

병렬 처리를 이용한 3차원 데토네이션 파 구조 해석

조덕래¹, 최정열^{2*}STUDY OF THREE-DIMENSIONAL DETONATION WAVE STRUCTURES
USING PARALLEL PROCESSING

D.R. Cho and J.Y. Choi

Three-dimensional structures of unsteady detonation wave propagating through a square-shaped tube is studied using computational method and parallel processing. Inviscid fluid dynamics equations coupled with variable- γ formulation and simplified one-step Arrhenius chemical reaction model were analysed by a MUSCL-type TVD scheme and four stage Runge-Kutta time integration. Results in three dimension show the two unsteady detonation wave propagating mode, the Rectangular and diagonal mode of detonation wave instabilities. Two different modes of instability showed the same cell length but different cell width and the geometric similarities in smoked-foil record.

Key Words: 삼차원 데토네이션 셀 구조(Three Dimensional Detonation Cell Structure), 병렬처리(Parallel Processing), 그을음 막 기록(Smoked-foil Record), 병렬 처리(Parallel Processing), 직교 모드(Rectangular Mode), 대각 모드(Diagonal Mode)

1. 서 론

에 혼합된 관 내부에서의 데토네이션 파 구조는 전방 데토네이션 파와 횡 방향 충격파의 삼중점에 의하여, 2차원적인 그을음 막 기록(smoked-foil record)을 통하여 실험적으로 확인 되는 세포질의 동적 구조를 가짐을 앞선 많은 2차원적 유동 형상에 대한 연구를 통하여 확인 된 바 있다[1-4]. 하지만 데토네이션 파의 구조는 근본적으로 삼차원적인 구조를 가질 수밖에 없으므로, 실질적인 데토네이션 파의 삼차원적 구조가 2차원적 그을음 막 기록과 어떻게 대응되는지는 충분히 알려져 있지 않았다. 하지만, 최근 컴퓨터 기술의 발달에 의한 전산 처리능력의 상승효과에 의하여 많은 계산 시간과 용량을 필요로 하는 삼차원 데토네이션 파 구조에 대한 해석이 수행 되어 기본적인 삼차원 구조에 대한 이해가 이루어지고 있다 [5]. 이러한 해석의 근간에는 병렬처리 기법이 커다란 부분을 차지하고 있다. 삼차원 해석에 있어서는 그 요구되는 성능에

비하여 아직 까지도 일반 단일 컴퓨터에 의한 계산은 불가능에 가깝다. 그러나 병렬 처리를 이용한다면 해석 수행이 가능하므로 이러한 배경에 의하여 본 연구에서는 Windows 기반의 PC 클러스터와 병렬 처리 기법을 이용하여 비정상 데토네이션 파의 삼차원 구조를 이해하기 위한 해석을 수행하였으며 [6-7], 직사각형 및 대각선 방향의 불안정성에 대한 진동 형상을 파악하였다.

2. 수치 해석 기법

3차원 데토네이션 파의 해석을 위하여 Euler 방정식과 함께 반응 진행 변수를 도입한 1 단계 비가역 반응 모델을 이용하였으며, 연계된 지배 방정식은 벡터 형으로 식 (1)과 같이 정리 할 수 있다. 압력은 상태 방정식으로부터 내부에너지와 발열량을 고려하여 식 (2)와 같이 정의된다. 여기서, ρ 는 밀도, u, v, w 는 각 방향의 속도 성분, e 는 단위체적당 전체 에너지, q 는 단위 질량당 발열 량 그리고 Z 는 반응과정 변수로서 0에서 1까지 변화는 반응 질량 분율 이다.[1-2]

1 학생회원, 부산대학교 대학원 항공우주공학과

2 정회원, 부산대학교 항공우주공학과

* Corresponding Author E-mail: aerochoi@pusan.ac.kr

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \\ \rho Z \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho e + p)u \\ \rho Zu \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ \rho vw \\ (\rho e + p)v \\ \rho Zv \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho w^2 + p \\ \rho wv \\ \rho wv \\ (\rho e + p)w \\ \rho Zw \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$p = (\gamma - 1) \left[e - \frac{\rho}{2} (u^2 + v^2 + w^2) + \rho Zq \right] \quad (2)$$

