



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

멀티스케일 다 물질 해석 기법을 활용한
금속 입자 함유 고에너지 물질의 연소/폭발
현상 연구

A Study on Combustion/Explosion of
Heterogeneous Energetic Materials Using
Multiscale and Multi-Material Analysis Method

2020년 6월

서울대학교 대학원

기계항공공학부

최 상 훈

초 목

반응 유동에서의 충격파-입자 상호작용에 대한 연구는 물질 경계면 처리를 위해 하이브리드 입자 레벨 셋 알고리즘과 함께 오일러리안 유체 역학 방법을 사용하여 수행되었다. 본 연구에서는 열압 효과를 향상시키기 위해 무작위로 분포된 반응성 금속 입자를 포함하는 고에너지 물질의 메조-메크로 스케일 수치 모델링을 다루고 있다. 반응성 유동 모델에서 압력기반 폭굉 해석을 위해 고폭화약으로 RDX, HMX 들을 사용하였으며 온도기반 폭연 모델링을 위해 알루미늄이나 구리 반응성 입자를 사용하였다. 고폭발성 응축된 상태의 고에너지물질에서 충격파로 인한 입자들의 붕괴를 시뮬레이션 하였으며 금속입자가 다량 함유된 RDX 는 충격파와 함께 폭발하며 폭발 충격파 뒤의 에너지 방출 및 알루미늄의 후 연소 반응을 수치적으로 모사하였다. 또한, 동일한 조성에서 연속체 모델과 이종모델을 가지고 충격파 전달 폭굉과정에 대해 비교 분석을 진행하였다. 다 물질 및 3 차원 시뮬레이션으로의 확장은 복합화약의 반응성 유동에서 입자 열/구조적 거동의 정확한 계산을 가능하게 하였다.

주요어: 하이드로다이내믹해석 (Hydrodynamic analysis), 고폭화약 (High explosive), 충격파전달폭굉 (Shock induced detonation), 고에너지물질 (Energetic materials), 메조스케일시뮬레이션 (Mesoscale simulation)

학번: 2018-28416

목 차

초 록	i
목 차	ii
표 목차	iv
그림 목차	iv
제 1 장 서 론	1
제 2 장 하이드로다이나믹 해석	6
2.1 지배 방정식	6
2.2 상태 방정식	10
2.3 연소 반응 모델	13
2.3.1 압력기반 폭굉 (Detonation) 화학반응	13
2.3.2 온도기반 폭연 (Deflagration) 화학반응	14
2.4 멀티스케일/다물질해석	16
2.4.1 레벨셋 (Level set) 기반 다물질 경계면 처리 기법 ...	16
2.4.2 메조스케일 (Mesoscale) 시뮬레이션을 위한 초기 조건	17
2.5 하이드로다이나믹 코드 검증	22
2.5.1 Rayleigh bubble collapse	22
2.5.2 충격파 전달 bubble collapse	23

제 3 장 열압탄 메조스케일 반응해석	27
3.1 고에너지물질 내부에서의 알루미늄 입자 연소.....	27
3.2 무한대 반지름을 가지는 반응막대의 연소해석.....	29
3.3 유한한 반지름을 가지는 반응막대의 연소해석.....	33
제 4 장 다물질 고폭화약 수치해석	40
4.1 고폭화약의 연속체 해석과 메조스케일 해석	40
4.1.1 반응막대 시뮬레이션 결과	40
4.1.2 통계적 열/연소 분석	47
4.2 3물질 복합화약 반응막대 해석	52
제 5 장 입자기반 3 차원 복합화약의 충격과 전달 폭굉 수치해석	58
5.1 3차원 2물질 복합화약의 충격과 전달 폭굉 시뮬레이션	58
5.2 3차원 3물질 복합화약의 충격과 전달 폭굉 시뮬레이션	60
제 6 장 결 론	63
참고문헌	64
Abstract	68

표 목차

표 2.1 금속 입자의 기계적/열적 물성치 및 Johnson-cook 계수	10
표 2.2 상태방정식 계수 정리 - 알루미늄, 구리, RDX, 물	11
표 2.3 상태방정식 계수 정리 - HMX95, HMX, ESTANE	12
표 2.4 폭굉모델에 대한 파라미터	13
표 2.5 알루미늄과 구리의 Arrhenius 파라미터	15
표 4.1 4개의 센서에서 측정된 Peak 압력과 Impulse	47

그림 목차

그림 1.1 알루미늄이 다량 함유된 열압 복합화약의 Grain 분석도	4
그림 2.1 알루미늄과 구리의 온도 역수에 따른 Arrhenius rate 상수, $\ln(k)$ 값 분포	16
그림 2.2 랜덤하게 생성된 다각형 예시 (N=5)	18
그림 2.3 RDX 배경 속 랜덤하게 설정된 다중 입자 분포 초기 도메인: (a) 원형 모양의 알루미늄 입자 (b) 다각형의 구리 입자	18
그림 2.4 (a) HMX Granule (b) 밀집된 알루미늄 파우더의 SEM 이미지. (c) HMX Granule (d) 알루미늄 파우더의 입자 크기 분포	19

그림 2.5	물질 경계면에서의 레벨셋 병합과 뒤집기 방법.....	20
그림 2.6	알루미늄(상), 구리(하)의 질량비율 변화 기록 그래프..	21
그림 2.7	(상) Rayleigh 버블 붕괴 초기 조건 (하) 압력 및 버블 모 양의 시간에 따른 참고 문헌 [22] 계산 결과와 본 연구 결 과 비교.....	22
그림 2.8	Rayleigh 버블 붕괴 시 시간에 따른 부피 변화와 버블 중 심의 위치 변화	23
그림 2.9	물속에서의 충격파 전달 공기 버블 붕괴 초기 조건	24
그림 2.10	충격파 전달 기포 붕괴의 시간 진행에 따른 결과비교 컨 투어 이미지 [22]	24
그림 2.11	충격파 전달 버블 붕괴 시 시간에 따른 부피 변화와 버 블 중심의 위치 변화.....	25
그림 2.12	충격파 전달 버블 붕괴에 대한 현 계산과 참고문헌[23] 모양 및 압력 비교 컨투어.....	26
그림 3.1	반응 RDX폭약에서의 단일 알루미늄 입자와의 상호작용 계산을 위한 초기 조건.....	27
그림 3.2	고폭화약과 단일 알루미늄 입자의 상호작용 결과.....	28
그림 3.3	알루미늄이 다량 포함된 RDX 반응 막대의 충격파 전달 폭굉 수치해석 결과	29

그림 3.4 구리가 다량 포함된 RDX 반응 막대의 충격과 전달 폭굉 수치해석 결과	31
그림 3.5 (상) 알루미늄 (하) 구리 이/가 포함된 RDX의 중심축에서 의 시간에 따른 압력분포	32
그림 3.6 금속입자가 함유된 RDX의 반응 막대 초기 조건	34
그림 3.7 구리를 포함한 RDX의 대기 연소 과정(압력, 에너지) ...	36
그림 3.8 구리를 포함한 RDX의 대기 연소 과정 (구리 질량분율)	36
그림 3.9 알루미늄을 포함한 RDX의 대기 연소 과정 (압력, 에너지, 알루미늄 질량 분율).....	38
그림 3.10 알루미늄을 포함한 RDX의 대기 연소 과정 (EPS)	39
그림 4.1 0.5mm HMX95 폭약의 충격과 전달 폭굉과정 연속체와 메조스케일 shadowgraph 컨투어 비교.....	41
그림 4.2 0.5mm HMX95 폭약의 충격과 전달 폭굉과정 연속체와 메조스케일 압력 컨투어 비교.	42
그림 4.3 연속체와 Grain모델 시뮬레이션의 충격과 속도 비교	43
그림 4.4 연속체(상), Grain scale(하) 수치해석의 압력 분포	44
그림 4.5 다양한 반지름을 가지는 반응막대의 수치해석(연속체, Grain)결과와 실험결과 폭굉속도 비교.....	45

그림 4.6	센서 P1~4에서 측정된 압력전파도	46
그림 4.7	(a-d) 연속체, (e-h) Grain 해석에서의 열 방출률.....	49
그림 4.8	열 방출 속도에 따른 PDF분포. (a-d) 연속체 해석, (e-h) Grain 시뮬레이션	51
그림 4.9	3개물질(HMX, Al, 바인더) 해석을 위한 초기 도메인 ...	53
그림 4.10	경미한 충격과 전달 시 Shadowgraph와 압력 컨투어.	54
그림 4.11	경미한 충격과 전달 시 HMX 및 Al 질량분율	54
그림 4.12	강한 충격과 전달 시 Shadowgraph 와 압력 컨투어 ..	55
그림 4.13	강한 충격과 전달 시 HMX 및 Al 질량분율.....	56
그림 4.14	강한 충격, $0.16\mu s$ 에서의 열 방출 속도 PDF 컨투어.	56
그림 5.1	3차원 2물질 복합화약 해석 초기조건(HMX, 바인더)....	59
그림 5.2	3차원 2물질 복합화약의 압력, 질량분율 해석결과.....	59
그림 5.3	3차원 3물질 복합화약 해석 초기조건(HMX, Al, 바인더)	61
그림 5.4	3차원 3물질 복합화약의 압력, 질량분율 해석결과.....	61

제 1 장 서 론

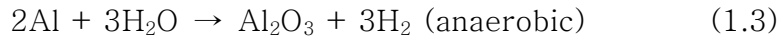
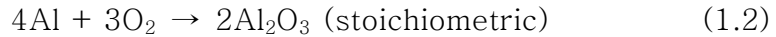
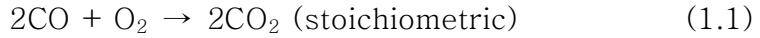
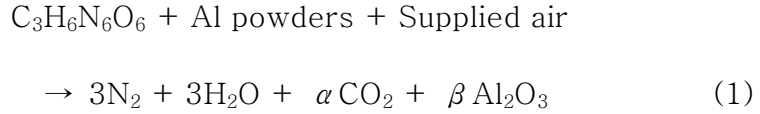
본 연구에서는 주로 고평화약이나 파이로테크닉 물질 같은 고체 상태의 고에너지 물질을 다루고 있으며 이의 초음속, 아음속 연소 과정을 수치적으로 해석하였다. 고에너지물질은 연료 및 산화제로 이루어진 복합체로 외부에서 에너지가 가해지면 화학적 엔탈피가 열적 에너지로 매우 빠르게 변화하는 특징을 가지고 있다. 고에너지 물질은 군용화약, 로켓, 기타 추진기관 등 다양한 영역에서 활용되고 있으며 폭굉(Detonation)반응이 일어날 시에는 높은 압력과 고온을 동반하게 된다. 이러한 고에너지 물질의 착화 방식은 다양한 방식이 있다. 전기 스파크로 순간적인 고에너지를 만들어서 착화하는 방식, 높은 열을 가해 착화하는 방식, Flyer 같은 비행체 파편을 빠르게 충돌시키는 방식 등 다양한 초기 점화 방식이 있으며 본 연구에서는 주로 Flyer와 같은 비행체 파편이 빠르게(~1500m/s) 날아와 고에너지 물질에 충돌하는 것으로 해석을 진행하였다.

외부의 강한 충돌이 있으면 고에너지물질 내부에서는 충격파(Shock)이 생성되게 된다. 진행하는 충격파가 내부 폭약 입자와 충돌할 때, 입자 압력파의 왜곡 및 입자의의 형상 변형으로 인하여 복잡한 유동 구조가 형성된다. 이때 rarefaction의 회절은 충격파와 후류 입자 사이의 상호작용으로 인해 다양한 형태로 발전한다. 입자의 존재는 장애물로서 작용하여 파면에서 왜곡을 발생시키고 입자 뒤에서 다양한 유형의 반사 인장파(Reflected tensile wave)가 중첩되게 한다. 이 과정의 또다른 주요 특징은 연소가능한 고에너지 금속 입자를 연소시킬 수 있으며 연소 가스화 된 물질은 대기중으로

퍼져 나간다. 이는 많은 수의 금속 입자와 고에너지물질의 연소로 발생된 강한 충격파 간의 상호작용 때문이며 그 복잡성으로 인해 쉽게 해석되기 어려운 현상이다. [1-4]

고에너지 물질 내부의 금속 입자 첨가물은 대기중에서 후 연소 (After-burning) 특성으로 인해 폭약의 다중 반응 기능을 향상시킨다. TNT, HMX, RDX, PETN등고전적인 고폭화약의 1차 폭발 후 금속입자의 2차 반응은 폭발 시간을 늘리며 이는 파괴력을 높이는 열압효과(Thermobaric) 이다. 금속이 다량 함유된 고에너지 물질의 고압조건에서 후 연소 현상을 이해하기 위해서는 고폭화약에 의한 1차 폭발과 금속입자에 의한 2차 폭연 반응을 이해하는 것이 매우 중요하다. [4-6]

본 연구에서 사용된 조성중 하나인 알루미늄이 함유된 RDX에서 단일 RDX의 반응을 요약해 보면 $C_3H_6N_6O_6 \rightarrow 3N_2 + 3H_2O + 3CO$ 과 같이 쓸 수 있다. 하지만 산소가 적게 함유된 폭약의 반응 과정의 경우 검은 연기를 발생시키며 그 자체로 더 연소할 수 있는 연료가 되는 단일 탄소 C와 탄소 monoxide CO가 생성되게 된다. 폭발으로의 연소가 종료된 이후에는 RDX와 같은 폭약의 생성물 (Product)은 자유롭게 공기중으로 퍼져 나가게 된다. 이러한 현상이 발생할 때 생성물은 공기중의 산소와 결합하게 되고 연소되게 되어 이산화 탄소가 완전히 연소될 수 있다. 이 과정에서 알루미늄 알갱이가 참여하게 되면, 역시 대기중 산소와 결합을 시도하여 연소된다. 알루미늄은 반응성 금속이고 물 및 공기와 자발적으로 반응하여 산화 알루미늄을 형성한다. 따라서 반응성 알루미늄이 첨가된 RDX의 전체 반응 과정은 다음과 같다.



알루미늄 산화의 제 2반응(식 (1.1))을 2차 fireball 혹은 후 연소 반응이라고 한다. 이러한 fireball은 폭발물과 혼합된 구리, 실리콘, 붕코, 지르코늄 및 바인더(binder)와 같은 다른 가연성 물질에 의해 생성될 수 있다. CHNO 폭발성 $\text{C}_x\text{H}_y\text{N}_w\text{O}_z$ 와 같은 일반 화학식을 참조하면, 모든 탄소가 CO_2 로 연소되기 위해서는 단일 탄소 원자당 두 배의 산소 원자가 필요한 것을 확인할 수 있다. 대부분의 CHNO 기반 폭발물은 음의 산소 평형 값(Oxygen Balance, OB%)을 가지기 때문에 항상 fuel rich한 반응을 보이고 연소 후 연소되지 못한 연료는 대기 중 대기와 반응할 때 다시 연소될 수 있다. 따라서, fuel rich한 금속 첨가 알갱이들은 폭발 후 시간이 지연된 후 폭연 반응으로 타게 된다. 본 연구에서 알루미늄연소는 stoichiometric과정을 가정하였으며 알루미늄의 연소는 2개의 aerobic과정(식 (1.1), (1.2))과 2개의 anaerobic과정(식 (1.3), (1.4))으로 구성된다. 이때 H_2O 및 CO_2 는 알루미늄과의 추가 반응없이 최종 생성물로 고려될 수 있다.

참고문헌 [8,9]에서, 응집된 입자들은 연속체로 가정되었으며 macroscale로 처리되었다. 그러나 이러한 접근은 개별 입자 및 집

단 입자의 상세한 거동을 보여주지 못한다. 또한 이 가정은 입자가 큰(~mm) 특수한 상황에서만 적용할 수 있기 때문에 마이크로미터에서 나노미터까지 입자가 사용되는 최근의 복합화약에는 적합하지 않다. 최근에, Mehta et al. [10]은 원통형(또는 구형) 강체의 단일 입자와 2차원 형상의 충격파 사이의 상호작용을 비교, 분석하였으며 Ling et al. [11]은 충격파에 의해 영향을 받는 입자의 변형을 고려하였다. 충격 압력이 가해짐에 따라서 둥근 입자는 점차 평평한 형태로 변형되었고 vortex shedding이 발생하였다. Boiko et al. [12]은 초고속카메라를 사용하여 충격파와 응집된 입자들 간의 상호작용을 시각화 하였다. 넓게 분포된 입자들이 조밀하게 분포된 입자들보다 대기중으로 더 빠르게 퍼져 나가는 것이 관찰되었다. 참고문헌 [13]은 폭발물내부에서 입자 구름 해석 수치 연구를 진행하였으나 알루미늄의 입자 크기 및 초기 배열이 고정되어 있어 입자의 크기 및 위치는 무작위로 분포되는 시제 복합 화약 분말의 경우와는 차이가 있다.

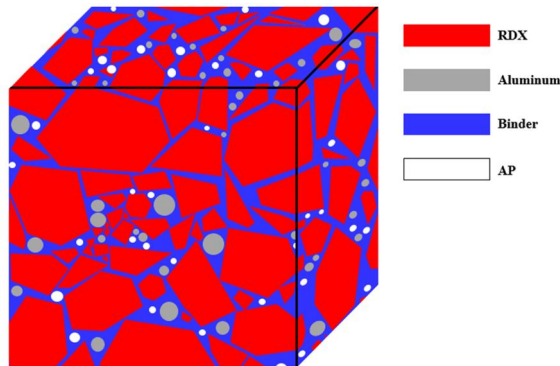


그림 1.1 알루미늄이 다량 함유된 열압 복합화약의 Grain 분석도

그림 1.1은 알루미늄 입자가 함유된 RDX의 개략도를 보여준다. 고에너지 물질에서 이렇게 반응성 금속이 함유된 경우에는 더 긴 연소시간으로 향상된 블라스트 효과(Blast effect)를 보장한다.

본 논문의 제 2장에서는 고에너지 물질의 연소/폭발을 해석하기 위한 열/유체 하이드로다이나믹(Hydrodynamic) 해석 기법에 대해 설명하고 있으며 지배방정식, 상태방정식, 연소 모델과 같은 다양한 해석 요소등에 대해 서술하였다. 또한 메조-마이크로(Meso-micro) 해석 및 다 물질 해석을 위해 도입한 경계면 처리 기법 및 비 반응성 유동(Cold flow)을 통한 코드의 V & V(Validation & Verification, 검증)과정도 함께 서술하였다. 제 3장에서는 고폭화약인 RDX와 금속 첨가물인 알루미늄과 구리입자를 대상으로 한 해석 결과를 서술하였으며 대기중으로 금속입자가 퍼져 나가면서 연소되는 후 연소 현상을 수치적으로 모사하였다. 제 4장에서는 HMX기반 고폭화약의 연속체 해석과 메조스케일 해석간의 차이를 나타내었으며 HMX, 알루미늄, 바인더 3개 물질을 고려한 시뮬레이션 결과를 기술하였다. 제 5장에서는 기존에 2차원으로 진행되었던 해석 방식을 3차원으로 확장하여 해석한 내용이 들어 있다.

제 2 장 하이드로다이나믹 해석

2.1 지배 방정식

2차원에서의 압축성 오일러 방정식의 질량, 운동량, 에너지 보존식은 아래 식 (2), (3), (4)와 같이 각각 서술할 수 있다.

