

# 직접모사법을 이용한 수직충격파에 관한 연구

## Studies on Normal Shock Waves by Using DSMC

이동대,<sup>1</sup> 박형구,<sup>2</sup> 박찬국<sup>3</sup>

D. D. Lee, H. K. Park and C. K. Park

This paper presents the studies on the variation of shape and thickness of a normal shock wave with Mach number and density by using the most useful numerical technique in rarefied gas regime, DSMC(Direct Simulation Monte Carlo). Calculations are performed for the three different Mach numbers and for one Mach number with different densities. From the obtained results, we find that the shock thickness is decreasing with increasing Mach number, and there are much variations in thickness and shape with decreasing density. Also, there is a noticeable overshoot of the translational temperature near the shock center in the case of a large Mach number.

### 1. 서 론

희박기체영역에서 적용되는 지배방정식은 phase space에서의 분포함수에 대한 보존식인 Boltzmann 방정식[1]인 데, 그 해석적 풀이는 분자간의 충돌을 무시할 수 있는 free molecule영역과 같은 극히 제한된 경우에 한해 가능하고, 그 풀이가 누센수의 크기가 1정도인 천이영역에서는 입자간의 충돌을 고려해 생긴 적분항 때문에 해석적으로나 유한차분법으로는 불가능하다. Boltzmann방정식의 해석, 즉 희박기체영역의 해석은 Monte Carlo방법[2]을 이용하는 DSMC[3-5]가 일반적으로 이용된다. 방법의 특징상 난수가 많이 사용되는 데, 이는 Monte Carlo방법의 특징이고 분자수준에서 본 기체의 확률적인 특징 때문에 분자개개의 상호작용들을 난수로 표현하는 것은 지극히 자연스럽다 할 수 있다. 컴퓨터가 발달되기 이전에는 아주 간단한 문제조차도 반복적인 난수생성 등으로 인해 Monte Carlo방법은 적용되지 못했다. 그러나 컴퓨터의 성능의 발달에 따라 아주 적은 비용으로도 수백만번의 분자충돌과 gas-surface interaction등이 필요한 프로그램도 수행시킬 수 있게 되었다.

DSMC에서는 기체유동을 모사하기 위해 실제유동에서 많은 수의 입자를 대표하는 모사입자 수천개를 계산영역에서 추적하는 데, 시간에 따라 입자가 움직이고, 서로 충돌하고, 경계와 상호작용하면서 변해가는 입자의 속도와 위치 등을 저장한다. 여기에는 다른 입자의 속도분포가 고려중인 입자의 속도분포에 영향을 미치지 않는다고 보는 molecular chaos의 가정과 분자간의 간격이 분자의 직경보다 매우 크다는 dilute의 가정이 들어가게 된다. DSMC계산에서의 시간은 실제유동의 시간과 동일시될 수 있고, 따라서 모든 계산은 비정상상태에서 행해진다고 볼 수 있는 데 정상상태의 해는 시간이 커짐에 따라 얻어지는 asymptotic limit이다. 또한 time step은 최소한 평균충돌시간보다는 짧아야 한다. 계산은 항상 명확히 주어진 초기상태 즉, 진공이나 균일한 평형유동으로부터 출발하므로 아무런 초기가정이나 iteration이 필요치 않다. Cell은 충돌쌍의 선택과 sampling을 위해 필요한 데, cell의 필요 차원수는 phase공간이 아닌 물리공간의 차원수면 되고, 그 크기는 평균자유경로보다 작아야 하며 또 어떠한 유동상태에 대한 구배도 충분히 인식할 수 있을 만큼 작아야 한다. 경계조건은 분포함수가 아닌 gas-surface interaction model에 따른 분자개개의 거동으로 표현된다.

충격파의 구조에 대한 연구는 오래 전부터 하나의 관심 대상이었다. Haviland[6]는 초기조건을 bimodal 분포로 주고 iteration과정을 거쳐 충격파의 형상을 얻어냈고, 최근에는 Muntz[7]와 Fiscoo 등 [8]은 단원자 분자인 아르곤 등을 대상으로 충격파를 고찰하였다.

