

데토네이션 셀 구조 모사를 위한 수치적 요구 조건

최정열* · 조덕래**

Numerical Requirements for the Simulation of Detonation Cell Structures

Jeong-Yeol Choi* · Deok-Rae Cho**

ABSTRACT

Present study examines the numerical issues of cell structure simulation for various regimes of detonation phenomena ranging from weakly unstable to highly unstable detonations. Inviscid fluid dynamics equations with variable- γ formulation and one-step Arrhenius reaction model are solved by a MUSCL-type TVD scheme and 4th order accurate Runge-Kutta time integration scheme. A series of numerical studies are carried out for the different regimes of the detonation phenomena to investigate the computational requirements for the simulation of the detonation wave cell structure by varying the reaction constants and grid resolutions. The computational results are investigated by comparing the solution of steady ZND structure to draw out the minimum grid resolutions and the size of the computational domain for the capturing cell structures of the different regimes of the detonation phenomena.

초 록

본 논문은 약한 불안정 데토네이션 영역부터 강한 불안정 데토네이션 영역까지 여러 영역에 걸친 데토네이션 파 셀 구조 모사에 대한 수치적 문제점들을 살펴보았다. 비열 비 값이 변하는 점성 유체 역학 방정식 및 1단계 Arrhenius 반응 모델 해석을 위하여 MUSCL-type TVD 기법을 이용한 공간 차분과 4차 정확도의 Runge-Kutta 시간 적분을 이용하였다. 일련의 수치해석 연구는 여러 반응 상수 및 격자 해상도에 따른 데토네이션 셀 구조를 해석하기 위하여 요구되는 계산 조건을 구하기 위하여 다양한 데토네이션 현상 영역에서 수행되었다. 다른 영역의 데토네이션 현상에서 셀 구조를 포착하기 위한 계산 영역의 크기와 최소 격자 해상도를 찾아내기 위하여 정상 1차원 ZND 해석 결과와 전산 해석 결과를 비교 검토 하였다.

Key Words: Detonation(데토네이션), Cell Structure(셀 구조), Grid Resolution(격자 해상도)

† 2006년 3월 6일 접수 ~ 2006년 6월 1일 심사완료

* 종신회원, 부산대학교 항공우주공학과

** 학생회원, 부산대학교 대학원 항공우주공학과
연락처, E-mail: aerochoi@pusan.ac.kr

Table 1. Survey of numerical studies on cellular structure of detonation waves

reference	reactants	kinetics	domain size	grid size	simulated cell size	perturbation
Taki and Fujiwara (1981)	H ₂ /O ₂ /Ar	2-step induction parameter	100 L _{ind} × 20 L _{ind} (L _{ind} ≈ 2.25 mm)	L _{ind} /4	~10 L _{ind}	hot spot in unburned mixture
Oran et al. (1981)	H ₂ /Air	1-step induction-parameter	8.25 × 0.45 cm ²	0.15 mm	0.9 cm	inclined initial shock
Oran et al. (1988)	H ₂ /O ₂ /Ar	48-step 8-species	H=6 cm	Δx=0.15 mm Δy=0.235 mm (benchmark)	3 cm	rectangular unreacted pocket
Gamezo et al. (1999)	H ₂ /O ₂	1-step Arrhenius	12 × 3 mm ²	0.01 mm	~0.08 cm	none
Singh et al. (1999)	—	1-step Arrhenius	H=10 L _{1/2} (L _{1/2} ≈ 5.4 μm)	L _{1/2} /24 ~ L _{1/2} /2	~10 L _{1/2}	sinusoidal perturbation
Nikolic et al. (1999)	—	1-step Arrhenius	H=0.5~100 L _{1/2}	L _{1/2} /40 ~ L _{1/2} /20	~10 L _{1/2}	sinusoidal density perturbation at shock
Gavrikov et al. (2000)	—	1-step Arrhenius	N/A	>100/per cell with	N/A	none
Sharpe (2001)	—	1-step Arrhenius	~400 L _{1/2} × 10 L _{1/2}	L _{1/2} /64 ~ L _{1/2} /4	~10 L _{1/2}	density perturbation in front of shock
Hu et al. (2004)	H ₂ /O ₂ /Ar	19-step 9-species	N/A	0.025~0.1 mm	8 mm	random perturbed specific energy

안정하여 파면이 일차원적으로 유지되지 않는 다차원 구조를 가진다. 다차원 파면 구조는 충격파의 상호 작용에 의한 삼중점으로 대표되는데, 관의 내벽에 얇은 그을음 막(smoked foil)을 씌운 데토네이션 전파 실험에서 삼중점의 움직임은 데토네이션 셀이라는 특징적인 형태로 궤적을 남긴다. 따라서 데토네이션 파의 불안정성은 셀의 크기와 분포 등에 의하여 특징 지워진다[1].

데토네이션 셀 구조에 대한 기존의 수치적 연구 결과를 개략적으로 Table 1과 같이 정리할 수 있다[2-10]. Taki, Fujiwara 그리고 Oran[2, 3] 등의 초기 연구는 간단한 화학종 및 성긴 격자 모델을 사용한 데토네이션 파의 충격파 상호 작용에 대한 것이었다. 하지만 최근 연구자들은 컴퓨터 능력의 진보에 의하여 더 좋은 격자 해상도를 가진 모델에 대하여 연구를 수행하고 있다. Oran 등은 낮은 압력 하에서 수소-산소-아르곤(H₂-O₂-Ar) 혼합 기체에 상세 화학 반응을 고려한 데토네이션 연구에서 비 반응 영역과 삼중점의 충돌, 그리고 횡단파의 전개를 포함한 데토네이션 셀 구조에 대한 더 자세한 정보를 획득하였다[4]. Singh[6] 등은 Euler 및 Navier-Stokes 방정식에 따른 해

를 비교하여 점성 효과를 고려하였다. 이들은 수치적 소산 항을 무시할 경우 높은 격자 해상도에서는 물리적 소산이 중요하다는 것과 Euler 방정식 해석에서 셀 구조는 격자 해상도에 의존한다는 결론을 내렸다. Nikolic[7] 등은 데토네이션 셀 크기에 대한 채널 폭의 효과를 연구하기 위하여 더 거대한 해석 영역을 이용하였다. 격자 해상도의 효과는 Sharpe[9]가 Arrhenius 반응 모델을 이용하여 깊이 연구하였다. 그는 셀 구조를 자세히 분석하기 위하여 기본적인 정상 데토네이션 파의 반반응 길이 (Half reaction length, L_{1/2})에 있어서 최소한 20개 정도의 격자 점 사용을 제안하였다. 최근 Hu[10] 등은 매우 높은 격자 해상도를 가진 상세 화학 반응모델에 대하여 데토네이션 파의 셀 구조를 연구하였다.

본 논문에서는 이전에 논의 되었던 주제인 격자 해상도의 효과와 계산 영역의 크기에 대하여 재고찰 하고자 한다. 반응 진행 변수(reaction progress variable)를 도입한 1단계 비가역 반응 모델에 대한 2차원 완전 보존 방정식에 대한 전산유체해석을 수행하였다. 수치해석에 앞서 정상 1차원 ZND (Zeldovich-Neumann-Döring) 구조

에 대하여 간단한 해석적 해를 구하였으며 결과 값은 2차원 수치 해석에서의 초기 조건으로 이용하였다. 일련의 수치 해법은 각각의 격자 해상도 및 반응 상수에 따라 약한 불안정 영역에서부터 강한 불안정 영역까지 서로 다른 데토네이션 현상 영역에서 해석을 수행하였다. 계산 결과는 최소 격자해상도와 격자영역의 크기를 결정하기 위하여 정상 ZND 해석 결과와 비교, 검토하였다. 본 연구는 펄스 데토네이션 엔진이나 연소파 점화 시스템과 같은 추진 기관의 연구를 위해 활용될 수 있을 것이다[11].

