

論文

Induction Parameter Modeling을 이용한 열 분해된 JP-7 연료 /산소
혼합기의 데토네이션 과 해석

조덕래*, 신재렬*, 최정열**, Vigor Yang***

Detonation Wave Simulation of Thermally Cracked JP-7
Fuel/Oxygen Mixture using Induction Parameter Modeling

Deok-Rae Cho*, Jae-Ryul Shin*, Jeong-Yeol Choi** and Vigor Yang****

ABSTRACT

The detonation wave characteristics of JP-7 and oxygen mixture is investigated by one-step induction parameter model (IPM) obtained from a detailed chemistry mechanism. A general procedure of obtaining reliable one-step kinetics IPM for hydrocarbon mixture from the fully detailed chemistry is described in this study. The IPM is obtained by the reconstruction of the induction time database obtained from a detailed kinetics library. The IPM was confirmed by the comparison of the induction time calculations with that from detailed kinetics. The IPM is later implemented to a fluid dynamics code and applied for the numerical simulation of detonation wave propagation. The numerical results show the detailed characteristics of the detonation wave propagation in JP-7 and oxygen mixture at affordable computing time, which is not be possible by the direct application of the detailed chemical kinetics mechanism of hydrocarbon fuel combustion.

초 록

JP-7/산소 혼합기의 데토네이션 과 특성을 상세 반응 기구로부터 얻은 일 단계 유도 변수 모델을 (IPM) 이용하여 살펴보았다. 탄화수소 혼합기에 대한 상세 화학 반응 모델로부터 신뢰할 만한 일 단계 반응 모델을 얻기 위한 일반적 과정을 본 연구에서 제시하였다. IPM은 상세 반응 모델 라이브러리로부터 획득한 유도 시간 데이터베이스를 재구성하여 얻었으며, 상세 반응 모델에 의한 결과와 비교하여 확인하였다. 이후 IPM을 유체역학 해석 코드에 적용하였으며, 데토네이션 과 전파에 대한 수치해석에 이용하였다. 수치해석 결과는 탄화수소 연료 연소의 상세 반응 기구를 직접 적용해서는 가능하지 않은, JP-7/산소 혼합기의 데토네이션 과 전파 특성의 상세한 특징을 보여주었다.

Key Words : Detonation Wave(데토네이션 과), Hydrocarbon Fuel(탄화수소 연료), Detailed Chemical Kinetics(상세 반응 기구), Induction Parameter Model (유도 변수 모델)

† 2008년 10월 27일 접수 ~ 2008년 3월 16일 심사완료

* 정희원, 부산대학교 항공우주공학과 대학원

** 정희원, 부산대학교 항공우주공학과

교신저자, E-mail : aerochoi@pusan.ac.kr

부산시 금정구 장전동 산 30번지

*** The Georgia Institute of Technology

1. 서 론

근래 환경 및 에너지 문제가 전 세계적인 화두로 대두되면서, 항공 우주 추진 분야에서도 기존 Brayton 사이클에 비하여 현격히 높은 열효율

을 가지는 추진기관에 대한 연구가 많은 관심을 얻고 있다. 이러한 노력의 한가지로써, 정압 연소를 이용하는 Brayton 사이클 대신에 Humphrey 사이클과 같은 정적 연소(Constant Volume Combustion, CVC) 방법에 관심이 증가하고 있다. 로켓 추진기관이나 공기흡입 추진기관과 같은 개방계 (Open System)에서 Humphrey 사이클을 구현하는 현실적인 방법으로써, 펄스 데토네이션 엔진 (Pulse Detonation Engine)이나, 연속 (또는 회전) 데토네이션 엔진(Continuous or Rotating Detonation Engine, CDE or RDE) 그리고 Detonation Wave Rotor 등 데토네이션 파를 이용하는 연소 방법에 대하여 지난 십년간 매우 많은 진척이 있었다.

이러한 새로운 종류의 데토네이션 이용 추진기관의 발전 과정에서 전산유체역학에 의한 압축성 연소 유동 해석은 작동과정에 대한 이해를 돕고 시스템의 최적 설계에 많은 기여를 하고 있다 [1-3]. 그러나 데토네이션 현상을 수치적으로 해석하여 설계에 이용하는데 있어서의 문제점은, 데토네이션의 구조 및 안정성 등 공학적 필요에 의해서 상세 반응 과정에 의하여 지배되는 점화 지연 (혹은 유도 시간, ignition delay or induction time)을 정확히 예측할 필요가 있는 반면, 실제 화학반응의 상세 과정에 대한 이해가 크게 필요 하지는 않다는 것이다.

