

데토네이션 셀 구조 포착을 위한 격자 해상도 요구 조건

최정열* · Fuhua Ma** · Vigor Yang***

Grid Requirements for Capturing Detonation Cell Structure

Jeong-Yeol Choi* · Fuhua Ma** · Vigor Yang***

ABSTRACT

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 cell structure of detonation wave 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 capturing cell structures of the different regimes of the detonation phenomena.

초 록

데토네이션 파의 셀 구조를 모사하기 위한 격자 해상도 요구 조건을 파악하기 위하여 여러 영역의 데토네이션 현상에 대하여 반응 속도 상수와 격자 해상도를 바꾸어가며 일련의 해석을 수행 하였다. 서로 다른 영역의 데토네이션 현상에 대하여 정상 상태 ZND 구조와 계산 결과를 비교하여 살펴봄으로써, 최소 격자 크기와 계산 영역의 크기에 대한 결론을 도출하였다.

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

1. 서 론

데토네이션 파는 근본적으로 불안정하며, 이 결과 전방의 데토네이션 파와 횡단 충격파의 상호작용으로 나타나는 삼중점은 $x-t$ 선도 상에서 셀 구조의 궤적을 가진다. 일반적으로 실험에서

는 관의 내벽에 설치 한 그을음 막 기록(Smoked foil record)을 이용하여 이러한 특징을 포착하며, 셀의 크기와 형태는 반응물의 반응 속도 및 민감도를 이해하는 지표로 이용된다. 그을음 막 기록은 수치적 해석에 의해서도 재현이 가능하며, 통념상 셀 구조를 포착하였는지가 해석의 이용된 격자의 해상도를 판단하는 척도로 여겨지고 있다. 가시화가 쉽지 않은 데토네이션 현상의 특성상, 그동안 많은 수치적 연구에 의해서 데토네이션 파의 물리적 특징에 대한 이해가 이루어졌다.

* 부산대학교 항공우주공학과

** 펜실베니아주립대학교 기계공학과

*** 펜실베니아주립대학교 기계공학과
연락처자, E-mail: aerochoi@pusan.ac.kr

이 과정에서 데토네이션 현상을 포착하기 위한 격자 해상도에 대한 논의도 많이 있었으나, 아직 체계적으로 정리되지 않았다. 따라서 본 연구에서는 넓은 영역의 데토네이션 현상 영역에 대하여 격자 해상도 및 반응 속도 상수에 따른 최소 격자 요구 조건을 파악하기 위한 수치적 연구를 수행하였다.

2 연구 내용

2.1 지배방정식 및 반응 모델

다원 화학 반응에 의한 복잡한 반응 기구를 간단한 모델을 이용하여 해석하기 위하여 반응 진행 변수(reaction progress variable)를 도입하였다. 반응 진행 변수는 0부터 1사이의 값을 가지며 생성 질량 분율에 해당한다. 한편 혼합기와 생성물은 열역학적 물성이 상당히 차이 나므로 상수로 가정하기 어려워 Rankine-Hugoniot 관계식을 만족하는 반응 진행 변수의 함수로 가정하였다. 아울러 열 유체학적 특징을 편리하게 살피기 위하여 1단계 비가역 Arrhenius 반응 모델을 이용하였다. 지배방정식 및 해석 방법에 대한 좀더 구체적인 내용은 앞의 논문에 기술하였으므로 생략한다.

2.2 정상 상태 ZND 구조 해석

데토네이션 파의 기본적인 구조는 정상 상태 가정의 C-J(Chapmann-Jouguet) 조건에서 ZND 구조를 통하여 파악할 수 있다. 물론 데토네이션 파는 불안정한 특징을 지니지만, 비정상 상태는 C-J 조건 전후로 ZND 구조를 기준으로 진동함이 알려져 있다. ZND 구조는 비점성 유체의 일차원 지배 방정식인 Rankine-Hugoniot 관계식과 다음의 정상 상태 반응 속도 식을 연계하여 해석함으로써 구할 수 있다.

$$\frac{\partial Z}{\partial x} = (1-Z)k \exp\left(-\frac{E_p}{p}\right) \quad (1)$$

반응 속도 식은 공간에 대한 일계 미분 방정식이므로 4차 정확도의 4단계 Runge-Kutta (RK4) 방법을 이용하여 풀이 하였다. 정상 상태의 ZND

구조는 전산 유체 해석을 위한 초기 조건으로 이용하였으며, 격자 해상도 요구 조건의 파악에도 유용하게 이용되었다.

2.3 해석 조건

데토네이션 파의 불안정성은 무차원화 된 활성화 에너지 θ 를 이용하여 크게 강, 중, 약으로 구분한다. 본 연구에서는 Austin[1]에 의하여 제시된 자료 가운데 각각의 대표적인 혼합기를 선정하여 연구를 수행 하였으며, Table 1에 정리하였다.

