

정사각관 내 데토네이션 파 구조의 삼차원 수치 해석

조덕래* · 원수희** · 신재렬* · 이수한* · 최정열***

Three-dimensional Numerical Analysis of Detonation Wave Structures in a Square Tube

Deok-Rae Cho* · Su-Hee Won** · Jae-Ryul Shin* · Soo-Han Lee* · Jeong-Yeol Choi***

ABSTRACT

Three dimensional structures of detonation waves propagating in a square tube were investigated using a high resolution CFD code coupled with a conservation equation of reaction progress variable and an one-step irreversible reaction. The code were parallelized based on domain decomposition technique using MPI library. The computations were carried on an in-house Windows cluster with AMD processors. Three-dimensional unsteady analysis results in the smoked-foil records caused by the instabilities of the detonation waves, which showed the rectangular and diagonal modes of detonation instabilities depending on the initial condition of disturbances and the spinning detonation for case of small reaction constant.

초 록

반응 진행 변수 보존 방정식 및 1단계 비가역 반응과 연계된 고해상도 전산유체 코드를 이용하여 관 내부를 전파하는 데토네이션 파의 삼차원 구조를 관찰하였다. 코드는 영역 분할에 기초하여 MPI 라이브러리를 이용하여 병렬화하였으며, AMD 프로세서로 구성된 Windows 클러스터를 이용하여 실행하였다. 삼차원 비정상 해석으로부터 데토네이션 파의 불안정성으로 유발된 그을음 막 기록(smoked-foil record)을 얻을 수 있었으며, 이로부터 초기 교란 조건에 따라 직사각 모드나 대각 모드의 셀 구조와 함께 작은 반응 상수 조건에서는 회전 데토네이션 파를 관찰할 수 있었다.

Key Words : Three-dimensional Detonation(삼차원 데토네이션), Domain Decomposition(영역 분할), Parallel Processing(병렬 처리), Smoked-foil(그을음 막), Rectangular Mode(직사각 모드), Diagonal mode(대각 모드), Spinning Detonation(회전 데토네이션)

† 2006년 10월 16일 접수 ~ 2006년 12월 4일 심사완료

* 학생회원, 부산대학교 대학원 항공우주공학과

** 학생회원, 서울대학교 대학원 항공우주공학과

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

1. 서 론

일반적으로 가스 상의 데토네이션 파는 세 층 격파의 상호작용으로 셀 구조를 가지는 것으로

알려져 있다[1]. 데토네이션 파 전파에 대한 실험에서 이러한 형상의 흔적은 얇은 그을음 막(smoked foil)을 입힌 벽에 이른바 데토네이션 셀이라고 불리는 형태로 남겨진다. 데토네이션 파의 이차원적 형상은 수치 해석 방법에 의하여 연구되었고, 이러한 연구들로부터 파의 구조와 물리적 특성에 대한 이해가 이루어 졌다[2-11].

그러나 데토네이션 파의 구조는 근본적으로 삼차원적인 구조를 가질 수밖에 없으나, 3차원 형상에 대한 실험적 관찰은 매우 제한적일 수밖에 없다. 실험적으로 파악하기 어려운 삼차원 구조를 이해하기 위해서 전산유체 해석 방법을 이용할 수 있으나, 충격파와 결합된 연소파로 특징되는 데토네이션 파의 구조를 해석하기 위해서는 충격파와 연소면을 포착하기 위하여 매우 조밀한 격자 분해능을 가지는 많은 수의 격자가 필수적이다. 그러나 삼차원 해석에서 요구되는 컴퓨터 처리 능력이 매우 발달한 현재에도 일반 단일 컴퓨터에 의한 해석은 불가능에 가깝다. 근래에 들어 네트워크로 연결된 컴퓨터 클러스터를 이용한 대규모 병렬처리 기법이 개발되면서 많은 계산 시간과 용량을 필요로 하는 삼차원 데토네이션 파 구조에 대한 해석이 수행되어 기본적인 삼차원 구조에 대한 이해가 이루어지고 있다[12-19]. 그러나 아직 대부분의 결과는 간단한 경우에 대한 제한된 결과만을 보여 주고 있으며, 데토네이션 파의 삼차원적 구조가 2차원적 그을음 막 기록과 어떻게 대응되는지는 충분히 알려져 있지 않다.

본 연구에서는 병렬처리 기법을 이용하여 삼차원 데토네이션 파의 구조를 해석할 수 있는 해석 코드를 개발하고, 기존 이차원 데토네이션 파에 대한 분석 연구를[11] 확장하여 삼차원 데토네이션 파의 구조를 살펴에 있다. 이를 바탕으로 삼차원 데토네이션 파의 구조를 파악하고 이차원 데토네이션 파 구조와의 연관성을 살펴볼 것이며, 직사각 모드 및 대각 모드 등의 삼차원 데토네이션 파의 불안정에 대한 기본적인 특징과 함께 회전 데토네이션 등의 조건을 살펴볼 것이다.

