

예조건화 시간차분을 통한 화학반응유동의 효율적 계산

김성룡* · 정인석** · 최정열***

A Preconditioned Time Method for Efficient Calculation of Reactive Flow

Seong-Lyong Kim, In-Seuck Jeung and Jeong-Yeol Choi

Key Words: Preconditioned time step, Stiff ODEs, Gauss-Seidel preconditioning

Abstract

The Equations of Chemical kinetics are very stiff, which forces the use of an implicit scheme. The problem of implicit scheme, however, is that the jacobian must be solved at each time step. In this paper, we examined the methodology that can be stable without full chemical jacobian, This method is derived by applying the different time steps to the chemical source term. And the lower triangular chemical jacobian is derived. This is called the preconditioned time differencing method and represents partial implicit method. We show that this method is more stable in chemical kinetics than the full implicit method and that this is more efficient in supersonic combustion problem than the full jacobian method with same accuracy. .

1. 서 론

화학반응 유동의 수치해석은 화학반응의 경직성 때문에 내재적 기법이 많이 사용된다. 그러나, 내재적 기법은 자코비안을 구하는 과정과 그 역행렬을 구해야 하는 단점이 있다. 만약 수치기법이 대

류항이나 점성항을 내재적으로 처리하면 화학반응 자코비안이 대류항과 점성항 자코비안의 연산에 포함되므로 추가적인 연산이 소요되지 않는다. 그러나, 화학반응항만을 내재적으로 취하는 일점 내재적 방법(point implicit)[1]이나 근사 플럭스 자코비안을 이용하여 행렬연산을 제거한 LUSGS(Lower Upper Symmetric Gauss-Seidel Scheme) 수치기법[2]에서는 추가적인 행렬연산을 필요로 한다. 특히 LUSGS 수치기법의 경우 화학반응 자코비안은 행렬연산을 필요로 하지 않는 LUSGS 고유의 장점을 잃게 만든다. 따

* 서울대학교 항공우주공학과

** 서울대학교 항공우주공학과

*** 부산대학교 항공우주공학과

라서 내재적 기법의 안정성을 유지하면서 효율적인 화학반응 계산이 가능한 수치기법이 필요하다.

최근까지 화학반응 및 화학반응 유동 계산에서 자코비안을 근사화하는 시도는 있었다[3,4,5,6]. Eberhardt와 Imlay[3]는 화학반응 자코비안의 대각항을 각 행의 L_2 노름(norm)으로 대치하고 비대각 성분은 0으로 하는 대각화 자코비안을 도입한 바 있다. 그들은 대각화 자코비안을 일점 내재적 방법[1]과 LUSGS 수치기법[2]에 결합하여 획기적인 계산시간의 단축을 보였다. 그러나, 대각화 화학반응 자코비안은 정상상태의 극초음속 화학반응 유동에 제한적으로 적용되었다.

화학반응과 같은 생성항 유동의 수치기법에 대한 보다 해석적인 방법으로 Merkle 등[4]이 생성항의 시간적분을 생성항 자코비안의 특성치에 따라 분리하는 방법을 제시한 적이 있다. 즉, 생성항 자코비안 특성치 부호에 따라 자코비안을 분리하여 시간 전진을 내재적, 외재적 접근을 동시에 사용하는 방법이다. 그러나, 자코비안 분리 방법은 특성치와 특성벡터를 반복계산마다 구해야하는 어려움이 있다.

연소화학반응은 아니지만 성층권 대기 화학반응 연구에서 외재적 기법의 효율성과 내재적 기법의 안정성을 동시에 획득하려는 시도들이 있다[5,6]. Aro와 Rodrigue[5]는 성층권의 대기화학 반응(atmospheric kinetics)에서 화학반응, 대류항, 점성항을 따로 분리하는 연산자 분리(operator splitting)을 통해 생성된 일차 상미분 방정식 형태의 화학반응 계산에 예조건화 시간 차분(preconditioned time stepping)을 적용하여 안정적이며 효율적인 수치기법을 개발하였다. 예조건화 시간차분은 생성항의 시간단계를 화학종에

따라 다르게 적용하여 계산하는 방법으로, 시간선택에 따라 자코비(Jacobi) 혹은 가우스자이델(Gauss-Seidel) 예조건화 시간차분[5]으로 나뉘어진다. 예조건화 시간 차분 방법은 내재적 기법보다 안정적이며 효율적인 계산을 가능케하고, 화학반응 자코비안 없이 연산이 이루어질 수도 있으며[4], 뉴턴(Newton) 선형화를 통해 대각항 자코비안으로 연산이 가능해진다[6]. 그러나, 예조건화 시간차분 기법이 연소화학반응에서 검증된 바는 없다.

