

6-방정식 확산경계 모델을 이용한 압축성 고체 및 액체에서 충격파 해석

염 금 수*

군산대학교 기계자동차공학부

NUMERICAL ANALYSIS OF THE SHOCK WAVES IN COMPRESSIBLE SOLIDS AND LIQUIDS USING A SIX-EQUATION DIFFUSE INTERFACE MODEL

Geum-Su Yeom*

School of Mechanicals Automotive Engineering, Gunsan Nat'l Univ.

In this paper, the shock waves in compressible solids and liquids are simulated using a six-equation diffuse interface multiphase flow model that is extended to the Cochran and Chan equation of state. A pressure relaxation method based on a volume fraction function and a pressure-correction equation are newly implemented to the six-equation model. The developed code has been validated by a shock tube problem with liquid nitromethane and an impact problem of a copper plate on a solid explosive. In addition, a new problem, an impact of a copper plate on liquid nitromethane, has been solved. The present code well shows the wave structures in compressible solids and liquids without any numerical oscillations and overshoots. After the impact of a solid copper plate on liquid, two shock waves (one propagates into liquid and the other into solid) are generated and a material interface moves to the impacting direction. The computational results show that the shock velocity inside the liquid linearly increases with the impact velocity.

Key Words : 6-방정식 확산경계모델(6-Equation Diffuse Interface Model), 압축성 고체(Compressible Solid), 압축성 유체(Compressible Liquid), Cochran-Chan 상태방정식(Cochran-Chan equation of state), 충격파(Shock Wave), 고속 충돌(High-Velocity Impact), 폭발물(Explosive)

1. 서 론

일반적으로 낮은 압력과 느린 속도의 유동 조건에서 고체 및 액체는 비압축성으로 취급된다. 하지만 고속 충돌 또는 폭발과 같은 고속/고압의 조건에서는 고체와 액체도 압축성 물질로 취급되어야 하며, 이 경우 기체 유동에서 주로 관찰되는 충격파가 발생하기도 한다. 본 논문에서는 압축성 고체 및 액체로 이루어진 두 개의 물질(또는 상)이 경계면으로 나뉘어져 있을 경우 충격파 전파 문제를 다루고자 한다.

일반적으로 고속 충돌 또는 폭발과 같은 문제에서는 물질 경계면에서 압력비가 10^7 정도로 매우 크고, 고체 및 액체는 기체에 비해 압축률(compressibility)이 매우 작기 때문에 수치

계산에 상당한 어려움이 따른다. 특히, 경계면에서 수치진동이 매우 크게 발생하거나 계산이 실패하는 경우가 빈번히 발생하는 것으로 알려져 있다[1].

물질경계면을 포함하는 다상유동 문제를 해석하는 방법으로는 VOF(volume of fluid) 법[2], level-set 법에 기반한 GFM(ghost fluid method)법[3], 확산경계모델(diffuse interface model) 법[4-10] 등이 있다. 이 중에서 확산경계모델은 다른 방법들에 비해서 물질경계면을 날카롭게 포착하지 못한다는 단점이 있지만, 캐비테이션과 같은 새로운 경계면의 생성을 쉽게 모사할 수 있다는 큰 장점이 있다. 확산경계모델은 속도와 압력의 근사방법에 따라 7-방정식 모델[4, 5], 6-방정식 모델[6, 7], 그리고 5-방정식 모델[8, 9]이 있다. 이 중에서 5-방정식 모델이 가장 효율적이지만 이 모델의 혼합음속(mixture sound speed)이 비단조(non-monotonic)적인 성질을 나타내기 때문에 물질경계면을 통한 파(wave)의 전파를 정확히 모사할 수 없다는 것이 알려졌다[6]. 또한 5-방정식 모델은 특별히 고안된 relaxation-projection 기법[9] 또는 최근의 path-conservative 법이

Received: April 23, 2011, Revised: September 13, 2012,

Accepted: September 17, 2012.

* E-mail: gsyecom@kunsan.ac.kr

DOI <http://dx.doi.org/10.6112/kscfe.2012.17.3.099>

© KSCFE 2012

적용된 HLLC-type 스킴[17]을 사용하여야 한다. 따라서 본 논문에서는 6-방정식 확산경계모델을 사용한다.

6-방정식 확산경계모델은 7-방정식 모델[4, 5]에서 두 상의 속도가 같다는 가정을 통해 유도할 수 있다. 이 모델은 Kapila 등[8]의 논문에서 처음 제시되었는데, 최종적으로 5-방정식 모델을 유도하는 과정 중에 제시된 중간 모델이다. 6-방정식 모델은 경계면에서 두 상의 압력에 대한 평형 조건을 만족시켜 주기 위해 압력이완 연산자(pressure relaxation operator)를 사용해야만 하는데, 따라서 5-방정식 모델에 비해 계산비용이 다소 비싸다. Saurel 등[6]은 6-방정식 모델의 물리적인 의미 및 수치해법을 제시하고, 이를 이용하여 이상유동(two-phase flow) 충격파관 문제 등을 해석하였다. 이 후 Zein 등[7]은 Saurel 등[6]의 6-방정식 모델에 상변화 모델을 추가하여 압축성 액체의 상변화 문제를 해석하였다.

지금까지 6-방정식 확산경계 모델은 경화기체(stiffened-gas) 상태방정식에 대해서만 발표되었다[6, 7]. 일반적으로 압축성 고체는 Cochran-Chan(CC) 상태방정식[11]과 같은 복잡한 상태방정식을 사용하는데, 이를 기존의 6-방정식 모델에 그대로 적용하기에는 상당한 어려움이 따른다. 이는 기존의 모델에 단순히 상태방정식 부분만 바꾸어 준다고 해서 되는 것이 아니라 모델의 많은 부분을 수정해야 하기 때문이다. 특히 압력이완 기법은 완전히 다른 방법을 사용해야 한다. 비록 Saurel 등[6]의 논문에서 6-방정식 모델에 CC 상태방정식이 적용된 액체의 충격파관 문제의 계산결과를 보여주었지만 고체는 계산하지 않았으며, 결정적으로 6-방정식 모델을 CC 상태방정식에 대해 확장하는 방법을 제시하지 않았다.

