

# 고불안정 조건에서의 3차원 데토네이션 파면 구조 해석 연구

조덕래\* · 원수희\*\* · 신재렬\*\*\* · 최정열\*

## Numerical Study of Three Dimensional Detonation Waves Structure in Highly Unstable Mode.

Deok-Rae Cho\*, Su-Hee Won\*\*, Jae-Ryul Shin\*\*\*, Jeong-Yeol Choi\*\*†

### ABSTRACT

The results are shown highly unstable mode's detonation dynamics by compared with weakly unstable mode. And we investigate the difference and similar features of 2D and 3D results. By using PSD via FFT, the effects of pre-exponential factor difference and of unstable mode were investigated in this study. The result of PSD is shown pulsed features in weakly unstable mode, but noselike in highly unstable mode. By compared between Sheliren image and overlaid slice image, the irregular feature of detonation waves structure was discussed in highly unstable mode.

**Key Words** : Detonation Dynamics(데토네이션 동적 특징), Highly Unstable Mode(고 불안정 모드), PSD(Power Spectrum Density)

기체상에 전파 하는 데토네이션 파는 기본적으로 불안정한 상태이다. 이러한 불안정한 데토네이션 구조도 혼합 물의 조성에 따라 저 불안정 영역(weakly unstable)부터 고 불안정(hightly unstable) 영역으로 또 다시 구분되어 불리어진다. 저 불안정 영역에서 데토네이션 파면 구조는 안정적이고 규칙적인 데토네이션 파면 구조의 움직임과 이것에 의한 일정한 주기와 셀 크기를 가지는 그을음 막(smoked-foil) 기록을 남긴다. 반면에 고 불안정 영역에서는 이러한 안정적이고 규칙적인 움직임 대신에 아주 불규칙적인 불안정한 파면 구조와 셀 형상을 띤다. J.M Austine[1]등은 실험적 연구를 통하여 저 불안정 영역부터 고 불안정 영역에 해당하는 화학 조성을 이용하여 저 불안정 영역과 고불안정 영역에서의 뚜렷한 차이를 관찰, 연구하였다. J.E. Sheperd[2]는 최근 논문에서 가스 상 데토네이션에서 난류의 영향에 대하여 논하였으며, 이러한 연구 주제에 대한 최근 연구 동향을 개괄하여 논의하였다. 또한 Powers [3]는 Euler 와 Navier-Stokes 방정식을 이용하여 두 결과들로부터 점성 효과에 대하여 논의하였다. 또한 Sharpes[4]와 Redulescue[5] 등은 격자 해상도 영향을 심도 깊게 논의하였다. Deledic

quel[6]등은 주기적 경계조건을 가진 3차원 형상에서 저 불안정 영역 근방에서 활성화 에너지에 따른 파면 형상과 유동의 동적 특징 등을 자세히 묘사하였다. 그리고 Choi등은 [7] 고정 격자 계를 이용한 2차원 데토네이션 셀 구조에 대한 수치해석에서 셀 구조를 포착하기 위해서는 고 불안정 영역에서는 다른 불안정 영역에서와 달리 더 많은 고정 격자 수 즉 더 좋은 격자 해상도를 요구함을 보였다. 아직까지 고 불안정 영역에서의 데토네이션 파면에 대한 자세한 3차원 수치 해석 묘사에 대한 연구 결과가 많이 보고되지 않고 있다. 이는 상대적으로 많은 컴퓨터 성능과 거대한 격자수에 의한 계산 시간의 소모 등으로 인한 문제로 보인다. 따라서 본 연구에서는 이러한 고불안정 영역에서의 데토네이션 파면에 대한 3차원 수치 해석을 통하여 2차원 문제에 대한 비교 등을 통하여 그 기본적인 특징 등을 파악하고자 한다.

