

Two-phase 모델을 활용한 에틸렌-공기와 RDX 혼합물의 데토네이션 특성 연구

곽민철* · 김우현* · 여재익*†

Numerical investigation of detonation characteristics in hybrid ethylene-air and RDX mixture using two-phase model

Min-cheol Gwak* · Wuhyun Kim* · Jai-ick Yoh*†

ABSTRACT

In this study, we numerically investigate the detonation characteristics (detonation velocity and pressure) of a hybrid ethylene-air and RDX mixture using two-phase model. Compared with detonation of pure ethylene-air mixture, the detonation of the hybrid ethylene-air and RDX mixture has higher pressure and stronger impulse because the hybrid mixture has additional chemical heat release of RDX particles. To validate the numerical results using two-phase model, we compare the experimental data which show changes of detonation pressure and velocity according to concentration of RDX particles.

초 록

본 연구에서는 two-phase model(이상 모델)을 활용하여, 고폭약(RDX) 입자가 고르게 분포되어 있는 에틸렌-공기 혼합물의 데토네이션 속도, 압력을 포함하는 데토네이션 특성을 확인하였다. 순수 가연성 기체 혼합물 내에 고폭약 입자를 분포시킬 경우, 고폭약의 화학 반응에 의한 열방출에 의해 순수 가연성 기체 혼합물의 데토네이션 보다 높은 압력 및 임펄스 증가를 발생시킬 수 있다. 본 연구에서 제안된 수치해석 접근법으로 계산한 결과를 검증하기 위하여, 이전에 수행된 실험 결과(RDX 입자의 함량에 따른 데토네이션 압력/속도)와 비교하였다.

Key Words: Two-phase model (이상 모델), Detonation(데토네이션), Ethylene-air mixture(에틸렌-공기 혼합물), RDX

Nomenclature

ρ : Gas(ethylene-air mixture) density
 ρ_{RDX} : Solid(RDX particle) density
 v : Gas velocity

* 서울대학교 기계항공공학부

† 교신저자, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

u	: Solid velocity
E	: Specific total energy of gas
E_{RDX}	: Specific total energy of solid
$\dot{\rho}_{RDX}$: Mass generation (solid→gas)
\dot{f}_x	: Momentum exchange rate
\dot{Q}_c	: Chemical heat release of solid
\dot{Q}_H	: Heat transfer between gas and solid
\dot{Q}_p	: Energy transfer by consumption of solid
T_m	: Melting temperature of solid
L_{RDX}	: Latenet heat of solid
\dot{Q}_T	: Heat transfer rate of solid
k	: Conductivity of gas
Pr	: Prantl number of gas
μ	: Viscosity of gas
T_g	: Gas temperature
T_{RDX}	: Solid temperature
e_{RDX}	: Specific internal energy of solid
$c_{v,RDX}$: Specific heat ratio of solid

1. 서 론

일반적으로 데토네이션은 강한 압력을 동반하는 비정상 화염으로 추진 분야에서는 펄스데토네이션 엔진과 같이 고효율의 엔진에 적용되고 있다[1]. 고압과 고속의 특성을 가지는 데토네이션은 연료의 종류에 따라 다른 특성을 가지게 된다. 그에 따라 많은 실험적, 수치적, 이론적 선행 연구자들에 의해 수소나 에틸렌과 같은 기체 연료에서부터 케로신과 같은 액체 연료와 더불어 알루미늄이나 고폭약과 같은 미세 입자가 추가된 복합 연료에 이르기 까지 다양한 연료에 대한 데토네이션 특성 연구가 이루어지고 있다[2]. 단일 연료에 비하여 고체 입자가 추가된 복합 연료와 관련된 연구는 상대적으로 늦게 시작된 만큼 연구가 많이 이루어지지 않았다. 최근 알루미늄 입자를 비롯한 고폭약 입자를 활용한 다양한 실험 연구[3]가 진행되고 있으며, 수치 연구 분야에는 고체 입자를 라그랑지안 방식으로 해석하거나 오일러리안 방식을 적용한 이

상 모델 연구가 이루어지고 있다[4].

본 연구에서는 선행 연구에서 제안된 이상 모델을 활용하여, 고폭약(RDX) 입자가 포함되어 있는 에틸렌-공기 혼합물의 데토네이션 특성 연구의 기초적인 단계에 해당하는 부분을 확인하기 위하여, 3가지 경우 (공기 내 고폭약 입자 분포 시 데토네이션 전과, 순수 에틸렌-공기 혼합물의 데토네이션 전과, RDX 입자 분포된 에틸렌-공기 혼합물 내 데토네이션 전과)에 대한 1차원 수치해석 연구를 수행하였다. 각각은 L. Yang et al.[3]를 비롯한 여러 실험 결과와 비교하여 추후 연구에서 이루어질 다차원 문제에 대한 연구적 기반을 마련하였고 현재 고려되는 모델의 적합성과 한계를 제시하였다.