Table 1. 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			
$\theta = 12.7$	$C_3H_8+5O_2+9N_2$	$\gamma_U = 1.336$	$\gamma_B = 1.161$

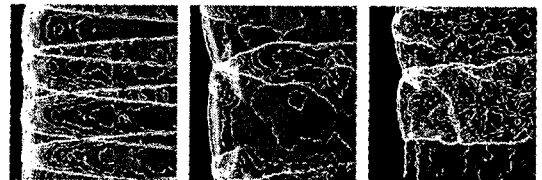


Fig. 2 Wave front structures of weakly(left), moderately(center) and highly(right) unstable detonation

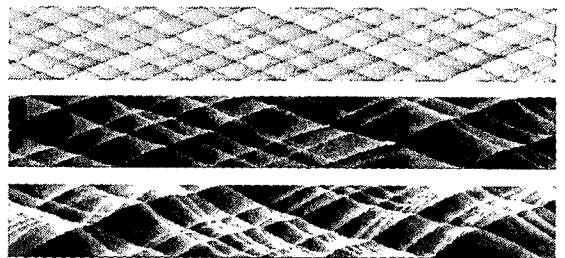


Fig. 3 Numerical smoked-foil records of weakly(top), moderately(center) and highly(bottom) unstable detonation

Figure 2 와 3는 각 경우의 대표적인 파면 구조와 그을음 막 기록을 예시한 그림이다. 약한 불안정의 경우 셀의 크기가 거의 일정하며, 중간 정도에서는 셀의 크기가 다소 불규칙하지만 일정

한 모양을 가지는 반면, 강한 불안정에서는 셀의 크기가 큰 범위에서 변하며 모양도 매우 불규칙한 특징을 보인다.

24 격자 해상도와 반응 속도 상수

격자 해상도는 반응 유동의 수치 연구에 있어서 매우 중요한 문제이나 모든 조건에서의 최적의 격자 조건을 찾는 것은 매우 지난한 일이다. 본 연구에서와 같이 단순 비가역 반응 모델을 이용하는 경우, 반응 속도 상수와 길이 척도 간에 scaling 법칙을 쉽게 도출할 수 있으며, 이를 이용하여 해상도의 영향을 살펴는 연구를 수행할 수 있다. Fig. 3은 서로 다른 반응 속도 상수에 대한 ZND 구조를 길이 척도를 달리한 그림으로, 활성화 에너지가 같은 조건에서 반응 속도 상수에 관계없이 ZND 구조는 동일한 형태를 가지며, 단지 같은 구조를 표시하는데 필요한 격자 해상도만이 차이가 있음을 알 수 있다. 이는 역으로 동일한 격자에서 반응 속도를 달리하는 것은 실제 파의 구조를 포착하는 해상도가 달라진다는 것을 의미한다.

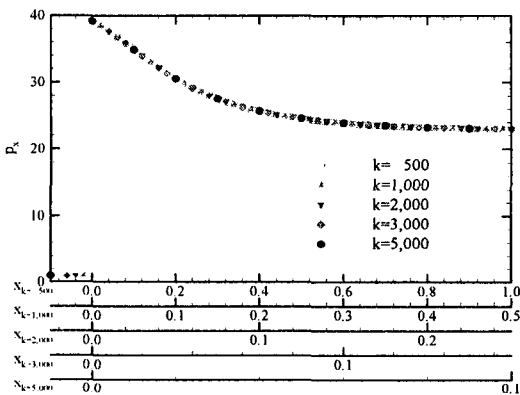


Fig. 4 Pressure profiles of ZND structures along the scaled coordinates depending on normalized reaction constants for weakly unstable detonations

25 Case Studies

격자 해상도에 따른 수치적 셀 구조 포착 여부 등에 대한 통계적 자료를 확보하기 위하여, 위에 언급한 강, 중, 약의 세 가지 불안정성에 대하여,

기본적으로 $\Delta x = 0.01, 0.005, 0.0025$ 의 세 가지 고정된 격자 체계를 이용하여, 무차원화 된 반응 속도 상수를 각각 500~20,000, 500~20,000, 100,000~2,000,000 사이에서 변화 시켜가며, 일련의 수치 해석을 수행 하였다.

이 결과 반응 속도 상수가 작은 경우에는 주어진 계산 영역 내에서 데토네이션 파가 포착되지 않고 출구로 밀려나가는 결과를 얻었으며, 반응 속도 상수가 큰 경우에는 정상상태의 ZND 구조가 포착되어, 중간 정도 범위에서 셀 구조를 포착할 수 있었다. 아울러 격자의 간격이 작은 경우는 해상도에 비례하여 더 큰 속도 상수에서도 셀 구조를 포착할 수 있었다.

