

3차원 데토네이션 파의 수평 및 대각선 모드 파면 구조

조덕래* · 최정열**

Transverse and Diagonal Mode Structures of Three-dimensional Detonation Wave

Deok-Rae. Cho* · Jeong-Yeol. Choi**

ABSTRACT

Three dimensional structures of detonation wave propagating through a square-shaped duct were investigated 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 MUSCL-type TVD scheme and four stage Runge-Kutta time integration. The unsteady computational results in three dimension show the detailed mechanism of transverse mode and diagonal mode of detonation wave instabilities resulting same cell length but different cell width in smoked-foil record.

초 록

전산 해석과 병렬처리를 이용하여 정사각 관 내부를 전파하는 데토네이션파의 삼차원 구조를 살펴보았다. 가변 비열비 공식과 간략화 된 일단계 Arrhenius 반응 모델과 연계된 비점성 유체 방정식을 MUSCL 기반 TVD 해법과 4단계 Runge-Kutta 적분 방법을 이용하여 해석하였다. 삼차원에서의 비정상 해석 결과로부터 그을음 막 기록(smoked-foil record)에서 같은 길이와 다른 폭을 가지는 수평 및 대각 방향 불안정에 의한 상세한 파면 구조를 파악할 수 있었다.

Key Words: Three-dimensional Detonation(삼차원 데토네이션), Diagonal Mode(대각선 모드) Detonation Cell(데토네이션 셀), Parallel Processing(병렬처리)

1. 서 론

기체상의 데토네이션 파 구조는 전방 데토네이션 파와 횡 방향 충격파의 삼중점에 의하여, 2

차원적인 그을음 막 기록(smoked-foil record)에 의하여 실험적으로 확인되는 세포질의 동적 구조를 가짐이 알려져 있으며, 앞선 많은 연구에서 2차원 계산을 통하여 확인 된 바 있다. 그러나 데토네이션 파의 구조는 근본적으로 삼차원적인 구조를 가질 수밖에 없으며, 실제의 삼차원적 구조가 2차원 적인 그을음 막 기록과 어떻게 대응 되는지는 충분히 알려지지 않았다. 최근 전산 처

* 학생회원, 부산대학교 대학원 항공우주공학과

** 정회원, 부산대학교 항공우주공학과

연락처자, E-mail: aerochoi@pusan.ac.kr

리능력의 증가에 따라 많은 계산 시간과 용량을 필요로 하는 데토네이션과의 삼차원 해석이 수행되고 있으며, 기본적인 삼차원 구조에 대한 이해가 이루어지고 있다. 이러한 배경에서 본 연구에서는 Windows 기반의 PC 클러스터와 병렬처리 기법을 이용하여 데토네이션과의 삼차원 구조를 파악하기 위한 해석을 수행하였으며, 수평 방향 및 대각선 방향의 불안정성에 대한 진동 기구를 파악하였다.

2. 수치 해석 기법

3차원 데토네이션과의 해석을 위하여 Euler 방정식과 함께 반응 진행 변수를 도입한 1 단계 비가역 반응 모델을 이용하였으며, 연계된 지배 방정식은 벡터 형태로 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 발열량 그리고 Z 는 반응과정 변수로서 0에서 1까지 변화는 반응 질량 분율 이다[1,2].

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

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

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

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

데토네이션과의 실제 반응 과정은 여러 화학 성분의 열역학적 데이터와 다단계의 반응 기구가

필요로 하지만, 해석이 복잡하고 많은 계산 시간을 요구하므로 열-유체역학적 특징만을 살펴보는 데에는 간단한 1단계 비가역 Arrhenius 반응 모델을 이용하는 것이 편리하다. 이 경우 식 (1)의 반응 물질의 질량 생성율은 다음과 같이 정의된다.