미연 혼합기와 연소 생성물은 서로 다른 열역학적 물성을 가지므로, Rankine-Hugoniot 관계식을 만족하는 비열비를 식 (3)과 같이 반응 진행 변수의 함수로 이용하였다.

$$\gamma(Z) = \frac{\gamma_U(\gamma_B - 1)(1 - Z) + \gamma_B(\gamma_U - 1)(Z)}{(\gamma_B - 1)(1 - Z) + (\gamma_U - 1)(Z)} \quad (3)$$

데토네이션파의 실제 반응 과정은 여러 화학 성분의 열역학적 데이터 및 다 단계 반응에 대한 해석을 필요로 하지만, 해석이 복잡하고 많은 계산 시간을 요구함에 따라 본 연구에서와 같은 열 유체역학적 특징만을 살펴보기 위해서는 간단한 1단계 비가역 Arrhenius 반응 모델을 이용하는 것이 편리하다. 이 경우 식 (1)의 반응 물질의 질량 생성율은 다음 식과 같이 정의된다.

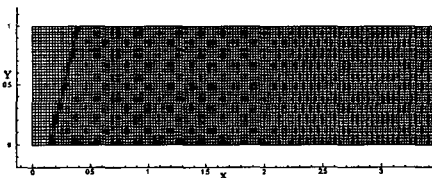


Fig. 1 Computational grid overlaid by initial distribution of reaction progress variable for 2-D model.

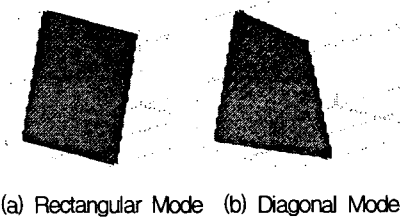


Fig. 2 Initial distribution of reaction progress variable for 3-D model.

$$\dot{w} = (1 - Z)k \exp(-E\rho/p) \quad (4)$$

식 (1)에 연계된 보존형의 지배방정식은 유한 체적 기법에 기반 하여 이산화 되었다. 셀 경계면에서의 수치 플럭스는 Roe의 리만 근사 해법과 MUSCL 외삽에 기초한 3차의 TVD 해법을 공간 차분에 적용하였다. 시간 적분 기법으로는 4차의 정확도를 가지는 4단계 Runge-Kutta 해법을 사용하였다[3]. 해석 코드는 MPI(Message Passing Interface) 라이브러리를 이용하여 병렬화 되었으며, Windows 기반의 Fast-Ethernet PC 클러스터를 이용하여 해석을 수행하였다.

3. 해석 모델 및 결과

3.1. 해석 조건

단면이 정사각형인 3차원 관의 계산 격자 모델은 길이 방향으로 단면의 크기가 일정한 형상으로 가로 세로의 길이 비가 1:1인 균일한 영역과 이후 가로 세로와 길의 비가 1:1이 아닌 격자 비를 늘린 격자계로 구성된다. 격자 비가 1:1인 곳은 데토네이션 파의 선두 부분과 연소 현상을 해석하기 위한 영역이며, 격자 비를 늘린 곳은 평형 C-J 상태에 도달하는 기연 가스를 해석하기 위한 영역이다. 격자 비가 1:1인 균일한 영역에서는 충격파의 삼중점에 의한 데토네이션 파의 smoked-foil 구조를 기록한다. 해석 모델의 물리적 형상은 격자 비가 1:1인 부분의 길이가 2, 가로 세로의 길이가 1이다. 동일한 해석 모델에 있어 2차원 및 3차원에서의 해석 결과를 먼저 비교하였다. 이후 그 결과를 바탕으로 3차원에서의 초기 조건에 따른 파면의 유동형상에 대한 해석을 수행하였다. Fig. 1은 1차원 ZND 해석 결과에 임의의 교란을 가한 2-D 모델에서의 초기 조건 형상이며, Fig. 2 또한 임의의 교란을 가한 3-D에서의 두 초기 조건 형상이다. (a)는 Rectangular mode의 초기 형상이며, (b)는 Diagonal mode의 초기 형상이다. Table. 1은 해석 모델의 격자 계를 정리한 것이다.