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial r} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial z} = \vec{S}(\vec{U}) \quad (2)$$

$$\vec{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_r \\ \rho u_z \\ \rho E \\ \rho \lambda_{\text{explosive},i} \end{bmatrix} \quad \vec{E} = \begin{bmatrix} \rho u_r \\ \rho u_r^2 + p \\ \rho u_r u_z \\ u_r(\rho E + p) \\ \rho \lambda_{\text{explosive},i} u_r \end{bmatrix} \quad \vec{F} = \begin{bmatrix} \rho u_z \\ \rho u_z u_r \\ \rho u_z^2 + p \\ u_z(\rho E + p) \\ \rho \lambda_{\text{explosive},i} u_z \end{bmatrix}$$

$$\vec{S} = \begin{bmatrix} -\frac{\rho u_r}{r} \\ -\frac{\rho u_r^2}{r} \\ -\frac{\rho u_r u_z}{r} \\ -\frac{u_r(\rho E + p)}{r} + \rho Q_i \dot{w}_i \\ \rho \dot{w}_{\text{explosive},i} \end{bmatrix} \quad (3)$$

여기서 식(3)은 화학반응이 일어나는 기체 상태에서의 고에너지물질의 압축성 방정식을 나타내며 식(4)는 금속 입자의 변형과 화학반응을 해석하기 위한 지배방정식이다. 여기서 r과 z는 원통 좌표계의 좌표 변수이고 ρ 는 밀도이며 u_z 와 u_r 은 각각

축방향과 반경 방향의 속도 성분이다.

$$\vec{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_r \\ \rho u_z \\ \rho E \\ \rho \lambda_{particle,i} \\ \rho S_{rr} \\ \rho S_{zz} \\ \rho S_{rz} \end{bmatrix} \quad \vec{E} = \begin{bmatrix} \rho u_r \\ \rho u_r^2 + p \\ \rho u_r u_z \\ u_r(\rho E + p) \\ \rho \lambda_{particle,i} u_r \\ \rho S_{rr} u_r \\ \rho S_{zz} u_r \\ \rho S_{rz} u_r \end{bmatrix} \quad \vec{F} = \begin{bmatrix} \rho u_z \\ \rho u_z u_r \\ \rho u_z^2 + p \\ u_z(\rho E + p) \\ \rho \lambda_{particle,i} u_z \\ \rho S_{rr} u_z \\ \rho S_{zz} u_z \\ \rho S_{rz} u_z \end{bmatrix}$$

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} -\frac{\rho u_r}{r} \\ -\frac{\rho u_r^2 - S_{rr}}{r} + \frac{\partial S_{rr}}{\partial r} + \frac{\partial S_{rz}}{\partial z} \\ -\frac{\rho u_r u_z - S_{rz}}{r} + \frac{\partial S_{rz}}{\partial r} + \frac{\partial S_{zz}}{\partial z} \\ \frac{(u_r S_{rr} + u_z S_{rz}) - u_r(\rho E + p)}{r} + \frac{\partial(u_r S_{rz} + u_z S_{zz})}{\partial z} + \frac{\partial(u_r S_{rr} + u_z S_{rz})}{\partial r} \\ \rho \dot{w}_{particle,i} \\ 2S_{rz}\Omega_{rz} + S_{rr}\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) + 2G\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} - \Sigma - D_{rr}^p\right) \\ -2S_{rz}\Omega_{rz} + S_{zz}\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) + 2G\left(\frac{\partial u_z}{\partial z} - \Sigma - D_{zz}^p\right) \\ -\Omega_{rz}(S_{zz} - S_{rr}) + S_{rz}\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) + 2G\left(\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}\right) - D_{rz}^p\right) \end{pmatrix} \quad (4)$$

$E = e + (u_z^2 + u_r^2)/2$ 는 단위 질량당 총 에너지, e 는 특정 내부에너지, p 는 압력을 나타낸다. 온도는 $e = C_v T$ 관계에서 도출되며, 여기서 C_v 는 일정한 체적에서의 비열이다. 본 해석에서 C_v 와 C_p 는 $\gamma \equiv c_p/c_v \sim 1$ 관계와 같이 거의 같다고 가정한다. 반응 속도는 고폭화약에 대한 충격-폭발 천이 데이터에서 얻은 경험적인 Ignition & Growth 관계식을 따라 계산할 수 있다. Arrhenius 법칙은 금속입자의 온도 기반 반응을 계산하도록 설정하였다 [14]. 하이브리드 입자 레벨셋 방법(Hybrid particle level-set

method)를 통해서 정밀한 물질 경계간 추적이 가능해지며 [15] 본 지배방정식인 parabolic 편미분 방정식의 시간 및 공간 이산화(discretization)는 3차 Runge-Kutta 방법과 essentially non-oscillatory (ENO) method [16]가 사용되었다.

한편 미 반응 상태에서의 고평화약의 non-spherical stress는 hydrostatic pressure에 비해 매우 작은 값을 가지기 통상적으로 무시된다. 그러나 금속입자는 변형과 관련한 구조적 거동을 면밀히 살펴보아야 하므로 Cauchy 응력 텐서는 다음과 같이 deviatoric 및 hydrostatic 응력으로 구성된다.

$$\sigma_{ij} = S_{ij} - p\delta_{ij} \quad (5)$$

$$I_1 = \sigma_{kk} = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} = -3p \quad (6)$$

$$J_1 = S_{kk} = S_{11} + S_{22} + S_{33} = \sigma_{kk} + p\delta_{kk} = 0 \quad (7)$$

여기서 I_1 와 J_1 는 각각 Cauchy stress tensor와 deviatoric stress의 첫번째 스칼라 불변량이다. Deviatoric stress t텐서(S_{ij}) 및 hydrostatic pressure (p)는 압축과정에서 양의 값으로 간주된다. Deviatoric stress의 변화율은 1차 미분방정식을 따르며 다음과 같이 기술할 수 있다.

$$\dot{S}_{ij} = \dot{S}_{ij,tr} + \dot{S}_{ij,cor} = \Omega_{ik} S_{kj} - S_{ik} \Omega_{kj} + 2G(\bar{D}_{ij} - D_{ij}^p) \quad (8)$$

$$\dot{S}_{ij,tr} = \Omega_{ik} S_{kj} - S_{ik} \Omega_{kj} + 2G\bar{D}_{ij} \quad (9)$$

$$\dot{S}_{ij,cor} = -H : D_{ij}^p = -2GAN_{ij,tr} \quad (10)$$

각각의 연산자들은 아래와 같이 정의 가능하다.

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \bar{D}_{ij} = D_{ij} - \frac{1}{3} D_{kk} \delta_{ij}, D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (11)$$

이때 D_{ij} 와 \bar{D}_{ij} 는 각각 strain-rate 텐서와 deviatoric strain-rate 텐서이다. Strain 텐서의 각 성분은 Johnson-cook 유동-응력 모델의 형태로 shear rate에 따라서 항복응력을 도출하는데 사용된다. Johnson-cook 모델은 소성변형에 필요한 유동 응력 또는 최소 외력을 얻기 위해 적용되었다. 이 모델은 equivalent plastic strain(EPS), strain rate, melting temperature [17]를 사용하며 식 (13)에 기술하였다.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p \quad (12)$$

$$\sigma_Y(\boldsymbol{\varepsilon}_p, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p, T) = \left[A_0 + B_0(\boldsymbol{\varepsilon}_p)^n \right] \left[1 + C_0 \ln \left(\frac{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{p0}} \right) \right] \left[1 - \left(\frac{T - T_0}{T_m - T_0} \right)^m \right] \quad (13)$$

여기서 $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_e$, $\boldsymbol{\varepsilon}_p$ 은 각각 strain tensor, elastic strain tensor, plastic strain tensor이며 σ_Y , $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p$, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{p0}$ 은 각각 항복응력, effective plastic strain rate, effective plastic strain rate of quasi-static state이다. 본 논문에서 사용된 금속 첨가물인 알루미늄과 구리의 기계적, 열적 물성치와 Johnson-cook 모델의 계수들은 다음 표에 정리되었다 [18].

표 2.1 금속 입자의 기계적/열적 물성치 및 Johnson-cook 계수

Parameter		Aluminum	Copper
Mechanical constant	Initial density (kg m ⁻³)	2700	8960
	Young's modulus (GPa)	69	117
	Shear modulus (GPa)	27	49
	Poisson's ratio	0.33	0.35
Thermal constant	Heat capacity (J kg ⁻¹ K)	900	386
	Room temperature (K)	300	300
	Melt temperature (K)	916	1356
Johnson-Cook model	A ₀ (GPa)	0.148	0.090
	B ₀ (GPa)	0.346	0.292
	C ₀	0.001	0.025
	m	0.895	1.090
	n	0.183	0.310
Strength model	Initial yield stress (GPa)	0.148	0.090

2.2 상태 방정식

고에너지 물질의 연소로 인한 압력을 정확하게 계산하기 위해 열유체 동적 특성과 관련된 식 (14)와 같이 JWL(Jones-Wilkins-Lee) 상태방정식 (Equation of state)을 사용하였다. 또한 미 반응 물질의 충격에 의한 압축 효과를 계산하기 위해 Mie-Grüneisen 상태 방정식이 식 (15)와 같이 사용되었다.

$$p_{\text{reactive solid, reacted}} = Ae^{-R_1(\rho_0/\rho)} + Be^{-R_2(\rho_0/\rho)} + \frac{C}{(\rho_0/\rho)^{\omega+1}} \quad (14)$$

$$p_{\text{reactive solid, unreacted}} = \Gamma_0 e_0 + \begin{cases} \rho_0 c_0^2 \mu \left[1 + \left(1 - \frac{\Gamma_0}{2} \right) \mu \right] / [1 - (s_0 - 1)\mu]^2 & \text{if } \mu > 0 \\ c_0^2 \rho_0 \mu & \text{if } \mu < 0 \end{cases} \quad (15)$$

여기에서 $\mu = \rho / \rho_0 - 1$ 이며 A, B, C, R_1 , R_2 및 w는 고폭화약에 따른 고유의 계수이다. 또한 c_0 는 음속, s_0 는 Hugoniot 기울기, Γ_0 는 Mie-Grüneisen gamma이다. 반응 중 질량분율에 따른 압력계산을 위해 식 (14)와 (15)는 다음과 같이 조합되어 압력계산에 사용되었다.

$$p = (1 - \lambda)p_{unreacted} + \lambda p_{reacted} \quad (16)$$

표 2.2와 표 2.3는 본 연구에 사용된 모든 물질에 대해 상태방정식 계수를 정리해 놓은 표이다.

표 2.2 상태방정식 계수 정리 - 알루미늄, 구리, RDX, 물

	Parameter	Aluminum	Copper	RDX	Water
Material property	ρ_0 (kg m ⁻³)	2700	8960	1640	1000
	c_v (J kg ⁻¹ K)	900	386	1650	4200
Mie-Grüneisen for metals	c_0 (m s ⁻¹)	5452	3933		
	s_0	1.26	1.50	-	-
	Γ_0	2.14	1.99		
Reactant JWL for RDX	A (GPa)			77810	
	B (GPa)			-50.31	
	R_1	-	-	11.3	-
	R_2			1.13	
	ω			0.89	
Product JWL for metals and RDX	A (GPa)	652.52	385.15	409.44	
	B (GPa)	4.78	3.62	7.47	
	C (GPa)	1.17	0.75	1.41	
	R_1	5.42	4.26	3.61	
	R_2	1.00	1.05	1.04	
	ω	0.09	0.21	0.37	
Tait for water	K_0 (GPa)	-	-	-	2.15
	n				7.15

표 2.3 상태방정식 계수 정리 - HMX95, HMX, ESTANE

	Parameter	HMX95	Pure HMX	Binder (Estane)
Material property	ρ_0 (kg m ⁻³)	1,820	1,910	1,190
	c_v (J kg ⁻¹ K)	1,120	1,100	1,480
Mie-Grüneisen for metals	c_0 (m s ⁻¹)	2,467	3,070	2,090
	s_0	1.89	1.79	1.79
	Γ_0	1.09	0.7	1.0
Product JWL for metals and HMX	A (GPa)	458	333.88	-
	B (GPa)	8.3	5.92	-
	C (GPa)	1.3	1.35	-
	R_1	3.721	3.63	-
	R_2	1.068	1.02	-
	ω	0.359	0.37	-

한편 각각 반응 전 상태와 반응 후 상태의 음속은 다음의 식들을 이용하여 구할 수 있으며 각각의 상태방정식과 매우 밀접한 관계를 가지고 있다.

$$c_{reactive\ solid, unreacted}^2 = \rho_0 \Gamma_0 \frac{p - p_0}{\rho^2} + \begin{cases} \frac{\rho_0^2 c_0^2 [\rho + s_0(\rho - \rho_0)]}{[\rho - s_0(\rho - \rho_0)]^3} - \Gamma_0 \frac{\rho_0^2 c_0^2 (\rho - \rho_0)}{[\rho - s_0(\rho - \rho_0)]^3} & \text{if } \rho \geq \rho_0 \\ c_0^2 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (17)$$

$$c_{reactive\ solid, reacted}^2 = \frac{\rho_0}{\rho^2} \left[AR_1 e^{-R_1 \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)} + BR_2 e^{-R_2 \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)} - C \frac{1 + \omega}{\left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{2 + \omega}} \right] \quad (18)$$

이때 반응 중에 있는 경우, 음속은 생성물 질량분율을 이용하여

다음과 같이 계산할 수 있으며 이는 충격과 압축의 오일러 방정식의 Invariant를 계산하는데 사용된다.

$$c^2 = (1 - \lambda)c^2_{unreacted} + \lambda c^2_{reacted} \quad (19)$$

2.3 연소 반응 모델

2.3.1 압력기반 폭굉 (Detonation) 화학반응

2 차원 비정상 상태에서의 생성물에 대한 고에너지 물질의 화학 반응 식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \rho \lambda_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \lambda_i u_r}{\partial r} + \frac{\partial \rho \lambda_i u_z}{\partial z} = \rho \dot{w}_i \quad (20)$$

이때 λ_i 는 생성물의 질량분율을 의미하며 \dot{w}_i 은 반응율을 나타낸다. 압력기반 간단화된 Ignition & Growth 모델은 다음과 같으며 폭굉현상을 모델링하는데 사용된다.

$$\dot{w}_{HMX,i} = I(1 - \lambda_i)\mu^a + G(1 - \lambda_i)P^b \quad (21)$$

여기서 I, G, a, b 는 해석하고자 하는 고폭화약의 반응 상수들이며 p 는 압력, $\mu = \rho / \rho_0 - 1$ 로 충격과 압축정도를 의미한다. 이때 본 연구에서 사용된 RDX, HMX95, HMX 의 상수들을 정리하면 아래 표와 같다.

표 2.4 폭굉모델에 대한 파라미터

Parameter	Pure HMX	HMX95	RDX
$I (\mu\text{s}^{-1})$	11.57	12.1	5.8
a	4.0	4.0	4.0
$G (\mu\text{s}^{-1}\text{Mbar}^{-b})$	754	530.8	240
b	1.995	1.65	1.1

2.3.2 온도기반 폭연(Deflagration) 화학반응

폭발한 폭발물의 고온 생성물 기체로 인해 고온 환경에 노출된 입자의 점화는 입자에 추가된 열량과 활성화 에너지 임계 값에 따라 달라진다. RDX 와 같은 폭약의 폭발이 이미 지나간 고온 가스 환경 내에서, 금속 입자의 대류 가열은 금속 점화의 활성화를 향해 입자의 엔탈피를 빠르게 증가시킨다. 그러나 입자가 너무 빠르게 팽창하면 에너지가 소실되고 금속 입자 폭연이 시작되기 위한 임계 온도 도달전에 열 손실이 발생하게 된다. 비정상적으로 팽창하는 동안 소량의 입자만 성공적으로 점화되면 인접한 입자도 연쇄적으로 반응하게 된다. 따라서 국소 불균일한 표면 반응은 입자들 사이의 동조반응을 유발할 수 있고, 다수 폭발의 연속으로 확산 화염으로 발전한다. 이것이 잘 정의된 폭발 및 폭연 Kinetics 를 이용하여 입자와 대기 사이의 열전달 교환을 이해해야 하는 이유이다. 한편 금속 입자들은 온도기반에 아레니우스 식(Arrhenius law)를 따라 폭연반응이 일어나게 된다.

$$k(T) = Z \exp(-E_a / RT) \quad (22)$$

$$A_i \rightarrow B_i : \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} = r_i = Z_i \exp(-E_{a_i} / RT)(1 - \lambda_i) \quad (23)$$

반응 파라미터, 즉 활성화 에너지 및 pre-expansion factor 는 시차 주사 열량 측정기(DSC)를 이용하여 구할 수 있다. 시료 샘플을 다양한 속도로 가열하고, 각 속도에 대해 피크 온도를 기록한다. 식 (23)에 로그를 취해 다시 쓰면 아래와 같다.

$$\ln \left[\frac{d\lambda_i}{dt} \right] = \ln Z_i - (E_{a_i} / RT) + \ln [1 - \lambda_i] \quad (24)$$

두개의 기본 파라미터($d\lambda/dt$, λ)는 DSC 발열 및 다중 선형 회귀를 이용하여 구할 수 있다. 활성화 에너지와 pre-expansion factor 는 각각 그림 2.1 의 기울기와 절편에서 구할 수 있다. 이러한 파라미터는 표 2.5 에 요약되어 있으며, Arrhenius 반응 속도는 그림 2.1 의 온도에 따라 도표로 표시되어 있다. [19, 20]

표 2.5 알루미늄과 구리의 Arrhenius 파라미터

	Parameter	Aluminum	Copper
Arrhenius law	Activation energy (kJ mol ⁻¹)	430-440	100-150
	Pre-exponential factor (s ⁻¹)	10 ²⁰ -10 ¹⁸	6.7 × 10 ⁶ - 4.0 × 10 ⁷
	Gas constant (kJ mol ⁻¹ K)		8.314 × 10 ⁻³

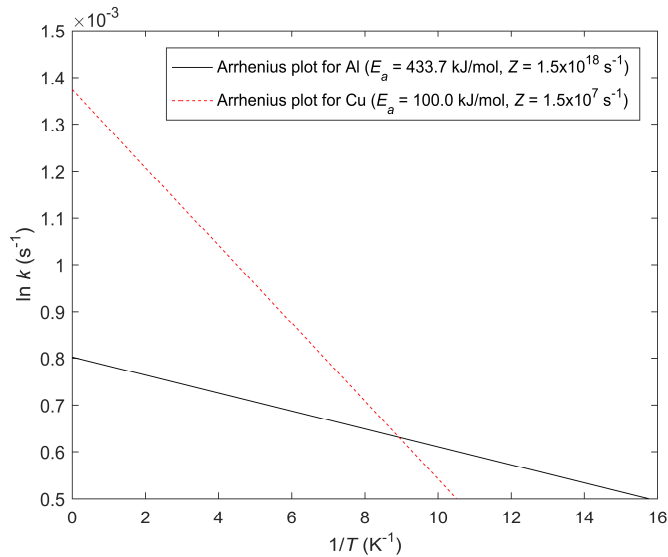


그림 2.1 알루미늄과 구리의 온도 역수에 따른 Arrhenius rate 상수, $\ln(k)$ 값 분포

2.4 멀티스케일/다물질해석

2.4.1 레벨셋(Level set) 기반 다물질 경계면 처리 기법

HMX 와 알루미늄의 반응이 일어나는 동안 경계면의 변화를 처리하기 위해 레벨 셋 개념이 사용되었으며 무작위적으로 생성된 입자 및 Grain 경계를 정확하게 추적하게 된다. 레벨 셋 함수 ϕ 는 모든 점 또는 계산 노드에서 물질 경계면까지 가장 가까운 거리 값을 가지며 그 값은 식 (25)를 따라 시간, 및 공간상에서 변화한다. 또한, $\phi=0$ 은 물질 경계면, $\phi>0$ 은 물질 바깥쪽, $\phi<0$ 은 재료의 내부를 나타낸다.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_r \frac{\partial \phi}{\partial r} + u_z \frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \quad (25)$$

이 방정식은 공간에서 4 차 차분방법과 3 차 Runge-Kutta 방법을 사용하여 적분된다 [21]. 인터페이스 레벨 셋 방법은 계산하는 동안 물질 경계면의 급격한 변화로 인해 인터페이스가 바람직하지 않게 왜곡될 수 있다. Eulerian 고정 메쉬 방법의 이러한 잘 알려진 약점을 해결하기 위해 정상 상태에 도달할 때까지 다음 방정식을 풀어 주기적으로 레벨 셋 함수를 초기화 시켜준다.

$$\phi_t + S(\phi)(|\nabla \phi| - 1) = 0 \quad (25)$$

$$S = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + (1 - |\nabla \phi|)^2 d^2}} \quad (26)$$

여기서 d 는 도메인의 그리드 크기이다.

2.4.2 메조스케일 (Mesoscale) 시뮬레이션을 위한 초기조건

메조스케일 시뮬레이션을 위해 입자 및 Grain 을 임의적으로 생성하는 방법을 본 연구에서 개발하였다. 원형 및 다각형 모양이 고려되었으며 복합화약 내부 형태를 적절하게 수치해석 도메인으로 구현하였다. 원형 입자는 중심점과 반지름을 정의하여 생성할 수 있으며 다각형은 그림 2.2 에서 볼 수 있는 것과 같이 각의 수, 점의 위치, 중심점, 중심점과 점까지의 거리, 편각 등을 랜덤함수를 이용해서 생성한 후 이를 레벨셋함수로 설정하여 주었다.

