



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](#)

공학석사학위논문

고에너지 물질의 데토네이션 천이 수치적  
연구를 위한 3차원 형상 레벨-셋 재현  
알고리즘 개발

Development of parameterized level-set method  
based on 3D CAD reconstruction for analysis of  
detonation transition of high energy materials

2019년 8월

서울대학교 대학원

기계항공공학부

김 현 준

# 초 목

3차원 카르테시안 좌표계에서 구현된 오일러리안 기반의 하이드로 다이나믹 코드에서 수학적 수식으로 물질의 경계면을 설정하는 방식을 벗어나 보편적인 형상 저장 포맷인 스테레오리소그래피(STL) 파일을 이용한 다상 유동 경계면 설정 기법에 적용할 수 있는 3차원 형상 재현 알고리즘을 개발하였다. 새롭게 개발된 고품 화약의 성능을 확인하기 위한 반응막대실험 모사를 3차원으로 확장하였고, 기존의 수학적 수식으로 설정한 경계와 STL 형식으로 설정한 경계와의 반응속도를 비교하여 3차원 경계면 설정의 타당성을 확보하였다. 이를 적용하여 장애물이 포함된 덕트 및 굽은관의 형상을 3차원에서 구현하고 이에 가연성 기체인 에틸렌-공기 혼합물을 채운 후, 초기 설정된 화염과 충격파의 상호작용에 따른 연소폭발천이(DDT) 현상의 변화를 수치적으로 모사하였다. 이를 통해 충격파 강도와 형상에 따른 DDT 현상의 Go-No Go를 판정함으로써 관내의 장애물이 데토네이션으로 발전함에 미치는 역할을 확인하였다. 이를 실제 크기의 공장 설비로 확장하여 화염이 퍼지는 상황을 3차원으로 가시화 하였다. 공장 설비 중 하나의 탱크 안에서 초 고압의 극한상황에서 폭발이 일어나는 조건을 주었을 때, 데토네이션에 의한 충격파가 설비에 미치는 영향을 수치적 실험을 통해 확인하였다.

주요어 : STL 파일 형식(Stereolithography file format), 캐드  
(Computer Aided Design), 레벨-셋 기법(level-set method),  
고에너지 물질(high energy material), 충격폭굉전이(Shock to  
Detonation Transition), 연소폭발전이(Deflagration to Detonation  
Transition), 화염전파(Flame spreading)

학번 : 2017-22312

# 목 차

초 록 .....	i
목 차 .....	iii
표 목차 .....	v
그림 목차.....	v
제 1 장 서 론 .....	1
제 2 장 수치적 기법 .....	4
2.1 지배방정식 .....	4
2.2 3차원 레벨-셋 경계 설정 기법.....	5
2.2.1 간단한 부호 거리 함수.....	6
2.2.2 첫번째 부호 거리 함수.....	8
2.2.3 두번째 부호 거리 함수.....	11
제 3 장 3 차원 형상 재현 검증 .....	15
3.1 3차원 레벨 셋 알고리즘 적용 결과 .....	15
3.2 반응막대 실험 시뮬레이션 .....	18
3.2.1 초기 조건 및 경계 조건 설정.....	18
3.2.2 시뮬레이션 결과 및 토의 .....	20
제 4 장 적용 및 결과 .....	23
4.1 구조 영향에 따른 DDT 현상과 화염 가속 모델링.....	23
4.1.1 반응 모델 검증.....	23
4.1.2 초기조건 및 경계조건 설정 .....	25
4.1.3 시뮬레이션 결과 및 토의 .....	27
4.2 공장 폭발 피해 예측 시뮬레이션 .....	32

4.2.1 초기 설정 및 화염 전파 시뮬레이션 결과.....	32
4.2.2 공장 구조물 피해 예측 시뮬레이션 초기 설정 및 결과 .....	35
제 5 장 결 론	39
참고문헌 .....	39
Abstract .....	43

## 표 목차

표 1 그림 10의 각 형상을 구성하는 STL 삼각형의 개수 .....	5
표 2 각 Type의 형상을 구성하는 STL 삼각형의 개수 .....	7
표 3 C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -공기 혼합물의 초기 물성값.....	14
표 4 4가지 Type과 충격과 강도에서 DDT 발생 Go/No-Go 표,Go: DDT, X: No detonation.....	15

## 그림 목차

그림 1 레벨 셋 개념 [2] .....	5
그림 2 모델링 형상을 삼각형으로 분할한 후, 꼭지점 위치와 바깥 방향의 단위 법선 벡터를 제공하는 STL 형식의 특징 .....	6
그림 3 격자 점과 형상 표면으로부터 얻은 Simple signed distance function 개념 .....	7
그림 4 (a) 굽은 관 형상 모델링 (b) 3차원 형상 재현 결과 (c) YZ평면상에서 본 레벨 값이 할당되지 않는 상황 예시 .....	7
그림 5 삼각형의 꼭지점으로 형성된 벡터 $U_{1,n}, U_{2,n}, U_{3,n}$ 를 통해 그 램-슈미트 직교 과정에 의해 생성된 임시 벡터 $v_{1,n}, v_{2,n}, v_{3,n}$ .....	9
그림 6 STL 삼각형을 포함하는 평면에 수직하는 세계의 평면에	

의해 생성된 삼각기둥.....	10
그림 7 3차원 공간 상에서 점과 표면 사이의 거리 형성 개념....	10
그림 8 (a) 추가적인 부호 거리 함수가 필요한 예외 상황의 예시, (b) 예외 상황 3차원 형상 재현 결과, (c) YZ평면상에서 본 예외 상황에 레벨 값이 할당되지 못하는 상세 상황...	12
그림 9 직선 $\vec{V}_{1,m}$ 과 t의 범위에 따른 격자 점과 최소 거리.....	13
그림 10 (좌) CAD 모델링 형상 (우)알고리즘을 적용한 3차원 형 상 재현 결과(a) – (f) .....	17
그림 11 Ratestick test 수치해석을 위한 계산 영역 설정.....	19
그림 12 (a) 기존의 부호 거리 함수인 수식에 의한 levelset 설정 (b) 캐드 모델링을 이용한 3D-STL-parameterized- levelset 설정 .....	19
그림 13 시간에 따른 밀도 변화 (a) 2D 수식 (b)3D 수식 (c) 3D CAD.....	20
그림 14 시간에 따른 압력 변화 (a) 2D 수식 (b)3D 수식 (c) 3D CAD.....	21
그림 15 시간에 따른 밀도 변화 3D ISO contour.....	21
그림 16 최고 압력에 도달하였을 때 3가지 경우의 폭발 압력 비교 .....	22



그림 17 화염 모델링 검증을 위한 실험과 계산 압력 결과 비교....	24
.....	
그림 18 경계면 설정을 위해 모델링한 다양한 형상 .....	25
그림 19 수치해석 영역 설정을 위한 도식화 .....	26
그림 20 Type- I 에서 마하수 2.5의 충격파와 에틸렌-공기 혼합 물의 상호작용에 의한 화염의 시간에 따른 온도 ISO contour.....	28
그림 21 4가지 Type에서 마하수 2.5의 충격파와 에틸렌-공기 혼 합물의 상호작용에 의해 CJ압력을 초과하는 열점 생성 시 간에 따른 화염의 압력 ISO contour .....	29
그림 22 4가지 Type에서 마하수 2.3의 충격파와 에틸렌-공기 혼 합물의 상호작용에 의해 DDT 현상의 유무에 따른 화염의 압력 ISO contour .....	30
그림 23 참고문헌[18]에 나온 1:5스케일 공장 설비 실제 모형 ....	33
.....	
그림 24 공장 설비 캐드 모델링 3차원 형상 재현 결과.....	33
그림 25 화염 전파 시뮬레이션을 위한 계산 영역 설정 .....	33
그림 26 시간의 변화에 따른 화염 전파 과정에 대한 압력 ISO contour (a) - (e) .....	35

그림 27 피해 효과 시뮬레이션을 위한 계산 영역 설정 .....	36
그림 28 시간 변화에 따른 화염 전파 과정에 대한 압력 ISO contour, 위: 자유시점, 아래: XZ평면상의 단면 시점....	37
그림 29 시간에 따른 균열 탱크 균열의 너비 증가 및 구조물 기둥 변화.....	38

# 제 1 장 서 론

대부분의 3 차원 유동 해석에는 캐드(CAD) 형상 내부를 비 정렬 격자(unstructured grid)로 채우는 방식[1]을 사용하여 해석 영역을 설정하는 반면, 오일러리안 기반의 하이드로 다이나믹 솔버(Hydrocode)에서 사용하고 있는 레벨-셋 기법 (level-set method) [2]은 물질의 경계면을 기준으로 내부와 외부를 부호 거리 함수(Signed Distance Function, SDF)를 통해 동일 레벨 값의 집합으로 표현 된다. 이 방식은 경계면이 급격하게 바뀌는 고체-유체[3] 또는 유체-유체 간의 경계면 추적에 유리하여 하이드로 코드에서 보편적으로 사용된다. 그러나 복잡한 3 차원 형상을 원통, 사각형, 구와 같은 단순한 수학적인 수식만으로 레벨로 구현하는 것은 어렵다. 따라서 캐드(Computer Aided Design, CAD)를 통해 만들어진 3 차원 형상을 3 차원 정렬 격자 공간상에 이식하는 방안이 모색되었고[4-5], 이를 통해 다양하고 복잡한 형상의 내부와 외부 유동에 대한 수치해석을 수행하였다.

CAD 형식중 하나인 스테레오리쏘그래피 (Stereolithography, STL) [6]은 3 차원 형상 표면을 삼각형으로 분할하여 삼각형의 꼭지점과 법선벡터로 형상 정보를 저장한다. 이 저장 형식을 바탕으로 최정일 등[4]은 Immersed Boundary Method (IBM)에서 형상 정보를 ‘bounding box’ [7]를 통해 표면의 삼각형을 제한하고 weighted pseudo normal vector [8] 및 Consensus 알고리즘 [9]을 이용하여 격자 점과 부호 거리를 할당하여 3 차원 정렬격자에 레벨 값을 결정하였다. 또한 Sean Mauch [5]는 삼각형을 제한하는 과정을 3 단계로 나타내어 Closet Point Distance (CPT) 알고리즘을

발표하였다. 이러한 방식들은 STL 형식이 제공하는 형상 정보뿐만 아니라 데이터가 저장되는 순서까지 고려해야 하므로 형상 정보를 사용하는 데에 보다 단순한 접근 방식이 필요하다. 다만 이전 연구에서는 수식이 아닌 기하학적인 도표와 개념만으로 형상을 변환하는 알고리즘을 소개하였기에 본 연구에서 최소한의 수학적인 공식들을 통해 STL 형상 정보를 바탕으로 3차원 정렬 격자 상에서 내부와 외부로 구분하는 레벨 값을 결정하는 3D-STL-parameterized-levelset algorithm 이 만들어지는 과정을 기존의 알고리즘[4-5]과 비교를 통해 설명하였다.

만들어진 알고리즘을 검증하기 위하여 반응막대실험(ratestick test)을 수치적으로 모사하였다. 반응막대실험은 다양한 반지름의 폭약을 충격에 의해 점화시켜 폭발 속도를 측정한 결과를 토대로 경험적인 반응 속도식의 파라미터[10]를 도출하는 대표적인 충격폭굉천이(shock to detonation, SDT) 실험이다. 반응막대의 형상을 기존의 수학 수식을 통한 경계면과 새롭게 개발된 STL 형식을 통한 경계면으로 설정하여 해석하였고 각각의 폭발 속도와 압력 측정 결과를 비교하여 검증하였다.

데토네이션(detonation)은 고온, 고압, 급격한 밀도 변화를 동반하는 비정상 화염이다. 이는 구조물의 손상과 인명 피해를 야기시킬 수 있다. 그래서 연소폭발천이(Deflagration to Detonation Transition, DDT) 현상을 확인하기 위해서는 수치적으로 접근해야 하며 특정한 조건에서 사고 예방의 관점에서 수행해야하는 수치해석 문제 중의 하나이다. Oran[11]은 Zel'dovich 의 gradient mechanism 을 제안하여 화염의 근처에서 발전하는 DDT 현상에 대한 연구를 진행하였고, 이를 발전시킨 Gamezo[12]는 2 차원 공간상에서 직선 관 안에 동일한 크기의

사각 장애물을 설치하여 DDT 현상이 일어나는 지형적인 조건을 확인하였다. 광민철 등[13]은 직선 관 과 더불어 곡선 관을 설정하고 관 내부에 타원형 장애물의 크기를 변경하여 DDT 현상이 일어나는 복합적인 수치해석 실험으로 장애물의 유무에 따른 데토네이션 천이 소요시간 및 위치를 측정하였다. 그러나 이러한 연구들은 2 차원 공간상에서 주로 이뤄졌다는 한계가 있다.

따라서, 기존의 수학적인 함수 방식으로는 설정하기 어려운 3 차원 형상을 CAD 프로그램으로 모델링하여 경계면을 설정한 후, 에틸렌-공기 혼합물이 채워진 상황에서 충격파의 강도를 변화시켰을 때, 충격파와 반사파가 가연성 기체-공기 혼합물과 반응하여 DDT 현상에 미치는 영향을 연구하였다. 이와 더불어 실제 크기의 공장 설비를 모델링하고 구조 내부에서 데토네이션에 의한 화염이 공장 설비에 미치는 피해 효과를 유체-고체 연성 기법을 적용한 시뮬레이션을 통해 확인하였다.