이에 본 연구에서는 예조건화 시간 차분 방법을 연소화학반응에 적용하여 그 정확성 및 효율성을 검증하고자 하고, 이의 수치적 의미를 밝히겠다. Aro와 Rodrigue[5]는 예조건화 시간차분법이 LSODE[7]에 포함된 BDF(backward differencing formula)기법보다 효율적이며 안정적이라 하였지만, 이는 평형상태까지의 결과일 뿐 연소화학반응에서 중요한 연소지연시간(ignition delay) 등 중간과정의 정확성은 보장되지 않는다. 또한, 예조건화 시간 차분법은 하삼각행렬 형태의 자코비안이 유도되는 부분 내재적 방법임을 밝히고, LUSGS에 적용될 경우 많은 연산시간의 절약을 가져올 수 있음을 밝히겠다.

2. 무차원 화학반응

2.1. 부분 내재적 근사 화학반응 자코비안의 유도

상미분 방정식의 경직성은 방정식의 특성치 차이가 매우 커서 독립변수의 차분 간격에 심각한 제한이 가해지는 경우를 말한다. 방정식의 경직성을 정의하는 특성치는 자코비안의 특성치 중 실수부 부호가 음수인 항들의 실수부 절대값으로서 결정된다[8]. 실수부의 부호가 양수

인 특성치는 경직성의 정의에 포함되지 않지만 해의 정확성을 위해 차분간격에 제한을 가한다[8]. 그런데, 화학반응 자코비안의 특성치는 각 화학종의 생성과 소멸 시간스케일의 역수를 의미하므로 결국 방정식의 경직성은 화학종 생성과 소멸 시간스케일의 차이를 의미한다.

화학반응에 의한 화학종의 생성과 소멸은 반응에 따라 서로 다른 반응시간을 갖지만 화학종의 전체 생성량은 각 화학반응이 영향이 더해져 나타난다. 그러므로 화학반응 자코비안에서 화학종이 관련된 여러 화학반응 단계 중 반응시간이 가장 짧은 화학반응이 지배적인 영향을 미친다. 따라서 화학반응 자코비안을 근사화하여 방정식의 경직성을 완화함과 동시에 계산상의 이득을 취하고자 한다면 화학반응의 시간스케일에 따라 짧은 시간스케일의 화학반응에 관련된 화학종은 내재적으로, 긴 시간스케일의 화학반응에 관련된 화학종은 외재적으로 고려할 수 있다.

그런데 같은 혼합기의 화학반응이라도 화학반응이 일어나는 위치의 온도, 압력, 화학종 분포도 등에 따라 지배적인 화학반응은 달라지고, 화학반응 모델의 반응상수도 이에 따라 역시 변화하므로 각 반응의 시간스케일도 다르게 나타난다. 이는 화학반응을 계산할 때마다 각 반응의 시간스케일의 크기를 판단해야하는 부담을 안겨준다. 이에 대한 대안으로 각 화학반응의 반응시간을 판단하는 대신 짧은 시간스케일의 화학반응에 빈번하게 관여하는 화학종을 내재적으로, 그렇지 않은 화학종에 대해서는 외재적 처리를 고려할 수 있다. 예를 들어 수소-산소 화학반응에서 HO₂, H₂O₂ 등의 반응기(radical)들은 화학반응이 활발한 곳에서 많이 발견되고 O₂, H₂, H₂O 등과 같은

안정적인 화학종은 화학반응이 활발하지 않은 곳에서도 많이 발견되므로 HO₂, H₂O₂의 생성과 소멸과정은 내재적으로 O₂, H₂, H₂O는 외재적으로 접근하는 것이다. 이러한 접근법을 화학반응을 나타내는 비선형 상미분 방정식을 통해 수식화 하겠다.

화학반응은 상태방정식과 일차의 상미분 방정식 형태이다.

$$\frac{dY_i}{dt} = f_i(Y_1, \dots, Y_{NS+1}), \quad (1)$$

$$i=1, NS+1$$

Y_i 는 화학종과 에너지 방정식의 독립변수를 의미한다. 식(1)의 완전 내재적 기법은 좌변의 시간미분항을 오일러 후방 차분법으로 차분하는 형태를 말한다. 그러나, 화학반응항의 시간단계를 화학종에 따라 (n+1) 시간단계와 (n) 시간단계를 혼합하는 부분 내재적 접근을 고려해보자. 이와 같은 시간선택을 예조건화 시간 차분이라 한다[5].

$$\frac{dY_i}{dt}^{n+1} = f_i(\dots, Y_i^{n+1}, Y_{i+1}^n, \dots) \quad (2)$$

식 (2)의 우변에서 (n+1) 시간단계 변수를 많을수록 내재적 기법에 가까워지고 (n) 시간단계 값이 많으면 외재적 기법에 가까워진다. 그런데 식(3)과 같이 i 번째 화학종까지 (n+1) 시간단계를 취하고 그 이후의 변수는 (n) 시간단계를 취하고 뉴턴 선형화 과정을 거친다면 하삼각행렬의 근사 자코비안을 유도할 수 있다.

$$\frac{\Delta Y_i}{\Delta t} = f_i(Y_j^n) + \sum_{j=1}^i \frac{\partial f_i}{\partial Y_j} \Delta Y_j \quad (3)$$

식 (3)은 뉴턴 선형화 가우스-자이델 예조건화 시간차분이라 한다. 만약 식(3)에서 뉴턴 선형화를 거치지 않고 화학반응

을 순차적으로 구하면 가우스-자이텔 예 조건화 시간선택과 같은 형태이다. 그러나, 연소화학반응 유동은 화학반응항만을 따로 계산하는 연산자 분리 기법이 적용되기 곤란하므로 식(3)과 같이 자코비안을 유도하여 사용하여야 한다.

