 회전식 소각로(rotary kiln) 분류된다[4,5]. 현재 한국에서는 내폭형 회전식 소각로가 운용되고 있으며, 20 mm 이하의 소구경 탄약 및 화공류품을 처리하고 있다[3]. 내폭형 소각로를 이용하여 벌크 탄약을 처리할 경우, 소각로 내부의 온도가 지속적으로 상승하여 소각로 내부 재질의 항복강도가 감소하고 내부 폭발에 의한 내부형상의 영구적 변형을 유발할 수 있는 위험성을 갖는다[4].

본 연구에 적용된 고에너지 물질은 나이트로셀룰로스(nitrocellulose, NC: 52%)와 나이트로글리세린(nitroglycerine, NG: 43%)이 혼합된 M8 추진제로 박격포의 추진장약으로 사용된다[6,7]. 두 단일물질 모두 연료(C/H, C/H/O)와 산화제(NO<sub>2</sub>)를 한 분자에 모두 포함하고 있는 고에너지 화합물로 액상의 NG와 면직물 형태인 NC를 혼합·젤라틴화하여 고체형 추진제로 사용된다[8,9]. 대상탄약의 열분해 반응은 응축상 반응(condensed phase reaction, CPR)과 기체상 반응(gas phase reactions, GPRs)로 구분된다[10,11]. CPR은 응상에서 일어나는 흡열반응으로 1개의 반응식으로 표현되는 반면, GPRs의 경우 365개의 요소반응과 59개의 가스화합물이 참여하는 복합반응이다. 공정 모사를 위해 CPR, GPRs 및 관형반응기의 수학적 모델링을 완성하였으며 범용 고정모사기인 gPROMS 소프트웨어를 이용하였다[12-14]. 본 연구는 대상탄약의 안전한 처리를 위한 기초연구로 운전 조건에 따른 반응기 내부의 온도 및 가스화합물의 농도 변화를 예측하였으며, 각각의 조건에서 활성화되는 GPRs를 추적하여 농도 변화 및 반응기 온도 상승과의 연관성을 해석하였다.

## 2. 이론적 배경

### 2.1. 열분해 반응 메커니즘

M8 추진제의 열분해 메커니즘을 Figure 1에 나타내었다. 고에너지 물질로 분류되는 추진제의 열분해 과정은 CPR과 GPRs으로 구성되어 있다. 응상(고체상 및 액체상)에서 활성화되는 CPR은 1개의 반응식으로 표현되는 흡열반응이다. CPR으로부터 발생된 가스 화합물(CH<sub>2</sub>O, NO<sub>2</sub>, (CHO)<sub>2</sub>, CO)로부터 활성화되는 GPRs은 365가지의 반응식과 59개의 가스 화합물(CH<sub>2</sub>CO, CHO<sub>2</sub>, NO, N<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, NH, HNO, HONO, NO<sub>2</sub>, OH, O, N, HNNO, NNH, CH<sub>2</sub>O, HCO, O<sub>2</sub>, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, CH<sub>2(s)</sub>, CH<sub>4</sub>, CH<sub>2</sub>OH, CH<sub>3</sub>OH, HCCO, CH<sub>3</sub>O, CH, C, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H, HCCOH, NH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub>, HOCO, N<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>H<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, NO<sub>3</sub>, HCN, HNCO, HOCH, HCNO, CN, H<sub>2</sub>CN, C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>, HNC, NCNO, NCN, NCO)로 구성되어 있으며, 흡열반응과 발열반응이 혼합된 형태이다. CPR과 GPRs의 속도상수 모두 아레니우스 식 형태인 Equation (1)을 통해 계산되며, CPR 및 주요 GPRs의 반응식, 빈도인자, 활성화 에너지를 Table 1에 나타내었다.