2. 연구 내용

2.1 지배방정식

반응 과정 변수를 도입한 압축성 비 점성 유동에 대한 2차원 Euler 보존 방정식은 벡터 형태로 다음과 같이 표현된다.

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

여기서 압력은 다음과 같이 정의된다.

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

생성물의 질량 분율을 나타내는 반응 진행 변수 Z 는 0에서 1 사이의 값을 가진다. q 는 연소에 의한 발열량이다. 미연 혼합기와 연소 생성물의 열역학적 물성은 서로 다르므로 반응 진행 변수에 대한 비열비 값은 미연 상태와 기연 상태에서부터 보간 법에 의하여 구하였다. 비열비는 보존 법칙과 이상기체 가정을 만족하기 위하여 Eq. 3과 같이 표현된다.

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

데토네이션파의 실제 반응 과정은 여러 화학 성분의 열역학적 데이터와 다단계의 반응 기구를

필요로 하지만, 해석이 복잡하고 많은 계산 시간을 요구하므로 열 유체역학적 특징을 살펴보기 위해서는 간단한 1단계 비가역 Arrhenius 반응 모델을 이용하는 것이 편리하다. 이 경우 Eq. 1의 반응 물질의 질량 생성율은 활성화 에너지, E , 상수 k 를 이용하여 다음과 같이 정의 된다.

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

2.2 정상 1차원 ZND 구조 해석

데토네이션 파에 대한 정상 1차원 ZND 구조 해석은 데토네이션 연구에 있어서 가장 기초가 되는 작업이다. 정상 1차원 유동상태 가정에 의하여 Eq. 1의 지배 방정식은 위치 x , 전방조건 ∞ 에 대하여 다음과 같이 간소화 된다.

$$\rho_x u_x = \rho_\infty u_\infty \quad (5)$$

$$\rho_x u_x^2 + p_x = \rho_\infty u_\infty^2 + p_\infty \quad (6)$$

$$h_x + \frac{1}{2}u_x^2 - Z_x q = h_\infty + \frac{1}{2}u_\infty^2 \quad (7)$$

$$\frac{\partial Z_x}{\partial x} = \frac{1}{u_x} (1 - Z_x) k \exp(-E\rho_x/p_x) \quad (8)$$

질량, 운동량 및 에너지 보존 방정식은 비 선형대수 방정식인 Rankine-Hugoniot 관계식을 따르나, 반응율은 Eq. 8과 같이 상미분 방정식으로 표현되며, 초기치 미분 방정식 해법에 의하여 해석적 해를 구할 수 있다. 본 연구에서는 4차 정확도의 Runge-Kutta(RK4) 기법을 이용하였다.

이상 기체가 아니거나, 물성치가 비선형적으로 변할 경우, Rankine-Hugoniot 관계식은 Newton 방법과 같은 비선형 대수 방정식 해석 방법으로 풀 수 있다. 이상 기체로 가정하고 비열비가 Eq. 3과 같이 변하는 경우, Rankine-Hugoniot 관계식은 마하수 M 의 관계식 Eq. 9로 변환된다. 후류 마하수는 마하수에 관한 2차 방정식으로부터 구할 수 있다. 비열비가 일정한 경우에 대한 유사한 관계식은 참고문헌 [12]등에서 찾을 수 있다.

$$G \frac{2(1 + \tilde{q}) + (\gamma_\infty - 1)M_\infty^2}{2 + (\gamma_x - 1)M_x^2} = \frac{(1 + \gamma_\infty M_\infty^2)^2}{(1 + \gamma_x M_x^2)^2} \frac{M_x^2}{M_\infty^2} \quad (9)$$

여기서,

$$G = \left(\frac{\gamma_\infty}{\gamma_x} \right)^2 \frac{\gamma_x - 1}{\gamma_\infty - 1} \quad (10)$$

$$\tilde{q} = \frac{q}{c_p T_\infty} = q \cdot \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty} \cdot \frac{\rho_\infty}{p_\infty} \quad (11)$$

후류 유동 특성은 후류 마하수와 보존식에 의하여 다음과 같이 유도된다.

$$\frac{p_x}{p_\infty} = \frac{1 + \gamma_\infty M_\infty^2}{1 + \gamma_2 M_2^2} \quad (12)$$

$$\frac{\rho_x}{\rho_\infty} = \frac{p_x \gamma_x (\gamma_\infty - 1)}{p_\infty \gamma_\infty (\gamma_x - 1)} \frac{2 + (\gamma_x - 1) M_x^2}{2(1 + \tilde{q}) + (\gamma_\infty - 1) M_\infty^2} \quad (13)$$

$$\frac{T_x}{T_\infty} = \frac{p_x}{p_\infty} \left/ \left(\frac{\rho_x}{\rho_\infty} \cdot \frac{R_x}{R_\infty} \right) \right. \quad (14)$$

Chapmann-Jouguet (C-J) 마하수는 완전 연소 기체 조건과, $Z=1$, 후류 마하수가 1.0 인 조건에 의하여 Rankine-Hugoniot 관계식으로부터 구해진다. C-J 마하수를 입구 유동 속도로 가정하면 ZND 데토네이션 구조는 연소가 없는 von Neumann(VN) peak 상태에서 $Z_{0,0} \equiv 0$ 을 초기조건으로 위의 방정식으로부터 계산된다. 새로운 상태에서 반응 과정 값은 VN 상태에서부터 RK4 기법에 의하여 Eq. 8을 공간 적분하여 계산된다. 다른 유동 특성 값들은 Eq. 9-14에 의하여 새로운 상태에서의 값들이 결정되며, 전진 적분 방법에 의하여 평형 상태인 $Z=1$ 인 값에 도달할 때까지 반복 계산된다. Fig. 1은 간단한 ZND 구조 해석 결과를 보여주는 그림이다.

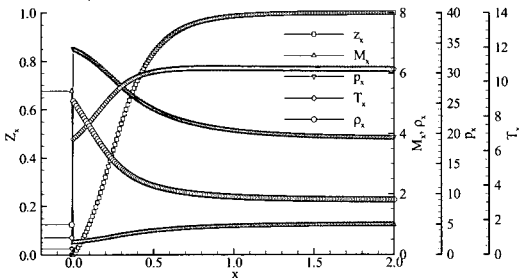


Fig. 1 An example of ZND structure calculation for the case of $\theta = 6.9$ and $k=1,000$ with $\Delta x = 0.01$

23 전산유체 해석 알고리즘

데토네이션 파 셀 구조의 전산유체 해석을 위하여 Eq. 1의 지배방정식을 유한 체적 셀 정점 기법에 의하여 이산화 하였다. 셀 경계에서의 수치 플럭스는 Roe의 근사 Riemann 해법과 3차 정확도의 MUSCL-type TVD 기법을 이용한 공간 차분과 RK4 시간 적분기법을 이용하였다[13, 14].

