실제기체 상태방정식과 풍상차분기법

Real gas equation of state and upwind scheme

○최정열[1), 김진수[2), 오세종[3)
Jeong-Yeol Choi , Chin-Su Kim, Se-Jong Oh

For the analysis of compressible flow with real gas effect, characteristic form of Roe's Riemann solver was derived again using real gas equation of state and variable specific heat, and it was extended to multi component reactive system. From this study, it is known that some correction should be made for the use of existing numerical algorithm. 1) Sonic speed and characteristic variable should be corrected with real gas effect. 2) Roe's average was applicable only with the assumption of constant properties. 3) Artificial damping term and characteristic variables should be corrected but their influence may not be significant.

1. 서 론

압축성 유동의 해석에 있어 이상 기체의 상태 방정식은 질량, 운동량 및 에너지 보존식에 추가되는 또 하나의 지배 방정식으로써, 압력을 계산하기 위하여 이용되어 왔다. 이상기체 상태 방정식은 압력과, 밀도 그리고 온도 사이의 관계를 선형적인 비례로 규정하는 관계식으로서, 압축성 유체 해석에 아주 편리하게 이용되어 왔으며, 현재 이용되고 있는 여러 가지의 고급 수치 기법은 이상기체 상태 방정식을 기초로 하여 개발되었다. 그러나 이상 기체의 가정을 적용할 수 없는 경우 현재 개발된 수치 기법을 그대로 이용하기에는 무리가 있을 수 있으며, 적용의 한계나 기법의 수정을 고려하여야 한다.

기체 분자를 질점으로 보고 분자간의 상호 작용을 고려하지 않았을 때 얻어지는 이상기체 상태 방정식은 기체의 일반적인 열 해석에 별 무리 없이 이용되어 왔지만, 분자의 크기와 분자간의 힘을 무시할 수 없는 경우에는 이용할 수 없음이 1800 년대에 이미 알려졌다. 분자의 크기와 분자간의 힘을 무시할 수 없는 경우는 분자간의 거리가 매우 작을 때 나타나며, 이는 일반적으로 압력이 높고 온도가 낮은 상태를 의미한다. 그러나 이때의 높은 압력과 낮은 온도는 상대적인 값으로써, 여러 가지의 유체 공학적인 상황에서 나타날 수 있다. 이상기체 가정을 적용할 수 없는 경우는 상변화가 발생하는 임계점 부근에서 일반적으로 나타난다. 즉, 기체의 압축과 팽창 과정 가운데 기체의 응축이 나타날 수 있는 문제들이 압축성 유체 해석 분야에 이상기체 가정을 적용할 수 없는 경우이다. 이러한 대표적인 예로써는 증기를 이용하는 터어빈 등의 문제나, 고체 화합물의 폭발, 고압 연소체계 등이 있으며, 기타 고압 유체 기계 등에서 이러한 예를 찾을 수 있다.

따라서 이러한 문제를 해석하는 경우에는 이상기체 상태 방정식에 근거하여 개발된 수치 기법을 적용하기에 문제가 있을 수 있으며, 현재 이용되고 있는 해석 기법의 적용 가능성 및 적용 한계 또는 해석 기법의 수정을 고려하여야 한다. 이상 기체 상태 방정식에 따르면, 압력과, 밀도 온도 등은 선형적 비례 관계로 나타나 있으며, 이러한 선형적 비례관계는 현재의 수치기법을 개발하는데 아주 유용한 특징이 되어 왔다. 그러나 이상 기체가정을 적용할 수 없는 실제 기체의 경우 압력과 밀도 및 온도와의 관계는 비선형이며, 이러한 비선형성은 그동안의 수치 해법의 개발 과정에서 충분히 고려된 바가 없다.

현재 널리 이용되고 있는 압축성 유체해석 기법들의 가장 큰 특징은 불연속면을 안정하게 포

1) 부산대학교 항공우주공학과 교수 (609-735 부산시 금정구 장전동 산 30번지)
2) 〃 대학원
3) 〃 교수

착할 수 있는 인공점성이며, FVS(Flux Vector Splitting) 과 FDS (Flux Difference Splitting) 등, 풍상 차분 기법 (Upwind Schemes)으로 요약할 수 있는 현재의 수치 기법들은 대부분 음속을 기준으로 차분 방법을 달리 함으로써, 압축성 해석에 필수적인 인공점성을 얻었다. 그러나 실제 기체의 경우 음속은 이상기체의 경우와 상당히 다른 형태를 보이며, 따라서 이에 근거하여 얻어지는 인공점성도 다른 형태를 보일 수 있다.