식 (3)에서 후방 화학종은 내재적 형태에 가깝고 전방의 화학종은 외재적 형태에 가깝다. 따라서 앞에서 언급한 대로 방정식의 후방에는 반응기들을, 전방에는 안정적인 화학종을 위치시킨다면 화학종에 따른 내재적 효과를 거둘 수 있을 것이다.

이와 같은 부분 내재적 기법을 정적 화학반응에 적용하여 완전 내재적 기법, 외재적 기법 및 Eberhardt와 Imlay[3]의 대각화 자코비안 기법과 비교하여 그 정확성, 안정성 그리고 효율성을 검증하였다.

2.2. 수소/산소 혼합기의 정적화학반응

지배 방정식의 독립변수인 화학종의 몰율(molar concentration) 순서는 H_2 , O_2 , H , O , OH , HO_2 , H_2O , H_2O_2 로 하였으며 지배방정식은 다음과 같다.

$$\frac{dC_i}{dt} = \omega_i = \sum_{k=1}^{NR} (\nu_{i,k}'' - \nu_{i,k}') \left\{ k_{fk} \prod_{j=1}^{NS} C_j^{\nu_{j,k}'} - k_{bk} \prod_{j=1}^{NS} C_j^{\nu_{j,k}''} \right\} \quad (4)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{R_u T \sum_i \omega_i - \sum_i h_i \omega_i}{\sum_i C_i (c_{p,i} - R_u)} \quad (5)$$

하삼각 형태의 부분 내재적 자코비안과 대각화 자코비안, 그리고 완전한 형태의 자코비안을 비교하기 위하여, 기준이 되는 수치기법으로 2차의 시간정확도와 뉴턴 내부반복을 이용한 완전 내재적 기법을 개발하였으며 GRI-Mech

Calculator[9]와 비교하여 정확성을 확인하였다. 화학반응 자코비안은 해석적 자코비안과 수치적 자코비안을 모두 사용하였으며 결과는 동일하였다. 기준 수치기법을 제외한 방법은 1차의 시간 정확도에 내부반복은 수행하지 않았다.

정적연소의 초기조건으로 10기압의 초기압력과 1,200K의 초기온도를 사용하였으며 수소와 산소가 이상혼합비일 때의 반응을 시간에 따라 구하였다. 이 조건에서 점화지연 시간에서 격렬한 화학반응 통해 불과 2μ sec 동안 모든 화학반응이 완결되므로 경직성과 안정성을 판단하는 데 좋은 조건이라 판단하였다. 화학반응식은 GRI Mech. V.2.11[10]의 8 화학종 25 화학반응 단계를 적용하였으며, 화학종의 정압비열 등의 열역학적 값들은 NASA 다항식 형태의 값들을 사용하였다.

기준 수치기법의 결과를 완전 내재적, 부분 내재적, 대각화 자코비안의 결과와 비교하여 그림 1에 제시하였다. 그림 1(a)는 시간 간격이 $10^{-3}\mu$ sec로서 완전 자코비안과 부분 자코비안의 결과는 동일한데 비하여 대각화 자코비안의 결과는 점화지연시간이 길게 나타났다. 이보다 시간 간격이 큰 그림 1(b)의 결과에서 그림 1(a)와 달리 대각화 자코비안의 결과가 실제에서 상당히 벗어났고 부분 자코비안 결과도 약간 벗어나 있다. 표 1에 시간 간격을 다양하게 분포하여 구한 결과를 제시하였는데 최종적인 결과에는 많은 차이가 있지만 부분 내재적 기법이 가장 안정적인 거동을 하는 것으로 나타났다. 가우스-자이텔 예조건화 시간차분을 이용한 Aro와 Rodrigue의 Chappmann 대기화학 반응에서 확인된 결과와도 일치한다.

그림 1(c)는 근사 자코비안을 이용한

뉴턴 내부반복을 수행한 결과로서 내부 반복 횟수는 10회로 제한하고 오차한계는 10^{-8} 인 결과이다. 완전 자코비안, 부분 자코비안, 대각화 자코비안 모두 일치된 결과를 보였다. 표 2는 오차한계를 다르게 한 경우 각 자코비안의 결과로서 오차한계가 낮으면 근사 자코비안이 효율적이지만, 오차한계를 높일수록 완전자코비안이 효율적인 것으로 나타났다. 이는 대각화 자코비안 형태로 나타나는 Kregel의 방법에서 확인된 사실이다[8].

