



극초음속 희박유동 해석을 위한 축대칭 다화학종 GH 방정식의 개발

안재완¹, 김종암^{*2}

EVELOPMENT OF AXISYMMETRIC MULTI-SPECIES GH EQUATION FOR HYPERSONIC RAREFIED FLOW ANALYSES

J.W. Ahn¹ and C. Kim^{*2}

Generalized hydrodynamic (GH) theory for multi-species gas and the computational models are developed for the numerical simulation of hypersonic rarefied gas flow on the basis of Eu's GH theory. The rotational non-equilibrium effect of diatomic molecules is taken into account by introducing excess normal stress associated with the bulk viscosity. The numerical model for the diatomic GH theory is developed and tested. Moreover, with the experience of developing the dia-tomic GH computational model, the GH theory is extended to a multi-species gas including 5 species; O₂, N₂, NO, O, N. The multi-species GH model includes diffusion relation due to the molecular collision and thermal phenomena. Two kinds of GH models are developed for an axisymmetric flow solver. By compar-ing the computed results of diatomic and multi-species GH theories with those of the Navier-Stokes equations and the DSMC results, the accuracy and physical consistency of the GH computational models are examined.

Key Words : 전산유체역학(CFD), 희박유동(Rarefied Flow), GH(Generalized Hydrodynamic) 방정식, 다화학종 유동, 극초음속

1. 서 론

희박 극초음속 유동의 해석은 우주 개발과 극초음속 항공기의 개발에 있어 그 중요성이 날로 높아지고 있으나, 낮은 밀도와 분자간의 충돌 감소로 인한 비평형성이 강하게 나타나 수치해석이 쉽지 않다.

희박유동의 특성은 높은 Knudsen 수로 특징지을 수 있으며, 0.01보다 작은 Knudsen 수 영역에서도 기존의 N-S(Navier-Stokes) 방정식은 정확한 해를 도출할 수 없어 여러 가지 대안이 강구되어 왔다. 대표적인 희박유동 해석자들은 크게 BGK(Bhatnagar-Gross-Krook) 방정식, Burnett 방정식 등을 포함하는 '기체역학적' 접근 방법(gas-kinetic method)과 DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)로 대표되는 '분자 동역학적' 방법(molecular dynamic method)의 두 가지로 구분할 수 있다. 이들 중 기체역학적 접근방법은 전산유체역학의 제반

수치기법을 적용할 수 있어 그 구현이 비교적 간단하고 또한 계산 효율이 높다는 장점이 있으나, 정확도 면에서 분자 동역학적 방법에 미치지 못하는 경우가 많다. 후자의 경우는 가장 정확한 결과를 도출한다는 장점이 있으나, 계산 효율이 낮아 매우 희박한 유동에 국한해 사용이 가능하며 다수의 tuning parameter를 설정해 주어야 하므로 정확한 해를 얻기 위해 많은 경험이 필요하다는 단점이 있다.

본 연구의 주제인 GH(Generalized Hydrodynamic) 방정식 [1-2]도 기체역학적 방법에 속하나, 유도 단계에서부터 열역학적 제2법칙을 엄밀히 적용하여 구한 것으로, 비평형 분포함수를 평형 분포함수와 유사한 지수함수 형태로 가정함으로써 항상 양의 생성 엔트로피를 생성할 수 있도록 고안되었다. GH 방정식은 Eu에 의해 단원자 및 이원자 분자에 관한 다화학종 (single species) 기체 방정식이 유도된 바 있으며[1-4], 단원자 분자만을 위한 다화학종(multi-species) 형태가 유도된 바 있다 [1]. 이들 중 단원자 및 이원자 분자의 다화학종 GH 방정식은 Myong에 의해 수치기법으로 구성되어 2차원 유동 문제를 해석하는 데 적용된 바 있다[4]. 이들 다화학종 GH 방정식의 수치기법은 본 저자들의 이전 연구에서 축대칭 형상으로 확

1 학생회원, 서울대학교 대학원 기계항공공학부

2 정회원, 서울대학교 기계항공공학부

* Corresponding author, E-mail: chongam@snu.ac.kr



장되었으나[5], 실질적인 극초음속 유동을 위해서는 화학반응을 고려한 다화학종 GH 방정식의 개발이 필수적이라 할 수 있다. 다화학종 GH 방정식에는 단원자-이원자 분자 간 충돌이 고려되어야 하며, 분자 간 충돌 시 소산(diffusion)에 대한 모델링이 필요하다.

본 연구에서는 단원자 분자의 다화학종 GH 방정식[1]과 이원자 분자의 다화학종 GH 방정식[2,4]을 결합하여 단원자 및 이원자 분자를 모두 포함하는 다화학종 GH 방정식을 유도하였다. 다화학종 GH 수치기법은 축대칭 형상의 다양한 검증 문제에 적용되었으며, 각기 N-S 방정식 및 DSMC의 해석 결과와 비교하여 그 정확성을 평가하였다.

2. 지배 방정식

축대칭 형태의 다화학종 GH 방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho E \\ \rho_i \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I} \\ (\rho E + p) \mathbf{u} \\ \rho_i \mathbf{u} \end{pmatrix} + \frac{1}{y} \mathbf{H} \\ & + \nabla \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \sum_i (\Pi_i + \omega \Delta_i \mathbf{I}) \\ \sum_i \{ (\Pi_i + \omega \Delta_i \mathbf{I}) \cdot \mathbf{u} + \mathbf{Q}_i \} \\ \frac{\rho_i}{\rho} D_{ci} c_{ci} \end{pmatrix} + \frac{1}{y} \mathbf{H}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ S_i \end{pmatrix} \quad (1) \end{aligned}$$

위의 지배 방정식에서 첨자 i 는 각각의 화학종을 지칭하고, 본 연구에서는 N_2 , O_2 , NO , N , O 의 다섯 가지 화학종이 섞여있는 공기를 대상으로 하였다. 위 식에서 D_{ci} 은 화학적 확산 계수, c_{ci} 는 전체 유체의 분자량에 대한 i 번째 화학종의 분자량 비를 각각 나타낸다. 우변의 S_i 는 화학반응으로 인한 각 화학종의 밀도 변화를 나타내는 source 항이다.

