변형하는 가스 이송관 내에서 전파하는 탄화수소화염의 수치 해석 모델링

곽민철* · 여재익*†

Numerical simulation on propagation of hydrocarbon flame in a deformable tube

Mincheol Gwak* · Jai-ick Yoh*†

ABSTRACT

This paper presents a numerical investigation on propagation of hydrocarbon (ethylene-air mixture) detonation in a deformable copper tube. In this study, we deal with interactions of multi-materials, gas and solid. In gas phase, the model consists of the reactive compressible Navier-Stokes equations and one step chemical reaction. Also we use Inviscid Euler equations in solid. In order to the interface tracking and the determination of boundary values, our model handle level-set and ghost fluid method. Through the numerical simulation results, we identify generations of expansion waves and interferences by the wall deformation. In addition, we predict the minimum copper tube thickness that ensures safety under an incident detonation.

초 록

본 연구는 에틸렌-공기 혼합물로 채워져 있는 변형 가능한 구리 관에서의 초음속 화염 전파를 수치적으로 살펴보았다. 탄화수소의 화염 전파를 해석하기 위하여 지배방정식으로 Navier-Stokes 방정식과 Arrhenius 형태의 1단계 화학 반응식을 활용하였으며 변형 가능한 관을 해석하기 위하여 Inviscid Euler 방정식을 활용하였다. 또한, 두 물질 간 경계면 추적을 위하여 Level-set 기법을, 경계값 결정을 위하여 ghost fluid 기법을 사용하였다. 이러한 수치적 기법을 바탕으로 관의 변화에 따른 초음속 화염 내 팽창파의 전파 및 그에 따른 간섭 현상을 밀도 및 속도 변화를 통해 확인하였으며 초음속 화염 전파에도 안전성이 확보되는 최소 관 두께를 예측할 수 있는 수치적 기반을 마련하였다.

Key Words: Multi-material interaction (다상 물질 상호 작용), Detonation (초음속 화염, 폭굉), Expansion wave (팽창파)

1. 서 론

* 서울대학교 기계항공공학부
† 교신저자, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

연소 현상은 크게 정상 화염으로서의 폭연과 비정상적인 화염으로서의 폭굉으로 나누어 볼 수 있다. 여기서, 폭연은 아음속 화염으로서 상대적으로 낮은 압력과 밀도의 변화를 가지는 반면 폭굉은 초음속 화염으로서 큰 압력과 밀도의 변화를 가진다. 그러한 이유에서 비정상 화염인 폭굉은 갑작스런 압력의 증가로 인하여 구조물 손상 및 인명 피해 등, 많은 문제점을 발생시킬 수 있다. 예를 들어 자동차의 노킹의 경우, 엔진 수명 단축 및 효율 감소 현상을 유발시킬 수 있으며, 연료 이송 관에서의 폭굉 발생은 원자로에서의 가스 이송관 사고와 같이 이송관 뿐만 아니라 주위 구조물 및 인명에 큰 피해를 줄 수 있다[1-2].

본 연구에서는 관에서의 초음속 화염 전파가 관에 미치는 영향과 관의 변형이 유동장에 미치는 영향을 복합적으로 살펴보기 위한 기초 연구로써, 관의 변형으로 인하여 화염 내 팽창파의 발생 및 간섭 현상에 대한 내용을 다룰 것이다. 이는 다상 물질 해석을 기반으로 하게 되는데, 다상 물질에서의 상호 작용을 해석하기 위한 여러 방법들 중 본 연구에서 level-set을 기반으로 한 방법을 사용하였으며 이는 고속 변형을 해석하는 선행 연구들이 수행되고 있다[3-5]. 이러한 연구들의 대부분은 비 반응성 물질들을 다루거나 반응성 물질을 다루더라고 폭약과 같은 특수한 경우에 대한 문제들을 다루고 있다[3,4]. 기체 상태의 연소장을 다룰 경우에도 반응물과 생성물의 경계[5]를 나누는데 국한되어 있었다. 하지만 본 연구에서는 탄화수소 계열의 에틸렌-공기 혼합물과 고체로써 구리를 활용하여 다상 물질 간의 상호 작용을 고려하였다.

