creative commons
COMMONS DEED

저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:

저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.

비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.

변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 이용허락규약(Legal Code)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

Disclaimer

dCollection

공학석사학위논문

3 차원 적응적 격자 세분화 기법을 이용한 PETN 결정의 이방성 반응 특성 해석

Numerical analysis on anisotropic detonation of pentaerythritol tetranitrate crystal using three-dimensional adaptive mesh refinement

2017년 8월

서울대학교 대학원

기계항공공학부

이 웅 현

3 차원 적응적 격자 세분화 기법을 이용한 PETN 결정의 이방성 반응 특성 해석

Numerical analysis on anisotropic detonation of pentaerythritol tetranitrate crystal using three-dimensional adaptive mesh refinement

지도교수 여 재 익

이 논문을 공학석사 학위논문으로 제출함

2017년 8월

서울대학교 대학원

기계항공공학부

이 웅 현

이웅현의 공학석사 학위논문을 인준함

2017년 8월

위 원 장 : 정 인 석

부위원장 : 여 재 익

위 원 : 윤 영 빈

초 록

본 연구에서는 고폭화약 관련 수치해석을 위해 서울대학교 고에너지응용연구실에서 개발 및 응용하고 있는 snu-hydrocode 를 이용한 Pentaerythritol Tetranitrate(이하 PETN)이라 칭함의 이방성 반응 특성 해석이 수행되었다. 고에너지 물질 해석에 널리 쓰이는 I&G 모델의 경우 등방성 가정 모델이므로, 충격 하중 방향에 따라 반응 특성이 달라지는 PETN 을 해석하는 데에는 적합하지 않다. 이에 따라 본 연구에서는 strain 을 고려한 이방성 I&G 모델을 제시하였고, 충격 하중 방향에 따른 반응 유도 거리를 실험 결과와 대조하여 검증하였다. 새로운 이방성 I&G 모델을 이용해 2 차원 형상의 PETN 을 모사하여 고체 고폭화약 내부의 변형장을 관찰하였다. 또한 적응적 격자 세분화 기법을 도입하여 기존의 코드로는 계산이 어려웠던 3 차원 형상의 PETN 에 대한 해석을 수행하였고, 실험 결과가 존재하는 세 가지 방향에 대하여 각 방향으로의 민감성/둔감성을 관찰할 수 있는 계산을 수행하였다. 본 연구를 통해 고폭화약 시뮬레이션을 3 차원 상에서 타당하게 수행할 수 있는 수치 기법 기반을 마련하였다.

주요어: 이방성 (anisotropy), 폭연-폭굉 천이현상 (Shock-to-detonation transition), 적응적 격자 세분화 기법 (Adaptive mesh refinement)

학번: 2015-20787

목 차

초 록 ····· i
목 차 ····· ii
표 목차 ····· iv
그림 목차 ····· iv

제 1 장 서 론 1

제 2 장 이방성 반응 모델링 4
2.1 지배방정식 및 반응 모델 ····· 4
2.2 계산 결과 및 논의 ····· 8
2.3.1 1차원 계산 ····· 8
2.3.2 2차원 계산 ····· 10

제 3 장 적응적 격자 세분화 기법 12
3.1 적응적 격자 세분화 기법의 필요성 ····· 12
3.2 세부 과정 ····· 14
3.2.1 격자 저장 구조 및 탐색 ····· 14
3.2.2 격자 분할 및 병합 ····· 16
3.2.3 유한체적법 진행 ····· 17
3.3 기법 검증 ····· 19
3.3.1 1차원 충격파관 문제 ····· 19
3.3.2 경사충격파 각도 문제 ····· 21
3.3.3 충격파 회절 문제 ····· 22

3.3.4 2차원 리만 문제 ····· 23
3.4 기법 적용 결과 ····· 26
3.4.1 1차원 계산 ····· 26
3.4.2 3차원 계산 ····· 27

제 4 장 결론 31

참고문헌 ····· 32
Abstract ····· 34

표 목차

표 1 압력 하중 방향에 따른 반응 유도 거리 ····· 1

표 2 이방성 반응 모델에 사용된 물성치 ····· 6

표 3 JWL 상태방정식에 사용된 물성치 ····· 7

표 4 충격파관 문제 해석 정확도 및 계산 시간 비교 ····· 20

표 5 격자 분할 최고 단계에 따른 균일 격자 코드와 적응적 격자 세분화 코드의 성능 비교 ····· 26

표 6 각 방향 및 각 압력 하중에 대한 go / no-go 여부 분류 30

그림 목차

그림 1.1 밀러 지수를 이용한 각 방향의 표기 ····· 1

그림 1.2 <110> 방향으로 8GPa 의 압력하중을 가했을 때 반응 유도 거리 측정 (빨간 실선) ····· 8

그림 1.3 압력 하중 세기에 대한 반응 유도 거리 ····· 9

그림 1.4 계산 결과에서 추출한 폭굉파의 속도 및 실험 결과와의 비교 ····· 10

그림 1.5 <110> 방향으로 15GPa 하중을 가했을 때 압력 컨투어 (왼쪽부터 400 ns, 550 ns, 700 ns) ····· 11

그림 1.6 <100> 방향으로 15GPa 하중을 가했을 때 압력 컨투어 (왼쪽부터 400 ns, 550 ns, 700 ns) ····· 11

그림 1.7 적응적 격자 세분화 기법의 필요성 ····· 13

그림 1.8 충격파 전후로 격자를 집중시킨 예시 ····· 13

그림 1.9 카테시안 격자가 단계적으로 분할되는 과정 ····· 14

그림 1.10 분할 단계별로 격자의 일련번호를 부여한 모습 ····· 15

그림 1.11 격자 분할 과정 ····· 16

그림 1.12 수직충격파 (빨간 실선) 주변 격자가 분할되는 과정 1 7

그림 1.13 작은 격자에서의 플럭스 (빨강)로 상위 격자 플럭스 (파랑)을 보정하는 과정 18

그림 1.14 1 차원 충격파관 문제 해석 결과. 0 초 (왼쪽) 및 0.2 초 (오른쪽), 밀도 컨투어 (위) 및 격자 모식도 (아래) 20

그림 1.15 1 차원 충격파관 문제 해석 결과를 수학적 엄밀해 및 균일 격자 코드와 비교한 결과 20

그림 1.16 경사충격파 문제 해석 모식도 21

그림 1.17 경사충격파 각도 측정 결과 22

그림 1.18 충격파 회절 문제 해석 결과. 격자 모식도 (왼쪽), 수치 슐리렌 이미지 (가운데), 실험 슐리렌 이미지 (오른쪽) 22

그림 1.19 2 차원 리만 문제의 초기 조건 23

그림 1.20 2 차원 리만 문제 case 3. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우) 23

그림 1.215 2 차원 리만 문제 case 4. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우) 24

그림 1.226 2 차원 리만 문제 case 5. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우) 24

그림 1.237 2 차원 리만 문제 case 12. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우) 24

그림 1.248 2 차원 리만 문제 case 16. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우) 25

그림 1.259 2 차원 리만 문제 case 17. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우) 25

그림 1.26 1 차원 PETN 계산 결과. 균일 격자 (실선), 적응적 격자 세분화 (삼각형) 27

그림 1.27 3 차원 해석 수행 결과 예시. 모식화된 격자 (왼쪽), 압력 컨투어 (가운데), 반응 진행 정도 (오른쪽) ... 28

그림 1.28 32GPa 의 압력 하중에 대한 세 방향의 반응 특성 28

그림 1.29 20GPa 의 압력 하중에 대한 세 방향의 반응 특성 29
그림 1.30 12GPa 의 압력 하중에 대한 세 방향의 반응 특성 30

제 1 장 서론

단일 결정 PETN (Pentaerythritol tetranitrate)은 충격파를 통해 점화시킬 때 충격 하중의 방향에 따라 점화 특성이 달라지는 현상을 보인다. 이는 결정 내부 분자 구조의 입체 장해 효과에 의한 것으로, 결정 구조 방향에 대한 충격파 방향에 따라 점화에 필요한 최소 충격파 세기 혹은 반응 유도 거리가 큰 폭으로 변화하게 된다. 예를 들어, PETN 결정에 <100> 방향으로 충격파를 주어 점화시킬 때 필요한 최소 충격파 세기는 <110> 방향보다 4 배 이상 크다. 또한 동일한 압력 하중에 대해서도 방향에 따라 반응 유도 거리가 달라지게 된다.

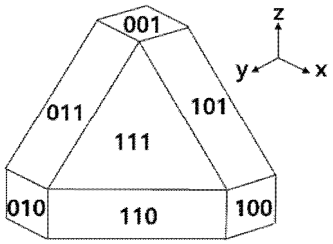


그림 1.1 밀러 지수를 이용한 각 방향의 표기

충격 하중 방향	충격파 세기 (GPa)	반응 유도 거리 (mm)
<110>	8.6	7.3
<110>	12.4	4.6
<001>	12.4	9.5
<101>	8.6	No go below 19.5 GPa
<100>	12.4	No go below 19.5 GPa

표 7 압력 하중 방향에 따른 반응 유도 거리 [1]

기존에 고에너지 물질 해석에 널리 쓰이는 Ignition and growth (I&G) 모델의 경우 밀도나 압력 등 스칼라 기반으로만 반응 속도를 모사하기 때문에, 충격 하중의 기하학적 방향에 따라 달라지는 반응 특성을 모사하는 데에는 적합하지 않다. 그러므로 본 연구에서는 I&G 모델에 변형률 텐서를 추가한 이방성 I&G 모델을 제시하여, PETN 의 이방성 반응 특성을 모사할 수 있는 수치해석 기법을 제시하고 검증하였다. 우선 1 차원 계산을 통해 각 방향의 변형률에 대한 물성치를 획득하고 모델의 타당성을 검증하였다. 이어서 2 차원 계산을 통해 원통 형상의 PETN 결정에 대해 계산을 수행하고 반응 특성 및 내부 변형장을 관찰하였다.