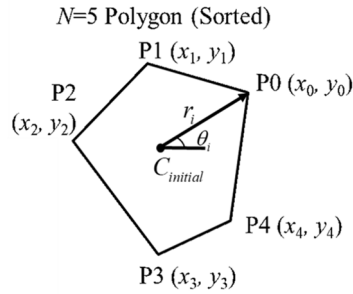
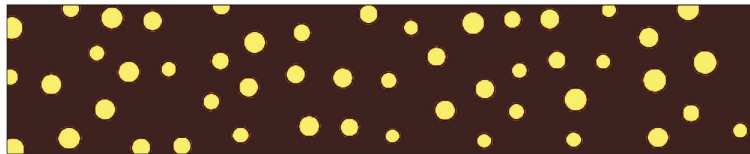


그림 2.2 랜덤하게 생성된 다각형 예시 ($N=5$)



(a) Aluminized RDX



(b) Copperized RDX

그림 2.3 RDX 배경 속 랜덤하게 설정된 다중 입자 분포 초기
 도메인: (a) 원형 모양의 알루미늄 입자 (b) 다각형의 구리 입자

그림 2.3 은 RXD 를 배경으로 하여 입자를 랜덤하게 생성한 초기 도메인 그림을 보여준다.

한편 제 4 장에서 기술한 HMX 와 같은 고폭화약의 Granule 을 모델링 하기 위해 위의 입자와 비슷한 방법으로 랜덤한 모양의 큰 다각형을 생성할 수 있다. 이때 HMX Granule 과 알루미늄 입자의 SEM 이미지 및 지름 분포는 아래 그림과 같다.

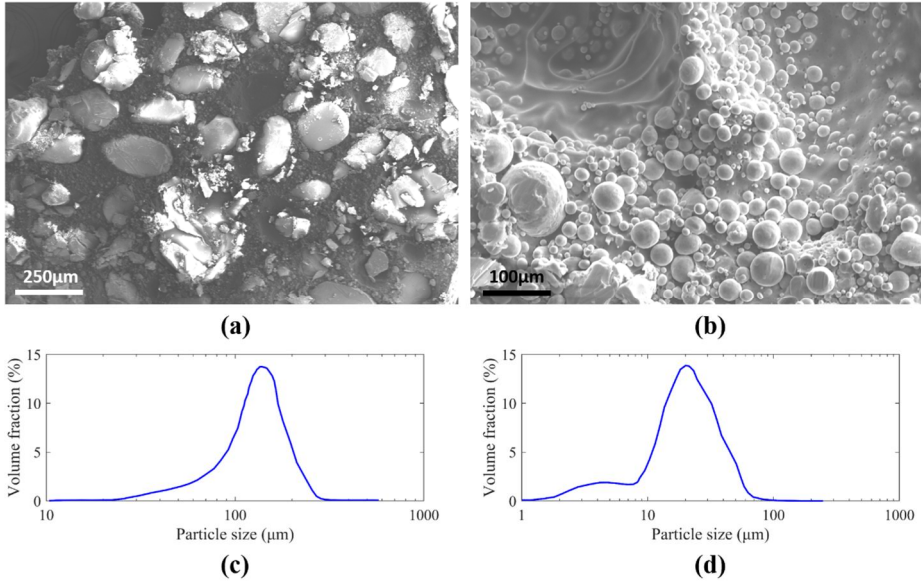


그림 2.4 (a) HMX Granule (b) 밀집된 알루미늄 파우더의 SEM 이미지. (c) HMX Granule (d) 알루미늄 파우더의 입자 크기 분포

그림 2.4 는 HMX 와 알루미늄 과립의 모양과 크기 분포를 명확하게 보여준다. 다각형은 볼록한 형상만을 가지도록 설정되어 있고 크기는 HMX 는 $120\ \mu\text{m}$, 알루미늄은 약 $40\ \mu\text{m}$ 의 중심직경을 가지며 가우스 분포를 확인할 수 있다. 따라서 다각형의 HMX Granule, 원형 알루미늄 입자 및 Estane 결합체 배경이 존재하는 제 4 장에서의 시뮬레이션에서는 3 개의 물질 경계면이 고려되었다. 시뮬레이션이 진행되는 동안 3 개의 물질 경계면을 효율적이고 오류 없이 안정적으로 관리하기 위해 그림 2.5 과 같은 레벨 셋 병합 및 플립 방법이 적용되었다. 그림 2.5는 물질 1 및 물질 2를 기반으로 물질 3 을 정의하는 알고리즘에 대해 설명한다. 이 절차에는 물질 1

및 물질 2 의 레벨셋을 합치고 부호를 변경하여 물질 3 에 해당하는 새 레벨 셋 값을 부여하는 작업을 포함한다. 다른 두 물질에 의존하여 물질 3 을 렌더링 함으로써, 각각의 시뮬레이션 경계면 추적 단계에서 물질을 3 개가 아닌 2 개에 대해서만 풀면 되므로 수치해석적 비용을 아낄 수 있다. 또한 레벨 셋 재 초기화로 인한 오류를 크게 줄였다.

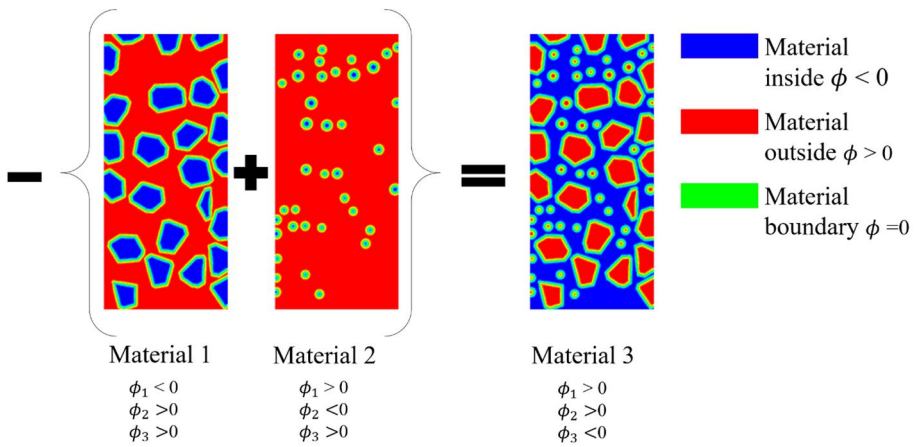


그림 2.5 물질 경계면에서의 레벨셋 병합과 뒤집기 방법

한편 시뮬레이션이 진행됨에 따라 물질 경계인 레벨 셋은 변하게 된다. 이 과정에서 레벨 셋의 변화는 유체 속도만 연관이 되어 있고 질량 보존과는 관련이 없다. 따라서, 금속 입자의 질량이 계산의 시작부터 끝까지 일정하게 유지되는지 확인하는 것이 필수적이다. 이상적인 경우, 총 입자의 질량은 시뮬레이션이 진행됨에 따라 변하지 않고 일정하게 유지된다. 그러나 시간이 경과한 레벨 셋 경계가 불연속 도메인에서 지속적으로 재구성되기 때문에 일부 질량 손실이 예상된다. 그림 2.6 은 시뮬레이션 중 알루미늄 및

구리 입자의 질량 변화에 대한 시간 이력을 보여준다. 시뮬레이션이 진행되어도 원래 질량의 약 95%를 유지하는 것을 확인할 수 있으며 레벨 셋 재 정렬 기능의 사용이 타당한 것이 확인되었다.

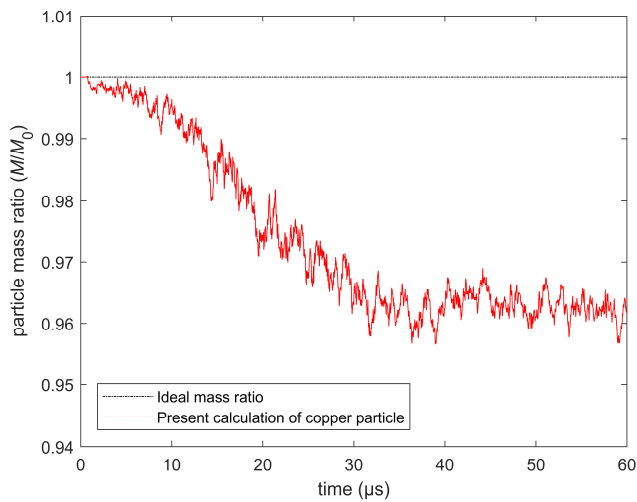
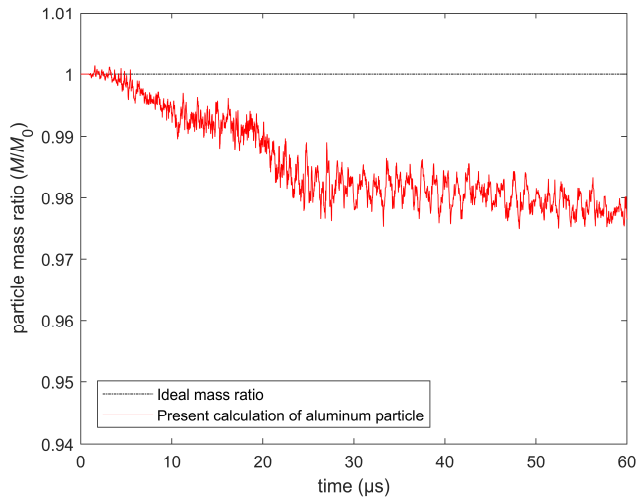


그림 2.6 알루미늄(상), 구리(하)의 질량비율 변화 기록 그래프

2.5 하이드로다이나믹 코드 검증

2.5.1 Rayleigh bubble collapse

본 논문 전체에서 사용한 고풍화약 수치해석 코드에 대해 비 반응성 유동을 사용하여 검증을 진행하였다. 고풍화약은 반응성 유동으로 그 복잡성 때문에 V&V (Validation and Verification)진행이 어렵다. 따라서 비 반응성 유동 특히 물과 공기를 사용하여 코드에 대한 검증을 진행하였다. 먼저 경계면 알고리즘을 검증하기 위해 bubble collapse 가 고려되었다 [22]. 크기 $40\mu\text{m}$ 의 버블에 36MPa 의 충격과 충격이 가해졌다. 시간에 따른 버블 붕괴의 모양을 비교하여 계산의 유효성을 확인하였다.

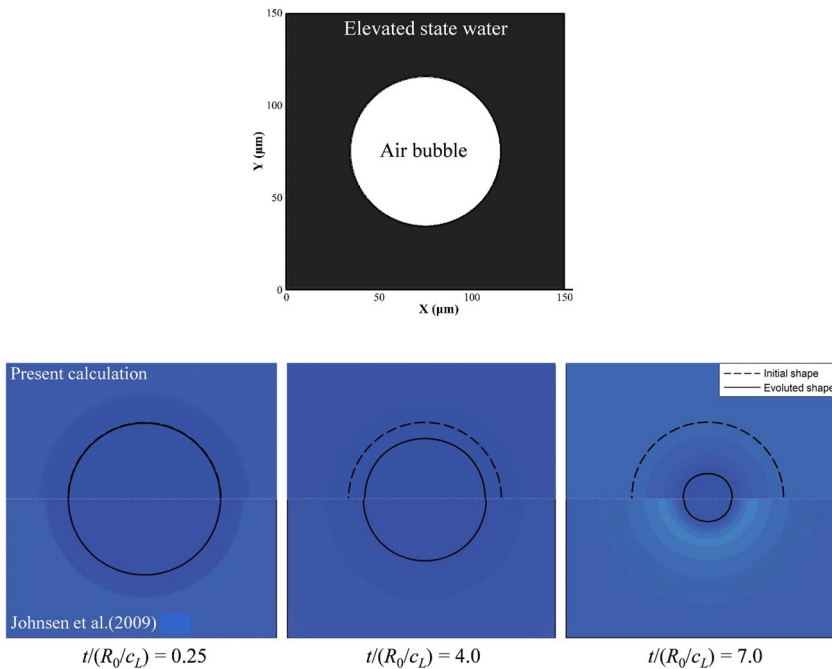


그림 2.7 (상) Rayleigh 버블 붕괴 초기 조건 (하) 압력 및 버블 모양의 시간에 따른 참고 문헌 [22]계산 결과와 본 연구 결과 비교

그림 2.7은 500개의 격자로 덮인 반경 40 μm 에서 Rayleigh 버블 붕괴의 시간 변화를 보여준다. 36MPa의 높은 수압이 사용되었고, 붕괴가 일어날 때까지 부피가 거의 기하 급수적으로 감소되었다. 압력은 붕괴의 첫 튀는 지점에서 최대치에 도달했으며 주변에서 균일한 압력이 작용했으므로 버블의 변위는 처음과 같다.

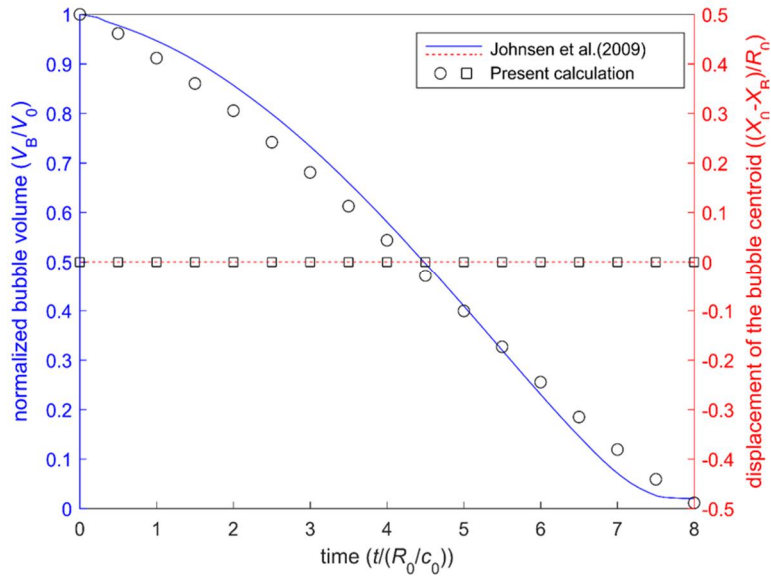


그림 2.8 Rayleigh 버블 붕괴 시 시간에 따른 부피 변화와 버블 중심의 위치 변화

그림 2.8은 기포 붕괴의 시간 이력과 기포 중심의 초기 위치에서 기포 중심의 변위를 보여준다. 기포 체적은 각 계산 셀의 공기 체적을 합하여 계산된다. 기포 형태 및 붕괴의 변화에 대한 현재의 시뮬레이션은 참조 데이터와 잘 일치한다.

2.5.2 충격파 전달 bubble collapse

충격으로 인한 붕괴의 계산 영역은 그림 2.9 에 표시되어 있다. 그림 2.10 은 외부 충격과 36MPa 가 도메인의 한쪽 끝단에 적용될 때 단일 기포에 대한 형상 변화를 보여준다.

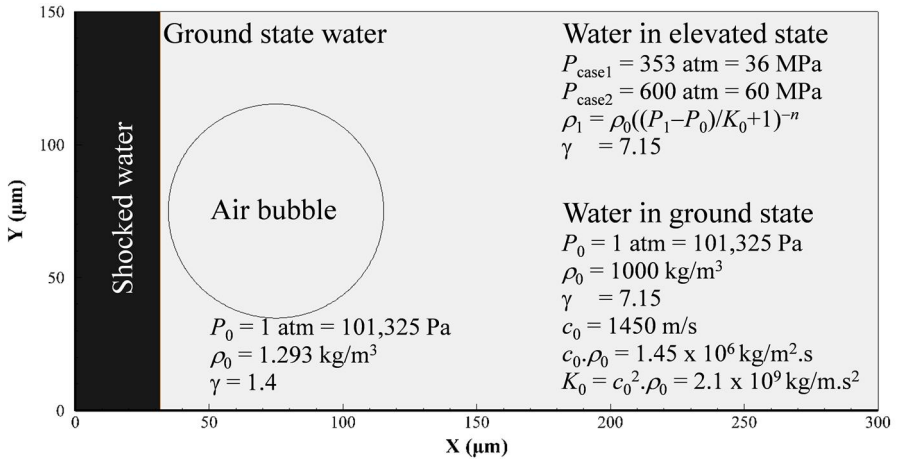


그림 2.9 물속에서의 충격파 전달 공기 버블 붕괴 초기 조건

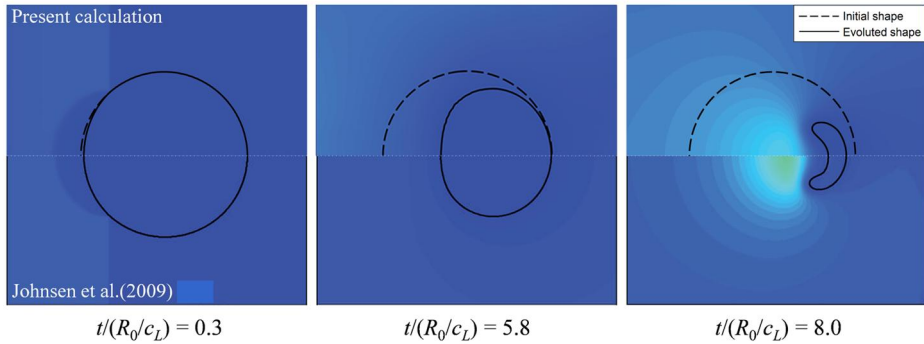


그림 2.10 충격파 전달 기포 붕괴의 시간 진행에 따른 결과 비교
 컨투어 이미지 [22]

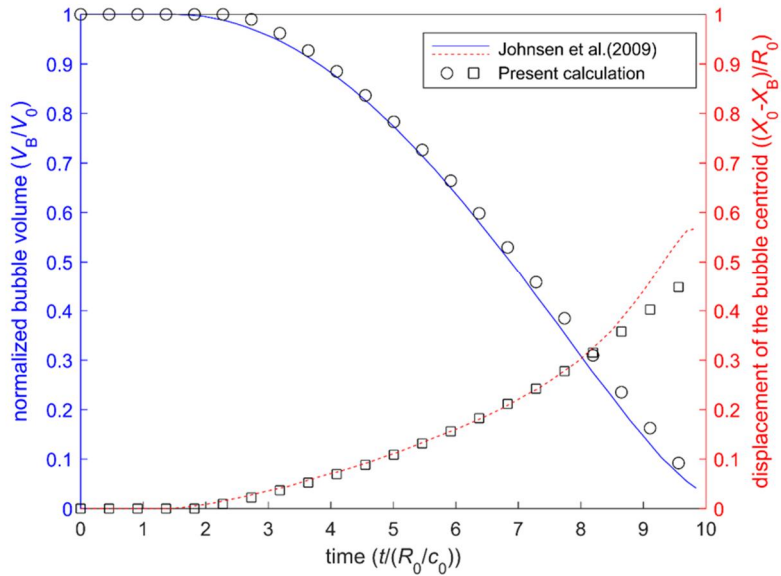


그림 2.11 충격파 전달 버블 붕괴 시 시간에 따른 부피 변화와 버블 중심의 위치 변화

외부로부터 충격파가 가해지면 기포가 변형되기 시작한다. 충격파가 기포와 상호작용하는 동안 충격파는 부분적으로 팽창파로 반사되어 Rayleigh 붕괴 경우와 유사하게 약한 충격으로 기포로 전달된다. 기포가 붕괴되기 시작하면 끝이 평평해지고 기포의 중심이 충격파가 진행되는 방향으로 움직이게 된다. 마지막으로, 붕괴의 후반에는, 버블 형태는 비구형이 된다. 단일 외부 충격파에 영향을 받는 단일 기포의 형태 변형은 Johnsen et al. [22]의 결과와 비교할 수 있다. 비교 결과는 그림 2.10, 11에서 볼 수 있는 바와 같이 잘 일치하며, 붕괴되는 동안 기포의 형상 변화는 매우 흥미롭다. 기포의 중심 변위의 경우, 붕괴의 마지막 단계에서 고도의 비선형 형태로 인한 약간의 차이가 관찰되지만, 기포 부피, 모양 및 위치의 변화가 매우 정확하게 포착된다.

또한 인터페이스 알고리즘을 정확히 검증하기 위하여 더 높은 충격압력으로 수행된 시뮬레이션과 다른 참고문헌과의 비교가 진행되었다. Turangan et al. [23]은 60MPa의 충격파가 가해졌을 때 기포의 붕괴를 관찰 하였다. 시뮬레이션과의 비교는 그림 2.12에 나와있다. 충격 접촉을 직접 받는 기포의 왼쪽이 평평해지고 오목해지는 것을 알 수 있다. 기포는 점차적으로 붕괴되고 부피는 오목한 형태로 감소하게 된다.