셀 구조 포착을 위한 최소 격자 조건을 도출하기 이전에, 동일한 조건에서 시간 간격 및 격자 크기에 따른 수치적 민감도를 살펴보았다. 본 연구에 이용한 4차 정확도의 Runge-Kutta 기법의 경우, 본 연소 유동 해석에서 일반적으로 사용할 수 있는 안정된 최대 CFL 수는 0.5 였으며, 이 이하의 CFL 수에 대해서 시간 간격의 크기에 따른 셀 크기의 정확도 차이는 파악하기 곤란한 수준이었으며, von Neumann 최고 압력은 5% 이내의 차이만 보였다. 반면 동일한 조건에서 격자 크기에 따라서는 10% 이내에서 셀 크기의 차이를 보였으나, 특별한 경향성을 찾을 수는 없었다. 따라서 셀 구조를 포착할 수 있는 최대 격자 크기 이하에서 셀 크기는 해상도에 민감하지 않은 것으로 확인 되었다.

26 Detonation 셀 구조 해석의 최소 격자 조건

다음의 Fig. 5는 ZND 구조에서 반응 진행 변수의 변화를 도시한 그림이다. 그림에서 L_{ind} 와 L_{HR} 는 각각 반응 유도(induction) 영역과 발열(heat release) 영역의 길이이다. 이 그림에서 활성화 에너지에 따라 데토네이션 파의 불안정성이 커질수록 반응 유도부의 길이가 길어지고, 발열부의 크기가 상대적으로 작아짐을 알 수 있다. 일반적으로 해상도 요구 조건은 해의 구배에 비례하여 증가하므로, 격자 해상도는 발열부에 중점을 두어 살펴보아야 함을 알 수 있다. 따라서

본 연구에서는 기존에 일반적으로 반반응 길이 (half reaction length), $L_{1/2}$ 에 얼마나 많은 격자가 필요한 지 대신에, 발열영역 L_{HR} 에 포함된 격자 수를 살펴 보았다.

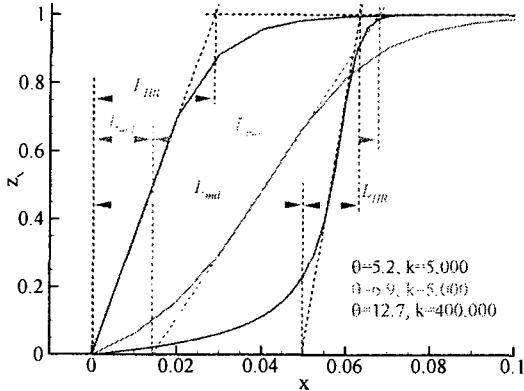


Fig. 5 Definitions and structures of Reaction zones for weakly, moderately and highly unstable detonations

Table 2 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	pts./ L_{HR}
Weakly unstable detonation ($\theta = 5.2$)		
301×101 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.01$)	k=5,000	2~3
501×201 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.005$)	k=10,000	2~3
901×401 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.0025$)	k=20,000	2~3
Moderately unstable detonation ($\theta = 6.9$)		
301×101 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.01$)	k=5,000	~5
† k=10,000 was possible (pts./ L_{HR} ~2.5) using ZND structure I.C. of k=5,000, but k=20,000 was not.		
901×401 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.0025$)	k=20,000	~5
Highly unstable detonation ($\theta = 12.7$)		
901×401 ($\Delta x_{min}=\Delta y=0.0025$)	k=400,000	~5
‡ k=1,000,000 was possible (pts./ L_{HR} ~2.5) using ZND structure I.C. of k=400,000, but k=2,000,000 was not.		

Table 2는 각 격자 해상도에서 셀 구조를 포착할 수 있었던 반응 속도 상수의 최대 값과 그 경우 정상 상태 ZND 구조의 발열 영역, L_{HR} 에 포함된 격자 수를 정리한 표이다. 이 결과에서 셀 구조를 포착할 수 있었던 경우, 정상 상태 ZND 구조의 반응 영역에 포함된 격자의 수는

반응 유도 영역이 없는 약한 불안정 조건에서는 2~3개, 그 밖의 경우에서 5개 정도임을 확인 할 수 있었다.

3. 결 론

여러 영역의 데토네이션 현상에 대하여 데토네이션 파의 셀 구조를 모사하기 위한 격자 해상도 요구 조건을 파악하기 위하여 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 20 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.

후 기

본 연구는 국방과학 연구소지원 고에너지 물질 센터의 HM-22 과제에 의하여 지원 받았으며, 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

1. Austin, J. M., Pintgen, F. and Shepherd, J.E., "Reaction Zones in Highly Unstable Detonations," Proceedings of the Combustion Institute, Vol.30/2, 2004.
2. Choi, J.-Y., Ma, F., and Yang, V. "Numerical Simulation of Cellular Structure of Two-Dimensional Detonation Waves ," AIAA Paper 2005-1174, 43rdAIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Jan. 10-13, 2005, Reno, NV.