2 연구 내용

2.1 지배방정식

반응 과정 변수의 보존 방정식과 연계된 압축성 비 점성 유동에 대한 삼차원 Euler 방정식은 벡터 형태로 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} = H \quad (1)$$

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \\ \rho Z \end{bmatrix} \quad E = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (e+p)u \\ \rho uZ \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (e+p)v \\ \rho vZ \end{bmatrix} \quad (2a)$$

$$G = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (e+p)w \\ \rho wZ \end{bmatrix} \quad H = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho \dot{w} \end{bmatrix} \quad (2b)$$

여기서 압력은 다음과 같이 정의된다.

$$p = (\gamma - 1)\rho \left\{ e - \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2) + Zq \right\} \quad (3)$$

생성 질량 분율을 나타내는 반응 과정 변수 Z 는 0 부터 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 상태로부터 보간법에 의하여 구하였다. 비열비는 보존 법칙과 이상기체 가정을 만족하는 식 (4)와 같은 관계식으로 표현된다.

$$\gamma(Z) = \frac{\gamma_U(\gamma_B - 1)(1 - Z) + \gamma_B(\gamma_U - 1)Z}{(\gamma_B - 1)(1 - Z) + (\gamma_U - 1)Z} \quad (4)$$

데토네이션파의 실제 반응 과정은 여러 화학성분의 열역학적 데이터와 다단계의 반응 기구를 필요로 하지만 해석이 복잡하고 많은 계산을

시간을 요구하므로 열-유체역학적 특징만을 살펴 보기 위해서는 간단한 1단계 비가역 Arrhenius 반응 모델을 이용하는 것이 편리하다. 이 경우 식 (1)의 반응 물질의 질량 생성율은 다음 식과 같이 정의된다.

$$\dot{w} = (1 - Z)k \exp(-E\rho/p) \quad (5)$$

2.2 열화학적 매개변수

본 연구는 데토네이션 파의 기본적인 삼차원적인 구조와 특징에 대한 이해를 높이는 데 목적이 있으므로 계산은 약한 불안정 데토네이션 영역의 경우로 제한하여 수행하였다. 수치 해석에 있어서 열화학적 매개변수들은 이전의 이차원 데토네이션 셀 구조에 대한 수치 해석 연구에서 이용되었던 값들을 사용하였다[11,20]. 미연 및 기연 가스의 비열비는 각각 1.602 와 1.288 이다. 무차원화된 단위 질량당 발열량은 $q = 24.2$ 이다. von Neumann peak 온도로 무차원화된 약한 불안정 데토네이션 영역의 활성화 에너지는 $\theta \equiv E/RT_{VN} = 5.2$ 이다. 이전의 이차원 해석에서 보인바와 같이 반응물에 따른 상수인 pre-exponential 인자 k 는 격자 해상도와 강하게 연계되어 있으므로 주어진 격자계 해상도 내에서 셀 구조를 포착할 수 있는 값을 택하였다.

2.3 계산 영역과 격자 영역

3차원 데토네이션 파에 대한 계산 영역은 정사각형 단면을 가진 직육면체이다. 전단면은 균일한 격자 해상도를 가진다. 또한 격자는 계산 영역의 후반(출구)부분을 제외하고는 길이 방향으로 균일하다. 계산 영역의 폭은 1.0 이며 격자 비가 균일한 영역의 길이는 2.0 이다. 후반 (출구) 영역은 출구 경계조건에서의 C-J (Chapman-Jouguet) 조건을 만족시키기 위한 길이 방향으로 점진적으로 격자 비를 늘린 격자계를 가진다. 격자계의 균일한 격자 영역 내에서 안정된 주기를 가진 데토네이션 파의 진동을 유지하도록 계산

영역의 길이는 폭의 3.5 배 길이를 가지도록 택하였다.

데토네이션 셀 구조를 포착하기 위한 격자 해상도 요구조건에 대한 앞선 논문에서[11], 해상도는 pre-exponential 인자 k 와 강하게 연계되어 있음을 보인바 있다. 즉, 고정된 격자계에서 작은 k 값은 큰 셀 크기와 함께 상대적으로 높은 해상도의 해를 보이는 반면, 큰 k 값은 상대적으로 낮은 해상도의 해와 작은 데토네이션 셀 크기를 보인다. 또한 정상 ZND(Zel'dovich-Neumann-Döring) 구조의 해석 해에서 von Neumann peak 후방 발열 영역에 5 개 이상의 격자가 포함된다면 데토네이션 파의 불안정 정도에 관계없이 데토네이션 셀 구조를 포착할 수 있음을 보인 바 있다. 아울러 데토네이션 파의 이차적인 상세 구조는 격자 해상도에 강하게 의존하지만 셀 크기 등의 주요 구조는 격자 해상도에 크게 영향을 받지 않는 것으로 나타났다. 따라서 k 값은 주어진 격자계에서 데토네이션 파의 주요 구조를 포착할 수 있도록 생긴 격자계에서는 1,000을 조밀한 격자계에서는 4,000을 택하였다. 본 연구에서 사용한 계산 격자계의 상세 정보를 Table 1 에 정리하였다.