따라서 본 논문에서는 압축성 고체 및 액체 모두에 대해 적용할 수 있도록 기존의 6-방정식 확산경계 모델을 CC 상태방정식에 대해 확장하는 방법을 자세히 유도하고 해석 코드를 개발하고자 한다. 이렇게 개발된 코드를 기존의 연구결과와 비교 검증하고, 고체와 액체의 고속 충돌에 따른 충격파 문제를 해석한다.

2. 6-방정식 확산경계 다상유동 모델

압축성 다상유동 해석을 위한 6-방정식 확산경계 다상유동 모델[6]은 한 개의 속도와 두 개의 압력을 가지며, 지배방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = \mu(p_1 - p_2) \quad (1.a)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 u)}{\partial x} = 0 \quad (1.b)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 u)}{\partial x} = 0 \quad (1.c)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0, \quad (1.d)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 e_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 e_1 u)}{\partial x} + \alpha_1 p_1 \frac{\partial u}{\partial x} = -\mu p_1 (p_1 - p_2) \quad (1.e)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 e_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 e_2 u)}{\partial x} + \alpha_2 p_2 \frac{\partial u}{\partial x} = \mu p_2 (p_1 - p_2) \quad (1.f)$$

여기서

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$$

$$\rho e = \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2$$

$$p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$$

$$p_I = (Z_2 p_1 + Z_1 p_2) / (Z_1 + Z_2)$$

$$Z_k = \rho_k c_k, \quad (k=1,2)$$

여기서 α 는 부피비, ρ 는 밀도, u 는 속도, e 는 내부에너지, p_I 는 계면압력, μ 는 압력이완 계수, c 는 음속을 나타낸다. 부피비는 식 $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ 를 만족한다.

식 (1.b)-(1.f)를 정리하면 혼합에너지에 대한 추가적인 보존방정식을 얻을 수 있다. 이 식은 유동에 충격파가 발생할 경우 내부에너지식 (1.e)와 (1.f)의 비보존항에 의해 발생하는 수치적인 오류를 수정하는데 사용되며 나중에 자세히 설명한다.

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(u(\rho E + p))}{\partial x} = 0 \quad (1.g)$$

여기서 E 는 다음과 같다.

$$E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2$$

$$Y_1 = (\alpha_1 \rho_1) / \rho, \quad Y_2 = (\alpha_2 \rho_2) / \rho$$

각각의 상에서 음속은 다음과 같이 정의된다.

$$c_k \equiv \left[\frac{p_k}{\rho_k^2} - \left(\frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right)_{p_k} \right] / \left(\frac{\partial p_k}{\partial \rho_k} \right)_{p_k}, \quad (k=1,2) \quad (2)$$

지배방정식 (1.a)-(1.f)는 수학적으로 쌍곡형(hyperbolic) 형태이며, 다음과 같은 실수 고유치를 가진다.

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u + c$$

여기서 혼합음속은 $c = \sqrt{Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2}$ 로 주어진다.

3. 압축성 고체 및 액체의 상태방정식

고체 또는 액체 속을 통과하는 충격파를 모사하기 위해서

는 적절한 상태방정식을 이용하여 압축성 유체로 취급하여야 한다. 고체 또는 액체에 대한 상태방정식으로는 경화기체 상태방정식과 Cochran-Chan 상태방정식 등이 주로 사용된다[11, 12]. CC 상태방정식은 경화기체 상태방정식에 비해 그 형태가 다소 복잡하지만 더 정확하며, 특히 압축성 고체에 더 적합하다[4]. 따라서 본 연구에서는 CC 상태방정식을 사용하며 이를 Mie-Grüneisen 형태로 나타내면 다음과 같다[11, 12].

$$p(\rho, e) = \rho \Gamma (e - e_{ref}(\rho)) + p_{ref}(\rho) \quad (3)$$

여기서

$$e_{ref}(\rho) = \frac{A_1}{\rho_{ref}(E_1 - 1)} \left(\frac{\rho}{\rho_{ref}} \right)^{E_1 - 1} - \frac{A_2}{\rho_{ref}(E_2 - 1)} \left(\frac{\rho}{\rho_{ref}} \right)^{E_2 - 1}$$

$$p_{ref}(\rho) = A_1 \left(\frac{\rho}{\rho_{ref}} \right)^{E_1} - A_2 \left(\frac{\rho}{\rho_{ref}} \right)^{E_2}$$

여기서 Γ 는 Grüneisen 계수, ρ_{ref} 는 기준 밀도를 의미하고, 나머지 A_1, A_2, E_1, E_2 는 상수값을 나타낸다. CC 상태방정식에서 음속은 다음과 같이 주어진다.

$$c^2 = \frac{A_1(E_1 - 1 - \Gamma) \left(\frac{\rho}{\rho_{ref}} \right)^{E_1} - A_2(E_2 - 1 - \Gamma) \left(\frac{\rho}{\rho_{ref}} \right)^{E_2} + (\Gamma + 1)p}{\rho} \quad (4)$$

4. 수치 기법

지배방정식 (1.a)-(1.g)는 연산자 분리기법을 사용하여 편미분 방정식 항과 소스항을 분리하여 다음과 같이 풀다.

$$U_i^{n+1} = L_S^{\Delta t/2} L_H^{\Delta t} L_S^{\Delta t/2} U_i^n \quad (5)$$

여기서 L_H 는 편미분 방정식 항에 대한 쌍곡형 연산자(hyperbolic operator)를, L_S 는 소스 연산자(source operator)를 의미한다. 쌍곡형 연산자는 Godunov 방법을 이용하여 다음과 같이 차분화 된다[6].