아울러 일반적으로 미분 방정식이 서로 결합되어 있는 유체 역학 방정식과 상세 화학 반응식을 전산 해석하는데 걸리는 시간은 기본적으로 방정식의 수에 비례한다. 즉, 전체 연산 시간은 보존 법칙이 적용된 화학종의 수와 유체역학 방정식의 수에 비례한다. 한편 긴 계산 시간이 필요한 지수 함수를 포함하는 반응 속도 상수의 계산은 반응의 수에 비례하며, 화학 반응식의 경직성(stiffness)을 극복하기 위한 음(implicit)해법에 필요한 연산 횟수는 화학종의 세제곱에 비례한다. 따라서 연결된 유체역학 방정식과 연계된 화학 반응식을 계산하는데 걸리는 시간은 적어도 관여하는 화학성분의 수에 비례하는 것 이상으로 크다. Table 1은 다양한 유체 역학 모델을 계산하는데 걸리는 시간을 표로 나타낸 것이다. 계산 시간은 비점성 유체 역학 음해법 모델을 펜티엄 III 650 MHz CPU를 이용한 결과이다.

상세 반응 해석의 연산 처리 시간은 탄화수소 연소의 해석과 같이 많은 화학종을 고려할수록 정도가 커진다. 탄화수소 연소 반응 해석을 위한 대표적인 상세 반응 기구로는 GRI Mech. 3.0 [4]을 들 수 있다. GRI Mech.3.0 은 325개 반응 단

Table 1. Computing times for the coupled fluid dynamics and chemical kinetics models

Fluid dynamics - Kinetics Model	Computing time μs /iteration/node
Non-Reacting flow	9.60
Non-Reacting flow +1 more conservation equation	12.73
Non-Reacting flow +1 more conservation equation with exponential source term	16.01
5 species and 1 steps kinetics for CH ₄ /Air	30.53
9 species and 19 steps detailed kinetics for H ₂ /Air	80.40
22 species and 34 steps reduced kinetics for CH ₄ /Air	233.06

계에서 53종의 화학 성분을 포함하며, 이를 이용하여 유체역학과 직접 연계된 해석은 실질적으로 곤란하다. 유체 역학과 연계된 해석을 위하여 15개에서 20개의 화학종이 포함된 축소 반응 기구 (reduced kinetics mechanism)을 이용하여 상당히 신뢰할 수 있는 결과를 얻을 수 있지만 [5], 유체역학과 연계된 해석은 여전히 많은 전산 해석 시간을 요구한다.

따라서 데토네이션 파의 유체역학적 해석에 상세 반응 기구를 이용하는 경우는 수소 연료의 연소와 같이 한정된 경우에만 이용되며, 일반적으로는 Arrhenius 반응식에 근거한 일단계 비가역 반응을 이용한 해석이 주를 이룬다. 그러나 이 방법은 정확도에 한계가 있기 때문에, Oran 등은 수소-공기 및 메탄-공기 혼합기에 대하여 유도 변수 모델(induction parameter model, IPM)을 제안 하였으나 [6], 수소와 메탄 연료에 대한 모델 결과와 데토네이션 파 해석 결과만을 다루었을 뿐 상세한 유도 개발 과정을 기술하지는 않았다. IPM은 넓은 온도, 압력 범위에서 상세 반응 기구를 이용하여 얻어진 데이터베이스를 바탕으로 최소 자승법(Least Square Method)과 같은 최적화 알고리즘을 이용하여 반응 속도 계수를 구한다. 이 방법은 열 폭발만을 고려하며, 연쇄반응 기구(chain-branching mechanism)에 의한 폭발 과정은 고려하지 않으므로, 물리적 과정을 정확히 모사할 수는 없지만, 상세 반응의 해석 결과를 함수 형태의 곡선접합 (curve fitting)을 통하여 재현하므로 높은 신뢰성을 가질 수 있다. 특히 유체역학 방정식과 연계된 해석을

수행하는 경우 IPM은 하나의 유도 변수의 보존 방정식만을 이용하므로 일단계 비가역 반응 모델과 같은 정도의 높은 효율성을 가진다.

본 논문에서는 간단한 일단계 반응 모델이 존재하지 않는 일반적인 탄화수소 연료의 한 가지 예로써, 고속 추진 기관의 연료로 고려되는 JP-7 연료를 대상으로 IPM의 일반적인 절차를 수립하였다. 이를 바탕으로 본 연구에서는 재생 냉각 시스템 내에서 열 분해(thermally cracked)되어 데토네이션 발생기에 공급된 JP-7 연료/산소 데토네이션과의 파면 구조 및 불안정을 살피는 일차원 및 이차원 전산 유체역학 해석을 수행하였다.

II. 유도 인자 모델

2.1 Induction Time 데이터베이스

고속 추진기관의 연료로 고려되는 JP-7 연료는 재생 냉각 과정에서 가벼운 탄화-수소로 열분해되며 기체 상태로 연소실에 분사된다. 본 연구에서 열 분해된 기체 상태 JP-7 연료의 구성 성분은 참고문헌 [7]의 값을 이용하였으며 Table 2에 나타내었다.