지난 십여년의 연구를 통해 알려진 여러 가지의 수치적 해법 가운데, 현재 가장 널리 이용되고 있는 방법은 FDS로 알려진 Roe 의 근사 리만 해법으로 여겨진다. 따라서 본 연구에서는 실제 기체의 일반적인 상태 방정식을 이용하여 Roe 의 근사 리만 해법을 다시 유도하여 봄으로써, 현재 이용되고 있는 수치 기법들에서 추가적으로 고려하여야 할 사항이나 수정할 사항을 살펴보기로 한다.

2. 유동장의 지배방정식과 실제기체 상태 방정식

압축성 유체의 해석에서 실체기체 상태방정식의 비선형적 영향을 살펴보기 위해 비점성 지배방정식을 변환된 2차원 일반좌표계에서 정리하면 다음과 같다.

$$\frac{1}{J}\frac{\partial \overline{U}}{\partial t}+\frac{\partial \overline{F}}{\partial \xi}+\frac{\partial \overline{G}}{\partial \eta}=0 \tag{1}$$

$$\overline{U}=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ e\end{bmatrix}\qquad \overline{F}=\frac{1}{J}\begin{bmatrix}\rho U\\ \rho uU+\xi_x P\\ \rho vU+\xi_y P\\ (e+p)U\end{bmatrix}\qquad \overline{G}=\frac{1}{J}\begin{bmatrix}\rho V\\ \rho uV+\eta_x P\\ \rho vV+\eta_y P\\ (e+p)V\end{bmatrix}$$

$$U=\xi_x u+\xi_y v\ ,\quad V=\eta_x u+\eta_y v$$

여기서 ξ_x. ξ_y , η_x , η_y 는 좌표의 변환 관계를 나타내는 metric이며 J는 metric Jacobian이다. 그리고 ρ는 밀도 u,v는 x,y방향의 속도 성분이며 P는 압력 e는 전에너지이다. e값은 단위체적 당의 총에너지로써 내부에너지와 운동에너지의 합으로 표시된다.
이상기체의 경우 압력과 밀도 또는 부피, 온도의 상관 관계로

$$P=\rho RT\ (\text{or}\quad Pv=RT) \tag{2}$$

의 이상기체 상태 방정식으로 가정되어진다. 여기서 R은 기체상수이다. 이 경우 전에너지는

$$e=\rho\varepsilon+\frac{\rho}{2}(u^2+v^2)\ ,\ \varepsilon=\int c_v dT \tag{3}$$

으로 나타나므로 정적비열 c_v가 일정한 경우, 즉 내부에너지가 온도에 비례하는 경우

$$\frac{R}{c_v}\left(e-\frac{\rho}{2}(u^2+v^2)\right)=\frac{R}{c_v}\left(e-\frac{1}{2\rho}((\rho u)^2+(\rho v)^2)\right) \tag{4}$$

으로 변환되어 압력을 유동의 보존 변수와 관계지을 수 있다. (3)식으로부터 그러나 비열이 일정하지 않을 경우 이러한 변환은 불가능하며 온도를 매개변수로 이용하여 (2)의 상태 방정식을 이용하여 압력을 구하여야 한다. 한편 기체 분자의 크기와 분자간의 상호작용을 무시할 수 없는 경우 (2)의 상태 방정식은 전체 체적에서 기체 분자가 차지하는 부피와 상호작용에 의한 힘을 고려하여 수정되어야 하며, 이런 개념에서 처음 제시된 간단한 형태가 van der Waal's 상태 방정식이다.

$$(P+\frac{a}{v^2})(v-b)=RT \tag{5}$$

그러나 보다 구체적인 연구들을 통해 van der Wall's 상태식에 수정이 가해진 다양한 상태식의 형태가 제시되어 왔으며, 일반적으로는 다음과 같은 비리얼 상태식으로 표시되어야함이 알려져 있다.