한편 PETN 의 reaction zone thickness 는 40 ㎛ 수준으로, 이를 타당하게 해석하기 위해서는 최대 크기 5 ㎛ 이하의 격자가 필요하다. 이러한 제약 조건은 2 차원 및 3 차원 계산에도 그대로 적용되어, ㎜ 수준 크기의 PETN 을 균일 격자로 해석할 경우 계산 영역 전체에 조밀한 격자가 배치되어 계산에 사용되는 격자의 수가 기하급수적으로 증가하게 된다. 이는 상당히 소모적인 상황으로, 실제로 조밀한 격자가 필요한 영역은 화염 전후의 좁은 영역에 국한됨에도 불구하고 화염이 아직 도달하지 않은 부분이나 화염이 통과하고 난 영역까지 같은 크기의 격자를 배치하게 된다. 이는 계산 자원의 심각한 낭비를 초래하는 것은 물론, 3 차원의 경우 계산을 아예 수행 불가능하게 만든다.

이러한 비효율성을 해결하고 계산을 실제로 수행 가능하게 만들기 위해, 화염 전후에서는 격자를 분할하여 조밀한 격자를 배치하고 이외의 영역에서는 격자를 최대한 병합하여 계산 자원 사용량을 줄이는 적응적 격자 세분화 기법을 적용하였다. 사각 균일 격자에 비교적 쉽게 적용할 수 있는 h 유형의 격자 세분화 기법을

차용하여 2 차원 및 3 차원 계산을 수행하였고, 5 ㎛ 수준의 격자 크기를 유지하면서 PETN 내부의 변형장을 관찰하였다.

제 2 장 이방성 I&G 모델

2.1 지배방정식 및 반응 모델

직육면체 형상의 PETN을 3차원 상에서 해석하기 위해 다음과 같은 직교좌표계 지배방정식을 사용하였다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial \rho u}{\partial x}+\frac{\partial \rho v}{\partial y}+\frac{\partial \rho w}{\partial z}=0 \qquad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t}+\frac{\partial (\rho u^2+p)}{\partial x}+\frac{\partial \rho uv}{\partial y}+\frac{\partial \rho uw}{\partial z}=0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t}+\frac{\partial \rho vu}{\partial x}+\frac{\partial (\rho v^2+p)}{\partial y}+\frac{\partial \rho vw}{\partial z}=0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t}+\frac{\partial \rho wu}{\partial x}+\frac{\partial \rho wv}{\partial y}+\frac{\partial (\rho w^2+p)}{\partial z}=0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t}+\frac{\partial u(\rho E+p)}{\partial x}+\frac{\partial v(\rho E+p)}{\partial y}+\frac{\partial w(\rho E+p)}{\partial z}=0 \quad (5)$$

$$\begin{aligned}&\frac{\partial \lambda}{\partial t}+\frac{\partial \lambda u}{\partial x}+\frac{\partial \lambda v}{\partial y}+\frac{\partial \lambda w}{\partial z}\\&= I_{Ani}(1-\lambda)^b\Big|_{0\le\lambda<\lambda_{ig,\max}} + G_{1,Ani}(1-\lambda)^c\lambda^d p^Y\Big|_{\lambda_{G1,\min}<\lambda<\lambda_{G1,\max}} + G_{2,Ani}(1-\lambda)^e\lambda^g p^Z\Big|_{\lambda_{G2,\min}<\lambda<1}\end{aligned} \qquad (6)$$

여기서 ρ 는 밀도, u, v, w 는 각각 x-, y-, z-방향으로의 속도 성분, E 는 단위 질량 당 총 에너지, p 는 압력을 뜻한다. 식 6 에서는 PETN 의 이방성 반응 특성을 모사하기 위해 기존의 I&G 모델에 이방성 계수를 추가하였다. 초기 점화 단계 및 1 차 성장

단계까지는 변형에 의한 현상이 지배적인 것으로 보고 변형률을 고려한 반응 속도식 계수를 사용한다. 반면 2 차 성장 단계에서는 폭굉파의 세기가 충분히 커짐에 따라 결정의 변형이나 응력보다는 압력 자체가 지배적인 것으로 가정하고 등방성 I&G 모델과 같은 상수 계수를 설정하여 계산한다. 이러한 가정을 반영하여 식 6 에서의 계수들을 변형률을 포함하는 형태로 기술하면 다음과 같다.

$$
\begin{aligned}
I_{Ani} = I\Bigg[& f\left(\frac{\varepsilon_{<100>}}{\varepsilon_{<100>,0}}-1\right)H(\dot{\varepsilon}_{<100>}) + f\left(\frac{\varepsilon_{<010>}}{\varepsilon_{<010>,0}}-1\right)H(\dot{\varepsilon}_{<010>}) \\
& + f\left(\frac{\varepsilon_{<001>}}{\varepsilon_{<001>,0}}-1\right)H(\dot{\varepsilon}_{<001>}) + f\left(\frac{\varepsilon_{<110>}}{\varepsilon_{<110>,0}}-1\right)H(\dot{\varepsilon}_{<110>}) \\
& + f\left(\frac{\varepsilon_{<011>}}{\varepsilon_{<011>,0}}-1\right)H(\dot{\varepsilon}_{<011>}) + f\left(\frac{\varepsilon_{<101>}}{\varepsilon_{<101>,0}}-1\right)H(\dot{\varepsilon}_{<101>})\Bigg]^{X} \chi\left(\dot{\varepsilon}_{\exp}\right) \\
G_{1,Ani} = [& G_{1,<100>}H(\dot{\varepsilon}_{<100>}) + G_{1,<010>}H(\dot{\varepsilon}_{<010>}) + G_{1,<001>}H(\dot{\varepsilon}_{<001>}) \\
& + G_{1,<110>}H(\dot{\varepsilon}_{<110>}) + G_{1,<011>}H(\dot{\varepsilon}_{<011>}) + G_{1,<101>}H(\dot{\varepsilon}_{<101>})]\,\chi\left(\dot{\varepsilon}_{\exp}\right) \\
G_{2,Ani} = & G_2
\end{aligned}
$$

여기서 ε, $\dot{\varepsilon}$, $H(\dot{\varepsilon}_{<>})$, $\chi\left(\dot{\varepsilon}_{\exp}\right)$, f 는 각각 변형, 변형률, 변형률 임계 함수, 압축 여부 판정 함수, 양수부 추출 함수이다. 각 함수들의 정의는 다음과 같다.

$$
H(\dot{\varepsilon}_{<>}(t)) = \begin{cases} 1 & \text{if } \dot{\varepsilon}_{<>}(t_0) \le \dot{\varepsilon}_{<>,0} \text{ for <100>, <010>, <001> directions, any } t_0 \le t \\ \frac{1}{2} & \text{if } \dot{\varepsilon}_{<>}(t_0) \le \dot{\varepsilon}_{<>,0} \text{ for <110>, <101>, <011> directions, any } t_0 \le t \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}
$$

$$
\chi(\dot{\varepsilon}_{\exp}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \dot{\varepsilon}_{<>} \ge \dot{\varepsilon}_{\exp} \text{ for <100>, <010>, <001> directions, any time} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}
$$

$$
f(\text{value}) = \begin{cases} \text{value} & \text{if value} > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}
$$

식 8 에서 $\dot{\varepsilon}_{<>,0}$는 각 방향으로의 기준 변형률이며, 충격파가 아닌 압력 하중에 의한 점화를 막기 위한 기준치로 사용된다. 이는 PETN 결정 가장자리에서 일어나는 급격한 팽창 영역에서의 비현실적인 점화를 억제하기 위함이다.

반응 전후 PETN 의 압력을 계산하기 위해 다음과 같은 JWL 상태방정식을 사용하였다.

$$P = A\left(1-\frac{\omega R_1}{V}\right)e^{-R_1 V} + B\left(1-\frac{\omega R_2}{V}\right)e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V} \quad (9)$$

각 식에서 사용된 물성치들의 값은 표 2 및 3 과 같다. 계산에 사용한 수치해석 기법으로는 공간 이산화에 3 차 정확도의 Convex ENO 기법, 시간 이산화에 3 차 정확도의 Runge-Kutta 기법을 적용하였다.