Table 1. Summary of computational grids

Grid System	Minimum spacing	Domain size
2D	$\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.025$	3.5x1.0
	uniform 83x42+2% stretching	39x42
	$\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.01$	3.5x1.0
2D	uniform 203x102 + 2% stretching	99x102
	$\Delta x_{\min} = \Delta y = 0.005$	3.5x1.0
	uniform 403x202 + 3% stretching	99x202
3D	$\Delta x_{\min} = \Delta y = \Delta z = 0.025$	3.5x1.0x1.0
	uniform 83x42x42 + 2% stretching	39x42x42
	$\Delta x_{\min} = \Delta y = \Delta z = 0.01$	3.5x1.0x1.0
3D	uniform 203x102x102 + 0.74% stretching	99x102x102

2.4 초기 조건과 경계 조건

데토네이션 파 전파에 대한 해석에서 초기 조건은 모든 격자점에 격자계의 길이 방향으로

ZND 구조의 해석 해의 결과를 적용하였다. 불안정 유동으로의 빠른 진행을 위하여 초기 조건에는 여러 종류의 임의의 교란들 중 간단한 형태인 ZND 해의 경사 분포를 이용하였다. Fig. 1은 122×42 계산 격자를 가진 2차원 격자계에 반응 과정 변수의 변화를 겹쳐서 표현한 것이다. 3차원 해석에 있어서 세 가지의 다른 경사 방법을 이용하였다. 첫 번째는 이차원 초기 조건을 진행 방향으로 간단히 확장한 것이고, 두 번째는 대각선 방향으로 기울기를 주었고 세 번째는 비틀림 기울기를 준 것이다.

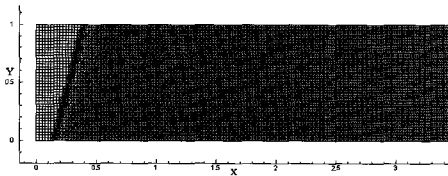
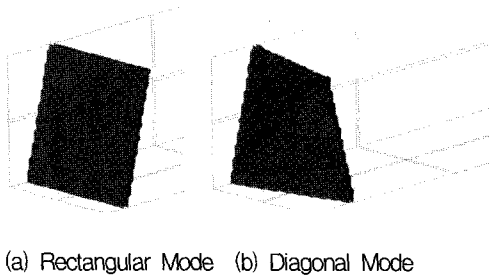


Fig. 1 Computational grid overlaid by initial distribution of reaction progress variable for 2-D model



(a) Rectangular Mode (b) Diagonal Mode

Fig. 2 Initial distribution of reaction progress variable for 3-D model

입구유속, U_∞ 는 C-J 데토네이션 속도, U_{CJ} 로 고정하였다. 즉, overdrive 인자 $f \equiv (U_\infty/U_{CJ})^2 = 1.0$ 이다. 출구에서는 C-J 조건을 만족하도록 출구 유동 속도가 초음속인 경우에는 보간법에 의하여 계산하며, 아음속일 경우에는 음속을 가지게 하였다. 벽면에서는 단열 및 slip 조건을 부여하였다. 출구 영역은 충분히 긴 계산 영역을 가지게 하여 출구 평균 속도가 음속과 큰 차이가 나지 않도록 유지 하였다.

데토네이션 파의 해석에서 파의 불안정성을

대표하는 삼중점의 운동은 삼중점의 시간 및 횡방 운동 기록 또는 $x-t$ 선도로 간주할 수 있는 그을음 막 기록(smoked-foil record)을 이용하여 분석한다. 그을음 막 기록의 물리적 메커니즘은 삼중점 근처에서 생기는 와동의 전단력에 의하여 만들어지지만, 수치 해석의 간편화를 위하여 각 시간, 횡방향 각 위치에서 길이 방향 최고 압력과 위치를 전체 시간에서 누적하여 기록하는 방법이 널리 이용되고 있다. 최고 압력의 위치는 고정된 계산 좌표계를 실험 좌표계로 변환시켜 기록한다.

2.5 유체 동역학적 해석 알고리즘

유체 동역학 방정식은 유한 체적 cell-vertex 기법에 의하여 이산화 하였으며, 셀 경계에서의 수치플럭스는 3차 정확도의 MUSCL-type TVD 기법에 의한 Roe의 근사 리만 해법으로 계산하였다. 이산화 방정식은 4차 정확도의 Runge-Kutta 기법을 이용하였다. 압축성 반응 유동의 수치 해석에 대한 자세한 내용은 이전의 연구에서 논의하였으므로 여기에서는 생략한다[11,21].

