

## 기체 상 데토네이션 셀 구조 해석을 위한 수치적 요구 조건

최정열,<sup>1</sup> 조덕래,<sup>2</sup> 이수한<sup>2</sup>

## NUMERICAL REQUIREMENTS FOR THE SIMULATION OF DETONATION CELL STRUCTURES

Jeong-Yeol Choi,<sup>1</sup> Deok-Rae Cho<sup>2</sup> and Su-Han Lee<sup>2</sup>

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- $\gamma$  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.

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

## 1. 서 론

기체상에 전파하는 데토네이션 파는 교란에 불안정하여 파면이 다차원 구조를 가진다. 다차원 파면 구조는 충격파의 상호작용에 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 특정 지워진다[1].

본 논문에서는 이전에 논의되었던 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) 구조에 대하여 간단한 해석적 해를 구하였으며 결과 값은 2차원 수치 해석에서의 초기 조건으로 이용하였다.

## 2. 연구 내용

## 2.1 지배방정식

반응 과정 변수를 도입한 압축성 비점성 유통에 대한 2차원 Euler 보존 방정식과 압력은 다음과 같이 표현된다.

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

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

생성물의 질량 분율을 나타내는 반응 진행 변수  $Z$ 는 0에서 1 사이의 값을 가진다.  $q$ 는 연소에 의한 발열량이다. 반응 진행 변수에 대한 비열비 값은 미연 상태와 기연 상태에서부터 보 간법에 의하여 구하였다. 비열비  $\gamma(Z)$ 는 보존법칙과 이상기체 가정을 만족하는  $Z$ 의 함수로 정의된다.

데토네이션파의 실제 반응 과정은 해석이 복잡하고 많은 계산 시간을 요구하므로 열 유체역학적 특징을 살펴보기 위해서 1단계 비가역 Arrhenius 반응 모델을 이용하였다. 이 경우

1 정회원, 부산대학교 항공우주공학과

2 학생회원, 부산대학교 대학원 항공우주공학과

\* Corresponding author, E-mail: aerochoi@pusan.ac.kr

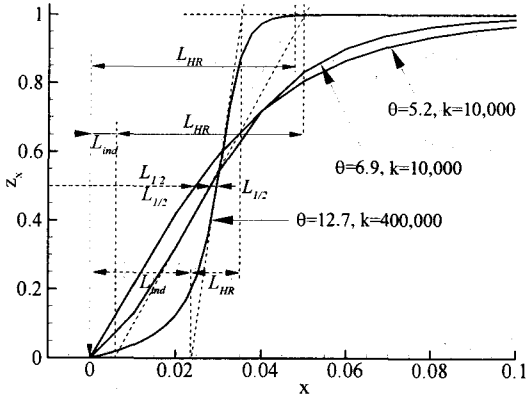


Fig. 1 Reaction progress within ZND structure

식 (1)의 반응 물질의 질량 생성율은 활성화 에너지 E, 상수 k 를 이용하여 다음과 같이 정의 된다.

$$w = (1 - Z)k \exp(-E\rho/p) \tag{3}$$

2.2 정상 1차원 ZND 구조 해석

정상 1차원 유동상태 가정에 의하여 식 (1)의 지배 방정식은 Rankine-Hugoniot 관계식으로 간소화 되며, 반응율은 식 (4) 과 같이 상미분 방정식의 초기치 미분 방정식 해법에 의하여 해석적 해를 구할 수 있고 후류 유동 특성도 후류 마하수와 보존식에 의하여 유도된다.

$$\frac{\partial Z_x}{\partial x} = \frac{1}{u_x} (1 - Z_x)k \exp(-E\rho_x/p_x) \tag{4}$$

ZND 데토네이션 구조는 Chapman-Jouguet (C-J) 마하수를 입구 유동 속도로 가정하여 von Neumann (VN) peak 상태를 초기조건으로 위의 방정식으로부터 구할 수 있다.

2.3 전산유체 해석 알고리즘

데토네이션 파 셀 구조의 전산유체 해석을 위하여 식 (1)의 지배방정식을 유한 체적 셀 점진 기법에 의하여 이산화 하였다. 셀 경계에서의 수치 플럭스는 Roe의 근사 Riemann 해법과

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

3차 정확도의 MUSCL-type TVD 기법을 이용한 공간 차분과 4 차 Runge-Kutta 시간 적분기법을 이용하였다[2,3].

