

Ghost Fluid concept기반의 에너지 물질의 Multi Physics 연구

김기홍* · 여재익**

Multi Physics research of Energy material using Ghost Fluid concept

Kihong Kim* · Jai-ick Yoh**

ABSTRACT

We present an innovative means of numerically treating interfaces associated with chemically active energetic materials. Recent advances in wave tracking technique based on the Ghost Fluid Concept is extended to handle multi-material multi-phase interfaces associated with chemical environment associated with explosion. We show several work-in-progress applications of our code, including the impact problems involving both energetic and inert elements. Accurate modeling of the equation of state and the constitutive relations are also discussed

초 록

본 연구에서는 화학적으로 활성화된 에너지 물질의 경계면을 정확하게 추적하는 기법을 소개한다. 이러한 경계면 추적기법은 Level Set기반의 Ghost Fluid Concept을 이용하여 폭발과 같은 화학적 현상을 포함하는 에너지 물질의 경계면을 정확하게 파악하고, 쉽게 multi material, pahse등과 같은 현상으로 확장이 가능하다. 본 연구에서는 이러한 multi physics modeling을 위한 선행연구로써 basic sharp interface tracking, impact problem에 대해서 소개할 것이다.

Key Words: Multi Physics(다중 물리학), Sharp interface tracking(정확한 경계면), Level set method (레벨셋 기법)

1. 서 론

실제 자연 현상에서는 여러 물질들이 접촉하면

서 많은 물리현상을 일으키고 있다. 이러한 물리 현상을 해석하기 위해서는 정확한 경계층을 찾는 것이 중요하다.

과거 여러 가지 방법들이 제안 되었으며 사용 되고 있다. 최근 경계층을 처리하기 위해 제안된 방법인 Ghost Fluid Method(GFM)[1]는 정확한 경계층 처리가 가능하며 다차원 확장에도 유리한

* 서울대학교 항공우주공학과

** 서울대학교 항공우주공학과

연락처, E-mail: project4@snu.ac.kr

장점을 가지고 있다.

본 연구에서는 GFM기법을 기본으로 하여 정확한 경계층을 찾아 hydro-dynamics에 high resolution의 simulation을 수행하였다. 이러한 모델링의 검증을 위하여 기본적인 Riemann problem과 선행 연구자들에 의해 수치해석 값이 구해진 임팩트 실험(Taylor impact)을 해석하여 벤치마킹을 하였다.

2. 본 론

2.1 preliminary validation

Computational fluid dynamics에서 기본적인 수치해석 validation을 위해서 사용하는 Riemann problem을 이용하여 기본적인 interface의 정확한 tracking을 확인하였다. 기본 조건은 $(\rho_L, V_L, P_L, \gamma_L) = (1, 0, 100000, 1.4)$, $(\rho_R, V_R, P_R, \gamma_R) = (0.125, 0, 10000, 1.2)$ 이다. 이러한 기본조건은 정확한 계산이 어려울뿐만 아니라 contact surface의 정확한 위치 역시 찾기가 매우 어렵다. 이를 해결하기 위해서 Ghost Fluid concept을 이용하여 정확한 contact surface에 대한 계산결과를 구하였다.

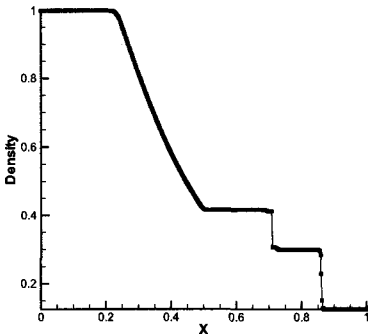


Fig. 1 Density profile of Riemann problem

2.2 Taylor Impact

Multi-Physics에 대한 지배방정식은 다음과 같이 나타난다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F(Q)}{\partial x} + \frac{\partial G(Q)}{\partial y} = S(Q)$$

위 식에서 conservative variables와 convective flux vector는 각각 다음과 같은 값을 가진다.

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho s_{xx} \\ \rho s_{yy} \\ \rho s_{xy} \end{pmatrix}, \quad F(Q) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E+p) \\ \rho s_{xx} \\ \rho s_{yy} \\ \rho s_{xy} \end{pmatrix}, \quad G(Q) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E+p) \\ \rho s_{xx} \\ \rho s_{yy} \\ \rho s_{xy} \end{pmatrix}$$

식에서는 일반적인 기체역학에서 사용되는 변수 외에 고체 물질의 변형률[2,3]을 나타내기 위해 deviatoric stress가 사용되었다. Deviatoric stress는 압력과 응력에 대해 아래와 같은 관계식을 가진다.