Parameter [unit]	Value
I [1/μs]	100
b, c, e, g	0.667
d	0.01
$\varepsilon_{<100>,0}$, $\varepsilon_{<010>,0}$, $\varepsilon_{<001>,0}$, $\varepsilon_{<110>,0}$, $\varepsilon_{<011>,0}$, $\varepsilon_{<111>,0}$	−0.199
X	8
$G_{1<110>}$ [Mbar^{-Y}/μs]	0.15
$G_{1<001>}$ [Mbar^{-Y}/μs]	0.015
$G_{1<100>}$, $G_{1<010>}$, $G_{1<011>}$, $G_{1<111>}$ [Mbar^{-Y}/μs]	0.001
Y	1
G_2 [Mbar^{-Z}/μs]	1500
Z	2
λ_{G1min}	0
λ_{igmax}, λ_{G1max}, λ_{G2min}	0.01
$\dot{\varepsilon}_{<110>}$,, $\dot{\varepsilon}_{<001>}$ [1/μs]	−1600

$\dot{\varepsilon}_{<100>}$, $\dot{\varepsilon}_{<101>}$, $\dot{\varepsilon}_{<011>}$, $\dot{\varepsilon}_{<111>}$ [1/μs]	−4200
$\dot{\varepsilon}_{exp}$ [1/μs]	0.1

표 8 이방성 반응 모델에 사용된 물성치

Parameter [unit]	Unreacted	Reacted
ρ_0 [kg/m^3]	1778	-
A [GPa]	20208	1032.258
B [GPa]	−3.752	90.570
R_1	10	6
R_2	1	2.6
ω	0.568	0.57
C_v [GPa/K]	2.718e-3	1e-3
T_0 [K]	298	−
E_0 [GPa]	0	10.8

표 9 JWL 상태방정식에 사용된 물성치

2.2 계산 결과 및 논의

2.2.1 1 차원 계산

1 차원 형상의 PETN 을 해석하기 위해 10mm 의 계산 영역에 2.5 ㎛ 크기의 균일 격자를 배치하고 8~19GPa 의 압력 하중을 가한 뒤 반응 유도 거리 (폭굉파가 압력파를 추월하는 거리)를 측정하였다.

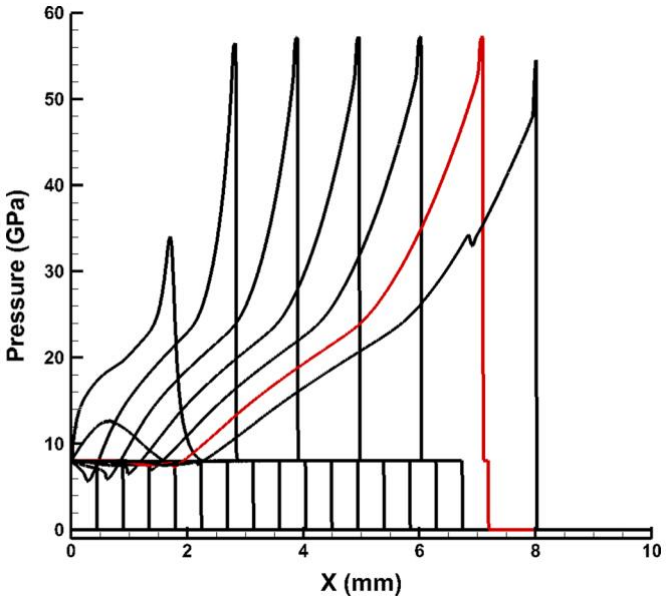


그림 2.1 <110> 방향으로 8GPa 의 압력하중을 가했을 때 반응 유도 거리 측정 (빨간 실선)

<110> 및 <001> 방향에 대해 측정된 반응 유도 거리를 압력에 대한 그래프로 나타낸 결과는 그림 2 와 같다. 실험 결과 및 기존의 등방성 I&G 모델을 사용한 계산 결과도 함께 표시해 비교하였다.

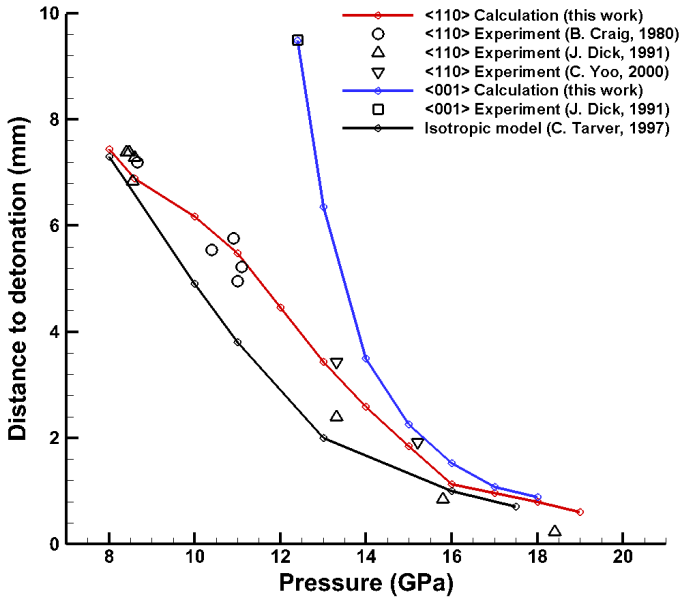


그림 2.2 압력 하중 세기에 대한 반응 유도 거리

등방성 I&G 모델의 경우 실험 결과와도 상대적으로 오차가 크고 <110> 방향 및 <001> 방향의 반응 유도 거리 차이를 모사하는 것이 불가능하다. 반면 본 연구에서 제시한 이방성 I&G 모델의 경우, 각 방향으로의 변형률에 대한 물성치를 조절함으로써 상대적으로 정확한 수치해석 및 이방성 반응 특성 모사가 가능하다는 것을 확인하였다.

또한 본 계산에서는 폭연-폭굉 천이현상에 동반되는 super detonation 의 존재를 포착하였으며, 수치해석 결과로부터 super detonation 및 정상 폭굉파의 속도를 추출하여 실험 결과와 비교한 결과 잘 일치함을 확인하였다.

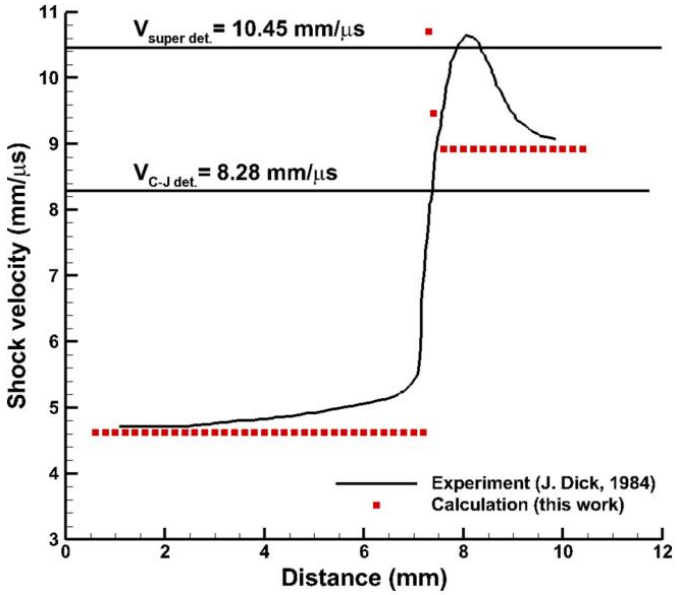


그림 2.3 계산 결과에서 추출한 폭굉파의 속도 및 실험 결과와의 비교

각 방향으로의 1 차원 계산을 통해 이방성 I&G 모델에 사용되는 변형률 기준치 및 물성치들을 획득하였고, 계산 결과를 실험 결과와 대조하여 해당 모델이 타당함을 검증하였다. 이를 통해 PETN 의 이방성 반응 특성을 타당하게 해석할 수 있는 수치해석 모델을 정립하였다.

2.2.2 2 차원 계산

1 차원 계산으로 정립한 이방성 반응 모델을 2 차원으로 확장하여 원통형 PETN 결정의 반응 특성을 해석하였다. 지배방정식 및 반응 모델을 축대칭 2 차원 직교좌표계 형태로 변환하고, 5 ㎛ 크기의 균일 격자를 배치하여 계산을 수행하였다. 15GPa 의 압력 하중에 대하여 상대적으로 민감한 <110> 방향과 둔감한 방향인 <100> 방향에 대한 반응 특성을 비교하였다. <110> 방향에서는 점화가

일어나는 반면 <100> 방향으로는 폭굉현상 없이 압력하중 자체만 전파되는 것을 관찰할 수 있고, 이는 기존의 실험 결과와 잘 일치한다.