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^* - F_{i-1/2}^*) \quad (6)$$

$$\alpha_{1,i}^{n+1} = \alpha_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[(u\alpha_1)_{i+1/2}^* - (u\alpha_1)_{i-1/2}^* - \alpha_{1,i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right] \quad (7)$$

$$(\alpha p e)_{k,i}^{n+1} = (\alpha p e)_{k,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[(\alpha p e u)_{k,i+1/2}^* - (\alpha p e u)_{k,i-1/2}^* - (\alpha p)_{k,i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right] \quad (8)$$

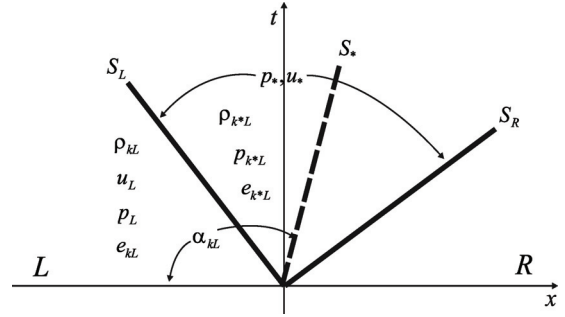


Fig. 1 Multiphase HLLC-type Riemann solver

여기서

$$U = \begin{pmatrix} \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \alpha_1 \rho_1 u \\ \alpha_2 \rho_2 u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix}$$

여기서 $()_{i+1/2}^*$ 은 격자 경계면에서의 유동 변수값을 나타내며, 이는 리만해법(Riemann solver)으로 구할 수 있다. 본 연구에서는 다상유동에 맞도록 수정된 HLLC-type 리만해법을 이용한다.

4.1 HLLC-type 리만해법

본 지배방정식이 쌍곡형 형태이며 세 개의 실수 고유치를 가지므로, Fig. 1과 같이 왼쪽(L)과 오른쪽(R) 격자의 경계면을 기준으로 세 개의 파를 고려한다.

이때 각각의 파의 속도는 다음과 같이 계산된다[13].

$$S_L = \min \{ u_L - c_L, u_R - c_R \} \quad (9)$$

$$S_R = \max \{ u_L + c_L, u_R + c_R \} \quad (10)$$

$$S_* = \frac{p_R - p_L + \rho_L u_L (S_L - u_L) - \rho_R u_R (S_R - u_R)}{\rho_L (S_L - u_L) - \rho_R (S_R - u_R)} \quad (11)$$

여기서 c, p 와 ρ 는 혼합음속, 혼합압력과 혼합밀도를 의미한다. Fig. 1의 중간 영역에서 p^*, u^* 그리고 ρ_{k*} 값은 단상유동의 HLLC 리만해법을 이용하여 다음과 같이 구할 수 있다.

$$p^* = p_L + \rho_L (S_L - u_L) (S_* - u_L) \quad (12)$$

$$u^* = S_* \quad (13)$$

$$\rho_{*X} = \rho_{kX} \left(\frac{S_X - u_X}{S_X - u^*} \right), \quad (X = L \text{ or } R) \quad (14)$$

하지만, 나머지 변수들 p_{k^*X} 과 e_{k^*X} 은 단상유동의 HLLC 리만해법으로는 구할 수 없다. 이는 유동에 충격파가 있을 경우, 내부에너지에 대한 식 (1.e)와 (1.f)의 비보존항(non-conservative term)으로 인해 충격과 전후 각각의 상에 대한 내부에너지 및 압력의 관계를 정확히 결정하기가 어렵기 때문이다. 이를 해결하고자 Saurel 등[6]은 Hugoniot 근사 모델을 도입하여 다음과 같은 충격과 전후의 jump condition을 제시하였다.

$$e_k - e_k^0 + \frac{p_k + p_k^0}{2} \left(\frac{1}{\rho_k} - \frac{1}{\rho_k^0} \right) = 0 \quad (15)$$

Saurel 등[6]은 위 식과 경화기체 상태방정식을 이용하여 각 상의 압력에 대한 식을 유도하였다. 하지만 CC 상태방정식에서는 Saurel 등[6]의 식을 그대로 사용할 수 없다. CC 상태방정식에서는 각 상의 압력 p_{k^*X} 에 대한 식이 다음과 같이 유도된다.

$$p_{k^*X} = \frac{A + B + C}{\Gamma_k \rho_{k^*X} - (\Gamma_k + 2) \rho_{kX}}, \quad (X = L \text{ or } R) \quad (16)$$

여기서

$$\begin{aligned} A &= [\Gamma_k \rho_{kX} - (\Gamma_k + 2) \rho_{k^*X}] p_{kX} \\ B &= 2\Gamma_k \rho_{k^*X} \rho_{kX} [e_{ref}(\rho_{k^*X}) - e_{ref}(\rho_{kX})] \\ C &= 2[\rho_{k^*X} p_{ref}(\rho_{kX}) - \rho_{kX} p_{ref}(\rho_{k^*X})] \end{aligned}$$

각 상의 내부에너지는 p_{k^*X} 및 CC 상태방정식을 이용하여 다음과 같이 계산된다.

$$e_{k^*X} = e_{k^*X}(\rho_{k^*X}, p_{k^*X}). \quad (17)$$

이렇게 구한 압력 및 내부에너지는 근사적인 값으로 압력이완 과정을 적용하기 전 초기값으로 사용되며, 이후 혼합에너지 보존방정식 (1.g)에 의해 정확히 보정된다.

부피비 α 는 이완항(relaxation terms)이 없을 경우 6-방정식 모델의 수학적 성질로부터 중간파(intermediate wave) S_* 에 의해서만 변하게 된다[6]. 따라서 중간 영역에서의 α 는 다음과 같다.

$$\alpha_{k^*X} = \alpha_{kX}, \quad (X = L \text{ or } R) \quad (18)$$

최종적으로 격자 경계면에서의 유동 변수는 파의 속도에 따라서 다음과 같이 결정된다.

$$W_{i+1/2}^{HLLC} = \begin{cases} W_L, & 0 \leq S_L \\ W_L^*, & S_L \leq 0 \leq S_* \\ W_R^*, & S_* \leq 0 \leq S_R \\ W_R, & 0 \geq S_R \end{cases} \quad (19)$$

여기서 $W = (\alpha_k, \rho_k, u_k, p_k, e_k)$ 이다.