삼차원 해석을 위하여 해석 코드는 MPI(The Message Passing Interface standard) 표준의 라이브러리를 이용하여 계산 영역 분할 기법으로 병렬화하였다. 삼차원으로 분할된 계산 영역은 경계에서 각각 2개의 셀, 양측을 합하여 총 4개의 셀 정보를 공유하며 삼차의 공간 정확도를 유지한다. 문제의 크기에 따라 해석 영역을 같은 정도의 격자수를 가지는 8개, 16개 또는 24개의 계산 영역으로 나누어 8개, 16개 또는 24개의 프로세서에 분산하여 병렬 해석을 수행하였다.

병렬 계산에는 본 연구 팀에서 자체 제작한 Windows 클러스터를 이용하였다. 병렬 계산에 이용된 클러스터는 AMD Athlon™ 64-X2 4400+ 듀얼코어 프로세서 노드 48개, Athlon™ XP 3000+ 단일 프로세서 노드 48개, Athlon™ XP 2200+ 단일 프로세서 노드 32개, Athlon™ MP 2000+ 듀얼 프로세서 노드 8개, Intel Pentium-III 1GHz 듀얼 프로세서 노드 8개 등, 총 214개의 프로세서 코어를 가지는 8개의 클러

스터로 구성되어 있으며 각각의 클러스터는 24, 16 또는 8개 프로세서 단위로 기가비트 이더넷을 이용하여 계산 네트워크를 구성하였다. 각 클러스터의 서버에는 Microsoft Windows Server 2003과 Compaq Visual Fortran을 설치하였으며, 개별 노드에는 Microsoft Windows XP Professional을 설치하였다. 병렬 처리는 MPI-II 표준을 따르는 MPICH.NT를 설치하여 계산에 이용하였다.

3. 해석 결과 및 고찰

3.1 이차원 모델의 격자 분석

삼차원 해석에 앞서 필요한 격자 해상도의 요구 조건에 대하여 살피기 위하여 이차원 모델의 해석 결과를 살피기로 한다. Fig. 3은 앞에서 설정한 계산조건에서 $k=2,000$ 인 경우의 전형적인 그을음 막 결과이다. 이 그림은 초반에 기울어진 초기 조건으로부터 천이 영역을 거치면서 셀 구조가 형성되기 시작하며, 얼마간의 거리를 진행한 후에는 주기적으로 안정화된 영역을 보여주며, 일정한 경향을 계속 유지한다. 이 결과로부터 얻어진 안정된 영역의 데토네이션 셀 크기는 단위 관 폭 당 1.5 개다.

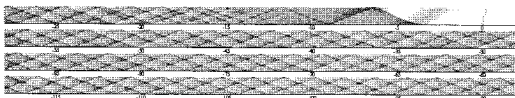


Fig. 3 Numerical smoked-foil record of weakly unstable detonation with $k=2,000$

Figure 4는 동일한 열-유체 유동 조건에서 격자 해상도가 다른 모델들의 그을음 막 기록을 비교한 것이다. 격자 해상도의 차이에 의한 셀 형상의 선명도는 비록 다르지만 데토네이션 셀 크기는 격자 해상도와 무관하게 거의 동일함을 알 수 있다. 비록 셀 크기에 약간의 차이가 존재하지만 해상도에 따른 경향성이 없고 최고 5%이내의 차이만 존재하므로 해상도가 셀 크기에 미치는 영향은 무시할 수 있다. 122×42 ($\Delta x_{min} = \Delta$

$y=0.025$)의 해상도를 삼차원에서 이용하는 경우 삼차원 해석은 이차원 해석에 비하여 약 50 (=40×1.25) 배 이상, 301×101 ($\Delta x_{min} = \Delta y = 0.01$) 격자는 약 125 (=100×1.25) 배 이상, 501×101 ($\Delta x_{min} = \Delta y = 0.005$)은 약 250 (=200×1.25) 배 이상의 계산 시간을 필요로 하므로 계산 효율을 고려하여 삼차원 해석은 낮거나 중간 정도의 격자 해상도를 이용하였다.

