

환상 형 도관 내의 데토네이션 파 전파 특성 해석

이수한* · 조덕래* · 최정열**

Numerical Analysis of Detonation Wave Propagation in Annular Channel

Suhan Lee* · Deok-Rae Cho* · J.-Y. Choi**

ABSTRACT

Present study examines detonation wave propagation characteristics in annular channel. A normalized value of channel width to the annular radius was considered as a geometric parameter. A parametric study was carried out for a various regimes of detonation waves from weakly unstable to highly unstable detonation waves. Numerical approaches that used in the previous study of numerical requirements of the simulation of detonation wave propagations in 2D and 3D channel were used also for the present study with OpenMP parallelization for multi-core SMP machines. The major effect of the curved geometry on the detonation wave propagation seems to be a flow compression effect, regardless of the detonation regimes. The flow compression behind the detonation wave by the curved geometry of the circular channel pushes the detonation wave front and results in the overdriven detonation waves with increased detonation speed beyond the Chapman-Jouguet speed. This effect gets stronger as the normalized radius smaller, as expected. The effect seems to be negligible beyond the normalized radius of 10.

Key Words: Detonation Wave(데토네이션 파), Annular Channel(환상 형 도관), OpenMp Parallelization(OpenMp 병렬화), Effect of the Curved Geometry(곡선 형상의 효과)

1. 서 론

데토네이션 파의 불안정한 다차원 파면 구조는 충격파의 상호작용에 의한 삼중점으로 대표되는데, 관 내벽에 얹은 그을음 막(smoked foil)을 써운 전파 실험에서 삼중점의 이동에 따라,

데토네이션 셀이라는 특징적인 궤적을 남긴다. 그러므로 데토네이션 파의 불안정성은 셀의 크기와 분포 등에 의해 특징 지워진다.[1]

본 논문에서는 환상 형 도관에서 반지름의 영향과 격자 해상도의 효과에 대하여 고찰하고자 한다. 반응 진행 변수를 도입하여 1단계 비가역 반응 모델의 2차원 완전 보존 방정식에 대한 전산유체해석을 수행하였다. 정상 1차원 ZND (Zeldovich-Neumann -Döring) 구조에 대하여 간단한 해석적 해를 구하였으며 결과 값은 2차

* 부산대학교 대학원 항공우주공학과

** 부산대학교 항공우주공학과

연락처자, E-mail: aerochoi@pusan.ac.kr

원 수치 해석에서의 초기 조건으로 이용하였다.

2. 연구 내용

2.1 지배방정식

반응 과정 변수를 도입한 압축성 비 점성 유동에 대한 2차원 Euler 보존 방정식과 압력은 다음과 같이 표현된다.

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

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

생성물의 질량 분율을 나타내는 반응 진행 변수 Z 는 0에서 1사이의 값을 가진다. q 는 연소에 의한 발열량이고 반응 진행 변수에 대한 비열비 값은 미연 상태와 기연 상태로부터 보간법으로 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 Arrhenius 반응 모델을 이용하였다. 이 경우 식 (1)의 반응 물질의 질량 생성율은 활성화 에너지 E , 상수 k 를 이용하여 다음과 같이 정의된다.

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

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.

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

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 정점 기법에 의하여 이산화 하였다. 셀 경계에서의 수치 플럭스는 Roe의 근사 Riemann 해법과 3차 정확도의 MUSCL-type TVD 기법을 이용한 공간 차분과 4차 Runge-Kutta 시간 적분기법을 이용하였다.[2,3]

2.4 해석조건

셀 구조 해석을 위하여 VN 상태 온도인 무차원 활성화 에너지($\theta = E/RT_{VN}$)를 정하였고, 미연 및 기연 가스의 비를 각각 $\gamma_U = 1.602$, $\gamma_B = 1.288$ 로 주었다. 반응 특성 길이를 유도 영역(L_{ind}), 발열 영역(L_{HR}) 그리고 반반응 길이($L_{I/2}$)로 구분하여, ZND 구조의 해석 결과를 도출하였다.

환상 형 도관의 반지름의 크기를 $R=1.5, 3.0, 4.5, 6.0, 7.5, 9.0$ 으로 변화를 주었다. 반응 상수의 민감도를 관찰하기 위하여 $k=2,000, 5,000, 10,000$ 인 경우에 대하여 저해상도(5001×101), 중해상도(5001×201), 그리고 고해상도(5001×401) 격자를 이용하여 데토네이션 현상을 해석하였다.