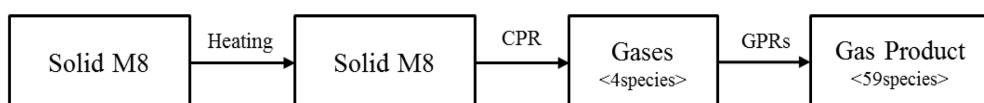
$$k_j^{rx} = A_j^{rx} T^n \exp\left(\frac{-E_j^{rx}}{RT}\right) \quad (1)$$

### 2.2. 수학적 모델링

본 연구의 대상 공정은 회전식 소각로로 실제 공정 크기 <지름(1 m) × 길이(6 m)>와 동일한 관형반응기를 적용하였으며, 3 kg의 M8 추진제의 위치를 반응기 앞 단 (0.5 m)에 고정하였다. CPR과 GPR으로부터 생성, 소멸되는 가스화합물의 정량적 수치 및 생성된 반응열에 의한 반응기 내부 온도 변화를 예측하기 위해 3가지 모델(CPR, GPR, PFR)로 구분하여

**Table 1.** Main reaction formulas of CPR and GPRs with frequency factor and activation energy [10,11].

Reaction type	Reaction formula, $\langle A: 1 \text{ s}^{-1} \text{ or } \text{m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}, E: \text{kJ mol}^{-1} \rangle$	A	E
CPR	$\text{M8} \rightarrow 2.49\text{NO}_2 + 2.36\text{CH}_2\text{O} + 1.26(\text{CHO})_2 + 0.17\text{CO}$	1E+17	167.4
GPR (No.42)	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{CO}$	3.3E+13	0
GPR (No.275)	$\text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}_2$	1.0E+12	33.5
GPR (No.346)	$\text{CH}_2\text{O} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{HONO}$	8.0E+02	57.5



**Figure 1.** Thermal decomposition mechanism of M8 propellant by incineration process [12].

수학적 모델링을 수행하였으며, 사용된 지배 방정식을 Equation (2)~(5)에 나타내었다.

#### • Mass conservation

$c_i$ 는 59가지의 가스화합물의 몰농도이며,  $u$ 는 반응기 내부 가스화합물의 유속을 의미한다.  $Sm_i^{CPR}$ 과  $Sm_i^{GPR}$ 은 CPR과 GPRs으로부터 생성된 가스상 화합물의 mass source이며 Equation (7)~(8)을 통해 확인할 수 있다.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{\partial c_i u}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_z \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) + Sm_i^{CPR} + Sm_i^{GPR} \quad (2)$$

#### • Energy conservation

$\rho$ 는 가스화합물과 열풍으로부터 유입된 공기 혼합물의 밀도를 의미한다.  $Se_e$ 는 CPR, GPR 및 열전달에 의해 변화하는 energy source의 총괄적 의미를 내포하고 있으며, Equation (9)~(11)에 상세히 정리하였다.

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho C_p u \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Se_e \quad (3)$$

$$Se_e = Se_e^{GPR} + Se_e^{CPR} - q^{ht} / V_{reactor} \quad (4)$$

#### • Momentum conservation

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\rho u \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial z} \quad (5)$$

#### • Heat of reaction by CPR and GPRs

$r_j^{rx}$ 는 CPR과 GPRs의 반응속도이며,  $Sm_i^{CPR}$ 와  $Sm_i^{GPR}$ 는 M8 추진제의 열분해 반응으로부터 생성된 가스화합물의 몰농도를 의미한다.  $Se_e^{CPR}$ 와  $Se_e^{GPR}$ 는 CPR과 GPRs의 반응열로부터 생성된 에너지이며,  $q^{ht}$ 는 M8 추진제와 가스화합물의 사이의 열전달을 나타낸다.