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

식 (1)에 연계된 보존형의 지배방정식은 유한 체적 기법에 기반 하여 이산화 되었다. 셀 경계면에서의 수치 플럭스는 Roe의 근사 Riemann 해법과 MUSCL 외삽에 기초한 3차의 TVD 해법을 공간 차분에 적용하였다. 시간 적분 기법으로는 4차의 정확도를 가지는 4단계 Runge-Kutta 해법을 사용하였다[2]. 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

계산에 사용한 모델은 정 사각 단면을 가진 3차원 관의 형상으로 가로 세로의 길이 비가 일정한 부분과 이후 가로 세로와 길의 비를 늘린 격자계로 구성된다. 격자 비가 균일한 곳은 데토네이션과의 선두 부분과 연소 현상을 해석하기 위한 영역이며, 격자 비를 늘린 곳은 평형 C-J 상태에 도달하는 기연 가스를 해석하기 위한 영역이다. 격자 비가 균일한 영역에서는 충격파의 삼중점에 의한 데토네이션의 smoked-foil 구조를 기록한다. 해석 모델의 크기는 격자 비가 일정한 길이는 2이며, 가로 세로의 길이는 1이다. 동일한 해석 모델에서의 2차원과 3차원에서의 해석 결과를 먼저 비교하였다. 이후 바탕으로 3차원에서의 초기 조건에 따른 파면의 유동형상에 대하여 해석을 수행하였다. Fig. 1은 2-D 모델의 초기 조건형상이며, Fig. 2는 3-D에서의 두 초기 조건형상이다. (a)는 수평모드의 초기형상이며, (b)는 대각선 모드의 초기형상이다. Table 1은 해석 모델의 격자계를 정리한 것이다.

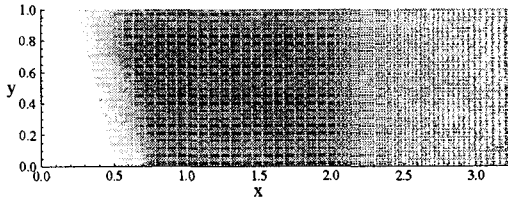
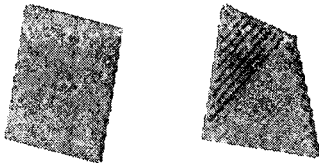


Fig. 1 122x42 computational grid overlaid by initial distribution of reaction progress variable



(a) Transverse Mode (b) Diagonal Mode

Fig. 2 122x42x42 initial distribution of reaction progress variable for 3-D mode.

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
3D	122x42x42	$\Delta x_{\min} = \Delta y = \Delta z = 0.025$	3.5x1.0x1.0
	215,000 cells	uniform 83x42x42 + 2% stretching	39x42x42

본 연구에서는 불안정성이 약한 데토네이션 파를 유발하는 혼합기를 가정하였으며, 이 경우 계산에 이용된 열역학 및 반응 특성 변수 값들은 다음과 같다.[3]

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

여기서 θ 는 von Neumann Peak 상태의 온도 (T_{VN})로 무차원화 된 활성화 에너지로써, 다음과 같이 표현되며, 데토네이션 파의 불안정성을 지배하는 척도이다.

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

3.2 이차원 해석 결과

Figure 3은 2-D의 그을음 막 기록을 수치 해석적으로 기록한 것이다. 오른쪽 위에서부터 왼쪽 아래로 시간의 순서대로 기록된 것으로 진행 방향으로의 좌표 식은 다음의 식(7)과 같이 표현된다. 그림에서 셀 구조가 일정한 형태를 지님을 알 수 있다. Fig. 4는 격자를 늘려서 계산한 결과 비교한 것이다. 격자수에 관계없이 세 결과 모두 동일한 크기의 셀 형상을 지님을 알 수 있다.