2.4 해석 조건

셀 구조 해석을 위하여 VN 상태 온도인 무차원 활성화 에너지( $\theta = E/RT_{VN}$ )와 미연 및 기연가스의 비열비를 대표 적 세 경우로 선정하여 Table 1에 정리하였다.

반응 특성 길이를 유도 영역( $L_{ind}$ ), 발달 영역( $L_{HR}$ ) 그리고 반반응 길이( $L_{1/2}$ ) 로 구분하여, 세 연소 영역에서의 ZND 구조 의 해석 결과로 얻은 반응 과정을 Fig. 1에 나타내었다.

2.5 계산영역, 초기조건, 경계조건 및 그을음 막 모사

고정된 격자 체계를 이용하였고 직사각형 형상의 채널을 지나는 2차원 데토네이션 파 전파에 관한 수치해석에서 계산 영역은 삼중점의 비정상 운동을 포착하기 위하여 가로-세로 비가 일정한 격자 영역에 이어, 평형 C-J 상태에 도달한 후류 영역의 포착에 격자 비를 늘린 형상을 선택하였다. 계산 영역 의 폭은 단위 길이이며 균일한 격자 영역의 길이는 폭의 2배 로 연구에 사용된 격자계를 Table 2에 정리하였다.

초기 조건으로는 1차원 ZND 해석의 결과를, 불안정 유동 의 시작을 위하여 모든 수평 방향 격자 선을 따라 수직방향으 로 기울어지게 적용하였다. 입구 경계조건은 C-J 데토네이션 속도로 고정하였다. 출구에서의 속도는 전방 유동 속도가 초 음속일 경우에는 보간법으로, 아음속일 경우에는 음속으로 설정하였다. 양 벽면은 단열 및 미끄럼 조건으로 설정하였다. 그 을음 막 기록은 수치적 간편화를 위하여 길이 방향의 모든 격 자 선에서 순간 최고 압력과 그 위치를 기록하여 얻어진다.

3. 해석결과 및 고찰

3.1 해석조건

반응 상수의 민감도를 관찰하기 위하여 k=500, 1000, 2,000, 5,000, 10,000 그리고 20,000인 경우에 대하여 저해상도(301 × 101), 중해상도(501 × 201), 그리고 고해상도(901 × 401) 격자를 이용하여 약한 불안정 데토네이션 현상에서 강한 불안정 데토 네이션 현상까지 해석하였다.

Table 2 Summary of computational grids

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

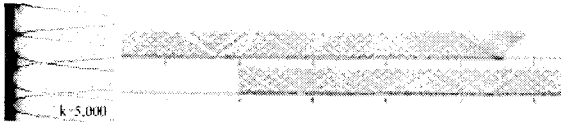


Fig. 2 Front structure of weakly unstable detonation wave from 901x401 grid with the numerical smoked-foil records

3.1.1 약한 불안정 데토네이션 현상

ZND 구조는 VN 상태 이후 화학적 유도 영역 없이 급격히 연소가 진행된다. 반응 변수는 충격과 뒤에서 선형적으로 변화하며 이후 평형 C-J 상태에 이르게 된다.

저해상도 격자에서는 k가 500과 1,000인 경우에는 매우 넓은 영역에 걸쳐서 반응이 일어나며, 삼중점 주위의 자세한 구조를 확인할 수 있다. 그러나 k가 증가함에 따라 반응 영역의 폭이 두드러지게 감소함을 볼 수 있다. k가 2,000과 5,000인 경우 삼중점의 수가 증가하며, 약한 불안정 데토네이션에서 전형적으로 보이는 균일한 삼중점 분포를 볼 수 있다. 그러나 k=10,000과 20,000일 경우에는 격자 해상도가 충분하지 않아 셀 구조를 포착할 수 없었고 정상 1차원 데토네이션 파의 ZND 해석 결과와 동일한 결과를 보인다.

해상도를 증가시켜 중해상도를 이용하여 해석을 하면 상세 구조를 더 자세히 볼 수 있다. k가 10,000인 경우는 5,000인 경우에 비하여 두 배의 삼중점이 관찰된다. 그러나 k=20,000인 경우에는 여전히 정상 상태의 ZND 구조를 보인다. 고해상도 격자를 이용하면 k=20,000인 경우에도 많은 삼중점 구조를 볼 수 있으며, 앞의 격자들 보다 더욱 상세한 결과를 볼 수 있다. Fig. 2는 고해상도 격자를 이용하여 계산의 마지막 단계에서의 결과를 반응 진행율과 충격파의 형상을 겹쳐서 나타낸 것과 그을음 막 결과를 도시한 것이다. 해상도가 향상 될수록 셀 구조를 관찰하기가 용이하고 반응 상수의 증가에 따라 셀의 개수가 증가함을 알 수 있다.