$$r_j^{rx} = k_j^{rx} \prod c_{j,i} \quad (6)$$

$$Sm_i^{CPR} = r^{CPR} \xi_i^{CPR} \quad (7)$$

$$Sm_i^{GPR} = \sum_{j=1}^{365} r_j^{GPR} \xi_{j,i}^{GPR} \quad (8)$$

$$Se_e^{CPR} = r^{CPR} (-\Delta H^r)^{CPR} \quad (9)$$

$$Se_e^{GPR} = \sum_{j=1}^{365} r_j^{GPR} (-\Delta H^r)_j^{GPR} \quad (10)$$

$$q^{ht} = hA(T - T_{M8}) \quad (11)$$

### 3. 결과 및 고찰

공정 운전 조건에 따른 반응기 내부의 물리적 화학적 변화 및 추진제의 폭발 현상을 유발할 수 있는 과열점 생성을 예측하기 위해 케이스스터디를 진행하였으며, 운전온도 변화에 따른 CPR와 GPRs의 반응속도 변화 및 주요 GPRs를 분석하였다. Table 2는 case study에 적용된 운전조건으로 운전온도와 유입되는 열원의 유속을 변수로 선정하여 진행하였다.

#### 3.1. 반응기 내부 온도 변화

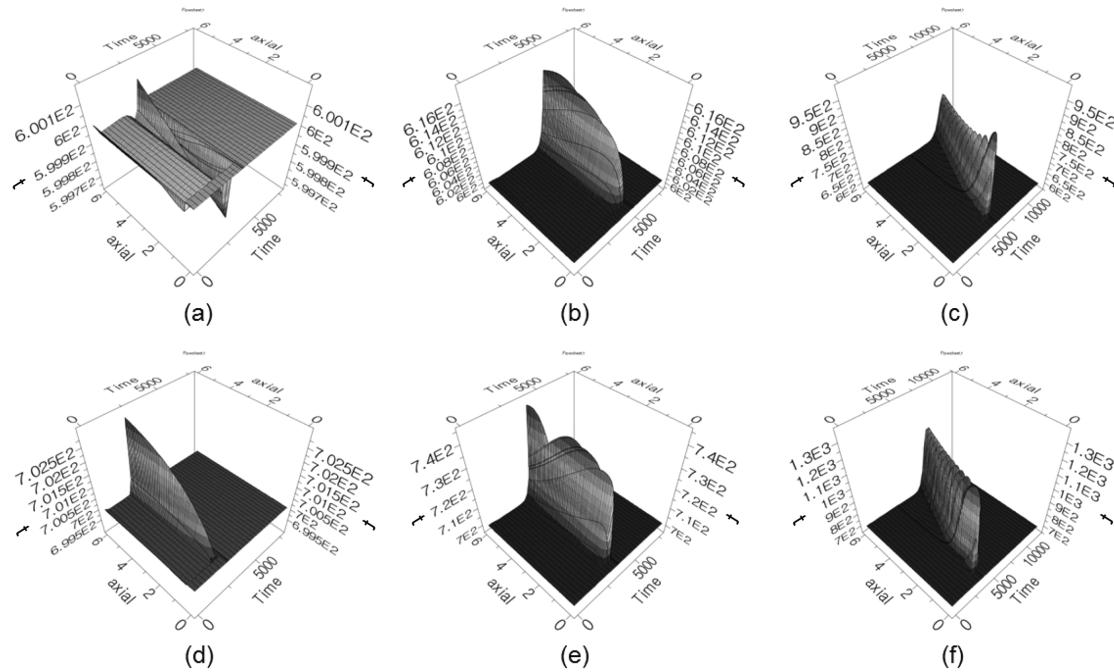
Figure 2는 운전조건 변화에 따른 회전식 소각로 내부 온도 변화로 시간·공간 변화에 따라 나타내었다. Figure 2(a)는 CPR의 흡열반응으로 인해 추진제가 위치한 (0.5 m) 부터 온도가 감소하며, 이후 미미한 온도상승이 반응기 후단에서 일어난다. 이와 같은 낮은 온도 상승은 GPRs의 비활성화에 의한 결과이며, Figure 5에 나타난 가스화합물의 몰농도 변화를 비교 분석함으로써 확인할 수 있다. Figure 2(b), (c)는 Case1 대비 유속을 감소시켜 진행된 공정 모사 결과로 CPR으로 생성된 가스화합물의 정체현상에 의한 몰농도 증가 및 낮은 열확산에 의해 GPRs의 활성화되었으며, 반응기의 온도가 616 K, 953 K까지 상승하였다. Figure 2(d)는 Case1 대비 운전온도를 증가하여 진행된 모사 결과로 Figure 2(a)와 비교 시 반응기 온도 변화폭이 증가하였다. 유속 감소에 의한 반응기 온도 상승 변화를 Figure 2 (e), (d)를 통해 확인할 수 있으며, Case6의 운전 조건에서 반응기 내부온도가 급격히 상승하는 것을 확인할 수 있다. Table 3은 케이스스터디를 통한 관형 반응기 내부 최대 온도를 정리하였으며, 높은 공정운전 온도 및 낮은 유속이 반응기의 온도를 상승시키는 것을 확인할 수 있다.