본 연구에서는 불안정성이 약한 데토네이션(weakly unstable detonation, $\theta=5.2$) 파를 유발하는 혼합기를 가정하였으며, 이 경우 계산에 이용된 열역학 및 반응 특성 변수 값들은 다음과 같다[4].

$$\begin{aligned} \gamma_U &= 1.602, \gamma_B = 1.288, k = 2000 \\ q &= 24.2, M_B = 1, \theta = 5.2 \end{aligned} \quad (5)$$

여기서 데토네이션 파의 불안정성을 지배하는 척도인 θ 는 von Neumann 상태의 온도(TVN)로 무차원화 된 활성화 에너지로써 다음과 같이 표현된다.

Table. 1 Summary of computational grids

Grid System		Minimum spacing	Domain size
2D	122x42	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.025$	3.5x1.0
	5,100 cells	uniform 83x42 + 2% stretching 39x42	
	302x102	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.01$	3.5x1.0
	30,000 cells	uniform 203x102 + 2% stretching 99x102	
3D	502x202	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.005$	3.5x1.0
	100,000 cells	uniform 402x202 + 3% stretching 100x202	
	122x42x42	$\Delta x_{min} = \Delta y = \Delta z = 0.025$	3.5x1.0x1.0
	215,000 cells	uniform 83x42x42 + 2% stretching 39x42x42	
3D	302x102x102	$\Delta x_{min} = \Delta y = \Delta z = 0.01$	3.5x1.0x1.0
	3,142,000 cells	uniform 203x102x102 + 0.74% stretching 99x102x102	

$$\theta = \frac{E_a}{RT_{VN}} \quad (6)$$

3.2. 2-D 해석

Fig. 3은 2-D 해석에 있어 최대 정점 압력을 수치 해석적으로 기록한 세 격자 모델중 하나의 smoked-foil 그림이다. 오른쪽 위에서부터 왼쪽 아래로 시간의 순서대로 기록된 것으로 진행 방향으로의 좌표 식은 다음의 식 (7)과 같이 정의된다. 2차원 smoked-foil 기록으로 부터 어느 정도의 경과 시간 후 셀 구조가 일정한 형태를 지닌다. 이는 2-D의 유동 형상이 일정한 유동 형상을 가지는 유동으로 발달됨을 나타낸다. Fig. 4는 세 가지 서로 다른 크기의 격자로부터 얻어진 smoked-foil 기록 결과를 비교한 것이다. 셀 형상은 격자수, 즉 해상도와는 상관없이 동일한 결과를 보이고 있다. 이로부터 임계 규모 이상의 격자에서는 동일한 셀 구조를 얻을 수 있음을 알 수 있다.[3]

$$x = x_{shock} - u_{\infty} t \quad (7)$$



Fig. 3 The numerical smoked-foil record from 502x202 grid

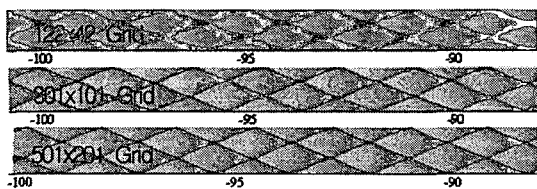


Fig. 4 The numerical smoked-foil record for three grid case

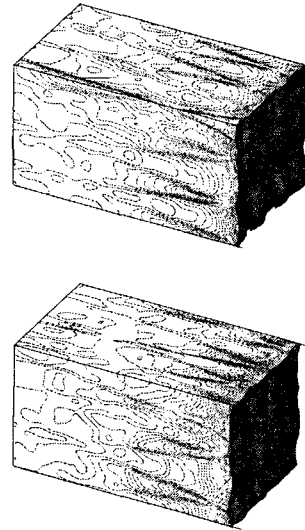


Fig. 5 Pressure contours on the wall boundaries and surface plots of the leading front at N=19000, 20000 for Rectangular Mode in 302x102x102 grid, k=4000.