4.2 Cochran-Chan 상태방정식에 대한 압력이완 기법

6-방정식 확산경계 모델은 각각의 상에 해당하는 두 개의 압력을 포함하고 있기 때문에 상 경계에서 압력평형 조건을 만족시키기 위해 압력이완 과정이 필요하다. 압력평형 조건은 지배방정식 (1.a)-(1.g)의 소스항 형태로 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \mu(p_1 - p_2) \quad (20.a)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} = 0 \quad (20.b)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2)}{\partial t} = 0 \quad (20.c)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = 0 \quad (20.d)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 e_1)}{\partial t} = -\mu p_1 (p_1 - p_2) \quad (20.e)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 e_2)}{\partial t} = \mu p_1 (p_1 - p_2) \quad (20.f)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} = 0 \quad (20.g)$$

여기서 압력이완 계수 μ 의 역수는 압력이완 시간(pressure relaxation time)을 나타내며, 이는 서로 다른 두 상의 압력이 평형상태에 도달하는데 걸리는 시간을 의미한다. 만약 μ 가 매우 큰 값을 갖게 되면 압력이완 시간은 0에 가깝게 되며, 두 상의 압력은 즉시 평형상태에 도달 한다고 생각할 수 있다. 압력이완 시간은 유동조건에 따라 그 값이 변하기 때문에 그 시간을 정확히 예측하기는 매우 어려운데, Kapilar 등[8]은 근사적으로 압력이완 시간이 $\Delta t \sim 0.03 \mu s$ 정도라고 예측하였다. 일반적으로 이 시간은 CFL 조건에 의한 Δt 보다 작은 값이기 때문에, 대부분의 연구자들[4-7]은 순간압력이완(instantaneous pressure relaxation) 기법($\Delta t \rightarrow 0$ or $\mu \rightarrow \infty$)을 사용하였다.

Saurel 등[6]은 6-방정식 모델에 압력 함수를 이용하여 다음과 같은 순간압력이완 기법을 사용하였다.

$$f(p) = \alpha_1 + \alpha_2 - 1 = \frac{(\alpha \rho)_1^0}{\rho_1} + \frac{(\alpha \rho)_2^0}{\rho_2} - 1 = 0 \quad (21)$$

$$\rho_k(p) = \rho_k^0 \frac{p + \gamma_k p_{\infty,k} + (\gamma_k - 1) \bar{p}_I}{p_k^0 + \gamma_k p_{\infty,k} + (\gamma_k - 1) \bar{p}_I} \quad (22)$$

여기서 γ 와 p_{∞} 는 경화기체 상태방정식의 상수값이고, $\bar{p}_I = p$ 로 근사된다. 이 방법은 평형압력 p 를 root finding 알고리즘을 이용하여 한 번에 구할 수 있다는 장점이 있지만, 경화기체 상태방정식과 같이 특수한 형태의 상태방정식에만 사용할 수 있다는 제약이 있다. 예를 들어, CC 상태방정식에서는 밀도가 압력의 양함수(explicit function) 형태, $\rho = \rho(p)$ 로 표현되지 않으므로 이 방법을 적용할 수 없다. 따라서 본 논문에서는 압력에 대한 함수 $f(p)$ 대신에 부피비에 대한 함수 $f(\alpha_1)$ 를 이용하는 다른 압력이완 기법[4]을 고려한다.

소스항 (20.a)-(20.g)를 정리하면 다음의 식을 얻을 수 있다.

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} = - \frac{p_I}{(\alpha_1 \rho_1)^0} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} \quad (23)$$

$$\frac{\partial e_2}{\partial t} = \frac{p_I}{(\alpha_2 \rho_2)^0} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} \quad (24)$$

위 식을 근사적으로 적분하면 다음과 같다.

$$e_1 = e_1^0 - \frac{\bar{p}_I}{(\alpha_1 \rho_1)^0} (\alpha_1 - \alpha_1^0) \quad (25)$$

$$e_2 = e_2^0 - \frac{\bar{p}_I}{(\alpha_2 \rho_2)^0} (\alpha_2 - \alpha_2^0) \quad (26)$$

여기서 평균압력은 아래와 같이 정의된다.

$$\bar{p}_I = \frac{p_I^0 + p_I}{2}$$

여기서 위첨자 0은 압력이완을 적용하기 직전의 상태를 의미한다. 또한 식 (20.b)과 (20.c)로부터 밀도는 다음과 같다.

$$\rho_1 = \frac{(\alpha_1 \rho_1)^0}{\alpha_1} \quad (27)$$

$$\rho_2 = \frac{(\alpha_2 \rho_2)^0}{\alpha_2} \quad (28)$$

압력평형 조건($p_1 = p_2$)과 CC 상태방정식 식 (3), 그리고 식 (25)-(28)로부터 부피비 α_1 에 대한 다음과 같은 함수를 얻을 수 있다.

$$f(\alpha_1, \bar{p}_I) = p_1 - p_2 = 0 \quad (29)$$

여기서

$$p_k = \frac{(\alpha_k \rho_k)^0}{\alpha_k} \Gamma_k \left(e_k^0 - \frac{\bar{p}_I}{(\alpha_k \rho_k)^0} (\alpha_k - \alpha_k^0) - e_{ref,k} \right) + p_{ref,k}$$

$$e_{ref,k} = \frac{A_{1k}}{\rho_{ref,k} (E_{1k} - 1)} \left(\frac{(\alpha_k \rho_k)^0}{\rho_{ref,k} \alpha_k} \right)^{E_{1k} - 1} - \frac{A_{2k}}{\rho_{ref,k} (E_{2k} - 1)} \left(\frac{(\alpha_k \rho_k)^0}{\rho_{ref,k} \alpha_k} \right)^{E_{2k} - 1}$$

$$p_{ref,k} = A_{1k} \left(\frac{(\alpha_k \rho_k)^0}{\rho_{ref,k} \alpha_k} \right)^{E_{1k}} - A_{2k} \left(\frac{(\alpha_k \rho_k)^0}{\rho_{ref,k} \alpha_k} \right)^{E_{2k}}$$

부피비에 대한 함수 식(29)는 Brent 법[14]과 같은 root finding 알고리즘을 이용하여 구할 수 있는데, 여기서 \bar{p}_I 는 이전 단계의 p_I 를 사용한다. 이 때 \bar{p}_I 를 새로운 값으로 대입하면서 α_1 이 수렴할 때까지 반복 계산한다.