$$\frac{PV}{RT} = \sigma(v, T) = 1 + \frac{B(T)}{v} + \frac{C(T)}{v^2} + \cdots \tag{6}$$

따라서 일반적으로는

$$Pv = \sigma(v, T)RT \quad \text{또는} \quad P = \sigma(\rho, T)\rho RT \tag{7}$$

의 상태 방정식을 이용하여야 하며 이상기체의 경우 압축성 인자 $\sigma(\rho, T) = 1$임을 알 수 있다. 한편 실제기체를 고려하는 경우 온도만의 함수로 고려하였던 주된 열역학적 변수들도 수정되어야 하며 이 경우 편리한 방법은 각 변수들을 이상기체항과 수정항의 합으로 표시하는 것이다.
이 경우 단위 질량당의 내부에너지 ε은

$$\varepsilon = \int^T c_v dT + \int\left[T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v - P\right]dv = \int^T c_v dT + RT\int \sigma_T \frac{d\rho}{\rho} \quad , \quad \sigma_T = T\left(\frac{\partial \sigma}{\partial T}\right)_v \tag{8}$$

과 같이 수정된다. 따라서 엄밀한 수치기법은 (2), (3) (또는 (4))의 방정식 대신 실제 기체 효과를 고려한 (7), (8)의 방정식을 이용하여 개발되어야 한다.

3. 플럭스 Jacobian 행렬과 고유치 및 음속

풍상 차분 기법의 개발에서 가장 우선하는 과정은 보존 변수벡터 $\overline{U}$와 플럭스 벡터 $\overline{F}$사이의 플럭스 Jacobian 행렬의 계산이다. 압력이 보존변수의 함수로서 외재적(explicit)으로 표시되지 않는 일반적인 경우에 대하여 압력의 도함수를 이용하여 플럭스 Jacobian 행렬을 표시하면 다음과 같다.

$$\overline{A} = \frac{\partial \overline{F}}{\partial \overline{U}} = \begin{bmatrix} -U & \xi_x & \xi_y & 0 \\ -uU + \xi_x P_\rho & \xi_x(u + P_{\rho u}) & \xi_x P_{\rho v} + \xi_y u & \xi_x P_e \\ -vU + \xi_y P_\rho & \xi_y P_{\rho u} + \xi_x v & \xi_y(v + P_{\rho v}) & \xi_y P_e \\ U(P_\rho - H) & \xi_x H + UP_{\rho u} & \xi_y H + UP_{\rho v} & P_e U \end{bmatrix} \tag{9}$$

여기서 matrix는 normalize된 값으로 가정한다. 즉 $\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2} = 1$이며 $P_{()} = \frac{\partial P}{\partial ()}$로서 압력의 미분을 의미한다. 한편 플럭스 Jacobian 행렬의 고유치 행렬은

$$\overline{\Lambda} = \begin{bmatrix} U & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U+a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U-a \end{bmatrix} \tag{10}$$

로 놓을 수 있으며 이 경우 음속 a는 유체역학적으로

$$a^2 = P_\rho + P_e(H - y^2 - v^2) \tag{11}$$

으로 정의 할 수 있다. 이와 같이 유체역학적으로 정의되는 음속은 등 엔트로피 과정을 통하여 열역학적으로 정의되는 음속과 다를 수 있으며 이에 관해서는 뒤에서 다시 논의하기로 한다.

4. 실제기체 효과가 characteristic form의 인공점성항에 미치는 영향

대류항의 차분식은 일반적으로 numerical flux를 이용하여 나타내며, numerical flux는 일반적으로

$$\widetilde{F} = \frac{1}{2}\left[\overline{F(U_r)} + \overline{F(U_L)} - |\delta\overline{F}|\right] \tag{12}$$

으로 표시 할 수 있다.