2.3. 선형 안정성 해석

표1에서 부분 자코비안이 안정적으로 나타나지만 선형 안정성 해석을 통하여 이를 확인할 수 있다. 비선형방정식의 선형 안정성 해석은 비선형항을 선형화한 후에 적용되는데, 변수 구배가 심하지 않은 범위내에서 선형화가 의미 있다. 화학반응에 의한 생성향도 심한 비선형이지만 화학반응 자코비안을 이용하여 생성향을 선형화한 후에 각 수치기법의 안정성을 해석할 수 있다.

우변의 생성향은 화학반응 자코비안을 통해 선형화한다.

$$f \approx \frac{\partial f}{\partial Y} Y \approx RY \quad (6)$$

화학반응 생성향은 심한 비선형 항이므로 위와 같은 선형화는 독립변수의 변화가 상대적으로 적은 범위에서 타당성을 갖는다. (n+1)시간단계의 생성향도 화학반응 자코비안으로 선형화되는데 식(3)의 근사 자코비안형태로 선형화한다.

$$f^{n+1} \approx f^n + \frac{\partial f}{\partial Y} \Delta Y \approx f^n + R' \Delta Y \quad (7)$$

따라서 식(1)의 일차상미분 방정식은 다음과 같이 선형화한 식으로 표현된다.

$$\frac{\Delta Y}{\Delta t} \approx RY^n + R'(Y^{n+1} - Y^n) \quad (8)$$

확대행렬을 이용한 $Y^{n+1} = GY^n$ 관계식을 통해 확대행렬 G에 대한 식을 유도한다.

$$(I - \Delta t R)G = I + \Delta t(R - R') \quad (9)$$

같은 과정을 통해 외재적 방법의 확대행렬 G를 유도할 수 있다.

$$G = I - \Delta t R \quad (10)$$

식(13)에서 R'과 R이 같으면 완전 내재적 방법이고, 다르면 부분 내재적 방법이다.

선형안정성해석은 시간 간격 Δt 의 (n) 번째 시간단계 (n+1) 시간단계의 해의 증감을 나타내는 증감행렬(Amplification Matrix, G)의 특성치로 판단한다. 일반적으로 증감행렬 G의 특성치중 최대치로 수치기법의 안정성을 판단하는데 최대치가 1보다 작거나 같아야 안정한 것으로 판단한다.

선형안정성 해석은 그림 1(c)의 반응초기, 반응이 활발한 경우, 반응후의 평형상태를 나타내는 A, B, C 점의 온도, 압력 및 화학종 분포에 대해 수행하였다. 또한 부분 자코비안은 화학종 순서에 따라 자코비안의 효과가 달라지므로 화학종 순서에 따른 안정성을 해석하였다.

그림 2에 화학반응의 진행에 따른 각 수치기법의 선형 안정성 해석 결과를 제시하였다. 화학반응의 초기단계인 A에서는 내재적 방법이 외재적 방법에 비하여 100 배 이상의 안정적인 시간 간격을 갖는다. 실제로 자코비안의 형태에 상관없이 내재적 기법은 $10^{-2} \mu \text{ sec}$ 의 시간 간격까지 안정적이지만 외재적 기법은 약 $10^{-4} \mu \text{ sec}$ 의 시간 간격까지 안정적이다. 그런데 그림 1(a)의 $1 \mu \text{ sec}$ 이상의 시간 간격에서 부분 및 대각화 자코비안이 완전 자코비안의 내재적 방법보다 안정적인데, 이 범위의 시간 간격은 선형화의 한계를 벗어나므로 큰 의미는 없을 것이

다.

격렬한 화학반응이 일어나는 B점에서는 외재적 기법과 내재적 기법이 비슷한 안정성을 보였다. 그런데 화학적 평형이 이루어지는 C점에서는 외재적 기법이 매우 불안정하고 대각화 자코비안의 내재적 기법도 다소 불안정성을 띠고 있다. 이는 외재적 기법이 화학반응이 활발한 B에서 화학적 평형을 이루는 C에 들어가면서 불안정해진다는 것을 의미한다. 실제로 그림 1의 (a)와 (b)에서 나타나듯이 외재적 기법은 점화지연시간을 정확히 예측하고 있지만 반응이 거의 끝나면서 곧바로 발산하였다. 이는 방정식의 경직성이 화학반응의 초기보다는 평형상태로 진행되는 C점에서 더 강하고, 자코비안의 역할이 중요해지는 것을 의미한다.

2.4. 화학종 순서가 부분 내재적 방법에 미치는 영향

부분 내재적 방법은 화학종의 순서에 따라 화학종의 내재적 특성이 달라진다는 특징이 있다. 독립벡터에서 전방에 위치한 화학종은 외재적, 후방의 화학종은 내재적인 특징을 갖게 된다. 따라서 화학종 순서에 따른 수치기법의 안정성이 달라지므로 이를 확인해야 한다. 화학종 순서의 조합은 8!개의 순서가 가능하나 이를 다 확인하는 것은 많은 시간과 노력을 요구하므로 대표적으로 다음과 같은 순서를 정하여 안정성을 확인하였다.