본 연구에서는 희박기체영역에서의 2차원 평판해석[9]을 기초로 하여 기체가  $N_2$ 인 경우에 대해 밀도 및 마하수에 따른 수직충격파의 구조를 고찰했다.

- 
1. 전남대학교 기계공학과 대학원 박사과정
  2. 전남대학교 기계공학과 조교수(500-757, 광주광역시 북구 용봉동 300번지)
  3. 전남대학교 기계공학과 교수

## 2. 계산절차

i) Upstream과 downstream의 경계를 설정한다. 그리고 upstream의 밀도, 온도, 속도 등의 조건을 주고, downstream의 조건은 Rankine-Hugoniot식[10]으로부터 계산한다.

ii) x방향으로  $u$ , y방향으로  $v$ 의 속도성분을 지닌 균일유동에 대한 Maxwellian분포식[6]을 이용해 upstream과 downstream의 조건에 맞게 초기 유동상태를 설정한다. 이 경우의 Maxwellian 분포식은 아래와 같다.

$$f_0 = \beta_\infty^3 / \pi^{3/2} e^{-\beta_\infty^2((u_x - u)^2 + (u_y - v)^2 + u^2)} \quad (1)$$

위의 분포식을 만족하는 속도성분은 난수 ( $R$ )를 사용해 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} u_x &= u + c_m \sqrt{-\ln R_1} \sin(2\pi R_2) \\ u_y &= v + c_m \sqrt{-\ln R_3} \sin(2\pi R_4) \\ w &= c_m \sqrt{-\ln R_5} \sin(2\pi R_6) \end{aligned} \quad (2)$$

여기서  $\beta_\infty$ 는 최빈속력(most probable speed)의 역수이고,  $u_x$ 와  $u_y$ 는 각각 x와 y방향의 유동속도에 열속력(thermal speed)까지 고려한 것이다.

iii) 시간간격과 각 입자의 속도에 해당하는 만큼 입자를 이동시킨 후 계산영역을 벗어나는 입자는 계산시 고려대상에서 제외시키고, 만약 고체면과의 충돌이 있는 경우는 적절한 gas-surface interaction model에 따라 처리한다. 아직 홀뜨려지지 않은 유동의 특성을 갖는 유동경계를 통해 계산영역에 새롭게 들어오는 입자의 수( $N_i$ )는 아래와 같이 계산한다[1].

$$\frac{\beta_\infty N_i}{n_\infty} = \frac{e^{-s^2 \cos^2 \theta} + \sqrt{\pi} s \cos \theta (1 + \operatorname{erf}(s \cos \theta))}{2\sqrt{\pi}} \quad (3)$$

여기서  $n_\infty$ 는 수 밀도,  $s$ 는 자유유동의 최빈속력에 대한 유동속도의 비,  $\theta$ 는 경계면의 수직벡터와 유동속도벡터가 이루는 각이다. 이렇게 새로 들어온 입자는 시간간격의 난수 비에 해당하는 시간에 맞게 이동시킨다.

iv) 입자를 이동시킨 후에는 격자내의 입자 수 등에 변화가 있으므로 전체 입자를 각 격자별로 정렬해 변화된 격자내의 정보를 저장한다.

v) 각 격자별로 시간간격에 해당하는 만큼의 충돌을 시킨다. 한 격자내에서  $\Delta t$ 동안의 충돌횟수는 다음과 같다[1].