## 제 2 장 수치적 기법

### 2.1 지배방정식

고에너지 물질의 테토네이션 과정을 수치적으로 계산하기 위해 본 연구에서는 Reactive Compressible Navier–Stokes 식을 사용하였다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) + \nabla P + \phi (\nabla \cdot \hat{\tau}) = 0 \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + P)U) + \phi (\nabla \cdot (U \cdot \hat{\tau})) + \\ \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho q \dot{\omega} = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho Y)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i U) + \phi (\nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i)) = \rho \dot{\omega} \quad (4)$$

여기서,  $\rho$ ,  $U$ ,  $P$ ,  $\hat{\tau}$ ,  $E$ ,  $Y_i$ ,  $D$  와  $k$ 는 각각 밀도, 속도, 압력, 점성 텐서, 총 에너지 밀도, 반응물의 질량 분율, 확산 계수 그리고 열전달 계수이다. 점성 텐서를 포함한 지배방정식의 자세한 설명과 각종 계수에 대해 사용된 값은 참고문헌 [11]에 자세히 설명되어 있다. 위의 지배방정식에서  $\phi = 0$ 인 경우 반응막대실험을,  $\phi = 1$ 인 경우에는 가연성 기체-공기 혼합물의 반응에 사용된다. 지배방정식의 공간 계산은 4th order Convex ENO scheme을, 시간 계산은 3rd order R-K method [14]를 사용하였다.

## 2.2 3차원 레벨-셋 경계 설정 기법

3D 공간에서 계산 영역  $\Gamma$ 는 부호가 있는 거리 함수  $\phi$ 의 제로 레벨 셋[2]으로 정의된다. 즉 레벨-셋이란 계산하고자 하는 영역을 설정하는 것이다. 레벨 셋 함수(5)에 대한 방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (5)$$

여기서  $\phi$ 는 일반적으로 수학적 함수 식으로써, 정확한 함수 형태 꼴(그림 1)로 표현해서 계산하고자 하는 영역의 경계를 설정한 후, 이 함수 식을 통해 계산 영역의 정렬 격자 점에 부호 거리(Signed distance) 값인 레벨 값을 결정한다.

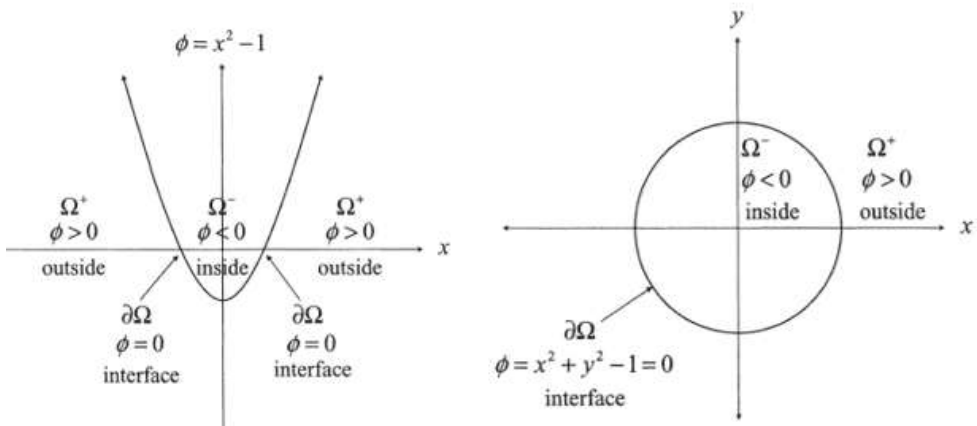


그림 1. 레벨 셋 개념[2]

3차원 공간 내에서 표면을 표현하는 방정식은 원통형 방정식, 구의 방정식 또는 평면의 방정식이 있으며 복잡한 3차원 경계를 표현하기에는 식의 개수 자체가 적다. 그래서 수학적 수식을 벗어나 복잡한 3차원 캐드 형상을 이용하기 위해 Stereolithography (STL)

형식의 형상 정보를 기반으로 개발된 3D-STL-parameterized-levelset 알고리즘으로 식(5)의  $\phi$  를 대체하였다.

기본적으로 STL 형식[6]은 그림 2와 같이 모델링한 형상을 n개의 삼각형으로 분할하여 각 삼각형의 세 꼭지점에 대한 위치 좌표와 바깥 방향에 대한 단위 법선 벡터를 제공한다.

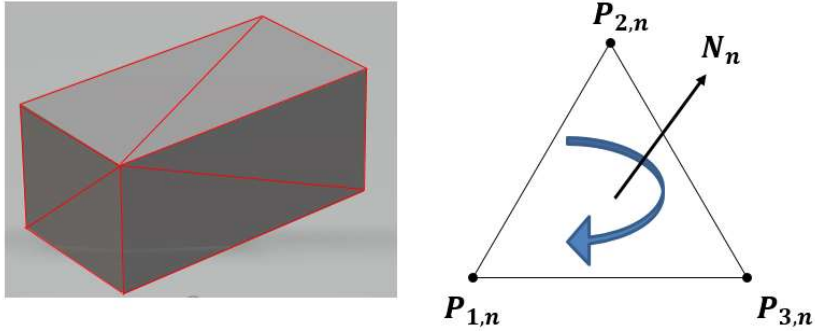


그림 2. 모델링 형상을 삼각형으로 분할한 후, 꼭지점 위치와 바깥 방향의 단위 법선 벡터를 제공하는 STL 형식의 특징

### 2.2.1 간단한 부호 거리 함수

STL 형식이 제공하는 삼각형 정보를 이용하여 공간상에서 평면을 생성해야 경계면으로 변환할 수 있다. 공간상의 격자 점( $G_k$ )와 경계면 사이의 부호 거리를 부여하는 simple signed distance function(SDF)은 다음의 식(6)으로 정의 된다.

$$\tilde{\phi}_n(G_k) = (G_k - P_{1,n}) \cdot N_n \quad (6)$$

$$\phi_n(G_k) = \min_n(\tilde{\phi}_n(G_k)) \quad (7)$$



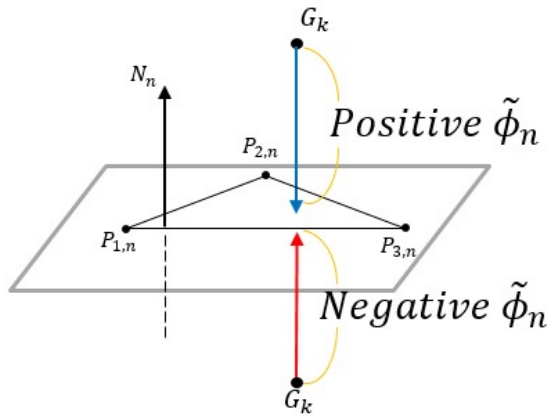
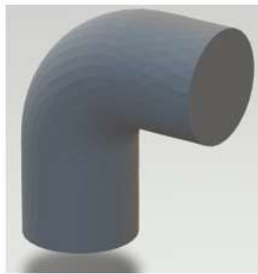
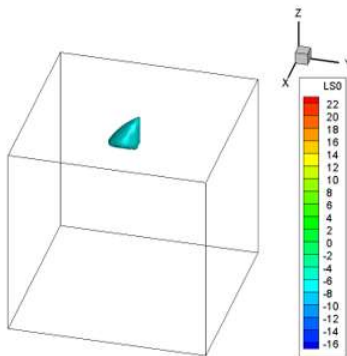


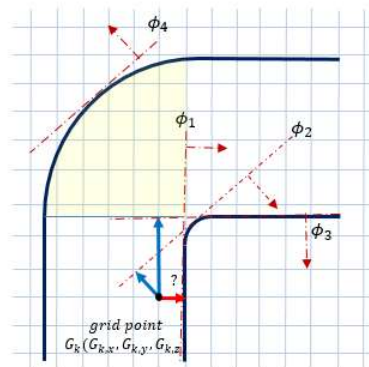
그림 3. 격자 점과 형상 표면으로부터 얻은 Simple signed distance function 개념



(a)



(b)



(c)

그림 4. (a) 굽은 관 형상 모델링 (b) 3 차원 형상 재현 결과 (c) YZ 평면상에서 본 레벨 값이 할당되지 않는 상황 예시

그림 3과 같이 어떠한 격자 점( $G_k$ )이 법선 방향과 같은 방향의 평면 위쪽에 있다면 양의 거리 값을, 법선 방향과 반대 방향인 평면의 아래쪽에 있다면 음의 거리 값을 구할 수 있다. 어떠한 STL 형상은  $n$ 개의 삼각형으로 이루어져 있으므로 격자 점( $G_k$ )과  $n$ 개의 평면에서 생성된 부호 거리 값 중 최소값을 식(7)을 이용하여 구한다. 이 값이 하나의 격자 점( $G_k$ )에 부여되는 레벨 값이 된다.

그림 4(a)는 꺾인 관을 캐드 모델링하여 추출한 STL형상이고 그림 4(b)는 SDF를 이용하여 3차원 형상 재현 결과이다. 이는 그림 4(c)에서 보는 것과 같이 형상의 내부에 있는 격자 점( $G_k$ )은  $\phi_1$  평면에서 음의 거리 값인 내부에 있다고 인식이 되지만,  $\phi_2, \phi_3$  평면에서는 외부에 있다고 인식되기 때문에 격자 점에 정확한 부호 거리가 할당되지 않는다.

즉, SDF으로 생성된 평면은 무한한 평면이기 때문에 STL 삼각형을 공간상에서 제한한 후 레벨 값을 부여하는 방식이 필요하다. 그래서 우리는 기존에 알려진 Immersed Boundary Method (IBM) [4]의 방식과는 다르게 삼각형을 제한하고 격자 점에 부호 거리를 부여하였다.

### 2.2.2 첫번째 부호 거리 함수

STL 형상 정보에서 삼각형의 각 꼭지점을 이용하여  $U_{1,n}, U_{2,n}, U_{3,n}$ 를 그림 5와 같이 생성한다.

$$v_{1,n} = U_{2,n} - \left( \frac{U_{2,n} \cdot U_{1,n}}{U_{1,n} \cdot U_{1,n}} \right) U_{1,n} \quad (8)$$

$$v_{2,n} = U_{3,n} - \left( \frac{U_{3,n} \cdot U_{2,n}}{U_{2,n} \cdot U_{2,n}} \right) U_{2,n} \quad (9)$$

$$\mathbf{v}_{3,n} = \mathbf{U}_{1,n} - \left( \frac{\mathbf{U}_{1,n} \cdot \mathbf{U}_{3,n}}{\mathbf{U}_{3,n} \cdot \mathbf{U}_{3,n}} \right) \mathbf{U}_{3,n} \quad (10)$$

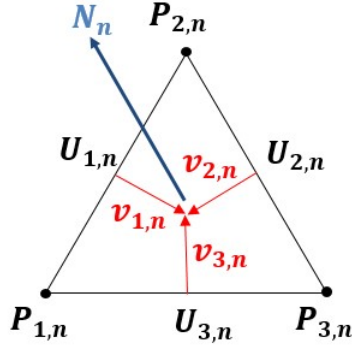


그림 5. 삼각형의 꼭지점으로 형성된 벡터  $\mathbf{U}_{1,n}, \mathbf{U}_{2,n}, \mathbf{U}_{3,n}$  를 통해 그램-슈미트 직교 과정에 의해 생성된 임시 벡터  $\mathbf{v}_{1,n}, \mathbf{v}_{2,n}, \mathbf{v}_{3,n}$

여기서  $\mathbf{v}_{1,n}, \mathbf{v}_{2,n}, \mathbf{v}_{3,n}$  는 식(8)-(10)의 그램-슈미트 직교 과정에 의해 만들어진 임시 벡터이며, STL 삼각형 모서리에 수직인 벡터이다. STL 삼각형과 서로 수직하는 3개의 평면은 격자 점과 임시 벡터  $\mathbf{v}_{1,n}, \mathbf{v}_{2,n}, \mathbf{v}_{3,n}$  를 이용하여 아래의 식(11)-(13)을 통해 생성할 수 있다.