지배 방정식은 대체로 N-S 방정식과 유사하나, 점성 플릭스에 excess normal stress(Δ)가 포함되어 있는 점과 응력 텐서(Π), 열전달 벡터(\mathbf{Q})를 별도의 GH 구성식을 통해 구해야 한다는 점에서 차이가 있다. 이들 응력과 열전달 벡터 등은 비보존항이며, 각각은 식 (2)~(5)의 GH 구성식을 통하여 구할 수 있다. 화학반응은 N-S 방정식 단계에서 적용되었으며, GH 구성식은 기본적인 화학반응식을 유지한 채, 각 화학종의 응력, 열전달 등을 구하는 방식으로 구성되었다.

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{\Pi_i}{\rho} \right) = & -2(p_i + \omega \Delta_i) [\nabla \mathbf{u}]^{(2)} - 2[\mathbf{J}_i d_i \mathbf{u}] \\ & - 2[\Pi_i \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)} - \frac{p_i}{\mu} q(\kappa) \sum_j \Pi_j \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{\Delta_i}{\rho} \right) = & -\omega \left[\frac{2}{3} d_i \mathbf{u} \cdot \mathbf{J}_i + \mathbf{J}_i \cdot \nabla \left(\frac{p_i}{\rho_i} \right) \right. \\ & \left. + \frac{2}{3} \gamma' (\Delta_i \mathbf{I} + \Pi_i) : \nabla \mathbf{u} + \frac{2}{3} p_i q(\kappa) \sum_j \Delta_j \right] \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{\mathbf{Q}'_i}{\rho} \right) = & -d_i \mathbf{u} \cdot (\Pi_i + \omega \Delta_i \mathbf{I}) - \mathbf{Q}'_i \cdot \nabla \mathbf{u} \\ & - (p_i + \omega \Delta_i) C_p T \nabla \ln T - \Pi_i \cdot \nabla h \\ & - \frac{p_i C_{p,i} T}{\lambda} q(\kappa) \sum_j \mathbf{Q}'_j \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{\mathbf{J}_i}{\rho} \right) = & \nabla \cdot (p_i \mathbf{I} + \omega \Delta_i \mathbf{I}) \\ & + \frac{\rho_i}{\rho} \nabla \cdot (\Pi_i + \sum_j (\omega \Delta_j) \mathbf{I}) - \nabla \cdot (\Pi_i + \omega \Delta_i \mathbf{I}) \\ & - \mathbf{J}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - p d_i - p k_{T,i} \nabla \ln T \\ & - p q(\kappa) \left[(\mathbf{D}^{-1})_i \frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} - \frac{k_{T,i}}{\lambda} \mathbf{Q}'_i \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

식 (2)~(5)에서 첨자 i 와 j 는 각각의 화학종을 의미하며, $k_{T,i}$ 는 열확산 계수, λ 는 열전달 계수와 온도의 곱이다. \mathbf{I} 는 단위 정사각 행렬이며, $q(\kappa)$ 는 분자 간 충돌에 의한 소산항으로 엔트로피 증가에 관련되며 다음과 같이 정의된다.

$$q(\kappa) = \frac{\sinh(\kappa)}{\kappa} \quad (6)$$

식 (6)에 의해 생성 엔트로피는 다음과 같이 도출된다.

$$\Delta s = k_B \kappa \sinh(\kappa) \quad (7)$$

위 식에서 k_B 는 Boltzmann 상수이다. 식 (7)을 살펴보면, κ 는 아래 식 (8)에서 볼 수 있듯 제곱근 형태가 되므로 항상 양의 부호를 가지며, hyperbolic sine 함수는 언제나 양의 값을 가지게 되어 생성 엔트로피가 항상 양수임을 알 수 있다. 이는 GH 방정식이 갖는 고유한 특성으로, 열역학 제 2법칙을 충실히 따르고 있음을 의미한다. 식 (6)에서 κ 는 Δ_i , Π_i , \mathbf{Q}_i , \mathbf{J}_i 등의 비보존 변수(nonconservative variables)로 된 1차 cummulant이며 다음과 같이 서술될 수 있다.



$$\kappa^2 = \frac{\sqrt{mk_B T}}{2d_m^2 p^2} \sum_i \sum_j \left(\frac{\Pi_i \cdot \Pi_j}{\mu} + \gamma' \frac{\Delta_i \Delta_j}{\mu_b} + \frac{\mathbf{Q}'_i \cdot \mathbf{Q}'_j}{\lambda} + p D_{ij} \mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j \right) \quad (8)$$

위 식에서 연산 $\mathbf{A}:\mathbf{B}$ 는 행렬 \mathbf{A} 와 \mathbf{B} 의 성분끼리의 곱 ($A_{ij}B_{ij}$)을 모두 더하는 double scalar product이다. μ_b 는 bulk viscosity를 의미하며, D_{ij} 는 i 번째 화학종과 j 번째 화학종의 충돌에 의한 확산계수이다. 특히 식 (5)에서 \mathbf{D} 는 확산계수 (D_{ij})로 구성된 5×5 행렬이며, \mathbf{d}_i 는 다음과 같이 계산된다.

