

효율적인 상세 반응 기구 해석을 위한 민감도 해석 기반의 부분 음해법

강기하* · 문성영* · 노진현* · 원수희** · 최정열***†

Partial Preconditioning Approach for the Solution of Detailed Kinetics Problems Based on Sensitivity Analysis

K.-H. Kang, S.-Y. Moon, J.-H. Noh, S.-H. Won and J.-Y. Choi

ABSTRACT

A partly implicit/quasi-explicit method is introduced for the solution of detailed chemical kinetics with stiff source terms based on the standard fourth-order Runge-Kutta scheme. Present method solves implicitly only the stiff reaction rate equations, whereas the others explicitly. The stiff equations are selected based on the survey of the chemical Jacobian matrix and its Eigenvalues. As an application of the present method constant pressure combustion was analyzed by a detailed mechanism of hydrogen-air combustion with NOx chemistry. The sensitivity analysis reveals that only the 4 species in NOx chemistry has strong stiffness and should be solved implicitly among the 13 species. The implicit solution of the 4 species successfully predicts the entire process with same accuracy and efficiency at half the price.

Key Words : 상세반응기구(Detailed Chemical Kinetics), 민감도 해석(Sensitivity Analysis), 부분 음해법 (Partly Implicit Method), 질소산화물 (NOx)

기 호 설 명

A_{fr} pre-exponential factor of forward reaction	w vector of a production rate
B_{fr} temperature exponent of forward reaction	N_s number of species
E_{fr}^* activation energy of forward reaction	ν' stoichiometric coefficient of reactants
x vector of concentration	ν'' stoichiometric coefficient of products

1. 서 론

연소 과정을 지배하는 화학적 과정은 상세 반응 기구에 지배되는데, 근래에 들어 반응의 상세

과정들과 반응 속도 정보가 파악되면서 상세 반응 기구를 직접 해석하는 것이 가능하게 되었다. 그러나 상세 반응 기구를 유동장과 함께 해석하는 것은 유동장 해석을 위한 격자수에 비례하여 계산 시간이 증가하므로 간단한 화염편(flamelet) 해석으로부터 얻어진 데이터베이스를 이용하여 연소장을 해석하는 방법이 많이 이용되고 있다. 그러나 진산 처리 능력이 향상되면서 최근 들어 상세 반응 기구를 유동 해석과 직접 연계하여 해

* 학생회원, 부산대학교 항공우주공학과 대학원

** 학생회원, 서울대학교 항공우주공학과 대학원

*** 정회원, 부산대학교 항공우주공학과

† 연락처, E-mail: aerochoi@pusan.ac.kr

석하는 연구 결과들이 보고되고 있으며 대부분 수소-산소 반응과 같이 비교적 간단한 반응에 국한되고 있다.

상세 반응 기구 해석을 어렵게 하는 기본적인 요인은 기본적으로 많은 수의 반응 성분에 대한 반응 속도를 해석하여야 하는데 있지만, 이와 더불어 화학반응의 경직성으로 인하여 음해법을 이용하여야 하는 문제에 있다. 수치해석 이론으로부터 상세 반응 기구의 음해법에 필요한 해석 시간은 반응성분 수의 제곱곱에 비례한다. 이러한 문제를 일반적으로 해결하기 위하여 많은 연구가 있었는데, Eberhardt 등은[1] 대각화 된 반응 Jacobian 행렬을 이용하는 방법을 제안하였으며, Kim 등은[2] 민감도 해석을 통하여 하삼각 행렬 형태의 Jacobian 행렬을 이용하는 방법을 제안하여 우수한 해석 성능을 보여 주는데, 대체로 전체 문제에 대한 음해법의 토대를 기본으로 하여 해석 시간을 줄일 수 있는 방법들이었다.