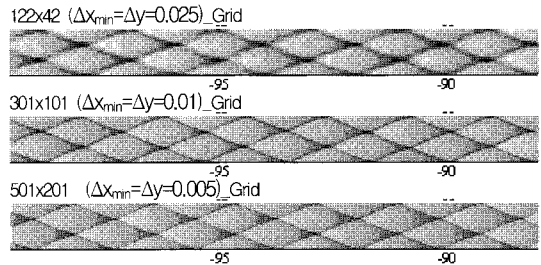


Fig. 4 Numerical smoked-foil record for three different grid resolution

3.2 $k=2,000$ 에서 $122 \times 42 \times 42$ 격자 결과

삼차원 해석은 우선 $k=2,000$ 인 $122 \times 42 \times 42$ 격자 모델에서 수행하였다. 해석은 모델에 세 가지의 다른 초기 조건을 부여하여 수행하였다. Fig. 5-7은 초기 조건으로부터 시간 횡수, N 에 따른 파면 구조의 발달을 보여주고 있다. 이 중 첫 번째의, Fig. 5는 2차원 초기 모델을 진행방향으로 확장한 것이다. 이 결과로부터 정사각 단면에 평행한 파면을 가지는 주기적 진동이 관찰되며, 이차원 해석의 결과와 동일하게 단위 튜브 단위 폭당 1.5개의 셀이 관측되었다.

두 번째의 경우에는 대각선을 따라 비틀린 ZND 해의 분포를 가지는 초기 조건을 적용하였으며, Fig. 6은 이 조건의 시간에 따른 파면 형상의 발달 과정을 나타낸 것이다. 이 경우에는 파면이 대각선 방향으로 진동하는 것이 관찰되었다. 세 번째는 대각선 방향으로 기울어진 ZND 분포를 가지는 초기 조건을 이용하였으며, 두 번째 경우와 같이 파면이 대각선 방향으로 진동하는 결과를 관찰할 수 있었다. Fig. 7은 이 조건의 시간에 따른 파면 형상의 발달 과정을 나타낸 것이다. 두 경우 모두 데토네이션 셀 폭

은 전체 튜브 폭을 차지하였으며, 특별한 차이점은 찾을 수 없었다.

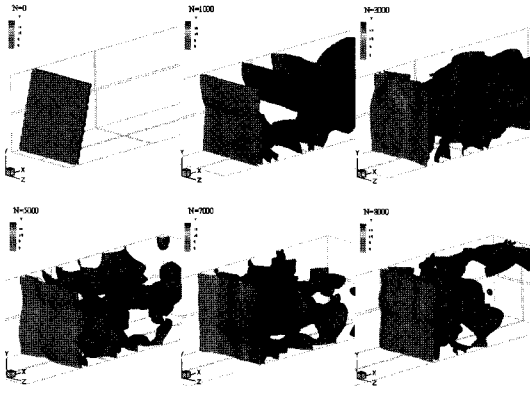


Fig. 5 Evolution of rectangular mode of detonation wave oscillation from the extended 2-D initial condition

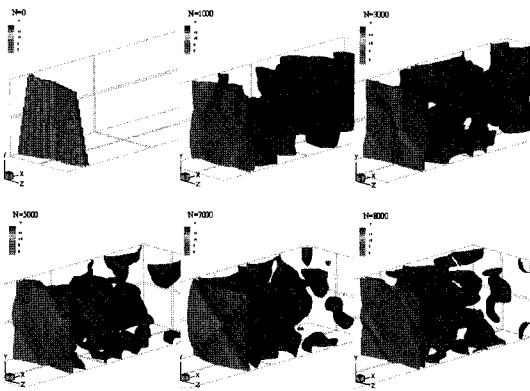


Fig. 6 Evolution of diagonal mode of detonation wave oscillation from the twisted initial condition

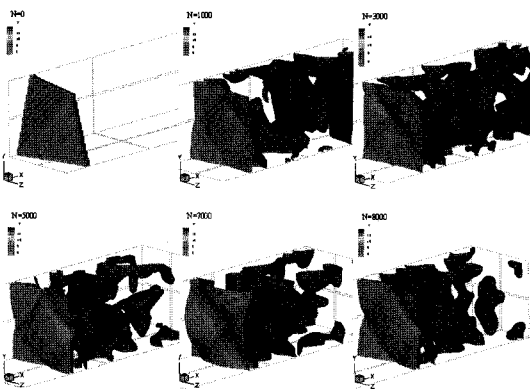


Fig. 7 Evolution of diagonal mode of detonation wave oscillation from the twisted initial condition

Figure 8은 해석모델의 그을음 막 기록을 비교한 것이다. 이차원 결과와 삼차원 직사각형 모드의 결과에서는 삼차원 기록에서 진행 방향으로 회색의 명암이 존재한 것을 제외하고는 매우 유사한 크기의 데토네이션 셀 기록을 보인다. 이러한 명암 기록은 셀이 기록되는 벽에 수직 방향으로 이동하는 횡단 충격파(slapping wave)가 벽면에 반사되면서 벽면에서의 압력이 증가 또는 감소되면서 나타나는 주기적 현상이다. 하지만, 다음의 두 대각선 모드의 결과에서는 이러한 slapping 파의 기록이 보이지 않는데 이는 측면 파 만나는 파가 45도로 기울어져서 벽에서 경사지게 반사되기 때문이며, 결과적으로 대각선 모드에서의 셀 사이즈는 튜브 폭 전체와 일치한다.