24 해석 조건

데토네이션 셀 구조에 대한 기존의 연구들은 반응물 조성이나 상태에 따라 넓은 범위의 불안정성(또는 불규칙성)을 보여주고 있다. 따라서 셀 구조 해석을 위한 수치적 요구 조건도 불안정성의 정도에 따라 나누어 살펴보는 것이 타당하다. 본 연구에서는 Austin 등이[15] 살펴본 여러 조건 가운데 대표적인 세 경우를 선정하였으며, 이 경우의 무차원 활성화 에너지 θ 와 미연 및 기연가스의 비열비를 Table 2에 정리하였다. θ 는 VN 상태의 온도로 무차원화된 활성화 에너지로써, 큰 값은 불안정성이 강한 데토네이션 현상을 보이는 것으로 알려져 있다.

$$\theta = \frac{E}{RT_{VN}} \quad (15)$$

Table 2. Summary of computational cases

Weakly unstable detonation			
$\theta = 5.2$	$2H_2+O_2+12Ar$	$\gamma_U = 1.602$	$\gamma_B = 1.288$
Moderately unstable detonation			
$\theta = 6.9$	$2H_2+O_2+5.6N_2$	$\gamma_U = 1.405$	$\gamma_B = 1.185$
Highly unstable detonation			
$\theta = 12.7$	$C_3H_8+5O_2+9N_2$	$\gamma_U = 1.336$	$\gamma_B = 1.161$

Figure 2는 세 연소 영역에서의 ZND 구조의 해석 결과로 얻은 반응 과정의 개략도이다. 비교를 위하여 반응 특성 길이를 유도 영역(L_{ind}), 발열 영역(L_{HR}) 그리고 반반응 길이($L_{1/2}$)로 구분하여 그림과 같이 정의하였다.

화학반응 관점에서 세 경우는 서로 상이한 반응 영역 구조를 보인다. 약한 불안정 데토네이션에서는 낮은 활동 에너지와 VN 상태에서의 높

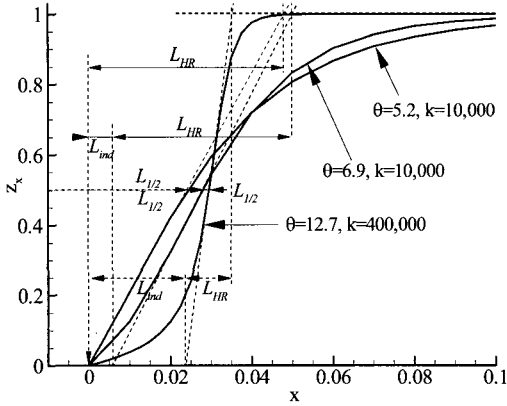


Fig. 2 Reaction progress within ZND structure

은 온도에 의하여 유도 영역이 거의 존재하지 않는다. 중간 불안정 데토네이션에서는 약간의 유도 영역과 수 배 길이의 발열 영역을 가진다. 하지만 높은 불안정 데토네이션에서는 높은 활동 에너지에 의하여 유도 영역이 발열 영역의 몇 배의 길이를 가진다.

2.5 계산 영역의 크기

격자 해상도는 반응 유동의 수치 연구에 있어서 중요한 주제이다. 하지만 모든 조건에서 최적의 격자 조건을 찾는다는 것은 매우 힘든 일이다. 따라서 최적의 격자 해상도 연구 대신에 이번 논문에서는 고정된 격자 체계를 이용한 연구를 진행하였다. 무차원 반응 유동에서 반응 과정 변수의 보존식은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z u}{\partial x} = \rho \left(\tilde{k} \cdot \frac{L_{ref}}{u_{ref}} \right) \exp(-E\rho/p) \quad (16)$$

여기서 \tilde{k} 는 유차원 값이며 다른 변수들은 무차원 값들이다. 무차원 반응 상수 k 와 유차원 반응 상수는 다음의 관계를 가진다.

$$k = \tilde{k} \cdot \frac{L_{ref}}{u_{ref}} \quad (17)$$

Figure 3은 서로 다른 반응 상수에 대한 ZND 구조 해석 결과로써, 고정된 격자계에서 큰 무차원 반응 상수는 발열 영역에서 낮은 격자 해상도를 가지며, 낮은 반응 상수에서는 높은 해상도를

가짐을 알 수 있다. 반응 상수가 500보다 작은 경우에 100개의 격자점으로는 ZND 구조를 포착할 수 없었다. Fig. 4는 각 경우에 비해 좌표를 적용한 결과로써, 각 경우가 서로 다른 해상도를 지니지만 모두 일치하는 해를 보임을 알 수 있다. 낮은 격자 해상도의 극단적인 경우에는 반응 영역에 단지 3개의 격자점만 포함되었다. 부수적으로, 현재의 공간 전진 상미분방정식에 대한 RK4 기법은 수치적 경직성으로 인하여 해를 얻지 못하는 경우를 제외하고는 격자 해상도에 대한 고려 없이도 아주 신뢰할만한 해석 결과를 보임을 알 수 있다.

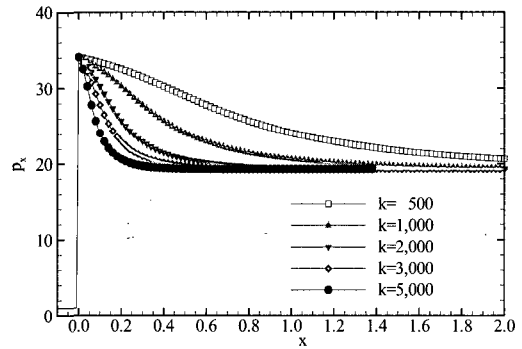


Fig. 3 Pressure profiles of ZND structures depending on reaction constant k , for $\theta = 6.9$ with $\Delta x = 0.01$

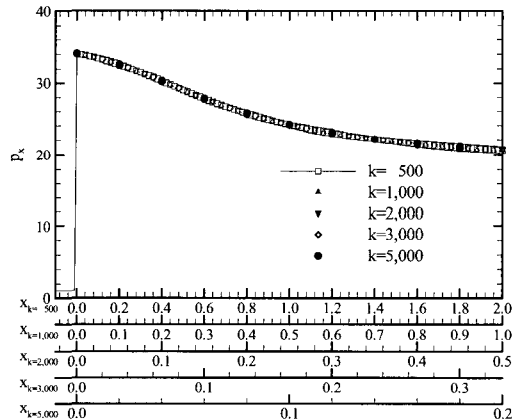


Fig. 4 Pressure profiles of ZND structures depending on reaction constant k , for $\theta = 6.9$ with $\Delta x = 0.01$, along the scaled coordinate

Table 3. Summary of computational grids

Grid system	Minimum spacing	Domain size
301 × 101	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.01$	5.18×1.0
30,000 cells, uniform 201 × 101 + 2% stretching 100 × 101		
501 × 201	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.005$	5.13×1.0
100,000 cells, uniform 401 × 201 + 3% stretching 100 × 201		
901 × 401	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.0025$	5.22×1.0
360,000 cells, uniform 801 × 401 + 3% stretching 100 × 401		

2.6 계산영역, 초기조건, 경계조건 및 그을음 막 모사

직사각형 형상의 채널을 지나는 2차원 데토네이션 파 전파에 관한 수치해석에서 계산 영역은 삼중점의 비정상 운동을 포착하기 위하여 가로세로 비가 일정한 격자 영역에 이어, 평형 C-J 상태에 도달한 후류 영역의 포착에 계산량을 줄이기 위하여 격자 비를 늘린 형상을 선택하였다. 계산 영역의 폭은 단위 길이이며 균일한 격자 영역의 길이는 폭의 2배이다. 연구에 사용된 서로 다른 해상도의 격자계를 Table 3에 정리하였다.