2. 모델링 기법 및 설정

2.1 지배 방정식 및 모델링 기법

기체와 고체 상태를 동시에 고려한 다상 물질의 상호 작용을 수치적으로 계산하기 위해서는 기체와 고체 각각에 대한 계산을 병행하여야 한다. 이를 위하여 기체 상태의 전파 (에틸렌-공기 혼합물의 초음속 화염 전파) 계산을 위하여 reactive Navier-Stokes 식을 바탕으로 1단계 화학 반응식을 사용하였으며 본 연구에서 사용하는 동점성 계수, 확산계수 그리고 열전달 계수는 온도에 의존하며 Le=Pr=Sc=1로 설정하였다[6]. 또한 점성항 계산은 constitutive relation을 활용하여 계산하였다. 고체 상태 (구리 관)를 해석하기 위하여 지배 방정식으로써 Inviscid Euler 방정식과 압력 계산을 위한 Mie-Gruneisen 상태 방정식, 그리고 Johnson-Cook 모델을 활용하였다[4].

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.

2.2 초기 조건과 경계 조건 설정

우선, 에틸렌-공기 혼합물의 초기 조건 및 기계적 화학적 변수 값은 아래의 Table 1과 같다. 또한 구리관의 물성치 및 구성 방정식은 Table 2를 통하여 확인할 수 있다.

Table 1. Initial conditions and parameters of ethylene-air mixture

Initial temperature	T_0	293
Initial pressure	P_0	$1.33X10^4$
Initial density	ρ_0	0.158
Adiabatic index	γ	1.15
Molecular weight	M	$29X10^3$
Pre-exponential factor	A	$3.2X10^8$
Activation energy	E_a	$35.35RT_0/M$
Chemical energy release	Q	$48.82RT_0$

Table 1과 2를 바탕으로 관 내부, 즉 기체 영역에서 전파되는 초음속 화염에 의해 관, 즉 고체 영역에 미치는 영향을 확인하기 위하여 아래 Fig. 1과 같은 평행한 이차원 실린더 관을 사용하였다. 여기서 계산 영역의 크기는 $250X35mm^2$로 설정하였으며 계산 영역에서의 경계 조건으로 좌측은 zero gradient condition (유입 조건)으로, 우측은 zero gradient condition (방출 조건)으로 각각 설정하였다. 또한 위쪽은 대칭 조

건을 사용하였다. 관 내부 벽면 경계의 추적 및 경계 값은 level-set 기법과 ghost fluid 기법을 통하여 결정하였다.

Table 2. Parameters of copper tube model

Properties	ρ	8930 kg/m^3
	E	117 GPa
	γ	0.35
	c	383.5 W/m·K
	k	401 J/kg·K
	T_m	1358 K
Mie-Gruneisen EOS parameters	Γ	2.0
	c_0	3940 m/s
	s_0	1.49
Constitutive (Jonson-Cook model) parameters	Y_0	0.09 GPa
	B	0.1 GPa
	N	1.0
	C	0.025
	m	1.09
	G	43.33 GPa

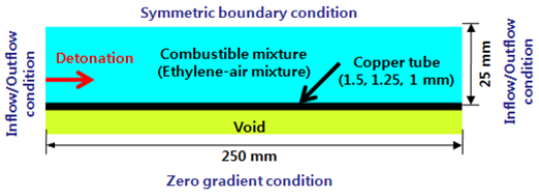

Fig. 1 Schematic of numerical setup of parallel tube

특히, 관과 혼합물 사이의 경계값을 결정하기 위해선 임의의 ghost node를 설정해야 한다. 이 때의 ghost node 값들의 결정을 위해선 알고 있는 값의 등엔트로피 가정 하에서 외삽법이 활용되는데 이는 아래의 Fig. 2를 통해 확인할 수 있다. 그림에서 확인 할 수 있듯이 임의의 ghost node G를 구하기 위해서 G에서 경계면에 대해 수직선 $\overrightarrow{N}$ 방향으로 거리 $\sqrt{\triangle x^2+\triangle y^2}$ 만큼 떨어진 E_1과 E_2를 사용한 외삽법을 통해 구하게 되는데 여기서, E_1과 E_2는 각각 주위 node 값으로부터 내삽법을 통해 구한다. 외삽법을 통해 G의 속도 성분, 밀도, 화학종 분율, 그리고 내부 에너지가 결정되며 압력은 상태 방정식을 통해 결정한다.

