

## 굽은 관에서의 연소폭발천이 현상 모델링

곽민철\* · 김기홍\* · 여재익\*†

### Numerical simulation of deflagration to detonation transition in bent tube

Mincheol Gwak\* · kihong Kim\* · Jai-ick Yoh\*†

#### ABSTRACT

This paper presents a numerical investigation of the deflagration to detonation transition (DDT) of flame acceleration by a shock wave filled with an ethylene-air mixture in bent tube. A model consisting of the reactive compressible Navier-Stokes equations and the ghost fluid method (GFM) for complex boundary treatment is used. A various intensities of incident shock wave simulations show the generation of hot spots by shock-flame interaction and the accelerated flame propagation due to geometrical effect. Also the first detonation occurs nearly constant chemical heat release rate, 20 MJ/(g · s). Through our simulation's results, we concentrate the complex confinement effects in generating strong shock wave, shock-flame interaction, hot spot and DDT in pipe.

#### 초 록

본 연구는 에틸렌-공기 혼합물로 채워져 있는 굽은 관에서의 충격파와 화염의 상호 작용, 화염 가속, 연소폭발천이 현상을 수치적으로 살펴보았다. 여기서 사용되는 모델은 지배방정식으로 Navier-Stokes 방정식과 경계조건 처리 방법으로 ghost fluid 기법을 사용하였다. 굽은 관에서 여러 충격파 강도를 이용한 모델링을 통하여 화염과 강한 충격파의 충돌에 의한 열점 생성과 화염 전파의 가속 현상을 확인하였으며 추가적으로 평균 화학적 열 발생률이 대략 20 MJ/(g · s)이 되는 지점에서 최초 폭굉이 발생한다는 것을 확인하였다. 즉, 우리는 복잡한 형상에 의한 효과를 포함하는 수치적 계산 결과를 기반으로 관에서의 강한 충격파, 충격파와 화염의 상호 작용, 열점, 연소폭발천이 현상 등의 발생을 확인하였다.

Key Words: Deflagration to detonation transition (연소폭발천이), Hot spot(열점), Shock-flame interaction(충격파와 화염의 상호 작용), Bent tube (굽은 관)

\* 서울대학교 기계항공공학부

† 교신저자, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

정상적인 화염 전파 조건에서 폭연이 폭굉으로 발전하기는 쉽지 않다. 하지만 연소폭발천이(DDT) 현상을 거치면서 폭굉으로 발전할 수 있기 때문에 이에 대한 많은 연구가 진행되고 있다. 여기서 DDT 현상이란 폭연이 폭굉으로 발전하는 현상을 말하는데, 이는 폭연, 충격파, 반사 충격파 및 경계층 등 여러 요소들의 상호 작용에 의해 유발된다. 또한 강한 충격파에 의해 형성되는 열점은 화염 가속 현상과 DDT 발생을 유도하는 원인이다. 특히, 강한 충격파를 형성하는 여러 원인 중 충격파와 화염의 상호 작용은 매우 중요한 역할을 한다. 그래서 많은 연구들에서 DDT의 원인으로 충격파와 화염의 상호 작용에 대한 연구를 진행하고 있다[1-3].

본 연구에서는 굽은 관을 사용하여 지형적 변화에 의해 유도되는 반사 충격파와 화염의 상호 작용에 대한 연구를 살펴 볼 것이다. 굽은 관의 선행 연구로써 Frolov[4]와 Otsuka[5]에 의해서 굽은 관에서 다른 곡률과 관 지름 등을 변수로 사용하여 폭굉의 변화에 대한 연구가 진행한 바 있었다. 하지만 굽은 관에서의 DDT 현상을 고려한 연구는 진행된 바 없기에 본 연구에서는 이를 수치적 기법을 통해 수행하였다.

연구 결과를 통하여 굽은 관에서의 곡면에 의해 짧은 시간 내에 연소폭발천이 현상을 발생 시키는데 주요한 역할을 하며 약간의 지형적 차이로 인하여 폭굉이 생성물의 부재와 반대쪽 벽면의 영향으로 소멸하거나 지연되는 등의 현상을 확인하였다.

## 2. 모델링 기법 및 설정

### 2.1 지배 방정식

DDT 현상을 수치적으로 계산하기 위하여 본 연구에서는 reactive Navier-Stokes 식을 사용하였으며 이는 이차원 직교 좌표계에서 질량, x축과 y축 운동량, 에너지, 화학종, 그리고 이상 기체 방정식으로 구성된다. 또한 본 연구에서 사용하는 동점성 계수, 확산계수 그리고 열전달 계수는 온도에 의존하며  $Le=Pr=Sc=1$ 로 설정하였다[1].

점성항 계산은 constitutive relation을 활용하여 계산하였다.