초기 조건으로는 1차원 ZND 해석의 결과를, 불안정 유동의 시작을 위하여 모든 수평 방향 격자 선을 따라 수직방향으로 기울어지게 적용하였다. Fig. 5는 301 × 101 계산격자 계에서 반응과정 변수의 초기 분포를 음영으로 표현한 것이며, Fig. 6은 이해를 돕기 위하여 초기조건을 3차원으로 표현한 것이다. 입구 경계조건은 C-J 데토네이션 속도로 고정하였다. 출구에서의 속도는 전방 유동 속도가 초음속일 경우에는 보간법으로, 아음속일 경우에는 음속으로 설정하였다. 양 벽면은 단열 및 미끄럼 조건으로 설정하였다.

그을음 막 기록은 물리적으로는 삼중점 주위의 전단력에 의하여 생성되는 것이지만, 수치적 간편화를 위하여 길이 방향의 모든 격자 선에서 순간 최고 압력과 그 위치를 기록하여 얻어진다. 이때의 좌표는 입구 유동의 속도를 이용하여 이동 좌표로 변환한다.

$$x = x_{shock} - u_{\infty} t \quad (18)$$

3. 해석결과 및 고찰

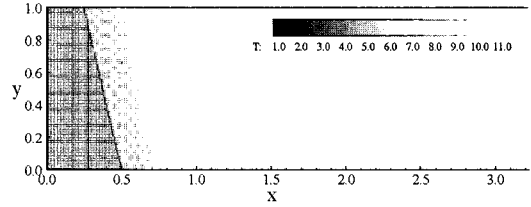


Fig. 5 301 × 101 computational grid overlaid by initial distribution of reaction progress variable

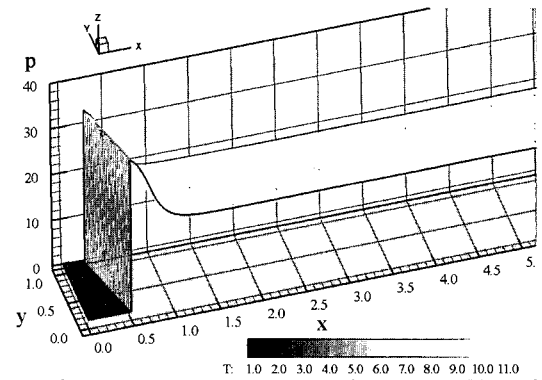
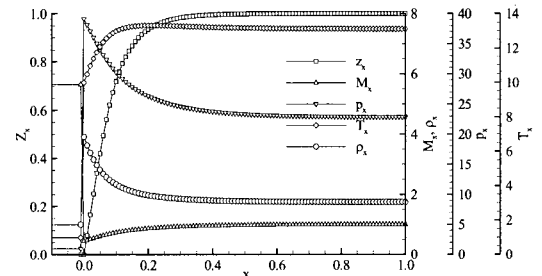


Fig. 6 Three-dimensional image of initial condition of fluid dynamics calculation. Vertical axis used for pressure level

3.1 약한 불안정 데토네이션 현상

Figure 7은 약한 불안정 데토네이션의 ZND 구조이다. VN 상태 이후 화학적 유도 영역 없이 급격히 연소가 진행됨을 알 수 있다. 반응 변수는 충격파 뒤에서 선형적으로 변화하며 이후 완만하게 평형 C-J 상태에 이르게 된다.

Fig. 7 Pressure profiles of ZND structures depending on reaction constant k , for $\theta = 5.2$ with $\Delta x = 0.01$, along the scaled coordinate

3.1.1 저해상도 격자를 이용한 해석 결과

반응 상수의 민감도를 관찰하기 위하여 반응상수가 $k=100, 200, 500, 1,000, 5,000, 10,000$ 그리고 $20,000$ 일 경우에 대하여 해석을 수행하였다. Fig. 8은 계산의 마지막 부분에서 반응율의 변화에 충격파의 형상을 등고선으로 겹친 그림이다.

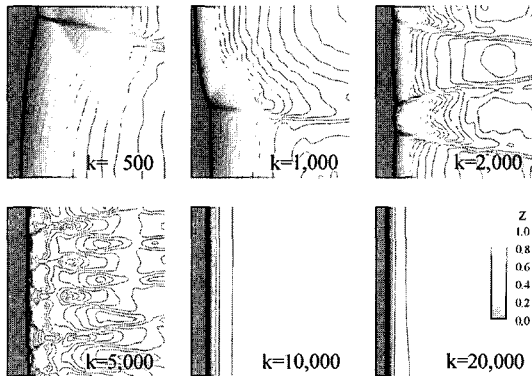


Fig. 8 Front structures of weakly unstable detonation wave from 301×101 grid

반응 상수, k 가 500과 1,000인 경우에는 매우 넓은 영역에 걸쳐서 반응이 일어나며, 삼중점 주위의 자세한 구조를 확인할 수 있다. 그러나 k 가 증가함에 따라 반응 영역의 폭이 두드러지게 감소함을 볼 수 있다. $k=2,000$ 과 5,000인 경우 삼중점의 수가 증가하며, 약한 불안정 데토네이션에서 전형적으로 보이는 균일한 삼중점 분포를 볼 수 있다. 그러나 k 가 10,000과 20,000일 경우에는 셀 구조를 포착할 수 없었다. 이것은 반응영역을 포착하기 위하여 격자 해상도가 충분하지 않기 때문이며, 정상 1차원 데토네이션 파의 ZND 해석 결과와 동일한 결과이다.

Figure 9는 각 경우에 대한 그늘음 막 기록이다. $k=100$ 인 경우 데토네이션 파는 계산 영역 내에서 연소가 충분히 진행되지 않고 종료되었다. 이 결과에서 반응 상수의 증가에 따라 셀의 개수가 증가함을 알 수 있으며, $k=10,000$ 이상에서는 셀 구조를 포착할 수 없음을 알 수 있다.

3.1.2 계산 시간 간격에 따른 영향

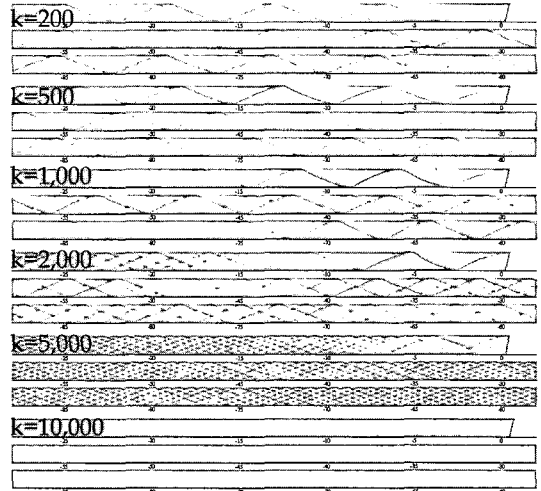


Fig. 9 Numerical smoked-foil records for weakly unstable detonation wave from 301×101 grid

수치 해석 관점에서 계산 시간 간격은 해의 안정성뿐만 아니라 수치적 소산 효과도 가지기 때문에 격자 해상도만큼이나 중요한 부분이다. 시간 간격의 영향을 알아보기 위하여 단위 폭에 15개의 셀을 가지는 $k=2,000$ 에서 CFL 수가 0.1에서부터 0.5까지의 서로 다른 경우를 살펴보았다. 비록 이론적으로 RK4 기법에서 더 큰 CFL 수의 사용이 가능하지만 화학적 경직성에 의한 제약으로 인하여 최대 0.5를 이용할 수 있었다. 효율을 고려하여 최소값은 0.1로 제한하였다.

