

분자 모사에 기초한 화재의 초기 발생 및 확산 현상 연구

박명남, 신동일*

명지대학교

(dongil@mju.ac.kr*)

산업현장에서의 화재는 복잡하고 다양한 화학물질, 유류, 가스 등 가연물질 및 점화원간의 복합적인 mechanism을 통해 발생하는데, 다양한 조건에서 화재 발생후 거시적인 확산부분에 대한 연구는 미국 NIST의 경우를 비롯해 CFD기반의 simulator들이 개발되어 있지만 화재발생 현상 자체에 대한 연구는 상대적으로 미진한 부분들이 많다. 대부분 점화 현상은 가스상의 탄화수소 연료들로 인해 발생하며, 또한 고체, 액체 유기화합물의 열분해로 인한 증발을 통해 나타난다. 현행 실험 및 이에 기반한 모델들은 경험적인 모델을 사용하여 큰 분자들인 등유 또는 목재 등의 휘발성물질들에 집중되어 있는데, 본 연구는 근본적인 원자수준에서의 계산 결과와 화학반응속도, 다성분 물질전달, 열 및 에너지 전달 등의 거시적인 점화 현상을 연관 짓는 새로운 simulation tool을 대용량 computation을 기반으로 개발하고 있다.