계산을 위하여 본 연구에서 공간 계산 시는 Convex ENO scheme을, 시간 계산 시는 3rd order R-K method를, source항 계산 시는 2nd order FDM를 사용하였다. 본 연구에서 사용하는 충격파는 주어진 마하수 (Ma)에 의한 Rankine-Hugonit 조건에 근거한 수치를 사용하였다[6]. 그리고 빠른 반응 시 resolution을 확보하기 위하여 mesh size를  $0.1 \times 0.1 \text{ mm}^2$ 로 유지하였는데 이는 에틸렌-공기 혼합물의 층류 화염 두께, 0.96mm에 대략 10개의 computational cell을 위치시키는 것이다.

### 2.2 초기 조건과 경계 조건 설정

에틸렌-공기 혼합물의 초기 온도, 압력, 밀도, 반응물의 질량분률, 그리고 물질량은 각각 293K,  $1.33 \times 10^4 \text{ J/m}^3$ ,  $1.58 \times 10^{-1} \text{ kg/m}^3$ , 1,  $29 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$ 이다. 그리고 본 연구에서는 하나의 화학 반응식을 사용하는데 이는 폭연과 폭굉의 특성 길이와 시간을 통해 구하게 되는데, 단열 온도와 CJ 폭굉 속도를 통해 혼합물의 비열비(1.15)와 화학 에너지 발생량( $Q$ ,  $3.2 \times 10^8 \text{ m}^3/\text{kg} \cdot \text{s}$ )을 결정하게 되며 폭연의 전파 속도와 폭굉 cell size를 통해 활성화 에너지( $E_a$ ,  $35.351RT_0$ )와 잣음률( $A$ ,  $48.824RT_0/M$ )를 결정한다[3].

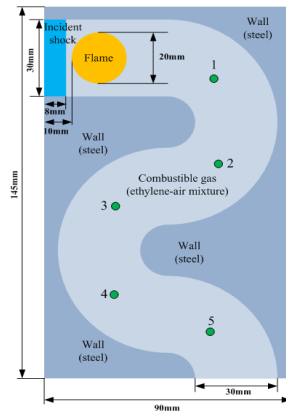


Fig. 1 Schematic of numerical setup of bent tube, Numerical gauges are located in point 1, 2, 3, 4, and 5

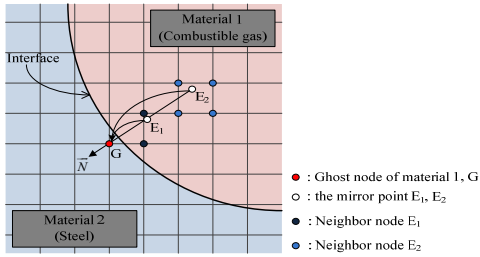


Fig. 2 Explanatory diagram of extrapolation process

Figure 1은 굽은 벽면의 효과를 확인하기 위한 굽은 관의 형상을 보여준다. 여기서 사용된 계산 영역은 90mm X 145mm이며 관의 경계 조건은 GFM에 의한 경계값을 활용하였다. 또한 좌측에서 우측으로 전파하는 충격파를 설정하였으며 지름 20mm의 단일 화염 온도의 화염을 위치시켰다.

본 연구에서는 굽은 관의 형상을 활용하는데 관(steel)과 에틸렌-공기 혼합물(combustible gas)의 경계 조건을 설정 시 ghost fluid 기법을 사용하였다[7]. 즉, 관과 혼합물 사이의 경계면에서 수치적 계산 시 임의의 ghost node를 설정해 주는 것이 필요로 하게 된다. 이때의 Ghost node 값들을 계산하기 위하여 알고 있는 값들을 등엔트로피를 가정한 하에서 외삽법을 통해 구하게 되는데 아래의 Fig. 2를 통해 확인할 수 있다. 그림에서 확인 할 수 있듯이 임의의 ghost node G를 구하기 위해서 G에서 경계면에 대해 수직선  $\vec{N}$  방향으로 거리  $\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$  만큼 떨어진  $E_1$ 과  $E_2$ 을 사용한 외삽법을 통해 구하게 되는데 여기서  $E_1$ 과  $E_2$ 는 각각 주위 node 값으로부터 내삽법을 통해 구한다. 외삽법을 통해 G의 속도 성분, 밀도, 화학종 분율, 그리고 내부 에너지를 결정하며 압력은 상태 방정식을 통해 결정한다.

### 3. 결과 및 논의

굽은 벽면을 사용한 지형적 변화에 따른 효과를 확인하기 위해 일반적으로 평행한 관과의 비

교와 더불어 여러 강도의 충격파와 화염의 상호 작용에 의해 유도되는 DDT 현상을 확인하였다.