$$q_{1,n}(G_k) = (G_k - P_{1,n}) \cdot \mathbf{v}_{1,n} \quad (11)$$

$$q_{2,n}(G_k) = (G_k - P_{2,n}) \cdot \mathbf{v}_{2,n} \quad (12)$$

$$q_{3,n}(G_k) = (G_k - P_{3,n}) \cdot \mathbf{v}_{3,n} \quad (13)$$

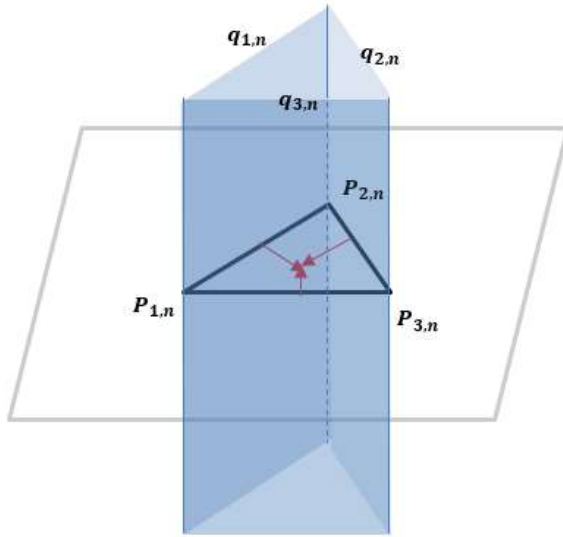


그림 6. STL 삼각형을 포함하는 평면에 수직하는 세개의 평면에 의해 생성된 삼각기둥

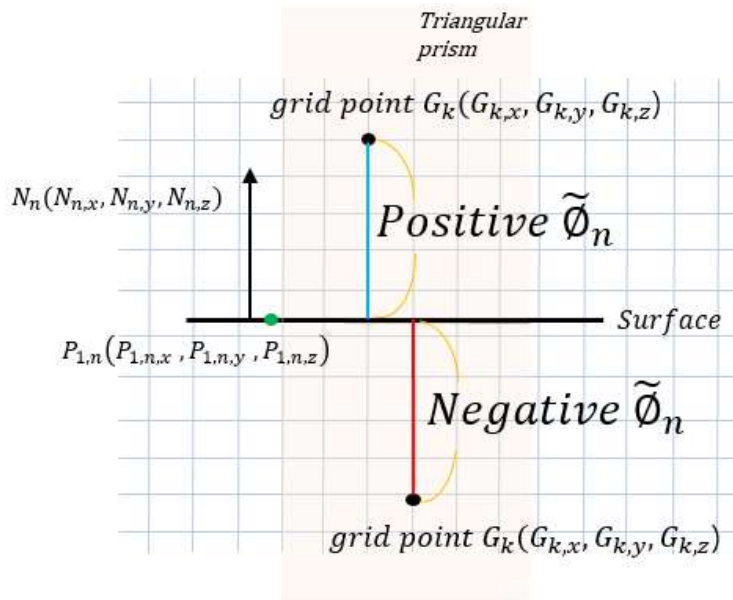


그림 7. 3 차원 공간 상에서 점과 표면 사이의 거리 형성 개념

$$\tilde{\phi}_n^1(G_k) = (G_k - P_{1,n}) \cdot N_n \quad (14)$$

If  $q_{1,n}(G_k) > 0$  and  $q_{2,n}(G_k) > 0$  and  $q_{3,n}(G_k) > 0$

$$\phi_n^1(G_k) = \min_n(\tilde{\phi}_n^1(G_k)) \quad (15)$$

그림 6과 같이 생성된 평면 는 삼각형을 제한하는 삼각 기둥이 된다. 이러한 접근법은 IBM에서 설명하는 Approximate Nearest Neighboring(ANN) 알고리즘[7]을 통해 삼각형의 무게중심을 기준으로 일정한 범위를 제한하는 ‘bounding box’를 설정하는 방식과 비슷하다. 그러나 삼각기둥으로 제한하게 되면 주변의 격자 점을 직관적으로 추려낼 수 있는 장점이 있다.

하나의 격자 점이 삼각 기둥의 범위에서 포함 여부를 먼저 파악하고 난 뒤에 삼각 평면과 격자 점 사이의 부호 거리를 할당하는 것이다. 그림 7과 같이 제한된 상태에서 격자 점에 부호 거리 함수를 부여하는 과정은 식(14)와 같다.

격자 점 주변에는 n개의 삼각 평면이 존재할 수 있으므로, 식(15)를 이용해 격자 점 하나에 최소의 부호 거리 값을 레벨 값으로 할당한다. Closet Point Transform(CPT) 알고리즘[5]에서 제안하는 방식과 동일하지만 본 논문에서는 상세한 수식을 통해 삼각기둥으로 설정하는 방법을 제공한다.

### 2.2.3 두번째 부호 거리 함수

First signed distance function으로는 격자 점( $G_k$ )에 레벨 값을 지정할 수 없는 예외적인 상황이 발생할 수 있다. 그림 8(a)와 같이 면과 면이 겹쳐서 접한 형상의 경우, 격자 점( $G_k$ )는 형상을 구성하는 삼각형으로 만들어진 제한된 삼각 기둥 경계 바깥에 위치하므

로 적절한 레벨이 할당되지 않는 부분이 생기게 된다.

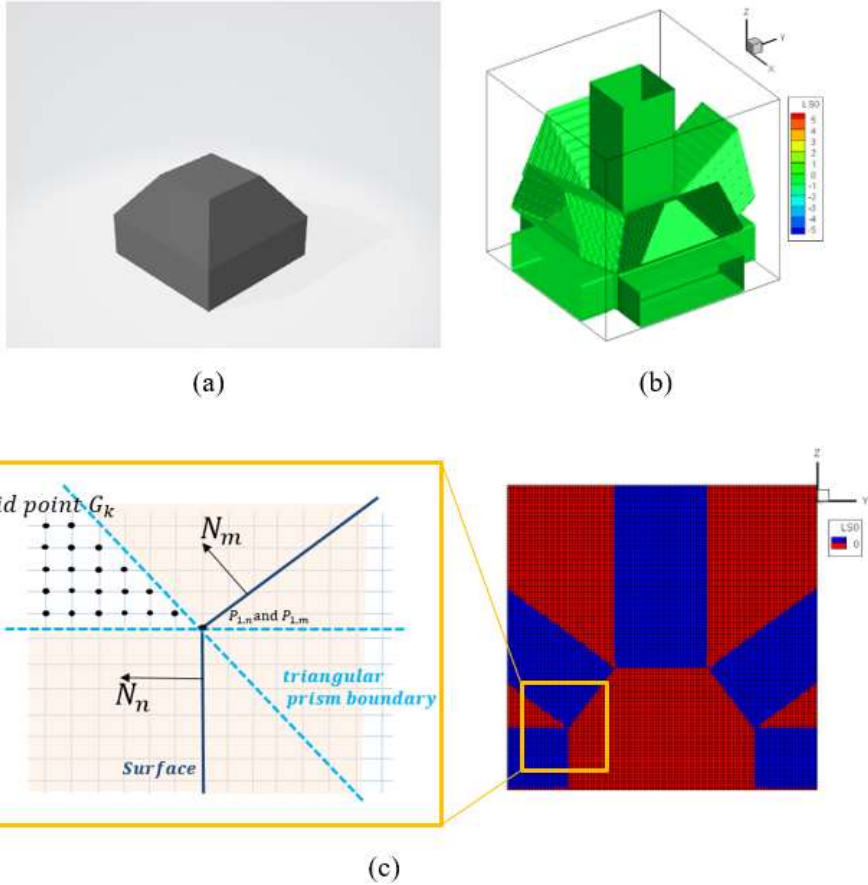


그림 8. (a) 추가적인 부호 거리 함수가 필요한 예외 상황의 예시, (b) 예외 상황 3 차원 형상 재현 결과, (c) YZ 평면상에서 본 예외 상황에 레벨 값이 할당되지 못하는 상세 상황

$$\vec{V}_{1,n} = \begin{bmatrix} P_{1,n,x} + (P_{2,n,x} - P_{1,n,x})t \\ P_{1,n,y} + (P_{2,n,y} - P_{1,n,y})t \\ P_{1,n,z} + (P_{2,n,z} - P_{1,n,z})t \end{bmatrix} \quad (16)$$

$$\text{where } t = \frac{(P_{1,n} - G_k) \cdot (P_{2,n} - P_{1,n})}{|P_{2,n} - P_{1,n}|^2}$$



[5]에서 모서리부분과 꼭지점 부분을 제한 하는 방식을 하나로 병합한 것과 같다. 즉 알고리즘상으로 격자 점과 STL형식간의 관계를 정의하는 방식에서 정보 처리 과정을 한단계 단축시킨 것이다. t의 범위에 따른 직선과 격자 점 사이의 거리는 식(17)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\tilde{\phi}_n^2(G_k) = \begin{cases} |P_{1,n} - G_k|, t \leq 0 \\ |V_{1,n} - G_k|, 0 < t < 1 \\ |P_{2,n} - G_k|, 1 \leq t \end{cases} \quad (17)$$

그러나, 식(17)은 거리만 구하는 식이다. 따라서 이 거리에 내부와 외부를 구분하는 부호는 다음의 식(18)와 같이 정의 된다.

$$sign = \begin{cases} \frac{(G_k - P_{1,n}) \cdot N_n}{\|(G_k - P_{1,n}) \cdot N_n\|}, t \leq 0 \\ \frac{(G_k - V_{1,n}) \cdot N_n}{\|(G_k - V_{1,n}) \cdot N_n\|}, 0 < t < 1 \\ \frac{(G_k - P_{2,n}) \cdot N_n}{\|(G_k - P_{2,n}) \cdot N_n\|}, 1 \leq t \end{cases} \quad (18)$$

$$\tilde{\phi}_n^2(G_k) = sign * \tilde{\phi}_n^2(G_k) \quad (19)$$

$$\phi_n^2(G_k) = \min_n(\tilde{\phi}_n^2(G_k)) \quad (20)$$

식(17)과(18)이 결합되어 식(19)가 되며, 내부 외부를 판별하는 부호를 가진 레벨 값을 격자 점에 부여할 수 있게 된다. 따라서 우리는 예외적인 상황에서도 격자 점에 레벨을 부여할 수 있는 수식인 식(19)를 얻을 수 있다. 격자 점 주위에 여러 개의 표면이 있을 수 있으므로, 부호가 있는 최단 거리는 식(20)을 사용하여 구한다.



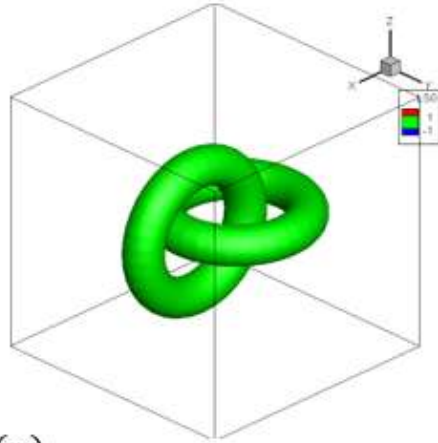
위에서 설명한 첫번째와 두번째 부호 거리 함수를 모든 격자 점에 반복해서 적용하면 3차원 공간의 모든 정렬 격자에 레벨 값이 주어지게 된다.

지금까지 식(5)의 부호 거리 함수  $\phi$ 를 대체하는 알고리즘의 생성 과정을 자세하게 기술하였다. IBM과 CPT 알고리즘은 공통적으로 angle weighted pseudo normal vector[8]를 사용하여 격자 점과 내적을 통해 부호를 할당하였고, CPT 알고리즘에서는 모서리 부분, 꼭지점 부분과 격자 점 사이의 관계를 분리시켜 고려한 반면 본 알고리즘은 모서리를  $t$ 에 대한 매개변수화된 직선으로 변환시켜 모서리와 꼭지점 사이의 관계를 한번에 정리하여 알고리즘 구현 과정을 단순화 하였다. 이는 STL 형식이 제공하는 요소들을 이해하기 쉬운 수식으로 처리하여 사용자가 보다 쉽게 접근할 수 있다는 장점이 있다.

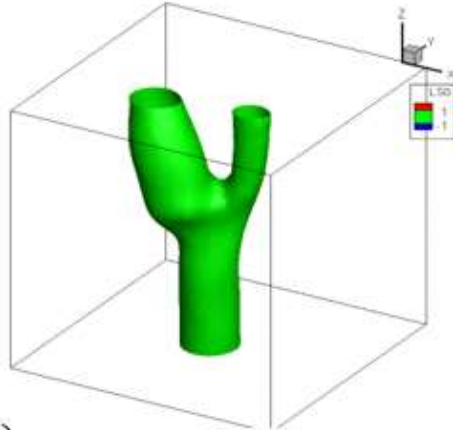
## 제 3 장 3차원 형상 재현 검증

### 3.1 3차원 레벨-셋 알고리즘 적용 결과

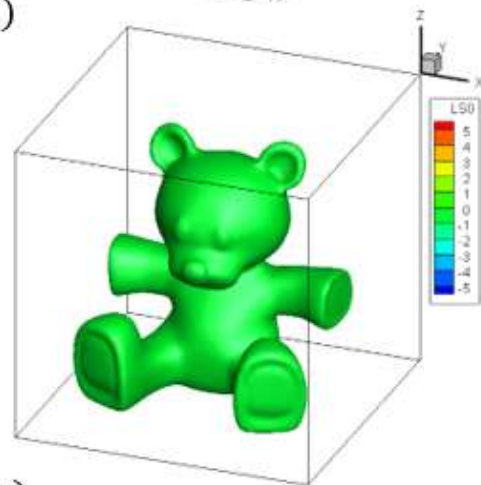
2.2절을 통해 설명된 3D-STL-parameterized-levelset 알고리즘을 통해 STL형상의 형상 정보를 이용하여 3차원 정렬 격자 상에서 내부와 외부로 구분하는 경계면을 설정한 결과는 그림 10과 같다. 토러스와 같이 간단한 기하학적 형상부터 사람의 형상까지 아주 복잡한 3차원 형상을 캐드를 통해 모델링하고 이를 STL 형식으로 추출하여 새로운 알고리즘을 적용하면 격자 점에 부여된 레벨 값의 집합이 해석 영역의 경계면이 되는 것이다.