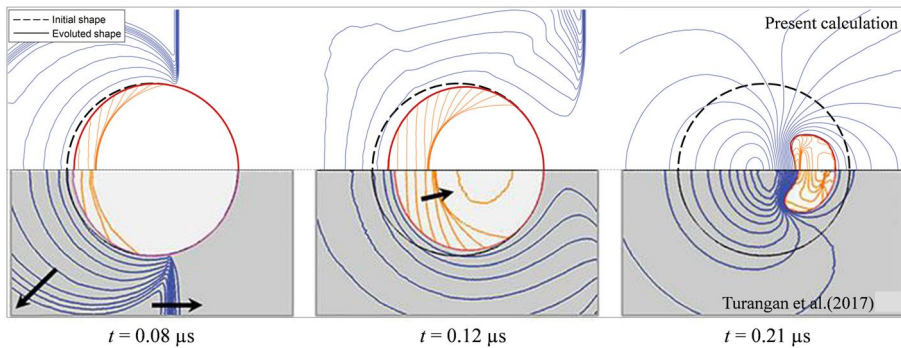


그림 2.12 충격파 전달 버블 붕괴에 대한 현 계산과 참고문헌[23] 모양 및 압력 비교 컨투어

제 3 장 열압탄 메조스케일 반응해석

3.1 고에너지물질 내부에서의 알루미늄 입자 연소

물질 경계면 처리를 위한 기본 모델을 검증하는 이전의 계산에서, 액체의 기포는 연속체에 매립된 알루미늄 또는 구리와 같은 Grain의 전형적인 구조적 특성을 포함하지 않았다. 여러 금속 입자의 무작위 분포를 고려하기 전에 강한 충격파를 받는 단일 입자를 고려하였다. 이러한 반응 유동에서의 간단한 고려 사항은 Ripley et al. [24] 및 Lieberthal et al. [25] 에서도 비슷하게 고려되었다. 그림 3.1은 충격파와 단일 입자 사이의 상호작용을 계산하기 위한 초기 형상을 보여준다.

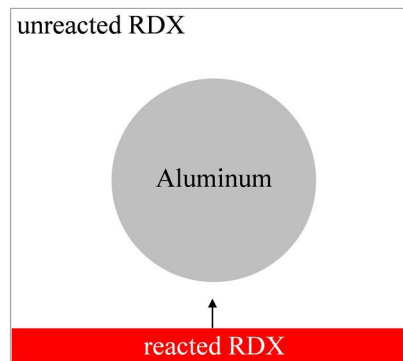


그림 3.1 반응 RDX폭약에서의 단일 알루미늄 입자와의 상호작용 계산을 위한 초기 조건

그림 3.2는 1행에서 Shadowgraph, 2행에서 압력, 3행에서 알루미늄 생성물의 질량분율, 4행에서는 종방향 속도를 보여주는 시간에 따른 컨투어 이미지이다. 초기 충격파는 위쪽으로 전파된다. 대략

0.25 μs 에서 알루미늄 입자의 바닥과 충격파는 충돌하기 시작한다. 0.5 μs ~0.75 μs 의 shadowgraph 및 압력 컨투어는 알루미늄을 통과하는 투과파가 알루미늄 바깥의 RDX부분의 충격파 보다 더 빠르다는 것을 보여준다. RDX와 알루미늄의 밀도 차이는 약 1.68배이다. 알루미늄의 음속은 5500m/s이며, RDX의 음속은 훨씬 낮은 값을 가진다. 주 충격파의 전파 속도는 약 7800m/s이다. 따라서 알루미늄 내부에서 진행되는 속도는 이미 음속보다 더 빠르게 충격파가 전파되는 것을 확인할 수 있다. 여기서 팽창파는 RDX 및 알루미늄의 음속에 따라 반사되기 때문에, 팽창파는 각 매질에서 상이한 속도로 전파되는 것을 볼 수 있다. 또 다른 흥미로운 특징은 알루미늄 입자의 모양 변화이다. 충격파로 인해 입자가 평평해지고 측면 끝이 약간 돌출되어 세로 속도 윤곽에서 높은 값이 나오는 것을 확인할 수 있다. 형태 변화는 참고문헌에 보고된 것과 일치한다. [24,25]

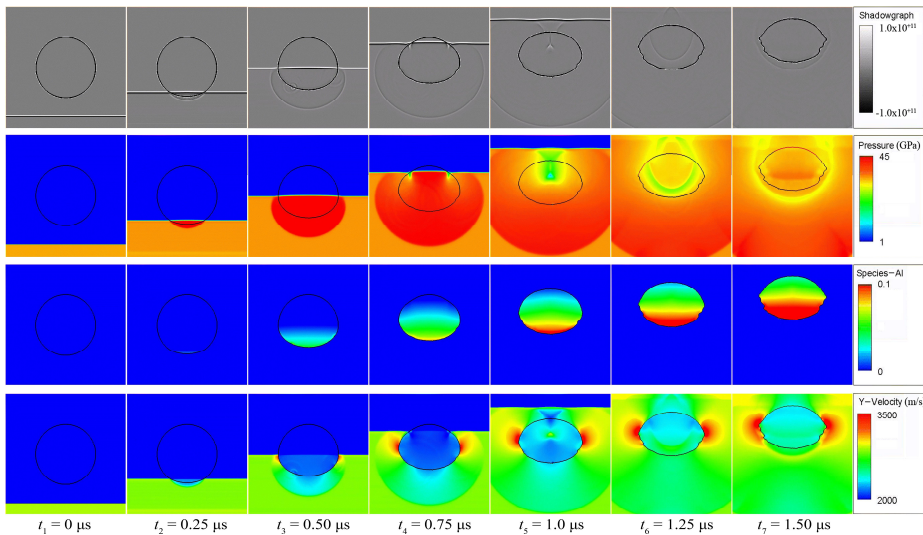


그림 3.2 고퍽화약과 단일 알루미늄 입자의 상호작용 결과

3.2 무한대 반지름을 가지는 반응막대의 연소해석

반응 막대 시험은 여러 폭발 특성 값을 구하기 위해 원통 형식으로 만든 간단한 폭약을 연소시키는 시험이다. 반응막대 시험을 통해 폭굉 속도, 폭압과 같은 폭발 특성을 구할 수 있다.

폭약내의 입자는 구형 충격 압축으로 인해 탄성 소성 변형을 거친다. 일단 알루미늄 입자의 항복 강도를 초과하는 응력이 가해지면, 입자는 굽힘 및 변형을 경험한다.

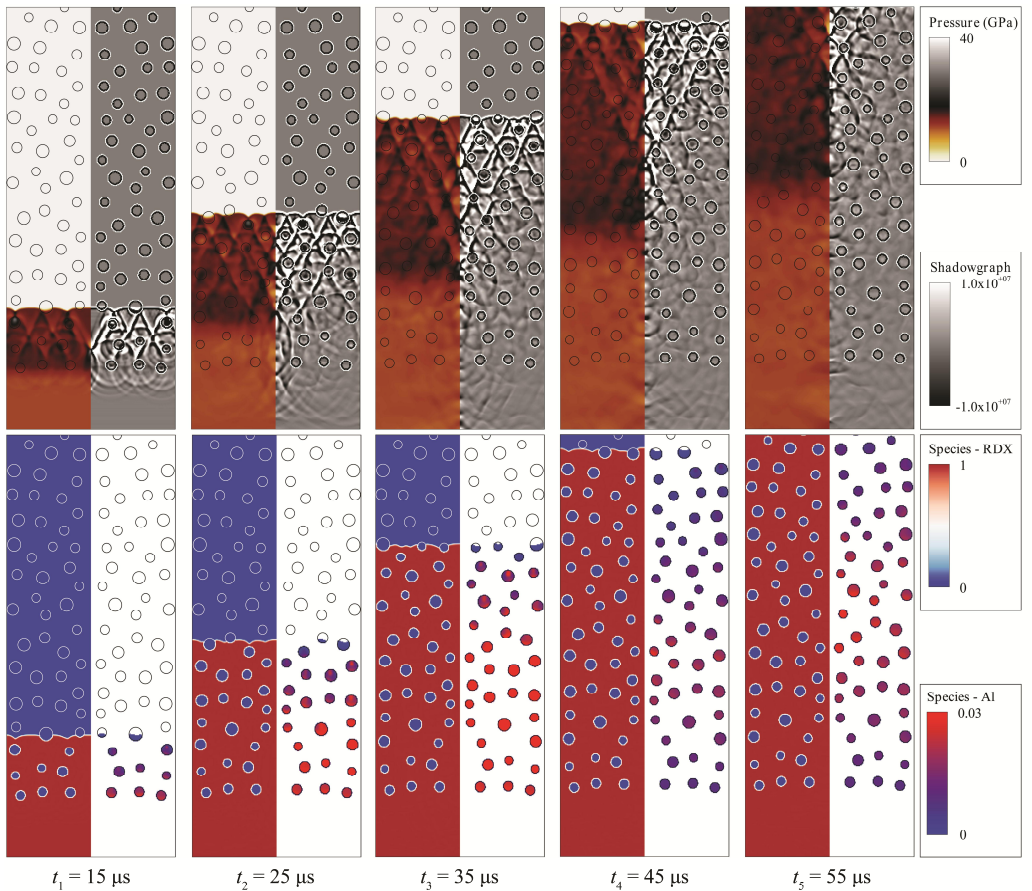


그림 3.3 알루미늄이 다량 포함된 RDX 반응 막대의 충격파 전달 폭굉 수치해석 결과

그림 3.3은 RDX와 임의로 분포된 알루미늄 입자사이의 상호작용에 대한 해석을 보여준다. 각각의 이미지는 왼쪽위: 압력, 오른쪽위: shadowgraph, 왼쪽아래: RDX 생성물 질량분율, 오른쪽아래: 알루미늄 생성물 질량분율을 나타내며 아랫면에서 충격파를 가했을 때 충격파가 전파되면서 반응하는 것을 보여준다. 각 입자는 RDX의 폭발 전파에 방해요소로 작용하고 반사된 파는 역방향으로 생성된다. 반사는 원을 따라서 일어나게 되며 서로 겹쳐진다. 물에 기포가 붕괴되는 것과 달리, 금속 과립은 강한 충격파가 유입되어 즉시 붕괴되지는 않는다. 대신, 이들은 심한 변형을 일으켜 일종의 인장파를 생성한다. 이 파동은 압축 응력의 반사에 의해 형성되는 반면 RDX의 폭발파는 고밀도 알루미늄 입자의 후면 경계면에 영향을 미친다. 이 파동은 인접한 알루미늄 입자와 충돌하여 반사파를 형성한다. 시간이 지남에 따라, 장력파는 매우 다양하고 복잡한 패턴으로 발전하여 유동장에서 겹쳐지고 합쳐지게 된다. 각 알루미늄 입자는 충격파의 압력에 의해 형태가 변형되기 때문에 입자 속도와 함께 진행한다. 입자 속도는 약 300-700m/s이다. 결과적으로 각 입자의 속도와 모양에 약간의 차이가 있다. 각 입자에 작용하는 충격파의 압력과 속도는 약간 다를 수 있으므로 기하학적 배열, 모양 변형 및 입자 속도는 부분적으로 다를 수 있다. 이러한 현실적인 확률 분포를 고려하면 모든 입자의 거동과 유동장과의 상호작용을 직접 분석할 수 있으며, 이는 매우 복잡한 형태로 발전하므로 의미 있는 결과를 제공한다.

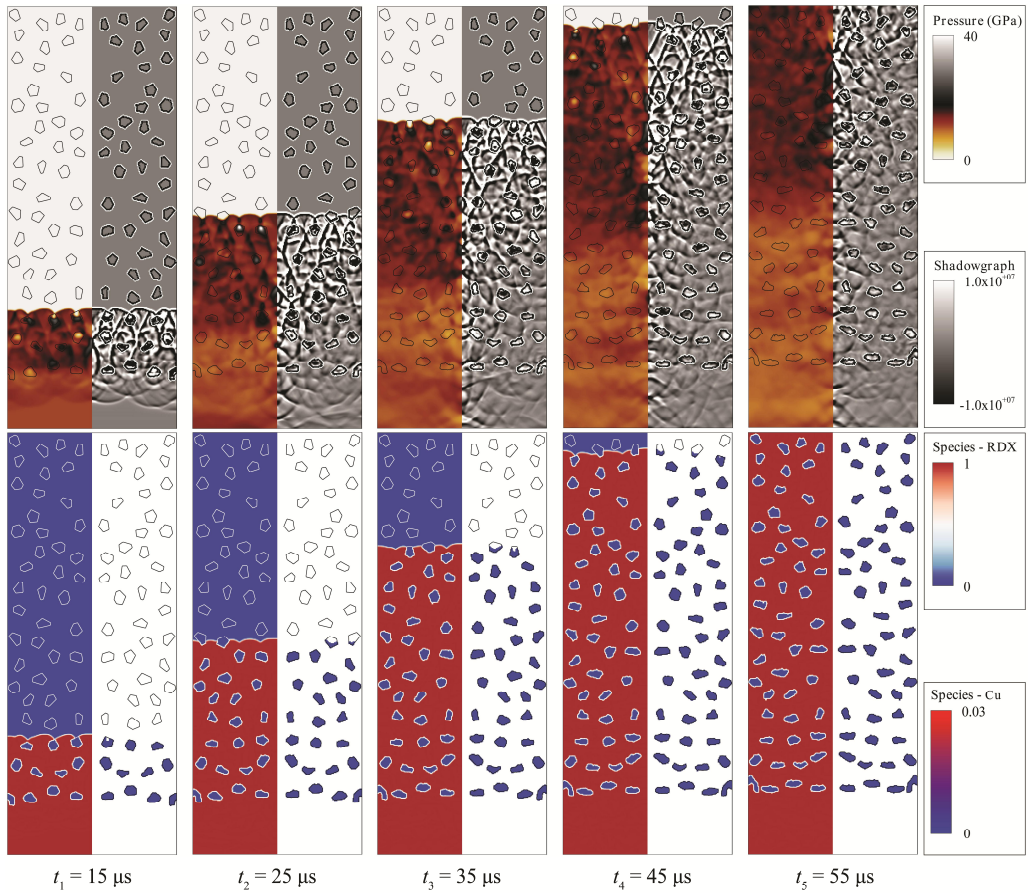


그림 3.4 구리가 다량 포함된 RDX 반응 막대의 충격파 전달 폭굉 수치해석 결과

구리가 다량 함유된 RDX의 경우에는 그림 3.4에 도시된 바와 같이, 알루미늄 입자와 달리 구리입자는 불규칙한 다각형 형상을 가지게 된다. 이러한 기하학적 인자는 길이 방향으로 전파되는 폭발파의 굴절 및 회절에 불규칙성을 야기한다. 원형 입자를 통과하는 충격파는 입자를 둘러싸고 후면에 겹쳐진다. 반대로, 다각형 구리 입자는 날카로운 모서리를 가지므로 충격 방향으로 빠르게 굴절됩니다. 이것은 알루미늄이 다량 함유된 RDX의 연소 경우보다 더 복잡한 유

동장을 초래한다. 또한, 충격과 입자 사이의 상호작용에서, 초기 충돌로부터 인장파에 의해 형성된 반사파 및 인접 입자 사이의 반복적인 충돌은 매우 불규칙한 패턴으로 후류에 나타나게 된다.

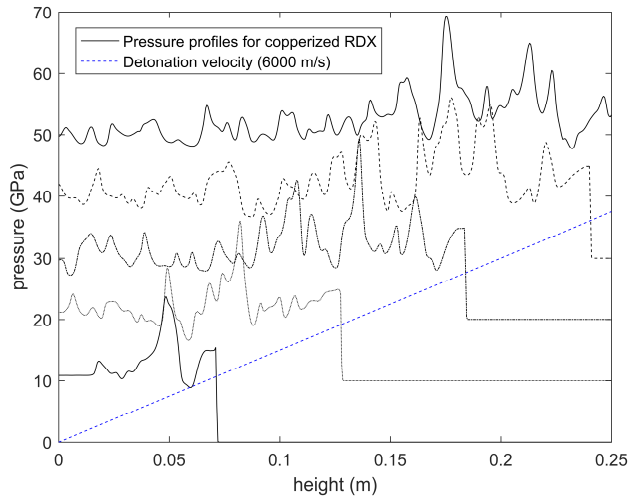
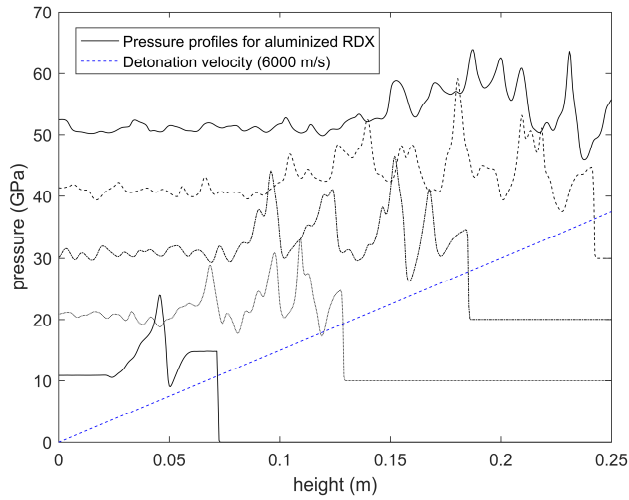


그림 3.5 (상) 알루미늄 (하) 구리 이가 포함된 RDX의 중심축에서의 시간에 따른 압력분포

그림 3.5에서, 폭발과 프론트 뒤에서 알루미늄이 다량 함유된

RDX 및 구리가 다량 함유된 RDX의 반응성 유동장을 비교하였다. 생성물 질량분율의 프로파일을 통해 시각화 된 폭발 파면의 전파속도는 두 경우 모두 동일하며, 이는 폭발속도가 궁극적으로 RDX의 폭굉에 의해 결정됨을 의미한다. 다시 말해, RDX에 비해 연소 속도가 느린 금속 입자는 초기 폭발파의 전파에 실질적으로 영향을 미치지 않는다. 그러나 압력 섭동의 크기는 두 경우에서 다르다. 압력 변동은 알루미늄이 포함된 RDX보다 구리가 포함된 RDX에서 더 뚜렷하다. 따라서, 압력 변동의 편차는 구리가 함유된 RDX의 반응성 유동이 함유된 입자의 형상을 따라 반사되어 다양한 변화를 만들어 내기 때문에 더 큰 것으로 계산된다. 알루미늄의 초기 항복응력과 소성 경화 계수의 값이 구리의 값보다 높기 때문에, 폭발파의 충격파에 대한 기계적 거동이 다른 것으로 보인다. 알루미늄은 수십 GPa의 충격 압력과 충돌한 직후 형태가 눈에 띄게 변화하지 않는다. 그러나 구리는 시간이 지남에 따라 점차 형태가 변하게 된다.

금속 입자의 화학반응은 폭연이 시작되는 임계 에너지 지점에 도달하지 않는다. 따라서, 금속 입자의 특성은 단시간 스케일에서 두드러지지 않게 된다. 그러나 알루미늄의 pre-expansion factor는 구리의 것보다 훨씬 높기 때문에 알루미늄의 화학반응은 thermal runaway로 더 빠르게 진행된다.

3.3 유한한 반지름을 가지는 반응막대의 연소해석

금속이 다량 함유된 폭발물의 후 연소 과정을 이해하려면 폭발 후 유동을 수치적으로 시뮬레이션해야 한다. 구형 알루미늄 및 다각형 구리 금속입자를 포함하는 산소가 적은 상태에서의 폭발을 시뮬레이션 하였다. 후 연소 효과는 공기 중의 폭발성 생성물의 연장된

과압 및 가열로 인해 일어났다. 후 연소 과정은 폭발성 혼합 및 대기 폭발에 의해 지배되기 때문에 완전히 불규칙적이거나 무작위적일 수 있다. 그러나, 이러한 열압 효과가 증대된 고에너지물질의 다중 반응의 주요 물리법칙은 일반적으로 초기반응 (또는 RDX의 최초 폭발)에 이어 산발적인 후 연소 (또는 금속 입자 연소)의 두 단계를 따른다. 산소 결핍이 자주 발생하는 폭발 과정에서 RDX는 음의 산소 균형(-21%)을 갖기 때문에 탄소 입자와 일산화탄소로 구성된 고온 기체 생성물로 변환된다. 이러한 탄화 기체는 후속 반응 동안 대기 중의 산소와 결합하여 안정적인 이산화탄소로 전환된다. 금속의 2차 폭연 연소열은 RDX 폭발 에너지보다 훨씬 높다. 후 연소는 첫 폭발과 비교하여 훨씬 넓은 지역에서 발생한다. 따라서, 이는 매우 높은 압력 및 고온 환경에서 폭발 전파, 충격파 반사 및 입자 상호 작용을 포함하는 매우 복잡한 유체역학 과정이다.