2. 수치적 모델

본 연구에서는 오일러리안 다상 보존 법칙을 기반으로 이상 모델 가정 하에 상호작용 물리량을 고려하여 지배 방정식을 구성하였으며, 이상 모델은 6가지 가정 (1) 기체매질 내 고체 입자의 부피 무시, 2) 고체입자 간의 상호 작용 무시, 3)기체상과 분포된 고체입자상 모두 각 공간 내에 연속체로 취급, 4) 고체입자들의 공간 내 매질의 압력과 음을 무시, 5) 고체입자는 비압축성으로 취급, 6) 입자 내 온도구배 무시) 하에 구성되었다. 이를 기반으로 아래의 Eqs. 1-7은 1차원 지배 방정식을 보여주고 있으며, Eqs. 1-4는 에틸렌-공기 혼합물의 질량, 운동량, 에너지, 화학종 보존식으로 구성되어 있고 Eqs. 5-7은 RDX 입자의 질량, 운동량, 에너지 보존식으로 구성되어 있다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) = \dot{\rho}_{RDX} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x^2 + P) = \dot{\rho}_{RDX} u_x - \dot{f}_x \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho E v_x + P v_x) = \rho \dot{\omega} Q - \dot{Q}_H + \dot{Q}_p + \dot{Q}_c - \dot{f}_x u_x \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho \lambda}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \lambda v_x) = \rho \dot{\omega} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho_{HMX}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_{RDX} u_x) = -\dot{\rho}_{RDX} \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_{HMX} u_x) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho_{RDX} u_x^2) = -\dot{\rho}_{RDX} u_x + \dot{j}_x \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_{RDX} E_{RDX}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_{RDX} E_{RDX} u_x) = \dot{Q}_H - \dot{Q}_P + \dot{j}_x u_x \quad (7)$$

위의 식에서 교환 물리량은 Khasainov et al.에 의해 제안된 KV 모델[4]과 Z. Wentao et al.이 제안한 모델[5]를 활용하였으며, 아래의 Eqs. 8-15와 같이 정리할 수 있다.

$$\dot{\rho}_{RDX} = \begin{cases} 0 & T_{RDX} < T_m \\ \frac{\dot{Q}_T}{L_{RDX}} & T_{RDX} > T_m \end{cases} \quad (8)$$

$$\dot{Q}_T = \frac{6\rho_{RDX}}{\rho_{RDX,0} \cdot d_{RDX}^2} \cdot Nu \cdot k \cdot (T - T_{RDX}) \quad (9)$$

$$(Nu = 2.0 + 0.459 Re^{0.55} Pr^{0.33}, Re = \frac{\rho d_{RDX} \sqrt{(v_x - u_x)^2}}{\mu})$$

$$\phi_{RDX} = \frac{\rho_{RDX}}{\rho_{RDX,ini}} = n_{RDX} \cdot \frac{\pi \cdot d_{RDX}^3}{6} \rightarrow d_{RDX} = \left(\frac{6\rho_{RDX}}{\pi \cdot \rho_{RDX,ini} \cdot n_{RDX}} \right)^{1/3} \quad (10)$$

$$\dot{j}_x = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_{RDX,0}} \frac{\rho_{RDX}}{d_{RDX}} C_D (v_x - u_x) \| v_x - u_x \| \quad (11)$$

$$C_D = \frac{24}{Re} + \frac{4.4}{\sqrt{Re}} + 0.42 \quad (12)$$

$$\dot{Q}_P = \dot{\rho}_{RDX} E_{RDX} \quad (13)$$

$$\dot{Q}_C = \dot{\rho}_{RDX} \Delta H ; (\Delta H = 4670 \text{ kJ/kg}) \quad (14)$$

$$T_{RDX} = \begin{cases} e_{RDX} / c_{v,RDX} & \text{if } e_{RDX} \leq c_{v,RDX} T_m \\ T_m & \text{if } c_{v,RDX} T_m < e_{RDX} \leq c_{v,RDX} T_m + L_{RDX} \\ (e_{RDX} - L_{RDX}) / c_{v,RDX} & \text{if } e_{RDX} > c_{v,RDX} T_m + L_{RDX} \end{cases} \quad (15)$$

수치 해석 시, 지배 방정식의 공간 차분과 시간 차분은 각각 3차 Convex ENO 기법과 3차 Runge-Kutta (RK) 기법을 사용하여 계산하였다.