이 경우 $|\delta\overline{F}|$는 인공점성항을 나타내며 각 수치기법에 따라 다르게 구해진다.
많이 이용되는 FDS기법의 경우

$$|\delta\overline{F}| = |\overline{A}|\delta U = \overline{P}\,|\Lambda|\,\overline{P^{-1}}\delta U \tag{13}$$

로 쓸 수 있으며, 엄밀한 의미에서의 풍상차분을 위하여 특성변수를 이용하여 인공점성항을 표시하는 경우

$$|\overline{\delta F}| = \overline{P}|\Lambda|\overline{\delta W} = \overline{P}|\Lambda|(\overline{P^{-1}}\overline{M}\,\overline{\delta V}) \tag{14}$$

로 표시 할 수 있다. 여기서 P는 A의 고유치 행렬이며 W는 특성변수 벡터, V는 원시변수 벡터이고, $\overline{M} = \overline{\partial U/\partial V}$로써 보존 변수와 원시변수의 관계를 나타내는 행렬이다. 따라서 (9)의 Jacobian 행렬로부터 인공점성항을 유도하여 보면

$$\overline{|\delta F|} = \overline{|U|}\partial w_1 \begin{vmatrix} 1 \\ u \\ v \\ H - a^2/P_e \end{vmatrix} + \overline{|U|}\partial w_2 \begin{vmatrix} 0 \\ \xi_y(\xi_x\partial u - \xi_x\partial v) \\ -\xi_x(\xi_x\partial u - \xi_x\partial v) \\ (\xi_y\partial u - \xi_x\partial v)\cdot(\xi_x\partial u - \xi_x\partial v) \end{vmatrix} + |\overline{U} \pm a|\partial w_{3,4} \begin{vmatrix} 1 \\ u \pm a \\ v \pm a \\ H \pm a \end{vmatrix} \tag{15}$$

$$\partial w_1 = \alpha\partial\rho - \beta\frac{\partial p}{a^2} \quad , \quad \partial w_2 = \rho$$

$$\partial w_{3,4} = \frac{1}{2a^2}\{a^2(1-\alpha)\partial\rho + \beta\partial p \pm \rho a(\xi_x\partial u + \xi_y\partial v)\} \tag{16}$$

$$\alpha = \frac{P_e(H - e_p)}{a^2} \quad , \quad \beta = p_e \cdot e_p$$

따라서 위의 (15),(16)식으로부터 (15)식의 인공점성항의 전반적인 형태는 이상기체의 경우와 별다른 차이가 없지만 (16)식으로 표시되는 특성변수에 추가적인 고려를 하여야 함을 알 수 있다. 한편 U_R 과 U_L의 적절한 평균값으로부터 얻어지는 행렬 A는

$$F_R - F_L = A(U_R, U_L)(U_R - U_L) \tag{17}$$

의 관계를 만족하여야 하는데, Roe는 U 벡터와 F 벡터의 관찰을 통하여 완전기체에 대하여 보조변수 벡터 U와 플럭스 벡터 F가

$$z = \sqrt{\rho}\begin{vmatrix} 1 \\ u \\ v \\ H \end{vmatrix} \tag{18}$$

로 정의할 수 있는 z 벡터의 2차식으로 표시될 수 있음을 보였고, 이를 바탕으로 (17)의 식을 완전히 만족시킬 수 있는 U_R 과 U_L의 평균값(Roe의 평균)을 정의 할 수 있었다. 그러나 이는 완전기체의 경우 (4)의 식과 같이 압력이 보존변수의 식으로써 외재적으로 표시될 수 있음에 근거하여, ① 비열이 온도의 함수이고 ② 압력이 온도와 밀도에 선형적으로 비례하지 않는 실제기체의 경우에는 Roe의 평균이 적용되지 않음을 쉽게 알 수 있다.

그러나 이런 경우에도, 국부적으로 비열이 일정하고 압축성 인자 σ를 일정하다고 가정한다면 Roe의 평균은 (17)식을 만족시키는 행렬 A를 찾기 위한 편리한 방법이다.