Figure 10은 일정한 시간 동안에 계산 영역의 중심에서 구한 VN 최고 압력의 변화 곡선이다. 압력 변화 모양은 CFL 값이 커짐에 따라 다소 이동하지만, 대체로 유사한 결과를 보이며 CFL 값이 0.1과 0.2일 경우는 매우 근접한 결과를 보인다. 따라서 엄밀하게 완전히 일치한다고 할 수는 없지만, 서로 다른 CFL 값에서 최고압력은 거의 같은 값과, 거의 동일한 진동수를 유지하며, Fig. 11에서 보는바와 같이 최고 압력의 위치 또한 거의 동일하게 나타남을 알 수 있다. Fig. 12는 CFL 값에 따른 수치적 그늘음 막 기록이다. 모든 경우에 있어서 셀 크기는 거의 동일하여, 시간 정확도에 대하여 상대적으로 둔감한 것을 알 수 있다.

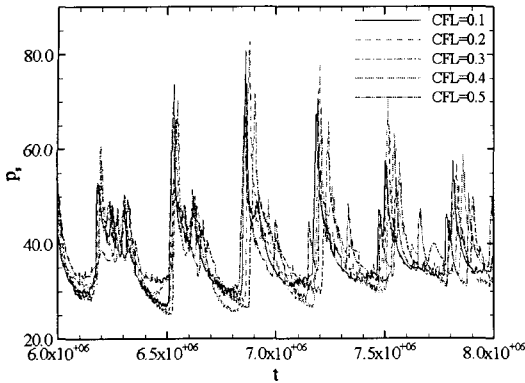


Fig. 10 von Neumann peak pressure history along the centerline of computational domain

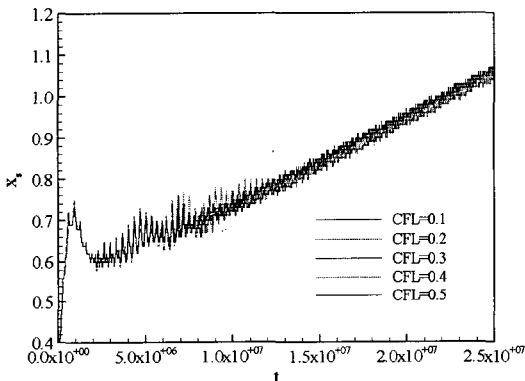


Fig. 11 History of shock wave location along the centerline of computational domain

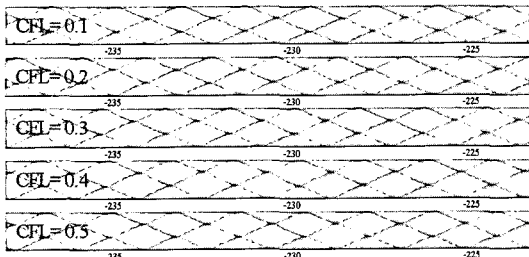


Fig. 12 Section of numerical smoked-foil records for the case of $k=2,000$ with different CFL numbers

3.1.3 중해상도 격자를 이용한 해석 결과

Figure 13은 격자 501×201 격자에서의 약한 불안정 데토네이션 파 해석 결과를 그린 것이다. 격자 해상도의 증가로 인하여 상세 구조를 더 자세히 볼 수 있다. 이 격자에서 $k=10,000$ 인 경우는 $5,000$ 인 경우에 비하여 두 배의 삼중점이 관찰된

다. 그러나 $k=20,000$ 인 경우에는 여전히 정상 상태의 ZND 구조를 보인다. 그을음 막 기록은 Fig. 14에 도시하였다. 향상된 격자 해상도 덕분에 $k=10,000$ 인 경우에도 셀 구조를 확인 할 수 있는 것과 해의 해상도가 더 좋아진 것 외에는 앞서의 성긴 격자 모델과 같은 결과를 보인다.

3.1.4 고해상도 격자를 이용한 해석 결과

Figure 15는 901×401 격자를 이용한 결과이다. $k=20,000$ 인 경우에도 많은 삼중점 구조를 볼 수 있으며, 앞의 격자들 보다 더욱 상세한 결과를 볼 수 있다. 그을음 막 기록은 Fig. 16에 도시하였으며, 큰 반응상수의 경우에도 상세한 셀 구조를 보여주는 것을 제외하고는 앞서의 결과들과 같은 경향을 보인다. 반응상수 $k=10,000$ 및 $20,000$ 인 경우에는 미세한 셀 구조를 확인하기 위하여 아래에 확대하여 도시하였다.

3.2 중간 불안정 데토네이션 현상

Figure 17은 중간정도의 불안정성을 가지는 데토네이션 파의 ZND 구조이다. 전반적으로 약한 불안정의 경우와 유사하지만, VN 상태 이후, 좁은 유도 영역이 존재함을 알 수 있다.

3.2.1 저해상도 격자를 이용한 해석 결과

반응상수에 따른 민감도를 관찰하기 위하여 약한 불안정 데토네이션 해석에서의와 같은 방법으로 반응 상수 $k=500, 1,000, 5,000, 10,000$ 그리고 $20,000$ 의 값을 가질 경우에 대하여 해석을 수행하였다. Fig. 18은 약한 불안정 데토네이션에서의와 같이 계산의 마지막 단계에서의 결과를 반응 진행율과 충격파의 형상을 겹쳐서 나타낸 것이다. $k=1,000$ 에서부터 $5,000$ 까지의 경우에만 삼중점의 구조가 보이고 있으며 반응 상수가 증가함에 따라 반응 영역의 폭이 작아지며 두께가 얇아지는 형상을 나타낸다. 그리고 $k=10,000$ 인 경우에는 삼중점의 구조가 여러 위치에서 보이지만 약한 불안정 데토네이션의 경우와 비교하여 불규칙한 형태를 보여준다. 반응상수 $k=20,000$ 인 경우 파면 구조는 나타나지 않으며 반응 영역을 포착하기에 충분하지 못한 격자 해상도 때문에 정상상태의 ZND 구조로 수렴하였다.

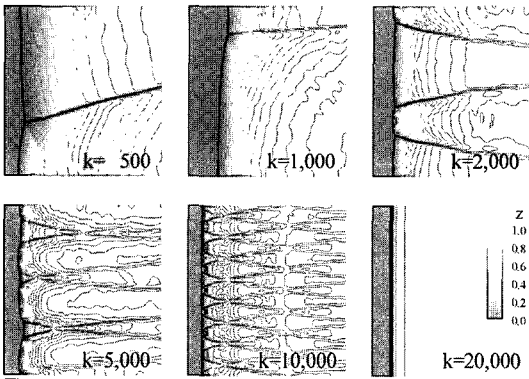


Fig. 13 Front structures of weakly unstable detonation wave from 501 x 201 grid

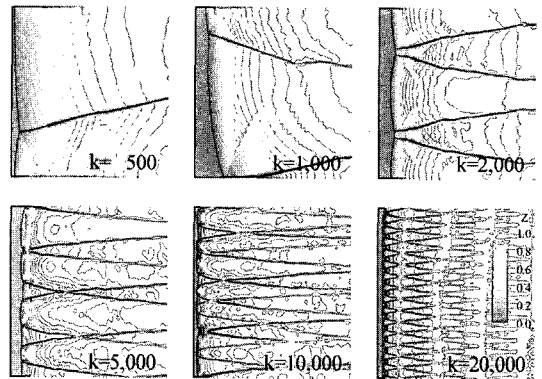


Fig. 15 Front structure of weakly unstable detonation wave from 901 x 401 grid

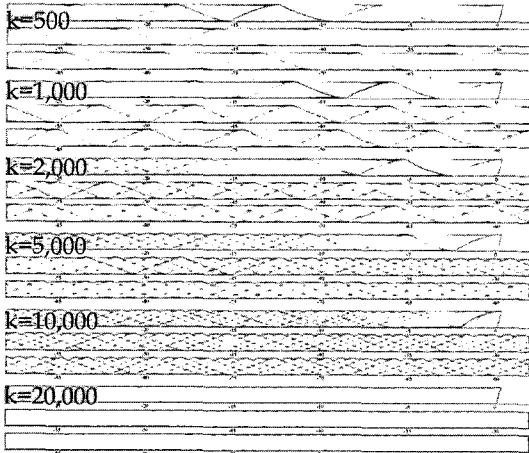


Fig. 14 Numerical smoked-foil records for weakly unstable detonation wave from 501 x 201 grid