$$\frac{1}{2} N \bar{N} F_N(\sigma_{TC,r})_{\max} \Delta t / V_c \quad (4)$$

여기서  $N$ 은 한 격자내의 모사입자의 수,  $\bar{N}$ 은 모사 입자수의 ensemble average,  $F_N$ 은 하나의 모사입자가 나타내는 실제 입자의 수,  $\sigma_T$ 는 총 충돌단면,  $c_r$ 은 상대속도이다. 모사기법에서 사용되는 모든 입자가 시험입자가 되는 데, 각 입자별로 표적입자는 시험입자가 속한 부격자(sub-cell)에서부터 가장 가까운 부격자로 하나씩 찾아나가게 되는 데 시험입자가 선택된 표적입자와 실제로 충돌을 하는지 여부는 입자간의 충돌확률이 총 충돌단면과 입자간 상대속도를 곱한 값을  $A$ 라고 하면  $A$ 는  $\sigma_{TC,r}$ 에 비례함을 이용하게 된다. 이 사실을 분포함수가 미리 알려져 있지 않는 경우에 사용되는 난수 추출기법인 acceptance-rejection 방법으로 처리하기 위해  $A$ 를  $A$ 의 최대값으로 나눈  $(\sigma_{TC,r}) / (\sigma_{TC,r})_{\max}$ 가 난수보다 크면 충돌한다고 본다. 본 논문에서 사용한 VHS(Variable Hard Sphere)모델[4]의 경우  $\sigma_T$ 는  $\pi d^2$ 이고, 여기서  $d$ 는 상대속도의 함수로 다음과 같이 표현된다[1].

$$d = d_{ref} \left[ \frac{\{2kT_{ref} / m_r c_r^2\}^{\omega-0.5}}{\Gamma(5/2 - \omega)} \right]^{1/2} \quad (5)$$

여기서  $\omega$ 는 온도와 점성계수사이의 계수( $\mu \propto T^\omega$ )이다. 그리고 충돌 후의 입자속도는 사용한 입자간 충돌의 모델링에 따라 달라지게 된다. VHS 충돌모델의 경우 산란각의 분포는 HS(Hard Sphere) model 처럼  $0 \sim 2\pi$ 사이에서 균일하게 분포하나 실제 기체의 점성계수에 대한 온도의 관계식에 맞도록 충돌단면이 상대속도의 함수가 된다.

x) 필요한 데이터를 샘플링한다. 예를 들어 면의 특성치인 압력과 전단응력 등을 구하기 위해서는 면에 수직한 방향의 운동량과 평행한 방향의 운동량을 샘플링한 후 샘플링 시간으로 나눈다. 그리고 유동장 특성치인 밀도나 온도 그리고 속도를 구하기 위해서는 각 격자의 입자의 갯수와 평균속도 등의 정보를 샘플링한다.

### 3. 결과 및 고찰

충격파는 연속체 영역내에서는 불연속으로 여겨지고 온도, 밀도, 압력, 온도 등의 비는 Rankine-Hugoniot관계식으로부터 주어진다. 그러나 사실은 충격파는 유한한 두께를 가지고 있고 그 형상 등은 기체의 물성치에 의존한다. 충격파의 두께  $L$ 은 충격파내의 최대밀도 구배로 전체 밀도 변화를 포함하는 데 필요한 거리로 정의된다. 결과에서  $y$ 축에 대한 normalization은 밀도의 경우  $\hat{\rho} = (\rho - \rho_1) / (\rho_2 - \rho_1)$ , 온도의 경우는  $\hat{T} = (T - T_1) / (T_2 - T_1)$ 이다. Fig. 1-2에 사용한 기체가  $N_2$ 이고 upstream 마하수가 각각 2와 9인 경우에 대해 밀도와 온도 형상을 나타내었다. 여기서 사용한 수밀도(number density)는  $1.0 \times 10^{22}$ 이다. 그림에서 보는 것처럼 마하수가 증가됨에 따라 충격파의 두께가 얇아짐을 알 수 있다.