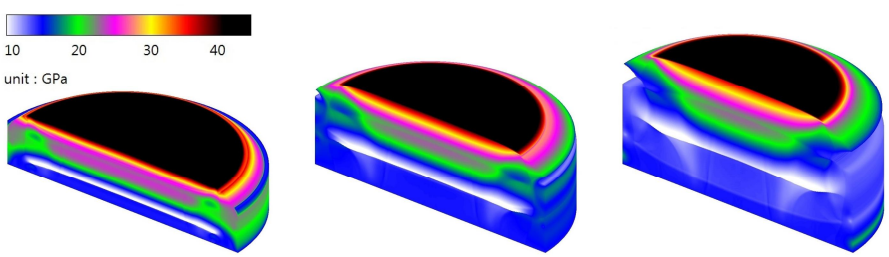


그림 2.4 <110> 방향으로 15GPa 하중을 가했을 때 압력 컨투어 (왼쪽부터 400 ns, 550 ns, 700 ns)

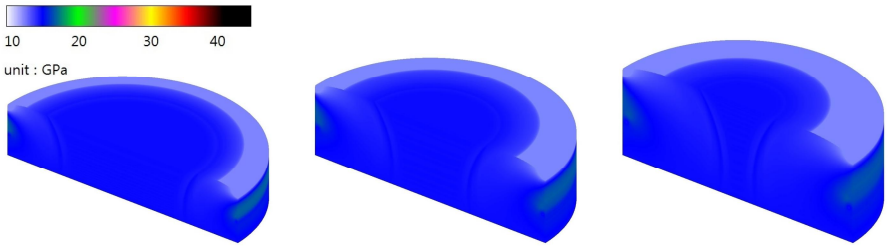


그림 2.5 <100> 방향으로 15GPa 하중을 가했을 때 압력 컨투어 (왼쪽부터 400 ns, 550 ns, 700 ns)

제 3 장 적응적 격자 세분화 기법

3.1 적응적 격자 세분화 기법의 필요성

고속의 충격파 혹은 폭굉파를 동반하는 문제에서는 충격파 전후의 불연속적인 물리량 구배를 정밀하게 포착하기 위하여 조밀한 격자가 필요하다. 그런데 이러한 문제를 균일 격자 코드로 해석할 경우, 충격파 전후뿐만 아니라 충격파가 도달하지 않은 영역 혹은 충격파가 이미 통과한 영역까지 조밀한 격자가 배치되어 버려 계산 자원의 낭비를 초래하고, 이러한 비효율성으로 인해 계산 시간이 길어지거나 계산이 아예 진행 불가능하게 된다. 특히 PETN의 경우 해석의 타당성을 위해 최대 5㎛ 이하 크기의 격자가 요구되므로, 2차원 계산에서의 계산 시간이 지나치게 길어짐은 물론 3차원 계산의 경우 단일 노드 컴퓨터로는 해석을 수행할 수 없게 된다.

그러므로 균일 격자를 사용하는 대신, 충격파가 진행함에 따라 충격파 전후로는 조밀한 격자를 배치하고 그 밖의 영역에서는 격자의 수를 줄이는 등 격자 해상도를 능동적으로 조절하는 기법을 도입할 필요가 있다. 이러한 적응적 격자 세분화 기법을 사용하면 해석의 타당성을 유지하면서 계산 시간 및 계산 자원 소모량을 획기적으로 절약할 수 있다.

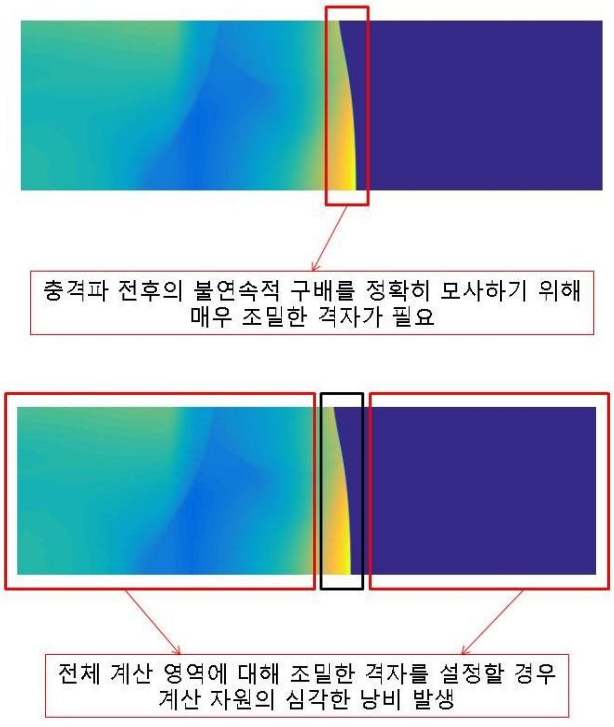


그림 3.1 적응적 격자 세분화 기법의 필요성

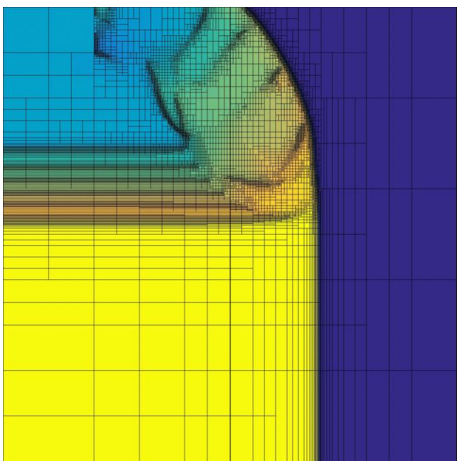


그림 3.2 충격파 전후로 격자를 집중시킨 예시

3.2 세부 과정

3.2.1 격자 저장 구조 및 탐색

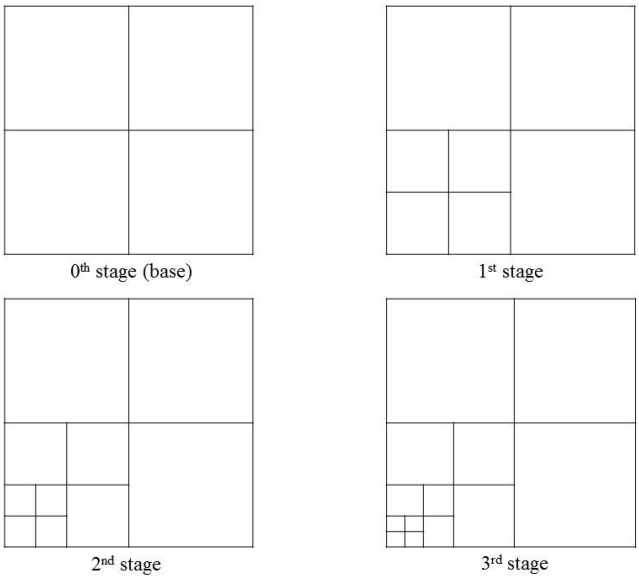


그림 3.3 카테시안 격자가 단계적으로 분할되는 과정

카테시안 좌표계에서 직사각형 균일 격자를 분할하는 가장 쉬운 방법은 절반 크기의 격자들로 나누는 것이다. 이에 따라 1차원에서는 2개, 2차원에서는 4개, 3차원에서는 8개의 하위 격자가 생겨나게 된다. 이러한 격자 분할은 높은 해상도가 필요한 영역에서만 선택적으로 시행할 수 있으며, 요구되는 격자 해상도에 도달할 때까지 연쇄적으로 중첩시켜 시행할 수 있다. 이렇게 위치에 따라 서로 다른 단계만큼 격자를 분할할 경우 다양한 크기의 격자들이 계산 영역 상에 혼재하게 되므로, 균일 격자처럼 격자의 기하학적 위치와 메모리 할당 형태를 직접 대응시켜 저장할 경우

불필요하게 많은 메모리가 사용되게 된다.

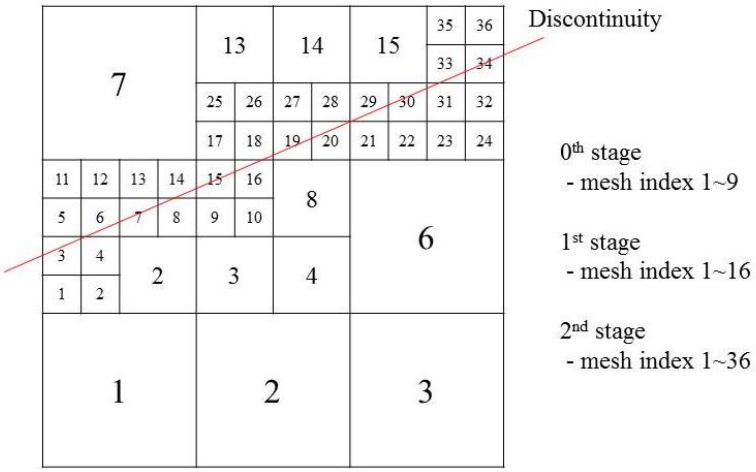


그림 3.4 분할 단계별로 격자의 일련번호를 부여한 모습

그러므로 격자 배열의 차원에 관계없이 일단 일련번호를 부여하여 메모리상에 일렬로 저장하되, 각 격자에서의 물리량 이외에 해당 격자의 기하학적 위치 정보를 추가적으로 저장하여 사용한다. 그림 3.4와 같이 활성화된 격자에 대해서만 새로이 일련번호를 부여하여 계산에 사용하고, 이후에 격자가 비활성화될 때는 해당 일련번호를 삭제한 뒤 다음 번호의 격자들을 앞당겨 배치한다.

다양한 크기의 격자가 존재하는 계산 영역에서의 빠른 자료 탐색을 위해, 격자 분할 및 병합 당시에 미리 상위/하위 단계 격자의 일련번호를 함께 저장한다. 예를 들어 그림 3.4에서 0단계 격자 중 5번 격자가 분할될 때, 하위 격자의 일련번호인 3, 4, 7, 8을 함께 저장하고, 해당 하위 격자들에는 바로 상위 격자의 일련번호인 5번을 각각 저장한다. 또한 1단계 격자 중 7번 격자가

분할될 때도 마찬가지로 2단계 격자의 번호인 9, 10, 15, 16을 함께 저장한다. 이렇게 정리해둔 자료 구조에서는 임의의 위치에서 최고 해상도에 해당하는 격자를 빠르게 탐색할 수 있다. 예를 들어 위 그림에서 0단계 격자 하나의 크기가 1이라고 할 때 (1.875, 1.625)에서의 값을 추출해야 할 때, 우선 0단계 격자에서 (2,2)에 해당하는 5번 격자를 호출한다. 해당 격자는 현재 분할되어 하위 격자가 존재하므로 1단계 격자 중 8번을 호출한다. 그런데 8번 격자는 더 이상 하위 격자가 없으므로, 1단계 격자 중 8번 격자가 해당 좌표에서의 최고 해상도 격자로써 호출된다.