유도 시간의 계산은 데토네이션 충격과 후방의 과정을 간단히 모사하기 위하여 정적 조건에서 수행하였다. 계산에는 Chemkin-II 패키지와 LSODE solver를 사용하였다 [8]. 탄화수소 연료의 반응 속도 메커니즘으로는 325개 반응 및 53종의 화학 성분을 포함하는 GRI Mech-3.0 데이터베이스를 사용하였고, 고압 연소 반응 속도를 고려하였다 [4]. 본 연구에서는 연료 과농인 액체 로켓의 작동 조건을 대략적으로 가정하여 산소와 연료의 몰 비는 2.0으로 고정하였으며, 이는 산소와 연료의 질량비 3.75나 당량비 1.23에 해당한다. 초기 압력, p_i 는 0.1, 0.3, 1.0, 3.0, 10, 30, 100, 300, 1000 atm을 대상으로 하였고, 초기 온도, T_i 는 900~1,800 K 범위에서 100 K 씩 증가시켰다. 점화 지연을 나타내는 화학 유도 시간, t_{id} 는 최대 온도 구배가 나타나는 시간으로 정의하였으며, 모든 결과를 요약하여 Fig. 1에서 나타내었다.

Table 2. Composition of thermally cracked JP-7 fuel

성분	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₂ H ₄
질량 분율, y_i	0.005	0.383	0.293	0.319
몰 분율, x_i	0.052	0.503	0.205	0.240

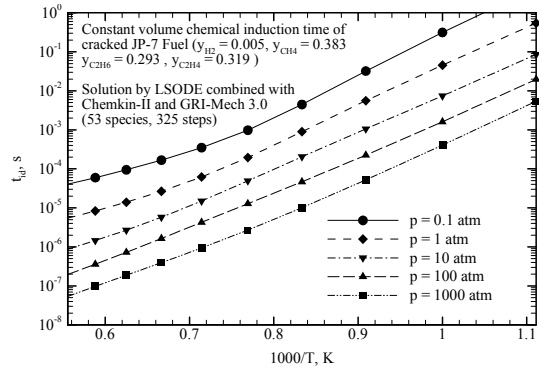


Fig. 1. Chemical induction time of cracked JP-7 and oxygen mixture depending on initial temperature and pressure

2.2 Induction Time의 함수화

위에서 구해진 유도 시간 데이터베이스의 결과, t_{id} 는 다음의 함수에 의해 초기 온도와 압력에 연관 지을 수 있다.

$$t_{id}(T, P) = \exp(f(T, P)) \quad (1a)$$

여기서 Arrhenius 반응 속도 상수 형태를 고려하여, 함수 $f(T, P)$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$f(T, P) = A^*(P) + \frac{E^*(P)}{T - T^*(P)} \quad (1b)$$

여기서 압력의 함수인 계수, A^* , E^* , T^* 는 주어진 압력에서의 데이터를 이용하여 최소 자승법 최적화 알고리즘을 통하여 구하며, 이때 비선형 방정식의 풀이에는 뉴턴 반복법을 이용하였다. 이와 같은 과정을 주어진 압력 범위에서 반복하여 압력의 함수로 표시되는 계수를 구하였으며, 각 계수는 압력의 함수로써 3차 다항식으로 표현하였다. 일정한 초기 온도와 고려한 압력 범위에서 10,000 배 정도, 전체 범위에서 1억 배까지 크게 변하는 점화 지연 유도 시간의 근사오차는 전 범위에서 10% 이하로 매우 작게 유지되었으며, 더 높은 고차 다항식을 이용하더라도 정확도는 향상되지 않았다.

2.3 Induction Parameter Modeling

생성물의 질량 분율을 나타내는 유도 인자 Z 를 도입하면, 반응 속도는 다음의 식을 이용하여 모델링할 수 있다.

$$\frac{dZ}{dt} = w(Z) = \frac{1}{\tau(T, P)} \quad (2)$$

이때, 유도 시간, $t_{id}(T, P)$ 는 열이 최대 배출되는 시간을 나타내므로, 다음과 같이 가정할 수 있다.

$$w_{\max} = \frac{1}{t_{id}}(T, P) \quad (3)$$

유도 시간 데이터는 정적 과정을 통하여 얻어지므로, 물성치가 일정하다면 온도와 압력을 유도 인자의 선형 함수로 정의할 수 있다.

$$T(Z) = T_0 + T_1 Z \quad (4a)$$

$$P(Z) = P_0 + P_1 Z \quad (4b)$$

$$f(T, P) = f(Z) \quad (4c)$$

여기서, T_0 와 P_0 는 각각 초기 온도와 압력이고 T_1 과 P_1 은 연소된 혼합물과 연소되지 않은 혼합물의 온도와 압력 차이이다. 연소 최종 상태의 값은 CEA 코드를 이용하여 얻는다[9].

한편, (1)과 (3)식에서 수학적인 직관을 바탕으로 반응을 w 는 다음과 같이 놓을 수 있으며,

$$w(Z) = \frac{C}{f'(Z)} \exp(-f(Z)) \quad (5)$$

함수, f 및 그 도함수를 대입하면 IPM에 의한 반응 속도 식은 최종적으로 다음과 같이 표시된다.

$$\frac{dZ}{dt} = C \frac{(T - T^*(P))}{E^*(P) T_1} \exp\left(-A^*(P) - \frac{E^*(P)}{T - T^*(P)}\right) \quad (6)$$

여기서 w 의 최대값은 수식 (3)에서 정의된 w_{\max} 와 같아야 하므로 계수 C 는 $w(Z)$ 의 도함수에서 구할 수 있다. A^* , E^* 와 T^* 를 국부적으로 일정하다고 가정하고 $f(Z)$ 함수의 Taylor 전개를 2차식까지만 사용하면 계수 C 는 다음과 같이 근사된다.

$$C = -\frac{4T_1}{E^*} \quad (7)$$

여기서 식 (7)의 E^* 는 압력에 관한 함수이므로 계수 C 는 상수가 아니라 유동조건에 따라 변화하는 함수이다.