A = {H₂, O₂, OH, H₂O, H, O, HO₂, H₂O₂}

B = {H, O, H₂O₂, HO₂, H₂, O₂, OH, H₂O}

C = {H₂O₂, HO₂, O, H, H₂O, OH, O₂, H₂}

D = {H₂, O₂, H, O, OH, HO₂, H₂O, H₂O₂}

네 종류의 조합에서 B와 C의 순서에는 반응기가 전방에 위치한 반면 A와 D

의 순서는 후방에 위치한 꼴이다. 독립변수 조합을 달리하면서 그림 1(c)의 A, B, C 점의 조건에 따른 안정성 곡선을 계산하여 그림 3에 제시하였다.

화학반응이 활발하게 일어나기 직전인 Point A와 격렬한 화학반응이 진행되는 Point B에서는 그림 3의 (a)와 (b)와 같이 화학종의 순서에 상관없이 비슷한 안정성을 보였다. 이에 비하여 화학반응이 끝나는 Point C에서는 화학종의 순서에 따라 안정성에 차이가 드러난다. 즉 앞의 수식화 과정에서 언급하였듯이 어느 화학종을 보다 내재적으로 취급하는가에 따라 방정식 경직성 완화정도가 달라진다고 할 수 있다. 그림 3(c)의 결과에서 반응기는 후방에 안정적 화학종은 전방에 위치하여야 한다는 사실을 알려주고 있다.

3. 부분 내재적 자코비안의 2차원 화학반응유동에 대한 적용

정상상태의 초음속 연소과정을 수치모사하기 위하여 뭉뚱한 물체 주위의 수소 산소 예혼합기의 비점성 충격과 유도 연소를 수치해석하였다. 수치기법은 참고 문헌[11]에서 사용했던 코드를 사용하였으며 지배방정식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + H \\ = \frac{\partial E_v}{\partial x} + \frac{\partial F_v}{\partial y} + H_v + W \end{aligned} \quad (11)$$

독립변수 Q는 다음과 같다.

$$Q = \{ \rho_1 \ \dots \ \rho_{NS} \ \rho_u \ \rho_v \ e \}^t \quad (12)$$

E, F, E_v, F_v는 각각 x와 y방향의 비점성항과 점성항이고 H, H_v는 축대칭 비점성항과 점성항을 나타낸다. 공간차분은 원시변수의 외삽을 이용한 MUSCL

(Monotone Upstream Centered Schemes for Conservation Laws) 형태의 3차 공간정확도를 갖는 풍상차분법을 도입하였다. 또한, 엔트로피 보정함수로는 Montagne[12]의 엔트로피 고정함수를 이용하였으며 보정계수 ϵ 은 0.3으로 하였다.

$$\psi(\lambda) = \begin{cases} |\lambda| & |\lambda| \geq \epsilon \\ \frac{\lambda^2 + \epsilon^2}{2\epsilon} & |\lambda| < \epsilon \end{cases} \quad (13)$$

시간적분에는 근사 플럭스 자코비안을 이용한 LUSGS 기법을 적용하였으며 정상 상태의 해를 구하는 과정이므로 국소 시간 전진 기법(local time stepping)을 택하였다. 방정식을 일반화된 $\xi - \eta$ 좌표계로 좌표변환하여 계산하였으며 화학반응 자코비안은 참고문헌[11]과 같이 아래반복(Lower Sweep)에만 적용하였다.

$$C_1 \Delta Q_{i,j}^* = -RES_{i,j} - C_2 \Delta Q_{i-1,j}^* - C_3 Q_{i,j-1}^* \quad (14)$$

$$C_1 \Delta Q_{i,j} = C_1 \Delta Q_{i,j}^* - C_4 \Delta Q_{i+1,j} - C_5 Q_{i,j+1} \quad (15)$$

$$RES = \frac{\partial \bar{E}}{\partial \xi} + \frac{\partial \bar{F}}{\partial \eta} - \frac{\partial \bar{E}_v}{\partial \xi} - \frac{\partial \bar{F}_v}{\partial \eta} + \frac{1}{J}(H - H_v) + \frac{1}{J}W \quad (16)$$

$$C_1 = \frac{I}{J\Delta\tau} + x\{\rho(A) + \rho(B)\} + R \quad (17)$$

$$C_2 = -\frac{1}{2}\{A_{i-1} + x\rho(A_{i-1})\} \quad (18)$$

$$C_3 = -\frac{1}{2}\{B_{j-1} + x\rho(B_{j-1})\} \quad (19)$$

$$C_4 = \frac{1}{2}\{A_{i+1} - x\rho(A_{i+1})\} \quad (20)$$

$$C_5 = \frac{1}{2}\{B_{j+1} - x\rho(B_{j+1})\} \quad (21)$$

A, B는 플럭스 자코비안, R은 화학반

응 자코비안, ρ 는 자코비안 최대 특성치를 의미한다. 화학종 화학종의 순서는 무차원 화학반응에서 비교적 높은 안정성을 보인 H_2 , O_2 , H, O, OH, HO_2 , H_2O , H_2O_2 로 하였다.