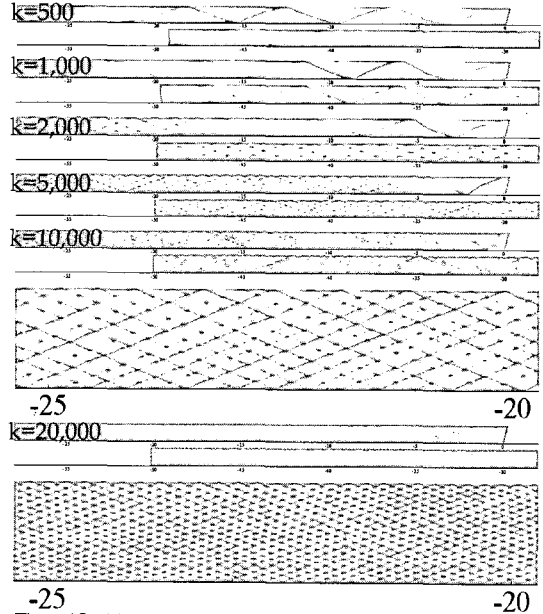


Fig. 16 Numerical smoked-foil records for weakly unstable detonation wave from 901 x 401 grid

Figure 19는 각 경우에서의 그을음 막 기록이다. $k=500$ 인 경우 데토네이션 파는 계산 영역 내에서 충분히 연소가 진행되지 않고 종료되었다. $k=20,000$ 인 경우의 해석 결과를 제외하면 반응상수의 증가에 따른 셀 수의 증가를 보여준다. 활성 에너지의 증가로 인하여 셀 구조는 약한 불안정 데토네이션의 경우보다 불규칙한 형상을 보이며, 셀의 최대/최소 길이 비는 2.0 이하로 유지되었다.

3.2.2 고해상도 격자를 이용한 해석 결과

Figure 20은 901 x 401 격자를 이용한 중간 불

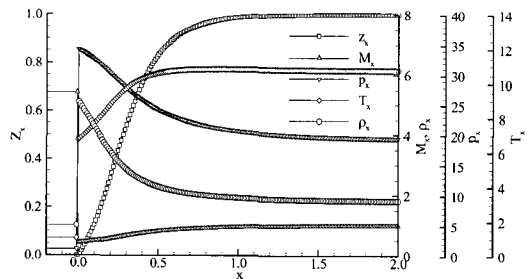


Fig. 17 ZND structure of moderately unstable detonation

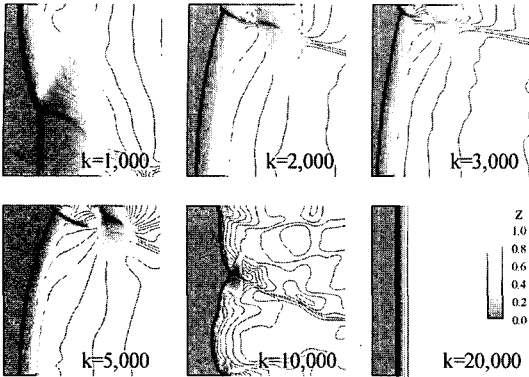


Fig. 18 Front structures of moderately unstable detonation wave from 301 x 101 grid

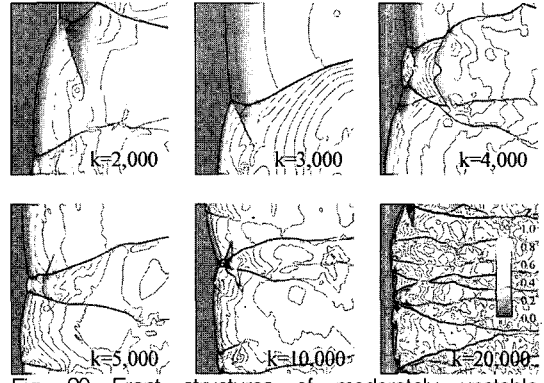


Fig. 20 Front structures of moderately unstable detonation wave from 901 x 401 grid

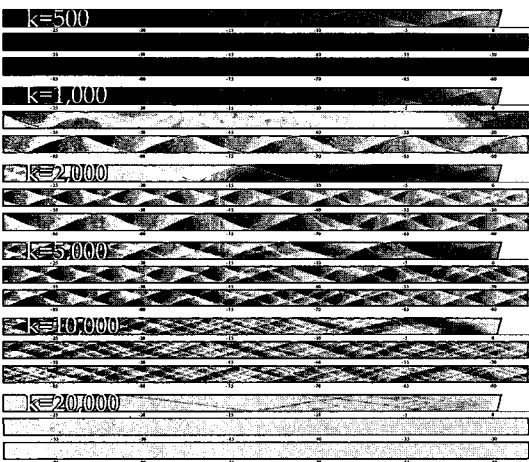


Fig. 19 Numerical smoked-foil records for moderately unstable detonation wave from 301 x 101 grid

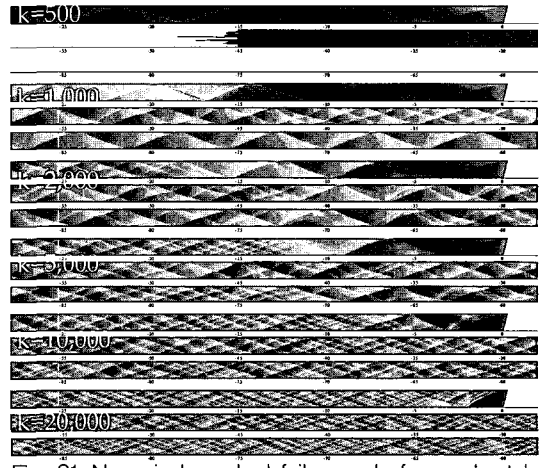


Fig. 21 Numerical smoked-foil records for moderately unstable detonation wave from 901 x 401 grid

안정 데토네이션 파의 해석 결과이다. 불규칙한 삼중점 구조 후방의 연소면 뒤쪽에서 국소적인 미연 영역을 포함한 상세한 구조를 파악 할 수 있다. 좋은 격자 해상도로 인하여 $k=20,000$ 인 경우에도 여러 개의 불규칙한 삼중점 관찰된다. 이 경우의 Fig. 21에 도시한 그늘음 막 기록은 이전과 대체로 유사하지만, 향상된 해상도로 인하여 큰 반응상수에서도 셀 구조를 확인할 수 있으며, 최소 및 최대 셀의 길이 비는 이 경우에도 2.0 이하로 유지되었다.

3.3 강한 불안정 데토네이션 현상

Figure 22는 강한 불안정 데토네이션의 ZND

구조로써, VN 상태 뒤쪽에서 비교적 완만한 압력구배가 존재하며, 반응 영역에 비하여 유도 영역이 몇 배 긴 특징을 보인다. 이 경우 매우 강한 불안정성 때문에 낮은 해상도의 격자에서는 충분한 결과를 얻을 수 없어 901 x 401 격자를 이용한 해석 결과만을 정리하였다.