전체 계산 알고리즘을 요약하면 다음과 같다.

step 1. Initial guess: $p_I^1 = p_I^0$

step 2. Calculate $(\bar{p}_I)^n = \frac{p_I^0 + p_I^n}{2}$

step 3. Solve α_1^{n+1} using $f(\alpha_1^{n+1}, (\bar{p}_I)^n) = 0$, 식 (29)

step 4. Convergence test: $\frac{|\alpha_1^{n+1} - \alpha_1^n|}{|\alpha_1^{n+1}|} \leq \epsilon (\approx 10^{-15})$

step 5. If not converged, update variables at (n+1) step and go to Step 2

4.3 압력 보정

앞서 잠시 언급한 바와 같이 쌍곡형 연산자 및 압력이완 과정을 통해 구한 평형압력은 내부에너지의 비보존함으로 인해 수치적으로 다소 부정확하다. 따라서 혼합에너지식 (1g)를 이용하여 정확히 보정해 주는 것이 필요하다. 식 (1g)은 보존식 형태로 주어지기 때문에 유동에 충격파가 있을 경우에 Rankine-Hugoniot 관계를 이용하면 혼합에너지를 정확하게 계산할 수 있다. 따라서 이를 이용하여 평형압력과 이에 따른 각 상의 내부에너지를 보정한다.

혼합에너지식을 계산하기 위해서는 혼합 상태방정식 (mixture equation of state)을 사용해야 하는데, Saurel 등[6]은 경화기체 상태방정식 일 경우에 대해서만 혼합상태방정식을 제시하였으며, 이는 본 논문에서와 같이 CC 상태방정식일 경우에는 그 식을 이용할 수 없다.

혼합내부에너지는 $pe = \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2$ 로 정의되며, 각 상의 상태방정식과 압력평형조건($p_1 = p_2 = p$)을 이용하면 혼합내부에너지와 압력에 대한 관계식(혼합상태방정식)을 얻을

수 있다. CC 상태방정식을 적용하면 평형압력 p 에 대한 다음과 같은 보정식을 얻을 수 있다.

$$p = \left[\rho e - \alpha_1 \rho_1 e_{ref,1}(\rho_1) - \alpha_2 \rho_2 e_{ref,2}(\rho_2) + \frac{\alpha_1 p_{ref,1}(\rho_1)}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2 p_{ref,2}(\rho_2)}{\Gamma_2} \right] / \left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \right). \quad (30)$$

여기서 ρe 는 혼합에너지 보존식 (1g)로부터 구하며, 나머지 변수는 압력이완 과정을 통해 얻은 값을 사용한다. 보정압력으로부터 각 상의 내부에너지 $e_k = e_k(\rho_k, p_k)$ 도 수정된다.

4.4 2차 정확도 확장

1차 정확도의 Godunov 방법을 MUSCL-Hancock 기법[13]을 이용하여 2차 정확도로 확장하고, 충격파와 같은 불연속면에서의 해의 진동을 억제하기 위해서 limited slope을 이용한다. MUSCL-Hancock 기법은 네 단계로 구성되며 간략히 정리하면 다음과 같다.

step 1. Limited slope

$$\Delta_i^- = W_i^n - W_{i-1}^n \quad \text{and} \quad \Delta_i^+ = W_{i+1}^n - W_i^n$$

$$\overline{\Delta}_i = \begin{cases} \max\{0, \min(\beta \Delta_i^-, \Delta_i^+)\}, \Delta_i^+ > 0 \\ \min\{0, \max(\beta \Delta_i^-, \Delta_i^+)\}, \Delta_i^+ < 0 \end{cases}$$

여기서, $\beta = 1$ 이면 minmod limiter, $\beta = 2$ 이면 superbee limiter이다.

step 2. Data reconstruction

$$W_{i,L}^n = W_i^n - \frac{1}{2} \overline{\Delta}_i \quad \text{and} \quad W_{i,R}^n = W_i^n + \frac{1}{2} \overline{\Delta}_i$$

step 3. Evolution during a half time step

$$W_{i,X}^{n+1/2} = W_{i,X}^n + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} [W_{i,L}^n - W_{i,R}^n], \quad (X=L \text{ or } R)$$

step 4. Riemann problem

$$F_{i+1/2}^* = F_{i+1/2}^*(W_{i,R}^{n+1/2}, W_{i+1,L}^{n+1/2})$$

5. 계산 결과

개발된 다상유동 코드를 이용하여 액체 니트로메탄 (nitromethane), 고체 구리, 고체 폭발물에 대한 충격파 전파 문제를 계산한다. 계산에 사용된 세 물질에 대한 CC 상태방정식의 상수값들은 Table 1에 정리되어 있다. 모든 계산에서 minmod limiter를 사용하였다. 확산경계모델에서 단상유체는

다른 상의 부피비에 매우 작은 값을 주어 모사하는데, 여기서는 $\epsilon = 10^{-8}$ 을 사용한다.

5.1 액체 니트로메탄의 충격파관 문제

첫 번째 검증 문제로 액체 니트로메탄의 충격파관 문제를 계산한다[6, 15]. 초기에 격막의 왼쪽은 매우 고압의 액체 니트로메탄이 오른쪽은 저압의 액체 니트로메탄으로 이루어진 충격파관을 고려한다. 순간적으로 격막이 터지면서 액체 속으로 충격파, 팽창파, 물질경계면이 발생하여 전파되어 나간다.