$$\mathbf{d}_i = \nabla \left(\frac{n_i}{n} \right) + \left(\frac{n_i}{n} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \nabla \ln p \quad (9)$$

식 (2)~(5)의 \mathbf{J}_i 는 확산 플럭스 벡터로 식 (10)과 같이 분자의 충돌에 의한 확산과 열적 확산의 합으로 정의된다. D_{Ti} 는 i 번째 화학종의 열적 확산계수를 의미한다.

$$\mathbf{J}_i = -\rho_i \left(\sum_j D_{ij} \mathbf{d}_j - D_{Ti} \nabla \ln T \right) \quad (10)$$

서론에서 밝힌 바와 같이, 다화학종 GH 방정식은 단원자 분자와 이원자 분자의 차이를 구분하여 각기 다른 특성을 부여할 수 있어야 한다. Eu에 따르면, 단원자 분자의 경우 excess normal stress (Δ_i)가 0이 되므로[1], 식 (1)~(5)에서 ω 를 0으로 설정함으로써 단원자 분자를 구분할 수 있다. GH 구성식에서 [...] ⁽²⁾ 연산은 다음과 같이 정의된다(α, β 성분).

$$[\nabla \mathbf{u}]^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{1}{3} I_{\alpha\beta} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (11)$$

$$[\mathbf{\Pi} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\Pi_{ik} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \Pi_{il} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) - \frac{1}{3} I_{kl} \Pi_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (12)$$

GH 구성식 (2)~(5)는 Eu의 단열 가정[1,4]에 의해 좌변 시간 미분항을 0으로 간주할 수 있다. 곧 비보존 변수는 밀도, 속도, 온도 등의 보존 변수보다 빠르게 평형 상태에 도달한다고 가정하여 상대적으로 시간 미분항의 크기가 작아진다는 의미이다. 단열 가정을 통해 GH 구성식은 비선형 대수 방정식이 된다. 무차원화된 GH 구성식은 다음과 같이 표현된다.

$$q(\kappa) \sum_j \Pi_j = \left(1 + \frac{\omega f_b}{\text{Rep}_i} \Delta_i \right) \Pi_0 - \frac{2}{\text{Rep}_i} \frac{\mu}{S_c} [\mathbf{J}_i \mathbf{d}_i \mathbf{u}]^{(2)} - \frac{2\mu}{\text{Rep}_i} [\mathbf{\Pi}_i \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)} \quad (13)$$

$$q(\kappa) \sum_j \Delta_j = \Delta_0 - f_b \frac{\mu}{\text{Rep}_i} (\mathbf{\Pi}_i + f_b \Delta_i \mathbf{I}) : \nabla \mathbf{u} - \frac{f_b}{\gamma'} \frac{\mu}{\text{Rep}_i} \frac{1}{S_c} \left[\mathbf{d}_i \mathbf{u} \cdot \mathbf{J}_i + \mathbf{J}_i \cdot \nabla \left(\frac{p_i}{\rho_i} \right) \right] \quad (14)$$

$$q(\kappa) \sum_j \mathbf{Q}'_j = \left(1 + \frac{\omega f_b}{\text{Rep}_i} \Delta_i \right) \mathbf{Q}'_0 - \frac{1}{\text{Rep}_i} \frac{\mu}{\text{Pr}} \mathbf{Q}'_i \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{\text{Rep}_i} \mathbf{\Pi}_i \cdot \mathbf{Q}'_0 \quad (15)$$

$$q(\kappa) \left[(\mathbf{D}^{-1})_i \frac{\mathbf{J}_i}{\rho_i} - \frac{(\gamma-1)\rho_0}{\text{Pr}} \mathbf{Q}'_i \right] = \rho_0 \nabla \cdot \left(\frac{p_i}{p} \mathbf{I} + \frac{\omega f_b}{\text{Rep}_i} \Delta_i \mathbf{I} + \frac{1}{\text{Rep}} \mathbf{\Pi}_i \right) + \frac{\rho_0 \rho_i}{\text{Rep}} \nabla \cdot (\mathbf{\Pi} + \omega f_b \Delta \mathbf{I}) - \frac{\rho_0}{\text{Rep}} \nabla \cdot (\mathbf{\Pi}_i + \omega f_b \Delta_i \mathbf{I}) - \frac{\rho_0}{\text{Rep}} \frac{1}{S_c} \mathbf{J}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{d}_i \quad (16)$$

위 식에서 S_c 와 Pr 은 각각 Schmidt 수와 Prandtl 수를 의미하며 첨자 0은 N-S 방정식의 플럭스 계산으로부터 구한 평형해를 뜻한다. γ' 은 $(5-3\gamma)/2$ 로 정의되며, f_b 는 분자의 회전에너지와 전체에너지의 비율을 의미하고 $C_{p,b}/C_p$ 와 같이 각 에너지의 정압비열의 비로 표현할 수 있다. 본 연구에서는 Myong의 견해[4]를 따라 $f_b = 0.8$ 의 값으로 설정하였다. 식 (13)~(16)의 κ 도 무차원화 해주어야 하며 결과적으로 다음과 같이 표현된다.

$$\kappa^2 = \frac{c}{\text{Rep}} \sum_{ij} [\mathbf{\Pi}_i : \mathbf{\Pi}_j + \omega \gamma' f_b \Delta_i \Delta_j + \frac{(\gamma-1)\text{Pr}}{T} \mathbf{Q}'_i \cdot \mathbf{Q}'_j + \frac{D_{ij}}{\rho_0 S_c} \mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j] \quad (17)$$