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

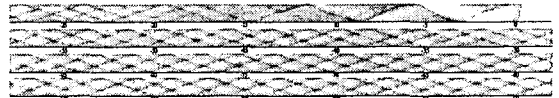


Fig. 3 The numerical smoked-foil record from 122x42 grid

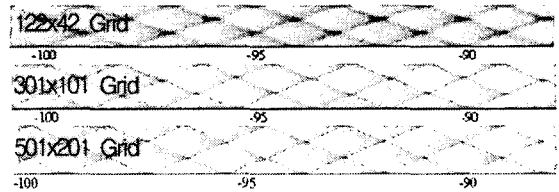


Fig. 4 The numerical smoked-foil record for three grids of different resolutions

3.3 삼차원 해석 결과

Figure 5 및 6은 Fig. 2의 (a)와 (b)의 형상을 초기 조건으로 하여 데토네이션 파가 규칙적인 유동 형상을 보이는 시점에서 시간에 따른 데토네이션 파면을 나타낸 그림이다. Fig. 5에서는 수직 및 수평 방향으로 진행하는 횡파가 벽면에 평행하게 반사되면서 주기적으로 진동하는 정사각의 파면 구조를 보인다. Fig. 6에서는 관의 모서리 및 관 내벽의 중심에서 45° 각도로 파의 반사가 주기적으로 이루어지면서 마름모꼴의 파면 구조를 보이고 있다.

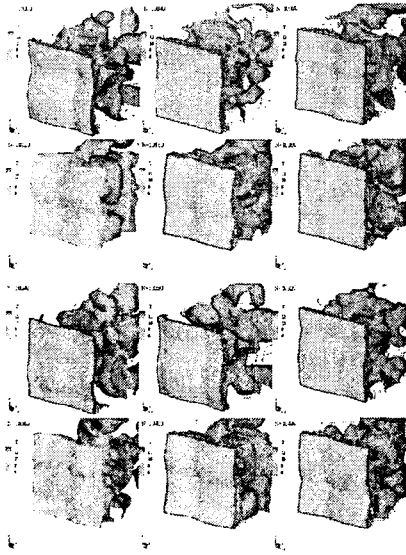


Fig. 5 Snapshots of 3D Temperature distribution on iteration number for Transverse Mode

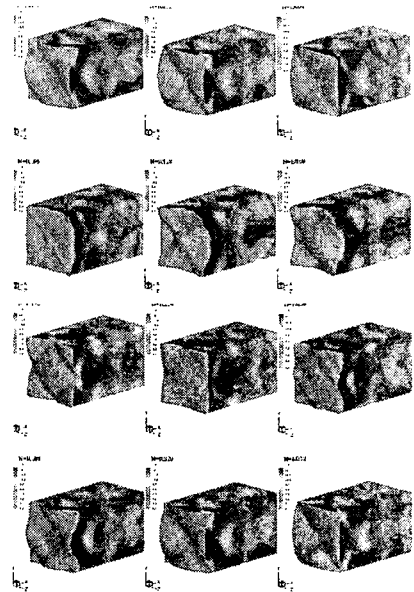


Fig. 6 Snapshots of 3D Temperature distribution on iteration number for Diagonal Mode

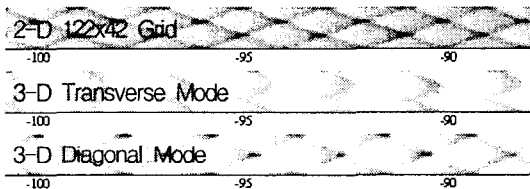


Fig. 7 The numerical smoked-foil record from 2-D and 3-D grid

4. 결론 및 고찰

3차원 관에서의 데토네이션 파의 진동 형상을 해석한 결과 2차원 유동에서는 알 수 없었던 데토네이션 파의 삼차원 구조에 대하여 이해할 수 있었다. 삼차원적으로 수평 및 대각선 방향으로 유동 형상을 가지며, 3차원 수평 및 수직 모드의 그을음 막 셀 형상은 셀 폭은 다르지만 셀의 길이는 거의 일치함을 알 수 있다. 좀더 정밀한 해석을 수행하여 파면 및 후방의 상세 구조에 대한 연구가 진행되어야 할 것이다.

후 기

본 연구는 국방과학 연구소지원 고에너지 물질 센터의 HM-22 과제에 의하여 지원 받았으며, 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

1. Kuo, K.K., "Principles of Combustion", John Wiley & Sons, 1986
2. Choi, J.-Y., Ma, F. and Yang, V., "Numerical Simulation of cellular Structure of Two-Dimensional Detonation Waves", AIAA Paper 2005-1174.
3. Austin, J.M., Pintgen, F., and Shepherd, J.E., "Reaction Zones in Highly Unstable Detonation", 30th International Combustion Symposium. 2004.