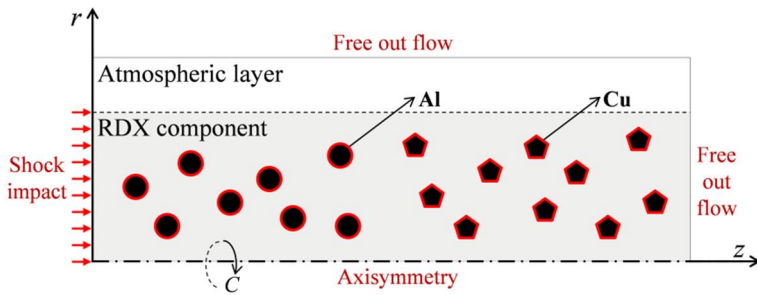


그림 3.6 금속입자가 함유된 RDX의 반응 막대 초기 조건

금속입자가 함유된 RDX의 유한한 반경을 가지는 반응 막대 계산 초기 도메인이 그림 3.6에 도시되어 있다. 대기, RDX, 금속 입자(Al, Cu)의 3개 다른 물질이 초기에 제로 레벨 셋 경계조건을 통해 설정되었다. 그림 3.7은 구리 RDX의 압력(상단) 및 총 에너지 (하단)

에 대한 시뮬레이션 결과를 보여준다. RDX에서 총 50개의 다각형 구리 입자가 무작위로 고려되었다. RDX의 구성 요소의 길이 방향으로 전파되는 폭발파는 최대 약 $50\ \mu\text{s}$ 까지 관찰된다. 이 경우에, 앞서 관찰된 바와 같이 폭발파가 RDX에서 랜덤하게 분포된 입자와 충돌하는 동안 후방에서 복잡한 형태의 유동흐름이 형성된다. 폭발이 폭발성 입자의 표면에 도달하면 폭발파가 형성되어 공기로 전파되며 배기 가스 유동에서 유속이 발생하여 입자가 종 방향 및 반경 방향으로 이동하게 된다. 이 고온 고압 환경은 일정 시간동안 유지되며 열 에너지가 입자에 공급된다. $70\ \mu\text{s}$ 후 일부 입자에 대해 점화가 시작된다. 이것은 투입된 에너지가 활성화 에너지를 초과할 때 발생하게 된다. 입자 연소가 점진적으로 진행되고 후 연소의 두번째 단계가 진행된다. 그림 3.7의 하단에 있는 에너지 컨투어는 반응성 생성물 기체 유동에서의 에너지 전달과정을 이해하는데 유용하다. RDX에서 초기 폭발이 진행되는 동안, 에너지 구배가 입자 사이에 나타난다. ($\sim 40\ \mu\text{s}$). 전이과정에 화학 에너지는 생성물 가스에서 입자로($\sim 70\ \mu\text{s}$) 전달된다. 결국, $90\ \mu\text{s}$ 후에, 충분히 가열된 입자들로부터 후 연소가 발생하고 이들 입자들 및 그들과 이웃하는 입자들이 동시에 연소된다.

구리 입자에 대한 점화 과정은 추후의 추가 시간 이미지를 보여줌으로써 그림 3.8에 자세히 설명되어 있다. 결과적인 변형 및 경계면의 변화 과정은 $90\ \mu\text{s}$ 에서 $100\ \mu\text{s}$ 까지 $1\ \mu\text{s}$ 간격으로 구리의 반응 진행 변수에 대해 표시된다. 입자가 점화되기 전에 외부에서의 충격파로 인한 기계적 변형만 관찰된다. 입자가 점화되면, 크기와 모양이 확산 화염의 형태로 극적으로 변형된다. 개별입자를 보면, 점화가 입자 전체에 고르게 분포되어 잇는 것으로 보인다. 입자의

표면은 대기 산소와 먼저 반응하므로 표면 반응 특성이 관찰된다.

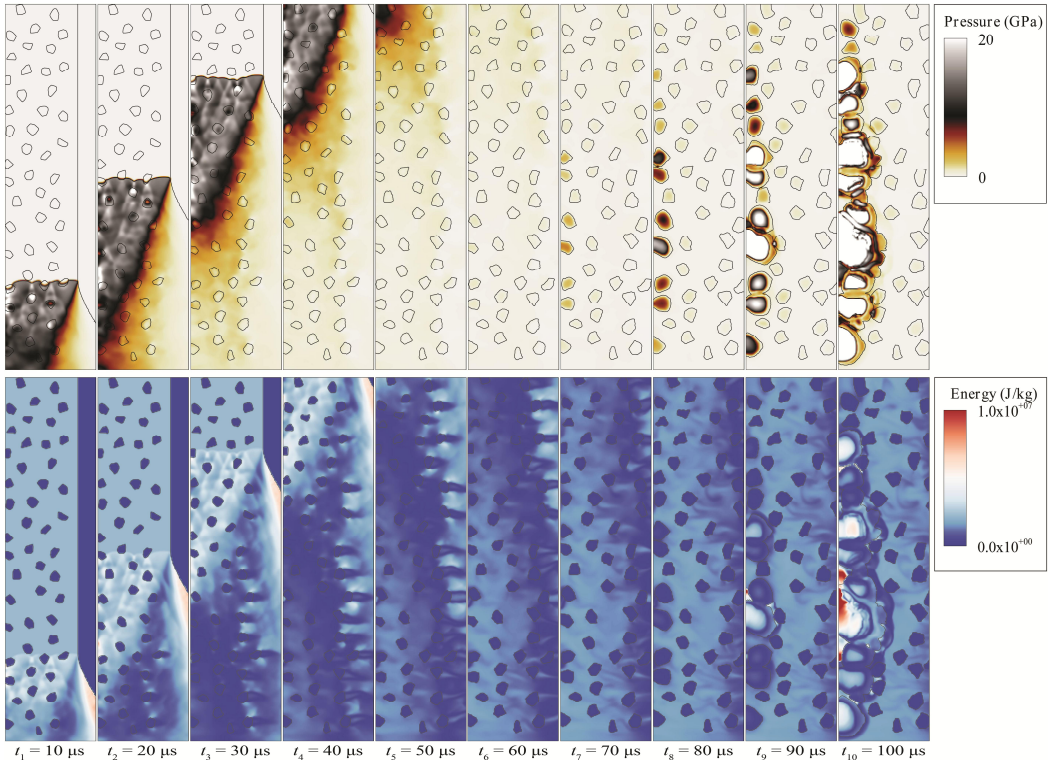


그림 3.7 구리를 포함한 RDX의 대기 연소 과정(압력, 에너지)

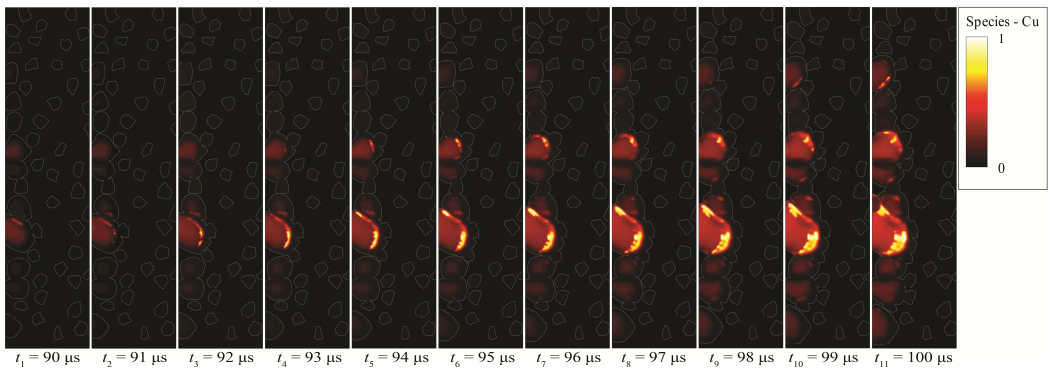


그림 3.8 구리를 포함한 RDX의 대기 연소 과정 (구리 질량분율)

폭발 후 유동에서 알루미늄 입자의 분산 및 연소는 그림 3.9에 묘사되어 있다. 이 그림은 알루미늄 입자가 함유된 RDX의 압력(상단), 총 에너지(중단), 반응 진행 변수(하단) 컨투어 시간 이미지를 보여준다. RDX의 충격과 전파 및 후속 알루미늄 입자의 후 연소가 명확하게 포착된다. 폭발 후 생성물 가스와 뒤 따르는 폭발과는 폭발 후 유동의 주요 구성요소이다. 폭발성 고에너지 물질에서의 폭발 프론트는 비 연소 된 알루미늄 입자와 폭발 생성물 기체를 분리하는 고압 및 고온 반응 구역으로 기술 될 수 있다. RDX에서 폭발은 $10^9 - 10^{10}$ Pa 정도의 압력으로 강한 충격파를 발생시킨다. 이 높은 압력은 알루미늄 입자에 필요한 엔탈피를 발생시켜 후 연소 효과를 유발하는 트리거를 제공한다. 생성물 가스 압력의 변화 및 응축된 상태에서의 유동 가속은 에너지 전달을 생성하고 알루미늄 입자의 후 연소를 유도한다. 알루미늄 입자의 연소 및 이어지는 afterburning으로 인한 열 방출은 제 2 peak 압력을 생성한다. 발화 될 때, 이들 입자는 빠르게 반응하여 고압 및 고온의 유동을 발생시켜 폭굉파를 일으킨다. 애프터 버닝은 확산 화염의 형태로 일어나며, 대기의 밀도가 다른 두 개 이상의 상이 분산되고 혼합되어 화염의 계면이 매우 불규칙적으로 발생한다. 금속이 함유된 RDX에서 다중 반응 메커니즘을 이해하기 위해, 알루미늄의 변형 분석이 요구되어진다. EPS(Effective plastic strain)은 변형을 텐서의 소성 성분의 함수로서 점진적으로 계산되는 단조 증가 스칼라 값이다. 유효 소성 변형의 값은 계산 시간동안 소성변형의 단계적 증분의 적분이다. 그림 3.10은 EPS의 시간 변화를 보여준다. 폭발단계 ($t_1 \sim t_4$) 및 Al 후연소 ($t_5 \sim t_{10}$) 중의 EPS를 나타낸다. t_4 에서 시작하는 확산 화염으로부터 후연소가 퍼진 후 스트레인 값이 빠르게 증가한다. 후연소 과정 중에 알루미늄 연소의 진행에 따라 변형이 계속 증가하

여 알루미늄의 표면은 20배 이상 확대되었다.

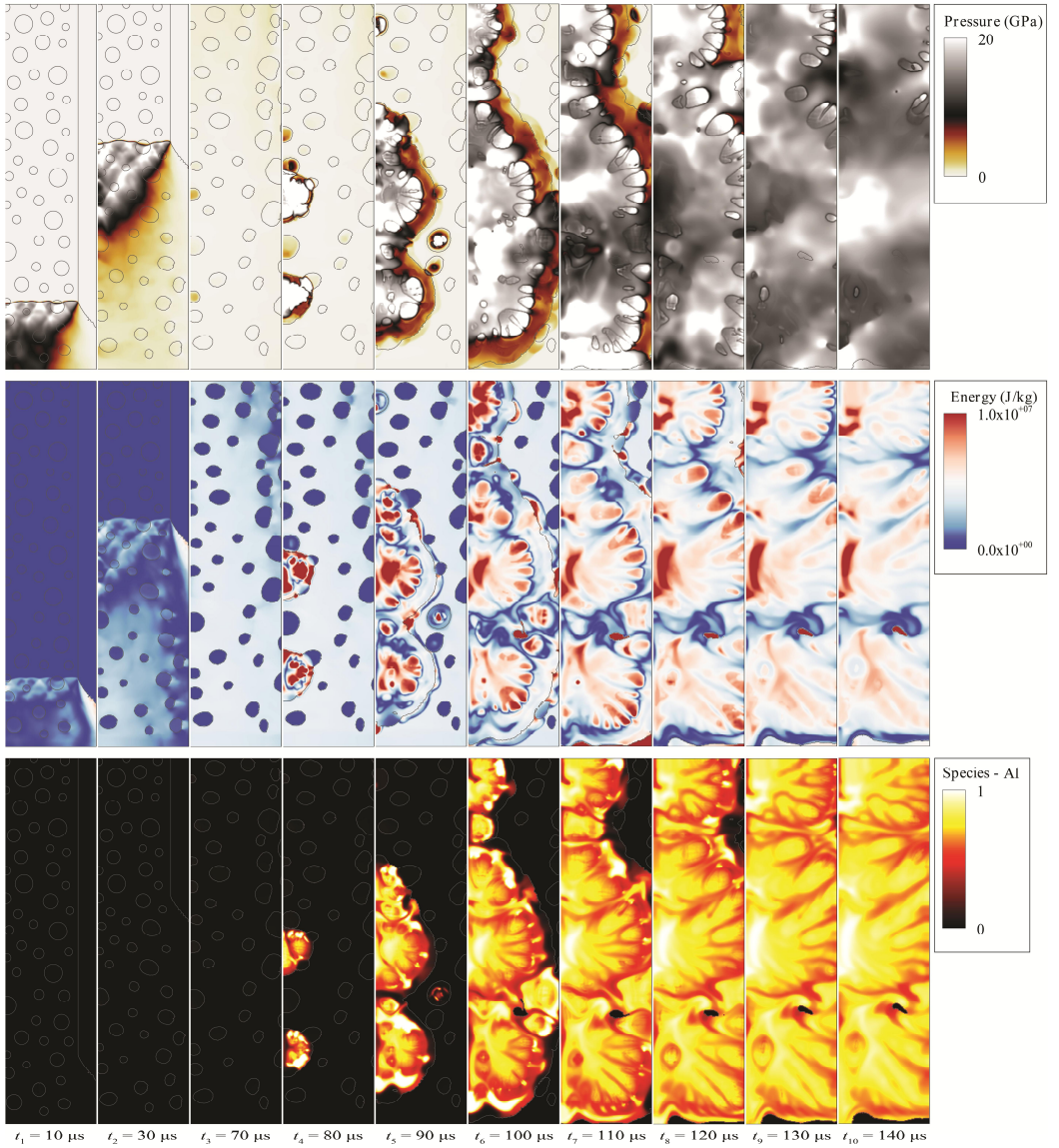


그림 3.9 알루미늄을 포함한 RDX의 대기 연소 과정 (압력, 에너지, 알루미늄 질량 분율)

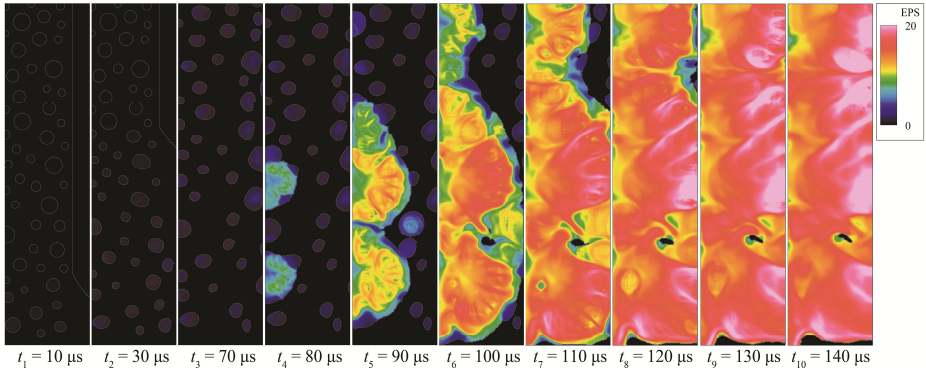


그림 3.10 알루미늄을 포함한 RDX의 대기 연소 과정 (EPS)

제 4 장 다물질 고폭화약 수치해석

4.1 고폭화약의 연속체 해석과 메조스케일 해석

4.1.1 반응막대 시뮬레이션 결과

폭속 측정 및 폭압 측정을 위한 유한 반경 반응 실린더 막대 테스트는 연속체 및 메조스케일에서 시뮬레이션 되었고 결과를 실험데이터와 비교하였다. 이것은 한쪽 끝에서 충격파가 시작될 때 다양한 입자 반경에서 샘플의 폭발 속도를 특성화 하기 위한 벤치마크 테스트이다. 약한 외부 충격의 충격속도는 1500m/s이고 강한 충격의 경우 3000m/s이다. 이러한 충격 속도는 폭발 거리에 영향을 미친다. 셋업은 두가지 물질로, 95%의 HMX와 5%의 바인더로 구성되었다. 연속체 접근법은 샘플이 균질하고 반응성 및 물질 강도와 같은 각 물질 고유 특성은 무시하는 걸로 가정한다. 그러나 메조스케일(혹은 Grain scale)에서 바인더는 반응하는 HMX 생성물 가스에 의해 압축 강도 및 내성을 갖는 불활성 Grain물질로 간주된다. 결과적으로, 반응이 진행되는 동안 반응물 또는 생성물에 대해 혼합 또는 평균화된 상태방정식이 사용되지 않았다. 그림 4.1의 상단 그림은 샘플의 왼쪽 끝에서 충격을 받을 때 전파 속도를 측정하기 위해 연소방향을 따라 설치된 4개 센서 위치를 보여준다. 반경 0.5mm의 실린더 폭약이 왼쪽 끝에서 충격을 받았으며 shadowgraph로 표현된 컨투어에서 충격과 전달을 확인할 수 있다. 폭약은 각 샘플 반경에 따라 완전히 충격과 전달 폭풍으로 천이 될 수 있을 만큼 길었다. 그림 4.2는 두개의 시뮬레이션 비교를 위해 충격으로 인한 폭발 압력 전파를 보여주는 컨투어이다.

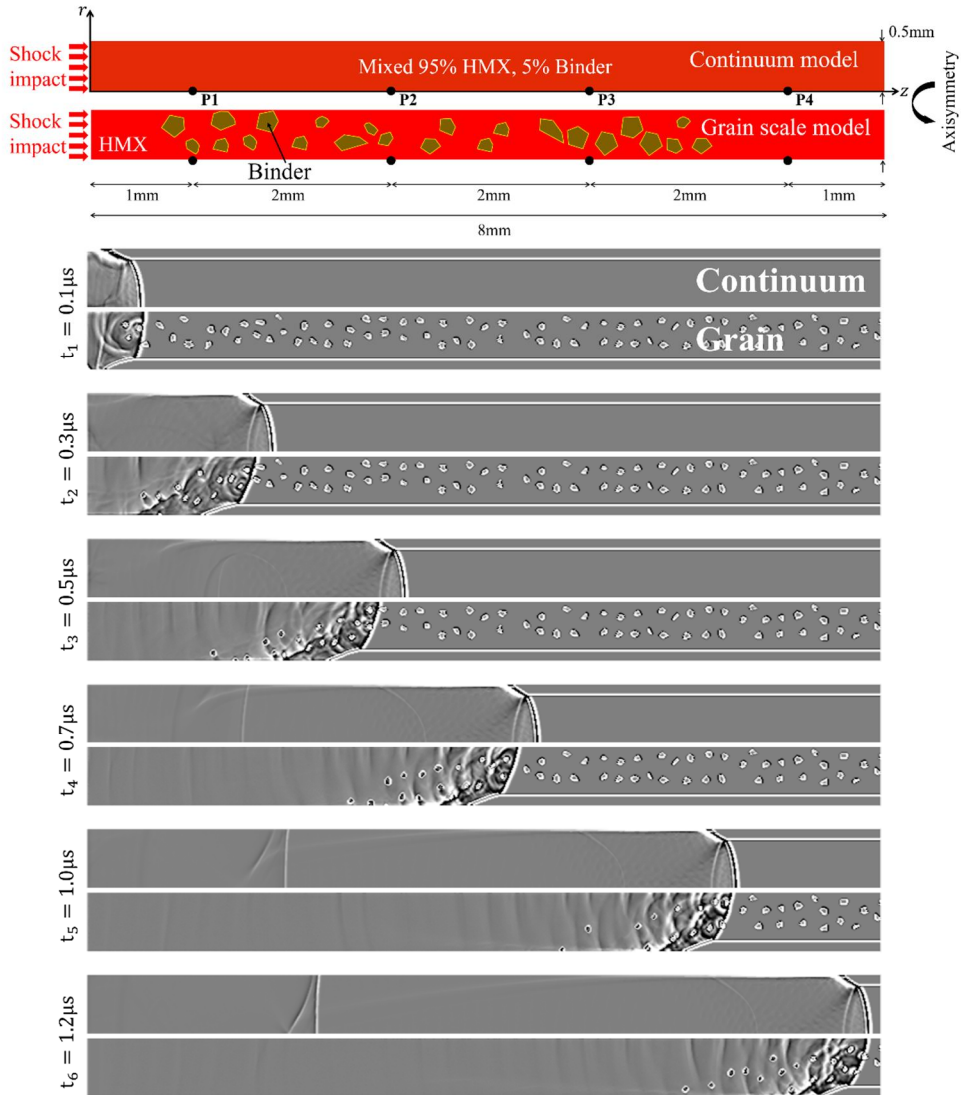


그림 4.1 0.55mm HMX95 폭약의 충격과 전달 폭굉과정 연속체와 메조스케일 shadowgraph 컨투어 비교.