2.5 계산영역, 초기조건, 경계조건 및 그을음 막 모사

고정된 격자 체계를 이용하였고 환형의 채널을 지나는 2차원 데토네이션 파 전파에 관한 수치해석에서 계산 영역은 삼중점의 비정상 운동을 포착하기 위하여 가로 길이의 격자수는 일정하고 세로 길이의 계산 영역은 단위 길이로 일정하고 격자수를 2배, 4배로 늘려서 계산에 사용된 격자 계를 Table 1에 정리하였다.

Table 1. Summary of computational grids

Grid system	Minimum spacing	Channel width
5001×101	$\Delta y=0.01$	1.0
5001×201	$\Delta y=0.005$	1.0
5001×401	$\Delta y=0.0025$	1.0

초기 조건으로는 1차원 ZND 해석의 결과를, 불안정 유동의 시작을 위하여 모든 수평 방향 격자 선을 따라 수직방향으로 기울여지게 적용하였다. 입구 경계조건은 C-J 데토네이션 속도로 고정하였다. 양 벽면은 단열 및 미끄럼 조건으로 설정하였다. 그을음 막 기록은 수치적

간편화를 위하여 길이 방향의 모든 격자 선에서 순간 최고 압력과 그 위치를 기록하여 얻어진다.

3. 해석 결과 및 고찰

3.1 반지름에 따른 영향

반지름의 길이 변화에 따른 데토네이션 파의 전파 특성 변화를 살펴보았다. k 값의 변화에 따른 smoked-foil 기록을 그림 1에 나타내었다. 반지름이 커질수록 완만한 곡률로 인하여 직선 관에서의 셀 구조 포착 결과와 유사한 형태를 보인다. 반지름이 6 이상인 경우에는 그림에서 볼 수 있듯이 반지름의 변화에 따른 영향이 적게 미침을 알 수 있다.

그림 2는 $k = 5000$ 인 경우의 관 바깥쪽의 최고 압력 변화를 그래프로 나타내었다. 관 외벽의 압력은 내벽의 압력보다 높음을 알 수 있었다. 반지름의 길이가 6 이상인 경우에는 관 외벽의 P_{max} 값의 차이가 거의 나타나지 않는다. 그리고 P_{max} 값은 주기적인 성질을 보이고 있다.