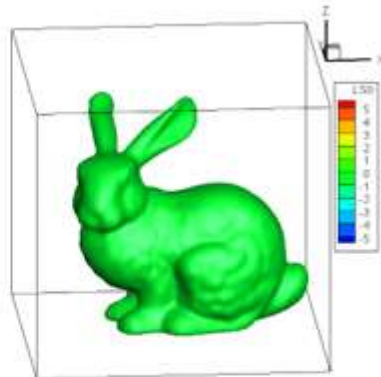
(a)



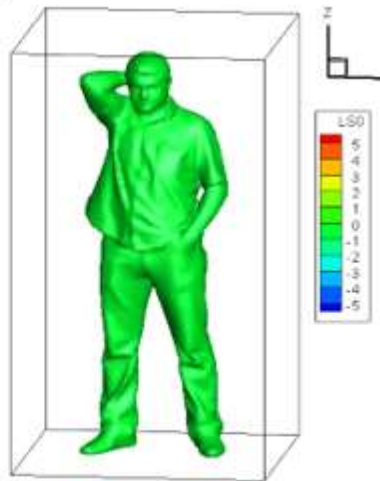
(b)



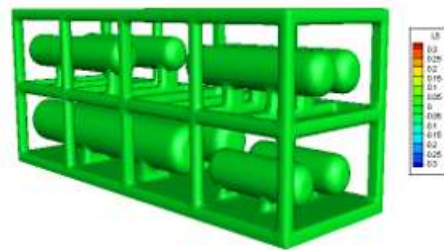
(c)



(d)



(e)



(f)

그림 10. (좌) CAD 모델링 형상 (우)알고리즘을 적용한 3 차원 형상 재현 결과(a)-(f)

	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
Triangle quantity	3456	21218	35180	98866	138950	6340

표 1. 그림 10의 각 형상을 구성하는 STL 삼각형의 개수

## 3.2 반응막대 실험 시뮬레이션

반응막대실험(Ratestick test)란 고폭 화약의 반지름 크기에 따라 폭발 속도를 측정하여 경험적인 반응속도 식을 도출할 수 있는 대표적인 충격과 - 충격폭굉천이(Shock to Detonation Transition, SDT) 실험 중에 하나이다.

### 3.2.1 초기 조건 및 경계 조건 설정

반응속도  $\omega$ 은 수정된 I&G 모델인 KYP 모델을, 고체 폭약의 반응 경과에 따라 고체 부분의 압력은 Mie-gruneisen EOS를, 기체 부분 압력은 isentropic JWL++ EOS를 통해 구한다. 본 검증에서 사용한 화약은 RDX 25이며 각종 수식과 파라미터는 참고문헌[10]에 자세한 설명이 나와있다. 내부와 외부의 경계면을 기준으로 물성값의 불연속부분은 Ghost Fluid 기법[14]을 통해 보완하였다. 그림 11에서 나타낸 도식화에서 고폭화약의 반지름 R의 크기는 17.5mm이며 화약 점화를 위한 impact velocity는 300m/s로 설정하였다.

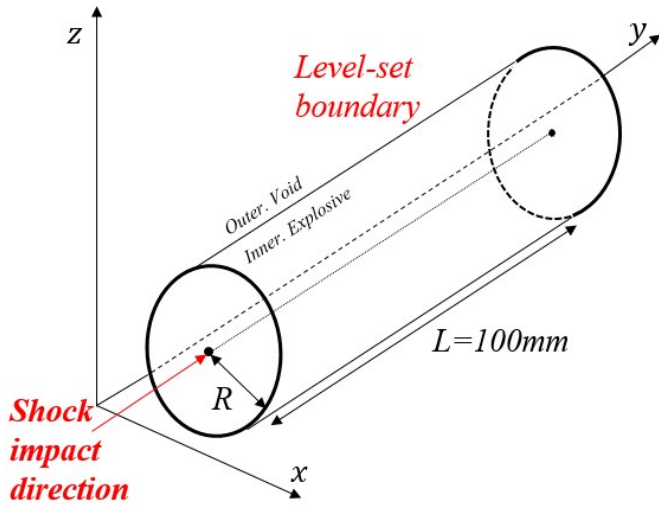


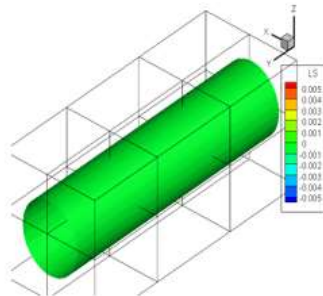
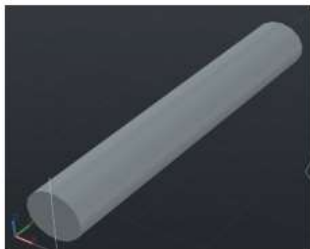
그림 11. Ratestick test 수치해석을 위한 계산 영역 설정

$$2D: \phi = y - 0.0175$$

$$3D: \phi = \sqrt{x^2 + y^2} - R, z_1 \leq a \leq z_2$$



(a)



(b)

그림 12. (a) 기존의 부호 거리 함수인 수식에 의한 levelset 설정 (b) 카드 모델링을 이용한 3D-STL-parameterized-levelset 설정

반응막대는 원기둥 형태의 간단한 형상으로써 기존에 이루어진 2D 수치해석에의 경우 반응막대의 단면만을 고려한다. 그림 12와 같이, 기존의 2D, 3D 해석은 부호 거리 함수인 수학적 수식을 통해 경계를 나타내었고, 추가적인 3D 해석에서 기존 방식 대신 캐드 모델링을 통해 경계면을 설정하였다.

### 3.2.2 시뮬레이션 결과 및 토의

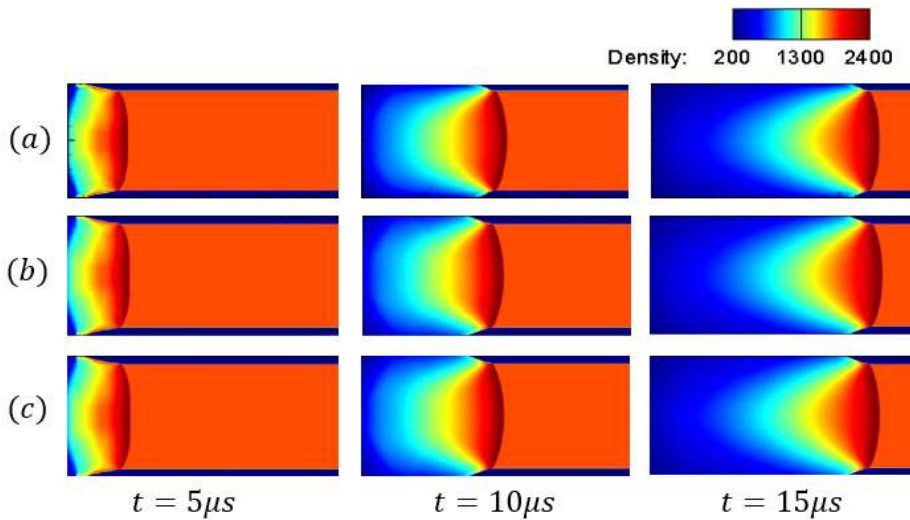


그림 13. 시간에 따른 밀도 변화 (a) 2D 수식 (b) 3D 수식 (c) 3D CAD

그림 13과 14는 반응막대실험 모사를 통해 얻는 압력과 밀도의 변화를 시간의 흐름에 따라 나타낸 결과이다. 여기서 (a), (b)는 기존의 경계면 설정을 통해 얻은 결과이고 (c)는 캐드 모델링을 통해 경계면을 설정하여 얻은 결과이다. 그림 15는 3D 결과의 밀도를 Iso-surface로 나타낸 결과이다. 초기에 전파되는 충격파의 속도부터 완전 발달에 도달하여 데토네이션으로 천이 되는 과정까지 3

가지 경우 압력과 밀도의 변화는 동일함을 알 수 있었다.

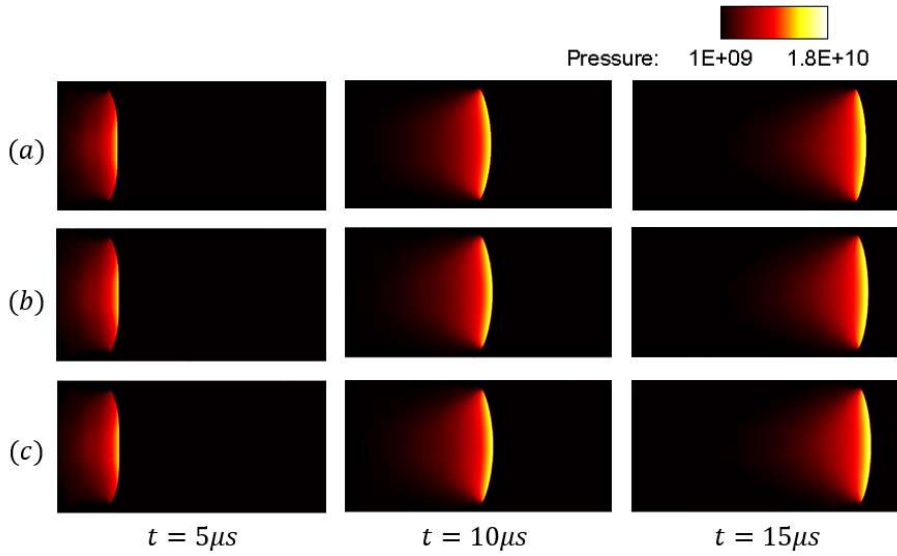


그림 14. 시간에 따른 압력 변화 (a) 2D 수식 (b) 3D 수식 (c) 3D CAD

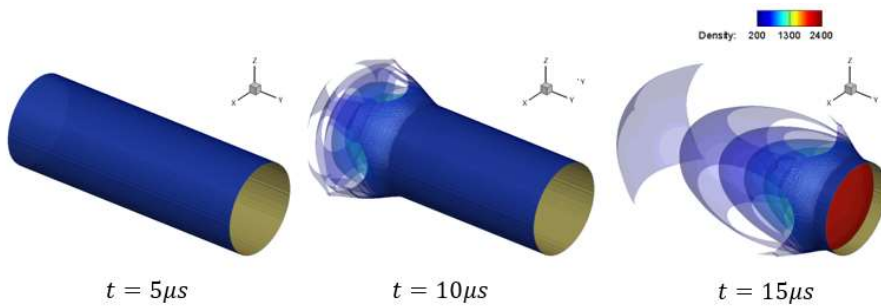


그림 15. 시간에 따른 밀도 변화 3D ISO contour

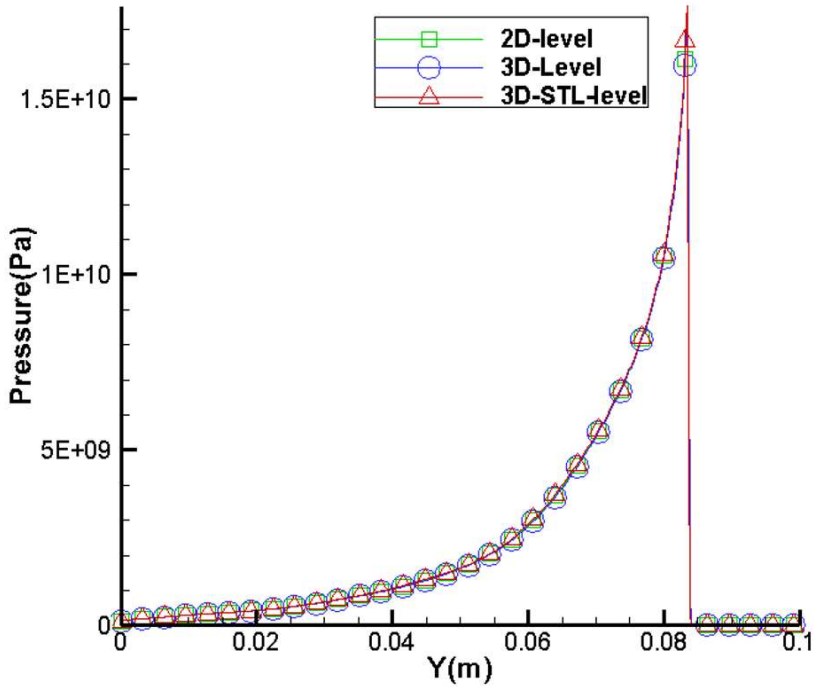


그림 16. 최고 압력에 도달하였을 때 3 가지 경우의 폭발 압력 비교

$t=17\mu s$ 에서 반응이 99% 진행되었고, 이때 얻을 수 있는 최고 압력(Peak pressure)의 3가지 경우의 결과는 그림 16과 같다. 이때 폭발 속도는 약 5400m/s로 측정되었으며 이는 실험값인 5396m/s와 비교하였을 때, 거의 동일함을 할 수 있었다. 이를 통해 3차원 정렬격자 상에서 기존의 레벨 셋 함수를 대체하는 3D-STL-Parameterized-levelset 알고리즘에 대한 타당성을 확보하였으며, 간단한 형상부터 복잡한 형상까지 CAD 모델링을 통한 레벨-셋(level-set)경계면 설정이 가능해졌다. 따라서, 캐드로 모델링한 형상을 하이드로 다이내믹 솔버에 적용하여도 기존의 경계면 설정 방식과 동등한 해석 결과를 얻을 수 있음을 확인하였다.



# 제 4 장 적용 및 결과

## 4.1 구조 영향에 따른 DDT 현상과 화염 가속 관계

DDT 현상은 고온, 고압을 동반하여 짧은 시간 동안 격렬하게 반응하는 비정상 연소반응 중의 하나이다. 충격파가 화염과 상호작용을 통해 생성된 열점은 화염 가속 현상과 DDT 발생의 요인이 된다 [11]. 본 연구는 shock tube 내에 가연성 기체-공기 혼합물인 에틸렌-공기 혼합물을 채운 후 전기 스파크로 생성한 화염 버블에 충격파를 주었을 때, 데토네이션으로 천이되는 과정을 확인한 G. Thomas [15]의 실험을 기반으로 하였다.