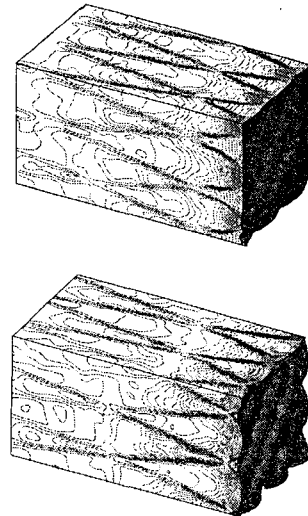


Fig. 6 Pressure contours on the wall boundaries and surface plots of the leading front at N=19000, 20000 for Diagonal Mode in 302x102x102 grid, k=4000.

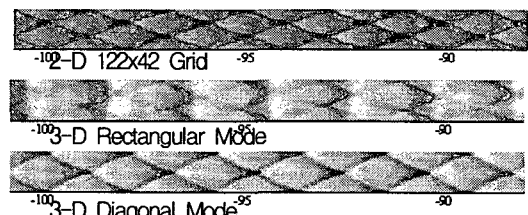


Fig. 7 The numerical smoked-foil record from 2-D and 3-D in 102x42x42 grid, k=2000.

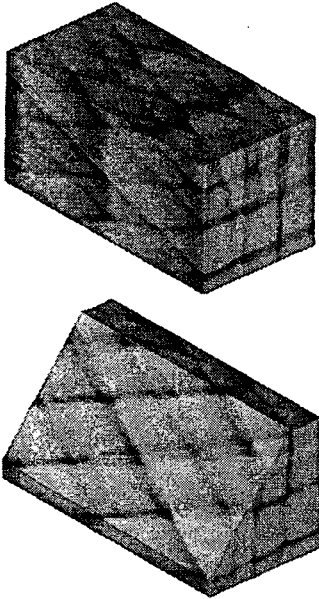


Fig. 8 The 3D numerical smoked-foil record for Rectangular Mode in 302x102x102 grid, $k=4000$.

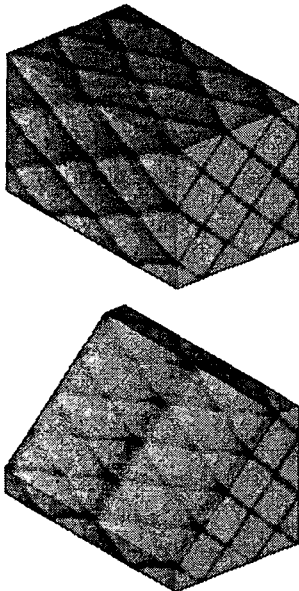


Fig. 9 The 3D numerical smoked-foil record for Diagonal Mode in 302x102x102 grid, $k=4000$.

3.3. 직사각형 및 대각선 모드의 3차원 해석

삼차원 해석에 있어서는 k 값을 2D 계산 모델에 사용한 $k=2000$ 과 그 두 배의 값인 $k=4000$ 인 두 가지를 계산 하였다. k 값을 두 배로 증가한 것은 좀 더 상세한 파면 구조를 확인

하기 위한 것이다. Fig. 5 및 Fig. 6은 큰 격자 모델에서 식(5)의 반응 특성 변수 pre-exponential 값을 $k=4000$ 으로 늘렸을 경우의 벽면과 정면에서의 압력 등고선 그림들이다. pre-exponential 값이 두 배 증가시킴으로 인하여 파면에서의 triple-line의 수도 두 배로 증가 하였고 격자수의 증가로 인하여 좀 더 상세한 전방의 파면 구조와 옆면의 유동 형상을 알 수 있다.