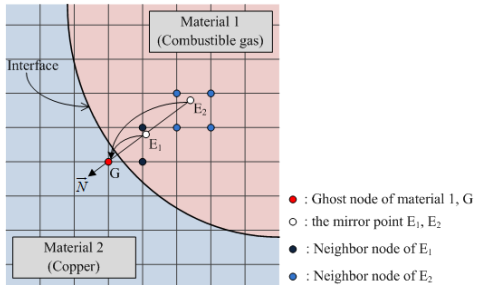

Fig. 2 Explanatory diagram of extrapolation process

3. 결과 및 논의

초기 저압 기체의 초음속 화염 전파에 의한 벽면의 변형 현상을 직접적으로 확인하기 위해서는 얇은 관의 사용이 필수적이다. 일반적으로 기체의 초음속 화염 압력 상승은 초기 압력 대비 대략 20배를 보이게 되는데, 굵은 관을 사용할 경우 기체의 초음속 화염에 의한 관의 변형을 확인할 수 없기 때문이다. 아래 Fig. 3은 두께, 1mm의 구리 관에서 초기 압력, 0.1 bar의 에틸렌-공기 혼합물의 초음속 화염 전파 (전파 속도, 1850 m/s) 의 밀도장을 보여주고 있다.

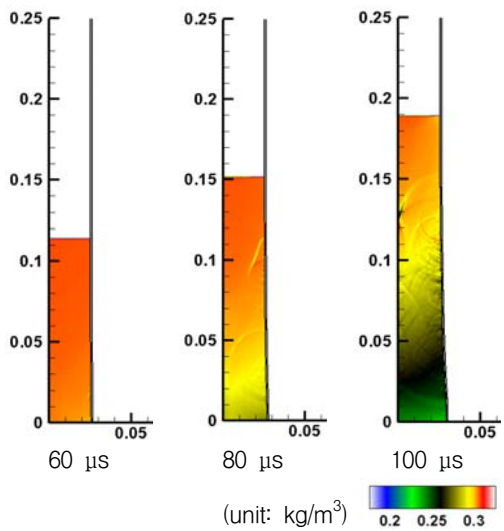

Fig. 3 Snapshots of density fields in thin wall tube

여기서, 계산 영역 내 최초 초음속 화염의 전파에 의해 관의 팽창 현상과 더불어 체적 증가

된 부분에서의 밀도 감소 현상 또한 확인할 수 있다. 최초 팽창파는 대략 60 μs부터 확인되었으며 시간이 흐름에 따라 팽창파가 전파되면서 유동장 내 여러 팽창파와의 간섭 현상을 확인하였다.

또한 축을 기준으로 한 radial velocity를 살펴보면, 초음속 화염에 의한 압력 하중이 구리의 항복 응력을 넘는 시점을 기준으로 급격히 증가함을 확인할 수 있는데, 아래의 Fig. 4는 시간에 따른 radial velocity의 크기를 보여준다. 그림에서 확인할 수 있듯이 60 μs (팽창파가 발생하는 지점)에서 높은 속도 값을 확인할 수 있으며 팽창 부위를 중심으로 높은 속도 분포가 형성됨을 확인할 수 있다.

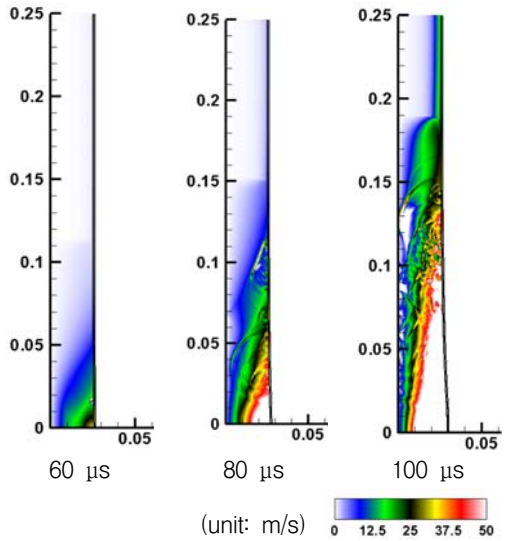

Fig. 4 Snapshots of radial velocity fields in thin wall tube

앞서 언급하였듯이 관의 두께가 두꺼울 경우, 초기 저압 기체의 초음속 화염 전파에 의한 압력으로는 관의 변형을 유도할 수 없다. 아래의 Fig. 5(a)와 (b)는 각각 두께 1 mm와 1.25 mm 구리 관에서 같은 압력 상승을 유도하는 초음속 화염 전파 시, 관 두께의 차이에 의한 팽창의 정도를 구리 관 내부의 effective plastic strain 값을 통하여 보여준다.

우선, Fig. 5(a)에서는 두께 1 mm 구리 관에 대한 effective plastic strain값을 보여주고 있다. 보는 바와 같이 항복 응력을 넘어서는 60 μs 이후 시간이 지남에 따라 관 팽창에 의해 값이 증가함을 확인할 수 있다. 또한 Fig. 5(b)에서는 1.25 mm 구리 관에서의 결과를 보여주는데 두께가 두꺼워짐에 의해 관의 팽창 시간이 지연되고 그 정도 또한 감소한다.