충격파관의 길이는 1 m 이고 격막은 왼쪽으로부터 0.6 m 에 위치하며, 액체 니트로메탄의 초기 조건은 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_L = \begin{pmatrix} 1134 \text{ kg/m}^3 \\ 0 \text{ m/s} \\ 20 \text{ GPa} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_R = \begin{pmatrix} 1200 \text{ kg/m}^3 \\ 0 \text{ m/s} \\ 0.2 \text{ MPa} \end{pmatrix}$$

Fig. 2(a)는 $t = 67 \mu\text{s}$ 에서 본 코드를 사용하여 계산한 결과이고, Fig. 2(b)는 Saurel 등[6]의 계산결과이다. 여기서 CFL=0.4를 사용하였다. 이 그림에서 왼쪽으로 진행되는 팽창파, 오른쪽으로 진행되는 물질경계면과 충격파가 잘 계산되며 두 결과가 매우 잘 일치하는 것을 알 수 있다.

5.2 고체 구리와 고체 폭발물의 충돌 문제

두 번째 검증 문제로 고속의 구리판이 고체 폭발물과 충돌하여 폭발물 및 구리 속으로 두 개의 강력한 충격파가 서로 다른 방향으로 전파되는 문제를 고려한다. 이 문제는 Saurel & Abgrall[4]이 7-방정식 확산경계 모델, Shyue[16]가 압축성 다물질(multicomponent) 모델을 이용하여 계산하였다.

계산영역은 1 m이고 왼쪽으로부터 0.5 m 지점에서 충돌이 일어난다. 왼쪽은 고체 구리가 오른쪽은 고체 폭발물이 위치해 있으며 초기 조건은 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_L = \begin{pmatrix} 8900 \text{ kg/m}^3 \\ 1500 \text{ m/s} \\ 101.3 \text{ kPa} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_R = \begin{pmatrix} 1840 \text{ kg/m}^3 \\ 0 \text{ m/s} \\ 101.3 \text{ kPa} \end{pmatrix}$$

Table 1 Parameters of the Cochran-Chan equation of state for liquid nitromethane, solid copper, and solid explosive [4, 6]

| | Liquid Nitromethane | Solid Copper | Solid Explosive |
|------------------------------|---------------------|--------------|-----------------|
| Γ | 1.19 | 2 | 0.93 |
| $\rho_{ref} (\text{kg/m}^3)$ | 1134 | 8900 | 1840 |
| $A_1 (\text{GPa})$ | 0.819181 | 145.667 | 12.871 |
| $A_2 (\text{GPa})$ | 1.50835 | 147.751 | 13.4253 |
| E_1 | 4.52969 | 2.994 | 4.1 |
| E_2 | 1.42144 | 1.994 | 3.1 |

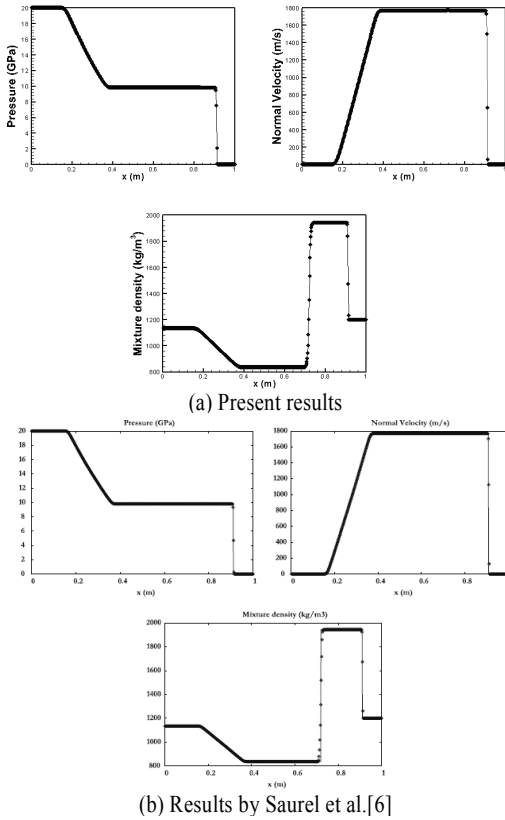


Fig. 2 Shock tube problem for liquid nitromethane (500 grid cells)

예비 계산 결과, 이 문제를 2차 정확도에서 수렴시키기에 다소 어려운 점이 있었다. 이는 압력이완과정에서 negative 압력이 나타나기 때문이다. 이를 해결하고자 부피비 α_1 에 대해서만 1차 정확도로 유지하고, 나머지 유동변수는 2차 정확도를 그대로 유지하는 방법을 사용하였다. 이를 위해 slope limiter 값을 $\overline{\Delta}_i(\alpha_1) = 0$ 으로 고정시켰다.

Fig. 3(a)는 $t = 85 \mu s$ 에서 본 코드의 계산결과와 엄밀해를 비교한 그림이며, Fig. 3(b)는 Shyue[16]의 계산결과이다. CFL 값은 0.7을 사용하였다. Fig. 3에서 혼합 열적 내부에너지 (mixture thermal internal energy), e_T 는 다음과 같다[16].