계산조건은 이론 혼합비의 수소-산소 예혼합 기체에서 마하수 3.55로 비행하는 경우이며, Lehr[13]의 실험 정상상태에 가까운 거동이다. 초기압력과 온도는 각각 186mmHg과 292K이다. 화학반응 모델로는 Evans와 Schexnayder[14]의 6화학종 8단계 반응 모델을 채택하였고, 열역학적 물성치는 정적연소와 같다.

그림 4에 완전 내재적 자코비안, 하삼각형태의 부분 내재적 자코비안과 대각화 자코비안의 결과를 Lehr의 실험과 비교하였다. 완전 자코비안과 부분 자코비안의 결과는 Lehr의 실험과 같이 충격파와 충격파 후면의 연소가 활발하게 일어나는 반응면(reaction front)가 명확하게 나타났다. 그러나, 대각화 자코비안의 결과는 충격파가 폭굉파로 발전하여 격자계의 원방경계를 넘어서 진행하였다. 그러나 식 (13)의 엔트로피 보정계수 ϵ 을 1에 가까운 값으로 하면 충격파와 연소면이 분리된 결과를 얻을 수 있으나 수렴하지는 않았다.

표 3에 격자점, CFL 수, 자코비안을 달리하면서 수렴성을 비교하였다. 어느 경우이던지 부분 자코비안이 15%이상의 연산시간 개선이 나타났다. 만약 자코비안 계산에서 부분 내재적 과정에 적합하게 이루어지면 이보다 더한 연산시간의 개선을 이를 것임을 예상할 수 있다. 또한 대각화 자코비안과는 달리 부분 자코비안은 완전자코비안과 동일한 조건에서 개선된 수렴성을 보였다는 점에서 수치기법의 우세성이 드러난다.

4. 결론

화학반응 자코비안의 부분적 형태를 취하는 부분 내재적 방법을 개발하여 무차원 화학반응과 2차원 초음속 연소에 적용하였다.

무차원 화학반응의 경우 안정성은 완전 자코비안, 부분 자코비안, 대각화 자코비안 모두 비슷하지만, 점화지연시간과 최종온도에서 대각화 자코비안은 많은 차이를 보였고 부분 자코비안은 완전 자코비안과 약간의 차이가 있다. 이는 화학종의 순서를 고려한 부분 내재적 기법이 완전 자코비안의 내재적 기법과 비슷한 안정성과 정확성을 보장하는 것을 의미한다. 또한 정확한 시간 정확도를 위한 뉴턴 내부반복에 각각의 자코비안을 적용할 경우 세 경우 모두 비정상 문제에 대해 동일한 정확도를 보였다.

초음속 충격과 유동 연소과정에서 부분 자코비안은 완전 자코비안과 동일한 정확도를 보였으며 15% 이상의 연산시간 개선이 이루어졌다. 대각화 자코비안은 본 연구의 예에서 정확성이 부족한 것으로 나타났다.

본 연구를 통해 화학반응 자코비안의 화학종의 순서를 고려한 부분 내재적 기법이 완전내재적 기법과 동일한 안정성과 정확도를 보장한다는 것을 확인하였다. 또한 화학종이 많거나, 격자점이 비약적으로 증가하는 3차원 화학반응 문제에서 본 연구의 부분 자코비안 기법이 연산시간을 효과적으로 개선할 것이라 사료된다.

참고문헌

(1) I. Bussing, T. R. A., and Murman, E.

M., "Finite Volume Method for the Calculation of Compressible Chemically Reacting Flows," AIAA Journal, Vol. 27, No. 12, 1989, pp. 1752-1760

- (2) Yoon, S., and Jameson, A., "Lower-Upper Symmetric-Gauss-Seidel Method of the Euler and Navier-Stokes Equations," AIAA Journal, Vol 26, No. 9, 1988
- (3) Eberhardt S., and Imlay, S., "Diagonal Implicit Scheme for Computing Flows with Finite Rate Chemistry," Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol 6., No. 2., 1992. pp.208-216.
- (4) Merkle, C.L., Venkateswaran, S., and Deshpande, M., "Efficient Implementation of Turbulent Modelling in Computational Schemes," Second US. National Congress on Computational Mechanics, Washington, DC., 16-18 August, 1993.
- (5) Aro, C. J., and Rodrigue, G.H., "Preconditioned time differencing for stiff ODEs in diurnal atmospheric kinetics", Computer Physics Communication 92 pp.27-53, 1995
- (6) Aro, C.J., "A Stiff ODE preconditioner based on Newton linearization", Applied Numerical Mathematics 21, pp.135-352, 1996
- (7) Hindmarsh, A.C., "LSODE and LSODI, Two New Initial Value Ordinary Differential Equation Solver", ACM SIGNUM Newsletter, Vol. 15, pp.10-11, 1980
- (8) Oran, E. S., and Boris, J. P., *Numerical Simulation of Reactive Flow*, Elsevier Science Publishing,