Table 2. Operation condition of PFR process for case study

Variable		Initial condition	
Mass of RDX		3 kg	
Temperature of RDX		290 K	
Pressure		101325 Pa	
No.	Initial condition	No.	Initial condition
Case1	600 K, 0.1 m s <sup>-1</sup>	Case4	700 K, 0.1 m s <sup>-1</sup>
Case2	600 K, 0.01 m s <sup>-1</sup>	Case5	700 K, 0.01 m s <sup>-1</sup>
Case3	600 K, 0.001 m s <sup>-1</sup>	Case6	700 K, 0.001 m s <sup>-1</sup>

Table 3. Maximum temperature with time in the rotary kiln

No.	Maximum temp.	No.	Maximum temp.
Case1	600 K, 3240 s	Case4	703 K, 2450 s
Case2	616 K, 5320 s	Case5	740 K, 3540 s
Case3	953 K, 5530 s	Case6	1300 K, 4010 s

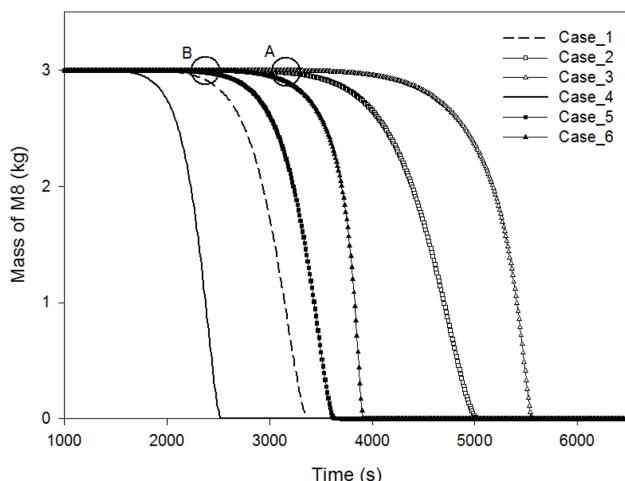


**Figure 2.** Distribution of temperature in the rotary kiln (a: Case1, b: Case2, c: Case3, d: Case4, e: Case5, f: Case6).