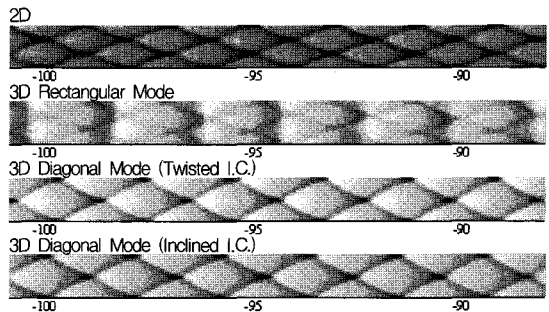


Fig. 8 Numerical smoked-foil records from two- and three-dimensional simulations with $122 \times 42 \times 42$ grid, $k=2,000$

3.3 $k=4,000$ 에서 $302 \times 102 \times 102$ 격자 결과

위의 결과들을 기초로 하여 더 세밀한 계산을 정밀한 격자와 더 큰 pre-exponential 인자, $k=4,000$ 을 이용하여 계산하였다. 이 경우 더 많은 수의 셀 구조를 포착할 수 있어 좀 더 실제적인 구조와 특징을 파악할 수 있다. 앞서와 유사하게 직사각형 및 대각선 모드 둘은 서로 다른 초기 상태에서부터 계산을 수행하였다.

Figure 9는 튜브 폭 방향으로 더 많은 수의 셀 구조를 가지는 직사각 모드 데토네이션 파 진동 해석의 압력 분포 및 그을음 막 기록이다. Fig. 9(b)의 그을음 막 기록에서는 왼쪽과 위쪽 면에서 상호 교차하는 횡단 충격파를 가지는 셀

형상을 볼 수 있으나, 본 결과는 셀 폭이 균일하지 않은 불규칙성을 보이고 있다. 이러한 불규칙성은 활성화 에너지가 큰 경우에 보통 나타나지만, 활성화 에너지가 작은 경우에도 튜브 폭이 셀 폭의 정수 배가 되지 않는 경우에 종종 보이는 결과이다[11].

크기의 불규칙성이 더 잘 나타나고 있는 반면 이 단면에서는 횡단 충격파가 보이지 않으며, 3.2절에서 서술한 대각선 모드의 벽면에서의 결과와 유사한 특징을 보이고 있다. 따라서 직사각 모드와 대각선 모드는 서로 다른 것이 아니라 상사성이 있는 것으로 여겨진다.

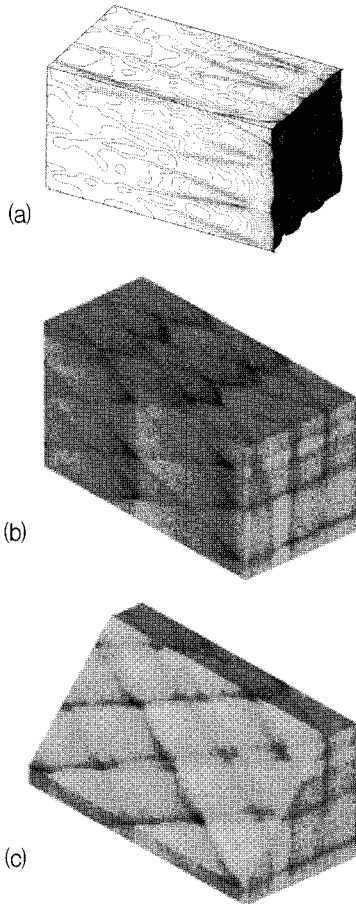


Fig. 9 Rectangular mode of detonation wave oscillation obtained with $302 \times 102 \times 102$ grid, $k = 4,000$. (a) Pressure contours on the wall boundaries and surface plots of the leading front, (b) Numerical smoked-foil record, (c) 45° of the smoked-foil record

Figure 9(c)는 그을음 막 기록의 45° 단면은 잘라서 도시한 그림으로서 대각선 방향으로의 그을음 막 기록을 보여 주고 있다. 앞서 서술한 셀