정적 과정을 가정하여 위의 IPM 반응 속도 식으로부터 유도 시간을 상세 반응 기구를 이용한 해석에서와 같은 온도 및 압력 범위에서 다시 계산할 수 있으며, 계수 C 는 대부분의 조건에서 1.0 보다 약간 작은 값을 가진다. 그러나 C 값은 높은 압력에서만 1.5 보다 커지며, 이때 유도 시간은 과소 예측된다. 한편, IPM은 상세 반응 기

구 해석의 결과를 근사시킨 함수에 근거하고 있으며 이미 몇몇 가정을 포함하고 있기 때문에 식 (5)에서와 같이 상수로 생각할 수 있으므로, 넓은 온도 및 압력 범위에서 전반적으로 정확도를 가질 수 있는 상수 값으로 1.0을 적용하였다. Fig. 2는 $C=1.0$ 으로 가정한 경우 IPM의 유도 시간 결과를 상세 반응 기구 해석에 의한 결과와 비교한 그림이다. 두 결과는 매우 잘 일치하고 있으며, 오차는 매우 낮은 압력과 온도 조건을 제외하고는 대부분의 경우에서 1% 미만이다.

Fig. 3은 10 기압 조건에서 여러 초기 온도에 대하여 상세 반응 기구 및 IPM을 이용하여 점화 과정을 해석한 결과의 온도 변화 곡선을 나타낸 그림이다. IPM 결과는 연쇄반응에 의한 폭발 과정을 고려하지 않고 열 폭발만으로 모델링한 반응 속도 식 (6)의 수학적 특성으로 인하여 온도가 좀 더 빨리 상승하는 특징을 볼 수 있으며, 유도 시간이 약간 불일치한다. 그러나 효율성을 고려할 때 오차는 대체로 작은 수준이라고 여겨진다.

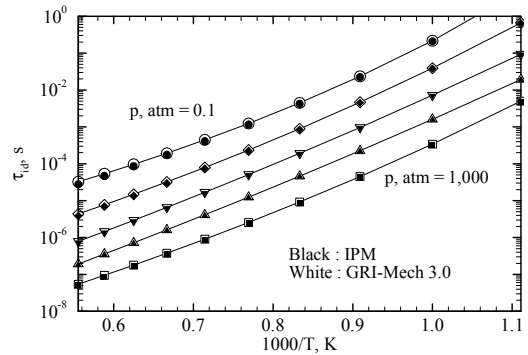


Fig. 2. Comparison of the chemical induction time calculated by detailed kinetics and IPM with $C=1.0$.

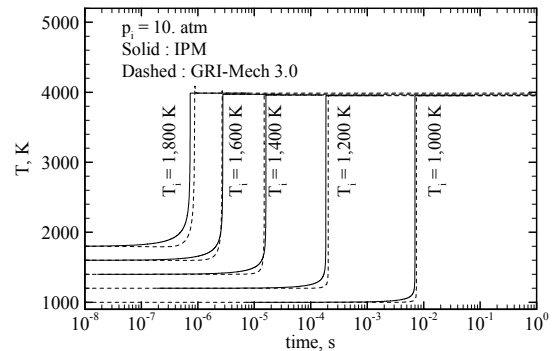


Fig. 3. Dependency of temperature evolutions on different initial temperatures with $p_i = 10$ atm

III. 전산 유체 역학과의 연계

3.1 IPM과 연계된 지배 방정식

데토네이션 파의 전파 과정을 전산 유체역학과 연계하여 해석하기 위하여 IPM을 압축성 유동 지배 방정식과 연계하였으며, 2차원 공간에서 벡터 형태로 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho Z \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ (\rho e + P)u \\ \rho Zu \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ (\rho e + P)v \\ \rho Zv \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (8)$$

여기서 단위 질량당 에너지는 다음과 같이 정의되며,

$$e = \frac{R(Z)}{\gamma(Z)-1} T + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) - Zq \quad (9)$$

이상기체 상태 방정식은 다음과 같다.

$$P = \rho R(Z) T \quad (10)$$

여기서 기체 상수와 비열비는 기연 및 미연 상태의 값들로부터 각각 다음과 같이 정의된다.

$$R(Z) = R_U(1-Z) + R_B Z \quad (11)$$

$$\gamma(Z) = \frac{\gamma_U(\gamma_B-1)(1-Z) + \gamma_B(\gamma_U-1)Z}{(\gamma_B-1)(1-Z) + (\gamma_U-1)Z} \quad (12)$$

위 두 식에서, 하첨자 U 와 B 는 각각 미연 (unburned) 및 기연(burned) 상태를 나타낸다.