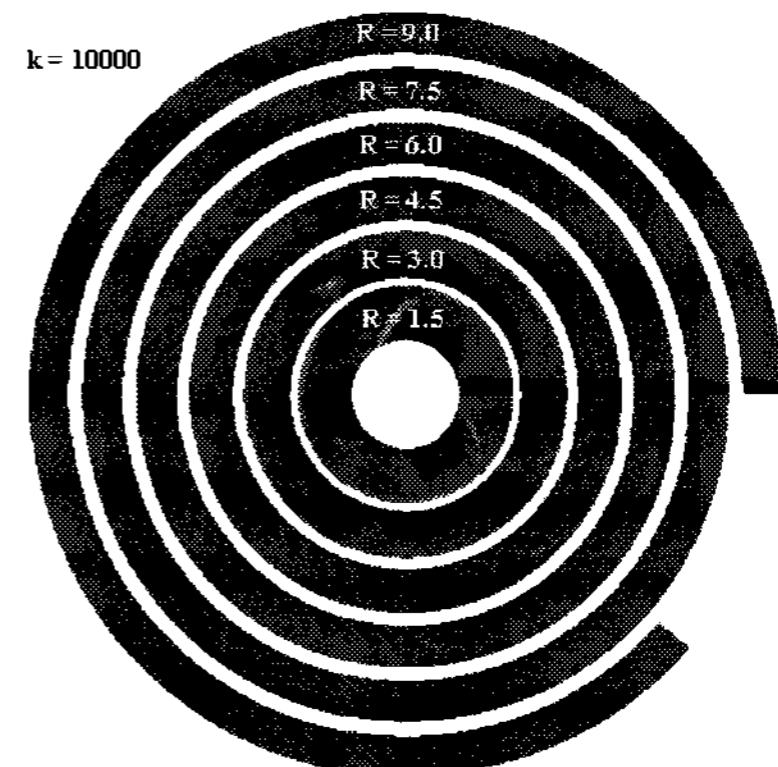
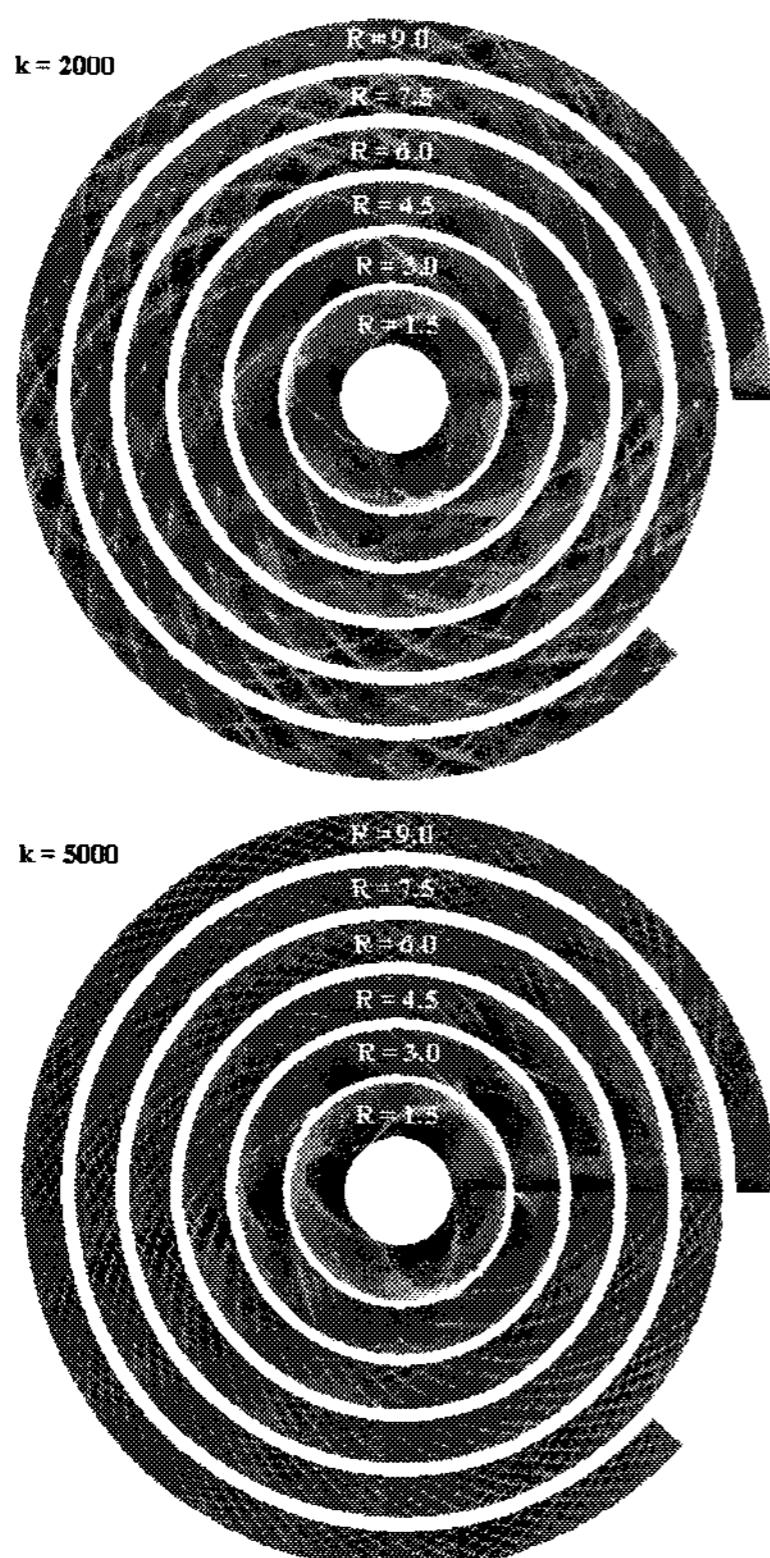


Fig. 1 Smoked-foil record by variation of Pre-Exponential factor(k)