3. 결과 및 논의

본 연구에서 다루고자 하는 RDX 입자 분포된 에틸렌-공기 혼합물 내 데토네이션 전파 현상을 수치 해석하기에 앞서, 에틸렌-공기 혼합물과 RDX 입자의 반응 모델을 확인하기 위하여 에틸렌-공기 혼합물의 데토네이션 전파 현상과 공기

내 RDX 입자 분포 시 데토네이션 전파 현상을 확인하였다.

3.1 에틸렌-공기 혼합물의 데토네이션

에틸렌-공기 혼합물 (F/O ratio, $\Phi=1.023$)의 데토네이션의 경우, 앞선 연구[6]에서 제안된 1-step 아레니우스 형태의 화학반응식을 활용하여 아래의 Fig. 1과 같은 데토네이션 전파 현상을 확인하였으며, 데토네이션 압력(4.5 MPa)과 전파 속도(1700 m/s)를 각각 도출하였다. 이를 실험값 (4.35 MPa과 1696 m/s)[3]과 비교하였을 경우 3% 이내의 오차범위에 있음을 확인하여, 이 모델을 본 연구에서 사용하는 에틸렌-공기 혼합물 부분에 사용하였다.

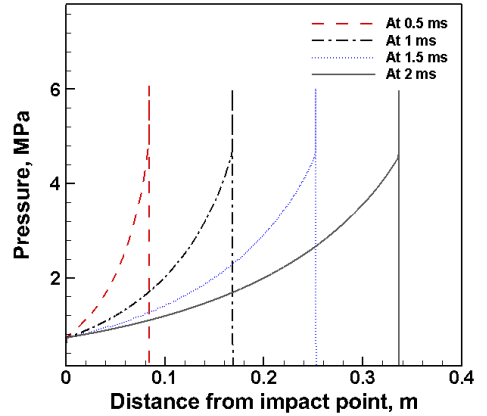


Fig. 2 Pressure profiles on detonation of ethylene-air mixture(F/O ratio, $\Phi=1.023$) at various times

3.2 공기 내 RDX 입자의 데토네이션

다음으로 RDX 입자의 데토네이션을 확인하기 위하여 이상 모델에서 공기(기체)와 RDX 입자(고체)를 고려하였다. 공기 내 RDX 입자(함유량, $c_{RDX} = 750 \text{ g/m}^3$)를 분포시킨 혼합물의 데토네이션을 수치 계산하였으며, 이를 통해 아래의 Fig. 2와 같은 데토네이션 전파를 확인하였으며, 이를 통한 데토네이션 압력과 속도는 각각 4.53 MPa과 1950 m/s이다. 이는 Z. Wentao et al.[5]의 데토네이션 압력(4.75 MPa)과 속도(1899 m/s²)와

5% 이내의 오차범위에 있음을 확인하였다. 그래서, 여기서 사용된 RDX 반응 모델을 이용하여 RDX 입자 분포된 에틸렌-공기 혼합물의 RDX 입자 부분에 사용하였다.

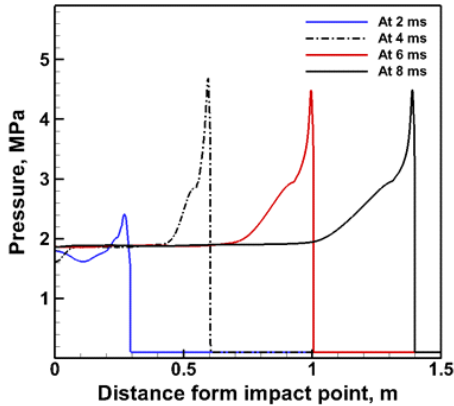


Fig. 3 Pressure profiles on detonation of RDX particle ($C_{RDX} = 750 \text{ g/m}^3$) at various times

3.3 에틸렌-공기와 RDX 혼합물의 데토네이션

3.1과 3.2에서의 에틸렌-공기 화학반응식과 RDX 입자의 반응 모델을 고려하고, 다양한 RDX 함량($C_{RDX} = 0, 94, 189, 284, 379, 474$)에 따른 에틸렌-공기($\Phi=1.023$)와 RDX 혼합물의 데토네이션 현상 변화를 수치 해석을 통하여 확인하였다. 우선, $C_{RDX} = 379 \text{ g/m}^3$ 의 경우 아래의 Fig. 4와 같은 데토네이션 전파를 확인할 수 있다.