- 1997.
- (9) GRI-Mech Calculator 2.22,
http://diesel.me.berkeley.edu/~gri_mech/cal22/
- (10). Bowman, C. T., Hanson, R. K., Davidson, D. F., Gardiner, W. C. Jr., Lissianski, V., Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., and Goldenberg, M.,
http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- (11) Choi, J.-Y., Jeung, I.-S., and Yoon, Y., "Numerical Study of Scram Accelerator Starting Characteristics", AIAA Journal, Vol.36, No.6, 1998, pp.1029-1038.
- (12) Montagne, J.L., Yee, H.C., Klopfer, G.H., and Vinokur, M., "Hypersonic Blunt Body Computation Including Real Gas Effects," NASA TM 10074,1988
- (13). Lehr, H. F., "Experiment on Shock-Induced Combustion," *Astronautica Acta*, Vol. 17, Nos. 4 & 5, 1972, pp. 589-797
- (14). Evans, J. S., and Schexnayder, C. J., "Influence of Chemical Kinetics and Unimixedness on Burning in Supersonic Hydrogen Flames." *AIAA Journal*, Vol. 18, Feb. 1980, pp. 188-193

Jacobian Type	time step [10 ⁸ sec]	Final Temperature [K]	Ignition Delay [10 ⁵ sec]	Elapsed time per unit time step [10 ⁴ sec]
Full Jacobian	1	3803	2.216	2.96
	2	fail	-	-
Partial Jacobian	1	3651	2.306	2.84
	5	3349	2.595	2.84
	10	3183	2.911	2.84
	50	2816	4.655	2.84
Diagonal Jacobian	1	3576	3.066	2.84
	5	3381	5.691	2.84
	10	3362	8.381	2.84
	20	fail	-	-

Table 1. Results of constant volume reaction for different time step and jacobian. Elapsed time is measured on desktop Pentium II processor.

Jacobian type	Logarithm of Error Tolerance	Elapsed time per unit time step [10^{-4} sec]	Final Temperature [K]	Ignition Delay [10^{-5} sec]
Full Jacobian	-4	3.06	3794	2.225
	-6	3.17	3794	2.225
	-8	3.17	3794	2.225
	-10	3.30	3794	2.225
	-12	3.51	3794	2.225
Partial Jacobian	-4	2.96	3802	2.252
	-6	3.17	3802	2.229
	-8	3.40	3802	2.225
	-10	3.73	3802	2.225
	-12	4.05	3802	2.225
Diagonal Jacobian	-4	2.96	3767	2.730
	-6	3.28	3767	2.389
	-8	3.96	3767	2.266
	-10	4.93	3767	2.226
	-12	5.03	3767	2.226

Table 2. Results of constant volume reaction with newton iteration of second order time accuracy, where time step is fixed to 10^{-8} and elapsed time is measured on desktop Pentium II processor.

GRID	CFL	Elapsed Time[sec]		Improvement [%]
		Full Jacobian	Partial Jacobian	
30×60	1	3126	2603	17
	5	3044	2514	17
	10	3029	2571	15
60×120	1	18132	14736	19
	5	8013	6535	18
	10	7968	6476	19
90×150	1	17035	14553	15
	5	17151	14393	16
	10	17384	14515	17

Table 3. Elapsed time to converge of steady shock induced combustion for error tolerance, 10^{-8} , which is measured on Digital Alpha Workstaton.