$$e_T = Y_1 e_{T,1} + Y_2 e_{T,2}$$

여기서

$$e_{T,k} = \frac{p - p_{ref,k}}{\rho_k \Gamma_k}, \quad (k=1,2)$$

이 그림에서 왼쪽으로 진행되는 충격파와 오른쪽으로 진행

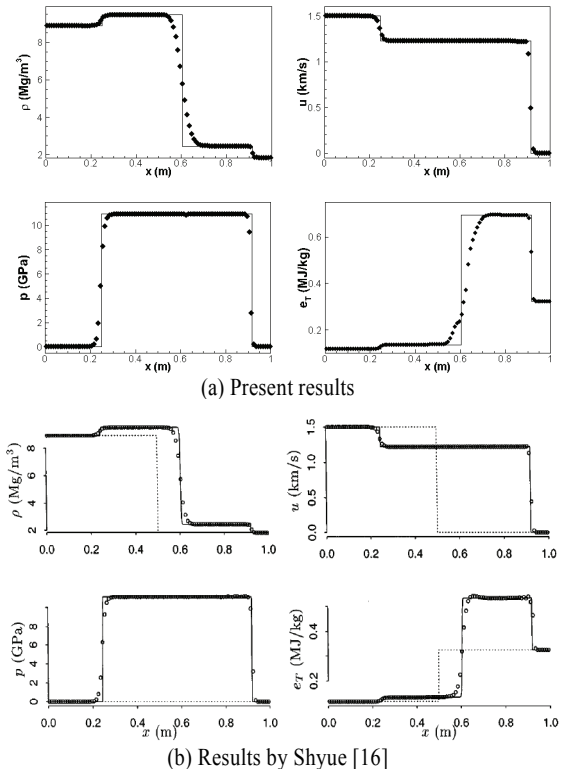


Fig. 3 Impact problem of a copper plate on an inert solid explosive (100 grid cells)

하는 충격파 및 물질경계면이 잘 나타나며 본 코드의 계산 결과가 엄밀해 및 Shyue[16]의 결과와도 서로 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 단, 본 코드의 결과에서 물질경계면의 확산이 다소 크게 나타나는데, 이는 α_1 에 대해서 1차 정확도로 고정시켰기 때문이다. 하지만 두 개의 서로 다른 충격파들은 매우 정확히 계산된다.

5.3 고체 구리와 액체 니트로메탄의 충돌 문제

마지막으로 고속의 고체 구리가 정지되어 있는 액체 폭발물에 충돌하는 문제를 고려한다. 이 문제는 앞의 문제와 유사하지만 고체 폭발물 대신에 액체 니트로메탄을 사용하며 이전에 계산된 적이 없는 새로운 문제이다. 충돌에 의해서 액체 폭발물 및 구리 속으로 강력한 충격파가 발생하여 각각 반대 방향으로 전파되고 물질경계면이 충돌방향으로 이동하게 된다.

계산 영역은 1 m이고 충돌은 왼쪽으로부터 0.5 m 지점에서 발생한다. 왼쪽에 위치한 구리와 오른쪽에 위치한 액체 니트로메탄의 초기 조건은 다음과 같다.

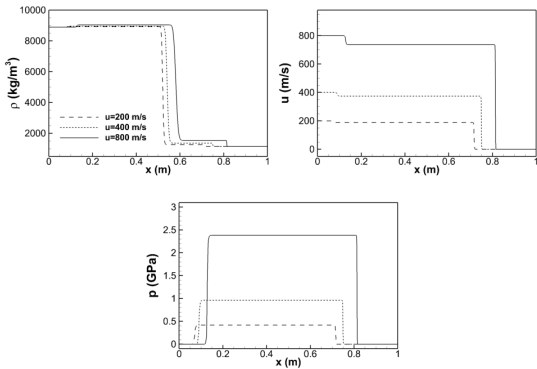


Fig. 4 Impact problem of a copper plate on liquid nitromethane for the impact velocities, $u = 200, 400, \text{ and } 800 \text{ m/s}$ (1000 grid cells)

$$\begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_L = \begin{pmatrix} 8900 \text{ kg/m}^3 \\ u_c \\ 101.3 \text{ kPa} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix}_R = \begin{pmatrix} 1137 \text{ kg/m}^3 \\ 0 \text{ m/s} \\ 101.3 \text{ kPa} \end{pmatrix}$$

계산에 사용된 코드는 바로 이전의 문제와 같은 조건으로 설정하였다.

먼저, 구리의 충돌 속도 u_c 가 200 m/s , 400 m/s , 그리고 800 m/s 일 때 전파되는 파의 모습을 살펴보았다. Fig. 4는 $t = 110 \mu\text{s}$ 에서 1000개의 격자셀을 사용하여 계산한 결과이다. 이 그림에서 두 개의 서로 다른 충격파 및 물질경계면이 매우 잘 나타나며, 수치적인 진동 없이 잘 계산되는 것을 알 수 있다. 계산결과에서 충돌 속도가 빠를수록 액체 속을 지나가는 충격파의 전파 속도와 강도(압력비)가 증가하고, 물질경계면의 속도도 증가하는 것을 알 수 있다. 특히, 충돌 속도가 변함에 따라 충격파 전후의 압력 변화는 매우 크지만, 밀도 변화는 상대적으로 매우 작다는 것을 알 수 있다. 이는 기체와 달리 액체와 고체는 압축률이 매우 작기 때문인데, 본 계산 결과는 그 특징을 잘 보여준다.

Fig. 5는 여러 가지 구리의 충돌 속도 u_c 에 대한 액체 니트로메탄 속을 진행하는 충격파의 속도 U_s 를 계산한 그래프이다. 이 그래프에서 액체 속의 충격파 속도는 구리의 충돌 속도에 대해 거의 선형적으로 비례한다는 것을 알 수 있으며, 직선으로 fitting 하면 $U_s = 1.5075u_c + 1654.9$ 의 상관식을 얻을 수 있다. 대부분의 순수 액체와 순수 고체에서 충격파와 속도와 충돌 속도가 실험 및 이론적으로 선형적으로 비례한다고 알려져 있다. 따라서 대부분의 EOS는 이를 기반으로 하여 만들어져있으며, CC-EOS 역시 이를 바탕으로 만들어져 있기 때문에 본 계산에서도 선형성이 잘 나타나는 것을 재확인할 수 있었다.