한편 실제 기체가 특성변수에 미치는 영향을 살펴보기 위하여 (16)식의 α와 β를 살펴보자

(16)식에서 P_e와 e_P는 각각

$$P_e = \frac{\partial P}{\partial e}\bigg|_{\rho,\rho u,\rho v} \quad , \quad e_P = \frac{\partial e}{\partial P}\bigg|_{\rho,u,v} \tag{19}$$

로 정의되며

$$e_P = \frac{\partial e}{\partial P}\bigg|_{\rho,u,v} = \frac{\partial e}{\partial P}\bigg|_{\rho,\rho u,\rho v} \tag{20}$$

이므로 어느 경우에도 $\beta = p_e \cdot e_p = 1$ 임을 알 수 있으며 이는 실제기체의 상태방정식을 직접 적용하여 구해봄으로써도 증명할 수 있다.

그러나 α의 경우 실제기체 방정식을 적용하되 비열을 일정하다고 가정하는 경우 분자는

$$p_e(H-e_P)= RT\frac{R}{C_v}\frac{(\sigma+\sigma_T)}{\left[(1-\frac{R}{C_v}\int\sigma_T\frac{\partial\rho}{\rho})-\frac{R}{C_v}T\frac{\partial}{\partial T}\int\sigma_T\frac{\partial\rho}{\rho}\right]}$$
$$\times\left(\frac{C_v}{R}\frac{\sigma+\sigma_\rho}{\sigma}+(\sigma+\sigma_T)+\frac{\sigma_\rho-\sigma}{\sigma}\int\sigma_T\frac{d\rho}{\rho}\right) \tag{21}$$

분모는

$$a^2=P_\rho+P_e(H-u^2-v^2)=\sigma RT\left(1+\frac{R}{C_v}\left[\frac{1+\frac{\sigma_T}{\sigma}\left(2-\frac{u^2+v^2}{2RT}\right)}{\left(1-\frac{R}{C_v}\int\sigma_T\frac{d\rho}{\rho}\right)}\right]+\left(\frac{\sigma_T}{\sigma}\right)+\left(\frac{\sigma_\rho}{\sigma}\right)\right)$$

(22) 얻어지며 실제기체의 비선형성을 무시할 수 있는 경우, 즉 $\sigma_t=0$, $\sigma_\rho=0$ 인 경우에만

$$\alpha=\frac{P_e(H-e_\rho)}{a^2}=1$$

이 됨을 알 수 있다. 또한 이 경우 편리한 이용을 위하여 음속을

$$a^2=\Gamma\frac{P}{\rho}$$

로 정의하면

$$\Gamma=1+\frac{R}{C_v}\left[\frac{1+\frac{\sigma_T}{\sigma}(2-\frac{u^2+v^2}{2RT})}{\left(1-\frac{R}{C_v}\int\sigma_T\frac{d\rho}{\rho}\right)}\right]+\left(\frac{\sigma_T}{\sigma}\right)+\left(\frac{\sigma_\rho}{\sigma}\right) \tag{23}$$

로 정의되어야 함을 알 수 있다.

5. 화학반응 유동으로의 확장

실제 기체 효과가 나타나는 많은 경우에 화학 반응이 수반되며 이러한 경우에는 유동의 보존 방정식과 함께 화학 성분의 보존 방정식을 함께 다루어야 한다.

$$\frac{\partial\rho_i}{\partial t}+\frac{\partial\rho_i u}{\partial x}+\frac{\partial\rho_i v}{\partial y}=w_i \tag{24}$$

여기서 $\rho_i=\rho y_i$이고 y_i는 i번째 성분의 질량분율이며 w_i는 i번째 성분의 질량 생성율이다. 이 경우 압력은 Dalton의 분압 법칙으로부터

$$P=\Sigma P_i=\Sigma\sigma_i\rho_i R_i T \tag{25}$$

로 표시할 수 있으며 전에너지는

$$e=\rho\left(\sum_{i=1}^{N}y_i\varepsilon_i+\frac{1}{2}(u^2+v^2)\right)$$
$$\varepsilon_i=\int c_{vi}dT+h_{fi}^{\circ}-RT\int\sigma_{iT}\frac{\partial\rho}{\rho} \tag{26}$$

