

# 고에너지 물질 연소를 기반으로 한 Multi Physics Modeling

김기홍\* · 여재익\*\*

## How to Prepare the Manuscript for Submission to the Proceedings of KSPE Conference

Kihong Kim\* · Jai-ick Yoh\*\*

### ABSTRACT

We present an innovative method of multi-physics application involving energetic materials. Energetic materials are related to reacting flows in extreme environments such as fires and explosions. They typically involve high pressure, high temperature, strong non-linear shock waves, and high strain rate deformation of metals. We use an Eulerian methodology to address these problems. Our approach is naturally free from large deformation of materials that makes it suitable for high strain-rate multi-material interaction problems. Furthermore we eliminate the possible interface smearing by using the level sets. We have devised a new level set based tracking framework that can elegantly handle large gradients typically found in reacting gases and metals. We show several work-in-progress applications of our algorithm including the Taylor impact test, explosive venting and additional confined explosion problems of modern interest.

Key Words : Multi physics, Reacting flow, Multi-material, Energetic material, Eulerian methodology, Level set

### 1. 서 론

일반적으로 multi physics는 두 가지 이상의 물질이 상호작용을 하며, 고 에너지 물질의 연소 현상을 포함하고 있다. 이를 해석하기 위해 Eulerian methodology[1]를 사용하였다. Multi physics의 대표적인 예로는 munition-target

interaction, shaped charge upon detonation, material deformation in combustion explosive welding, abnormal burn of energetic materials, fast/slow cook-off 등이 있다. 이러한 현상은 물질들간의 충돌시 비선형 shock wave를 발생시키며, 고체상태의 물질에게 큰 변형이나 상변화를 유발시키게 된다.

Multi physics 문제를 푸는데 Eulerian method를 사용하게 되면 물질들간의 경계면을 찾는데 어려움을 겪게 된다. 이를 해결하기 위해서는 정확한 경계면 tracking이 가능한 level set

\* 서울대학교 항공우주공학과

\*\* 서울대학교 항공우주공학과

연락처, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

method[2]를 사용하였다. 물질 내부에서 발생하는 비선형 shock wave를 풀기 위해서 modern shock capturing method인 ENO scheme[3]을 사용하였다. Multi physics에 대한 우리의 algorithm을 검증하기 위해서 shock tube test(Riemann problem), Taylor impact test를 시뮬레이션 하였다. 그리고 현재 진행하고 있는 연구인 confinement venting에 대해서 소개하도록 하겠다.

## 2. 지배방정식

Multi physics를 구현하기 위해서 conservative law를 사용하였다.

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

여기에서 conservative variable(Q)와 convective flux vector(F, G)는 각각 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho s_{xx} \\ \rho s_{yy} \\ \rho s_{xy} \\ \rho \bar{E}^p \\ \rho \lambda \end{pmatrix}, \quad F(Q) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E+p) \\ \rho u s_{xx} \\ \rho u s_{yy} \\ \rho u s_{xy} \\ \rho u \bar{E}^p \\ \rho u \lambda \end{pmatrix}, \quad G(Q) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E+p) \\ \rho v s_{xx} \\ \rho v s_{yy} \\ \rho v s_{xy} \\ \rho v \bar{E}^p \\ \rho v \lambda \end{pmatrix} \quad (2)$$

위 식은 gas, liquid, metal, 그리고 energetic materials를 구현하기 위해서 사용된다. Mass, momentum, energy conservative equation은 gas, liquid, metal, energetic materials에 공통된 부분으로 사용되며, deviatoric stress와 equivalent plastic strain은 metal을, burning fraction은 energetic materials를 모델링하기 위해 사용된다. Phase change를 위한 식 역시 추가하여 완전한 multi physics modeling을 할 수 있다. 각 equation에 대한 source term은 다음과 같이 주어진다.