지배 방정식의 이산화에는 유한 체적법을 이용하였으며, 대류 플럭스는 Roe 의 근사 Riemann 해법을 적용하여 유도하였고, 고차 정확도를 위하여 TVD 기법을 적용한 3차 외삽을 이용하였다. 시간 적분에는 2차 정확도의 시간 근사를 포함한 LU-SGS 음해법을 적용하였으며, 수치적 경직성을 유발하는 화학반응의 생성항도 음해법으로 처리하였다.[10] 각 시간 단계에서 시간 정확도를 위하여 sub-iteration을 수행하였다. 한편, 음해법을 4차 Runge-Kutta 방법과 비교하였을 때, 더 큰 시간 간격을 제공하는 측면의 장점뿐만 아니라 [11], 초기 과정의 비대칭성으로 인하여 데토네이션 파의 불안정성을 좀 더 일찍 유발하기 때문에 계산 초기 과정을 단축시키는 장점을 얻을 수 있었다.

3.2 데토네이션 전파 과정의 일차원 해석

전산 유체역학 해석과 연계된 IPM 모델의 타당성을 살펴보기 위하여 일차원으로 데토네이션 전파 과정의 일차원 해석을 수행하였다. 열 분해

된 JP-7 연료/산소 혼합기의 초기 조건은 당량비 1.23, 1 MPa, 400 K 으로 설정하였다. 미연 및 기연 상태의 초기 조건은 CEA 코드를 이용하여 계산한 Chapman-Jouguet(C-J) 데토네이션 파의 전후의 값을 이용하였으며, 계산된 C-J 데토네이션파 특성 값은 $P_1/P_0 = 26.881$, $T_1/T_0 = 10.672$, $\rho_1/\rho_0 = 1.8384$ 그리고 $V_{CJ} = 2580.1 \text{ m/s}$ 이다. 또한 미연 및 기연 기체의 비열비는 각각, $\gamma_B = 1.1481$, $\gamma_U = 1.2992$ 이며 기체 상수는 각각 $R_U = 293.23 \text{ J/kg} \cdot K$, $R_B = 401.79 \text{ J/kg} \cdot K$ 이다. 한편, Rankine-Hugoniot 관계식과 C-J 구속 조건을 이용하여 발열량은 $q = 1.0422 \text{ J/kg}$ 으로 얻어 진다.

고려한 혼합기의 데토네이션 파 구조를 포착하기 위하여 필요한 격자의 크기를 추정하는 일련의 일차원 해석을 수행하였다. Fig. 4는 이 가운데 0.2 m 당 1,000 개 및 8,000 개의 대표적으로 서로 다른 해상도를 가지는 격자를 이용한 경우의 시간 진행에 따른 데토네이션 파의 구조를 나타낸 그림으로써, 두 계산 격자에 의한 결과는 데토네이션 파 후방의 전반적인 압력 분포가 대체로 일치하는 결과를 보여준다. 이 결과에서 데토네이션 파의 구조는 파면에서 압력이 급격히 상승하는 von Neumann spike 를 보이고 나서, C-J 조건까지 압력이 떨어진 후, 막혀 있는 끝단의 조건을 만족할 때 까지 팽창한다. 계산된 C-J 압력은 26.8 MPa 로써, CEA 코드를 이용한 이론 값과 잘 일치한다. 파의 위치로부터 추정한 데토네이션 파의 속도는 2580.3 m/s 로써 역시 이론 값과 거의 일치한다.

이 결과로부터 격자 해상도가 충분히 높은 경우, C-J 압력은 물론 ZND (Zel'dovich-

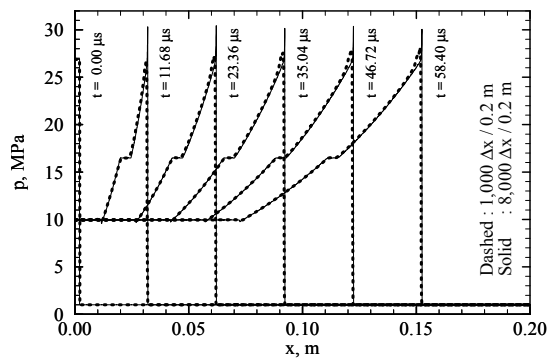


Fig. 4. Temporal evolution of one-dimensional detonation wave with different grid resolutions

Neumann-Döring) 구조를 포함하는 von Neumann spike 압력까지 예측할 수 있음을 알 수 있다. 그러나 본 해석 결과는 계산 공간 내에서 데토네이션 파가 전파되는 동안 파면의 불안정성이 유발될만한 충분한 시간 및 공간적 여유를 가지지 못하여 파면의 구조 자체는 거의 일정하게 유지되는 준-정상 상태의 결과만을 보여준다.