해석 시간의 문제를 가져오는 경직성의 문제는 일반적으로 화학반응에 의하여 유발되는 급격한 구배의 문제로 인식되기도 하지만, 이 문제는 기본적으로 시간 또는 공간 해상도의 향상으로 해결되며, 해상도의 향상은 물리적 현상을 구체

적으로 이해하기 위해서도 바람직한 방향이기도 하다. 이 경우 음해법의 필요성은 급격히 약화된다. Choi 등은[3] 수소-산소 상세 반응 기구를 이용한 충격과 유동 연소 유동 해석에서 비정상 화염구조를 해석 할 수 있는 수준의 계산 격자를 이용하는 경우 양해법 만으로 충분히 효율적인 해석을 할 수 있음을 보인 바 있다. 그러나 보다 근본적인 경직성의 문제는 해석에 포함되는 변수들의 크기 사이에서 심한 지수적 차이가 있을 때 나타난다. 예를 들어 Choi 등이 해석한 문제에서 NO_x의 생성 반응을 고려하는 경우 경직성의 문제가 다시 발생하여 음해법의 고려 필요성이 다시 제기되었다. 즉, 화학 반응의 종류에 따라 경직성의 문제가 선별적으로 존재함을 의미하며 이 경우 전체 시스템을 모두 음해법으로 푸는 것은 해석의 효율성에 심각한 문제를 가져온다.

한편, 유동장의 해석에 있어 정상 상태 문제 등에서 음해법이 효율성 등의 측면에서 선호되기도 하지만, 비정상 상태 문제의 해석에 있어서는 시간 간격내의 반복 수렴 과정으로 인하여 효율성의 장점이 약화된다. 특히 대규모의 병렬 처리에서 가상의 영역 분할이 필요한 경우 음해법의 효율성은 크게 약화된다. 아울러 대외류 모사

Table 1 Jachimowski's detailed kinetic mechanism of Hydrogen-Air combustion [4]. This model involves 32 elementary steps and 13 reacting species; H, HNO, HO₂, H₂, H₂O, H₂O₂, N, NO, N₂, NO₂, O, O₂, OH.

Forward Reaction Rate							
Reaction	A_f	B_f	E_f^*/R	Reaction	A_f	B_f	E_f^*/R
$H_2+O_2 \leftrightarrow HO_2+H$	1.00×10^{14}	0.00	56,000	$N+N+X \leftrightarrow N_2+X$	2.80×10^{17}	-0.75	0
$H+O_2 \leftrightarrow OH+O$	2.20×10^{14}	0.00	16,800	$N+O_2 \leftrightarrow NO+O$	6.40×10^{17}	1.00	6,300
$O+H_2 \leftrightarrow OH+H$	1.80×10^{10}	1.00	8,900	$N+NO \leftrightarrow N_2+O$	1.60×10^{13}	0.00	0
$OH+H_2 \leftrightarrow H_2O+H$	2.20×10^{13}	0.00	5,150	$N+OH \leftrightarrow NO+H$	6.30×10^{11}	0.50	0
$OH+OH \leftrightarrow H_2O+O$	6.30×10^{12}	0.00	1,090	$H+NO+X \leftrightarrow HNO+X$	5.40×10^{15}	0.00	-600
$H+OH+X \leftrightarrow H_2O+X$	2.20×10^{22}	-2.00	0	$H+HNO \leftrightarrow NO+H_2$	4.80×10^{12}	0.00	0
$H+H+X \leftrightarrow H_2+X$	6.40×10^{17}	-1.00	0	$O+HNO \leftrightarrow NO+OH$	5.00×10^{11}	0.50	0
$H+O+X \leftrightarrow OH+X$	6.00×10^{16}	-0.60	0	$OH+HNO \leftrightarrow NO+H_2O$	3.60×10^{13}	0.00	0
$H+O_2+X \leftrightarrow HO_2+X$	2.10×10^{15}	0.00	-1,000	$HO_2+HNO \leftrightarrow NO+H_2O_2$	2.00×10^{12}	0.00	0
$HO_2+H \leftrightarrow OH+OH$	1.40×10^{14}	0.00	1,080	$HO_2+NO \leftrightarrow NO_2+OH$	3.40×10^{12}	0.00	-260
$HO_2+H \leftrightarrow H_2O+O$	1.00×10^{13}	0.00	1,080	$H+NO_2 \leftrightarrow NO+OH$	3.50×10^{14}	0.00	1,500
$HO_2+O \leftrightarrow O_2+OH$	1.50×10^{13}	0.00	950	$O+NO_2 \leftrightarrow NO+O_2$	1.00×10^{13}	0.00	600
$HO_2+OH \leftrightarrow H_2O+O_2$	8.00×10^{12}	0.00	0	$NO_2+X \leftrightarrow NO+O+X$	1.16×10^{16}	0.00	66,000
$HO_2+HO_2 \leftrightarrow H_2O_2+O_2$	2.00×10^{12}	0.00	0	Third body efficiencies relative to N ₂			
$H+H_2O_2 \leftrightarrow H_2+HO_2$	1.40×10^{12}	0.00	3,600	$H+OH+X \leftrightarrow H_2O+X$	H ₂ O = 6.0		
$O+H_2O_2 \leftrightarrow OH+HO_2$	1.40×10^{13}	0.00	6,400	$H+H+X \leftrightarrow H_2+X$	H ₂ O = 6.0, H ₂ = 2.0		
$OH+H_2O_2 \leftrightarrow H_2O+HO_2$	6.10×10^{12}	0.00	1,430	$H+O+X \leftrightarrow OH+X$	H ₂ O = 6.0		
$H_2O_2+X \leftrightarrow OH+OH+X$	1.20×10^{17}	0.00	45,500	$H+O_2+X \leftrightarrow HO_2+X$	H ₂ O = 16.0, H ₂ = 2.0		
$O+O+X \leftrightarrow O_2+X$	6.00×10^{13}	0.00	-1,800	$H_2O_2+X \leftrightarrow OH+OH+X$	H ₂ O = 15.0		