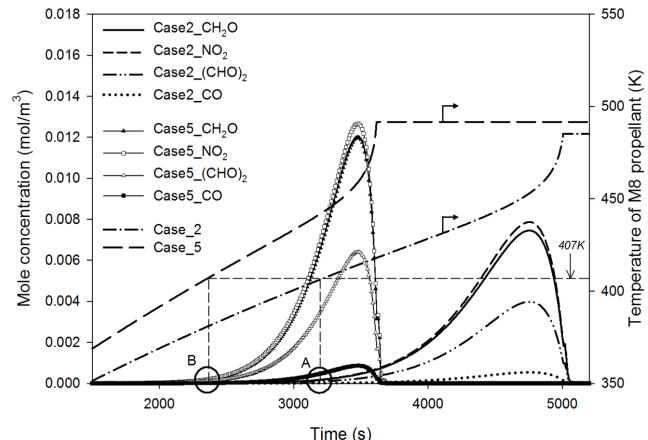
### 3.2. M8 propellant 질량 변화

M8 추진제의 열분해 반응의 초기 단계는 유입되는 열원에 의한 추진제의 온도상승과 CPR에 의한 대상물질의 질량감소 및 가스화합물( $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $(\text{CHO})_2$ ,  $\text{CO}$ )의 생성으로 구성된다. Figure 3은 운전조건 변화에 따른 M8 추진제의 질량변화로 기준공정(Case5)의 경우 2380 s (M8: 2.98 kg)부터 질량이 감소하며, 공정온도 증가에 비례, 유속 감소에 반비례하여 질량감소 속도가 증가하는 것을 확인할 수 있다.

Figure 4는 M8 추진제의 온도 변화 및 CPR으로부터 생성된 화합물의 몰농도 변화를 나타낸다. M8 추진제의 온도가 407 K에 도달하는 시점(point A; 3150 s, point B; 2380 s)부터



**Figure 3.** Change in the mass of M8 propellant (point A: 3150 s in Case2, point B: 2380 s in Case5).

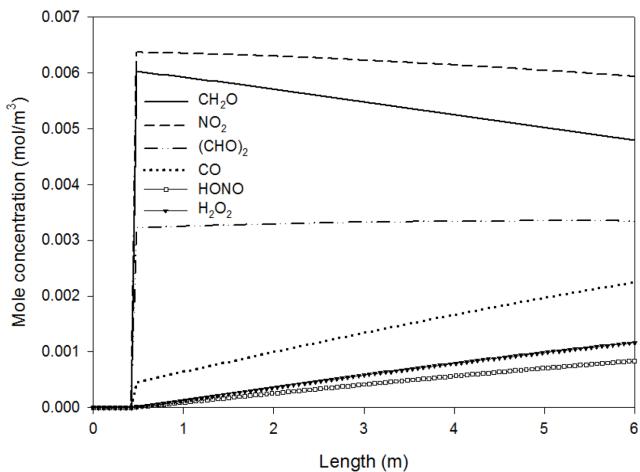


**Figure 4.** Dynamic behavior of M8 propellant by thermal decomposition (point A: 3150 s in Case2, point B: 2380 s in Case5).

CPR이 활성화되는 것을 생성물의 몰농도 증가를 통해 확인할 수 있으며, Figure 3의 질량변화가 관찰되는 시점과 일치한다. 즉 높은 공정온도 조건에서 추진제의 온도상승 및 CPR의 기점이 가속화 되는 것을 확인할 수 있다. CPR로부터 생성된 가스화합물은 GPRs의 반응물로 소비되며, 단위 시간 및 단위 공간에서의 몰농도 값이 GPRs의 반응속도를 결정하는 주요 요인인 된다는 것을 다음 연구 결과를 통해 확인할 수 있다.

### 3.3. 관형반응기 내부 가스화합물의 몰농도 변화

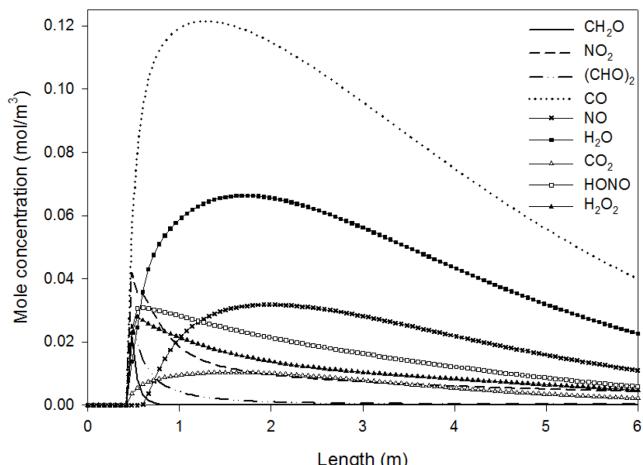
Figure 5는 운전온도 600 K에서 수행된 공정모사 자료로 초기 CPR으로 생성된 가스화합물( $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $(\text{CHO})_2$ ,  $\text{CO}$ )의 몰