수치 해석에 있어서 열화학적 매개변수들은 J. M. Austine등의 연구에 이용되었던 값들을 사용하였다[1]. 유체 동역학 방정식은 유한 체적 cell-vertex 기법에 의하여 이산화 하였으며, 셀 경계에서의 수치적 플러스는 3차 정확도의 MUSCL-type TVD 기법에 의하여 Roe의 근사 리만 해법으로 계산하였다[8]. 이산화 방정식은 4차 정확도의 Runge-Kutta 기법을 이용하였으며 MPI (The Message Passing Interface standard) 표준 라이브러리를 이용하여 계산 영역 분할 기법으로 병렬화를 수행하였다. 3차원 계산에 사용

\* 부산대학교 항공우주공학공학과  
\*\* 한국항공우주연구원  
\*\*\* 대우건설 연구소  
† 연락처, [aerochoi@pusan.ac.kr](mailto:aerochoi@pusan.ac.kr)  
TEL : (051)510-2373 FAX : (051)-510-2373

된 주 격자는 506(길이방향)×402(반경방향)×402(원주방향) 개다. 격자 해상도는 주어진 반응 속도 상수 값  $k$ 의 범위에서 Choi[5] 등의 연구에 의하여 제안된 발열 영역 내 최소 격자점 수 이상을 만족하는 격자 해상도를 유지하게 하였다. 경계 조건은 벽면 방향은 주기적(periodic) 경계 조건으로 주었으며, 입구 경계조건은 C-J 테토네이션 속도로 고정하였으며, 출구 경계조건은 Choi[7]등이 제안한 C-J 상태 값을 적용한 특성 경계 조건을 사용하였다. 해석에서 사용된 격자계 및 매개변수의 물리적 값들은 표1과 표2에 정리하였다.

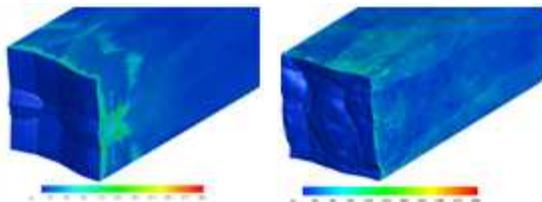
**Table 1 Summary of computational grids**

Grid system	Minimum spacing	Domain size
2D		
506×402	$\Delta x = \Delta y = 0.0025$	5.13×1.0
200,000 cells, uniform 401×402 + 3.85% stretching 105×402		
3D		
506×402×402	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.0025$	5.13×1.0
81,700,000 cells, uniform 401×402×402 + 3.85% stretching 105×402×402		

**Table 2 Computational cases adapted from Austin et al. (2005)**

Weakly unstable detonation	
$\theta = 5.2$	$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 12\text{Ar}$
$\gamma_U = 1.602$	$\gamma_B = 1.288$
Highly unstable detonation	
$\theta = 12.7$	$\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2 + 9\text{N}_2$
$\gamma_U = 1.336$	$\gamma_B = 1.161$

Austin et al. (2005)

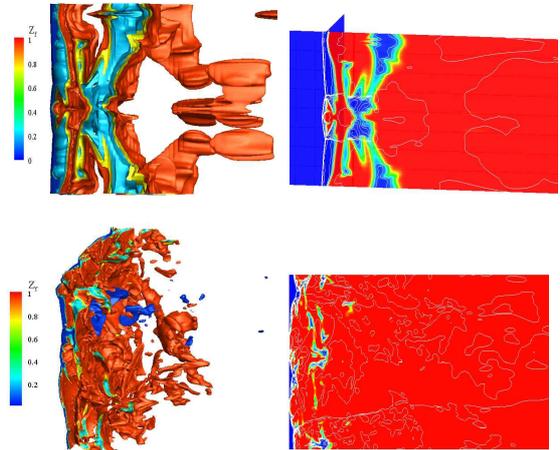


**Fig. 1** Pressure distribution,  $k=10^5$ (left at time=35.48),  $k=4 \times 10^5$ (right at time=39.76)

Figure 1은 각 반응 속도 상수 값 (pre-exponential factor,  $k$ )에 대한 각각 3차원 해석에서의 일정 시간 이후 테토네이션 파가 균일한 격자 계에서 유동이 안정화된 상태에서의 3차원 파면 그림이다. 초기 파면 형상이 상대적으로 균일하고 반응 속도 상수가 작은 값을 준 경우의 파면의 형상이 상대적으로 안정화된 형상을

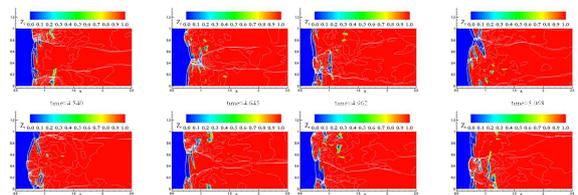
보여준다. 반면에 반응 속도 상수가 크고 초기 형상에서 초기 값들의 분포 구 배가 큰 경우에는 파면이 상당히 불규칙적인 결과를 보여주고 있다.