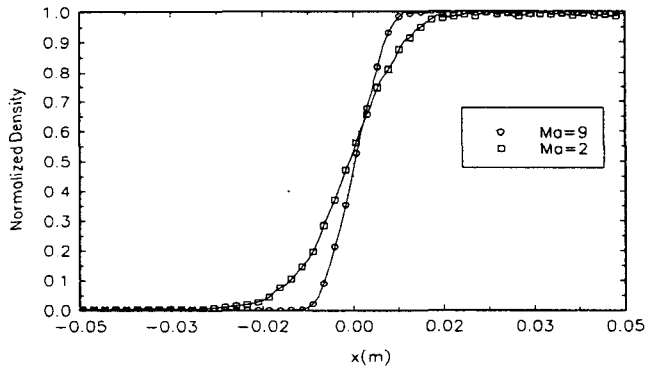


Fig. 1 Density Profiles with Mach Numbers

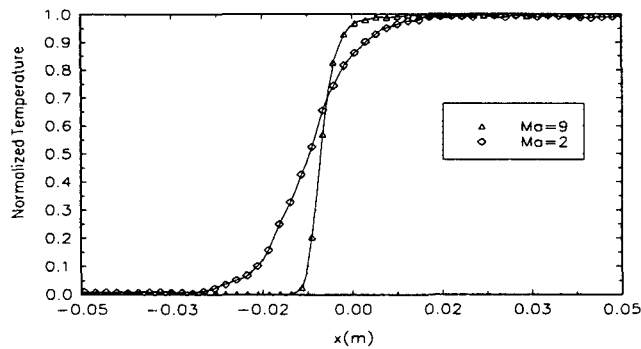


Fig. 2 Temperature Profiles with Mach Numbers

Fig. 3-4는 일정 마하수에서 밀도변화에 따른 충격파의 변화를 보이고 있다. 마하수는 5를 택하였고, 각각의 수밀도( $n$ )는  $n1(=1.0 \times 10^{22})$ 와  $n2(=1.0 \times 10^{20})$ 이다. 밀도의 변화에 따라 그 형상 및 두께가 상당한 차이를 보이고, 그림에서 보는 것처럼 밀도가 증가하면 충격파의 두께는 급격히 감소한다.

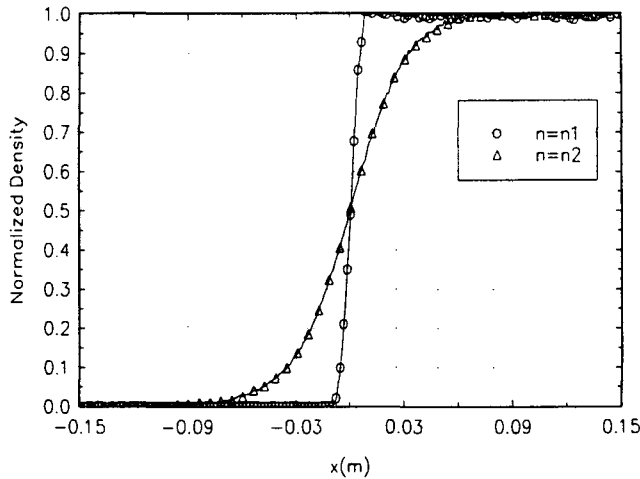


Fig. 3 Density Profiles with Various Number Densities(Ma=5)

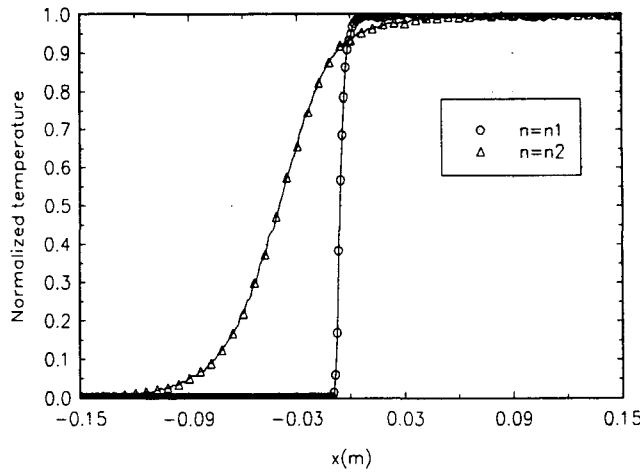


Fig. 4 Temperature Profiles with Various Number Densities(Ma=5)