$$S(Q) = \begin{pmatrix} -\phi \frac{\rho u}{x} \\ \frac{\partial s_x}{\partial x} + \frac{\partial s_{xy}}{\partial y} + \phi \left( \frac{s_x}{x} - \frac{\rho u^2}{x} \right) \\ \frac{\partial s_y}{\partial x} + \frac{\partial s_{xy}}{\partial y} + \phi \left( \frac{s_y}{x} - \frac{\rho uv}{x} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} (u s_{xx} + v s_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y} (u s_{xy} + v s_{yy}) + \phi \left( \frac{s_x u + s_y v}{x} - \frac{u(E+p)}{x} \right) \\ s_{xx} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \Omega_{me} s_{me} - s_{me} \Omega_{me} + 2G \left( D_{xx}' - \frac{3}{2} \frac{\chi s_{xx}}{\bar{\sigma}^2} \frac{s_{me} D_{xx}'}{1 + \Sigma'/3G} \right) \\ s_{yy} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \Omega_{me} s_{me} - s_{me} \Omega_{me} + 2G \left( D_{yy}' - \frac{3}{2} \frac{\chi s_{yy}}{\bar{\sigma}^2} \frac{s_{me} D_{yy}'}{1 + \Sigma'/3G} \right) \\ s_{xy} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \Omega_{me} s_{me} - s_{me} \Omega_{me} + 2G \left( D_{xy}' - \frac{3}{2} \frac{\chi s_{xy}}{\bar{\sigma}^2} \frac{s_{me} D_{xy}'}{1 + \Sigma'/3G} \right) \\ \frac{\chi}{1 + \Sigma'/3G} \frac{s_{me} D_{me}'}{\bar{\sigma}} \\ Y(p+Z)^n (1-\lambda) \end{pmatrix} \quad (3)$$

Source term에는 metal의 deformation을 모델링하기 위해 deviatoric stress와 elasto-plastic model이 포함되어 있다. (3)식에서 사용된 spin tensor components  $\Omega_{ij}$ , rate of deformation tensor components  $D_{ij}$  그리고 deviator  $D_{ij}'$ 는 아래와 같이 정의된다.

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} (v_{i,j} - u_{j,i}) \quad (4)$$

$$D_{ij} = \frac{1}{2} (v_{i,j} + v_{j,i}) \quad (5)$$

$$D_{ij}' = D_{ij} - \frac{1}{3} D_{kk} \delta_{ij} \quad (6)$$

Metal의 strength model은 rate-independent model인 Prandtl-Reuss model과 rate-dependent model인 Johnson-Cook model을 사용하였다. 그리고 energetic materials의 연소현상은 JWLL++ model을 사용하여 묘사하였다.

## 3. 상태방정식

지배방정식을 closed form으로 만들기 위해서 변수에 대한 관계식이 필요하다. 이러한 관계식을 상태방정식이라 하며, 본 연구에서는 3가지의 상태방정식이 사용되었다. 1) Gamma law EOS, 2) Mie-Gruneisen EOS, 3) JWLL++ EOS 이다. Gamma law EOS는 (5), Mie-Gruneisen EOS는

(6), (7), (8), JWL++는 (9), (10), (11)로 나타낼 수 있다.

$$p = \rho RT \quad (5)$$

$$P(e, V) \sim \Gamma(V) \frac{(e - e_c(V))}{V} + p_c(V) = \Gamma \frac{e}{V} + f(V) \quad (6)$$

$$e = \frac{E}{\rho} - \frac{u^2}{2}, \quad V = \frac{1}{\rho}, \quad \Gamma = V \left( \frac{\partial p}{\partial e} \right)_V = \frac{\Gamma_0 \rho_0}{\rho} \quad (7)$$

$$f(V) = \begin{cases} \frac{\rho_0 c_0^2 \phi}{(1-s\phi)^2} \left[ 1 - \frac{\Gamma}{2V} (V_0 - V) \right] & \text{if } V \leq V_0 \\ c_0^2 \left( \frac{1}{V} - \frac{1}{V_0} \right) & \text{if } V > V_0 \end{cases} \quad (8)$$

$$P(\text{unreacted}) = \frac{1}{n\kappa} \left( \frac{1}{v^n} - 1 \right) \quad (9)$$

$$P(\text{reacted}) = A \exp(-R_1 v) + b \exp(-R_2 v) + \frac{C}{v^{1+w}} \quad (10)$$

$$P(\text{total}) = (1-\lambda)P(\text{unreacted}) + \lambda P(\text{reacted}) \quad (11)$$

위의 3가지 EOS를 사용하여 gas, liquid, metal, energetic material에 대한 압력을 구할 수 있다. 이를 통해서 각각의 material에 대한 완성된 model를 마련하였다.

#### 4. 해석 결과

##### 4.1 Shock tube validation (Riemann problem)

Gasdynamics에서 gas에 대한 algorithm test를 위해서 shock tube test를 많이 실시하고 있다. Shock tube test는 초기조건에 대해 정확한 해가 구해져 있기 때문에 현재의 approach를 검증하기 위해 사용하였다. 초기 조건은 다음과 같이 양쪽의 밀도가 다른 상태이다.

$$(\rho, p, u, \gamma)_L = (1, 10^5, 0, 1.4) \quad (12)$$

$$(\rho, p, u, \gamma)_R = (0.125, 10^4, 0, 1.2) \quad (13)$$

이러한 문제는 conventional method를 통해서 풀면 contact discontinuity가 smearing되면서

oscillation이 발생하는 것을 볼 수 있다. 하지만 우리의 algorithm에서는 smearing과 oscillation 없이 sharp한 contact discontinuity를 확인할 수 있다.

