

상 변화와 인터페이스 이론을 이용한 고에너지물질의 반응연구

김기홍* · 김학준** · 김형원** · 여재익*

Study of energetic materials using phase change and interface theory

Kihong Kim* · Hakjun Kim** · Hyoungwon Kim** · Jai-ick Yoh*

ABSTRACT

Phase change in combustion of energetic materials happens inevitably. The product gas generated by combustion is at extreme temperature and pressure state. The interaction between a gas and metal generates high strain rate deformation and complex wave phenomena. In order to perform combustion simulation containing phase changes, we develop an elegant model for phase change and provide a proof of performance via vapor explosion example.

초 록

고에너지 물질의 상변화는 연소과정에서 발생하는 필연적으로 중요한 요소이다. 연소과정에서 발생한 고온, 고압의 가스는 주변의 물질과 상호작용을 통해 복잡한 현상을 일으키게 된다. 본 연구에서는 고에너지 물질의 상변화를 해석을 하기 위한 기초 연구로 상변화 변수를 이용하여, 증기 폭발을 해석하였다.

Key Words: Energetic materials, Phase change, Vapor explosion, Interface theory

1. 서 론

고에너지 물질의 연소과정은 기본적으로 고체에서 시작하여 액체, 기체로 이어지는 상변화가

발생하게 된다. 이러한 현상은 일반적인 detonation에서는 아주 짧은 시간에 발생하기 때문에 큰 공학적인 의미를 가지기 어렵다. 하지만 연소반응이 천천히 일어나는 deflagration 현상에서는 고에너지물질의 상변화가 긴 시간동안 천천히 발생하기 때문에, 각 단계의 상을 정확하게 파악하여 해석하는 것이 필요하게 된다.

본 연구에서는 이를 해결하기 위한 기본적인

* 서울대학교 기계항공공학부

** 국방과학연구소

연락처, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

상변화 모델을 제시하고, 이를 이용하여 고에너지물질의 연소 과정에 적용하기 앞서 원자력과 용융/철강 산업에서 주로 발생하는 증기폭발을 해석하였다.

증기 폭발의 기본적인 과정은 Fig. 1과 같이 설명할 수 있다. 세부적인 상세과정은 뜨거운 고체 용융물이 물속으로 들어갈 경우, 용융물 주위의 물이 급격하게 수증기로 변화는 상변화가 일어나게 되며, 이는 주위에서 연속적으로 발생하게 된다. 이러한 연속적인 액체에서 기체로의 상변화는 급격한 비체적의 증가를 발생시키게 된다. 이는 결국 물을 감싸고 있는 용기에 손상을 발생시키게 된다.

본 연구에서는 이러한 상변화를 해석하기 위하여, 정확한 상변화 모델을 제시하고 이를 이용하여 증기 폭발을 해석하였다.

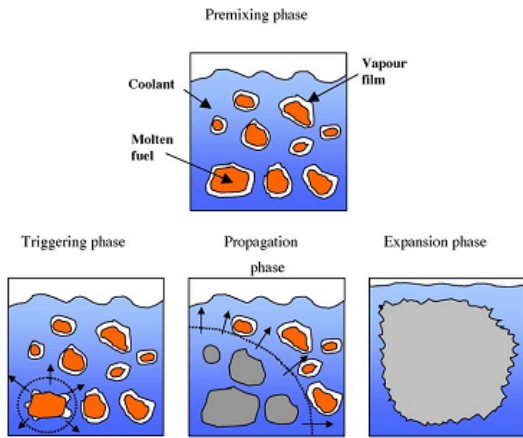


Fig. 1 Schematic presentation of the four consecutive phases of the steam explosion [1]

2. 본 론

2.1 상변화 모델

본 연구에서는 상변화를 모사하기 위하여, Ruderman et al.[2]와 Yoh et al.[3]에서 제시한 상변화 모델을 적용하였다. [2], [3]에서 사용한 상변화 모델은 Helmholtz free energy와 Clausius Duhem inequality를 이용하여 일반적

으로 발생하는 상변화 과정을 해석하였다. 본 연구에서는 증기 폭발에 맞는 기본적인 상변화 모델을 사용하였다.

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{G}}{\partial y} = \bar{S}(U) \quad (1)$$

여기서 각 항은 각각 다음과 같다.

$$\bar{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho \phi \end{bmatrix}, \quad \bar{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho ue + up \\ \rho u \phi \end{bmatrix}, \quad \bar{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho vw \\ \rho v^2 + p \\ \rho ve + vp \\ \rho v \phi \end{bmatrix},$$

$$\bar{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -q_t + \rho \beta'_v(\phi) \frac{T}{T_v} Q_v \phi \\ \frac{1}{B_\phi} \left[-\rho \frac{1}{2} \Psi \frac{\partial}{\partial \phi} (\{(\phi-1)(\phi-2)\}^2) - \rho \beta'_v(\phi) \frac{T-T_v}{T_v} Q_v \right] \end{bmatrix}$$

소스 항에서 나온 각각의 상수에 대한 설명은 [2], [3]에 제시되어 있다.

2.2 증기 폭발

상변화 모델이 포함된 식을 이용하여 상변화를 해석한 여러 연구가 있으며, 기본적인 1차원에 대한 해석은 [4]에서 이루어졌다. Fig. 2에서는 물이 수증기로 변화는 과정을 해석한 결과로 상변화가 일어나는 동안 압력이 불연속적으로 변화는 것을 보여주고 있다. 이는 아주 짧은 시간과 좁은 공간에서 발생하는 것으로 일반적인 모델로 해석하기는 어려움이 있다. 이러한 상변화 과정은 본 연구에서 사용하는 모델을 통하여 적절하게 해석할 수 있다. 증기 폭발을 해석하기에 앞서 이와 비슷한 현상인 polymer jetting 현상을 해석하였다. Fig. 3에서는 고체 표면에 고온이 순간적으로 가해졌을 때 액체화된 고체가 순간적으로 기체로 변하면서 Rayleigh-Taylor instability와 비슷한 현상을 보여준다. 그림에서 phase 1과 2는 각각 액체, 기체를 의미한다.