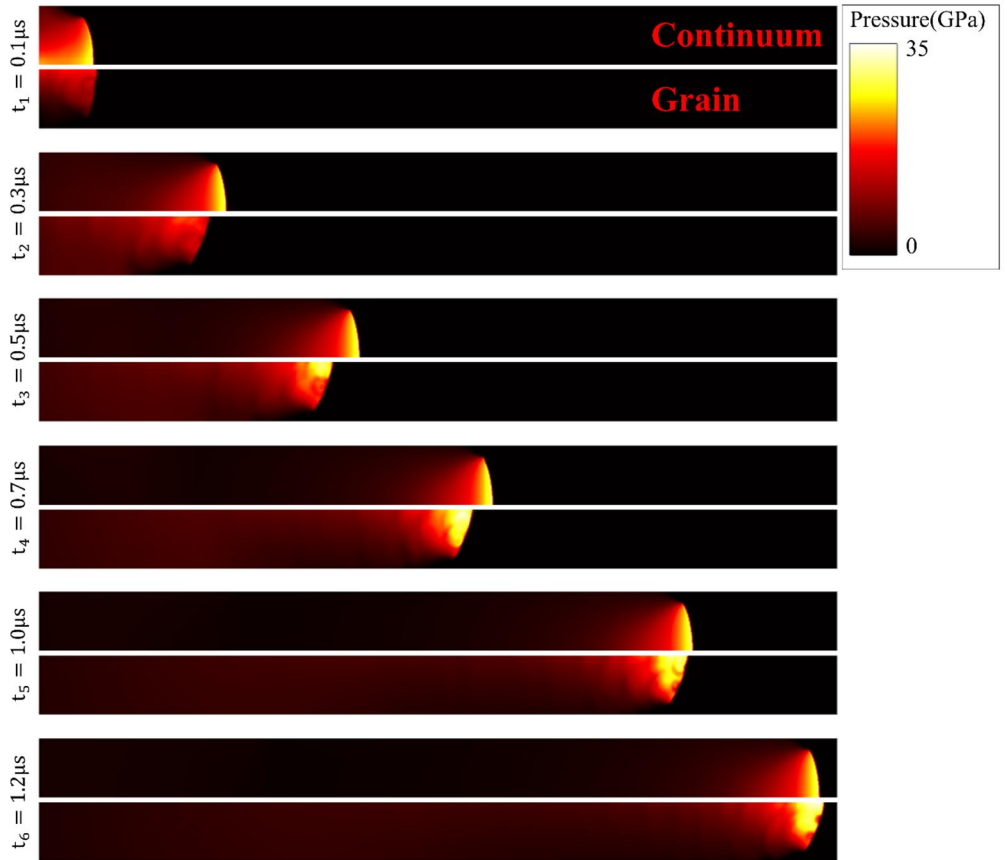


그림 4.2 0.55mm HMX95 폭약의 충격과 전달 폭굉과정 연속체와 메조스케일 압력 컨투어 비교.

두가지 시뮬레이션 조건에 대해 $0.1 \mu\text{s}$ 에서 시작한 거의 동일한 속도에 있는 반면, 연속체 영역에서의 속도는 시간이 $1.2 \mu\text{s}$ 에 도달할 때까지 Grain 조건의 속도보다 빨랐다. 전파 화염의 프론트 뒤의 화염 구조는 바인더 주위 및 후방에 강한 희귀 및 반사가 존재하는 Grain scale 시뮬레이션 측면에서 극히 복잡한 것을 확인할 수 있다. 실험적으로 이용 가능한 데이터인 폭발 속도를 가지고 시뮬레이션과의 검증을 진행하였다. 여기서, 연속체 및

Grain 시뮬레이션 모두 최종 폭발 속도는 일치하는 반면 충격과 전달 폭풍의 초기 가속은 Grain시뮬레이션에서 더 사실적으로 계산되었다. 이러한 전파 속도는 연속체에서 초기에 더 빠르게 계산되었으나 곧 Grain조건에 따라 잡히게 된다. (그림 4.3)

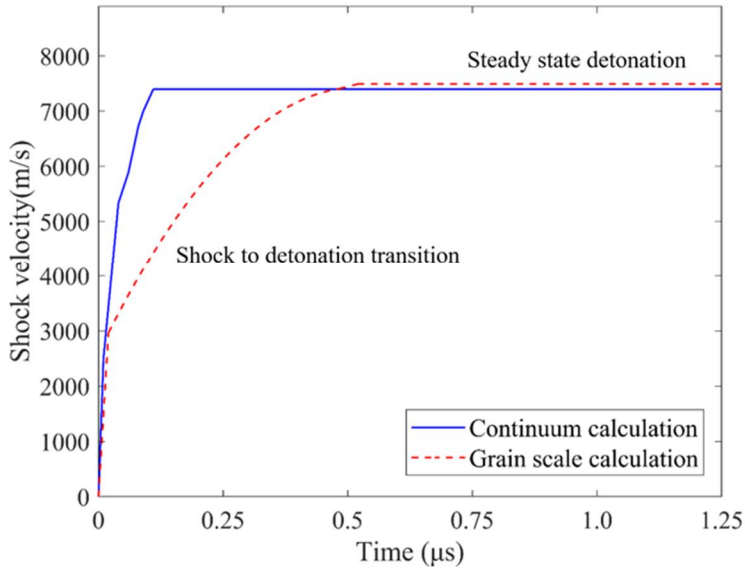


그림 4.3 연속체와 Grain모델 시뮬레이션의 충격파 속도 비교

그림 4.4은 0.12 μs마다의 원통형 폭약의 중심선을 따라 전파 반응 프론트와 꼬리부분의 압력 필드를 보여준다. 연속체 결과는 폭발 정면 뒤에서 균일한 압력 강하를 보여주었고, 화염 프론트 뒤의 복잡성은 Grain scale 시뮬레이션에서 그 특성으로 인해 뚜렷하게 관찰된다.

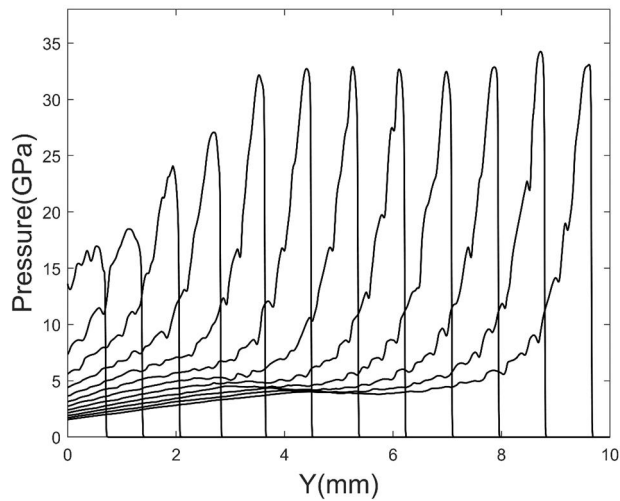
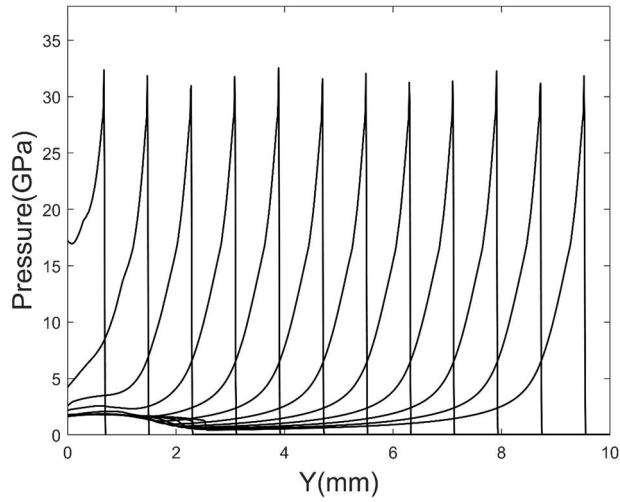


그림 4.4 연속체(상), Grain scale(하) 수치해석의 압력 분포

그림 4.5는 기존의 0.5mm 반응 막대에서 벗어나 다양한 반지름의 원통형 반응막대 실험데이터와 두 시뮬레이션을 비교한 것이다. 도시된 바와 같이, 매우 큰 반경 또는 제로 역 반경의 경우, 폭발속도는 이론적인 CJ 폭발속도 8750m/s와 잘 일치하였다.

0.5mm⁻¹의 경우를 제외하고, 폭발 속도는 모두 잘 일치하여 연속체 및 Grain scale 시뮬레이션이 폭발 속도 데이터를 수치적으로 모사하는데 신뢰할 수 있음을 시사한다. 그러나, Grain scale 해석만이 화염 프론트의 초기 가속에 대해 심층적인 세부사항을 제공한다. 이는 강도가 높은 불활성 과립 (또는 바인더 과립)이 뜨거운 생성물 가스 주위에 존재할 때 폭발에 대한 내성이 더 컸기 때문이다.

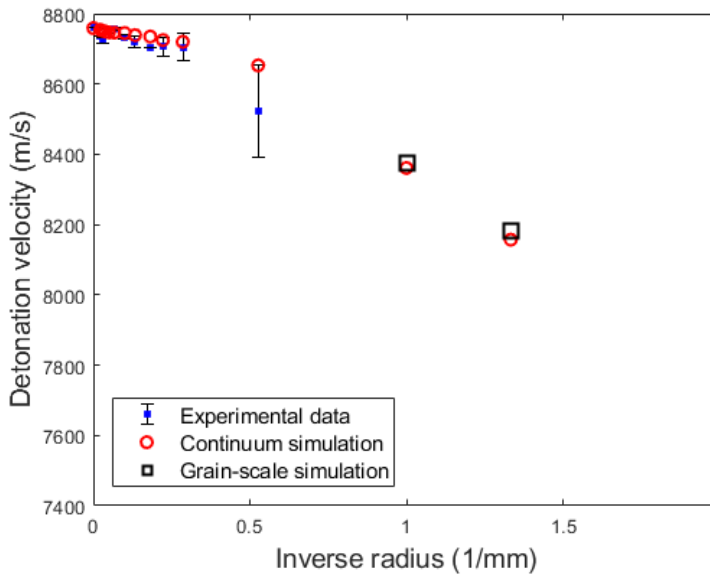


그림 4.5 다양한 반지름을 가지는 반응막대의 수치해석(연속체, Grain)결과와 실험결과 폭발속도 비교

메조스케일 시뮬레이션으로 대표되는 또 다른 차이점은 누적 충격량(Impulse) 값의 차이이다. 그림 4.6는 축방향을 따라 4 개의 압력센서 측정 값을 보여준다. 연속체 및 Grain 두경우의 시뮬레이션에서 센서 P4의 충격파로 인한 폭발은 유사한 피크 값과

모양을 가지지만, P1 센서 Grain 해석의 경우는 충격파가 아직 완전히 폭굉으로 천이되지 않은 상태이다. Grain 시뮬레이션에서 압력 전파를 고려하면, 폭굉으로 발달함에 따라 P1의 뭉툭한 peak 모양이 P2, 3, 4에서 보는 바와 같이 뾰족한 형태로 발전하는 것을 확인할 수 있다. 이러한 압력 샤프닝 지연현상은 Grain scale simulation의 새로운 특성으로 여겨진다. 또한, 모든 물질이 균질한 것으로 가정되는 연속체 해석의 경우는 Grain 해석에서만 나타나는 유동 반사, 굴절로 인해 생기는 복잡하고 불규칙적인 wake가 없는 것이 확인된다. 충격파 프론트가 센서 P2~P4를 통과하는 동안 Grain scale simulation의 폭굉 프론트는 연속체 시뮬레이션 프론트를 따라잡았다.

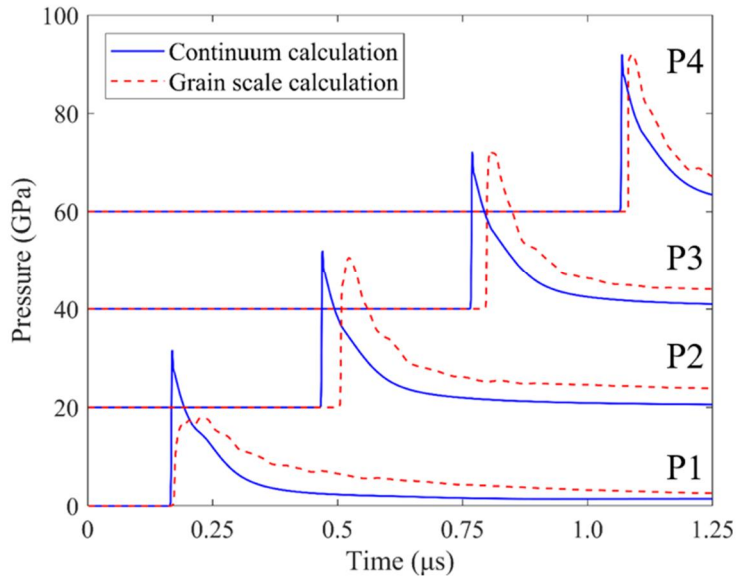


그림 4.6 센서 P1~4에서 측정된 압력전파도

표 4.1 4개의 센서에서 측정된 Peak 압력과 Impulse

	P1	P2	P3	P4
Peak pressure (continuum, GPa)	31.6	31.9	32.3	32.0
Peak pressure (granule, GPa)	17.3	30.7	32.4	32.4
Impulse (continuum, Pa•s)	1,849.3	1,764.9	1,767.8	1,763.5
Impulse (granule, Pa•s)	1,683.4	2,101.2	2,112.9	2,116.8

표 4.1은 각 압력 그래프에 대해 계산된 임펄스와 함께 4개의 센서 위치에서 측정된 peak 압력을 보여준다. 센서 P1에서 측정하였을 때 최대 압력은 대략 32GPa였다. 이 단계에서 Grain 해석은 폭굉으로 완전히 천이 되지 않았으므로 여기서 측정된 임펄스는 연속체 해석에서 더 크게 계산되었다. 그러나, P2~P4에서 계산된 임펄스는 Grain simulation이 더 큰 값을 가졌으며, 이는 폭굉으로 천이 된 후 HMX와 바인더 두 물질 간의 상호작용으로 인해 더 긴 압력 완화길이와 관련이 있다. 연속체 계산은 균질한 매체를 가정했으며, 따라서 압력 분석 결과 꼬리부 압력이 비교적 짧은 폭발 후류 구조가 발생하였다. 반면, Grain scale 시뮬레이션은 중첩된 rarefaction, grain-solid 상호작용, 뜨거운 기체상태의 압축으로 인해 상대적으로 길고 높은 테일 압력을 가지게 되었다.

4.1.2 통계적 열/연소 분석

폭굉으로 천이되는 동안의 발열 거동을 분석하기 위해 다음 방정식 [26]를 사용한 열 방출 속도(\dot{q} ; GW/m³)는 연속체 및 Grain simulation을 비교 분석하는데 사용되었다.

$$\dot{q} = -\Delta H_R \rho z_i \dot{w}_i \quad (27)$$

여기서 ΔH_R 는 발열량 (J/kg)이고 z_i 는 반응물의 volume fraction, \dot{w}_i 는 reaction rate를 나타낸다. 시뮬레이션의 각 단계에서 열 방출 속도가 계산된다. 열 방출 속도의 전체 범위는 로그 스케일로 균일하게 나뉘며 각 계산 셀은 통계적으로 계산된다. 이 연구에서 열 방출 속도는 0에서 대략 10⁹GW/m³의 범위이므로 확률 밀도 함수 (PDF; Probability Density Function)는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\text{Probability}(n \leq \log_{10}(\dot{q}) < n + dn, y \leq Y < y + dy) = f(\dot{q}, y) dndy$$

$$\text{PDF} : f(\dot{q}, y) = \frac{\text{Probability}}{dndy} = \frac{\text{counted cell number}}{\text{All computational cell number}} \frac{1}{dndy}$$

$$\text{Unit} : \dot{q}(\text{GW/m}^3), Y(\text{mm}) \quad (28)$$

그림 4.7은 PDF를 사용하여 실린더의 세로 축을 따라 열 방출률의 분포를 보여준다. 반응이 진행됨에 따라, 종 방향으로 방출된 열의 분포는 색상 컨투어로 확인할 수 있다. 10⁸정도의 열 방출이 주로 충격과 정면에서 방출되고 10⁴정도의 열 방출량이 팽창 섹션에서 지배적인 것을 알 수 있다. 여기서, 열 방출 속도의 분포는 (i) Grain vs 연속체 scale (a,b,e,f) 및 (ii) 폭굉 vs 폭굉 천이 지점 두개의 기준으로 나누어서 분석되었다.

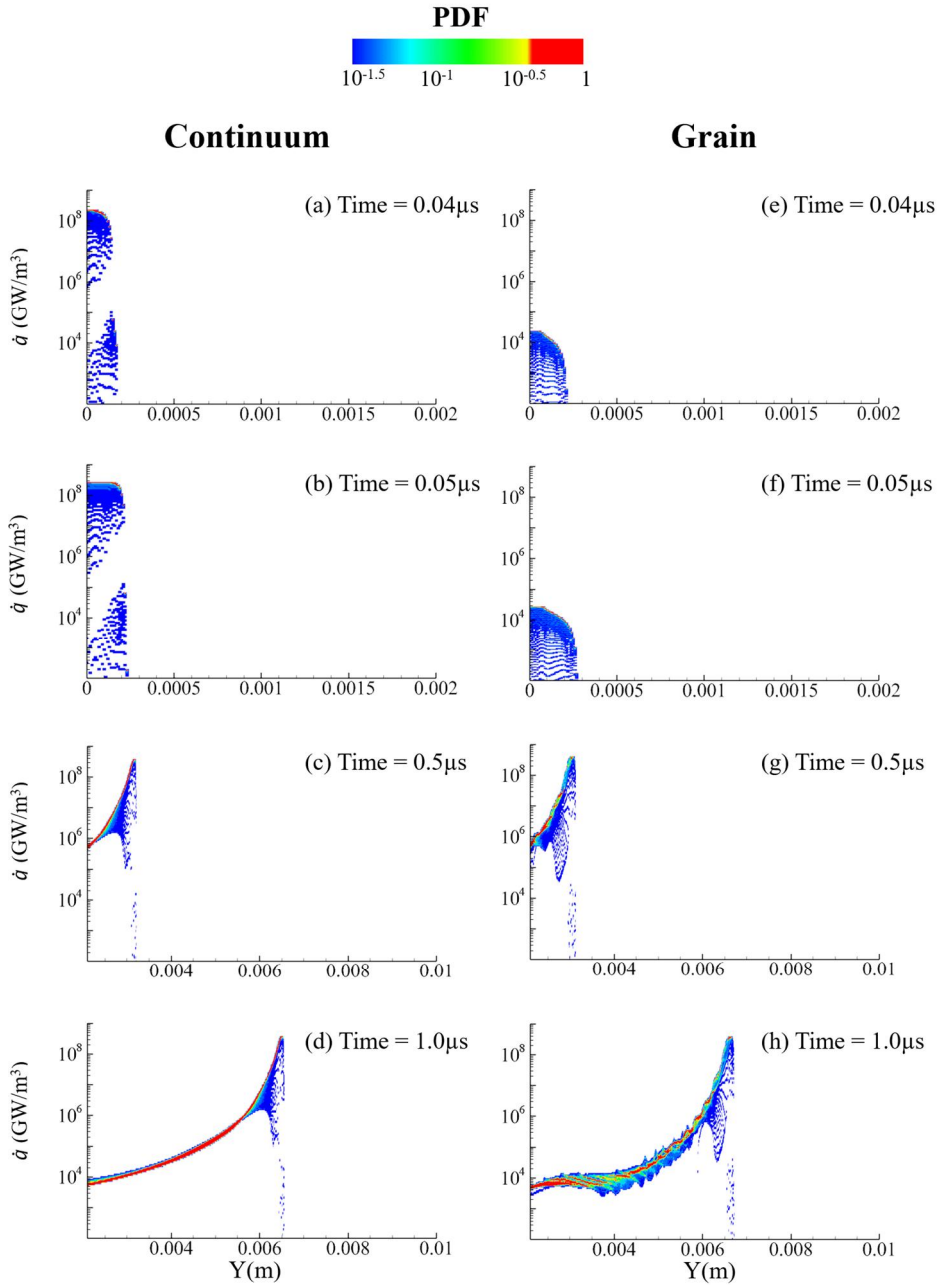


그림 4.7 (a-d) 연속체, (e-h) Grain 해석에서의 열 방출률

먼저, 천이 상태에서 (a-b) 연속체 및 (e-f) Grain 수치해석을 비교할 때, 연속체 및 Grain 시뮬레이션에 대한 가장 높은 열 방출률은 각각 10^8 및 10^4 로 표시된다. Grain 수치해석에서 보다 연속체에서 열 방출 속도가 더 크기 때문에, 균질분석(연속체)에서 충격 폭발 전이가 더 빠른 이유가 확인된다. 폭굉으로 완전히 발달한 이후인 (c-d) 및 (g-h)의 나머지 수치를 비교할 때, 열 방출 속도 분포는 두 조건에서 상당히 유사하다는 것을 알 수 있다. 데토네이션 프론트에서 10^8 에서 10^9 사이의 열 방출 값을 가진다. 두 경우 모두, PDF이미지로부터 $10^5 \sim 10^9$ 의 열 방출량이 반응 영역 전면에서 존재하는 것이 확인된다. 이 넓은 열 방출은 반응 막대 내의 반응 프론트가 공기와 만나는 부분 때문에 곡선 형태로 형성 되기 때문이다. 또한 PDF 컨투어는 두 시뮬레이션 모두 가장 확률이 높은 선(밝은 선)을 표시하며 각 Y축의 평균 열 방출량에 해당한다. 이 라인은 같은 시간의 두 시뮬레이션에서 동일한 값을 갖는다. 다시 말해, 두 개의 서로 다른 시뮬레이션에서 벌크 열 방출률은 동일하지만, 연속체 스케일로 얇은 분포의 컨투어가 형성되는 반면 메조스케일에서는 두꺼운 분포의 컨투어가 생긴다. 이것은 연속체 시뮬레이션에서의 균질함을 보여주고 granule 시뮬레이션에서의 이중성을 보여준다.