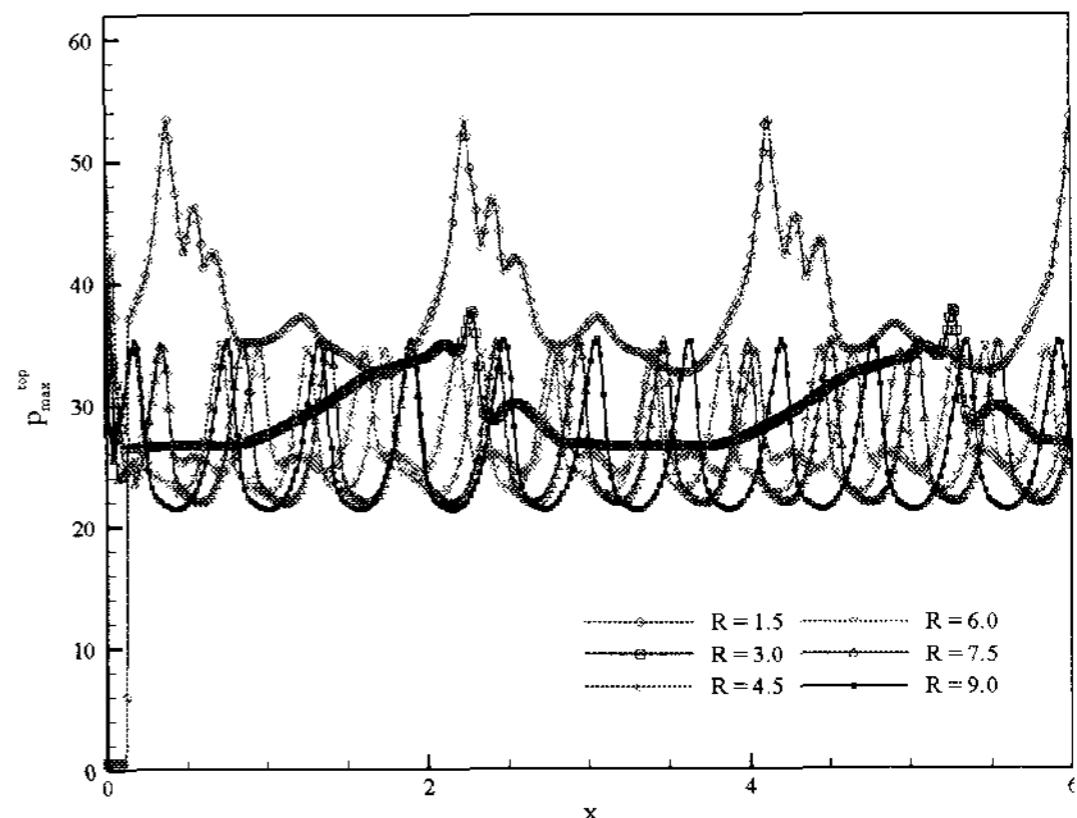


Fig. 2 P_{max} of outer round of channel

3.2 약한 불안정 데토네이션 현상

ZND 구조는 VN 상태 이후 화학적 유도 영역 없이 급격히 연소가 진행된다. 반응 변수는 충격파 뒤에서 선형적으로 변화하며 이후 평형 CJ 상태에 이르게 된다.

저해상도 격자에서는 k 가 증가함에 따라 반응 영역의 폭이 두드러지게 감소함을 볼 수 있다. k 가 2,000과 5,000인 경우 약한 불안정 데토네이션에서 전형적으로 보이는 균일한 삼중점 분포를 볼 수 있다. 그러나 $k=10,000$ 인 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. 고해상도 격자를 이용하면 앞의 격자들 보다 더욱 상세한 결과를 볼 수 있다. 해상도가 향상 될수록 셀 구조를 관찰하기가 용이하

고 반응 상수의 증가에 따라 셀의 개수가 증가한다.

3.3 중간 불안정 데토네이션 현상

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

저해상도 격자를 이용하여 해석한 결과는 $k=2,000, 5,000$ 인 경우에만 삼중점의 구조가 보이고 있으며 반응 상수가 증가함에 따라 반응 영역의 폭이 작아지며 두께가 얇아지는 형상을 나타낸다. 그리고 $k=10,000$ 인 경우에는 삼중점의 구조가 여러 위치에서 보이지만 약한 불안정 데토네이션의 경우와 비교하여 불규칙한 형태를 보여준다. 고해상도 격자를 이용하여 해석한 결과는 불규칙한 삼중점 구조 후방의 연소면 뒤쪽에서 국소적인 미연영역을 포함한 상세한 구조를 파악 할 수 있다.

3.4 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 고해상도 격자를 이용한 해석 결과만을 정리하였다.

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.

4. 결 론

데토네이션 현상에 대하여 셀 구조를 포착할 수 있는 격자 해상도 요구 조건을 파악하기 위한 연구를 수행하였다. 반지름의 길이와 반응 속도 상수, 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 기

존에 알려진 $L_{1/2}$ 에 수십 개의 격자가 필요하다는 정보와는 상당한 차이를 보이는 결과이다. 아울러 활성화에너지에 따른 파의 구조를 고려하지 않은 $L_{1/2}$ 의 기준보다는 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 유추하는데 매우 효과적임을 알 수 있었다.

수치적 안정성이 확보되고, 셀 구조를 포착할 수 있는 한, 격자 해상도는 셀의 크기를 예측하는데 있어 매우 작은 영향만을 보여 주었다. 반지름의 길이가 커질수록 직선 관에서의 해석 결과와 유사함을 알 수 있었다. 한편 셀 구조 포착을 위해서는 출구에서 CJ 조건을 만족시키고, 초기 조건으로부터 안정화를 위하여 예상되는 셀 크기보다 큰 수준 계산 영역의 길이가 필요함을 알 수 있었다.

참 고 문 헌

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