(LES) 등과 같이 유동 해석의 시간 간격이 난류 에디의 포착 요구로 인하여 작은 격자 크기를 이용하고, 이에 따라 화염 구조 포착이 가능한 경우 시간 간격은 점성 항에 지배 받으며, 대류항의 예조건화에 근거한 일반적인 유동장의 음해법은 오히려 효율성의 장애 요인이 될 수도 있어 양해법이 선호된다.[5]

본 연구에서는 반응 유동 해석 등에 있어 전체적인 문제를 양해법으로 해석 하는 경우를 위하여 화학반응 해석에서 경직성의 문제를 가져오는 일부 반응 성분만을 음해법으로 해석하고 전체적인 해석의 기초는 양해법으로 해석하여 해석의 효율성을 유지할 수 있는 부분 음해법의 방법을 단순한 반응 모델을 이용하여 제시하고 그 효율성 등을 살펴보고자 한다.

2. 수치 해석 기법

2.1 해석 모델

본 연구에서는 반응 해석 기법 연구를 위하여 Table 1의 13개 화학종 32개 반응을 고려하는 Jachimowski의 수소-공기 상세 반응 기구를 이용하여 단순한 정압 반응 해석을 고려하였다.[4] 식 (1) 과 (2)는 정압 반응 해석을 위한 간단한 모델 방정식이다.

$$\frac{\partial X}{\partial t} = W, \quad H(T) = H_0 \quad (1)$$

여기서 \mathbf{x} , \mathbf{w} 는 다음의 농도와 반응을 벡터이다.

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kr} X_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^N \nu''_{kr} X_k \quad (2)$$

Mechanisms는 많은 수의 반응과 화학종을 포함하고 있어 각 mechanisms을 간단하게 나타내는 쪽으로 발전해 왔으며 일반적으로 식 (2)과 같이 표현되었다.

$$X = [[X_1], \dots, [X_{Ns}]]^T, \quad W = [\dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_{Ns}] \quad (3)$$

$$\dot{\omega}_j = \sum_{i=1}^{Nr} (\nu''_{ji} - \nu'_{ji}) \left[k_{fi} \prod_{j=1}^{Ns} [X_j]^{\nu_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^{Ns} [X_j]^{\nu_{ji}} \right]$$

여기서 Ns 는 고려하는 화학종의 수를 나타내며, 전치 반응 속도 상수 k_{fi} 는 i 번째 반응으로 Arrhenius 형태로 표현된다. 식 (4)에서 반응 계수 A_i , B_i 와 활성화 에너지 E_i^* 는 Table 1에서 Jachimowski의 수소-산소 상세반응 기구를 참

조한다.