식 (13)~(17)의 비선형 대수 방정식의 해는 수치적 해석자를 이용해 구할 수 있다. 본 연구에서는 Broydn의 반복계산을 이용한 비선형 방정식 해석자를 이용하여 계산을 수행하였다. 앞서 밝힌 바와 같이 단원자 분자와 이원자 분자가 섞여



있는 다화학종 유동에서는 이들 분자의 구분이 필요하다. 이는 두 가지 방향에서 고려될 수 있다. 첫째, 단원자 분자에서는 excess normal stress(Δ_i)의 값이 0이다. 둘째, 확산의 영향에 있어 단원자-단원자 충돌, 단원자-이원자 충돌, 이원자-이원자 충돌이 다르게 설정되어야 한다. 전자의 경우는 GH 구성식에서 단원자 분자 화학종의 값을 0으로 두어 구현할 수 있다. 후자의 경우는 확산계수(D_{ij})의 값을 각 충돌쌍마다 다르게 설정해 줌으로써 해결할 수 있다. 참고 문헌 [3]을 토대로 하여, 본 연구에서는 단원자-단원자 충돌에 0.18, 단원자-이원자 충돌에 0.48, 이원자-이원자 충돌에 0.65의 값을 사용하였다.

다음으로 GH 수치기법의 전체적인 해석 절차는 다음과 같이 이루어진다. 먼저, 이전 단계에서의 물성치들(밀도, 온도, 속도 등)을 기반으로 N-S 방정식의 점성 플렉스를 구한다. 이를 초기조건으로 활용하여 비선형 수치해석자를 통해 식 (13)~(17)의 구성 방정식의 해를 구한다. 이들 해는 Δ_i , Π_i , Q_i , J_i 등의 비보존 항이며, 이를 지배 방정식에 넣어 최종적인 플렉스를 계산하고 시간 전진을 시키게 된다. 이러한 GH 구성식의 해를 구하는 과정은 N-S 방정식의 계산보다 2~3배의 시간을 소요하기는 하나, Knudsen 수가 증가하여도 계산 시간에 큰 변동이 없고 Knudsen 수가 작은 경우에는 DSMC 보다 효율적으로 계산을 수행할 수 있게 된다.

3. 수치기법 및 경계조건

3.1 수치기법

본 연구에서는 플렉스 분할 기법으로 AUSMPW+ 기법을 사용하였으며, 2계 MUSCL과 van Leer 제한자를 사용하였다. 시간적분 기법으로는 LU-SGS를 사용하였다. 화학반응이 있는 극초음속 유동 해석의 특성 상 CFL 수를 크게 줄 수 없으므로 수렴성을 높여줄 필요가 있다.

수렴성을 높이기 위하여 본 연구에서는 5가지의 화학종 (N_2 , O_2 , N , O , NO)의 화학반응을 위한 source 항을 내재적 기법으로 처리하였으며, 보다 빠른 계산을 위해 4단계 다중격자 기법을 사용하였다. 또한 후류가 있는 문제의 경우 수렴도가 급격히 저하되므로 공간을 분할하여 병렬처리를 수행함으로써 전반적인 계산 시간의 절감을 이룰 수 있었다.

3.2 벽면 경계조건

고체 벽면에서의 미끄러짐 현상(velocity slip)과 온도 불연속(temperature jump)은 희박 유동에서 특징적으로 나타나는 현상으로, 이를 적절하게 반영하는 것은 플렉스의 변화를 예측하는 것 이상으로 수치해의 정확성에 영향을 주게 된다. 이

러한 고체 벽면에서의 불연속을 반영하기 위해 본 연구에서는 Langmuir의 slip 모델[4]과 Maxwell-Smoluchowski 모델[6]을 사용하였다.

Langmuir 모델은 다음과 같다.

$$u = \alpha u_w + (1 - \alpha) u_g \tag{18}$$

$$T = \alpha T_w + (1 - \alpha) T_g \tag{19}$$

위 식에서 첨자 w , g 는 각각 벽면 및 벽면에서 가까운 유체의 값을 의미한다. α 의 값은 다음과 같은 식으로 구할 수 있다.

$$\alpha = \frac{\beta p}{1 + \beta p} \tag{20}$$

$$\beta = \frac{A l}{k_B T} \exp\left(\frac{D_e}{k_B T_w}\right) \tag{21}$$

식 (20)에서 A 는 유동 영역의 실효 면적이고, D_e 는 슬립이 일어나는 벽면에서의 potential parameter이다. 본 연구에서는 $D_e = 1.32 \text{ kcal/mol}$ 의 값을 사용하였다.

Maxwell-Smoluchowski 경계조건은 다음과 같다[6].

$$u_g - u_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{\mu}{\rho(2RT_w/\pi)^{1/2}} \frac{\partial u_s}{\partial n} \tag{22}$$

$$T_g - T_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \left[\frac{2(\gamma - 1)}{\gamma + 1} \right] \times \frac{k}{\rho R(2RT_w/\pi)^{1/2}} \frac{\partial T}{\partial n} \tag{23}$$

σ 는 벽면에서의 accomodation parameter이며, 보통 0.2~0.8의 범위에서 사용하게 된다.

Langmuir의 경계조건은 tuning parameter가 없이 속도와 온도가 계산될 수 있다는 장점이 있으나, 벽면 물성치와 벽면에 인접한 유동의 물성치의 비율을 결정하는 방식이어서 지나치게 단순화된 측면이 있다. 반면 Maxwell-Smoluchowski 경계조건은 벽면과 벽면 근처 유동의 속도 및 온도 차이가 속도 구배 및 온도 구배에 의해 결정되므로 물리적 특성을 잘 반영할 수 있다는 장점이 있다. 단, accomodation parameter의 값이 tuning parameter로 작용한다는 점과 이로 인해 수렴성이 크게 나빠질 수 있다는 점을 단점으로 꼽을 수 있다.