3.1.2 계산 영역의 크기와 출구 경계조건의 영향

계산 영역 크기에 따른 연구는 k=1,000일 때, 51x101에서 401x101까지의 격자를 사용하여 계산 영역 크기의 효과를 명확히 보여준다. 일정 격자 시스템은 출구가 0.5에서 2.0에 각각 위치되어 졌을 때, 51x101에서 201x101격자가 사용되어진다. 늘린 격자 시스템은 출구가 x=2, 9, 5.2, 11.4, 그리고 28.2에 위치되어졌을 때, 251x101에서 401x101격자가 사용되어진다. 출구의 위치가 x=1.5보다 작게 위치 할 때, 데토네이션 파동은 불안정하다. 규칙적으로 진동하는 데토네이션 파는 151x101격자보다 큰 격자에서 관찰되어진다.

데토네이션 파 후방에 나타나는 전방 충격 압력은 151x101 격자와 201x101 격자에서 서로 다른 결과를 보여주지만, 더 긴 계산 영역은 압력자료의 여섯 가지 중요한 수에 동일한 결과

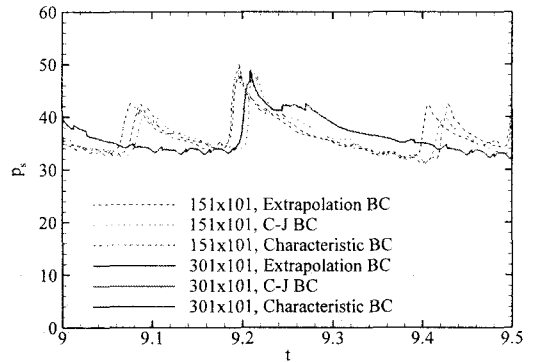


Fig. 3 Von Neumann peak pressure history along the centerline of computational domain for weakly unstable detonation for k=1,000 with different exit boundary conditions.

를 나타낸다. 그래서 만약 계산 영역의 길이가 임계한계보다 크면 출구 경계는 파의 전방 해석에 영향을 미치지 못한다. 출구 경계에서의 평균 마하수는 계산 영역이 길어질수록, 편차는 고르게 되고 단일해지는 경향을 보인다. 거의 일정한 출구 마하수인 0.996은 401x101 격자에서 관찰되어진다.

출구 경계 조건의 영향도 위에서 언급된 경계조건의 차이에 따라 시험되어졌다. Fig. 3은 서로 다른 출구 조건에서 전방 충격 압력을 나타낸 것이다. 서로 다른 경계조건은 151x101 격자에서 서로 다른 압력 분포를 나타내지만, 위의 압력자료의 여섯 가지 중요한 수의 동일한 해석을 하였다. 만약 계산 영역이 충분히 길면, 파 전방 해석 효과가 무시되는 경계조건이 고려되어진다. 힘이 가해진 조건에 의해 출구 마하수가 1.0보다 훨씬 큰 강제적인 C-J 경계조건을 나타낸다. 단순한 외삽법은 큰 계산영역에서 타당한 결과를 보여주지만, 지속적인 출구 마하수 감소를 나타낸다. 그래서 충분한 길이의 계산 영역이 고려되어지면 비록 출구 경계조건의 영향이 약하더라도, 출구 경계조건은 바람직한 특징을 보여준다.

3.1.3 계산 시간 간격에 따른 영향

격자 해상도만큼 중요한 시간 간격의 영향을 알아보기 위하여 단위 폭에 1.5개의 셀을 가지는 k=2,000에서 CFL 수가 0.1에서부터 0.5까지의 서로 다른 경우를 살펴보았다. 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.