$$\sigma_{ij} = s_{ij} - p\delta_{ij}$$

그리고, deviatoric stress의 변화율은 다음과 같이 주어진다.

$$\overset{\nabla}{s}_{ij} = 2G(\overline{D}_{ij} - D_{ij}^p)$$

$$\overset{\nabla}{s}_{ij} = \dot{s}_{ij} + s_{ik}\Omega_{kj} - \Omega_{ik}s_{kj}$$

여기서 G는 전단계수(shear modulus), s_{ij} 는 Jaumann derivative, \dot{s}_{ij} 는 s_{ij} 의 물질미분(total derivative), \overline{D}_{ij} 는 deviatoric strain-rate, D_{ij}^p 는 plastic deviatoric strain-rate, Ω_{ij} 는 회전 텐서(spin tensor)이다. 그리고, 변형률 텐서(strain-rate tensor)와 회전 텐서(spin tensor)는 각각 다음과 같다.

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} - u_{j,i}), \quad D_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i})$$

여기서 D_{ij} 는 탄성과 소성 변형률의 합으로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$D_{ij} = D_{i,j}^e + D_{i,j}^p$$

Deviatoric strain-rate는 다음과 같다.

$$\bar{D}_{ij} = D_{ij} - D_{kk} \delta_{ij}$$

마지막으로 소스 항은 다음과 같이 나타난다.

$$S(Q) = \begin{pmatrix} -\phi \frac{\rho u}{x} \\ \frac{\partial s_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial s_{yy}}{\partial y} + \phi \left(\frac{s_{xx} + s_{yy} + s_{zz}}{x} - \frac{\rho u^2}{x} \right) \\ \frac{\partial s_{yy}}{\partial x} + \frac{\partial s_{xx}}{\partial y} + \phi \left(\frac{s_{yy} - \rho uv}{x} \right) \\ -\phi \left(\frac{u(E+p)}{x} + \frac{(us_{xx} + vs_{yy})}{x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (us_{xx} + vs_{yy}) + \frac{\partial}{\partial y} (us_{xy} + vs_{yy}) \\ s_{xx} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\Omega_{xy} s_{xy} + 2G \left[\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{u}{x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \\ s_{yy} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\Omega_{yy} s_{yy} + 2G \left[\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{u}{x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \\ s_{xy} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \Omega_{xx} s_{xy} + \Omega_{yy} s_{yy} - \Omega_{xy} s_{xx} - \Omega_{yy} s_{xy} + 2G \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \end{pmatrix}$$

23 Mie-Gruneisen EOS

지배 방정식에서 압력이 미지수이기 때문에 압력을 구하기 위해서 상태방정식이 필요하다. 일반적으로 압력은 두 항으로 표현된다. 첫째는 열적 흥분상태에서의 압력이며, 두 번째는 원자 격자들 사이에서 인력과 척력으로 인해 생기는 압력이다. 본 연구에서 고체는 큰 변형과 높은 변형율을 가지게 된다. 이러한 고체에 적합한 압력을 구하기 위하여 Mie-Gruneisen EOS를 사용하였다. Mie-Gruneisen EOS는 다음과 같은 식으로 주어진다.

$$P(e, V) \sim \Gamma(V) \frac{(e - e_c(V))}{V} + p_c(V) = \Gamma \frac{e}{V} + f(V)$$

위 식에서 e 와 V 는 각각 다음과 같다.

$$e = \frac{E}{\rho} - \frac{u^2}{2}, \quad V = \frac{1}{\rho}$$

Mie-Gruneisen 파라미터는 다음과 같이 정의된다.

$$\Gamma = V \left(\frac{\partial p}{\partial e} \right)_V = \frac{\Gamma_0 \rho_0}{\rho}$$

shock의 속도와 입자의 속도 u_p 는 실험 데이터를 통해 얻어진 상수값 c_0 와 s 를 통해 다음과 같은 관계식을 얻을 수 있다.

$$U_s = c_0 + su_p$$

Mie-Gruneisen EOS의 마지막 항인 $f(V)$ 는 다음과 같이 얻어진다.

$$f(V) = \begin{cases} \frac{\rho_0 c_0^2 \phi}{(1-s\phi)^2} \left[1 - \frac{\Gamma}{2V} (V_0 - V) \right] & \text{if } V \leq V_0 \\ c_0^2 \left(\frac{1}{V} - \frac{1}{V_0} \right) & \text{if } V > V_0 \end{cases}$$