3.4. 3차원 Smoked-Foil Record

Fig. 7는 2-D 및 3-D 모델에서 $k=2000$ 인 경우의 smoked-foil 기록을 2차원 적으로 비교 한 것으로서 2-D 및 3-D 직사각형 모드에서의 smoked-foil 기록은 같은 형상을 지니지만, 대각선 모드에서의 기록은 셀 크기에 차이를 가진다. Fig. 8과 Fig. 9는 Fig. 5와 Fig. 6과 같은 조건에서의 3D smoked-foil 기록이다. 수직 방향으로 자른 단면에서 Fig. 8에서는 벽면과 나란한 triple-line이 존재하며, Fig. 9에서는 45도 기울어진 대각선 방향으로 triple-line이 존재함을 자세히 알 수 있다. 그리고 Fig. 8의 두 번째 그림과 Fig. 9의 벽면에 수직 방향으로 존재하는 줄무늬 형상은 벽면과 평행한 triple-line이 벽면과 충돌할 때 만들어지는 것으로서, 일정한 간격을 두고 존재하는 것은 triple-line과 벽면이 일정한 주기로 만나는 것을 의미한다. 이러한 현상을 2D 해석에서는 알 수 없는 부분이다. 또한 Fig. 9의 그림에서 알 수 있듯이 벽면과 평행한 triple-line이 존재하지 않는 대각선 모드에서는 이러한 줄무늬가 존재하지 않음을 알 수 있다. Fig. 8과 Fig. 9의 첫 번째 그림에서 45도 방향으로 자른 단면이 각각의 두 번째 그림이다. 각각의 첫 번째 그림은 다른 모드의 두 번째 그림과 유사함을 알 수 있다. 이는 직사각형 및 대각선 모드가 기하학적 유사성을 지님을 의미한다.

4. 결론

3차원 관에서의 데토네이션 파의 진동 형상을 해석한 결과 2차원 유동에서는 알 수 없었던 데토네이션 파의 삼차원 구조에 대하여 이해 할 수 있었다. 3차원 데토네이션 파는 직사각형 및 대각선 방향으로의 유동 형상을 지님을 확인하였다. 또한 3차원 직사각형 및 대각선 모드의 smoked-foil 기록의 셀 형상은 셀 길이는 다르지만 셀 폭은 거의 일치함을 알 수 있다. 3차원적 smoked-foil 기록에 의하여, 직사각형 모드의 smoked-foil에 나타나는 slapping wave라고 불리는 줄무늬 형상은 벽면과 나란한 triple-line의 존재로 인한 결과였다. 또한 직사각형 및 대각선 모드는 기하학적 유사성을 지님을 알 수 있었다. 앞으로 더 많은 3차원 현상을 이해하기 위해서 실제 반응 과정에 대한 해석을 수행해야 할 것이다



후 기

본 연구는 국방과학연구소 설립 고에너지 물질 특화연구센터의 지원을 받는 “고온유동 에너지 변환현상 전산해석기법 연구 (HM-22)” 과제의 일부로 수행된 결과이며 연구비지원에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] Kuo, K.K., 1986, "Principles of Combustion", *John Wiley & Sons*.
- [2] Fuhua. Ma, 2004, "Thrust Chamber Dynamics and Propulsive Performance of Airbreathing Pulse Detonation Engines", *Doctor thesis in Mechanical Engineering, The Pennsylvania State Univertisy*.
- [3] J.Y. Choi, Fuhua Ma and Vigor Yang, 2005, "Numerical Simulation of cellular Structure of Two-Dimensional Detonation Waves", *43rd Aerospace Science Meeting and Exhibit*.
- [4] J.M. Austin, F. Pintgen, and J.E. shepherd, 2004, "Reaction Zones in Highly Unstable Detonation", *30th International Combustion Symposium*.
- [5] Keitaro Eto, Nobuyuki Tsuboi and A. Koichi Hayashi, 2004, "Numerical Study on Three-Dimensional C-J Detonation Waves : Detail Propagating Mechanism and Existence of OH Radical", *30th International Combustion Symposium*.
- [6] 신재렬, 김명호, 최정열, 2001, “윈도우 클러스터 기반의 병렬 슈퍼 컴퓨팅 환경”, *추계 한국항공우주공학회 학술대회 논문집*, 11. p.517-520.
- [7] Thomas Sterling, 2002, "Beowulf Cluster Computing with Windows", *The MIT Press*.