강한 충격파로서의  $Ma=2.7$ 인 경우를 살펴보면 위의 Fig. 3와 같은 온도 및 압력장을 얻을 수 있다. 첫 번째 폭굉이 0.179ms로 빠르게 발생하는데(Fig. 4(3)), 이때의 폭굉은 반응물의 부재, 유동 방향, 그리고 굽은 면의 유동 방해 때문에 윗부분으로는 전파하지 못하게 된다. 하지만 0.275ms 이후에는 반사 충격파가 윗 방향으로 전파하면서 화염과 벽면 사이에서 다중 충돌을 발생시키면서 압력 상승을 유도하게 된다. 이 과정을 통하여 두 화염 면 사이에서 생성되는 열 점으로부터 두 번째 폭굉이 0.293ms에 발생하여 윗 방향으로도 전파하게 된다(Fig. 4(c)-(d)).

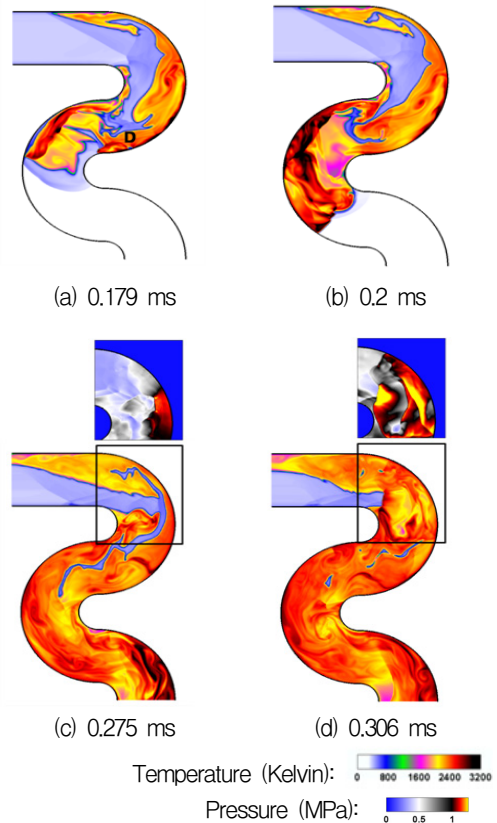
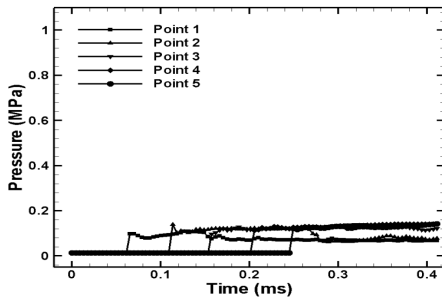


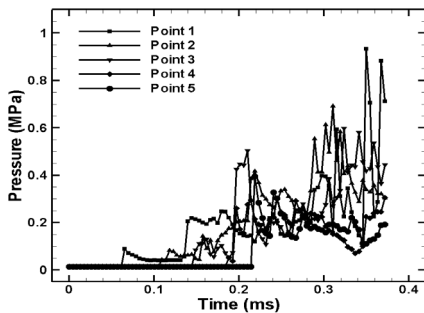
Fig. 3 Temperature and pressure in rectangular box under  $Ma=2.7$  incident shock interacting with an ethylene-air flame in bent tube

DDT 발생에 있어서 굽은 면의 효과를 확인하기 위하여 Fig. 4과 5을 통해  $Ma=2.7$ 인 경우에 대하여 굽은 관에서 굽은 벽면을 제외하고 나머지 조건을 동일하게 설정한 평행한 관과의 비교를 보여준다.

우선, 상대적으로 동일한 위치에 있는 두 모델의 수치적 게이지에서서의 압력 변화를 살펴보면 압력의 심한 변동 및 증가를 통하여 굽은 면의 효과를 확연히 확인할 수 있다(Fig. 4). 여기서 굽은 관의 압력이 1MPa이하를 유지하고 있는데, 이는 폭굉에 의한 압력 증가라고 하기에 낮다고 생각될 수 있다. 하지만 수치적 게이지가 위치한 지점이 중앙 지점에 위치하게 되는데 이 점들의 경우 폭굉 전파되기 이전에 연소가 끝난 상태이므로 폭굉에 의한 연소 에너지가 없으므로 충분한 압력 증가를 일으키지 못하기 때문이다. 이는 Fig. 3(d)의 압력장을 통하여 폭굉이 전파할 경우 압력이 반응물이 없는 경우에는 0.6MPa 가량을 보이며 반응물이 있는 경우 2.1MPa 이상의 넓은 범위를 가진다.