이러한 특징은 그림 Fig. 2에서 더욱 뚜렷하게 나타나고 있다. 둘 결과 모두 고 불안정 영역의 특징답게 충격파와 연소면 사이의 유동 영역의 길이가 반응 면에 비하여 상당히 길게 가지고 있다. 또한 연소 반응 영역 사이에 반응이 미처 일어나지 않은 비 반응 영역(unreacted pocket)의 현상 또한 뚜렷이 보인다. 그리고 2차원 해석에서의 결과에서와 동일하게 반응 속도상수가 낮은 결과에서는 선두 충격파와 연소면 사이의 반응 영역 길이가 상대적으로 더욱 크게 나타나고 있다.



**Fig. 2** Pressure and reaction progress variable (left) and cross-sectional structure (right) at  $k=10^5$ (top) and  $k=4 \times 10^5$ (bottom).

Figure 2의 좌측 3차원 등고면(iso-surface) 그림들에서 전방과 연소 영역내의 푸른색으로 표현된 부분은 압력을 나타낸 영역이다. 나머지 컬러 색들은 반응 과정을 나타낸  $Z_f$ 를 의미한다. 반응 과정은 작은 반응 상수에서 상대적으로 긴 영역에 걸쳐서 발생하고 있음을 알 수 있다. 반면에 반응 속도 상수 값  $k$ 가 증가하면 짧은 구간에서 급격하게 연소가 진행되고 있다.



**Fig.3** 2D pressure and  $Z_f$  contour for  $k=4 \times 10^5$ .

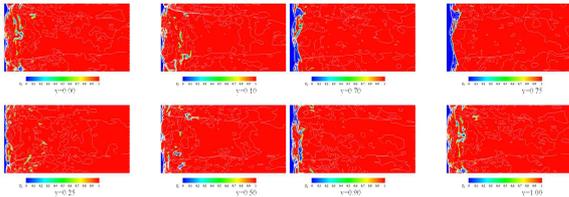


Fig.4 3D pressure and Zf contour for  $k=4 \times 10^5$  at time  $t=39.76$ .

Figure 3과 4는 각각 2차원 및 3차원에서의 압력과 연소 반응 진행을 표현한 것들이다. 2차원 그림들은 시간에 따른 변화를 나타냈으며, 3차원 결과는 임의의 시간에서 정지된 파면에 대하여 각 절단면 위치에서의 파면과 반응 진행의 차이를 표현한 것이다. 이 결과들을 비교하면 2차원의 시간에 따른 결과와 비슷한 경향을 3차원 결과에서는 한 순간에 모두 포함하고 있음을 알 수 있다. 즉 2차원에서의 여러 시간에 걸친 이러한 결과들이 복합적이고 중첩되어 3차원에서는 한 순간에 데토네이션 파면 구조가 형성됨을 의미한다. 특이한 점은 이번 연구에서는 2차원 결과에서 반응 상수가  $k=10^5$ 인 경우에 초기 파면이 안정화되기 전에 선두 파면이 경계 영역 밖으로 밀려 나가면서 연소가 종료되었다. 하지만 3차원 해석에서는 파면이 균일한 격자 영역 내에서 안정되게 유지 되었다는 것이다. 또한 3차원 결과에서 파면의 안정화 특징이 이전 2차원 해석 결과의 약한 불안정과 중간 불안정 결과에서 보인 반응 상수  $k=1,000$ 의 경우와 비슷한 결과를 보이고 있다. 이는 2차원 보다 3차원 해석이 경계 영역 방향으로 1차원 더 많은 공간 영역을 가짐으로 해서 1차원 공간만큼 더 많은 영역에서 연소 반응이 동시에 발행하며, 주기적 경계조건을 가진 경계 영역의 증가 등이 복합적으로 겹쳐서 생긴 결과로 추측된다. 하지만 이러한 결과에 대하여는 향후 더 많은 해석을 통한 연구가 진행 되어야 할 것으로 판단된다.