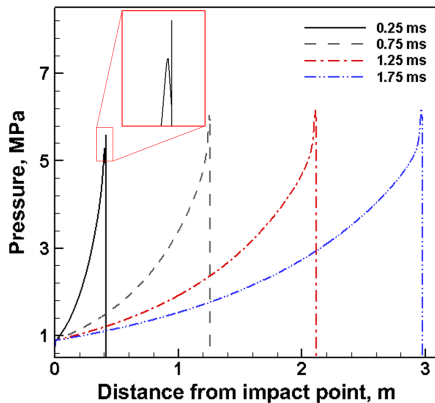


Fig. 4 Pressure profiles on detonation of hybrid

mixture ($C_{RDX} = 379 \text{ g/m}^3$) at various times

그림에서 데토네이션 전파 속도는 1745 m/s 이며 CJ 압력은 5.32 MPa 임을 확인할 수 있다. 그리고 천이 과정(0.25 ms 의 압력 선도)에서 볼 수 있듯이 선두에 에틸렌-공기 혼합물의 VN spike가 보이고 뒤이어 RDX의 연소에 의한 압력 피크를 확인할 수 있다. 이후 정상 상태(1.25 와 1.75 ms 의 압력 선도)로 발전할 경우, 데토네이션 압력 선도가 유지되게 된다. 다양한 RDX 함유량에 따른 수치해석을 수행하여 L. Yang et al.[3]와 비교할 경우, 아래의 Table 1과 같이 정리할 수 있으며, 이상 모델을 통해 수치 해석한 결과가 전반적으로 5% 이내의 오차범위에서 실험값을 모사함을 확인할 수 있다. 하지만, 저함량($C_{RDX}=94, 189, 284 \text{ g/m}^3$)의 경우, 고함량($C_{RDX}=379, 474 \text{ g/m}^3$)에서 비하여 실험값을 잘 모사하지 못함을 확인할 수 있는데, 이는 이상 모델의 저함량의 경우, RDX 입자가 데토네이션 전파 에너지를 소비하는 양에 비하여 방출하는 양이 적기 때문인데, 이에 대해서 모델을 보완해야 할 것으로 판단된다.

Table 1. Comparison between experiment and simulation in peak pressure (MPa) and detonation velocity (m/s)

C_{RDX} (g/m^3)	Experiment[3]		Simulation	
	P_{CJ} (MPa)	V_{Det} (m/s)	P_{CJ} (MPa)	V_{Det} (m/s)
0	4.35	1696	4.5	1700
94	4.938	1762	4.6	1678
189	5.059	1746	4.83	1685
284	5.135	1766	5.1	1703
379	5.326	1743	5.32	1745
474	5.479	1750	5.68	1750

4. 결론

본 연구에서는 이상 모델을 활용하여, 고품약(RDX) 입자가 고르게 분포되어 있는 에틸렌-공기 혼합물의 데토네이션 속도, 압력을 포함하는

데토네이션 특성을 확인하였으며, 이를 실험값과 비교 검증하였다. 이를 통하여 기체상과 고체상이 혼합된 연료의 데토네이션 특성을 확인할 수 있는 수치적 기반을 마련하였으며, 이상 모델의 취약점의 확인을 통해 추후 연구에서 수정되어야 할 사항에 대해 고찰해 보았다.

후 기

본 연구는 서울대학교 차세대 우주추진 연구센터와 연계된 미래창조과학부의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행한 선도연구센터지원사업(NRF-2013R1A5A1073861)과 2016년도 교육부의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업(2016R1A6A3A11932827)의 연구 결과입니다.

참 고 문 헌

1. Roy, G. D., Frolov, S. M., Borisov, A. A. and Netzer, D. W., "Pulse Detonation Engine: Challenges, Current Status, and Future Perspective," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 30, No. 6, 2004, pp. 545-672
2. A. V. Fedorova and Yu. V. Kratovaa, "Calculation of Detonation Wave Propagation in a Gas Suspension of Aluminum and Inert Particles" *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, Vol. 49, No. 3, pp. 335 - 47, 2013
3. Yang, L., Yao, J., Yang, Z, Xie, L., Peng, J. and Rao, G., "Experimental investigation into the detonation characteristics of hybrid RDX-ethylene-air mixtures," *Shock Waves*, Vol. 26, 2016, pp. 611-619
4. B. Veysiere and B. Khasainov, "A model for steady, plane, double-front detonations (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminum particles in suspension," *Combust. Flame*, 85 (1, 2), 241 - 53 1991.
5. Wentao, Z., Tao, H., and Hefei, D., "Simulation of suspended mixed RDX and Al dust in one dimension with the CESE method," 25th ICDERS, August 2-7, 2015, Leeds, UK
6. Gwak, M. and Yoh, J.J., "Effect of multi-bend geometry on deflagration to detonation transition of a hydrocarbon-air mixture in tubes," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 38, 2013, pp. 11446-11457