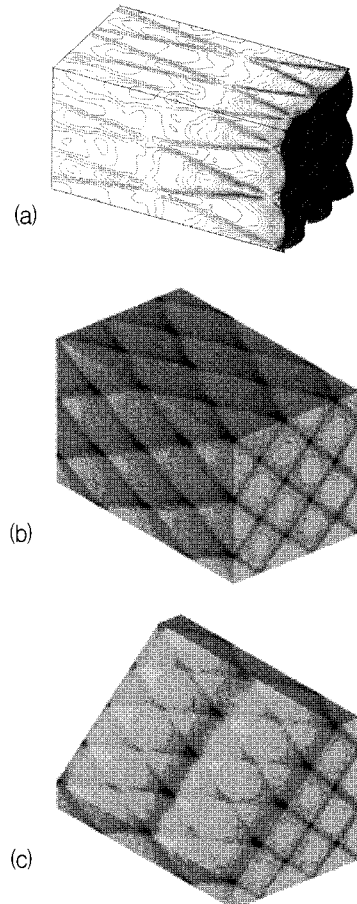


Fig. 10 Diagonal mode of detonation wave oscillation obtained with $302 \times 102 \times 102$ grid, $k = 4,000$. (a) Pressure contours on the wall boundaries and surface plots of the leading front, (b) Numerical smoked-foil record, (c) 45° of the smoked-foil record

Figure 10은 대각선 방향으로 기울어진 초기 조건 분포를 이용한 데토네이션 파의 대각선 모드 해석 결과이다. 이 결과는 일정한 셀 형상의

결과를 보이며 직사각형 모드와는 달리 횡단 충격파에 의한 벽면 명암 구배는 보이지 않는다. 그러나 45° 단면을 도시한 Fig. 10(c)의 결과에서는 벽면 명암 구배를 명확히 파악할 수 있으며, 직사각 모드와 동일한 결과임을 알 수 있다. 따라서 직사각 모드와 대각선 모드는 단면에서 파의 운동을 보는 방향에 따른 대각선 방향의 기하학적 상사성에 의한 결과임을 알 수 있다.

3.4 회전 데토네이션 실험

데토네이션 파 전파의 회전 모드는 셀 크기가 튜브의 직경보다 클 경우 낮은 민감도의 혼합기체에서 관찰되는 현상이며, 데토네이션으로의 발달 여부를 가늠하는 임계 조건의 현상으로 오랫동안 연구 주제가 되어 왔다. 회전 데토네이션의 특징적인 삼차원적 거동은 삼차원적 전산 유체 해석으로 잘 관찰할 수 있는데, 이에 대한 연구는 주로 실험에 의해서만 수행되고 있으며, 해석을 통한 연구는 최근에서야 발표되고 있다.[17,18]

본 연구에서는 이전의 이차원 연구를 바탕으로 삼차원적 거동 특성을 살펴보았다. Fig. 11은 앞서와 동일한 조건에서 $k=1,000$ 인 경우의 그을음 막 기록으로서 혼합 기체의 민감도가 임계점보다 낮은 경우, 즉 작은 pre-exponential 계수, k 를 가지는 경우, 셀 구조가 나타나지 않고 관 내벽의 양측에서 삼중점이 반사되는 셀 기록이 관찰된다. 따라서 이 경우 삼차원적인 거동을 관찰하기 위한 해석을 수행하였다. 해석은 동일한 열화학적 조건에서 $122 \times 42 \times 42$ 격자를 이용하였다.

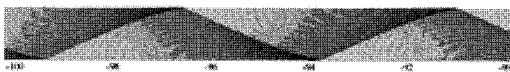


Fig. 11 Numerical 2-D smoked foil record showing half cell width within the tube width¹¹

Figure 12는 삼차원 해석의 결과로 얻어진 수치적 그을음 막 기록이다. 셀 형상은 진행 방향으로 오른쪽과 위쪽 벽면에서 상호 교차하는 회

전파의 위치가 관찰된다. 이는 측면 방향으로 움직이는 삼중점이 최종적으로는 벽면을 따라 회전하면서 움직인 결과로 이해될 수 있다. Fig. 13은 네 벽면에서의 결과를 펼쳐서 도시한 그림으로써, 옆 벽면들을 따라서 회전하는 삼중점의 궤적을 보여 주고 있으며, 기체의 열화학적 특성이 달라 데토네이션 파의 속도와 궤적의 기울기에 차이가 나지만, Fig. 14의 실험결과를 대체적으로 잘 모사하고 있다.

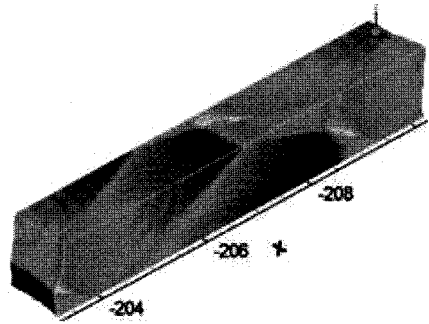


Fig. 12 3-D numerical smoked foil record for spinning detonation

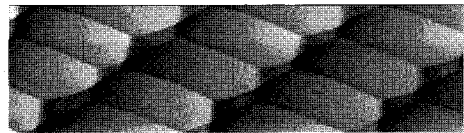


Fig. 13 Unfolded smoked foil record of four walls for the 3-D spinning detonation; detonation propagates left to right