$$k_{fi} = A_i T^{B_i} \exp(-E_i^*/RT) \quad (4)$$

후치 반응 속도 상수인 k_{ri} 는 앞에서 언급한 전치반응 속도 상수와 평형 상수를 사용해서 다음과 같이 표현 할 수 있다.

$$K_{eq}^r = k_{fi}/k_{ri} \quad (5)$$

여기서 평형 상수 K_{eq}^r 는 Gibbs 자유에너지의 최소 조건을 이용해서 구할 수 있다.

$$K_{eq}^r = \left(\frac{1 \text{ atm}}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^N (\nu''_k - \nu'_k)} \exp \left[\sum_{k=1}^N (\nu''_k - \nu'_k) \left(\frac{S_k}{R} - \frac{H_k}{RT} \right) \right] \quad (6)$$

여기서 온도의 함수로 이루어진 엔트로피 S_k 와 엔탈피 H_k 는 표준 상태의 비열 데이터 이용하여 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\frac{H_k}{RT} = \frac{1}{RT} \left[\int^T C_{pk} dT + H_{fk} \right] \quad (7)$$

$$\frac{S_k}{R} = \int^T \frac{dH_k}{RT} = \int^T \frac{C_{pk} dT}{RT} \quad (8)$$

본 연구에서 해석은 정압 용기에 채워진 수소 공기 혼합 기체를 대상으로 하였으며, 해석 조건은 초기 조건이 당량비 1에 10기압 1,200K인 경우를 대상으로 하였다. 이와 같은 조건은 스크램 제트 엔진의 연소실 입구 조건 정도에 해당하는 값이다.

2.2 해석 방법

표준 4단계 Runge-Kutta 방법을 식 (1)의 해석에 적용하는 경우 해석 순서는 다음과 같다.

$$X^0 = X^n \quad (9)$$

$$X^1 = X^n + \frac{1}{2} \Delta t W(X^0)$$

$$X^2 = X^n + \frac{1}{2} \Delta t W(X^1)$$

$$X^3 = X^n + \Delta t W(X^2)$$

$$X^{n+1} = X^n + \frac{1}{6} \Delta t \sum_{l=0}^3 W(X^l)$$

한편 표준 4단계 Runge-Kutta 방법에 음해법을 적용하면 다음과 같다.

$$\begin{cases} [I - \frac{\Delta t}{2} J^0] \Delta X = W(X^0), & X^1 = X^0 + \Delta X \\ [I - \frac{\Delta t}{2} J^1] \Delta X = W(X^1), & X^2 = X^0 + \Delta X \\ [I - \Delta t J^2] \Delta X = W(X^1), & X^3 = X^0 + \Delta X \\ [I - \frac{\Delta t}{6} \sum_{i=0}^3 \alpha_i J^i] \Delta X = \frac{1}{6} \Delta t \sum_{i=0}^3 \alpha_i W(X^i), & X^{n+1} = X^n + \Delta X \end{cases} \quad (10)$$

식 (9)에서 계수 값 α 는 다음과 같이 정의된다.

$$\alpha_0 = 1, \alpha_1 = 2, \alpha_2 = 2, \alpha_3 = 1 \quad (11)$$

본 연구에서 고려한 부분 음해법은 농도 변수 벡터 \mathbf{x} 를 경직성 있는 성분과 경직성이 없는 벡터 \mathbf{x}_{im} 와 경직성이 있는 없는 벡터 \mathbf{x}_{ex} 로 분할하여 경직성이 있는 성분과 경직성이 없는 벡터에 대해서는 식 (10)의 과정을 수행하고 경직성이 없는 성분과 경직성이 없는 벡터에 대해서는 식 (9)의 과정을 수행하는 방법을 일컫는다.

$$\begin{aligned} X &= [X_{im}, X_{ex}]^T & (12) \\ X_{im} &= [[X_1], \dots, [X_{N_i}]]^T \\ X_{ex} &= [[X_{N_i+1}], \dots, [X_{N_s}]]^T \end{aligned}$$

여기서 N_i 는 음해법으로 해석하는 화학종의 수이며, 이와 같은 부분 음해법의 경우 완전한 음해법과 비교하여 행렬의 해석에 소요되는 연산 횟수의 비율은 이론적으로 $(N_i/N_s)^3$ 이다.