로 정의된다. 따라서 화학반응 유동의 경우에도 마찬가지 과정을 거쳐 수치 점성항을 유도하여 보면

$$|U|\partial W_1\begin{bmatrix}1\\u\\v\\H-\frac{a^2}{P_e}\\y_i\end{bmatrix}+|U|\partial W_2\begin{bmatrix}0\\\xi_y(\xi_y\partial u-\xi_x\partial v)\\-\xi_x(\xi_y\partial u-\xi_x\partial v)\\(\xi_y u-\xi_x v)(\xi_y\partial u-\xi_x\partial v)\\\partial y_i\end{bmatrix}+|U\pm a|\partial W_{3,4}\begin{bmatrix}1\\u\pm a\\v\pm a\\H\pm aU\\y_i\end{bmatrix}-|U|\begin{bmatrix}0\\0\\0\\-\frac{1}{P_e}\sum P_\rho y_i\sum e_{y_i}\partial y_i\\0\end{bmatrix} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} \partial w_1 &= a\partial P - \beta\frac{\partial P}{a^2} - \frac{1}{a^2}(\sum P\rho_i\partial y_i + P_e\sum e_{y_i}\partial y_i) \\ \partial w_2 &= \rho \\ \partial w_{3,4} &= \frac{1}{2a^2}\{a^2(1-a)\partial\rho + \beta\partial\rho \pm \rho a(\xi_x\partial u+\xi_y\partial v) + \sum P_{\rho_i}\partial y_i + \rho_e\sum e_{yi}\partial yi\} \end{aligned} \quad (28)$$

로 구해진다.

따라서 성분 변화에 따른 특성 변수의 추가점으로 고려해야 함은 물론 인공 점성항 자체에 추가적인 고려가 있어야 함을 알 수 있다.

그러나 질량분율의 정의로부터 $\partial y_i = y_{iR} - y_{iL}$이고, $\sum y_i = 1$이므로

$\sum_{i=1}^{N}\partial y_i = \sum y_{iR} - \sum y_{iL} = 1-1 = 0$이므로 비록 $\sum\rho_{\rho_i}\partial y_i$ 와 $\sum e_{yi}\partial y_i$ 가 절대적으로 0 일수는 없지만 $p_{\rho i}$와 e_{yi}가 유한한 값이라면 이 두 항은 다른 항에 비하여 작은 값을 가지는 항임을 알 수 있다.

6. 결론

실제 기체의 상태 방정식을 고려하여 압축성 유체의 수치해법을 다시 유도한 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

1) 실제 기체의 효과는 음속과 비열비에 가장 크게 나타난다.
2) 압력이 밀도와 온도에 선형적으로 비례하지 않는 실제기체의 경우, 특성 변수 형태의 인공 점성항의 전체적인 형태에는 변화가 없지만 특성 변수 자체는 실제 기체효과를 고려하여 수정하여야한다.
3) 완전 기체가 아닌 경우 Roe의 평균은 성립하지 않으나 국부적으로 비열과 압축성인자가 일정하다고 가정하는 경우 유용하게 이용할 수 있다.
4) 화학 성분 변화를 고려하는 경우 특성 변수는 물론 인공점성항에 추가적인 항을 고려하여야 한다. 그러나 추가되는 항은 상대적으로 작은 값을 가진다.

참고문헌

[1]. Bauer, P., Legendre, J.F., Henner, M. and Giraud, M., Real Gas Effects in Ram Accelerator propellant mixtures: Theoretical Concepts and Applied Thermochemical Codes., *Ram Accelerators* edited by Takayama, K. and Sasoh A., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1998, pp.39-52.

[2]. Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion Part I: Validation," *AIAA Journal*, Vol. 38, No 5, May 2000, in press.

[3]. Grossman, B. and Cinnella, P., Flux Split Algorithms for Flows with Non-equilibrium Chemistry and Vibrational Relaxation, *Journal of Computational Physics*, Vol. 88, 1990, pp. 131-168.

[4]. Hirsch, C., *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Vol. 2 , Wiley , New York , 1990.

[5]. Roe, P. L., Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes, *Journal of Computational Physics*, Vol. 43, 1981, pp. 357-372.

[6]. Shuen, J. S., Liou, M. S. and van Leer, B., Inviscid Flux-Splitting Algorithms for Real Gases with Non-equilibrium Chemistry, *Journal of Computational Physics*, Vol. 90, 1990, pp. 371-395.

[7]. 노승탁, 공업열역학, 1986.