**Figure 5.** Variation of mole concentration in the rotary kiln (Case1 at 3240 s).

농도 값이 M8 추진제가 위치한 부분(0.5 m)부터 증가하며, 이후 매우 미미하게 감소 및 증가하는 것을 확인할 수 있다. 이와 같은 결과는 낮은 공정운전 온도에 의한 GPRs의 비활성화로 설명되며, Figure 2(a)에서 나타낸 바와 같이 반응기의 온도 변화가 없는 것을 확인할 수 있다. HONO, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>는 GPRs으로 생성되는 가스화합물로서 CH<sub>2</sub>O와 NO<sub>2</sub>의 감소와 HONO, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>의 증가를 통해 확인할 수 있다. Kinetic 연구를 통해 14개의 GPRs가 활성화된 것을 확인하였으며, 주요 3개 반응식의 경우 Table 1과 동일하였다.

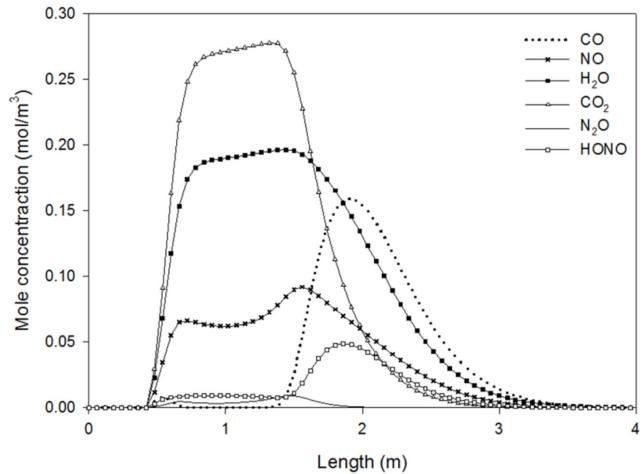
Figure 6은 Case5의 공정모사 결과로 반응기 최고 온도 지점(Figure 2(f), 3540 s)에서 반응기 내부의 몰 농도 변화를 나타낸다. CPR으로부터 생성된 4가지의 가스화합물이 반응기 앞 단에서 급격히 반응하는 것을 확인할 수 있다. 본 공정 조건에서 활성화된 GPRs은 총 28개이며, 본 반응으로부터 생성된 막대한 반응열에 의해 반응기의 온도가 740 K까지 상승하는 것을 Figure 2(f)를 통해 확인할 수 있다. 본 공정 조건에서



**Figure 6.** Variation of mole concentration in the rotary kiln (Case5 at 3540 s).

**Table 4.** Reaction formula of GPRs for NO and CO<sub>2</sub> in Case5

No.	Reaction formula of gas phase
17	$\text{NO}_2 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{NO}_3$
18	$\text{NO}_2 + \text{NO}_3 \rightarrow \text{NO} + \text{NO}_2 + \text{O}_2$
44	$(\text{CO}) + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$



**Figure 7.** Variation of mole concentration in the rotary kiln (Case6 at 4010 s).

NO, CO<sub>2</sub>가 추가적으로 생성되었으며, 관련된 반응식을 Table 4에 정리하였다.