### 4.1.1 반응 모델 검증

에틸렌-공기 혼합물의 반응 과정을 수치적으로 모사하기 위해 사용된 반응 속도 식은 아래의 One step Arrhenius 식을 사용하였다.

$$\dot{\omega} = A\rho Y_i \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (21)$$

여기서  $A$ ,  $R$ ,  $T$ 와  $E_a$ 는 잣음률, 기체상수, 온도 및 활성화 에너지이며, 압력은 이상기체상태 방정식을 사용하였다. 충격파의 설정은 식(22)-(24)에 나타낸 Rankine-Hugoniot 관계 [16]에 의해 정의된다. 본 연구에서 사용한 충격파 강도의 범위는 마하수(Ma) 1.9~2.5이다.

$$P_s = P_0 \left( \frac{2\gamma M_s^2}{\gamma+1} - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right) \quad (22)$$

$$\rho_s = \rho_0 \left( \frac{\left( \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \frac{P_2}{P_1} + 1 \right)}{\left( \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right) + \frac{P_2}{P_1}} \right) \quad (23)$$

$$T_s = T_0 \left( \frac{\left( 1 + \frac{\gamma-1}{2} M_s^2 \right) \left( \frac{2\gamma}{\gamma-1} M_s^2 - 1 \right)}{\frac{(\gamma+1)^2}{2(\gamma-1)} M_s^2} \right) \quad (24)$$

Stoichiometric 상태의 가스가 채워진 shock tube에서 화염 버블을 생성하여 Ma2.5의 충격파를 주었을 때, 실험 조건과 동일한 위치에서 측정된 수치적 계이저를 통해 기록된 압력 값은 그림 17과 같다. 데토네이션 발생시 측정된 압력은 1.25Mpa이고 폭발 속도는 2050m/s였으며, 실험 값인 1.2Mpa과 1870m/s 보다 다소 높지만 오차범위 10%이내로 확인하였다.

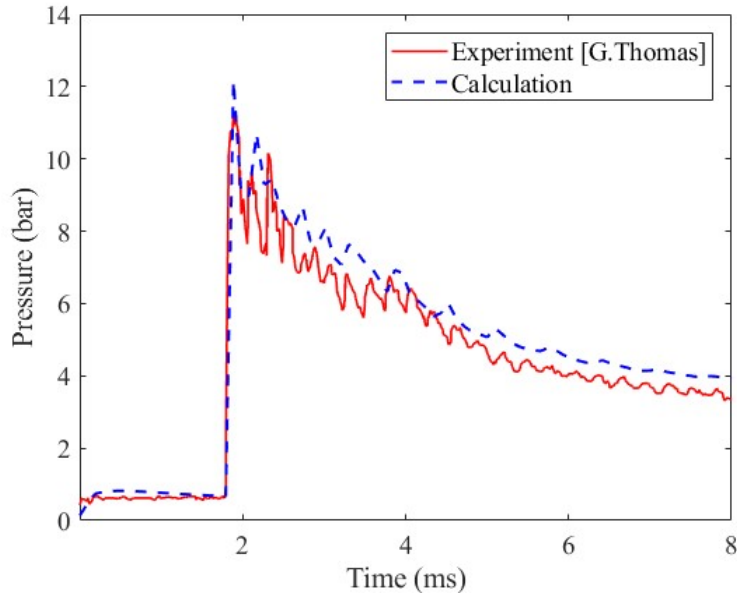


그림 17. 화염 모델링 검증을 위한 실험과 계산 압력 결과 비교

#### 4.1.2 초기 조건 및 경계 조건 설정

본 연구는 에틸렌-공기 혼합물이 채워진 형상을 다르게 하여 DDT 현상 발생의 유무를 확인하였다. 2.2절에서 설명한 3D-STL-parameterized-levelset 알고리즘을 이용하여 경계면을 설정하였다.

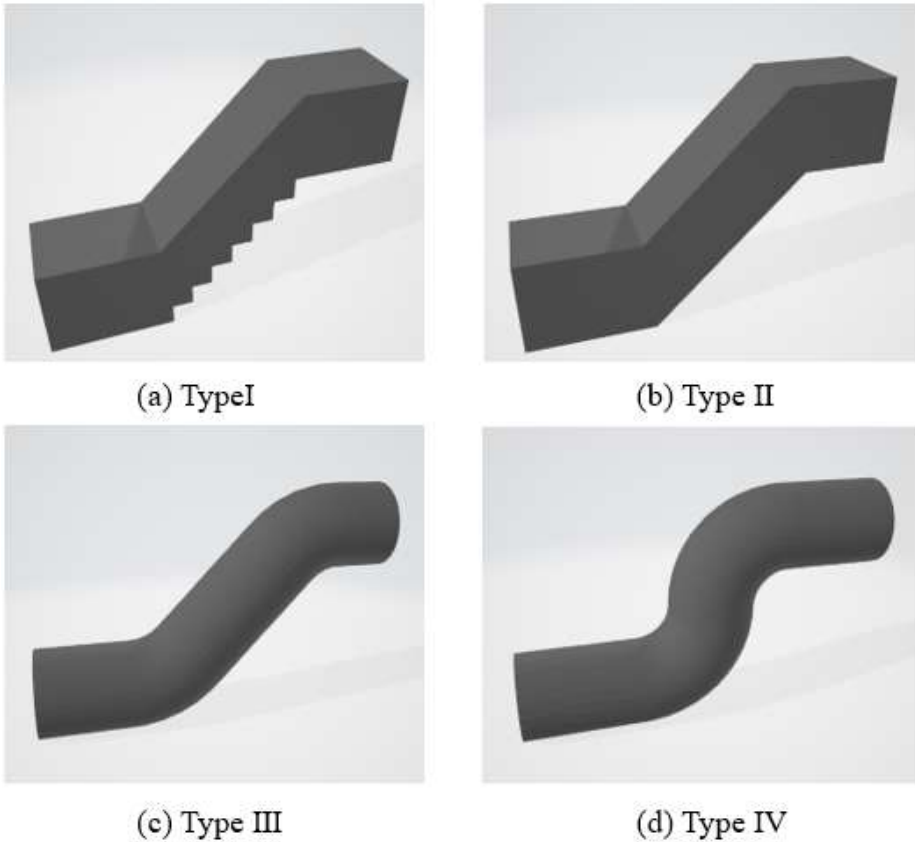


그림 18. 경계면 설정을 위해 모델링한 다양한 형상

그림 18에서 Type-I은 사각형 덕트에 계단식 장애물을 넣었고, Type-II는 장애물이 없는 형상이다. Type-III는 사각형이 아닌 원형 관으로 모델링하였고, Type-IV는 관이 꺾이는 각도를 90도로 바꾸어 모델링한 형상이다. 형상을 구성하는 STL 삼각형의 개수는

Table 2에 나와있다. 그림 19와 같이 동일한 위치에 반지름 7.5mm의 단열 온도의 화염을 설정하였다. 화염의 왼쪽에는 충격파 생성 지점을 설정하였고, 형상이 처음으로 꺾이기 시작하는 지점부터 수치적인 계지를 설정하여 충격파가 퍼져나가면서 화염과의 반응에 의해 생성되는 압력을 측정하였다. 계산 영역의 크기는 70mm×55mm이고 형상의 너비는 20mm로 설정하였다. 에틸렌-에어 혼합물과 벽(steel)의 경계조건 설정 시 Ghost Fluid기법[14]을 사용하였다. 계산에 사용된 각종 물성값은 표 3[13]에 정리하였다.

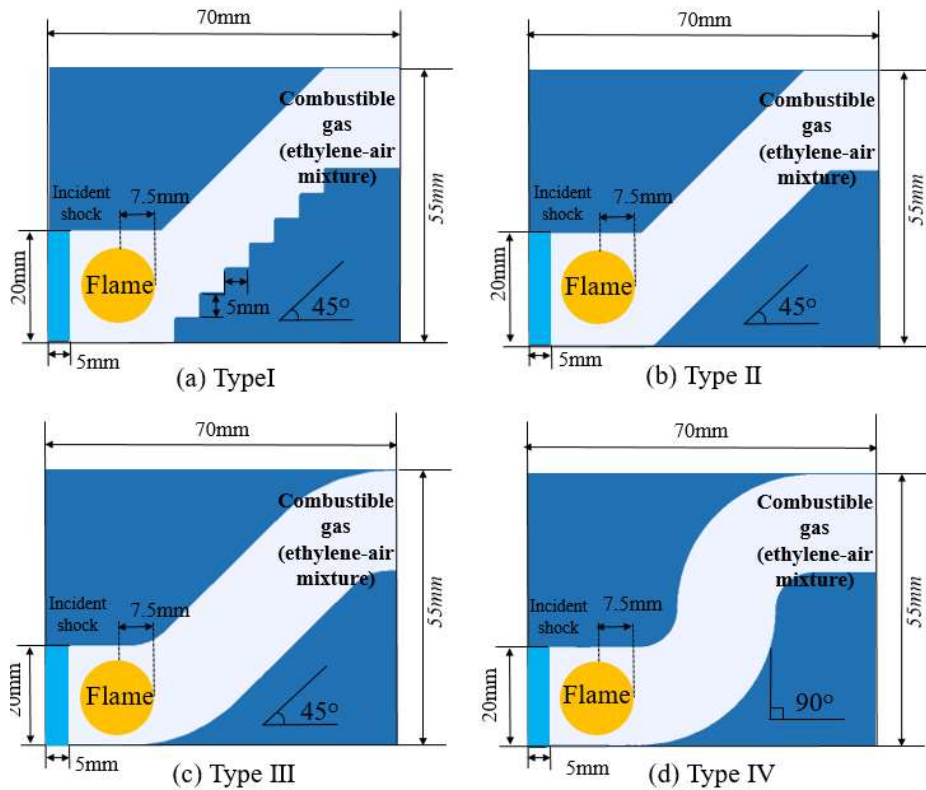


그림 19. 수치해석 영역 설정을 위한 도식화

	Type I	Type II	Type III	TypeIV
Triangle quantity	76	40	1666	2720

표 2. 각 Type 의 형상을 구성하는 STL 삼각형 개수

Parameter	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -air mixture
Initial density, $\rho_0$	0.42
Initial pressure, $P_0$	2.32
Initial temperature, $T_0$	1466
Specific heat ratio, $\gamma$	300
Molecular weight, $M_w$	330.3
Pre exponential factor, $A$	2180
Activation energy, $E_a$	1.410
Chemical heat release, $Q$	0.85
Flame density, $\rho_f$	0.76
Flame temperature, $T_f$	0.07

표 3. C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-공기 혼합물의 초기 물성값[13]

### 4.1.3 시뮬레이션 결과 및 토의

아래의 그림 20은 Type-I 에서  $Ma=2.5$ 의 충격파와 화염의 상호작용으로 화염이 발달하는 모습이다. 초기에 생성된 원형의 화염은 충격파에 의해 경사를 타고 이동한다. 이때, 충격파는 계단에 의해 생성되는 반사파와 중첩이 되면서 화염에 영향을 미치며 화염이 상하좌우로 퍼지도록 한다.  $t=0.064ms$ 에서 화염 내에 새로운 열점이 생성(그림 21(c))되며 CJ 압력에 도달하면 격렬한 연소 반응인 데토네이션으로 발전한다.

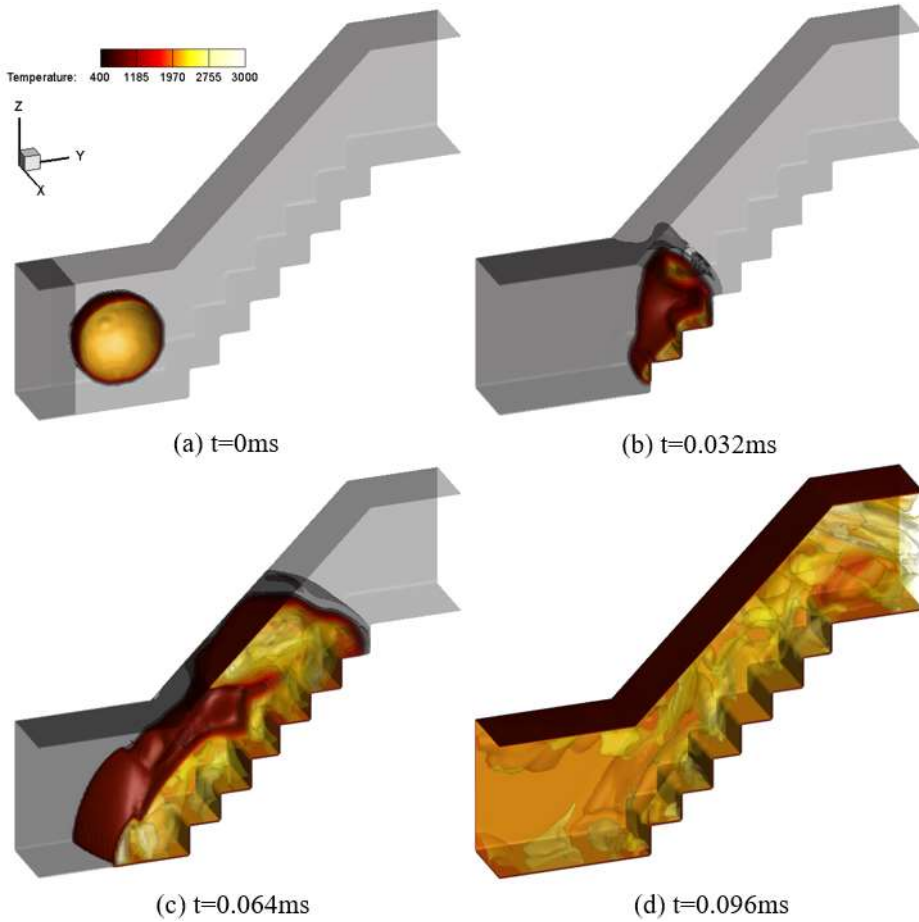


그림 20. Type-I 에서 마하수 2.5 의 충격파와 에틸렌-공기 혼합물의 상호작용에 의한 화염의 시간에 따른 온도 ISO contour

그림 21은  $Ma=2.5$ 에서 형상의 종류에 따라 열점이 생성되는 시간에 따른 압력 분포를 보여준다. Type-I 과 Type-II를 보면 계단의 형상이 있는 경우가 없는 경우보다 더 빠르게 반응이 진행된다. Type-II는 초기 충격파와 화염이 퍼져나갈 때, 반사파의 생성이 더디게 나타나 충격파와 반사파의 간섭이 상대적으로 약하게 일어난다. 따라서 데토네이션으로 발전하기 위한 충분한 에너지가 모이

는데 소요되는 시간이 차이가 나는 것이다. Type-III와 Type-IV를 보면 관의 굵힘 정도에 따라 열점 생성 도달까지 걸리는 시간에 차이가 생긴다. 이는 충격파가 전달될 때, 진행 방향의 급격한 변화에 따라 반사파의 발달을 촉진시켰기 때문이다.