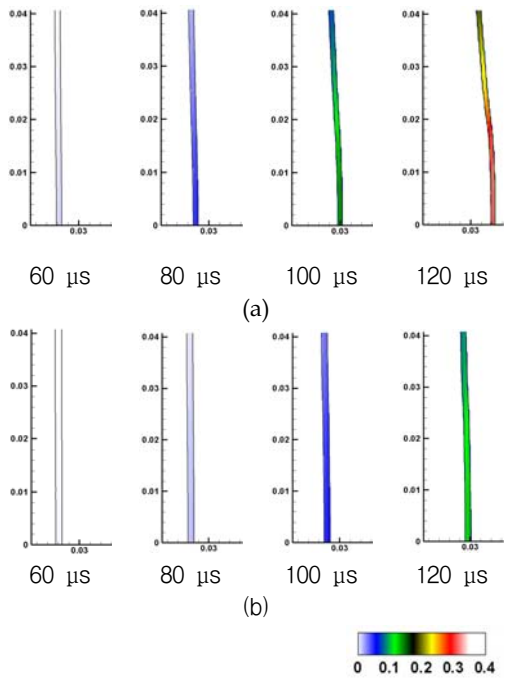

Fig. 5 Snapshots of effective plastic strain fields in two different wall thickness tube, (a) 1 mm and (b) 1.25 mm

추가적으로 관 팽창과 관 두께간의 상관 관계는 아래의 Fig. 6을 통하여 확인할 수 있는데 그림에서 보는 바와 같이 계산 영역 내 가장 변화가 심한 부분에서의 관 팽창의 비는 관 두께가 두꺼워짐에 따라 감소하며 1.5 mm의 구리 관의 경우는 120 μs까지 약간의 진동만을 가질 뿐 팽창에 의한 변화가 없음을 확인할 수 있다. 이는 추후 연구에서 초음속 화염 전파 시 안전성을 확보하기 위한 최소한의 구리 관 두께를 예측할 수 있는 기틀을 제공한다.

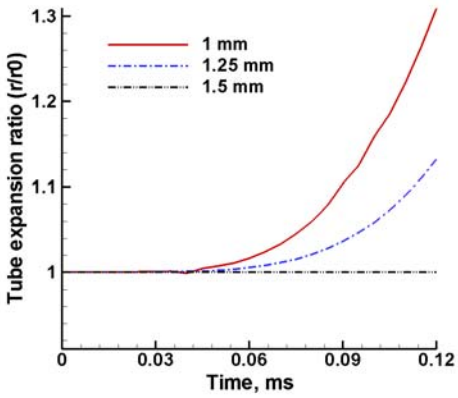

Fig. 6 Tube expansion ratios of three different thickness tubes (1, 1.25, and 1.5 mm)

4. 결론

본 연구에서는 다상 물질이 고려된 수치 해석을 통하여 초음속 화염의 전파에 의한 관의 변형과 관의 변형에 의해 유도되는 화염 내 팽창파의 발생 및 간섭 현상에 대해 살펴보았으며 낮은 초기 압력 (0.1 bar) 하에서 에틸렌-공기 혼합물의 초음속 화염 발생 시 안전성을 확보하기 위해 최소한의 구리 관 두께를 예측할 수 있는 수치적 기반을 마련하였으며 추후 실험이 이루어진다면 검증을 통하여 수정/보정할 수 있을 것이다.

후 기

본 연구는 고압충격 폭발현상 해석기법 특화연구실의 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. Kim, D. H. and Yoh, J. J., "Predictive model of onset of pipe failure due to a detonation of hydrogen-air and hydrocarbon-air mixtures," Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 34, 2009, pp. 1613-1619.
2. Gwak M. C. and Yoh, J. J., "Gaeous deflagration-to-detonation impact simulation on copper-based furnace injector," Combustion Explosion and Shock Waves, Vol. 47, 2011, pp. 457-463.
3. 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.
4. Tran, L. B. and Udaykumar, H. S., "A particle-level set-based sharp interface caresian grid method for impact, penetration, and void collapse," J. Comput. Phys., Vol. 193, 2004, pp. 469-510.
5. Hartmann, D., Meinke, M., and Schroder, W., "A level-set based adaptive-grid method for premixed combustion," Combut. Flame, Vol. 158, 2011, pp. 1318-1339.
6. 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.