3.3 데토네이션 파의 일차원 준정상 해석

따라서 전파되는 파의 해석에서 파면의 상세 구조를 포착하기 위하여 필요한 국부적 격자 밀집과 같은 수치적 어려움을 피하고 일차원적 불안정성을 포착하기 위하여 입구 유동이 C-J 속도로 불어오는 준-정상 상태의 해석을 수행하였다. 유동의 조건은 이전과 같으며 출구 조건은 C-J 조건을 적용하였다. 이 해석에서는 1,100 개의 격자를 이용하되, 격자의 크기를 줄여 가면서 불안정성의 포착 여부를 살펴보는 해석을 수행하였다. 초기 조건에서 ZND 데토네이션 파는 $x=0.0$ 에 위치하여, 파의 후방에 1,000개의 격자가 포함될 수 있도록 하였다. 이 해석 결과에 의하면 $\Delta x = 100 \mu\text{m}$ 인 경우에서부터 파의 불안정이 나타나기 시작하였으며, 여러 시간에서 중첩된 압력 파형의 결과를 Fig. 5에 나타내었다. 그러나 이 결과는 데토네이션파가 전후로 진동하는 특징은 잘 보여주지만, 압력 분포의 변동은 거의 나타나지 않아 데토네이션 파의 불안정성을 충분히 보여주지는 못하는 결과로 여겨진다.

따라서, 격자의 크기를 더욱 줄여가며 해석을 진행하였으며, 제한된 격자수에서 불안정성을 포착할 수 있는 최소의 격자 크기 $\Delta x = 20 \text{ nm}$ 였다.

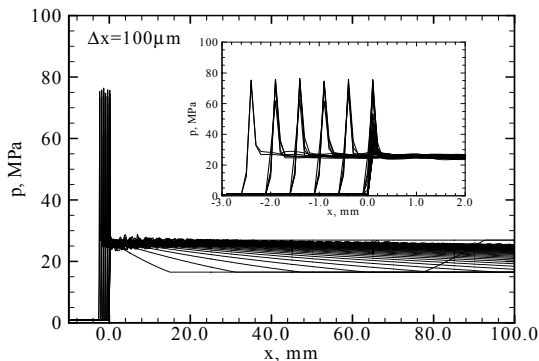


Fig. 5. Pressure distributions of the quasi-stationary detonation wave with $\Delta x = 100 \mu\text{m}$

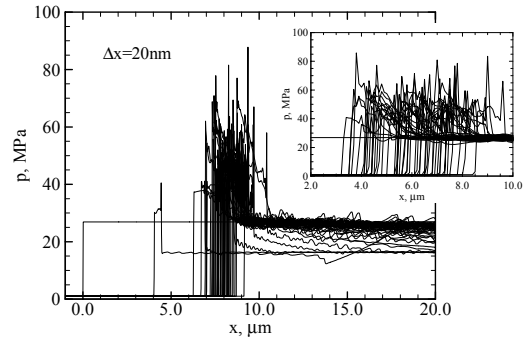


Fig. 6. Pressure distributions of the quasi-stationary detonation wave with $\Delta x = 20 \text{ nm}$

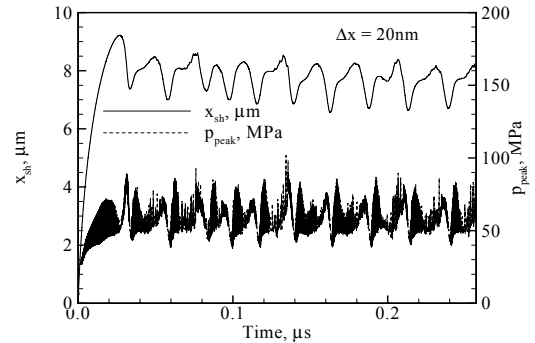


Fig. 7. Temporal variations of detonation wave location and peak pressure with $\Delta x = 20 \text{ nm}$

이보다 작은 격자 간격을 이용하는 경우에는 제한된 공간 내에서 데토네이션 파가 안정되지 못하고 후방으로 흘러가버리는 결과를 보였다. Fig. 6은 $\Delta x = 20 \text{ nm}$ 인 경우 여러 시간에서 중첩된 압력 파형을 보여준다. 이 그림에서 압력 파형은 매우 불규칙하게 진동하고 있음을 알 수 있으며, 이로써, 본 연구에서 고려한 JP-7/산소 혼합기의 데토네이션 파와 같이 강한 불안정 (highly unstable) 영역에 있음을 알 수 있다 [12]. Fig. 7은 데토네이션 파면 및 파 후방의 압력(von Neumann peak)의 시간에 따른 변동을 도시한 그림으로써 파면이 전후방으로 약 30 MHz 정도의 고주파로 진동함을 알 수 있다. 이때, 최고 압력은 C-J 압력에 비하여 대략 1.5~4배 범위의 40~100 MPa 까지 진동함을 알 수 있다.

3.4 데토네이션 파면 구조의 이차원 해석

일차원 해석 결과를 바탕으로 2차원 파면 구조를 살피기 위한 해석을 수행하였다. 해석 영역

의 크기는 데토네이션 파의 이차원 구조를 엄밀히 연구하였다. 계산 영역의 크기는 길이 $20 \mu\text{m}$, 높이 $30 \mu\text{m}$ 로 설정하였다. 유동 방향으로 총 500개의 격자를 이용하였으며, 그 중 400 개의 격자를 25 nm 의 크기로 데토네이션 파 주위에 분포시켰고, 나머지 격자는 하류로 가면서 확장되도록 설정하였다. 높이 방향으로는 50 nm 의 크기로 600 개를 설정하였다. 전반적인 유동 조건은 일차원 해석에서와 동일하게 설정하였으며, 상하의 벽면조건은 주기적 경계조건을, 출구 조건은 외압 조건을 이용하였다. 계산에 필요한 물리적 시간 간격은 CFL 수 1.0에 근거하여 7.87×10^{-12} 초로 설정하였고, 각각의 시간 간격에서 최대 4회의 반복 부연산 (sub-iteration)을 수행하였다.