한편 전체 도메인에서의 열 방출 속도 PDF 다음 수식을 통해서 구할 수 있다.

$$f(\dot{q}) = \int_0^Y f(\dot{q}, y) dy \quad (29)$$

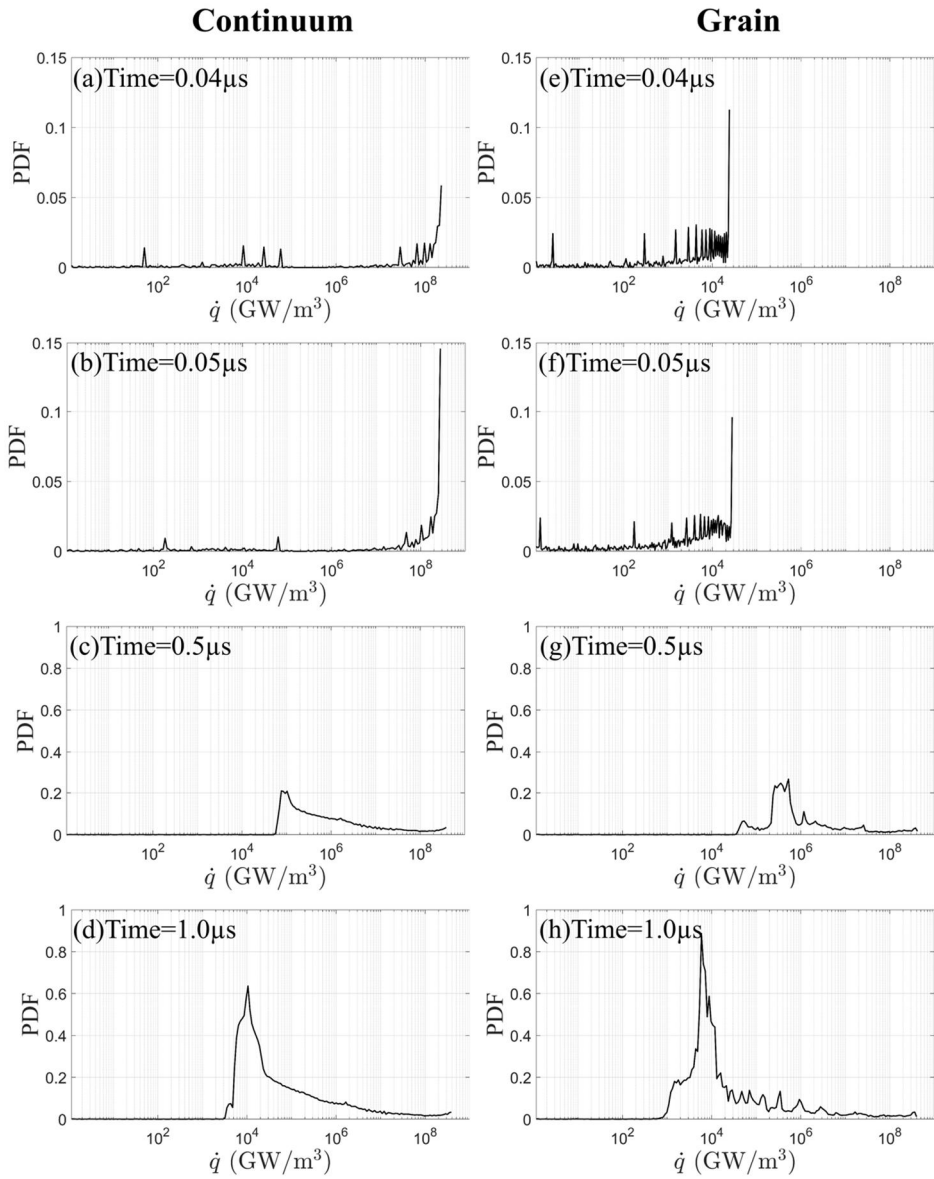


그림 4.8 열 방출 속도에 따른 PDF분포. (a-d) 연속체 해석, (e-h) Grain 시뮬레이션

그림 4.8은 전체 도메인에서 가장 지배적인 열 방출률을 보여준다. 여기에서 PDF와 같은 열 방출률이 발생하는 영역의 크기를 나타낸다. 그림 (a-b)와 (e-f) 천이 상태에서, grain시뮬레이션에서 보다 연속체 시뮬레이션에서 더 높은 열 방출 속도를 확인할 수 있다. 또한, 그림 (c-d)와 (g-h)를 비교하면, 벌크 열 방출 속도는 그림 4.7에 도시된 바와 유사하기 때문에 완전히 데토네이션으로 천이 후 유사한 패턴이 관찰된다. PDF 최대값과 대략적인 형상은 유사하지만, 연속체 해석은 Grain 시뮬레이션보다 단순한 도메인을 가지기 때문에, 메조 스케일에서의 이중 grain 특성이 주변 물질의 복합 반응에 유리하게 영향을 끼쳤음을 나타낸다.

4.2 3물질 복합화약 반응막대 해석

서로 다른 유형의 3종 다중 grain을 고려한 해석을 진행하였다. 반응성 grain으로서의 HMX (55%), 반응성 금속 첨가물 알루미늄 입자 (10%), 도메인 배경으로서의 미반응 바인더(35%)가 고려된 시뮬레이션을 수행하였다. 비 균질성은 시뮬레이션 초기화에서 엄격하게 실시된다. 본 논문에서 앞서 언급된 초기 도메인 형성 방법 및 3물질 처리기법이 시뮬레이션에 적용되어 각 물질 경계면을 정확하게 추적할 수 있었다. 그림 4.9는 HMX, Al, 바인더를 포함하는 시뮬레이션 도메인을 보여준다. 하단에 충격이 가해지면 충격파가 형성되고 HMX 및 Al입자에서부터 급격한 변형으로 인해 연소 가스가 발생한다. HMX는 폭발로 빠르게 발전한 후 뜨거운 생성물 연소 가스로부터 Al의 입자들이 후 연소하게 된다.

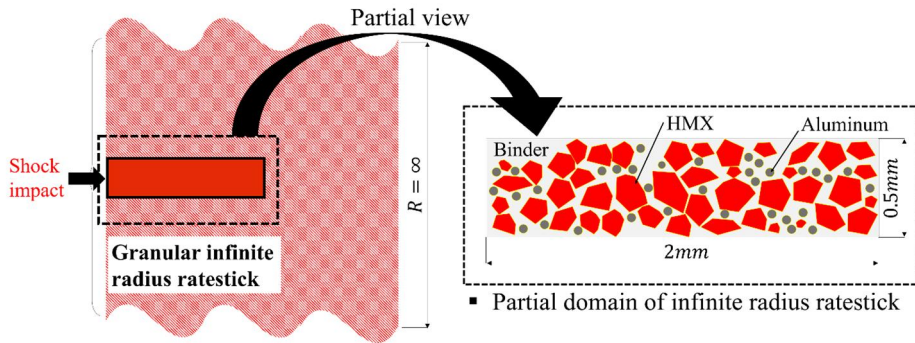


그림 4.9 3개물질(HMX, Al, 바인더) 해석을 위한 초기 도메인

그림 4.10과 11은 약한 충격($\sim 1500\text{m/s}$)에 대한 반응 막대의 연소 해석 결과를 보여준다. 각각 Shadowgraph, 압력, HMX 생성물 질량분율, Al 생성물 질량분율이 고려되었다. 충격은 Grain을 가속화시켜 최대 15GPa 의 압력을 만든다. Shadowgraph를 통해 초기에 HMX 및 Al 입자의 변형이 일어나는 것을 볼 수 있고 특히 HMX의 국부적인 압축은 반응으로 이어진다는 사실을 확인할 수 있다. 알루미늄은 초기에 반응을 하지 않고 기계적인 변형만 하지만, HMX의 반응으로부터 생성된 고온의 생성물 가스는 데토네이션 프론트 뒤의 영역에서 미세 입자로의 열 전달을 유발한다. HMX의 생성물 질량분율은 0에서 1로 변화하여 완전히 연소되었음을 볼 수 있고, Al 미립자는 거의 연소되지 않으며 최종적으로 0.0005의 반응 단계치를 확인할 수 있다. 압축에 의한 열은 알루미늄의 연소에 중요한 요소다. 그러나, 이 경우 약한 충격은 알루미늄을 생성물 가스로 완전히 전환시키기에 충분한 에너지를 제공하지 못했기 때문에 완전히 연소되지 못하였다.

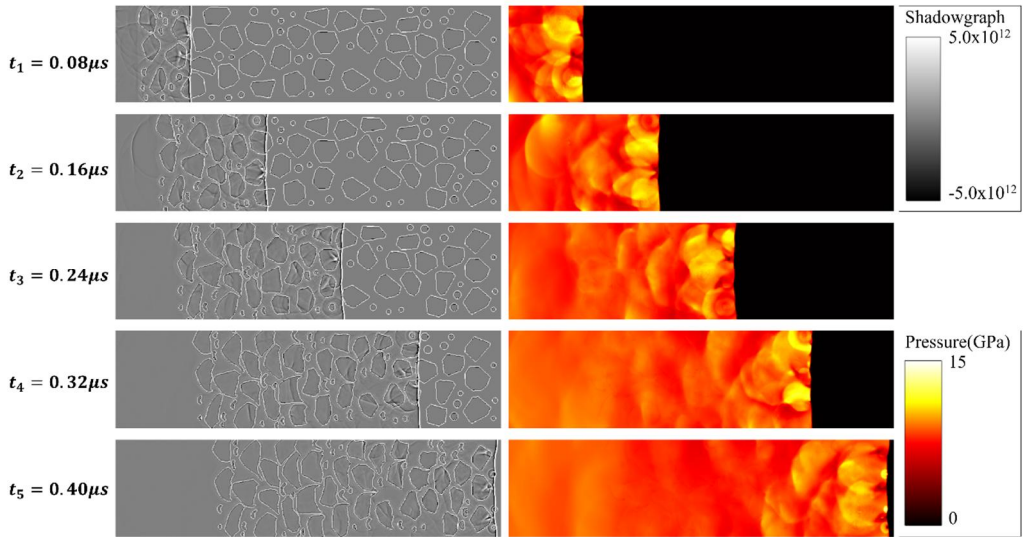


그림 4.10 경미한 충격파 전달 시 Shadowgraph와 압력 컨투어

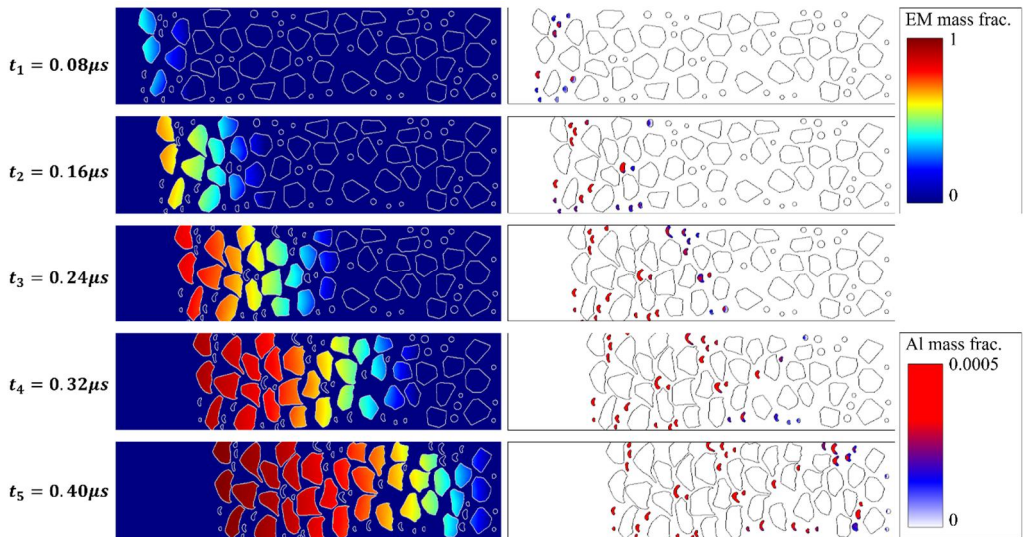


그림 4.11 경미한 충격파 전달 시 HMX 및 Al 질량분율

그림 4.12와 13은 완전한 반응을 유도하도록 설계된 강력한 충격 문제 (~3000m/s)를 나타낸다. 샘플 상단에 도달하는데 걸리는 시간은 약 $0.25 \mu\text{s}$ 였으며 이는 약한 충격의 경우보다 훨씬 빠르다. 강한 충격으로 인해 입자 속도가 빨라져 HMX와 알루미늄 입자가 심한 변형을 일으켜 HMX가 완전하게 반응하고 알루미늄도 역시 완전하게 연소되었다. t_1 에서 초기 압축이 관찰되었고, t_5 에 이르러서는 이러한 변형은 상당히 심해진 것을 확인할 수 있다. 따라서, HMX 및 알루미늄 둘 다의 생성물 질량분율이 1에 도달하여 완전히 반응한 것을 확인할 수 있으며 후속된 폭발이 일어났음을 나타낸다. 이러한 결과는 연속체 시뮬레이션이 HMX grain, 알루미늄 및 강도를 갖는 바인더와 같은 세가지 물질이 초기 천이 구간 및 완전 폭발 천이 완료 구간에서 상호작용하는 방식에 대해 세부 정보를 보여주지 못했기 때문에 매우 흥미롭다.

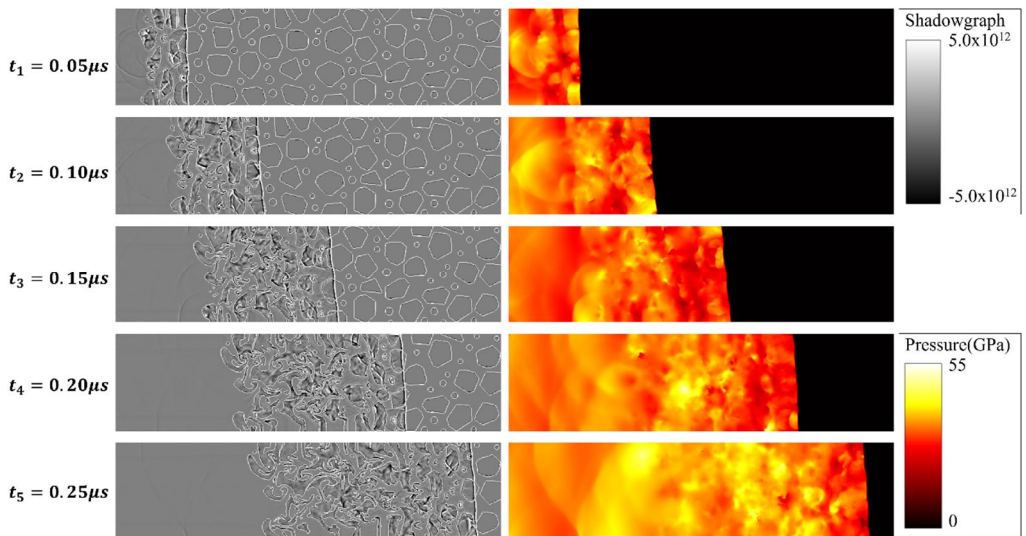


그림 4.12 강한 충격과 전달 시 Shadowgraph 와 압력 컨투어

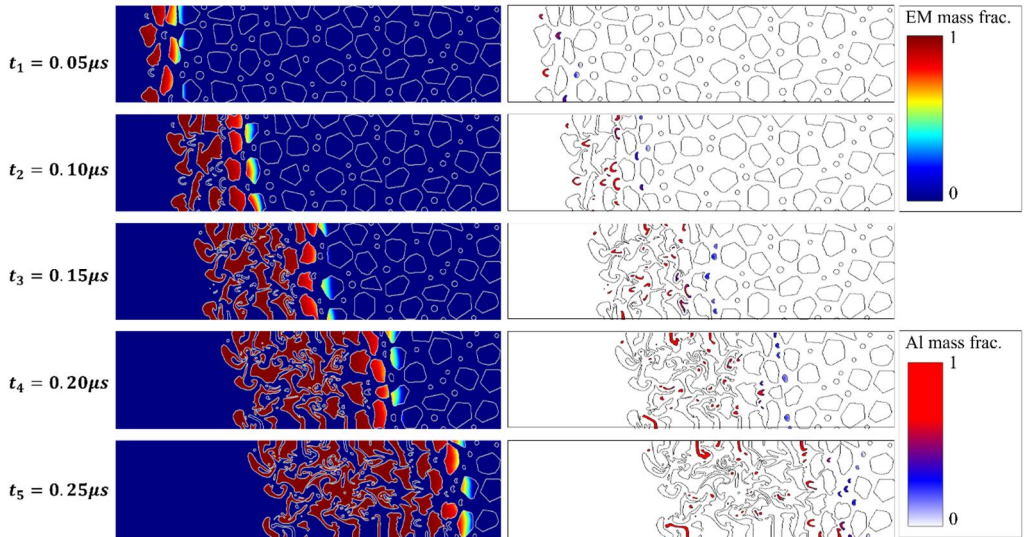


그림 4.13 강한 충격파 전달 시 HMX 및 Al 질량분율

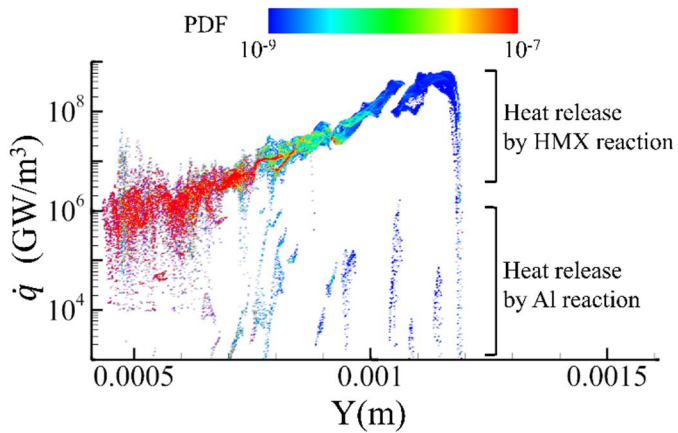


그림 4.14 강한 충격, $0.16 \mu\text{s}$ 에서의 열 방출 속도 PDF 컨투어

그림 4.14는 이전에 2개의 물질로 고려되었던 열 방출 분포 PDF를 3개의 물질 경우에서 나타낸 결과를 보여주는 그림이다. 높은 열 방출을 나타내는 HMX의 반응 영역과 비교적 낮은 열 방출 속도를

갖는 알루미늄이 구별되는 것을 확인할 수 있다. HMX의 높은 반응성은 높은 열 방출 속도 ($\sim 10^8$)로 충격파 프론트 근처에 국한된다. 그러나 HMX와 달리 알루미늄은 비교적 천천히 연소하여 약 0.0007~0.0012m의 넓은 반응 구역에서 $10^4\sim 10^6$ 정도의 열을 방출한다. 이는 반응성 금속(이경우, 알루미늄)의 후 연소 특성을 설명한다.