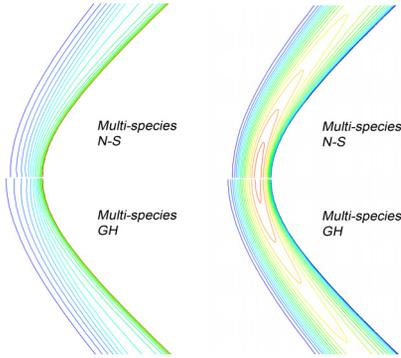


Fig. 1 Density(left, log-scale) and temperature(right) contours on the space shuttle nose geometry

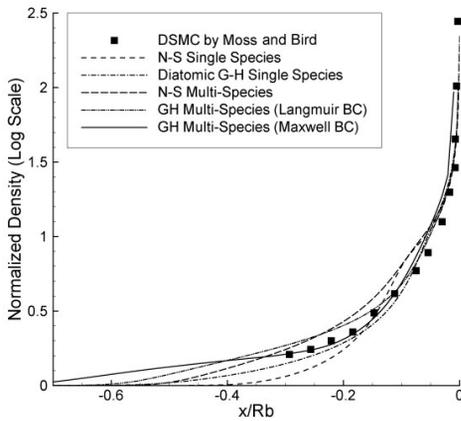


Fig. 2 Log-scale density distribution on the symmetric axis of a space shuttle nose geometry

4. 수치해석 결과 및 분석

4.1 스페이스 셔틀 앞전 극초음속 희박유동 해석

스페이스 셔틀의 앞전을 모델로 쌍곡선 단면의 축대칭 형상에 대한 극초음속 희박유동을 해석하였다. 자유류 조건은 $M=25.3$, $Re=170$, $Kn=0.227$, $T_w=223K$, $T_\infty=560K$ 이다[7]. 스페이스 셔틀 앞전의 형상은 축대칭 쌍곡면이며 격자계는 51×81 개의 격자점을 갖는 정렬 격자로 구성하였다. Fig. 1.에 N-S 방정식과 GH 방정식으로 계산한 밀도 및 온도 분포를 비교하여 도시하였다.

Fig. 1에서, 다화학종 GH 방정식의 해가 밀도 및 온도 분포가 더 넓은 영역에 걸쳐 퍼져 있음을 알 수 있다. 이는 분자 간 충돌이 충분치 않은 희박유동의 특성 상 비평형 효과가 커져 유동에 급격한 물성치 변화가 일어나기보다 점진적으로 변화가 일어나기 때문이다. 또한 밀도 분포가 로그 척도

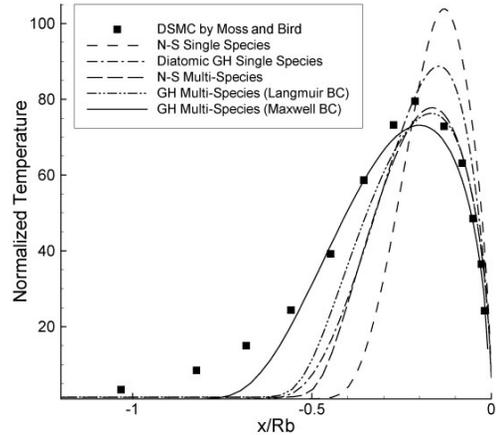


Fig. 3 Normalized temperature distribution on the symmetric axis of a space shuttle nose geometry

임을 감안할 때, 대부분의 유체 질량이 물체 표면에 집중되고 있음을 알 수 있다. 이는 높은 희박도로 인해 충격파를 미처 형성하지 못한 채 물체 표면에 도달하기 때문이다.

정체 유선 상에서의 무차원 밀도(로그 척도)와 온도를 Fig. 2,3에 도시하였다. 두 그림에서 다화학종 GH 방정식의 결과는 DSMC의 결과와 거의 유사한 분포를 보이고 있는 반면, N-S 방정식의 결과는 상당한 차이를 보였다. 분포의 기울기 측면에서도 다화학종 GH 방정식의 결과가 N-S 방정식의 결과에 비해 우수한 것을 볼 수 있다. 또한 Langmuir 경계조건보다 Maxwell-Smoluchowski 경계조건이 더 좋은 결과를 보여주었는데, 이는 앞서 3.2절에서 언급한 바와 같이 Maxwell-Smoluchowski 경계조건이 Langmuir 경계조건보다 더 물리적 특성을 잘 반영하기 때문으로 보인다.

4.2 구 형상 물체 주위의 극초음속 희박 유동 해석

구 형상 물체의 후류 해석을 통해 다화학종 GH 방정식의 정확도를 검증하였다. 구 형상 문제의 자유류 조건은 $M=11.25$, $Re=15.16$, $Kn=0.078$, $T_w=600K$, $T_\infty=22.8K$ 이다[8]. 후류가 있는 경우 수렴성이 좋지 않은 관계로, 97×161 개의 총 격자수를 갖는 영역을 8개로 분할하여 병렬화를 수행하였다. Fig. 4에 구 형상 주변의 밀도 및 온도 분포를 도시하였다. 다화학종 GH 방정식의 결과가 N-S 방정식의 결과보다 더 넓은 영역에 걸쳐 밀도와 온도가 퍼져 있음을 알 수 있다. 이는 앞서 기술한 바와 같이 희박유동의 비평형성을 반영하는 데 GH 방정식이 유리함을 보여주는 결과라고 할 수 있다. 또한 후류 영역에서 다화학종 GH 방정식은 N-S 방정식보다 더 낮은 온도 분포를 보여주고 있는데, 이것은 밀도가 낮은 경우 화학반응이 더 적은 빈도로 일어나 발열반응으로 인한 온도 증가가 작음을 반영하는 것으로 볼 수 있다.