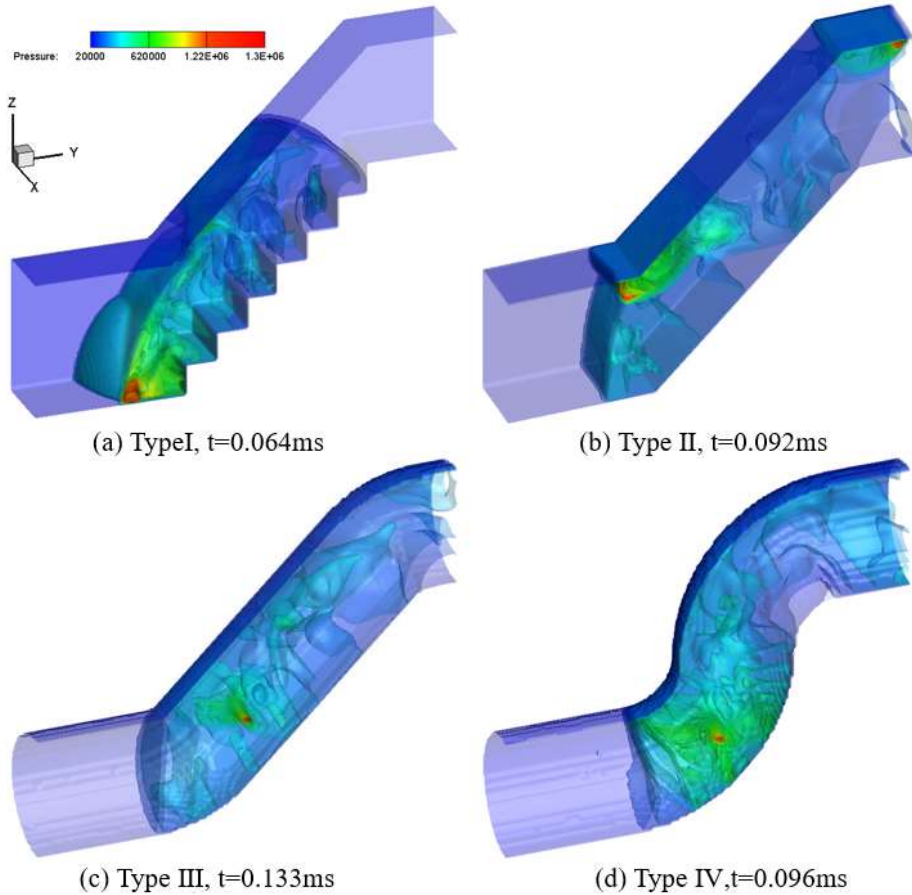


그림 21. 4 가지 Type 에서 마하수 2.5 의 충격파와 에틸렌-공기 혼합물의 상호작용에 의해 CJ 압력을 초과하는 열점 생성 시간에 따른 화염의 압력 ISO contour

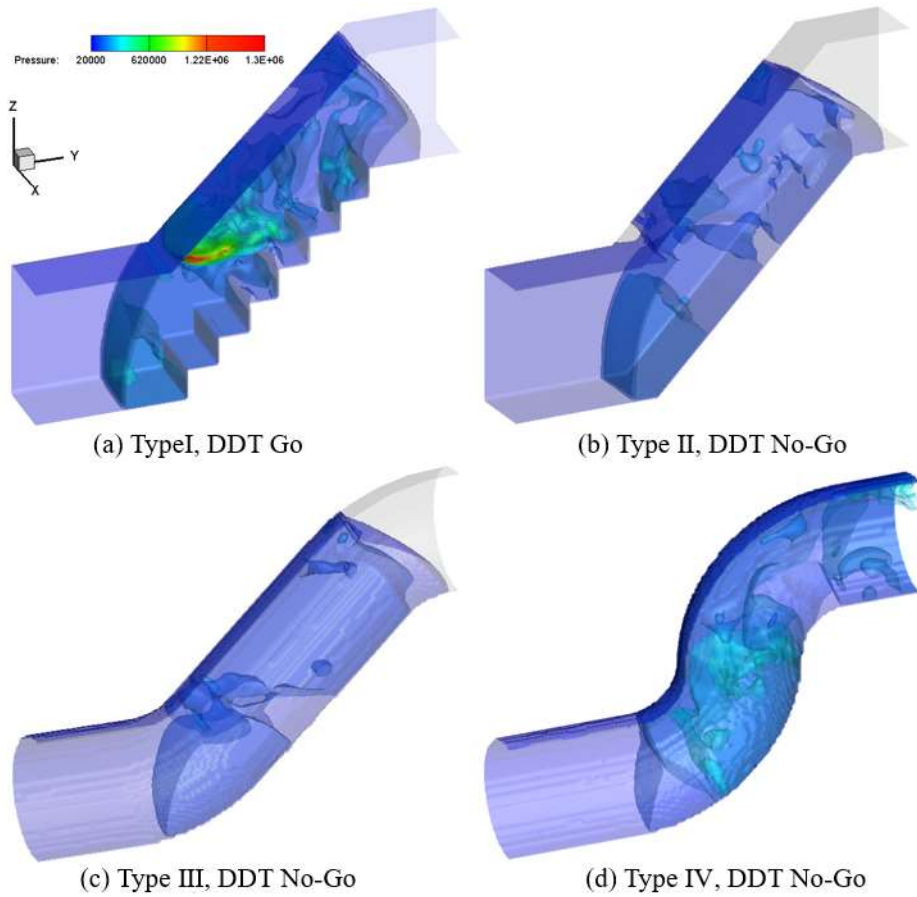


그림 22. 4 가지 Type 에서 마하수 2.3 의 충격파와 에틸렌-공기 혼합물의 상호작용에 의해 DDT 현상의 유무에 따른 화염의 압력 ISO contour

또한, Type-I, II의 열점 생성 도달시간이 Type-III, IV보다 상대적으로 빠르다는 것을 알 수 있다. 이는 사각 덕트의 경우 사방의 벽면까지 평평한 slip으로 되어 있다. 이는 사각 덕트의 경우 벽면이 평평한 slip 이지만 바깥 지점에서 90도로 꺾이는 부분에서 충격파와 반사파에 의해 압력상승이 급격하게 일어났기 때문이다. 열점 생성의 위치는 Type-I, II의 경우 경계면과 가까이에서 생성되



는 반면 Type-Ⅲ,Ⅳ같은 경우는 가운데 부분에서 일어나는 것을 확인할 수 있다. 원형 파이프의 경우는 반사파가 사방에서 동일한 각도로 전달되어 압력 상승이 형상의 중앙에서 집중적으로 일어났기 때문이다. 한편, 충격파 강도  $Ma=2.3$ 의 경우, 그림 22와 같이 Type-I에서만 CJ 압력을 넘어서는 열점의 생성 후 데토네이션으로 천이되는 것을 확인하였다. 이는 구조 내에 장애물이 DDT에 미치는 영향에 대한 여러 연구결과[12-13]와 마찬가지로 channel 형태와 같이 뾰족한 장애물이 데토네이션 천이를 촉진 시킨다는 수치적 실험 결과와 동등함을 알 수 있다.

충격파 강도와 형상의 차이에 따른 DDT 현상의 Go/No-Go를 표 4에 정리하였다. 모든 Type에서  $Ma=2.5$ 이상의 강한 충격파에 의한 DDT 현상을 확인하였고, 열점 생성 위치를 3차원 공간상에서 확인할 수 있었다. 특히 충격파 강도가  $Ma=2.3$ 일 경우, Type-I만 DDT 현상이 일어났다. 즉, 장애물의 존재 유무, 형상의 차이가 데토네이션 천이를 결정하는 중요한 요인임을 알 수 있었으며, 이를 통해 DDT 현상은 Type-I의 계단과 같은 극단적인 형상에서 더욱 잘 발생할 수 있음을 확인하였다.

Shock intensity (Ma)	Type-I	Type-II	Type-III	Type-IV
1.9	X	X	X	X
2.1	X	X	X	X
2.3	Go	X	X	X
2.5	Go	Go	Go	Go

표 4. 4 가지 Type 과 충격파 강도에서 DDT 발생 Go/No-Go 표, Go:DDT, X:No detonation

## 4.2 공장 폭발 피해 예측 시뮬레이션

본 시뮬레이션을 위해 유체-고체 연성(Fluid-Solid Interaction, FSI) 기법을 적용하였다. 고체에 미치는 deviatoric stress tensor에 대한 수식은 참고문헌[17]에 자세히 나와있다. 공장은 304 stainless steel로 구성되어 있으며 고체 구조에 미치는 압력은 Mie-gruneisen 상태방정식을 통해 계산하였고, 변형률은 Johnson-Cook 강도 모델을 사용하였으며 참고문헌[3]에 나온 수식과 물성값을 사용하였다.

### 4.2.1 초기 설정 및 화염 전파 시뮬레이션 결과

큰 공장을 1:5비율로 축소, 제작하여 진행한 실험[18]에서 사용한 구조(그림 23)을 참조하여 그림 24와 같이 2m×8m×2.5m의 공간에서 총 8개의 탱크가 설치된 복잡한 공장을 캐드 모델링하였다. 공장의 형상을 STL 파일로 추출하였을 때, 형상을 이루는 삼각형의 개수는 6340개이다. 이를 2.2절에서 설명한 3D-STL-parameterized level-set 기법을 적용하여 형상의 경계면을 설정하였다.

본 시뮬레이션은 에틸렌-공기 혼합물이 공장 주변에 균일하게 퍼져 있다고 가정하였다. 그림 25와 같이 화염은 지름 0.4m의 구 형태이며 위치의 좌표는  $x=4.66\text{m}$ ,  $y=0.9\text{m}$ ,  $z=2.0\text{m}$ 이다. 초기 화염의 압력은 3.1절에서 확인한 CJ압력으로 설정하여 데토네이션이 발생된 상황으로 가정하였다. 그림 26과 같이 초기 설정된 화염을 중심으로 시간이 지날수록 화염이 퍼지는 양상을 볼 수 있다. 이는 3차원 수치해석을 수행해야만 볼 수 있는 화염 전파 모습이다.