Figure 23은 계산 마지막 순간에서 강한 불안정 데토네이션 파의 구조를 보여준다. 이 경우 마지막 단계에서 삼중점의 자취를 명확히 이해할 수 있는 그늘음 막 기록을 비교하여 도시하였다. 이 그림에서 충격파와 연소면은 매우 강한 불규칙성을 보이고 있으며, 연소면의 후방에는 다수의 미연 영역이 존재하고 있고, 셀의 크기는 매우 크게 변화하고 있음을 알 수 있다.

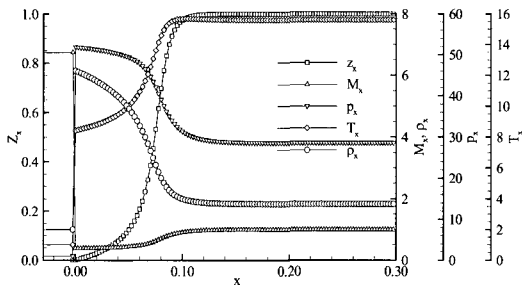


Fig. 22 ZND structure of Highly unstable detonation

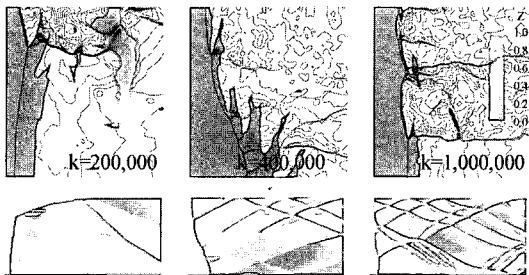


Fig. 23 Front structures of highly unstable detonation wave from 901x401 grid with the final stage smoked-foil records for each case

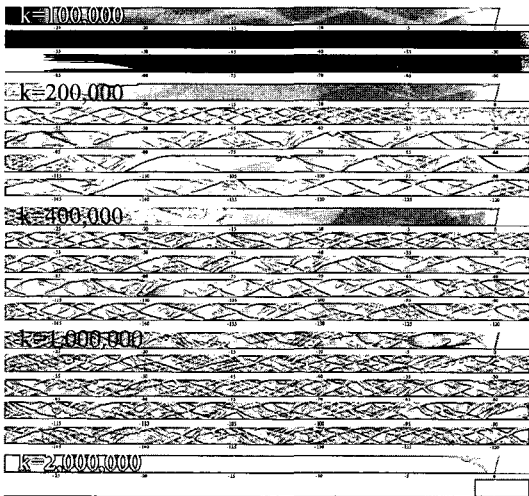


Fig. 24 Numerical smoked-foil records for highly unstable detonation wave from 901x401 grid

Figure 24는 강한 불안정 데토네이션의 그을음 막 기록으로서, 반응상수 값이 증가함에 따라 이전과 유사하게 셀의 크기가 작아지고 개수가 증가함을 알 수 있으나, 큰 차이점은 셀의 크기와 구조가 매우 불규칙하다는 것이다. 이 경우, 중간

불안정 데토네이션과 달리 최대/최소 셀의 길이 비는 10 이상이다. $k=2,000,000$ 인 경우에는 해상도의 부족으로 ZND 해로 수렴하였다.

3.4 셀 구조 포착의 최소 격자 조건

수치 해석적 관점에서 볼 때, 물성치 변화는 유도영역에서 완만하게 변하며 반응영역에서 급하게 변한다. 따라서 일반적으로 다루는 것처럼 격자 해상도를 반반응 길이를 기준으로 살펴보는 것 보다, 구배가 심한 발열 영역에서 살펴보는 것이 타당할 것이다. 따라서 본 연구에서는 셀 구조를 얻을 수 있는 최대 반응 상수에 대하여, 초기 조건으로 이용된 ZND 구조 계산에서 발열 영역과 반반응 길이에 포함된 격자점수를 Table 4에 비교하여 정리하였다. 격자점의 수는 Fig. 2의 유도영역과 발열 영역의 정의로부터 Fig. 25의 예시처럼 환산된다. 이 결과로부터 흥미로운 점은 반반응 길이 내에 포함된 격자점의 수는 일정하지 않으며, 강한 불안정 데토네이션으로 갈수록 크게 증가하는 반면, 발열 영역 내 최소 격자점수는 불안정의 정도에 관계없이 5개 이하로 일정하다는 것이다. 이러한 낮은 해상도에도 불구하고, 높은 해상도의 해와 비교할 때, 데토네이션과 구조와 데토네이션의 동적거동에 의한 셀 크기는 큰 차이를 보이지 않았다.

Table 4. Maximum possible reaction constants for each grid system that produce the detonation cell structures and number of grid points within reaction zone of steady ZND structure.

Grid system	Case	$\frac{grids}{L_{1/2}}$	$\frac{grids}{L_{HR}}$
Weakly unstable detonation ($\theta = 5.2$)			
301x101 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.01$)	$k=5,000$	< 3	< 5
501x201 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.005$)	$k=10,000$	< 3	< 5
901x401 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.0025$)	$k=20,000$	< 3	< 5
Moderately unstable detonation ($\theta = 6.9$)			
301x101 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.01$)	$k=10,000$	< 3	< 5
501x201 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.005$)	$k=20,000$	< 3	< 5
901x401 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.0025$)	$k=20,000$	< 3	< 5
Highly unstable detonation ($\theta = 12.7$)			
301x101 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.01$)	cell structure N/A		
501x201 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.005$)	$k=400,000$	< 14	< 5
901x401 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.0025$)	$k=1,000,000$	< 12	< 5

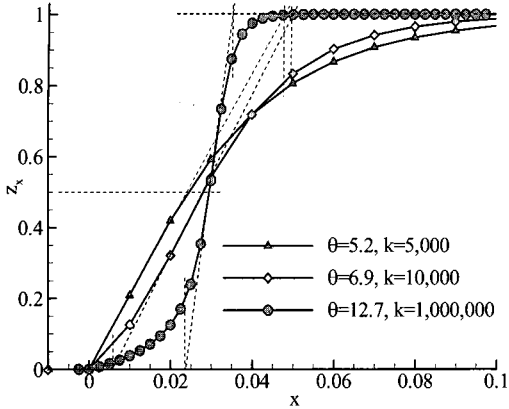


Fig. 25 Reaction zone of steady ZND structure with marked grid points

3.5 계산 영역의 크기

높은 해상도의 격자는 정확도 면에서 바람직하지만, 격자수에 비례하는 기억용량 및 계산시간 때문에 실질적으로 한계가 있다. 격자수를 줄이기 위하여 계산 영역의 크기를 줄인다면 데토네이션 파의 물리적 특징에 따른 제약이 주어진다.

불안정한 파면 구조를 가지는 C-J 데토네이션을 포착하기 위해서는, C-J 입구 유속을 가지는 임의의 초기 조건으로부터 정규 진동 조건을 얻기까지 적절한 크기의 완충 공간이 필요하며, 계산 영역의 출구에서는 음속을 만족하는 평형조건이 이루어져야 한다. 그러나 이상적으로 출구에서 완전한 음속 조건을 만족시키기 위해서는 출구의 위치가 매우 멀리 있어야만 한다. Fig. 26은 시간에 따른 최고 압력의 위치로 표시한 데토네이션 파 이동 곡선이다. 좋은 해상도를 가지는 작은 반응 상수의 경우 데토네이션 파의 안정화 거리(run-up distance)가 크게 나타나고 있으며 매우 작은 반응 상수의 경우에는 계산 영역 내에서 안정된 데토네이션 파를 얻을 수 없음을 알 수 있다. 이는 데토네이션 파가 안정되기에 계산 영역의 길이가 너무 짧기도 하지만, 출구에서 음속 조건을 만족 시키지 못하기 때문이기도 하다. 한편, 큰 반응 상수의 경우에는 파의 위치가 크게 변하지 않는 C-J 데토네이션을 얻을 수 있음을 알 수 있다. 따라서 계산 영역의 길이는 안

정화 거리를 포함하도록 충분히 커야한다. 해석으로부터 측정된 셀 크기와 안정화 거리를 Table 5에 정리하였다. 계산 영역의 폭에 의한 직접적인 효과는 발견할 수 없었다.