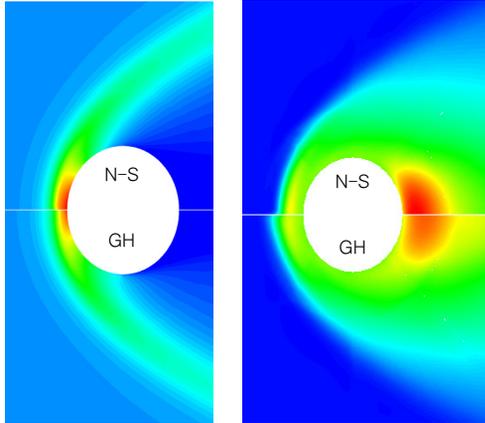


Fig. 4 Density(left, log-scale) and temperature distributions around the sphere

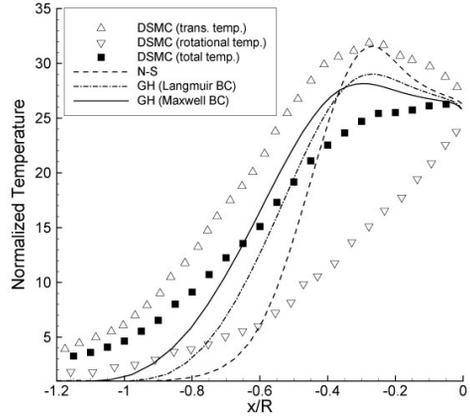


Fig. 6 Normalized temperature distribution along the symmetric axis of the sphere geometry.

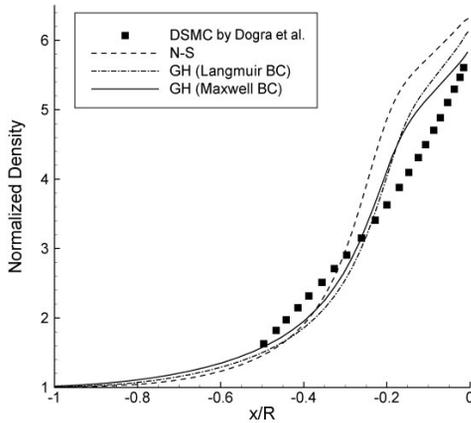


Fig. 5 Normalized density distribution along the symmetric axis of the sphere geometry

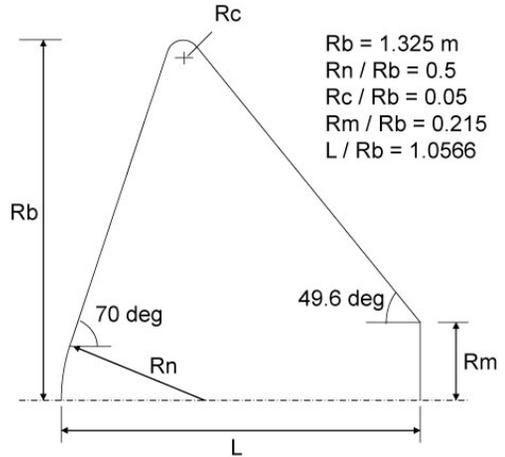


Fig. 7 Reentry body geometry

정확도를 살펴보기 위해 정체 유선 상의 밀도 및 온도 분포를 비교하였다. Fig. 5에 밀도, Fig. 6에 온도 분포를 도시하였다. 두 그림을 살펴 보면, 다화학종 GH 방정식에 Maxwell-Smoluchowski 경계조건을 사용한 결과가 DSMC 결과에 가장 근접하는 분포를 보여주고 있음을 알 수 있다. 다만 분포의 시작위치 및 최댓값은 다소 차이가 존재하는 데, 이는 GH 구성식의 유도 과정에서 Chapman-Enskog 확장의 1계 근사값을 도입한 영향, 수치기법 상의 오차 등을 원인으로 짚을 수 있을 것이다. 대부분의 기체역학적 접근 방법은 정확도 측면에서 DSMC와 같은 분자 동역학적 접근 방법에 미치지 못하는 근본적인 원인으로 무시할 수 없을 것이다. 결론적으로 다화학종 GH 방정식은 정성적으로 N-S 방정식보다 물리적으로 더 타당한 결론을 도출하였고, 정량적으로는 정확도 측면에서 개선해야 할 점이 남아 있다고 할 수 있다.

4.3 재돌입 물체 주위의 극초음속 희박 유동 해석

재돌입 물체 주위에서 발생하는 높은 희박도의 유동을 해석함으로써 다화학종 GH 방정식의 효용을 검토하였다. 자유류 조건은 $M=23.47$, $Re=155.5$, $Kn=0.2238$, $T_w=1000K$, $T_\infty=211.1K$ 이다[9]. 재돌입 물체의 형상은 Fig. 7에 도시한 바와 같으며, 격자계는 65×129 개의 격자점을 갖는 정렬 격자를 사용하였다. 역시 후류 유동이 존재하여 수렴성이 좋지 않은 관계로 8개의 영역으로 나누어 병렬화를 수행하였다.