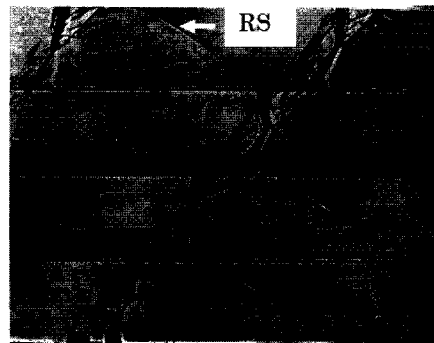


Fig. 14 Experimental smoked foil records of spin detonation in square tube by E.A. Lundstrom²³; detonation propagates from left to right

4. 결 론

정사각 단면의 관내에서 전파하는 데토네이션 파의 삼차원적 구조에 대한 수치적 연구를 수행하였다. 삼차원 비정상 상태 해석의 그을음 막 기록에서 길이는 같지만 폭은 다른 직사각 모드와 대각선 모드 파의 구조와 상사성을 확인하였다. 같은 조건에서 이차원과 삼차원 직사각 모드의 데토네이션 셀 크기는 횡단 충격파의 존재에 따른 음영 효과를 제외하고는 동일하다. 또한 직사각 및 대각선 모드는 서로 다르게 보이지만 45° 방향 단면의 그을음 막 기록을 관찰하여 상사성이 존재함을 확인하였다.

혼합 기체의 민감도가 임계점 보다 낮은 경우에 대한 이차원 해석과 삼차원 해석을 비교하여 회전 데토네이션의 전파 기구를 살펴보았으며, 이차원 해석에서 벽면 양 측에서 삼중점이 반사되는 메커니즘이 삼차원에서는 관 내벽을 따라 삼중점이 회전하는 회전 데토네이션 파의 형태로 나타남을 확인할 수 있었다.

후 기

본 연구는 2006년 정부(교육인적자원부)의 재원으로 한국학술진흥재단의 지원(KRF-2006-521-D00061)과 부산대학교 산학협력 중심사업(동남권부품소재산학협력혁신사업단)의 일부 지원을 받아 수행되었으며 지원에 감사드립니다.

참 고 문 헌

1. Fickett, W., and Davis, W.C., Detonation Theory and Experiment, Dover Publications, 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. 최정열, 조덕래, "데토네이션 셀 구조 모사를 위한 수치적 요구 조건," 한국추진공학회지, 제10권, 제2호, 2006, pp.1-14

12. Williams, D. N., Luc Bauwens and Oran, E. S., "Detailed Structure and Propagation of Three-Dimensional Detonations," Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 26, 1997, pp.2991-2998
13. Zhang, Z.-C., Yu, S. T. J. and Chang, S.-C., "A Space-Time Conservation Element and Solution Element Method for Solving the Two- and Three-Dimensional Unsteady Euler Equations Using Quadrilateral and Hexahedral Meshes," Journal of Computational Physics, Vol. 175, 2002, pp.168-199
14. Tsuboi, N., Katoh, S. and Hayashi, A. K., "Three-Dimensional Numerical Simulation for Hydrogen/ Air Detonation: Rectangular and Diagonal Structures," Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 29, 2002, pp. 2783-2788
15. Deiterding, R., "Numerical Structure Analysis of Regular Hydrogen-Oxygen Detonations," Proc. of fall '03 meeting of Western States Section of The Combustion Institute, Oct. 20-21, 2003
16. Eto, K, Tsuboi, N. and Hayashi, A. K., "Numerical Study on Three-dimensional C-J Detonation Waves: Detailed Propagating Mechanism and Existence of OH Radical," Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 30, 2005, pp.1907-1913
17. Hayashi, A. K., Eto, K. and Tsuboi, N., "Numerical Simulation of Spin Detonation in Square Tube," 20th International Colloquium on Detonation and Reactive Systems (ICDERS), Jul.31-Aug.5, 2005, McGill University, Montreal, Canada
18. Tsuboi, N., Eto, K. and Hayashi, A. K., "Three-Dimensional Numerical Simulation of H₂/Air Detonation in a Circular Tube: Structure of Spinning Mode," 20th International Colloquium on Detonation and Reactive Systems (ICDERS), Jul.31-Aug.5, 2005, McGill University, Montreal, Canada
19. Deledicque, V. and Papalexandris, M. V., "Computational Study of Three-Dimensional Gaseous Detonation Structures," Combustion and Flame, Available online 15 November 2005, to be appeared 2006
20. Austin, J. M., Pintgen, F. and Shepherd, J.E., "Reaction Zones in Highly Unstable Detonations," Proceedings of the Combustion Institute, Vol.30/2, 2005, pp. 1849-1858
21. 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
23. Lee, J.H., Soloukhin, R.I., and Oppenheim, A.K., Astronautica Acta., Vol. 14, 1967, pp.565-584