제 5 장 입자기반 3차원 복합화약의 충격과 전달 폭굉 수치해석

본 장에서는 Grain 시뮬레이션을 위해 계산 영역을 기존 2차원에서 3차원으로 확장하였다. 2차원에서 3차원 시뮬레이션으로 확장하려면 다각형 입자의 적절한 초기화와 배치가 요구되며 이는 충격에 의한 초기 반응 시 입자의 압축, 팽창, 반응, 입자상호작용 등에 영향을 끼치게 된다. 본 장에서는 2개 및 3개의 물질을 포함하는 고에너지 물질에 대해 3차원 충격과 충격에 대한 시뮬레이션 결과를 나타낸다.

5.1 3차원 2물질 복합화약의 충격과 전달 폭굉 시뮬레이션

HMX 및 바인더와 관련된 2개의 물질이 사용된 문제가 3차원 분석을 위해 먼저 고려되었다. 다각형 3차원 HMX Grain과 배경으로 사용된 HMX 경계면은 레벨셋 함수를 이용하여 모델링 되었다. 무한 반지름을 가지는 반응 막대의 폭약 수치해석 초기 도메인이 그림 5.1에 도시되어 있다. 그림 5.1은 어떻게 크고 작은 HMX Grain들이 open-end 도메인에서 배치되어 있는지 나타낸다. HMX의 입자 크기는 무작위로 50~200 μm 의 크기를 가지도록 설정하였다. 이 영역의 빈 공간은 빈 공간이 아니라 탄성 바인더로 물질할당이 되어 있고, 외부 충격 위치는 바닥면으로 1500m/s의 flyer 충돌을 가정한다.

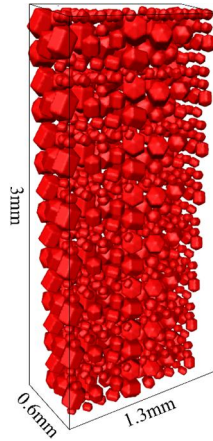


그림 5.1 3차원 2물질 복합화약 해석 초기조건(HMX, 바인더)

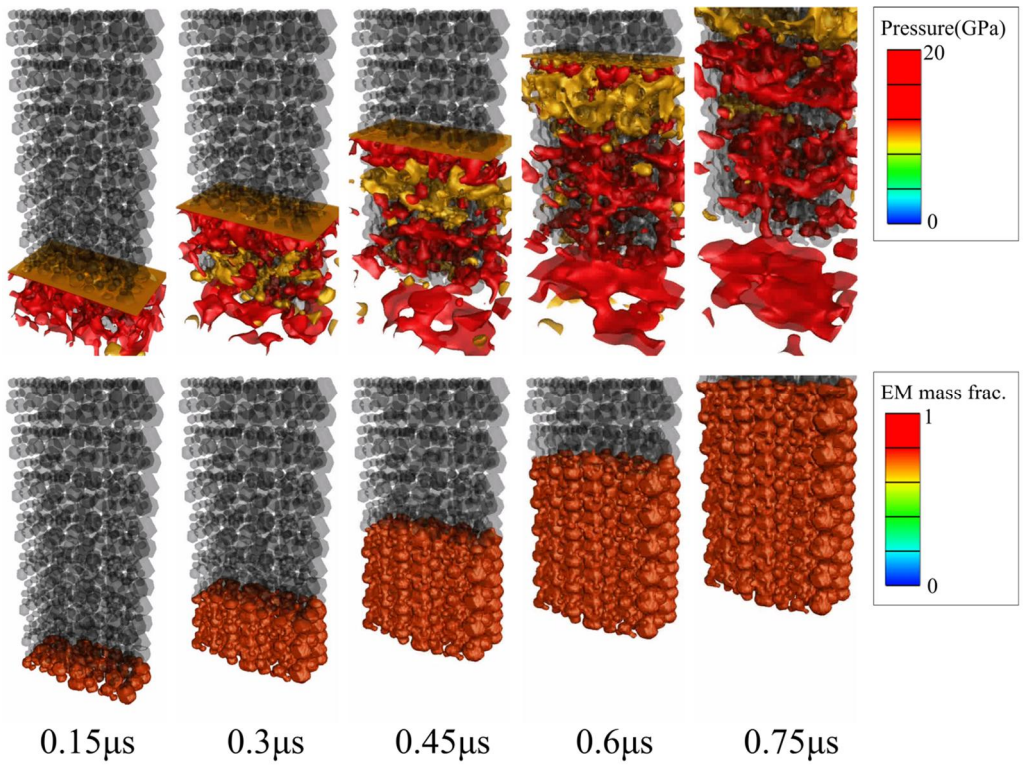


그림 5.2 3차원 2물질 복합화약의 압력, 질량분율 해석결과

그림 5.2는 바인더의 압축과 HMX반응에 의한 압력과 분포를 보여준다. 바인더의 압축에 의한 압력 발생은 평평한 충격파 프론트(압력 컨투어에서 주황색으로 도시됨)를 형성하고; 그 후 HMX의 폭발에 의해 생성된 압력을 나타내는 적색의 파 구조가 형성된다. 또한, $0.6 \mu\text{s}$ 에서 시작하여 시뮬레이션이 끝날 때까지 나타나는 전면의 노란색 물질 구조는 expansion wave를 나타낸다. HMX반응의 진행은 또한 2D 약한 충격의 결과와 같이 반응이 0에서 1로 직접 빠르게 진행되지 않았지만, 팽창파가 생성될 때 완전히 반응했음을 나타낸다. 이때, HMX 입자는 압축되고 입자 속도에 따라 위쪽으로 이동하며 서로 겹쳐진 것을 확인할 수 있다.

5.2 3차원 3물질 복합화약의 충격파 전달 폭굉 시뮬레이션

이제, 알루미늄입자가 기존 3차원 도메인에 추가되어 HMX보다 상대적으로 더 오랜 시간 연소하고 Heterogeneous 고에너지 물질 시스템에 엔탈피를 지속적으로 공급할 수 있게 도메인을 설정하였다. HMX 다각형과 함께 원형의 추가 알루미늄 입자는 검정색으로 모델링되어 그림 5.3에 나타나 있다. 알루미늄의 직경은 20에서 $40 \mu\text{m}$ 로 배치되도록 설정하였고, 1500m/s 의 표면 충격 속도가 아랫면에 적용되었다.

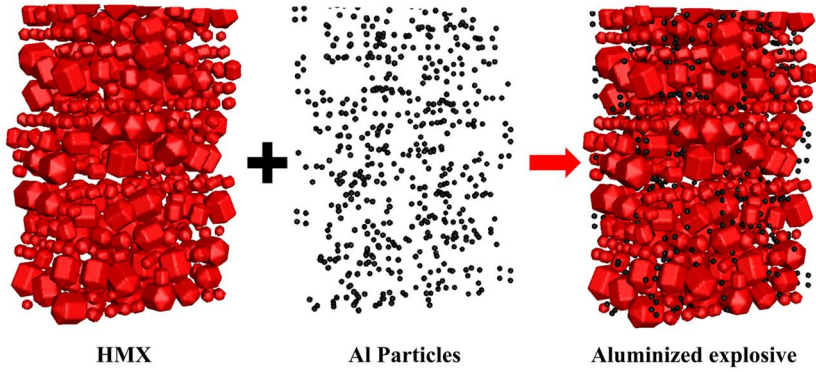


그림 5.3 3차원 3물질 복합화약 해석 초기조건(HMX, Al, 바인더)

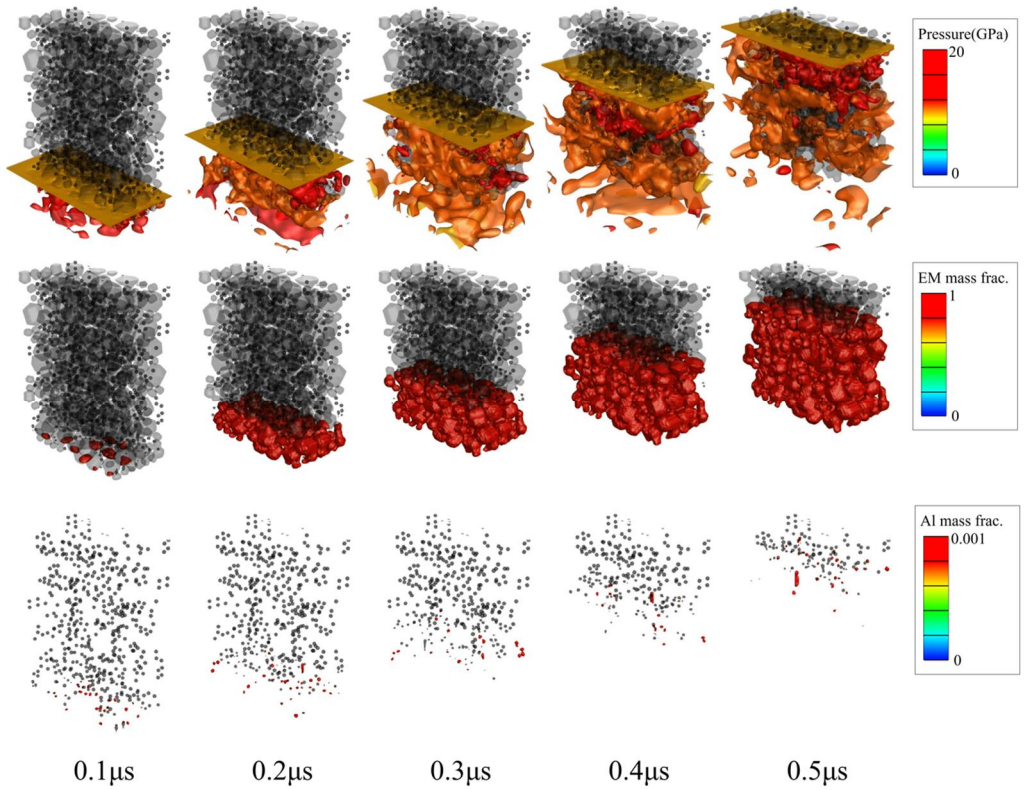


그림 5.4 3차원 3물질 복합화약의 압력, 질량분율 해석결과

그림 5.4에서 볼 수 있는 것과 같이, 평면 압력과 표면의 형성은 바인더 물질의 압축, HMX의 연소, 압축 및 rarefaction 상호작용으로 인해 발생하는 것으로 나타났다. 3차원 도메인에서 각 알루미늄의 극심한 변형으로 산란된 알루미늄입자의 점화 확인할 수 있다. 알루미늄 입자 들은 초기에 압축되어 반응 프론트를 통해 위쪽으로 이동하면서 연소되고 레벨이 붕괴되면서 사라지게 된다.

제 6 장 결 론

멀티스케일 다 물질 해석 기법을 활용하여 금속입자 함유 고에너지 물질의 연소/폭발 해석을 진행하였다. 물질 경계면의 효과적인 처리를 위해 레벨 셋 알고리즘과 함께 압축성 오일러리안 유체 역학 방법을 사용하여 반응성 유동 및 충격파-입자 상호작용을 해석하였다. 유체 역학 시뮬레이션은 condensed phase 유동과 고체 입자들의 변형 사이 상호작용을 통해 양방향으로 수행되었다. 충격파-입자 상호작용만 아니라 다 물질, 다상 유동을 처리하기 위한 본 알고리즘의 적합성은 일련의 알려진 Cold flow 솔루션 및 참고 문헌을 통해 검증되었다. 본 연구는 기본 폭발성 물질(RDX, HMX)의 폭발(Detonation), 반응 금속 첨가물(Al, Cu)의 폭연(Deflagration) 및 물질 결합체로 사용된 바인더의 압축 등 여러 물질의 열적/구조적 거동을 성공적으로 해석하였다. 초기 고폭화약의 폭발 및 알루미늄의 후 연소 반응을 메조스케일에서 해석하여 금속 첨가물에 따른 열압 효과를 수치적으로 모사하였다. 또한 연속체 모델과 Grain 모델에서의 비교 분석을 통해 메조스케일 해석기법의 중요성을 분석하였으며 기존 2물질 해석을 3물질로, 2차원 해석을 3차원으로 확장하여 충격파 전달 폭발이 일어날 때 고에너지물질 내부 개별 물질의 연소 및 유동의 압축, 팽창을 살펴보았다.

참고문헌

- [1] D.L. Frost, “Heterogeneous/particle-laden blast waves”, *Shock Waves*, Vol. 28, No. 3, 2018, pp. 439–449.
- [2] D.V. Ritzel, R.C. Ripley, S.B. Murray and J. Anderson, “Near-field blast phenomenology of thermobaric explosions”, 26th International Symposium on Shock Waves, Vol. 1, 2009, pp. 305–310.
- [3] Y. Mehta, C. Neal, K. Salari, T.L. Jackson, S. Balachandar, and S. Thakur, “Propagation of a strong shock over a random bed of spherical particles”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 839, 2018, pp. 157–197.
- [4] C. Lu, S. Sambasivan, A. Kapahi and H.S. Udaykumar, “Multiscale modeling of shock interaction with a cloud of particles using an artificial neural network for model representation”, *Procedia IUTAM*, Vol. 3, 2012, pp. 25–52.
- [5] D.L. Frost, C. Ornthanalai, Z. Zarei, V. Tanguay and F. Zhang, “Particle momentum effects from the detonation of heterogeneous explosives”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 101, 2007, 113529.
- [6] F. Zhang, K. Gerrard and R.C. Ripley, “Reaction mechanism of aluminum-particle-air detonation”, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 25, No. 4, 2009, pp. 845–858.
- [7] W. Kim, M. Gwak and J.J. Yoh, “Formation of double front detonations of a condensed-phase explosive with powdered aluminium”, *Combustion Theory and Modelling*, Vol. 22, No.

- 2, 2017, pp. 1–16.
- [8] B. Kim, J. Park, K. Lee and J.J. Yoh, “A reactive flow model for heavily aluminized cyclotrimethylene–trinitramine”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 116, No. 2, 2014, 023512.
- [9] C. Kim, J. Moon, J. Hwang, M. Lai and K. Im, “Afterburning of TNT explosive products in air with aluminum particles”, 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA 2008–1029, 2008, pp. 1–11.
- [10] Y. Mehta, T.L. Jackson, J. Zhang and S. Balachandar, “Numerical investigation of shock interaction with one-dimensional transverse array of particles in air”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 119, 2016, 104901.
- [11] Y. Ling, A. Haselbacher, S. Balachandar, F.M. Najjar, and D.S. Stewart, “Shock interaction with a deformable particle: Direct numerical simulation and pointparticle modeling”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 113, 2013, 013504.
- [12] V.M. Boiko, V.P. Kiselev, S.P. Kiselev, A.N. Papyrin, S.V. Poplavsky and V.M. Fomin, “Shock wave interaction with a cloud of particles”, *Shock Waves*, Vol. 7, 1997, pp. 275–285.
- [13] F. Zhang, “Detonation in reactive solid particle–gas flow”, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 22, No. 6, 2006, pp. 1289–1309.
- [14] B. Kim, S. Jang and J.J. Yoh, “A full scale hydrodynamic simulation of energetic component system”, *Computers and Fluids*, Vol. 156, 2017, pp. 368–383.
- [15] K. Kim, M. Gwak and J.J. Yoh, “An enhanced particle

- reseeding algorithm for the hybrid particle level–set method in compressible flows”, *Journal of Scientific Computing*, Vol. 65, 2015, pp. 431–453.
- [16] K. Kim and J.J. Yoh, “Shock compression of condensed matter using multimaterial reactive ghost fluid method”, *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 49, 043511, 2008, pp. 1–16.
- [17] G.R. Johnson and W.H. Cook, “A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures”, *Proceedings of the 7th International Symposium on Ballistics*, Vol. 21, 1983, pp. 541–547.
- [18] T. Hussain, D.G. McCartney and P.H. Shipway, “Bonding between aluminum and copper in cold spraying: story of asymmetry”, *Materials Science and Technology*, Vol. 28, No. 12, 2012, pp. 1371–1378.
- [19] M.A. Trunov, M. Schoenitz, E.L. Dreizin, Effect of polymorphic phase transformations in alumina layer on ignition of aluminum particles, *Combust. Theor. Model.* 10 (2006) 603–623.
- [20] Y. Zhu, K. Mimura, J. Lim, M. Isshiki, Q. Jiang, Brief Review of Oxidation Kinetics of Copper at 350 °C to 1050 °C, *Metall. Mater. Trans. A* 37 (2006) 1231–1237.
- [21] K. Kim, J.J. Yoh, A particle level–set based Eulerian method for multi–material detonation simulation of high explosive and metal confinements, *Proc. Combust. Inst.* 34 (2013) 2025–2033.

- [22] E. Johnsen, T. Colonius, Numerical simulations of non-spherical bubble collapse, *J. Fluid Mech.* 629 (2009) 231–262.
- [23] C.K. Turangan, G.J. Ball, A.R. Jamaluddin, T.G. Leighton, Numerical studies of cavitation erosion on an elastic–plastic material caused by shock–induced bubble collapse, *Proc. R. Soc. A* 473 (2017) 20170315.
- [24] R.C. Ripley, F. Zhang, F. Lien, Acceleration and heating of metal particles in condensed matter detonation, *Proc. R. Soc. A* 468 (2012) 1564–1590.
- [25] B.A. Lieberthal, J.B. Bdzil, D.S. Stewart, Modelling detonation of heterogeneous explosives with embedded inert particles using detonation shock dynamics: Normal and divergent propagation in regular and simplified microstructure, *Combust. Theor. Model.* 18 (2014) 204–241.
- [26] X.C. Mi, L. Michael, E. Ioannou, N. Nikiforakis, A.J. Higgins, H.D. Ng, Meso-resolved simulations of shock–to–detonation transition in nitromethane with air–filled cavities, *J. Appl. Phys.* 125 (2019) 245901

Abstract

A Study on Combustion/Explosion of Heterogeneous Energetic Materials Using Multiscale and Multi-Material Analysis Method

Sanghun Choi

Department of Mechanical and Aerospace Engineering

The Graduate School

Seoul National University

An investigation of shock-particle interactions in reactive flows is performed using Eulerian hydrodynamic method with a hybrid particle level-set algorithm to handle the material interface dynamics. The analysis is focused on the meso- to macro-scale numerical modeling of a granular metalized explosive containing randomly distributed metal particles intended to enhance its blast effect. The reactive flow model is used for the cyclotrimethylene-trinitramine (RDX) and 1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocane (HMX) component, while thermally induced deflagration kinetics describes the aerobic reaction of the metal particles. Then, the shock-induced collapse of metal particles embedded in the condensed phase domain of a high explosive is simulated. Both aluminized and copperized RDX are shown to detonate with a shock wave followed by the burning of the metal particles. The energy release and the afterburning behavior behind the detonating shock wave successfully identified

the precursor that gave rise to the development of deflagration of the metal particles. In addition, the homogeneous model and the heterogeneous model were compared and analyzed on the mesoscale for the detonation phenomenon with the same composition. The expansion to multi-material and three-dimensional simulation allowed accurate calculation of the thermal/structural behavior of grains in the reactive flow of heterogeneous explosive.

Keywords: Hydrodynamic analysis, High explosive, Shock induced detonation, Energetic materials, Mesoscale simulation

Student Number: 2018–28416