Fig. 8은 데토네이션 파의 파면 구조를 보여주는 밀도 분포와 밀도 구배 분포도이다. 강한, 또는 약한 충격파 후방에 존재하는 유도 영역의 존재를 볼 수 있으며, 위쪽 또는 아래쪽으로 향하는 횡단 충격파(transverse wave) 들과, 이들 충격파들의 상호 작용에 의한 삼중점의 존재와 와동의 존재 등과 같은 강한 불안정 데토네이션 파의 일반적인 특징을 확인할 수 있다. Fig. 9는 시간에 따른 데토네이션 파면 구조의 변화를 살펴기 위하여 데토네이션 파의 진행 방향에 따라 파면의 밀도 분포도를 나열한 것이다. 이 그림을 통하여 삼중점이 전파하여 가는 과정 및 충격파와 유도 영역의 변화 등 파면 구조의 변화를 살펴 볼 수 있다. Fig. 10은 삼중점의 이동 경로를 살펴기 위하여 충격파 후방 최고 압력의 시간에 따른 변화를 도시한 수치적 smoked-foil 결과로

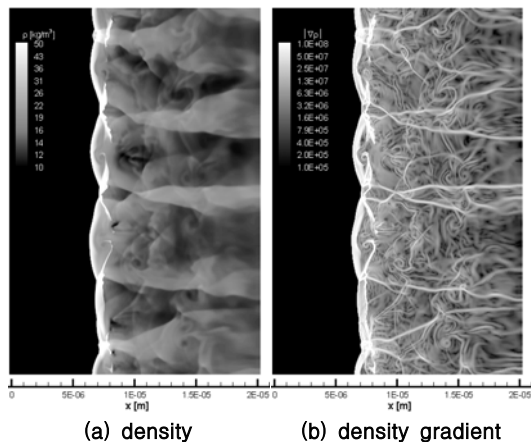
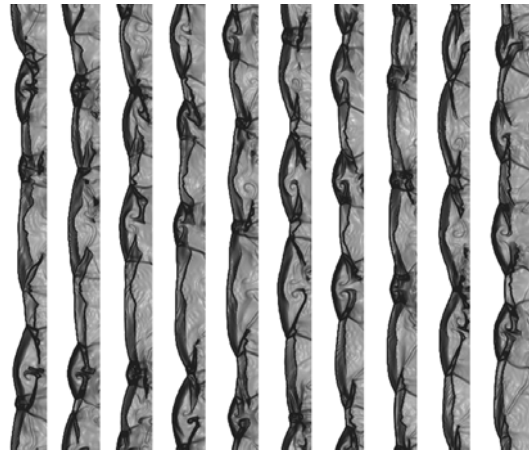


Fig. 8. Instantaneous density and density gradient distributions of the detonation wave



← 데토네이션 파 전파 방향

Fig. 9. Numerical Schlieren images showing the temporal evolution of the detonation wave front and the cellular structure

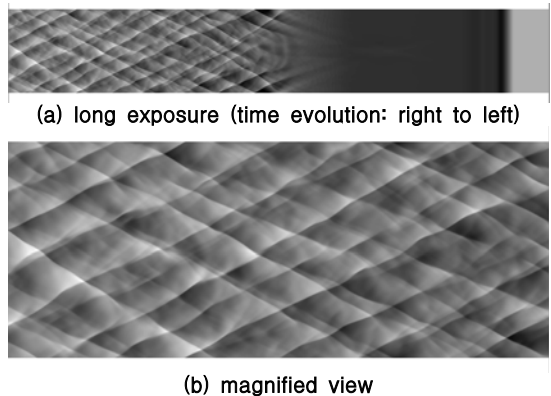


Fig. 10. Numerical smoked foil records

써, 데토네이션 파면의 x-t 선도에 해당한다. 우측의 초기 조건에서 시작한 해는 상하의 벽면에서 발생한 수치적 불안정이 해석 영역 안쪽으로 전파하여 최종적으로 데토네이션 파의 주기적 불안정을 야기하였다. 본 해석에서는 별도의 초기 섭동을 부여하지 않았으므로 파면의 불안정성이 발생하기까지는 매우 많은 계산이 필요하였다. 본 해석 조건에서 수치적으로 얻어진 데토네이션 셀 폭은 대체적으로 $5 \sim 10 \mu\text{m}$ 사이에서 변화하였으며, JP-7/산소 혼합물의 데토네이션 셀의 크기는 매우 불규칙하게 변화하고 있어 강한 불안정 영역에 있음을 확인할 수 있다.