초기 유입되는 열원은 M8 추진제의 열분해를 위한 개시제로서 역할을 수행하지만 이후 반응열에 의해 상승된 반응기의 온도를 낮추는 냉각제로서의 역할을 수행하게 된다. 즉, 유속을 감소시키면 반응기 내부의 온도는 증가하게 되며, 증가된 반응기 내부 온도는 GPRs의 활성화를 촉진하게 된다. 이와 같은 연쇄 작용은 반응기의 국부적 과열점을 생성할 수 있으며 M8 추진제 및 폭약의 폭발(detonation)을 유발할 가능성이 있다. 이후 진행된 공정모사는 외부적 요인으로 인해 반응기 내부 유동장의 흐름이 원활하지 않는 상황을 가정하였으며, 열풍의 유속을 0.001 m s⁻¹로 설정하여 진행하였다. 본 조건으로부터 총 55개의 GPRs가 활성화 되었으며, 반응기 최고온도가 관찰되는 시점(4010 s)에서의 반응기 내부 가스화합물의 몰 농도를 Figure 7에 나타내었다.

반응기 내부의 높은 온도 및 낮은 유속은 CPR으로부터 생성된 가스화합물의 완전연소를 유도하며, 이 결과 CO<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O의 몰 농도가 이전 case 대비 매우 높으며 내부 온도 또한 최고 온도임을 확인할 수 있다. 최종적으로 Case6의 CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O의 몰 농도가 0.28, 0.19으로 나타났으며, 이와 같은 결과는 Yang의 균질 추진제의 연구 결과와 매우 유사한 것을 확인하였다[11].

#### 4. 결론

본 연구는 M8 추진제의 열분해 공정 모사를 통한 반응기 내부의 물리적 화학적 변화를 예측 및 분석하였다. 열분해 반응

모사를 위해 1개의 CPR과 365개의 GPRs으로 구성된 반응매커니즘을 활용하였으며 범용 공정모사기 gPROMS를 통해 진행하였다. 반응초기 CPR의 흡열반응으로 M8 추진제 주변의 온도가 낮아지는 경향을 보였으나 변화 값이 매우 미미했으며, 흡열반응과 발열반응으로 구성된 GPRs의 운전조건 변화에 따라 활성도의 차이를 보였다. Case1의 운전조건에서 GPRs의 반응속도가 매우 낮았으며 온도변화가 나타나지 않은 반면, Case4의 경우 증가된 공정온도에 의한 반응속도 상승으로 반응기의 온도를 약 703 K까지 상승하였고 활성화된 GPRs의 종류 또한 14개에서 21개로 증가하였다. Case3과 Case6은 반응기의 공기 유입이 원활하지 않은 상황을 가정한 운전 조건으로 반응기의 온도가 약 953 K, 1300 K까지 상승하였으며 총 55개의 GPRs 이 활성화된 것으로 나타났다. 본 공정모사를 통해 M8 추진제의 열분해 반응 매커니즘 및 수학적 모델링을 완성하였으며, 공정 운전 조건에 따른 반응기 내부의 화학적 변화를 예측하였다. 또한, 운전 조건에 따른 GPRs의 활성화 및 반응기 내부 온도를 추적함으로써 과열점의 생성 조건을 확인할 수 있었다. 본 연구 내열형 소각로 설계 및 운전조건을 도출하는데 있어 기초 자료로 활용될 수 있을 것으로 사료된다.

## 감사

본 연구는 차세대에너지물질특화센터와 국방과학연구소의 지원으로 이루어졌으며, 이에 감사드립니다.

## Nomenclature

$A$	Heat transfer area of M8 propellant, $\text{m}^2$
$A_j^{rx}$	Collision factor of CPR and GPRs, $\text{s}^{-1}$ or $\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$
$C_p$	Heat capacity of gas in PFR, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$c_i$	Concentration of component, $\text{mol m}^{-3}$
$D_z$	Diffusion coefficient, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
$E_j^{rx}$	Activation energy of CPR and GPRs, $\text{J mol}^{-1}$
$h$	Heat transfer coefficient by convection, $\text{J m}^{-2} \text{K}^{-1} \text{s}^{-1}$
$K_z$	Thermal conductivity of explosive, $\text{J m}^{-1} \text{K}^{-1} \text{s}^{-1}$
$k_j^{rx}$	Reaction constant of CPR and GPRs, $\text{s}^{-1}$ or $\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$
$(-\Delta H^r)^{CPR}, (-\Delta H^r)_j^{GPR}$	Heat of reaction of CPR and GPRs, $\text{J mol}^{-1}$
$P$	Pressure in the PFR, $\text{Pa}$
$q^{ht}$	Heat rate by heat transfer, $\text{J s}^{-1}$
$R$	Ideal gas constant, $\text{J mol}^{-1} \text{s}^{-1}$
$r_j^{rx}$	Reaction rate of CPR and GPRs, $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$
$Se$	Total energy source, $\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}$
$Se^{CPR}, Se^{GPR}$	Energy source by CPR and GPRs, $\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}$
$Sm_i^{CPR}, Sm_i^{GPR}$	Mass source by CPRs and GPRs, $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$
$T$	Temperature of gas in PFR, $\text{K}$