Fig. 8과 Fig. 9에 각각 재돌입 물체 주위의 밀도 및 온도 분포를 N-S 결과와 GH 결과를 비교하여 도시하였다. 두 그림에서도 역시 재돌입 물체의 앞쪽에서 다화학종 GH 결과가 밀도와 온도의 분포가 넓게 퍼져 있음을 확인할 수 있다. 또한 후류 부분에서 GH 방정식의 결과가 더 낮은 온도 분포를

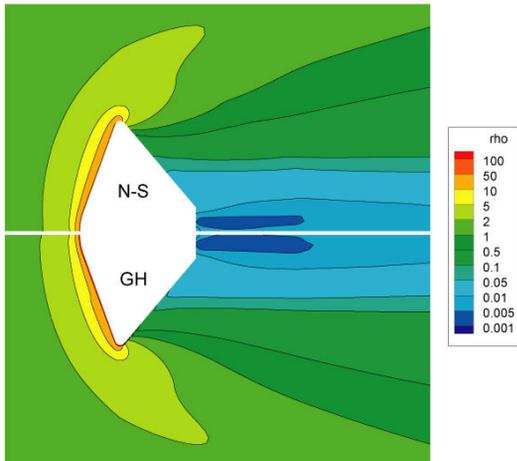


Fig. 8 Normalized density distribution around the reentry body

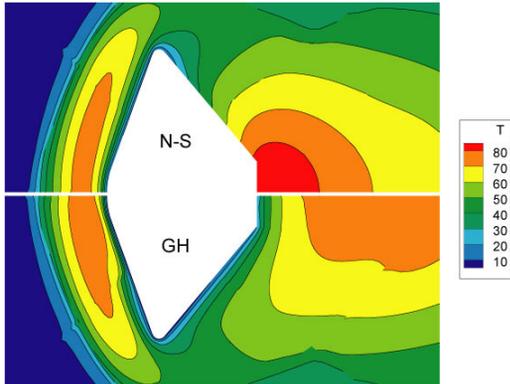


Fig. 9 Normalized temperature distribution around the reentry body

보이고 있으며, 특히 밀도가 극히 낮은 뒷면의 벽면 부근에서 온도 차이가 심하게 나고 있음을 알 수 있다. 이는 벽면에서의 slip 경계조건을 동일하게 적용하여도 N-S 방정식은 경계 조건의 영향을 전체 유동에 전달하는 데에 불리함을 나타낸다고 볼 수 있을 것이다.

보다 정량적인 비교를 위하여 후류 부분 특정 위치에서의 밀도 및 온도 분포를 비교하였다. Fig. 10와 Fig. 11에 각각 밀도와 온도 분포를 도시하였다. 두 그림에서도 앞서와 마찬가지로 다화학종 GH 방정식의 결과가 N-S 방정식의 결과보다 DSMC의 결과에 더 가깝게 접근하고 있음을 확인할 수 있다. 특히 Fig. 11에서 볼 수 있듯 재돌입 물체의 뒷면 근처에서는 DSMC와 N-S 방정식이 전혀 다른 경향성을 보이는 것을 알 수 있다. 곧, DSMC는 벽면에 가까워질수록 온도가 낮아지는 데 반하여, N-S 방정식은 벽면에 가까워질수록 온

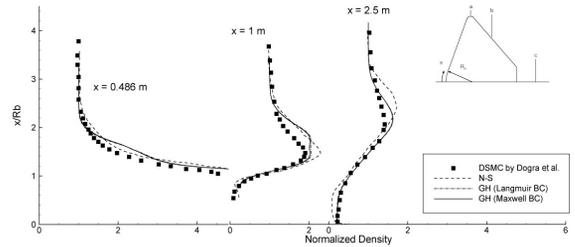


Fig. 10 Normalized density distribution at the selected wake positions of the reentry body

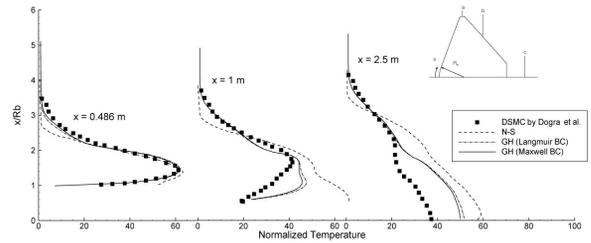


Fig. 11 Normalized temperature distribution at the selected wake positions of the reentry body

도가 높아지고 있다. 반면, GH 방정식의 결과는 벽면에 가까워질수록 온도가 낮아지는 경향이 나타나 DSMC와 유사한 경향을 보여주고 있다. 따라서, GH 방정식이 N-S 방정식보다 물리적 측면에서 더 부합하는 성질을 갖고 있다고 할 수 있을 것이다. 한편, 다화학종 GH의 결과에서도 아직 DSMC 만큼의 정확성을 기하지 못하는 것도 발견할 수 있는데, 이는 앞서 서술한 바와 같이 GH 구성식을 유도하는 과정에서 Chapman-Enskog 확장의 1계 가정을 도입한 것이 하나의 이유가 될 수 있을 것이다. GH 방정식의 정성적 특성이 N-S 방정식보다 뛰어난 점을 전제로, 보다 정확성이 높은 GH 방정식의 개발 및 이에 상응하는 높은 수준의 수치기법의 개발이 향후 조속한 시일 내에 이루어져야 할 것이다.