24 Interface tracking

경계층을 정확히 찾기 위한 방법으로 Ghost Fluid concept을 사용한다. Ghost Fluid concept을 사용하게 되면 경계층의 정확한 위치 확인이 가능하며, 물성치의 점프조건이 사라지기 때문에 안정적인 수치계산이 가능해진다. Ghost Fluid concept에서는 경계층을 찾기 위해서 level-set 함수를 이용한다. Level-set 함수의 기본 방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{u} \nabla \phi = 0$$

위 식에서 ϕ 는 경계층의 위치를 나타내는 변수이다. ϕ 의 값을 통해서 물질의 경계층의 위치를 정확하게 추적할 수 있다. Level-set 함수를 계속 계산하는 과정에서 변수 값이 급격하게 변하게 되면 찾고자 하는 경계면에 왜곡이 생기게 된다. 이러한 왜곡을 막기 위해서 주기적으로 초기화(re initialization)를 해주어야 한다. 초기화 함수는 다음과 같다.

$$\phi_t + \bar{w} \nabla \phi = \text{sign}(\phi)$$

위 식에서 w 와 $\text{sign}(\phi)$ 는 각각 다음과 같이 주어진다.

$$\text{sign}(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + (\Delta x)^2}}, \quad \bar{w} = \text{sign}(\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

2.5 result

초기 조건은 밀도 8930kg/m^3 의 실린더 형태의 구리 바가 수직 아래 방향으로 227m/s 의 속도로 이동하는 상태이다. 이 상태에서 바닥에서 강체(rigid body)에 충돌하게 되면서 소성변형을 하게 된다. 구리 바의 규격은 반지름이 3.2mm 이며, 높이는 32.4mm 이다. 기본적인 고체 물성치인 영계수(Young's modulus)는 $E=117\text{Gpa}$, 포아송 비(Poisson's ratio)는 $\nu=0.35$, 항복응력(yield stress)은 $\sigma_Y = 400\text{MPa}$ 이다. $80\mu\text{s}$ 가 지난 이후에 모든 속도에너지(kinetic energy)는 소성변형으로 변화되게 된다.

$80\mu\text{s}$ 에서 구리 바의 변형을 보여주는 등가 소성 변형(equivalent plastic strain)은 Fig. 2 같은 형태를 보인다. 그리고 선행 연구자들인 Camacho and Ortiz[4] 의한 결과는 유사한 경향을 보이고 있다. 하지만 등가 소성 변형의 최대 값에서 약간의 차이를 보이고 있으며 경계면에서 선행 연구와 차이를 조금씩 보이고 있다.

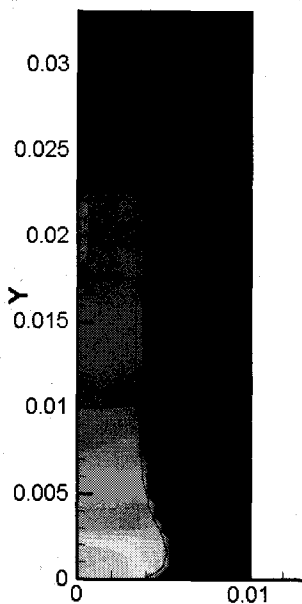


Fig. 2 Equivalent plastic strain at $80\mu\text{s}$

3. 결 론

에너지 물질을 적절하게 수치해석 하기 위해서는 각 물질에 대한 적절한 모델 수립과 다중 물질들의 접촉면을 정확히 파악하여야 한다. 본 연구에서는 CFD에서 가장 기본적인 문제인 Riemann problem을 통해서 기본적인 interface tracking을 검증하였다. 그후 고체를 탄-소성 물질(elasto-plastic material)로 모델링 하였으며, 경계층을 Ghost Fluid concept을 이용하여 처리하였다. 그 결과 선행 연구에 대하여 만족할만한 데이터를 얻을 수 있었으며, 향후 에너지 물질을 이용한 수치해석에 사용될 수 있는 기초적인 자료를 구축하였다.

참 고 문 헌

1. Ronald P.Fedkiw, Tariq Aslam, Barry Merriman and Stanley Osher, 1999, "A non-oscillatory Eulerian approach to interface in multimaterial flows(the Ghost Fluid Method)," *Journal of Computational Physics*, Vol. 152, pp.457-492.
2. J.J. Yoh and D.S. Stewart, "Modeling of energetic and inert materials at large deformation rates," LLNL Technical Report, UCRL-JC-151176, 2002.
3. M.A. Meyers, 1994, "Dynamic behavior of materials," John Wiley & Sons, New York
4. C.W. Shu, S. Osher, 1988, "Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing scheme II," *Journal of Computational Physics*, Vol. 83, pp.32-78.
5. G.T. Camacho, M. Ortiz, 1997, "Adaptive Lagrangian modeling of ballistic penetration of metallic targets," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, Vol. 142, pp.269-301.