$T_{M8}$	Temperature of M8 propellant, $\text{K}$
$u$	Velocity of mixture, $\text{m s}^{-1}$
$V_{reactor}$	Volume of PFR, $\text{m}^3$
$\rho$	Density of mixture, $\text{kg m}^{-3}$
$\xi_i^{CPR}, \xi_{j,i}^{GPR}$	The number of stoichiometry, dimensionless

## References

- Lee, J. C., Park, B. S., and Go, B. N., "Analysis of Current Techniques and Operation of Ammunition," *Defense & Technol.*, **364**, 34-42 (2001).
- Kwon, D. E., Choi, M. G., and Lee, S. G., "A Study on the Policy of South-north Ammunition Demilitarization of Unification Korea" *Asia-pacific J. Multimedia Services Converg. Art, Humanities, and Sociol.*, **6**(5), 421-434 (2016).
- Jang, G. H., Beak, B. H., and Seo, N. S., "Development plan of Demilitarization for Waste Ammunition by High-temperature Plasma Technology," *Defense & Technol.*, **400**, 112-121 (2012).
- "Analysis of Current Techniques and Operation of Commercial Rotary Kilns in Demilitarization of Propellants and Explosives," Agency for Defense Development (2013).
- Kim, H. S., "Basic Technologies for the Development of High Explosives," *Korea Chem. Eng. Res.*, **44**(5), 435-443 (2006).
- DeFrank, J. J., Guelta, M. A., and Haley, M. V., "Treatment of M1 and M8 Hydrolysates with Hd/Tetrytol Adapted Immobilized Cell Bioreactors," Report (2002).
- "Analysis Of Engineering Design Studies for Demilitarization of Assembled Chemical Weapons at Pueblo Chemical Depot," Board on Army Science and Technology National Research Council, Washington DC (2001).
- Akhavan, J., "The Chemistry of Explosive," 2nd ed., Royal Military College of Science, Cambridge (2004).
- Kuo, K. K., and Acharya, R., "Applications of Turbulent and Multiphase Combustion," 1st ed., John Wiley & Sons, INC., New Jersey (2012).
- Miller, M. S., and Anderson, W. R., "Cyclops, a Breakthrough Code to Predict Solid Propellant Burning Rate," Army Research Laboratory, Report No. ARL-TR-2910 (2003).
- Roh, T. S., Tseng, I. S., and Yang, V., "Effects of Acoustic Oscillation on Flame Dynamics of Homogeneous Propellants in Rocket Motors," *J. Propul. Power.*, **11**(4), 640-650 (1995).
- Kim, S. H., Nyande, B. W., Kim, H. S., Park, J. S., Lee, W. J., and Min, O., "Numerical Analysis of Thermal Decomposition for RDX, TNT, and Composition B," *J. Hazard. Mater.*, **305**(5), 120-130 (2016).
- Kim, S. H., Yeom, G. H., Il, M., Chae, J. S., Kim, H. S., and Min, O., "An Analysis of Dynamic Characteristics of RDX Combustion Using Rigorous Modeling," *Clean Technol.*, **20**(4), 398-405 (2014).
14. <http://www.psenterprise.com/modelbuilder.html> (accessed May. 2016).