Fig. 5에는 내부 자유도에 따른 영향을 보이기 위해, 마하수가 5이고 수밀도가  $1.0 \times 10^{22}$ 인 경우에 온도 성분에 대한 그림을 그렸다. 여기서 각각의 온도는 다음과 같이 즉, translational 온도  $T_{tr}$ 은  $(3/2)RT_{tr} = e_{tr} = (1/2)\bar{c}^2$ 로 정의된다. 또한 rotational 온도  $T_{rot}$ 은  $(1/2)\zeta_{rot}RT_{rot} = e_{rot}$ 로 정의된다. Overall 온도는 위의 온도의 가중치 평균으로, 즉  $T_{ov} = (3T_{tr} + \zeta_{rot}) / (3 + \zeta_{rot})$ 로 정의되는 값이다. 그림에서 보면 충격파의 중앙부에서는 회전에너지에 의한 온도 기여가 낮아 translational 온도의 overshoot를 볼 수 있다. 하지만 마하수가 2인 경우에는 이런 overshoot를 볼 수 없다.

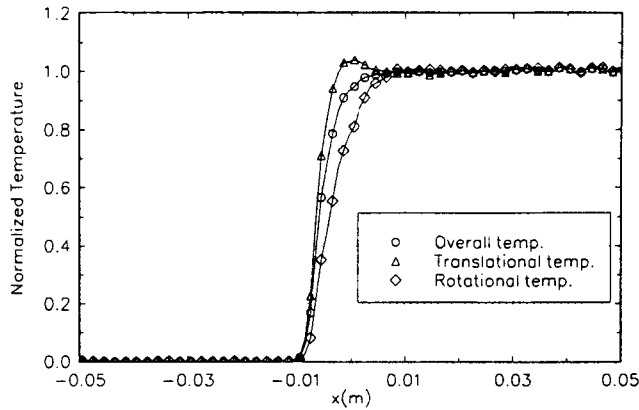


Fig. 5 Translational, Overall and Rotational Temperature Profiles(Ma=5)

#### 4. 결론

충격파의 형상 특히, 충격파의 두께는 연속체 영역에서는 해석을 위해 불연속으로 가정하지만, 결과에서 보는 것처럼 연속체에 가까운 영역이나 좀 더 희박한 영역에서는 유한한 두께를 보이며, 그 두께는 upstream 마하수가 커지며, 밀도가 높아짐에 따라 줄어드는 경향을 보였다. 또한 마하수가 큰 경우에는 translational 온도의 overshoot 현상을 볼 수 있다.

#### 참고문헌

- [1] Bird, G. A., *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, Oxford, 1994
- [2] Kalos, M. H. and Whitlock, P. A., *Monte Carlo Methods*, John Wiley & Sons, New York, 1986, Chap. 3
- [3] Bird, G. A., "Monte Carlo Simulation of Gas Flows," *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 10, 1978, pp. 11-31.
- [4] Bird, G. A., "Monte Carlo Simulation in an Engineering Context," *AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 74, 1981, pp. 239-255.
- [5] Bird, G. A., "Direct Simulation of Gas Flows at the Molecular Level," *Communications in Applied Numerical Methods*, Vol. 4, 1988, pp. 165-172.
- [6] Haviland, J. K., "The Solution of Two Molecular Flow Problems by the Monte Carlo Method," *Methods in Computational Physics*, Vol. 4, 1965
- [7] Erwin, D. A. and Muntz, E. P., "Nonequilibrium Gas Flows: A Detailed Validation of Monte Carlo Direct Simulation For Monatomic Gases," *Physics of Fluids A*, Vol.3, No. 4, 1991
- [8] Fisco, K. A. and Chapman, D. R., "Comparison of Burnett, Super-Burnett and Monte Carlo Solutions for Hypersonic Shock Structure," *AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 118, 1989
- [9] 이동대, 박형구, 박찬국 "직접모사법에 의한 희박기체영역내의 평판주위 유동장 및 공력학적 특성 해석," 한국항공우주학회 논문집, 제23권, 제5호 게재 예정
- [10] Saad, M. A., *Compressible Fluid Flow*, Prentice Hall, New Jersey, 1993