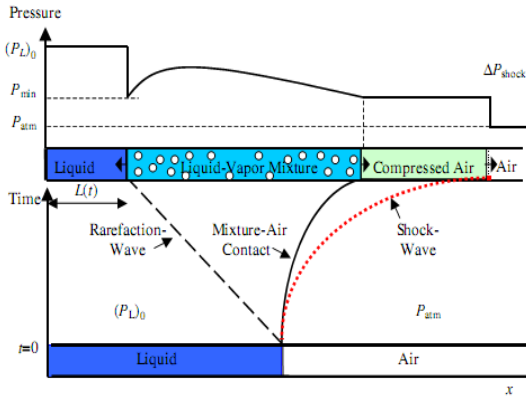


Fig. 2 Typical wave action in the $x-t$ plane and the pressure profile following boiling liquid expanding vapor explosion [4]

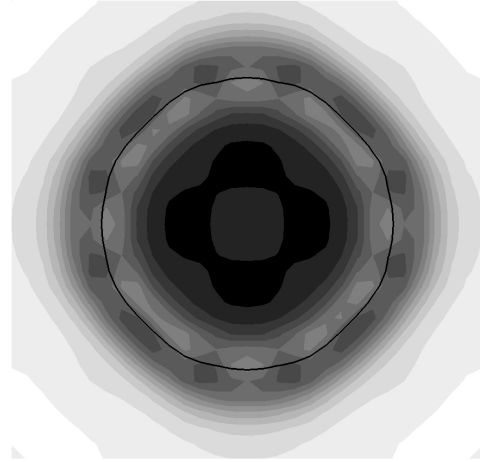


Fig. 4 Density profile of a water droplet in phase change

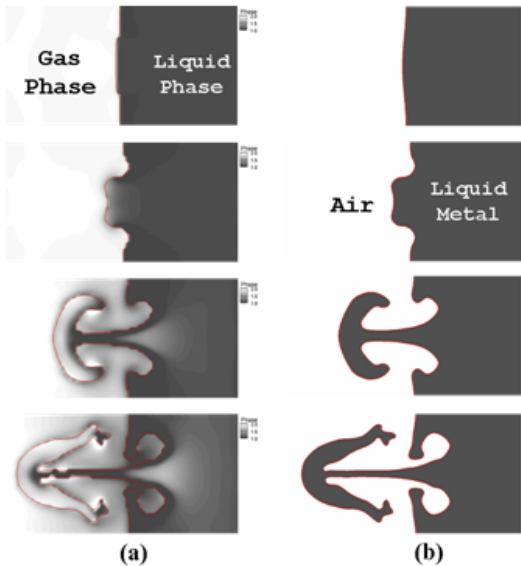
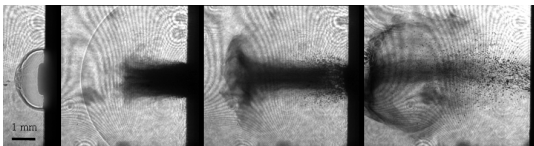


Fig. 3 Phase profile of polymer jetting driven by high power laser

Fig. 4는 증기폭발을 간략하게 모사한 것으로 액체가 기화되는 과정으로 가운데 높은 밀도가 점점 낮아지는 것을 보여주고 있다.

3. 결 과

Fig. 3과 4에서 상변화 과정 중 밀도의 변화와 물질의 상이 액체에서 기체로 변화하는 것을 확인하였다. 이는 상변화가 포함된 연구를 하기 위한 기본적인 현상을 확인한 것으로, 상변화 과정에서의 물성치 변화로 인한 물질의 압력과 밀도의 급격한 변화로 물질의 경계면이 크게 변하는 것을 확인하였다.

4. 결 론

본 연구에서는 고에너지 물질의 연소과정에서 발생하는 상변화 현상을 해석하기 위한 기초적인 연구로써, 물의 액체에서 기체로 상이 변화하는 과정 중 발생하는 증기폭발을 모사하였다. 이를 위하여 상변화 해석을 위한 모델을 제시하고, 이를 이용하여 증기 폭발을 해석하였다. 증기 폭발은 철강 산업에서 많이 발생하는 재해로써, 본 연구는 증기 폭발에 대한 기초적인 해석의 기틀을 마련하였다.

후 기

본 연구는 BK21과 국방과학연구소 장기기초과제(나노연소상변화 08-08-01)와 고에너지 물질 센터(HM-20)의 지원을 받아 수행되었습니다. 지원에 감사드립니다.

참 고 문 헌

1. Cizelj L., Koncar B. and Leskovic M., "Vulnerability of a Partially Flooded PWR Reactor Cavity to a Steam Explosion" Nuclear Engineering and Design Vol.236: 1617-1627, 2006
2. Ruderman G., Stewart D. and Yoh J., "A Thermomechanical Model for Energetic Materials with Phase Transformations" SIAM Journal of Applied Mathematics Vol. 63, No.2: 510-537, 2002
3. Yoh J., Stewart D. and Ruderman G., "A Thermomechanical Model for Energetic Materials with Phase Transformations: Analysis of simple motion" SIAM Journal of Applied Mathematics Vol. 63, No.2: 538-563, 2002
4. Pinhasi G., Ullmann A. and Dayan A., "1D Plane Numerical Model for Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion" International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 50: 4780-4795, 2007