Figure 5는 3차원 해석에서 불안정 영역이 다른 조건 조건에서 선두 충격 파 압력 변동이 안정화된 영역에서 일련의 시간 변동에 대한 FFT(Fast Fourier Transform)를 이용한 PSD(Power Spectrum Density)분석의 결과이다. 왼쪽과 중간 그림은 약한 불안정 영역에서의 결과들이다. 왼쪽 그림은 반응 속도 상수 값  $k$ 가 일정하고 초기 형상이 다른 조건에서 나온 결과를 비교한 그래프이다. 동일한 반응 속도 상수 값을 가지는 경우에는 동일한 분석 결과를 보여준다. 그러나 같은 초기 조건에서 다른 반응 속도 상수로 계산한 결과를 비교한 중간 그래프는 뚜렷한 차이를 보이고 있다. 반응 속도 상수  $k=1,000$ 인 곳에서는 최초의 peak 값이 최대 peak 값이 되며, 이후

로는 peak 압력이 전체적으로 감소하는 특징을 가진다. 반응 속도 상수 값  $k=1,500$ 으로 증가하면 최대 peak 값 이전에 한번의 peak 값을 가지고 있다.

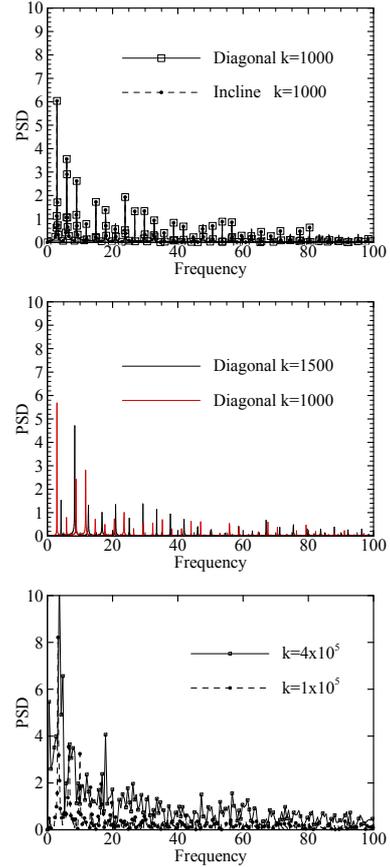
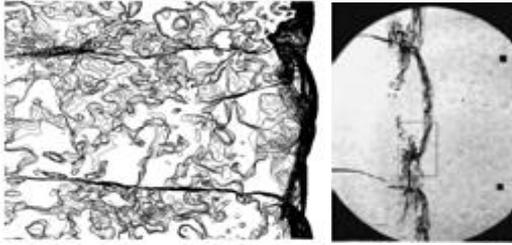


Fig. 5 Amplitude of the oscillation mode as function of pre-exponential  $k$ . Weakly unstable results (top and middle) and highly unstable result (bottom).

최대 peak 값 이후로는  $k=1,000$ 의 결과와 같이 전체적으로 peak 값이 감소하는 특징을 보인다. 반응 상수  $k=1,000$ 에서는 최대 peak 값 주파수는  $f_{\max\text{peak}} \approx 2.928$ , peak 값들 사이의 주파수 간격은  $\Delta f_{\text{peak}} = 5.856$ 으로 나타났다. 그리고  $k=1,500$ 에서 최대 peak 값의 주파수는  $f_{\max\text{peak}} \approx 8.6$ , peak 값들의 주파수 간격은  $\Delta f_{\text{peak}} = 4.2$ 로 나왔다. 두 결과 모든 peak 값들이 전체적으로 일정한 간격을 두고 이산화 된 pulse 형태로 나타나고 있다.

이와는 달리 고 불안정 영역에서는 반응 상수  $k=10^5$ ,  $k=4 \times 10^5$  두 가지 모두 주파수 형태가 peak 값들 사이의 간격이 일정하지 않고 불규칙적인 nose와 같은 형태를 보이고 있다. 반응 상수 값이 증가하면서 전체적인 강도 또한 상대적으로 증가하는 결과를 보이고 있다. 최대 peak 값이 나타나는 주파수는  $k=10^5$ 에서는  $f_{\text{peak}} = 3.25$

이며,  $k=4 \times 10^5$ 에서는  $f_{\text{peak}} = 3.67$ 이다. 또한 반응 속도 값이 증가하면서 최대 peak 값의 크기가 증가했으며, 전체적인 강도 또한 동일한 주파수 영역에서 상대적으로 더 큰 값을 가지고 된다.