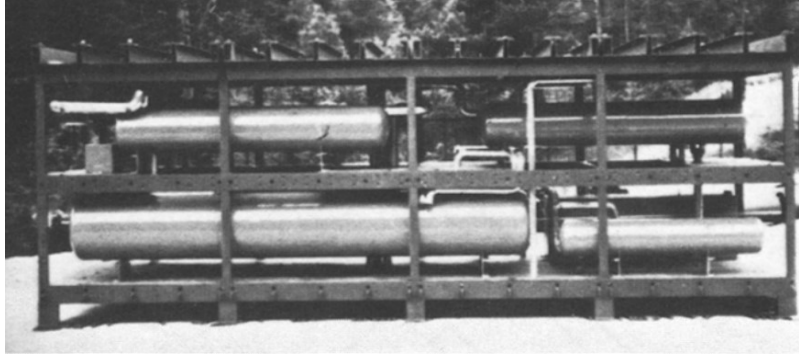


그림 23. 참고문헌[18]에 나온 1:5 스케일 공장 설비 실제 모형

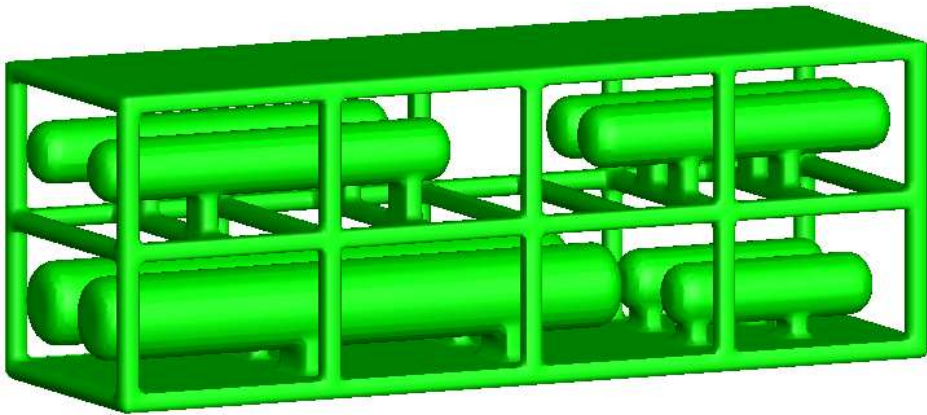


그림 24. 공장 설비 캐드 모델링 3 차원 형상 재현 결과

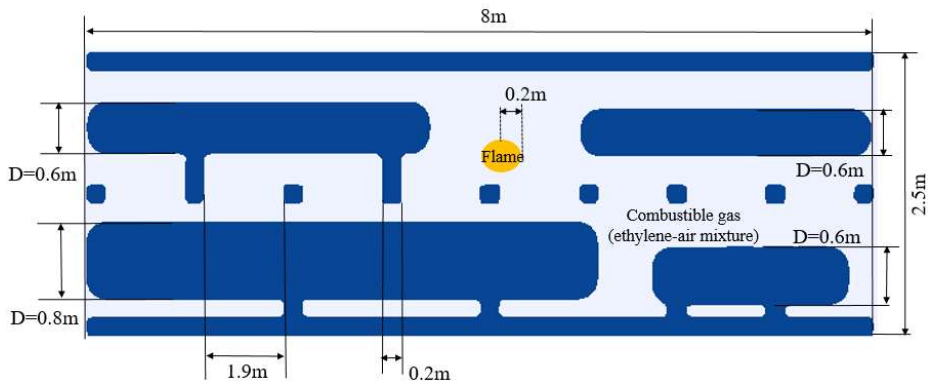
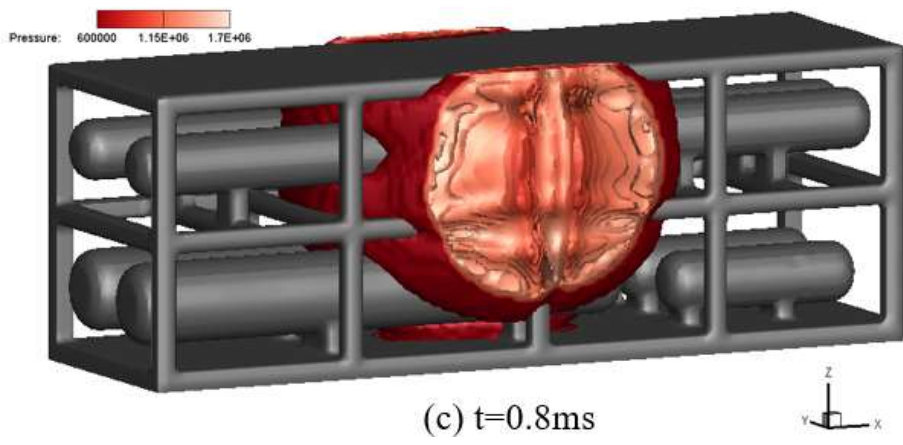
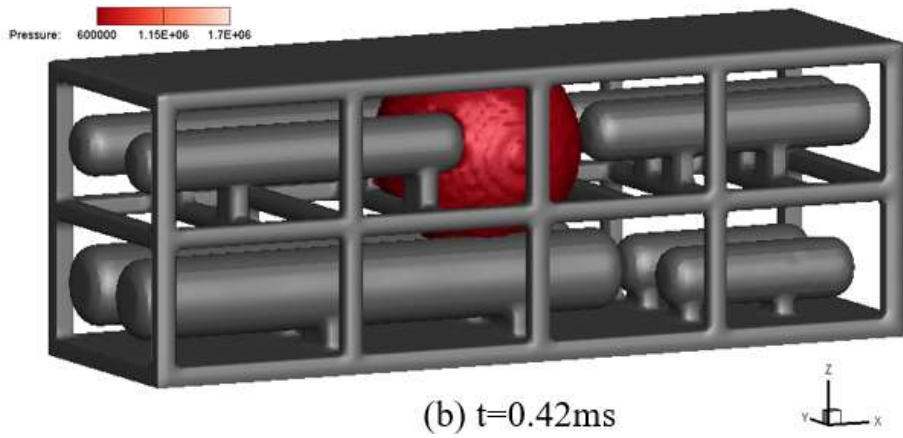
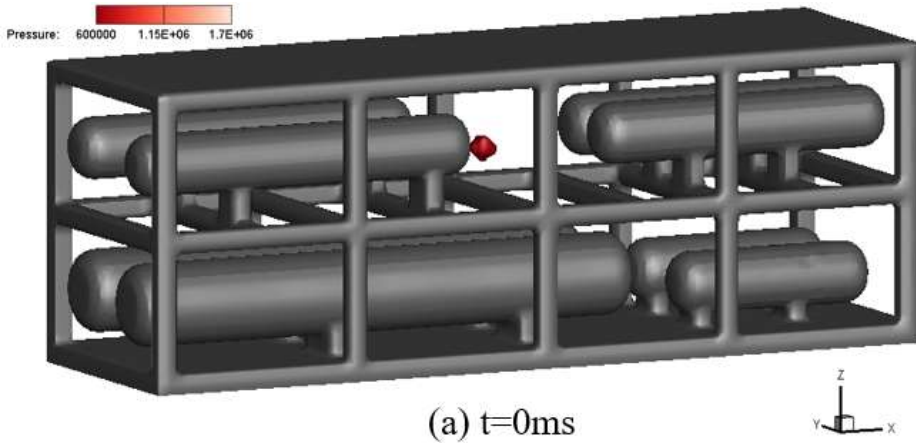


그림 25. 화염 전파 시뮬레이션을 위한 계산 영역 설정



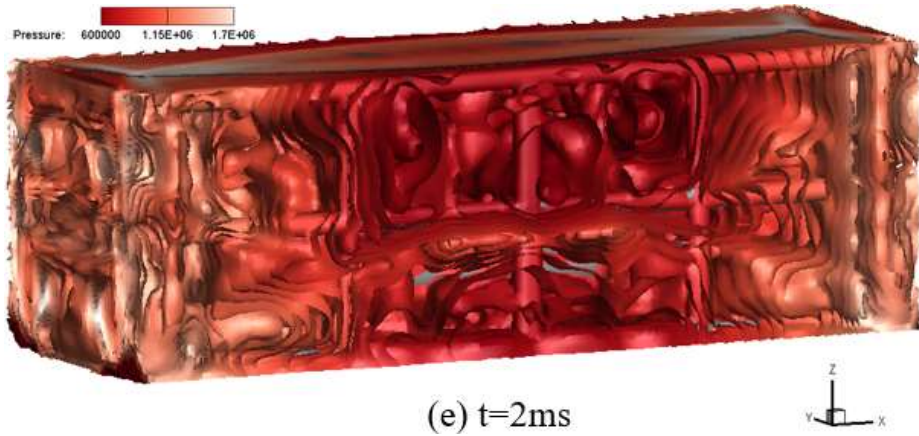
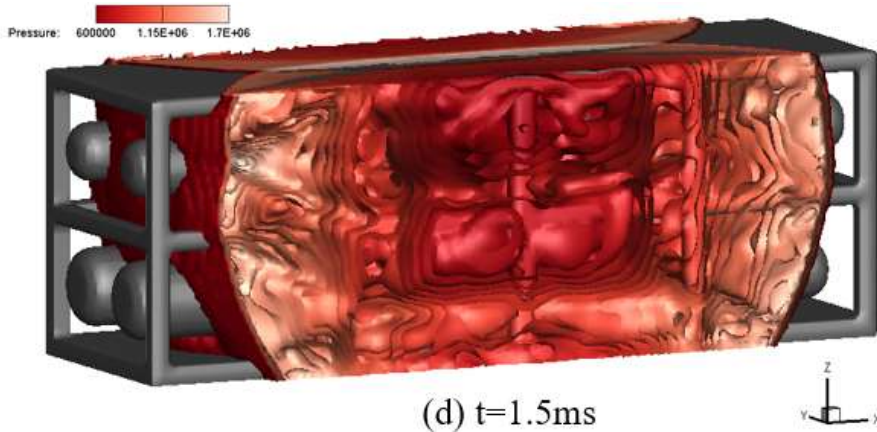


그림 26. 시간의 변화에 따른 화염 전파 과정에 대한 압력 ISO contour (a) – (e)

#### 4.2.2 공장 구조물 피해 예측 시뮬레이션 초기 설정 및 결과

그림 24에서 본 모델링에서 8개의 탱크 중 한개의 탱크를 두께 50mm로 설정하여 빈 공간을 만들고 10mm의 균열을 넣어 모델링 하였다. 공장의 형상을 STL 파일로 추출하였을 때, 형상을 이루는 삼각형의 개수는 9808개이다. 이를 2.2절에서 설명한 3D-STL-parameterized level-set 기법을 적용하여 형상의 경계면을 설정하

였다.

본 시뮬레이션은 에틸렌-공기 혼합물이 누출되고 있다는 상황을 가정하였다. 그림 27과 같이 화염은 지름 0.4m의 구 형태이며 위치의 좌표는  $x=4.66m$ ,  $y=0.9m$ ,  $z=0.73m$ 이다. 초기 화염의 압력은 CJ압력의 10배(100bar)로 설정하여 데토네이션이 발생된 상황으로 가정하였으며 4.1.1절에서 설명된 초기 충격파는 적용하지 않았다.

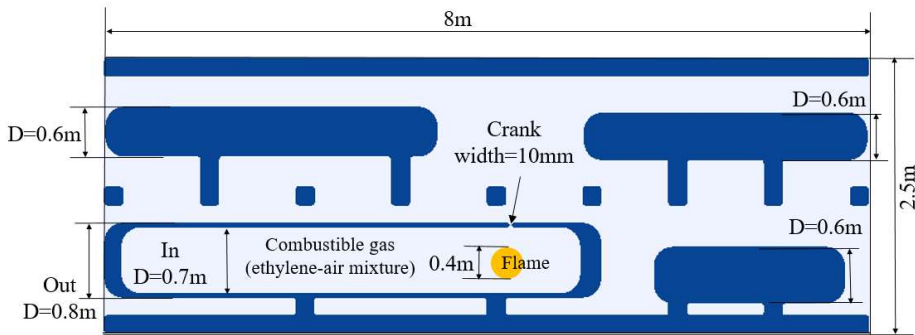


그림 27. 피해 효과 시뮬레이션을 위한 계산 영역 설정

그림 28은 각 시간에 따라 화염이 공장 전체로 퍼져나가는 것을 보여준다. 내부에 위치되어 있던 화염은  $t=0.12ms$ 에 균열까지 도달한다. 그 이후, 균열의 틈을 뚫고 나와 공장의 전체적으로 확산된다. 화염은 구조물과의 상호작용으로 원형으로 퍼지지 않고 탱크와, 기둥, 기둥과 기둥사이로 퍼져나가는 것을 확인할 수 있다.

그림 29는 구조물이 강한 압력을 동반하는 데토네이션에 의해 변화하는 과정을 나타낸 그림으로써, 탱크에 설정한 균열은 반응이 진행됨에 따라 10mm에서 80mm까지 벌어지는 피해를 입은 것으로 확인 되었다.