압력 변화 모양은 CFL 값이 커짐에 따라 다소 이동하지만, 대체로 유사한 결과를 보이며 CFL 값이 0.1과 0.2일 경우는 매우 근접한 결과를 보인다. 완전히 일치한다고 할 수는 없지만, 서로 다른 CFL 값에서 최고압력은 거의 같은 값과, 거의

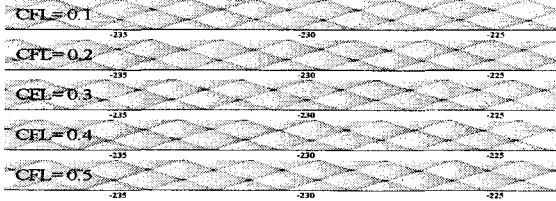


Fig. 4 Section of numerical smoked-foil records for the case of  $k=2,000$  with different CFL numbers



Fig. 5 Front structure of moderately unstable detonation wave from  $901 \times 401$  grid with the numerical smoked-foil records

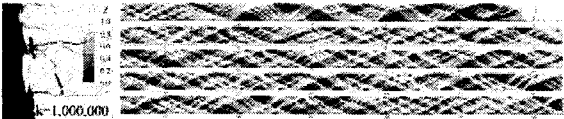


Fig. 6 Front structures of highly unstable detonation wave from  $901 \times 401$  grid with the numerical smoked-foil records

동일한 진동수를 유지하며, 최고 압력의 위치 또한 거의 동일하게 나타난다. Fig. 4는 CFL 값에 따른 수치적 그늘음 막 기록이다. 모든 경우에 있어서 셀 크기는 거의 동일하여, 시간 정확도에 대하여 상대적으로 둔감한 것을 알 수 있다.

3.1.4 중간 불안정 데토네이션 현상

ZND 구조는 전반적으로 약한 불안정의 경우와 유사하나, VN 상태 이후 좁은 유도 영역이 존재한다.

저해상도 격자를 이용하여 해석한 결과는  $k=1,000$ 에서부터 5,000까지의 경우에만 삼중점의 구조가 보이고 있으며 반응상수가 증가함에 따라 반응 영역의 폭이 작아지며 두께가 얇아지는 현상을 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.

고해상도 격자를 이용하여 해석한 결과는 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.

Fig. 5는 고해상도 격자에서의 반응 진행율과 충격파의 형상과 그늘음 막 기록이다. 고해상도 격자의 경우는 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.

3.1.5 강한 불안정 데토네이션 현상

ZND 구조는 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  $901 \times 401$  격자를 이용한 해석 결과만을 정리하였다.

Fig. 6은 계산 마지막 순간에서 강한 불안정 데토네이션 파의 구조와 그늘음 막 기록을 도시하였다. 충격파와 연소면은 매우 강한 불규칙성을 보이고 있으며, 연소면의 후방에는 다수의 미연 영역이 존재하고 있고, 셀의 크기는 매우 크게 변화한다. 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.

3.2 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 3에 비교하여 정리하였다.

Table 3 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	$\frac{grids}{L_{1/2}}$	$\frac{grids}{L_{RR}}$
Weakly unstable detonation ( $\theta = 5.2$ )			
$301 \times 101$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.01$ )	$k=5,000$	< 3	< 5
$501 \times 201$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.005$ )	$k=10,000$	< 3	< 5
$901 \times 401$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.0025$ )	$k=20,000$	< 3	< 5
Moderately unstable detonation ( $\theta = 6.9$ )			
$301 \times 101$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.01$ )	$k=10,000$	< 3	< 5
$501 \times 201$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.005$ )	$k=20,000$	< 3	< 5
$901 \times 401$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.0025$ )	$k=20,000$	< 3	< 5
Highly unstable detonation ( $\theta = 12.7$ )			
$301 \times 101$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.01$ )	cell structure N/A		
$501 \times 201$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.005$ )	$k=400,000$	< 14	< 5
$901 \times 401$ ( $\Delta x_{min} = \Delta y = 0.0025$ )	$k=1,000,000$	< 12	< 5

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, 데토네이션 파 구조와 데토네이션의 동적거동에 의한 셀 크기는 큰 차이를 보이지 않았다.

#### 4. 결 론

여러 영역의 데토네이션 현상에 대하여 셀 구조를 포착할 수 있는 격자 해상도 요구 조건을 파악하기 위한 연구를 수행하였다. 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.

#### 참고문헌

- [1] Fickett, W., and Davis, W.C., 2000, *Detonation: Theory and Experiment*, Dover Publication, New York.
- [2] Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., July 2000, "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 1: Validation," *AIAA Journal*, Vol.38, No.7, pp.1179-1187.
- [3] Choi, J.Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., July 2000, "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 2: Comparison," *AIAA Journal*, Vol.38, No.7, pp.1188-1195.
- [4] Choi, J.Y., Ma, F., and Yang, V., Jan. 10-13, 2005, "Numerical Simulation of Cellular Structure of Two-Dimensional Detonation Waves," *AIAA Paper 2005-1174*, 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.