3.2.2 격자 분할 및 병합

매 시간적분마다 격자 분할 알고리즘이 작동한다. 해당 시점에서 존재하는 전체 격자에 대해 그림 3.5와 같이 주변 영역에서의 극댓값과 극솟값을 조사하여, 두 극값의 차이가 일정 기준치를 초과하면 물리량 구배가 큰 영역으로 판단하고 격자를 분할한다.

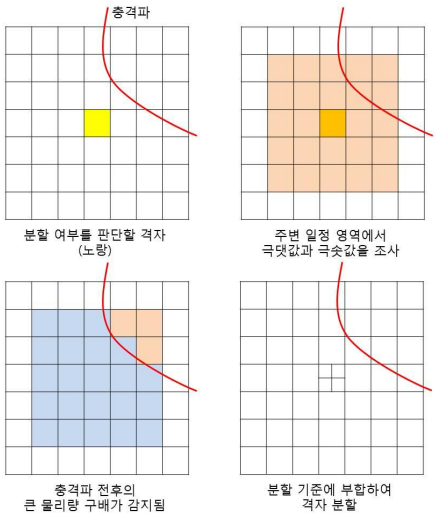


그림 3.5 격자 분할 과정

예를 들어 수직 충격파 주변으로는 다음과 같이 연쇄적으로 격자를 분할할 수 있다.

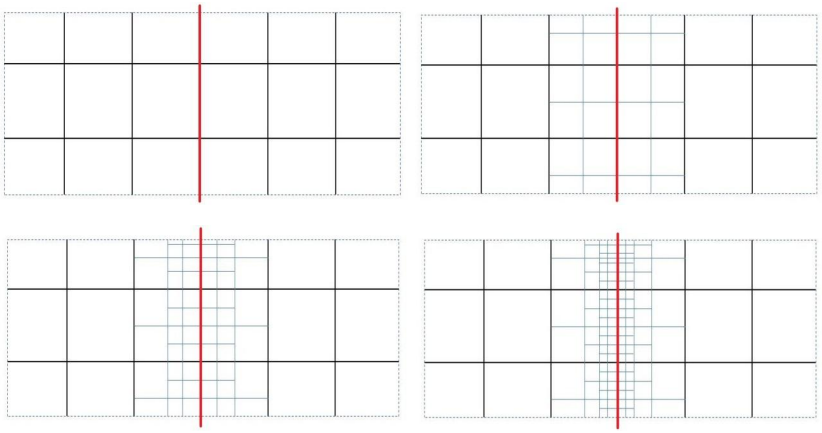


그림 3.6 수직충격파 (빨간 실선) 주변 격자가 분할되는 과정

격자 병합의 경우 격자 분할의 반대 과정으로 진행하며, 매 시간 적분 이후마다 해당 시점에 존재하는 모든 격자에 대해 주변 물리량 구배를 조사한다. 이 때 극댓값과 극솟값의 차이가 분할 기준치보다 작은 기준치 이내로 수렴하면, 더 이상 분할된 격자를 유지할 필요가 없다고 판단하여 분할 이전 상위 격자로 평균값을 전송한 뒤 해당 격자들을 삭제한다.

3.2.3 유한체적법 진행

계산 영역 상에 존재하는 다양한 크기의 격자들 중에서 크기가 작은 격자들에서의 계산이 상대적으로 정확하다고 할 수 있다. 그러므로 크기가 가장 작은 격자에서부터 플럭스를 계산하여 시간적분을 진행하고, 해당 플럭스를 바로 윗 단계 격자의 플럭스를 보정하는 데에 사용하여 계산의 정확도를 유지하는 방법을 사용한다.

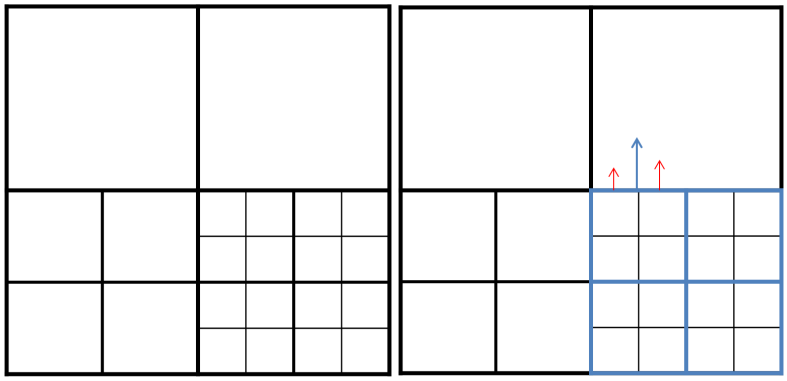


그림 3.7 작은 격자에서의 플럭스 (빨강)로 상위 격자 플럭스 (파랑)을 보정하는 과정

3.3 기법 검증

적응적 격자 세분화 기법이 올바르게 구현되어 작동하는지 검증하기 위하여 전형적인 수치해석 문제들에 적용하여 결과를 관찰하였다.

3.3.1 1차원 충격파관 문제

경계면 좌우로 불연속적인 초기조건을 부여한 뒤 시간에 따른 변화를 관찰하는 1차원 충격파관 문제를 풀어보았다. 좌우 밀도는 각각 0.125 및 1, 압력은 0.1 및 1, 기체상수는 1로 설정하였다. 격자 개수는 초기 11x4x4 개에서 최대 3단계까지 추가로 분할될 수 있도록 설정하였다.

계산 결과에서는 좌측으로 진행하는 충격파, 우측으로 진행하는 팽창 팬, 사이에서 움직이는 접촉 불연속면을 올바르게 포착하고 있으며, 해당 물리현상이 존재하는 영역에서만 조밀한 격자를 배치한 반면 상대적으로 잠잠한 영역에서는 초기조건으로 부여한 성긴 격자가 그대로 유지되어 계산 자원을 절약하고 있음을 관찰할 수 있다.

또한 충격파관 문제는 특성곡선해법에 의한 수학적 엄밀해가 존재하므로, 수치해석 결과를 엄밀해와 대조해볼 수 있다. 밀도에 대한 2차 정확도의 오차를 계산해보면, 해석의 정확도를 거의 유지하면서도 계산 소요 시간을 5배 가까이 단축한 것을 확인할 수 있다.

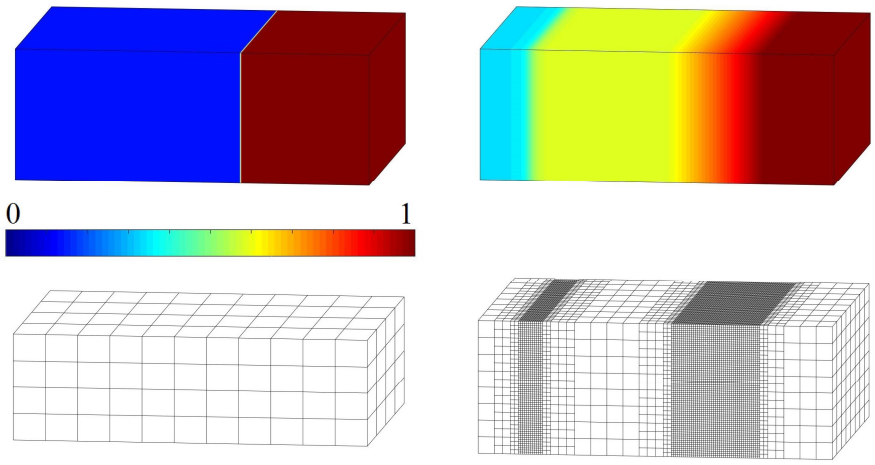


그림 3.8 1 차원 충격파관 문제 해석 결과. 0 초 (왼쪽) 및 0.2 초 (오른쪽), 밀도 컨투어 (위) 및 격자 모식도 (아래)

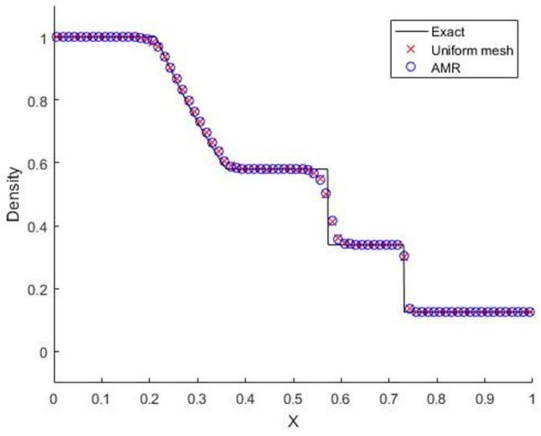


그림 3.9 1 차원 충격파관 문제 해석 결과를 수학적 엄밀해 및 균일 격자 코드와 비교한 결과

기법	오차 (2 차 밀도)	계산 시간 (분)
균일 격자	0.0585	51
적응적 격자 세분화	0.0601	11

표 10 충격파관 문제 해석 정확도 및 계산 시간 비교

3.3.2 경사충격파 각도 문제

일정 각도의 2차원 쐐기에 균일한 초음속 자유류가 입사할 때 형성되는 경사충격파의 각도를 수치해석으로 예측하였다. 본 문제 또한 수학적 엄밀해로써 마하수-중심각-충격파각의 관계식이 존재하여, 해석의 정확도를 판단하는 지표로 사용하였다. 자유류의 마하수는 1.5, 2.0, 2.5, 3.0까지 설정하였고, 쐐기의 중심각은 5도부터 30도까지 5도 간격으로 변경하며 계산하였다.