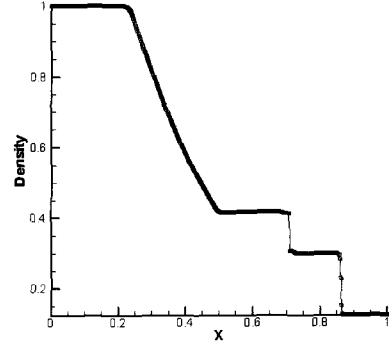


Fig. 1 Density profile of shock tube test.

##### 4.2 Taylor impact validation

Taylor impact test는 material의 변형을 확인하기 위하여 사용되는 test이다. 이 test를 통해서 material에 대한 strength model과 interface tracking에 대해 검증하였다. Camacho[4]의 Lagrangian method 결과를 바탕으로 Eulerian methodology에 의한 결과를 검증하였다. Fig. 2에서 보듯이 effective plastic strain의 결과는 거의 같음을 알 수 있다.

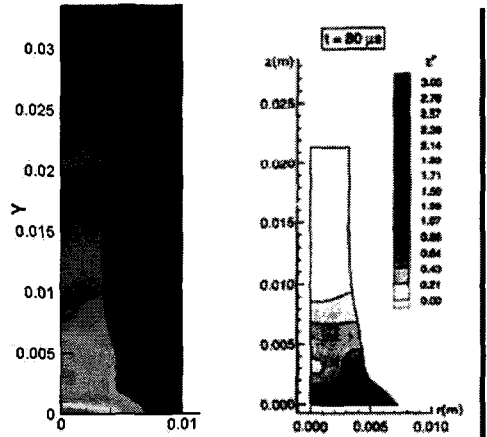


Fig. 2 Comparison of our approach (left) to Camacho and Ortiz [4] (right) at 80  $\mu$ s

### 4.3 Work in progress

위에서 사용한 approach를 기초로 하여 integrated system을 setup하였다. Schematic은 fig 3과 같으며, 사용된 material은 reactant, product, metal 그리고 void이다. 중심에 위치한 ANFO K1에 hot spot을 위치시켜 detonation을 발생시켰으며, product와 metal과의 상호 작용으로 metal에 변형이 발생함을 figs 4와 5를 통해 확인 할 수 있다.

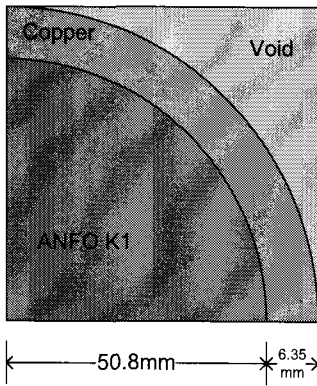


Fig. 3 Schematic of setup for the integrated system

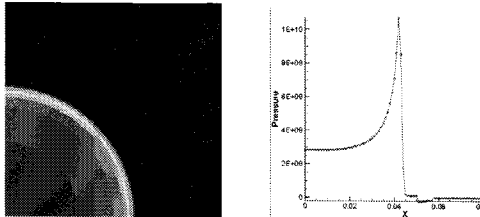


Fig. 4 Reaction progress and pressure profile at 12.21  $\mu$ sec



Fig. 5 Equivalent plastic strain for copper ring at 15.64  $\mu$ sec

### 5. Conclusion

Multi physics 문제는 기본적으로 여러 가지 물질들의 상호작용을 풀어야 하기 때문에 시뮬레이션을 하기 어려움 점이 많이 존재한다. 대표적으로 비선형 shock wave가 존재하며, 고체의 대 변형이 발생하게 된다. 이러한 문제를 해결하기 위해 Eulerian methodology를 사용하였으며, modern shock capturing method와 interface treatment를 통해 통합된 문제(integrated system)을 해결하기 위한 기본적인 tool을 개발하고 있다. 이러한 tool을 기반으로 하여 복잡적이고 복잡한 현상을 해결하기 위한 simulation toolkit과 database를 만들 수 있다.

### Acknowledgment

This work was supported by the Korea Research Foundation Grant funded by the Korea Government (KRF-2006-015-D00038), the Agency for Defense & Development (HM-20), and the BK21.

### 참고 문헌

1. J.J. Yoh, D.S. Stewart: LLNL Technical Report, UCRL-JC-151176, 2002
2. R.P.Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, S. Osher: Journal of Computational Physics, Vol. 152, pp.457-492
3. C.W. Shu, S. Osher: Journal of Computational Physics, Vol. 83, pp.32-78
4. G.T. Camacho, M. Ortiz: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 142, pp. 269-301