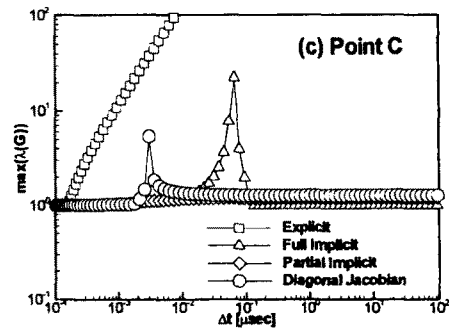
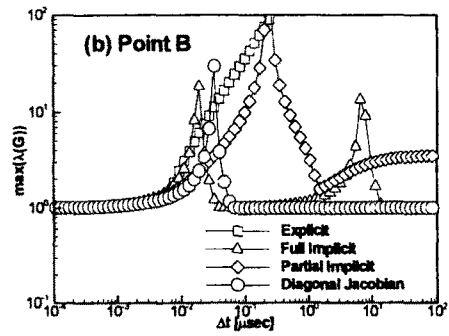
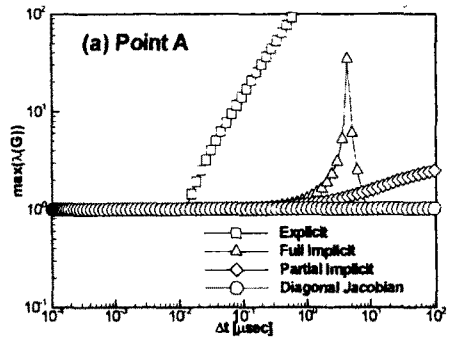
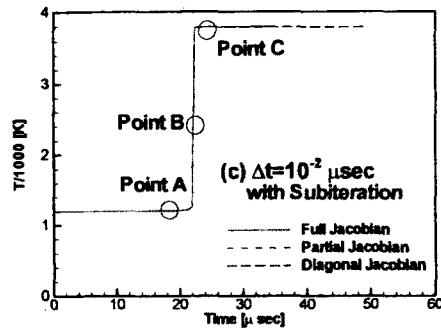
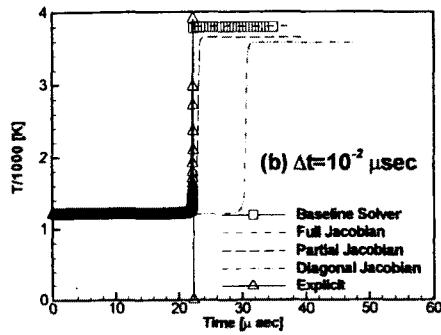
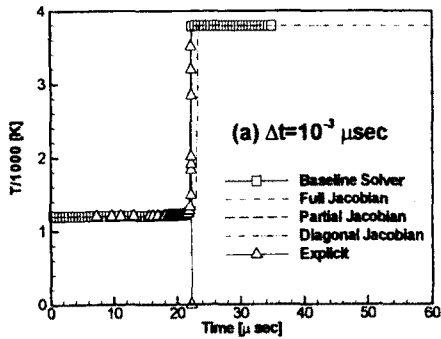


Figure 1. Temperature profile for hydrogen oxygen constant volume reaction (a) time step $10^3 \mu\text{sec}$ (b) time step $10^2 \mu\text{sec}$ (c) time step time step $10^2 \mu\text{sec}$ with subiteration

Figure 2. Amplification Factor of hydrogen oxygen constant volume reaction (a) initial stage of reaction (b) peak stage of reaction (c) chemical equilibrium

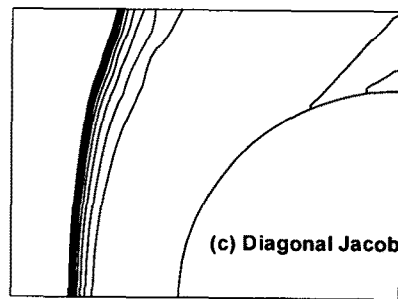
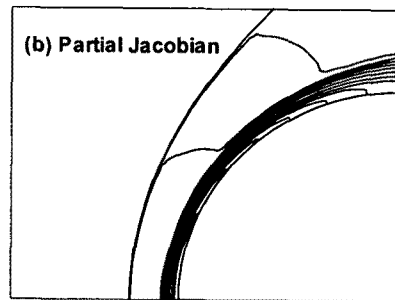
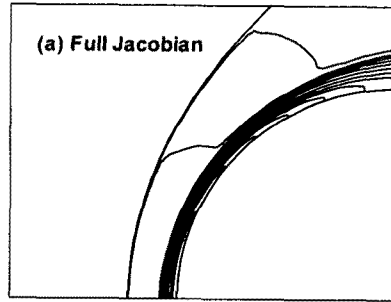
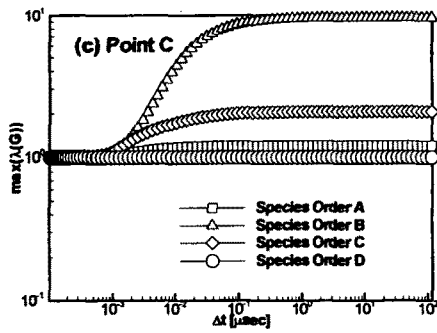
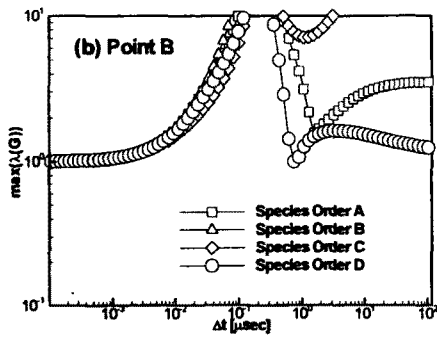
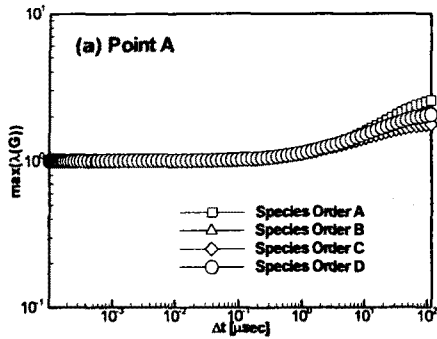


Figure 3. Amplification Factor for the species order (a)initial stage of reaction (b)peak stage of reaction (c)chemical equilibrium

Figure 4. Temperature profile of hydrogen oxygen supersonic combustion ($M=3.55$) for different jacobian