Fig. 12는 재돌입 물체의 표면을 따라 표면에서의 압력계수를 로그 척도에 따라 도시한 것이다. 그림에서 알 수 있듯이, 재돌입 물체의 코너 부분에서 급격한 압력의 저하가 일어나게 된다. 이후 후류에서는 밀도와 압력이 급격히 저하된 상태이므로 강한 비평형성이 나타난다. Fig. 12에서도 Maxwell-Smoluchowski 경계조건을 사용한 다화학종 GH 방정식이 후류에서 가장 낮은 압력 분포를 예측하고 있으며, 이는 DSMC 결과에 가장 가까운 결과임을 알 수 있다. 압력 분포가 로그 척도임을 감안할 때, 재돌입 물체의 뒷면에서 GH 방정식이 N-S 방정식보다 훨씬 정확성이 높음을 확인할 수 있다. 결론적으로 희박 극초음속 유동의 해석 문제를 통해 다화학종 GH 방정식이 정성적으로 DSMC에 근접한 결과를 보여

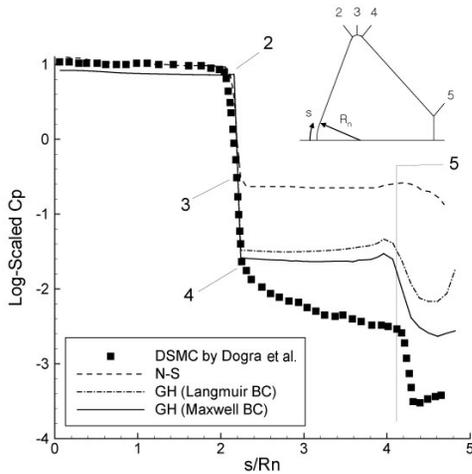


Fig. 12 Log-scale pressure coefficient distribution on the reentry body surface

주고 있으며 희박유동의 물리적 특성을 N-S 방정식보다 더 잘 반영하고 있음을 확인할 수 있었다. 정량적 측면에서 다화학종 GH 방정식은 N-S 방정식 결과보다 DSMC에 가까운 결과를 보였으나, 향후 정확성의 제고를 위한 여러 가지 개선점이 남아 있음을 알 수 있었다.

5. 결 론

본 논문에서는 Eu의 GH 이론을 토대로 다화학종으로 구성된 극초음속 희박유동을 해석하기 위한 기법을 구현하였다. 기존의 이원자 분자 기반의 단화학종 GH 방정식과 단원자 분자 기반의 다화학종 GH 방정식을 결합하여 이원자 분자와 단원자 분자를 모두 포함하는 일반적인 다화학종 GH 방정식을 유도하였다. 이 과정에서 이원자 분자를 위한 excess normal stress를 고려하고, 분자 간 충돌과 열적 원인으로 초래되는 확산 플럭스를 고려하여 GH 구성식을 유도하였다. 일반적인 다화학종 GH 구성식의 해를 구하기 위한 수치기법을 도입하고, 최종적으로 축대칭 형태의 GH 방정식을 유도하였다. 이러한 축대칭 다화학종 GH 방정식을 기반으로 극초음속 희박유동의 해석을 위한 해석자를 개발하였으며, 이를 여러 검증문제에 적용하였다. 스페이스 셔틀 앞선 유동, 구 형상 물체 주위의 유동, 재돌입 물체 주위의 유동을 해석한 결과, 다화학종 GH 방정식은 N-S 방정식에 비해 DSMC에 월등히 근접하는 결과를 도출하였다. 정성적으로 희박유동의 낮은 밀도와 불충분한 충돌로 인한 높은 수준의 비평형성을 반영할 수 있었다. 정량적으로도 다화학종 GH 방정식은 N-S 방정식보다 우수한 결과를 보여주었다. 다만, DSMC 결과에 비추어

볼 때 보다 정확성을 높이기 위한 노력이 필요함을 확인할 수 있었다. GH 구성식의 유도 과정에서 정확성을 높이기 위한 노력이 이루어지고 향후 보다 좋은 CFD 기법의 적용이 이루어진다면, 본 논문에서 개발된 다화학종 GH 방정식은 극초음속 희박유동 해석자로서 여러 분야에서 활용될 수 있을 것이다.

후 기

본 연구는 2008년도 두뇌한국 21사업과 항공우주신기술연구소의 지원으로 수행되었으며, 또한 한국과학재단을 통해 교육과학기술부의 우주기초원천기술개발 사업(NSL, National Space Lab)의 지원으로 수행되었습니다(S10801000121-08A0100-12110).

참고문헌

- [1] 1992, Eu, B.C., *Kinetic Theory and Irreversible Thermodynamics*, Wiley, New York.
- [2] 2002, Eu, B.C., *Generalized Thermodynamics: The Thermodynamics of Irreversible Processes and Generalized Hydrodynamics*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- [3] 1970, Chapman, S. and Cowling, T.G., *The Mathematical Theory of Nonuniform Gases*, Cambridge University Press.
- [4] 2004, Myong, R.S., "A Generalized Hydrodynamic Computational Model for Rarefied and Microscale Diatomic Gas Flows," *Journal of Computational Physics*, Vol.195, pp.655-676.
- [5] 2007, 안재완, 이준석, 홍우람, 김종암, "이원자 GH 방정식을 통한 극초음속 희박유동 해석," 2007 항공우주학회 춘계학술대회.
- [6] 1994, Beskok, A. and Karniadakis, G.E., "Simulation of Heat and Momentum Transfer in Complex Microgeometries," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.8, No.4, pp.647-655.
- [7] 1995, Boyd, I.D., Chen, G. and Candler, G.V., "Predicting Failure of the Continuum Fluid Equations in Transitional Hypersonic Flows," *Physics of Fluids*, Vol.7, No.1, pp.210-219.
- [8] 1992, Dogra, V.K., Wilmoth, R.G. and Moss, J.N., "Aerothermodynamics of a 1.6-Meter-Diameter Sphere in Hypersonic Rarefied Flow," *AIAA Journal*, Vol.30, No.7, pp.1789-1794.
- [9] 1995, Dogra, V.K., Taylor, J.C. and Hassan, H.A., "Blunt Body Rarefied Wakes for Earth Entry," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.9, No.3, pp.464-470.