계산에서 얻어지는 경사충격파의 각도를 별도 코드로 측정하여 수학적 엄밀해와 비교하여 표시하였다. 이론적으로 예측되는 충격파 각도와 거의 일치하는 해석결과가 얻어짐을 확인할 수 있다. 자유류 마하수가 너무 낮거나 쐐기의 중심각이 너무 커서 경사충격파를 형성하지 못하는 케이스는 결과 표시에서 제외하였다.

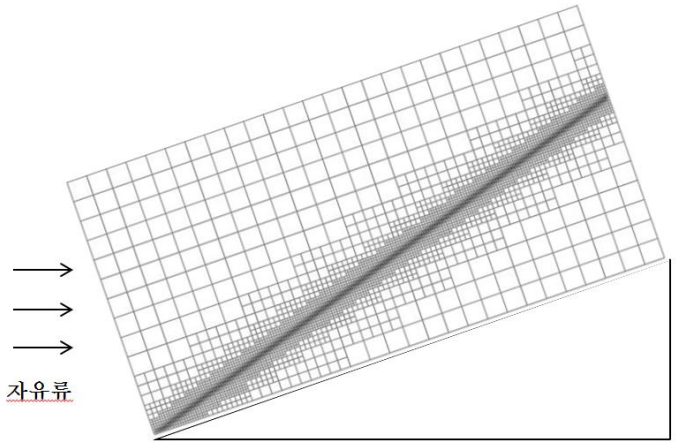


그림 3.10 경사충격파 문제 해석 모식도

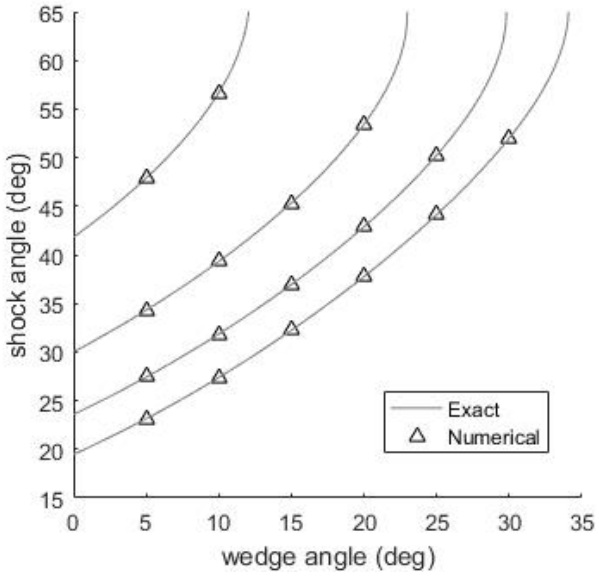


그림 3.11 경사충격파 각도 측정 결과

3.3.3 충격파 회절 문제

마하수 1.3의 약한 충격파가 직각의 모서리를 지날 때 발생하는 회절에 대해 해석을 수행하였다. 실험 결과로 존재하는 이미지와 비교한 결과 수직 방향 충격파, 궁형 충격파, 원형 팽창 팬으로 이루어진 구조가 잘 포착되고 있음을 확인할 수 있다.

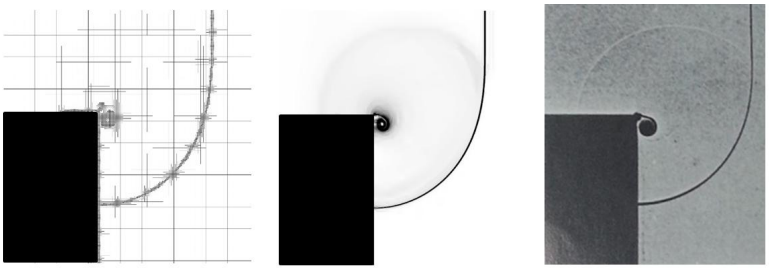
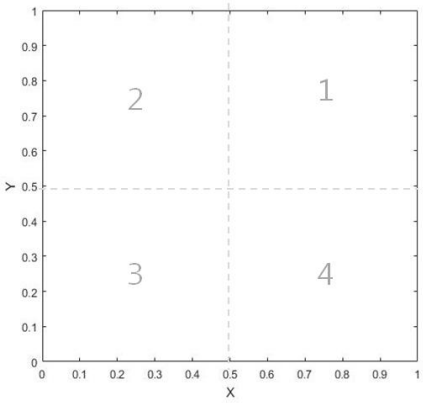


그림 3.12 충격파 회절 문제 해석 결과. 격자 모식도 (왼쪽), 수치 슐리렌 이미지 (가운데), 실험 슐리렌 이미지 (오른쪽)

3.3.4 2차원 리만 문제

2차원 좌표계 상에서 각 사분면에 서로 다른 초기조건을 부여한 뒤 유동구조를 관찰하는 2차원 리만 문제를 해석하였다. 선행 수치 결과가 존재하는 6가지 케이스에 대해 계산을 수행한 뒤 기존 결과와 비교한 결과 본 연구에서 구축한 적응적 격자 세분화 기법이 잘 작동하고 있음을 검증하였다. [17]



$$(p,\ \rho,\ u,\ v)(x,\ y,\ 0) = \begin{cases} (p_1,\ \rho_1,\ u_1,\ v_1), & \text{if } x > 0.5 \text{ and } y > 0.5, \\ (p_2,\ \rho_2,\ u_2,\ v_2), & \text{if } x < 0.5 \text{ and } y > 0.5, \\ (p_3,\ \rho_3,\ u_3,\ v_3), & \text{if } x < 0.5 \text{ and } y < 0.5, \\ (p_4,\ \rho_4,\ u_4,\ v_4), & \text{if } x > 0.5 \text{ and } y < 0.5. \end{cases}$$

그림 3.13 2차원 리만 문제의 초기 조건

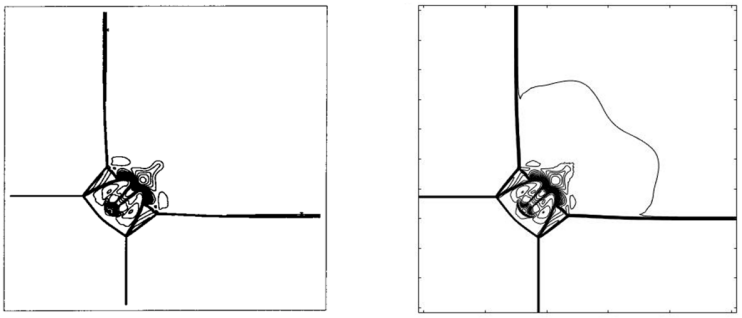


그림 3.14 2차원 리만 문제 case 3. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우)

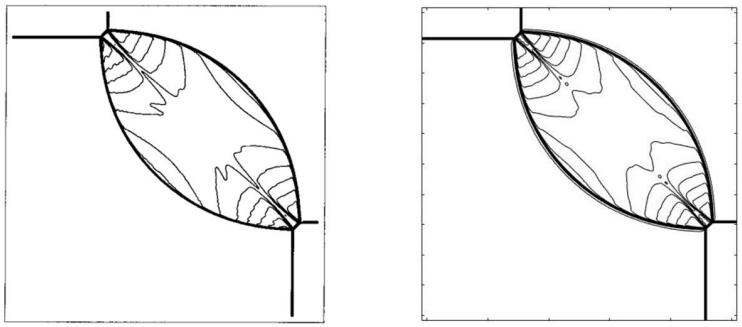


그림 3.15 2차원 리만 문제 case 4. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우)

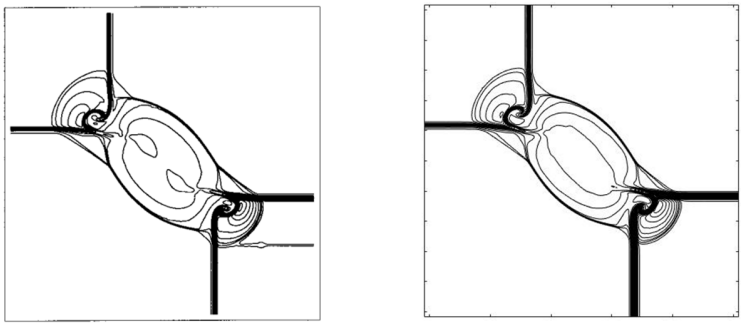


그림 3.16 2차원 리만 문제 case 5. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우)