3. 해석 결과 및 분석

3.1 반응 성분의 민감도 해석

수소-공기 반응 기구의 해석에서 음해법으로 해석하는 성분을 선택하기 위하여 반응의 전반 과정에서 반응의 민감도를 나타내는 화학 반응을 Jacobian 행렬의 변화 거동을 살펴보았다.

Fig. 1은 Jacobian 행렬의 고유치의 크기 변화를 나타낸 그림이다. 이 그림에서 13개의 고유치들은 각기 매우 큰 수준의 차이를 보이며 고유치의 최대 크기는 한두 가지 성분과 의해서만 지배되는 것을 알 수 있다. 여기서 특정 성분과 의해서 반응이 지배된다는 사실은 알 수 있었지만 어떠한 성분이 이에 기여하고 있는 지에 대해서는 알 수 없었다. 고유치의 경우 순서가 따로 정해져 있는 것이 아니어서 특정 성분의 기여도를 알 수 없기 때문이다. 이에, Jacobian 행렬의 각 성분의 변화 즉, 성분의 생성의 민감도를 살펴보았다.

Fig. 2는 여러 성분 중 대표적으로 NO 생성의 민감도에 대한 주요 성분의 영향을 도시한 그림이다. 이 그림에서 NO의 생성에 미치는 주요

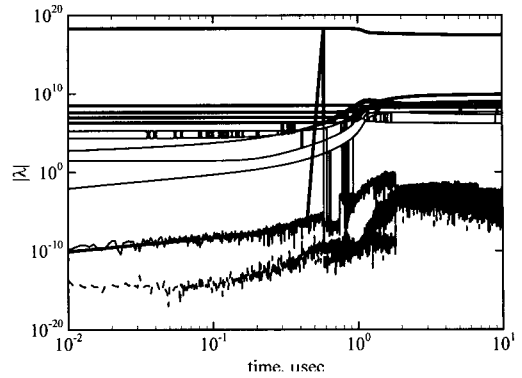


Fig. 1 Temporal Variation of eigenvalues of the chemical Jacobian matrix

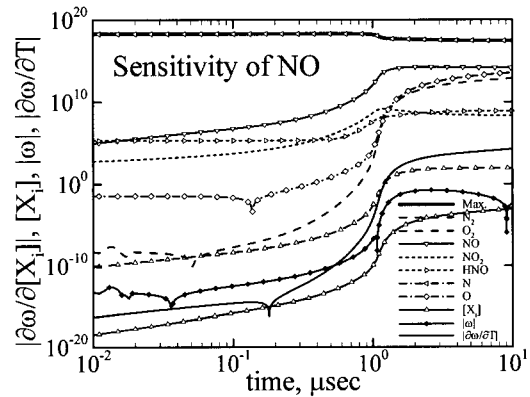


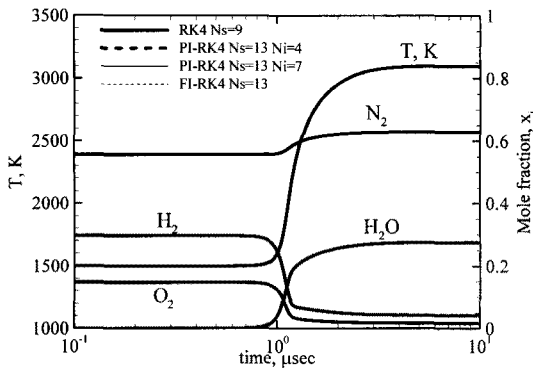
Fig. 2 Sensitivity of NO production rate

성분은 N, NO, O, O₂ 등의 순서임을 알 수 있고, 이 중에서 N에 의한 민감도가 가장 큰 것을 알 수 있다. 이는 주지의 사실과 같이 thermal NOx 생성 기구가 매우 작은 양을 가지는 N에 크게 의존하는 사실을 재확인할 수 있는 결과이다.