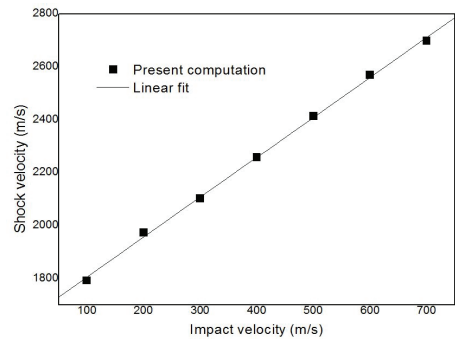


Fig. 5 Impact velocity of a copper plate vs. shock velocity propagating into liquid nitromethane

6. 결 론

본 논문에서는 확장된 6-방정식 확산경계 압축성 다상유동 모델을 이용하여 고체 및 액체에서의 충격파 전파를 해석하였다. 압축성 고체 및 액체를 정확히 모사하기 위해서 Cochran-Chan(CC) 상태방정식을 도입하였으며 이를 기존의 6-방정식 확산경계 모델에 적용하기 위해서 1) 다상유동 HLLC-type 리만해법을 수정하고, 2) 부피비 함수 기반의 압력이완 기법을 6-방정식 모델에 새롭게 적용하였으며, 3) 혼합 CC 상태방정식을 유도하고 이에 따른 압력 보정식을 제시하였다. 또한 1차 정확도의 Godunov 스킴을 MUSCL-Hancock 방법과 limited slope을 이용하여 2차 정확도로 확장하였다.

개발된 코드를 검증하기 위해서 액체 니트로메탄의 충격파관 문제 및 고체 구리와 고체 폭발물의 충돌 문제를 계산하고 기존의 결과와 비교하였다. 그 결과 개발된 코드가 기존의 결과와 잘 일치하였다. 이 코드를 이용하여 새로운 문제인 고체 구리와 액체 니트로메탄의 충돌 문제를 계산하였다. 충돌 속도가 증가함에 따라 액체 속으로 전파되는 충격파의 속도는 거의 선형적으로 증가하는 것을 알 수 있었고 그에 대한 상관식을 도출하였다.

본 연구에서 개발된 코드는 고체 및 액체 폭발물의 폭발, 고체의 고속 충돌 해석에 유용하게 사용될 수 있다. 또한 본 모델에 화학반응 모델이 추가되면, 충돌에 의한 폭발물의 점화, 데토네이션 등의 해석에도 유용하게 사용될 수 있을 것으로 판단된다.

후 기

이 논문은 2012학년도 군산대학교 신입교수 연구비 지원에 의하여 연구되었음.

참고문헌

- [1] 1996, Abgrall, R., "How to Prevent Pressure Oscillations in Multicomponent Flow Calculations: a Quasi Conservative Approach," *J. Comput. Phys.*, Vol.125, pp.150-160.
- [2] 1981, Hirt, C.W. and Nichols, B.D., "Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries," *J. Comput. Phys.*, Vol.39, pp.201-255.
- [3] 1999, Fedkiw, R., Aslam, T., Merriman, B. and Osher, S., "A Non-Oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method)," *J. Comput. Phys.*, Vol.152, pp.457-492.
- [4] 1999, Saurel, R. and Abgrall, R., "A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows," *J. Comput. Phys.*, Vol.150, pp.425-467.
- [5] 2001, Saurel, R. and LeMetayer, O., "A Multiphase Model for Compressible Flows with Interfaces, Shocks, Detonation Waves and Cavitation," *J. Fluid Mech.*, Vol.431, pp.239-271.
- [6] 2009, Saurel, R., Petitpas, F. and Berry, R.A., "Simple and Efficient Relaxation Methods for Interfaces Separating Compressible Fluids, Cavitating Flows and Shocks in Multiphase Mixtures," *J. Comput. Phys.*, Vol.228, pp.1678-1712.
- [7] 2010, Zein, A., Hantke, M. and Warnecke, G., "Modeling Phase Transition for Compressible Two-Phase Flows Applied to Metastable Liquids," *J. Comput. Phys.*, Vol. 229, pp.2964-2998.
- [8] 2001, Kapila, A.K., Menikoff, R., Bdzil, J.B., Son, S.F. and Stewart, D.S., "Two-Phase Modeling of Deflagration-to-Detonation Transition in Granular Materials: Reduced Equations," *Phys. Fluids*, Vol.13, pp.3002 - 3024.
- [9] 2008, Saurel, R., Petitpas, F. and Abgrall, R., "Modelling Phase Transition in Metastable Liquids: Application to Cavitating and Flashing Flows," *J. Fluid Mech.*, Vol.607, pp.313 - 350.
- [10] 2012, Yeom, G.S. and Chang, K.S., "New HLLC-Type Riemann Solver for the Compressible Six-Equation Two-Fluid Model," *Comput. Fluids*, accepted for publication.
- [11] 1979, Cochran, G. and Chan, J., "Shock Initiation and Detonation Models in One and Two Dimensions," *Lawrence Livermore National Laboratory Report*.
- [12] 1998, Saurel, R. and Massoni, J., "On Riemann-Problem-Based Methods for Detonations in Solid Energetic Materials," *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.26, pp.101-121.
- [13] 1999, Toro, E.F., *Riemann Solver sand Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*, Springer-Verlag, Berlin.
- [14] 1999, Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. and Flannery, B.P., *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing, 2nd ed.*, Cambridge University Press, New York.
- [15] 2007, Saurel, R., Franquet, E., Daniel, E. and LeMetayer, O., "A Relaxation-Projection Method for Compressible Flows. Part I: The Numerical Equation of State for the Euler Equations," *J. Comput. Phys.*, Vol.223, pp.822-845.
- [16] 2001, Shyue, K.M., "A Fluid-Mixture Type Algorithm for Compressible Multicomponent Flow with Mie-Gruneisen Equation of State," *J. Comput. Phys.*, Vol.171, pp.678-707.
- [17] 2011, Tian, B., Toro, E.F. and Castro, C.E., "A Path-Conservative Method for a Five-Equation Model of Two-Phase Flow with an HLLC-type Riemann Solver," *Comput Fluids*, Vol.46, pp.122-132.