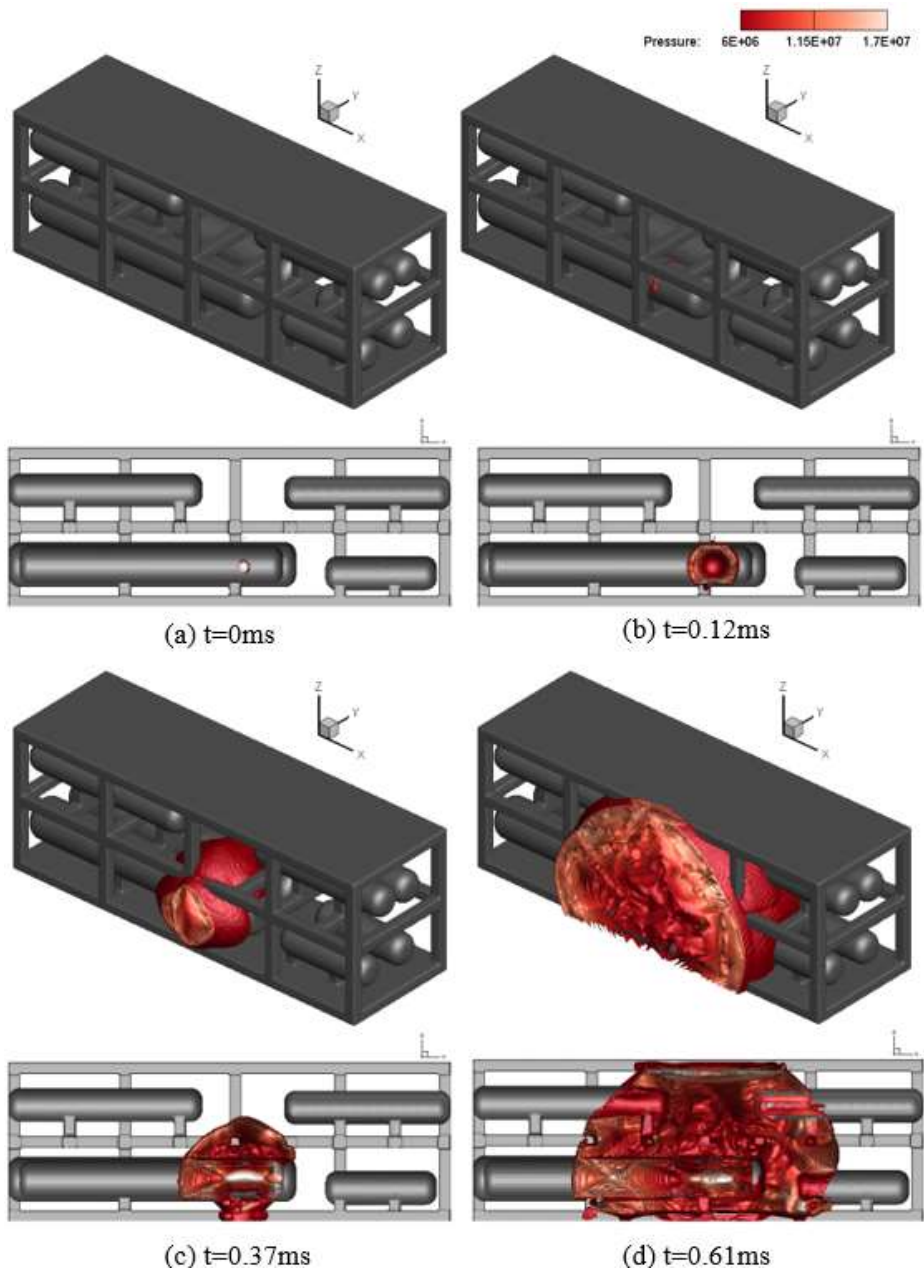


그림 28. 시간 변화에 따른 화염 전파 과정에 대한 압력 ISO contour, 위: 자유시점, 아래: XZ 평면상의 단면 시점

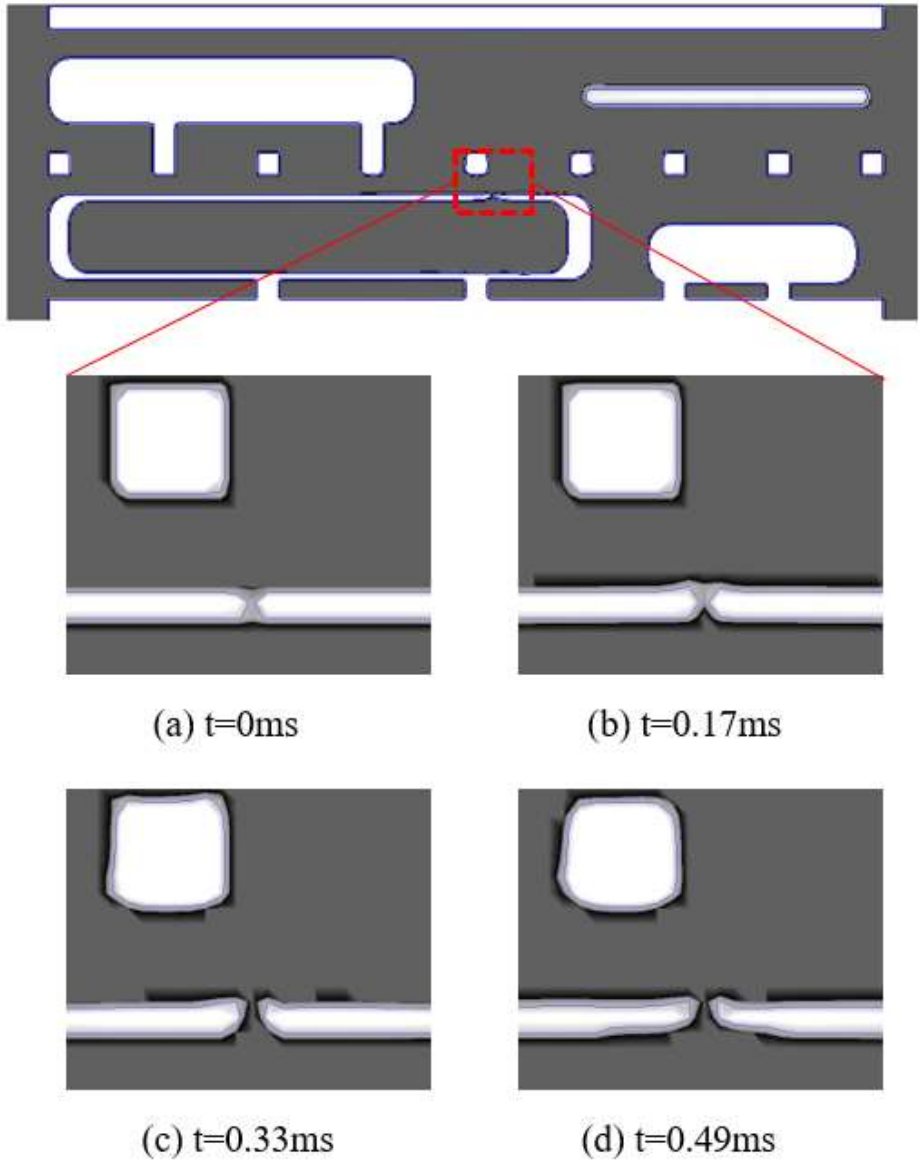


그림 29. 시간에 따른 균열 탱크 균열의 너비 증가 및 구조물 기둥 변화



## 제 5 장 결론

본 연구는 복잡한 3차원 형상을 기존의 수식을 이용한 경계면(level-set) 설정 방식을 벗어나 캐드 프로그램으로 모델링하여 추출한 STL 형식의 형상 정보를 이용하여 3차원 정렬 격자 상에서 내부와 외부를 구분하는 경계면(level-set)으로 변환하는 3차원 형상 레벨-셋 경계 변환 알고리즘(3D-STL-parameterized-level set algorithm)을 개발하였다. 이를 오일러리안 Framework인 하이드로 다이나믹 코드에 적용하여 기존의 방식과 비교를 통해 STL 형식을 이용하여 설정한 경계면 설정 기법을 적용하여도 정상적인 수치해석 수행이 가능함을 증명하였다.

DDT 연소 모델을 선행연구와 비교하여 검증하고 형상과 충격과 강도에 따른 화염 가속 모델링 수치해석 결과로 조건에 따른 데토네이션 발전의 유무를 확인하였다. 3차원 유동-구조 연성 해석 기법을 적용한 공장 내부의 가스 누출 사고 및 가압 탱크 내부의 폭발 현상을 해석하여 구조 변형 및 초기 조건에 따른 피해 효과 해석결과로 신뢰할 수 있는 안전 설계를 위한 기초 자료 제공하였다.

따라서 기존에 경계면 설정에서 오는 한계를 넘어 향후 더욱 복잡하고 정교한 캐드 모델링을 통해 다양한 수치해석을 수행할 수 있는 기틀을 마련하였다.

본 연구는 기존의 수식을 이용한 해석영역의 경계면(level-set) 설정 방식을 벗어나 CAD 프로그램에서 추출한 STL 형식의 형상 정보를 이용하여 3차원 정렬 격자 상에서 내부와 외부를 구분하는 경계면(level-set)으로 설정할 수 있는 3차원 형상 레벨-셋 알고리즘(3D-STL-Parameterized level-set algorithm)을 상세히 소

개하였다. 이 알고리즘을 오일러리안 Framework인 하이드로 다이나믹 솔버에 이식하였고, 대표적인 SDT인 반응막대 실험 모사에서 기존의 수학적인 함수 방식과 새로운 알고리즘으로 signed distance fields 설정하여 각 방식으로 얻은 시뮬레이션 결과와 실험값의 비교를 통해 CAD 모델링을 이용한 경계면이 설정된 3차원 수치 해석도 정상적으로 수행이 가능함을 증명하였다. 고에너지 물질을 가연성 기체-공기 혼합물로 변경하여 DDT연소 모델을 선행 연구와 비교, 검증하고 다양한 형상과 충격과 강도에 따른 화염 가속 모델링 수치해석 결과를 통해 동일한 충격과 강도에서 형상의 차이에 따른 데토네이션 발전의 양상을 확인하였다. 이를 확장시켜 복잡하게 모델링한 공장을 3차원 경계면으로 설정하고, 유동-구조 연성 해석 기법을 적용하여 가스 누출 사고에 따른 가압 탱크 내부의 폭발 현상을 모사하여 구조 변형 및 초기 조건에 따른 피해 효과를 해석하여 신뢰할만한 안전 설계 기준을 제시하였다.

따라서 기존에 경계면 설정에서 오는 한계를 넘어 향후 더욱 복잡하고 정교한 캐드 모델링을 통해 다양한 3차원 수치해석을 수행할 수 있는 기틀을 마련하였다.

## 참고문헌

- [1] Mavriplis, D. J. "Unstructured grid techniques." Annual Review of Fluid Mechanics 29.1 (1997): 473–514.
- [2] Osher, Stanley, and Ronald Fedkiw. Level set methods and dynamic implicit surfaces. Vol. 153. Springer Science & Business Media, 2006.
- [3] Gwak, Min-cheol, Younghun Lee, and Jack J. Yoh. "Numerical Investigation of Kerosene-Based Pulse-Detonation Loading on the Metal Tubes." Journal of Propulsion and Power (2016): 1146–1152.
- [4] Choi, Jung-Il, et al. "An immersed boundary method for complex incompressible flows." Journal of Computational Physics 224.2 (2007): 757–784.
- [5] Mauch, Sean. "A fast algorithm for computing the closest point and distance transform." Go online to <http://www.acm.caltech.edu/seanm/software/cpt/cpt.pdf> (2000).
- [6] Szilvsi-Nagy, M., and G. Y. Matyasi. "Analysis of STL files." Mathematical and Computer Modelling 38.7–9 (2003): 945–960.
- [7] Arya, Sunil, et al. "An optimal algorithm for approximate nearest neighbor searching fixed dimensions." Journal of the ACM (JACM) 45.6 (1998): 891–923.
- [8] Bærentzen, Jakob Andreas, and Henrik Aanaes. "Signed distance computation using the angle weighted

- pseudonormal." IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics 11.3 (2005): 243–253.
- [9] Sagawa, Ryusuke, and Katsushi Ikeuchi. "Taking consensus of signed distance field for complementing unobservable surface." Fourth International Conference on 3-D Digital Imaging and Modeling, 2003. 3DIM 2003. Proceedings.. IEEE, 2003.
- [10] Baek, Donghyeon, Bohoon Kim, and Jack J. Yoh. "Modeling the effects of aluminum and ammonium perchlorate addition on the detonation of the high explosives C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>8</sub>N<sub>8</sub> (HMX) and C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O<sub>6</sub>N<sub>6</sub> (RDX)." Journal of Applied Physics 124.21 (2018): 215905.
- [11] Oran, Elaine S., and Vadim N. Gamezo. "Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion." Combustion and Flame 148.1–2 (2007): 4–47.
- [12] Gamezo, V. N., A. M. Khokhlov, and E. S. Oran. "Effects of wakes on shock-flame interactions and deflagration-to-detonation transition." Proceedings of the combustion Institute 29.2 (2002): 2803–2808.
- [13] Gwak, Min-cheol, and Jack J. Yoh. "Effect of multi-bend geometry on deflagration to detonation transition of a hydrocarbon-air mixture in tubes." international journal of hydrogen energy 38.26 (2013): 11446–11457.
- [14] Yoh, Jack J., and Ki-hong Kim. "Shock compression of condensed matter using Eulerian multimaterial method: Applications to multidimensional shocks, deflagration,

- detonation, and laser ablation." *Journal of Applied Physics* 103.11 (2008): 113507.
- [15] Thomas, Geraint, Richard Bambrey, and Caren Brown. "Experimental observations of flame acceleration and transition to detonation following shock-flame interaction." *Combustion Theory and Modelling* 5.4 (2001): 573–594.
- [16] John, James EA. "Gas dynamics." (1984): pp. 107~123
- [17] Kapahi, A., S. Sambasivan, and H. S. Udaykumar. "A three-dimensional sharp interface Cartesian grid method for solving high speed multi-material impact, penetration and fragmentation problems." *Journal of Computational Physics* 241 (2013): 308–332.
- [18] Hjertager, B. H., K. Fuhre, and M. Bjørkhaug. "Gas explosion experiments in 1: 33 and 1: 5 scale offshore separator and compressor modules using stoichiometric homogeneous fuel/air clouds." *Journal of loss prevention in the process industries* 1.4 (1988): 197–205.

## Abstract

# Development of parameterized level-set method based on 3D CAD reconstruction for analysis of detonation transition of high energy materials

Hyunjun Kim

Department of Mechanical and Aerospace Engineering

The Graduate School

Seoul National University

We have developed a 3D STL parameterized level-set algorithm that is applied to multi-phase flow interface setup method using generally used stereolithography (STL) file instead of setting the boundary of the material by a mathematical formula in Eulerian based hydrodynamic code operated in 3D Cartesian coordinate system. Numerical simulation of rate-stick test was extended to three dimensions and the validity of newly developed algorithm was verified by comparing the detonation velocity of the boundaries set in the conventional equation and the boundaries set in the STL format. After various tubes interface is set by applying the new algorithm, Effect of geometry for deflagration

to detonation transition (DDT) phenomenon according to the interaction of the flame and the shock wave on combustible gas-air mixture were numerically simulated. This study confirmed the role of obstacles in the tube to develop detonation by judging Go-No Go of DDT phenomenon according to shock wave intensity and shape. Complex facility modeling boundary using New algorithm is applied to the situation of a real size, and the situation of flame spreading is visualized in three dimensions. Numerical experiments were carried out to determine the effect of detonation shock waves on the equipment when one tank of the plant inside was given extreme pressure conditions

**Keywords:** Stereolithography file format, CAD(Computer Aided Design), level-set method, high energy material, SDT(Shock to Detonation Transition), DDT(Deflagration to Detonation Transition), Flame spreading

**Student Number:** 2017-22312