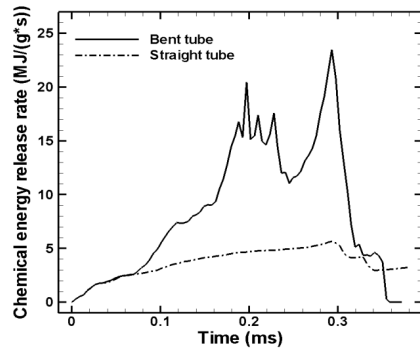
(a) Straight tube



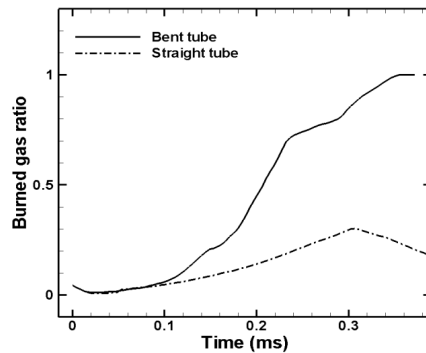
(b) Bent tube

Fig. 4 Pressure histories taken at every 500 cycles of five numerical gauges under  $Ma=2.7$

다음으로 반응에 의한 화학에너지 생성률 ( $\sum Q\dot{w}/(mesh\ volume)$ )과 생성물의 분율을 통하여 평행한 관과 굽은 관을 비교해 보면 아래 Fig. 5과 같다. 대략 0.1ms 이전에는 두 경우 모두 비슷한 양상을 보이게 되는데 이는 굽은 면의 영향이 없기 때문이며 굽은 면의 영향이 발생하면서 두 경우가 급격하게 변하게 된다. 굽은 관의 경우 0.179-0.24ms 사이에 첫 번째 폭굉의 전파에 의해 연속적으로 높은 화학적 에너지 생성률을 보이며 0.293ms에는 다시 높은 수치를 보이는데 이 때 두 번째 폭굉이 발생된다. 폭굉이 발생할 때의 화학적 에너지 생성률은 대략  $20\text{MJ}/(\text{g}\cdot\text{s})$ 의 수치를 보인다. 생성물의 분율을 보면 굽은 관의 경우 0.34ms 이후에 수치적 계산 영역 내 모든 영역이 생성물이 되는 반면 평행한 관의 경우는 확연히 다른 양상을 보인다.



(a) Straight tube



(b) Bent tube

Fig. 5 Comparison between straight tube and bent tube under  $Ma=2.7$

#### 4. 결 론

본 연구에서는 굽은 면에 의해 유도되는 압력파와 화염의 상호 작용에 의한 화염 가속 및 DDT 현상에 대하여 살펴보았다. 이를 확인하기 위하여 에틸렌-공기 혼합물의 수치적 계산을 수행하였다. 굽은 관의 수치적 계산을 평행한 관과 비교하여 지형적 영향에 의한 화염과 강한 충격파의 상호 작용에 의한 열점 생성과 가속되는 화염 전파 현상을 확인하였다. 또한 계산 결과를 통하여 화학적 에너지 발열률이 대략 20MJ/(g·s) 근방에서의 DDT 발생을 확인하였다. 즉, 굽은 관을 사용한 지형적 변화는 반사 충격파 생성, 충격파와 화염의 상호 작용, 열점 생성, 그리고 DDT 현상에 주요한 역할을 한다.

#### 후 기

본 연구는 고압충격 폭발현상 해석기법 특화 연구실의 HH-5 과제와 ADD 위탁과제 (열 및 충격 하중에 대한 고체 추진기관 거동 예측 기술)에 지원을 받아 수행된 것이며, 지원에 대하여 감사드립니다.

#### 참 고 문 헌

1. Oran, E. S. and Gamezo, V. N., "Origines of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion," *Combust. Flame*, Vol. 148, 2007, pp.4-47
2. Ciccarelli, G., Johansen, C. T., and Parravani, M., "The role of shock-flame interactions on flame acceleration in an obstacle laden channel," *Combust. Flame*, Vol. 157, 2010, pp.2125-2136
3. Gamezo, V. N., Ogawa, T., and Oran, E. S., "Numerical simulations of flame propagation and DDT in obstructed channels filled with hydrogen-air mixture," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 31, 2007, pp. 2463-2471
4. Frolov, S.M., Aksenov, V. S., and Shamshin, I. O., "Shock wave and detonation propagation through U-bend tube," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 31, 2007, pp.2421-2428
5. Otsuka, S., Suzuki, M, and Yamamoto, M., "Numerical investigation on detonation wave through U-bend," *J. Thermal Sci.*, Vol. 19, 2010, pp.540-544
6. James, E. A. J., *Gas dynamics*, 3<sup>rd</sup>ed., Pearson Prentice Hall: 2006, pp.107-123
7. Liu, T. G., Khoo, B. C., and Yeo, K. S., "Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface," *J. Comput. Phys.*, Vol. 190, 2003, pp.651-681