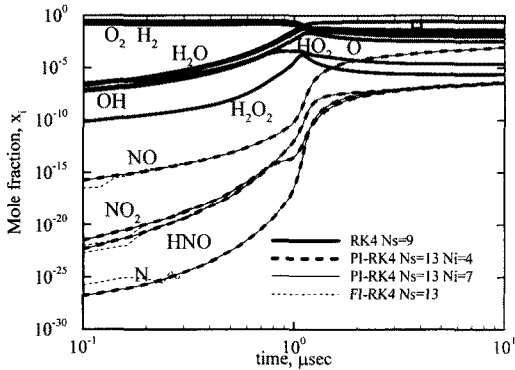
다른 성분과 대한 분석 결과는 농도 당 반응율의 정도의 차이는 있을 지언정 대체로 유사한 경향을 보여 주었다. 민감도 해석에서 농도 당 반응율의 진동이 생기는 경우가 있는데, 이는 계산과정에서 생기는 반올림 오차(round-off error)에 의해 발생한다. 이것은 민감도를 해석하는데 있어서 영향을 미치지 않으며 다른 방법으로 Jacobian 행렬을 계산하면 진동을 없앨 수 있다.

3.2 음해법 대상 화학종의 선택

이 결과로부터 본 연구에서는 부분 음해법으로



(a) variation of temperature and mole fractions



(b) variation of mole fractions

Fig. 3 Comparison of the variation from different time integration schemes

로 해석할 성분을 두 가지 조합으로 선택하였다. 첫째는 Table 1에서 모든 NOx 반응 기구에 참여하는 7가지 주요 화학종(N₂, N, NO, NO₂, HNO, O, OH, O₂)의 조합이며, 다른 하나는 민감도 해석의 결과로 보여진 4가지 주요 화학종 (N, NO, O, O₂)의 조합이 그것이다. 또한, NOx 반응을 고려하지 않고 질소를 비활성으로 가정한 수소-산소 반응과, 13 가지 모든 성분을 고려하는 경우를 비교하였다.

위의 그림은 서로 다른 성분 조합을 이용한 해석의 결과를 비교한 그림이다. Fig. 3(a)에서의 해석 결과는 성분 조합과 방법에 관계없이 육안으로 구분하기 어려운 동일한 결과를 보이고 있다. Fig. 3(b)에서는 매우 작은 몰 분율을 가지는 성분에 대한 해석 방법에 따른 변화가 발생하는 지에 대해 살펴보았으며, 이에 의하면 모든 성분을 음해법으로 해석하는 경우를 제외하고는 동일

한 결과를 나타내고 있음을 확인 할 수 있다. 여기서 모든 성분을 음해법으로 해석한 결과가 초기에 정상적이지 않은 경향을 보여주는 것은 매우 작은 양을 가지는 성분의 생성과정을 해석함에 있어 행렬 계산에서 발생하는 반올림오차 (round-off error)에 의한 결과로 여겨진다.

보다 정량적인 비교를 위하여 해석 종료 시점에서의 결과 중 일부를 Table 2 에 정리하였다. 이 결과에서 각 방법에 의한 해석 결과는, NOx 생성을 예측할 수 없는 수소-산소 반응을 제외하고는 매우 유사한 결과를 보여주며 0.01% 이하의 오차만을 보임을 알 수 있다. 이는 근본적으로 음해법에 필요한 예조건 행렬이 다를 뿐 물리적 정확도를 지배하는 반응율은 동일하기 때문에 나타나는 당연한 결과이다.

아울러 Pentium 4 3GHz PC를 이용한 해석 시간은 NOx 생성 반응을 고려하는 해석이 수소-산소 반응만을 이용하는 해석에 비하여, 본 연구에서 제시하는 부분 음해법을 이용하는 경우에도 최소 3 배 이상의 계산 시간이 더 소요됨을 알 수 있다. 이는 9개에서 13개로 증가된 화학종 수, 19개에서 32개로 늘어난 반응의 수, 그리고 행렬 연산에 필요한 시간이 더해져서 나타난 결과이다. 4개의 성분에 대하여 부분 음해법을 적용한 경우는 완전 음해법에 비하여 방정식의 수나 성분의 수는 동일하지만 행렬 계산 시간이 대폭 절감됨으로써 40% 이상의 시간 절감 효과를 가짐을 알 수 있다. Table 2에서 부분 음해법을 사용한 두가지 경우를 비교해보면 온도나 몰분율 등은 동일한 값을 가지지만 계산시간은 4개의 성분을 음해법으로 해석하는 경우가 빠른 것을 확인할 수 있다. 즉, 4 성분을 음해법으로 해석하는 것이 경직성의 문제를 해결하면서 연소 과정을 가장 효율적으로 해석할 수 있는 것이다.