Table 5로부터 안정화 거리는 최대 셀 크기에 비하여 작지만, 같은 차수를 가지고 있어, 데토네이션 해석에 필요한 계산 영역의 최소 크기는 셀 크기 정도 이상이어야 함을 알 수 있다.

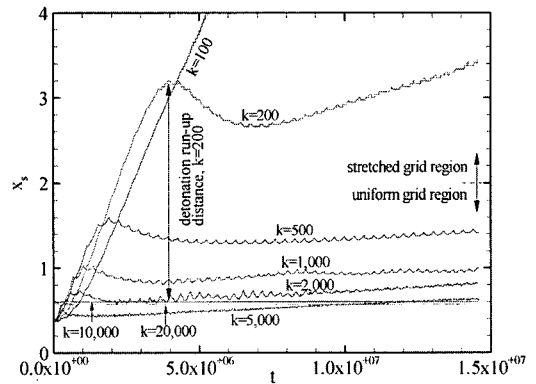


Fig. 26 History of shock wave location along the centerline of computational domain for weakly unstable detonation with 301 x 101 grid

Table 5. Detonation run-up distances and detonation cell sizes measured or estimated from the present computations

case	cell size	Run-up distance
Weakly unstable detonation ($\theta = 5.2$)		
k=100	~ 20	> 5
k=200	~ 10	2.8
k=500	5.5	1.22
k=1,000	2.74	0.68
k=2,000	1.70	0.36
k=5,000	0.67	0.15
k=10,000	0.37	0.05
k=20,000	0.19	-
Moderately unstable detonation ($\theta = 6.9$)		
k=500	~ 15	> 5
k=1,000	~ 15	4.6
k=2,000	7.5	2.3
k=5,000	1 ~ 3	0.85
k=10,000	0.5 ~ 2	0.45
k=20,000	0.3 ~ 1	0.20
Highly unstable detonation ($\theta = 12.7$)		
k=100,000	~ 10	> 5
k=200,000	1 ~ 5	4.18
k=400,000	0.5 ~ 5	2.97
k=1,000,000	0.2 ~ 2	0.35

4. 결 론

여러 영역의 데토네이션 현상에 대하여 셀 구조를 포착할 수 있는 격자 해상도 요구 조건을 파악하기 위한 연구를 수행 하였다. 반응 속도 상수와 격자 해상도를 바꾸어가며 일련의 해석을 수행 하고, 해석에 필요한 격자 해상도를 4차 정확도의 RK4 기법에 의한 정상 상태 ZND 구조와 계산 결과를 비교한 결과, 발열 영역, L_{HR} 에 약 5개의 격자점이 필요함을 알 수 있었다. 이는 기존에 알려진 $L_{1/2}$ 에 수십 개의 격자가 필요하다는 정보와는 상당한 차이를 보이는 결과이다. 아울러 활성화 에너지에 따른 파의 구조를 고려하지 않은 $L_{1/2}$ 의 기준 보다는 해의 구배가 급한 발열 영역, L_{HR} 에 포함되는 격자를 파악하는 것이 더욱 일반적인 기준이 됨을 알 수 있었다. 이러한 연구를 수행함에 있어, 간단한 1차원 정상 상태 ZND 구조 해석은 격자 해상도 요구 조건을 유추 하는데 매우 효과적임을 알 수 있었다.

수치적 안정성이 확보되고, 셀 구조를 포착할 수 있는 한, 시간 간격과 격자 해상도는 셀의 크기를 예측하는데 있어 매우 작은 영향만을 보여 주었다. 한편 셀 구조 포착을 위해서는 출구에서 C-J 조건을 만족시키고, 초기 조건으로부터 안정화를 위하여 예상되는 셀 크기보다 큰 수준 계산 영역의 길이가 필요함을 알 수 있었다.

후 기

본 연구는 한국학술진흥재단의 신진교수연구지원사업과 국방과학연구소 고에너지물질 특화연구센터의 HM-22 과제 지원에 의하여 수행되었으며, 지원에 감사드립니다.

참 고 문 헌

1. Fickett, W., and Davis, W.C., Detonation: Theory and Experiment, Dover Publication, New York, 2000
2. Taki, S., and Fujiwara, T., "Numerical Simulation of Triple Shock Behavior of Gaseous Detonation," Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 18, 1981, pp. 1671-1681
3. Oran, E.S., Boris, J.P., Young, T., Flanigan, M., Burks, T., and Picone, M., "Numerical Simulations of Detonations in Hydrogen-Air and Methane-Air Mixtures," Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 18, 1981, pp. 1641-1649
4. Oran E.S., Weber, J.W., Stefaniw, E.I., Lefebvre, M.H., and Anderson, J.D., "A Numerical Study of a Two-Dimensional H₂-O₂-Ar Detonation Using a Detailed Chemical Reaction Model," Combustion and Flame, Vol. 113, 1998, pp.147-163
5. Gamezo, V.N., Desbordes, D., and Oran E.S., "Two-Dimensional Reactive Flow Dynamics in Cellular Detonation Waves," Shock Waves, Vol. 9, 1999, pp.11-17
6. Singh, S., Powers, J.M., and Paolucci, S., "Detonation Solutions from Reactive Navier-Stokes Equations," AIAA Paper 1999-0966, January 1999
7. Nikolic, M., Williams, D.N.; and Bauwens, L., "Detonation Cell Sizes - A Numerical Study," AIAA Paper 1999-0967, January 1999
8. Gavrikov, A.I., Efimenko, A.A., and Dorofeev, S.B., "A Model for Detonation Cell Size Prediction from Chemical Kinetics," Combustion and Flame, Vol. 120, 2000, pp.19-33
9. Sharpe, G.J., "Transverse Waves in Numerical Simulations of Cellular Detonations," Journal of Fluid Mechanics, Vol. 447, 2001, pp.31-51
10. Hu, X.Y., Khoo, B.C., Zhang, D.L., and

- Jiang, Z.L., "The Cellular Structure of a Two-Dimensional H₂/O₂/Ar Detonation Wave" *Combustion Theory Modeling*, Vol. 18, 2004, pp.339-359
11. Choi, J.Y., and Yang, V., "Numerical Study of Detonation Wave Propagation in Combustion Wave Ignition (CWI) System," AIAA Paper 2003-5207, January 2003
 12. Oosthuizen, P. H., Carscallen, W. E., *Compressible Fluid Flow*, McGraw-Hill, 1997, pp.88-99
 13. Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 1: Validation," *AIAA Journal*, Vol. 38, No. 7, July 2000, pp.1179-1187
 14. Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 2: Comparison," *AIAA Journal*, Vol. 38, No. 7, July 2000, pp.1188-1195
 15. Austin, J. M., Pintgen, F. and Shepherd, J.E., "Reaction Zones in Highly Unstable Detonations," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30/2, 2004, pp.1849-1858