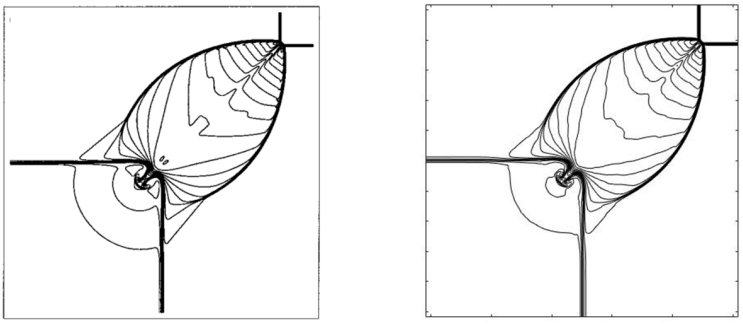


그림 3.17 2차원 리만 문제 case 12. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우)

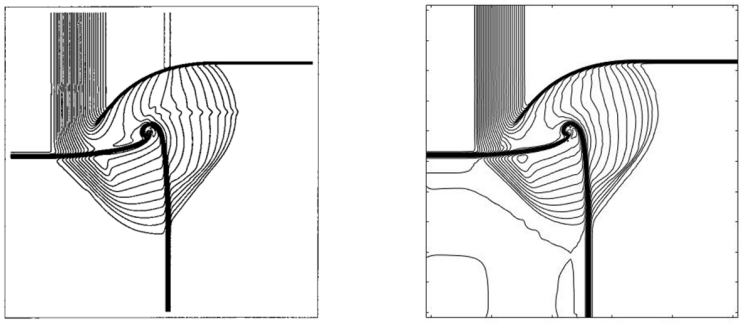


그림 3.18 2차원 리만 문제 case 16. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우)

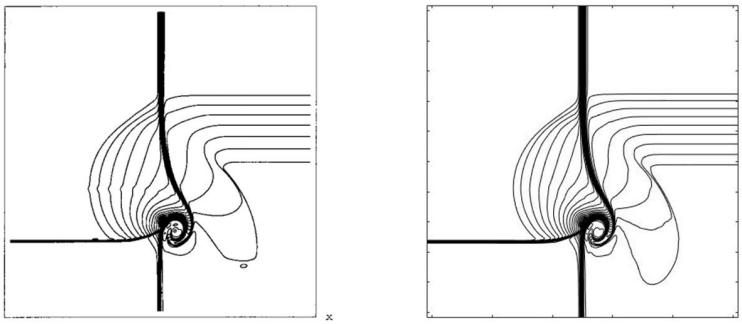


그림 3.19 2차원 리만 문제 case 17. 참고문헌 (좌) 및 본 연구 (우)

3.4 기법 적용 결과

본 연구에서 구현한 적응적 격자 세분화 기법을 PETN 계산에 적용하여 계산 정확도 및 계산 속도 향상을 관찰하였다.

3.4.1 1차원 계산

1차원 형상의 PETN에 대해 균일 격자 코드 및 적응적 격자 세분화 코드로 해석을 수행하고 계산 결과 및 계산 시간을 관찰하였다. 경계조건 압력은 15GPa, 결정 방향은 <110>으로 설정하여 상대적으로 반응이 잘 일어나게 하는 한편 기존 계산 결과 및 실험 결과와의 비교가 용이하게 하였다.

두 계산에서 충격파 및 폭굉파가 동시에 반응 유도 거리에 도달하는 순간을 포착하여 압력 그래프를 그려 보면 두 계산 모두 약 1.6mm의 동일한 반응 유도 거리를 보이며, 기존 실험 결과와도 잘 일치함을 확인할 수 있다. 그러므로 적응적 격자 세분화 기법을 사용하여도 기존 계산에서 관찰되는 유동 구조를 거의 유지하면서 계산 시간은 획기적으로 줄어듦을 관찰할 수 있다. 특히 격자 분할 단계를 높이 설정할수록 계산 시간은 더욱 줄어들게 되나, 메모리 사용량 등 전산적인 문제의 해결 또한 같이 이루어져야 한다.

Max Level	Uniform mesh(s)	AMR (s)	Uniform mesh /AMR
Level 4	54	18	3
Level 5	480	80	6
Level 6	4080	523	7.8

표 11 격자 분할 최고 단계에 따른 균일 격자 코드와 적응적 격자 세분화 코드의 성능 비교

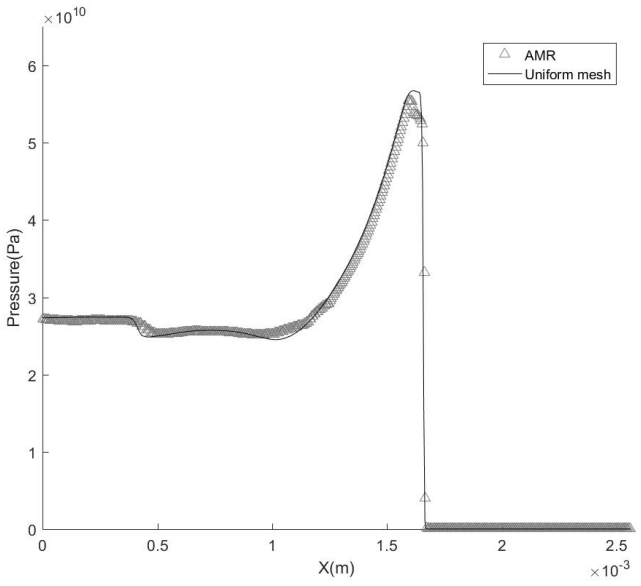


그림 3.20 1 차원 PETN 계산 결과. 균일 격자 (실선), 적응적 격자 세분화 (삼각형)

3.4.2 3차원 계산

0.64mm의 크기를 갖는 정육면체형 PETN 결정에 대해 초기 격자 16x16x16 (크기 40㎛), 최대 분할 격자 128x128x128 (크기 5㎛)를 배치하여 계산을 수행하였다. 방향성에 따른 반응 특성 차이를 관찰하기 위해 12, 20, 32GPa의 압력 하중을 <110>, <100>, <001> 방향으로 주었다고 가정하여 총 9개 케이스에서의 계산 결과를 관찰하였다. 이에 따라 각 압력에서의 정성적인 go / no-go 차이를 관찰할 수 있다.

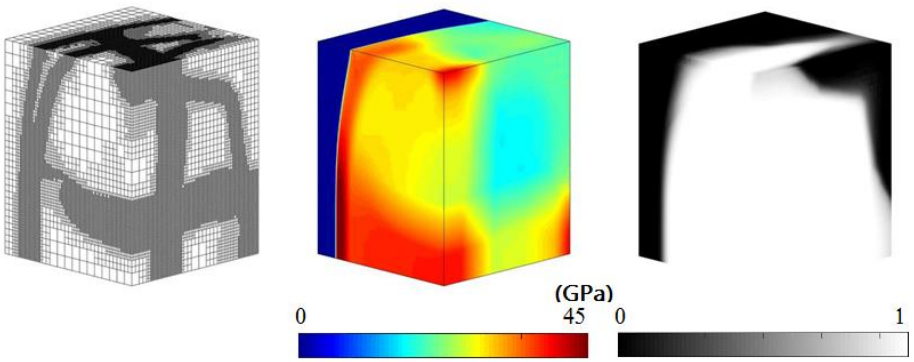


그림 3.21 3 차원 해석 수행 결과 예시. 모식화된 격자 (왼쪽), 압력 컨투어 (가운데), 반응 진행 정도 (오른쪽)

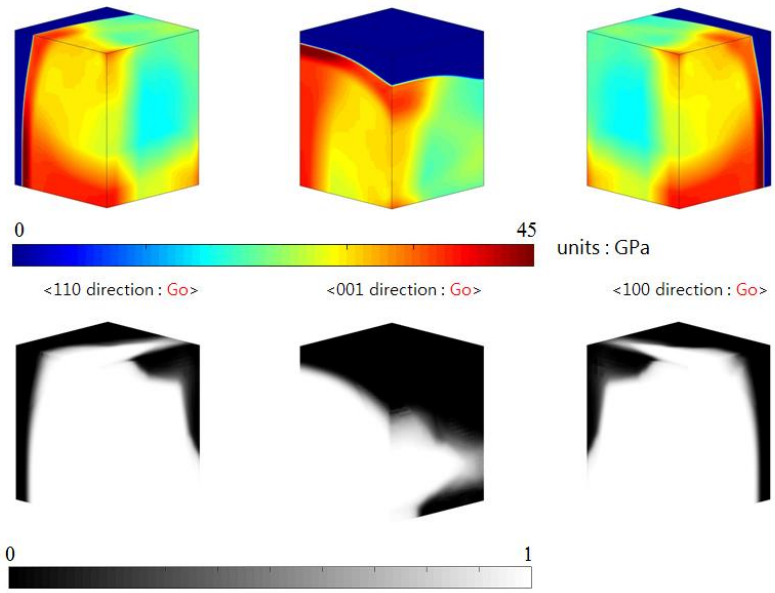


그림 3.22 32GPa 의 압력 하중에 대한 세 방향의 반응 특성

32GPa의 압력 하중에서는 이방성으로 인한 반응 특성 차이가 드러날 만큼 결정 구조 혹은 변형률의 영향이 크지 않아 세 방향 모두 같은 반응 특성을 보인다.