한편 각 방법의 안정성을 비교하기 위하여 시간 간격을 조절하며 계산을 수행 하였으며, 모든 경우에 수소-산소 반응에 적용된 양해법과 동일한 수준의 안정성을 가짐을 알 수 있었다. 특히 완전 음해법의 경우 다소 큰 시간 간격을 사용할

Table 2 Comparison of final solution with different time integration schemes

	T, K	X _{H2O}	X _{NO}	computing time, s
RK4 Ns=9	3097.8	0.27429	0	0.83
PI-RK4 Ns=13, Ni=4	3096.3	0.27426	9.0641×10 ⁻⁴	2.87
PI-RK4 Ns=13, Ni=7	3096.3	0.27426	9.0645×10 ⁻⁴	3.19
FI-RK4 Ns=13	3096.2	0.27422	9.0505×10 ⁻⁴	4.89

수 있는 것처럼 보이기도 하였으나, Fig. 3에서 보이는 바와 같은 질소 산화물 계열 성분에 대한 오차는 좀 더 심한 진동을 보여, 실질적인 안정성은 모든 방법이 동일한 수준임을 확인할 수 있었다.

4. 결 론

부분 음해법은 경직성의 문제가 발생하는 ODE문제의 상세 반응 기구를 해석하기 위해 제안되었다. 여기서 제안된 방법은 양해법을 해석의 기초로 하고 경직성의 문제를 유발하는 일부 생성 화학종에 대해서 음해법으로 해석하는 것을 일컫는다. 경직성의 문제를 유발하는 화학종은 민감도 해석을 통해 선별하며 선별된 화학종만을 음해법으로 해석하였다.

본 연구에서 상세 NO_x 생성 반응 기구의 수소-공기 반응에 부분 음해법을 적용하였으며, 음해법으로 해석할 성분은 두 가지 조합으로 이루어졌다. 여기서 두 가지 조합은 첫째 NO_x 반응 기구에 참여하는 7가지 주요 화학종 (N, NO, O, O₂, NO₂, HNO, OH)과 둘째 민감도 해석 결과에 따른 4가지 주요 화학종 (N, NO, O, O₂)이다. 질소를 불활성으로 가정한 수소-산소 반응과 완전 음해법으로 해석한 경우를 두 가지 조합을 고려한 부분 음해법으로 해석한 것과 비교하였다. 수소-산소 반응을 제외하고 모두 유사한 결과를 보였다. 해석 시간에 있어서는 상세 NO_x 생성 기구의 수소-공기 반응에서 부분 음해법을 적용한 경우 완전 음해법을 통한 해석에 비해 해석 시간이 절반정도 절감되었으며 질소를 불활성이라고 가정한 수소-산소 반응에 비하면 3배 이상의 해석시간이 소요되는 것을 확인할 수 있다.

후 기

본 연구는 방위사업청과 국방과학연구소의 연구비 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] Eberhardt, S., and Imlay, S., "Diagonal implicit scheme for computing flows with finite rate chemistry," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 6, No. 22, 1992, pp.208 - 216.
- [2] Kim, S.-L, Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Park, Y.-H., "Application of Approximate Chemical Jacobians for Constant Volume Reactor and Shock-Induced Combustion," *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 39, 2001, pp.87-104.
- [3] Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 2: Comparison," *AIAA Journal*, Vol. 38, No. 7, July 2000, pp.1188-1195..
- [4] Jachimowski, C. J., "An Analytical Study of the Hydrogen-Air Reaction Mechanism With Application to Scramjet Combustion," NASA TP-2791, Feb. 1988.
- [5] Choi, J.-Y., Yang, V. and Ma., F., "Combustion Oscillations in a Scramjet Engine Combustor with Transverse Fuel Injection," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30/2, Jan. 2005, pp. 2851-2858.