Fig. 11은 계산 영역의 중간선을 따라 데토네이션 파면의 위치와 von Neumann peak 압력을

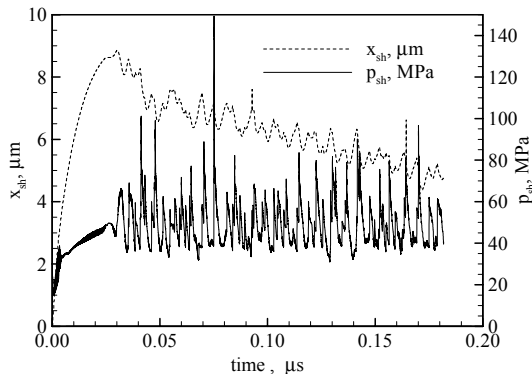


Fig. 11. Time history of shock wave location at the middle of the computational domain and the pressure behind the shock wave

기록한 그림이다. 데토네이션 파의 시간에 따른 위치 변화를 평균적으로 살펴볼 때, 이차원 해석에 의한 수치적인 데토네이션 파면의 속도는 C-J 속도에 비하여 약 40 m/s 정도 크게 관측되며, 이는 계산영역의 크기, 출구 경계 조건 및 3차원 효과의 배제 등에 의한 것으로 여겨진다 [12]. 한편 von Neumann peak 압력은 35에서 100 MPa 범위에서 진동하고 있으며, 파의 위치 및 압력에서 추정된 주요한 주파수는 수십 MHz 정도로써 대체로 일차원 해석의 결과와 일치하는 결과를 보여주고 있다.

IV. 결 론

상세 반응 기구를 이용한 유도시간 데이터로부터 탄화수소 혼합물의 신뢰성 있는 일단계 비가역 반응 속도 모델을 얻기 위한 IPM의 일반적인 절차를 확립하였으며, 이를 이용하여 열 분해된 JP-7 연료와 산소 혼합기의 반응 속도 모델을 구하였다. 이 모델을 이용하여 데토네이션 파의 특징을 살펴 볼 수 있는 일차원 및 이차원 전산 유체 역학 해석을 수행하였다. 상세 반응 기구를 이용하는 경우 매우 많은 해석 시간이 소요되어 실용적으로 불가능한 탄화수소 연료/산화제의 데토네이션 파 해석을 IPM을 이용하여 해석할 수 있었으며, 탄화수소 연료에서 일반적인 강한 불안정 데토네이션 파의 특징을 수치적으로 재현하고 살펴 볼 수 있었다.

후 기

본 연구는 NASA Marshall Space Flight Center (NAG8-187)의 지원과 한국과학재단을 통

해 교육과학기술부의 우주기초원천기술개발 사업 (NSL, National Space Lab., S10801010002-08A0101-00210)의 지원을 받았으며, 지원에 감사드립니다.

참고문헌

- 1) Ma, F., Choi, J.-Y., and Yang, V., "Internal Flow Dynamics in a Valveless Airbreathing Pulse Detonation Combustor Facility", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 24, No. 3, May-June 2008, pp. 479-490.
- 2) Ma, F., Choi, J.-Y., and Yang, V., "Propulsive Performance of Airbreathing Pulse Detonation Engines", *Journal of Propulsion and Power*, Vol.22, No.6, Nov. 2006, pp. 1188-1203.
- 3) Ma, F., Choi, J.-Y., and Yang, V., "Thrust Chamber Dynamics and Propulsive Performance of Multitube Pulse Detonation Engines", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 21, No. 4, July 2005, pp. 681-691.
- 4) Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Song, S., Gardiner Jr., W.C., Lissianski, V.V., and Qin, Z., GRI-Mech, www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- 5) Montgomery, C.J., Cremer, M.A., Chen, J.Y., Westbrook, C.K. and Maurice, L.Q., "Reduced Chemical Kinetic Mechanisms for Hydrocarbon Fuels", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 18, No. 1, Jan.-Feb., 2002, pp. 192-198.
- 6) Oran, E.S., Boris, J.P., Young, T., Flanagan, M., Burks, T., and Picone, M., "Numerical Simulations of Detonation in Hydrogen-Air and Methane-air mixtures", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 18, The Combustion Institute, 1981, pp. 1641-1649
- 7) Puri, P., Ma, F., Choi, J.-Y. and Vigor, Y., "Ignition characteristics of cracked JP-7 fuel", *Combustion and Flame*, Vol.142, 2005, 454-457.
- 8) Kee, R. J., Rumpley, F. M., and Miller, J.A., *Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics*, Gov. Pub. SAND89-9009B. Sep. 1989.
- 9) Gordon, S. and McBride, B.J., "Computer

Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Composition and Applications", NASA RP-1311, Oct., 1994.

10) Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 1: Validation", AIAA Journal, Vol. 38, No. 7, July 2000, pp. 1179-1187.

11) Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y.,

"Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 2: Comparison", AIAA Journal, Vol. 38, No. 7, July 2000, pp. 1188-1195.

12) Choi, J.-Y., Ma, F. and Yang, V., "Some Numerical Issues on Simulation of Detonation Cell Structures", Combustion Explosion and Shock Waves, Vol.44, No. 5, pp. 560-578, Sep. 2008.