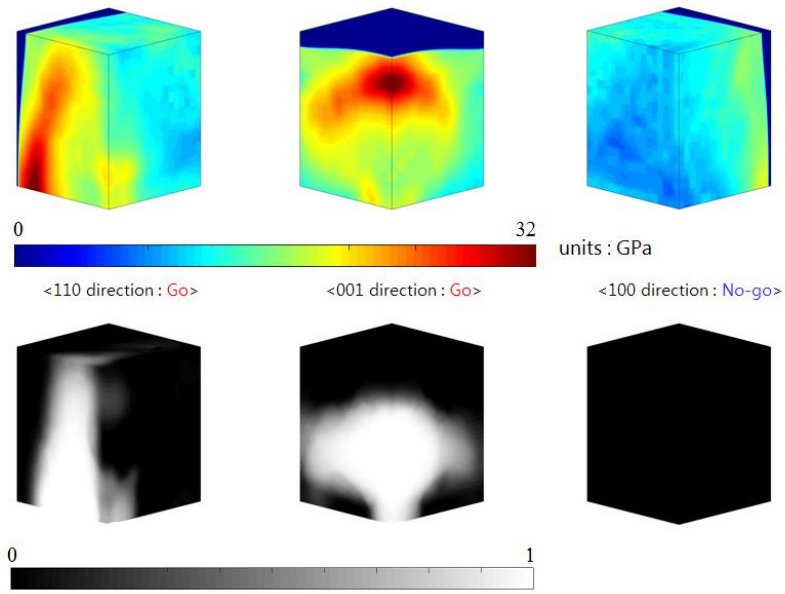


그림 3.23 20GPa의 압력 하중에 대한 세 방향의 반응 특성

20GPa의 압력 하중에서는 상대적으로 가장 둔감한 <100> 방향에서 점화가 일어나지 않는 것을 관찰할 수 있다. 또한 상대적으로 민감한 <110> 방향의 경우 <001> 방향보다 반응 유도 거리가 짧고 폭굉파 전파 속도가 빠르게 나타난다.

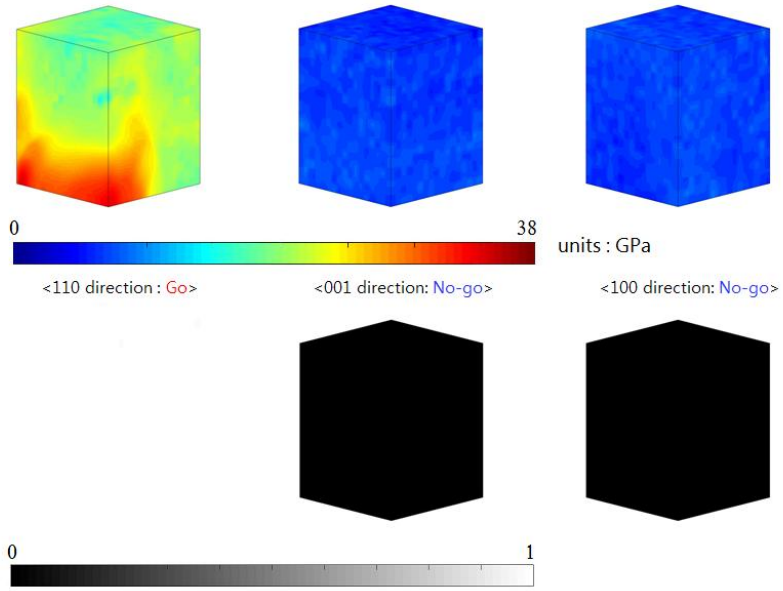


그림 3.24 12GPa의 압력 하중에 대한 세 방향의 반응 특성

12GPa의 압력 하중에서는 상대적으로 가장 민감한 <110> 방향에서만 점화가 일어나고, 나머지 두 방향은 둔감하여 점화가 일어나지 않음을 관찰할 수 있다.

세 방향 및 세 가지 압력 하중에 대한 계산 결과에서 go / no-go 여부를 정성적으로 관찰하여 정리하면 다음과 같다.

충격 방향 / 하중 강도	12 GPa	20 GPa	32 GPa
<110> 방향	Go	Go	Go
<001> 방향	No-go	Go	Go
<100> 방향	No-go	No-go	Go

표 12 각 방향 및 각 압력 하중에 대한 go / no-go 여부 분류

제 4 장 결론

본 연구에서는 PETN의 이방성 반응 특성을 모사하기 위해 기존의 I&G 모델에 변형률을 추가로 고려한 이방성 I&G 모델을 제시하였다. 그리고 이방성 I&G 모델을 적용한 1차원 계산을 수행하여 반응 유도 거리를 수치적으로 측정하고, 이를 실험값으로 측정된 수치와 비교하여 모델에 필요한 물성치를 획득하고 해당 모델이 타당함을 검증하였다. 또한 각 방향의 계산에서 획득한 물성치를 고차원 계산에 적용하여 2차원 및 3차원 형상의 PETN을 모사할 수 있는 수치 기법 기반을 마련하였다.

더불어 3차원 PETN 계산을 실현 가능하게 하기 위해 적응적 격자 세분화 기법을 도입하였다. 먼저 여러 수치해석 문제를 통해 적응적 격자 세분화 기법이 올바르게 작동한다는 것을 검증하였고, 검증된 적응적 격자 세분화 기법을 본 계산에 적용하여 기존의 균일 격자 코드로는 관찰할 수 없었던 3차원 형상 PETN의 이방성 반응 특성을 성공적으로 모사하였다. 특히 서로 다른 방향의 충격 하중을 받았을 때 방향에 따라 go / no-go 여부가 달라지는 현상을 수치적으로 포착하였다.

본 연구에서 제시한 이방성 I&G 모델 및 적응적 격자 세분화 기법은, 추후에 이방성 반응 특성을 보이는 임의의 고폭화약에 대한 3차원 시뮬레이션을 타당하게 수행할 수 있는 수치 기법 기반이 될 것이다.

참고문헌

[1] J. J. Dick, Appl. Phys. Lett. 44, 859 (1984).

[2] J. J. Dick, J. Appl. Phys. 81, 601 (1997).

[3] C. S. Yoo, N. C. Holmes, P. C. Souers, C. J. Wu, F. H. Ree, and J. J. Dick, J. Appl. Phys. 88, 70 (2000).

[4] S. V. Zybin, W. A. Goddard III, P. Xu, A. C. T. van Duin, and A. P. Thompson, Appl. Phys. Lett. 96, 081918 (2010).

[5] I. Plaskin, C. S. Coffey, R. Mendes, J. Ribeiro, J. Campos, and J. Direito, 13th Symposium (International) on Detonation, ONR 351-07-01, 2006, p. 319.

[6] Y. A. Gruzdkov and Y. M. Gupta, J. Phys. Chem. 104, 11169 (2000).

[7] P. Maffre and M. Peyrard, Phys. Rev. B 45, 9551 (1992).

[8] E. L. Lee and C. M. Tarver, Phys. Fluids 23, 2362 (1980).

[9] C. M. Tarver, R. D. Breithaupt, and J. W. Kury,J. Appl. Phys. 81, 7193 (1997).

[10] R. F. Bunshah, Techniques of Metals Research, Measurement of Mechanical Properties (Wiley, New York, 1971), Vol. 5, p. 244.

[11] K. Kim and J. J. Yoh, Proc. Combust. Inst. 34, 2025 (2013).

[12] J. J. Dick, R. N. Mulford, W. J. Spencer, D. R. Pettit, E. Garcia, and D. C. Shaw, J. Appl. Phys. 70, 3572 (1991).

[13] J. M. Winey and Y. M. Gupta, J. Appl. Phys. 107, 103505

(2010).

[14] R. Menikoff and T. D. Sewell, Combust. Theory Modell. 6, 103-125 (2002).

[15] T. E. Holland, A. W. Campbell, and M. E. Malin, J. Appl. Phys. 28, 1217 (1957).

[16] M. Van Dyke, An album of fluid motion / assembled by Milton Van Dyke. Stanford, Calif.: Stanford, Calif. : Parabolic Press (1982)

[17] A. Kurganov and E. Tadmor, "Solution of two-dimensional Riemann problems for gas dynamics without Riemann problem solvers," Numerical Methods for Partial Differential Equations, vol. 18, no. 5, pp. 584–608 (2002)

Abstract

Numerical analysis on anisotropic detonation of pentaerythritol tetranitrate crystal using three-dimensional adaptive mesh refinement

Woonghyun Lee
Department of Mechanical and Aerospace Engineering
The Graduate School
Seoul National University

Numerical analysis for anisotropic detonation of pentaerythritol tetranitrate have performed using snu-hydrocode. Since conventional ignition and growth model based on density and pressure is isotropic, it cannot handle such a anisotropic phenomenon. In this paper, we suggest modified I&G model, adding stress and strain term to rate law equation. The model has been verified with one dimensional calculation, comparing run distance to detonation measured in experiment. In two dimensional calculation, strain field inside solid crystal of PETN could be observed. Introducing adaptive mesh refinement technique, full scale three dimensional calculation have been able to be conducted. Along 3 directions in which calibrated parameters exist, three dimensional calculation which can reveal anisotropic behavior of PETN is conducted. With combination of anisotropic I&G model and adaptive mesh refinement technique, numerical basis which can reasonably

analyze energetic material on three dimension have been established.

Keywords: Anisotropy, Shock-to-detonation transition(SDT), Adaptive mesh refinement(AMR)

Student Number: 2015-20787