**Fig. 6** The pressure contour line is overlaid from  $y=0.7$  to  $y=0.75$ (left) and schlieren image by J.M. Austine<sup>1</sup> in  $C_2H_4-3O_2-8N_2$ ,  $P_1=20kPa$  in the narrow channel(right).

Figure 6은 고 불안정 영역에서 J.M. Austine[1] 등의 실험에 보여주는 고 불안정 영역에서의 슐리엔(schlieren) 사진(우)과 수치해석 결과에서 압력의 강도를 일정 위치 사이의 단면 사진(좌)를 겹쳐서 표현 한 그림을 비교한 것이다. 실험 결과 사진은 고 불안정 영역에서의 선 두 데토네이션 파면의 거칠고, 주름진 특징이 잘 나타나 있다. 수치적 해석에서는 하나의 단면 사진이 아닌 서로 가까이 이웃한 위치의 단면 사진을 여러 겹 겹쳐서 표현하면 이러한 데토네이션 파면 특징을 그림과 같이 보여준다. 이렇게 이웃한 파면들이 서로 간섭함으로 해서 데토네이션 파면이 매우 불규칙적인 형상을 띄게 된다.

데토네이션 현상에 수치해석 분야는 컴퓨터 성능 향상과 함께 더불어 더 효율적이고 정확한 수학적 모델, 수치해석 알고리즘들에 의하여 많은 발전을 이룩하였다. 이러한 발전으로 인하여 지난 수십년간 수치해석 하지만 여전히 데토네이션 분야에서는 많은 문제점들이 해소되지 않고 남아 있다. 이중 3차원 데토네이션 현상에 대한 수치적 연구는 최근 십년동안 그 기초적인 부분을 이룩하였다. 특히 이중 고 불안정 영역에서의 데토네이션 현상에 대한 수치적 연구는 여전히 그 발전 양상이 더딘 상태이다. 본 연구는 이러한 고 불안정 데토네이션 영역에서 수치적 노력과 시간 소모를 최소한으로 하기위하여 1단계 화학 반응식을 도입한 3차원 Euler 방정식을 이용하여 고 불안정 영역에서의 3차원 데토네이션 해석을 통하여 고 불안정 영역에서의 파면 구조의 특징을 논의하였다. 또한 2차원과 3차원 해석 결과를 비

교하여 두 결과의 유사성과 차이점에 대하여 검증하였다. 또한 PSD 분석을 이용하여 반응 속도 상수(pre-exponential factor)  $k$ 의 변화와 불안정 영역에 따른 특징에 대하여서 비교하여 그 특징을 파악하였으며, 고 불안정 영역에 대한 실험 슐리엔 사진과 3차원 해석 결과에서의 단면 사진들의 중첩 이미지를 비교하여 3차원 파면의 간섭에 의한 불규칙성에 대하여 논하였다.

## 후 기

본 연구는 국방과학연구소 국제공동기초 연구 과제(ADD-12-70-05-01)의 지원 받았습니다.

## 참고 문헌

- [1]. J. M. Austin, F. Pintgen, J. E., Shepherd, "Reaction zones in highly unstable detonations", Proc. Combust. Inst. 30, 2005, 1849-1858.
- [2] J. E. Shepherd, "detonation in gases", Proc. combust. Inst. 32, 2009. pp.83-98
- [3] J. M. Powers , "Review of multiscale modeling of detonation", J. Prop. Power 22 (6), 2006, pp.1217-1229
- [4] G. J. Sharpe, " Transverse Waves in Numerical Simulations of Cellular Detonations", Journal of Fluid Mechanics. 447, 2001, pp.31-51.
- [5] M. I. Radulescu, G. J. Sharpe, C. K. Law, J.H.S. Lee, "The Hydrodynamic Structure of Unstable Cellular Detonations", J. Fluid Mech. 580, 2007, pp.31-81
- [6] V. Deledicque, M. V. Papalexandris, "Computational study of three-dimensional gaseous detonation structures", Combust. Flame, 144, 2006, pp.821-837
- [7] J. Y. Choi, F. M, V. Yang, "Some Numerical Issues on Simulation of Detonation Cell Structures", Comb. Expl. Shock Waves 44(5), 2008, pp.560-578.
- [8] J. Y Choi, I. S. Jeung, Y. Yoon, "Computational fluid dynamics algorithms for unsteady shock-induced combustion", AIAA J. 38, 2000, pp.1179-1195.