

## 論文

## 다화학종 GH 방정식의 정확성 향상을 위한 벽면 경계조건 연구 및 GH 방정식의 엔트로피 특성 고찰

안재완\*, 김종암\*\*

### The Slip-Wall Boundary Conditions Effects and the Entropy Characteristics of the Multi-Species GH Solver

Jae Wan Ahn\* and Chongam Kim\*\*

#### ABSTRACT

Starting from the Eu's GH(Generalized Hydrodynamic) theory, the multi-species GH numerical solver is developed in this research and its computational behaviors are examined for the hypersonic rarefied flow over an axisymmetric body. To improve the accuracy of the developed multi-species GH solver, various slip-wall boundary conditions are tested and the computed results are compared. Additionally, in order to validate the entropy characteristics of the GH equation, the entropy production and entropy generation rates of the GH equation are investigated in the 1-dimensional normal shock structure test at a high Knudsen number.

#### 초 록

본 연구에서는 다화학종 희박유동의 해석을 위해, GH(Generalized Hydrodynamic) 방정식을 기반으로 한 축대칭 유동 해석이 가능한 다화학종 GH 수치해석 기법을 전산유체역학 수치해석자로서 개발하였다. 최초로 구현된 다화학종 GH 수치기법은 축대칭 형상의 물체 주위의 극초음속 희박유동을 대상으로 하여, DSMC(Direct Simulation Monte Carlo) 및 N-S(Navier-Stokes) 방정식의 결과와의 비교를 통해 정확도를 검증하고자 하였다. GH 해석자의 정확도 향상을 위해 고체 벽면에서의 여러 가지 slip-wall 경계조건을 적용하고 각각의 결과를 비교하였다. 또한, 높은 Knudsen 수의 1차원 수직 충격파 구조 문제를 통해 GH 방정식의 엔트로피 특성 및 정확성을 고찰하였다.

**Key Words** : Multi-species GH equation(다화학종 GH 방정식), Hypersonic rarefied flow(극초음속 희박유동), Slip-wall boundary condition(slip 벽면 경계조건), Entropy production(생성 엔트로피), Langmuir boundary condition(Langmuir 경계조건)

#### 1. 서 론

희박유동의 해석은 낮은 밀도로 인해 분자간 평균자유행정(mean free path)이 증가하고 분자간 충돌이 감소하여 비평형 특성이 현저히 발생하게 된다. 희박유동의 해석자로서 기체역학적 접근 방법(gaskinetic approach)은 Knudsen 수의

† 2009년 6월 2일 접수 ~ 2009년 9월 22일 심사완료

\* 정희원, 서울대학교 기계항공공학부 대학원

\*\* 정희원, 서울대학교 기계항공공학부

교신저자, E-mail : chongam@snu.ac.kr

서울시 관악구 신림동 산56-1

증가에 따라 증대되는 비평형형을 예측하기에는 한계가 있었다. N-S(Navier-Stokes) 방정식이 적용될 수 있는 유동 영역은 매우 낮은 값의 Knudsen 수를 전제로 하고 있으며, 천이 영역(transition flow regime,  $0.01 \leq Kn \leq 1$ )에서도 정확도가 낮아 실용적이지 못하였다. 이러한 기체역학적 접근 방법의 한계를 극복하기 위한 노력이 최근 20여 년 동안 진행되어 왔으며, GH 방정식, Burnett 방정식, BGK 기법 등이 이에 해당한다. 이들 기체역학적 방법은 DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)로 대표되는 분자동역학적 방법(molecular dynamic approach)에 비해 상대적으로 정확성이 떨어지는 단점이 있으며, 이러한 차이는 Knudsen 수가 높아질수록 더욱 크게 나타나게 된다. 그러나 DSMC는 계산에 필요한 조율 파라미터(tuning parameter)가 많고, 가상분자 샘플링에 관한 상당한 경험이 필요하며, 무엇보다 천이영역 이하의 Knudsen 수에서는 계산 효율이 극도로 낮아지는 단점을 갖고 있다. 따라서 대략적으로  $Kn \leq 0.01$ 의 구간에서는 기체역학적 방법이 계산효율 면에서 상대적인 장점이 있으며,  $Kn \geq 1$ 의 구간에서는 DSMC가 정확도 및 계산효율의 측면에서 장점을 갖는다고 할 수 있다. 천이영역에서는 기체역학적 방법의 정확도가 여전히 낮고, DSMC의 계산효율이 나쁜 영역이므로, 기체역학적 방법의 정확도를 향상시킬 수 있다면 이러한 천이영역에서 DSMC에 비해 사용상의 우위를 보일 수 있을 것이다.

본 연구에서 다루는 GH 방정식도 기체역학적 접근 방법의 하나이나, 유도 과정에서부터 열역학 제2법칙을 엄밀히 따르도록 하여 기존의 Burnett 방정식에서 보이는 음의 생성 엔트로피와 같은 문제를 근본적으로 해결하였다. 또한 단원자 및 이원자 분자에 대한 기체 분자의 특성이 충분히 반영되어 분자의 회전 에너지(rotational energy)의 비평형성 등을 상대적으로 정확히 예측할 수 있다. 그동안 GH 방정식에 관한 기존 연구는 단원자 분자 또는 이원자 분자로만 구성된 단일 화학종 유동에 대해서만 이루어졌으나, 본 연구에서는 단원자 및 이원자 분자가 혼합되어 있는 다화학종 유동을 위한 GH 방정식을 유도하였다[1]. 기존 연구로는 Myong의 단일 화학종을 대상으로 하여 단원자 분자[2]와 이원자 분자[3] 희박유동을 해석하는 수치연구가 있었으나, GH 구성식을 직접 풀지 않았고, 2차원 문제에 국한되어 왔다. 본 연구를 통해 다화학종 GH 방정식의 근사적 형태를 처음으로 유도하였으며, 이를 기반으로 전산유체역학적 수치 해석자를 새로 개발하였다.

본 논문에서는 다화학종 GH 수치해석자를 소개하고, 정확도 향상을 위해 여러 slip-wall 경계조건을 적용한 극초음속 희박유동 결과를 고찰하였다. 정확성을 살펴보기 위해 DSMC 및 N-S 방정식 결과와의 비교를 수행하였으며, 각 경계조건의 특성을 간단히 살펴보았다. 이를 통해 희박유동 해석 및 GH 방정식에서 벽면 경계조건의 중요성을 보이고, 정확한 해석을 위한 벽면 경계조건의 요건을 추론하였다. 또한 GH 방정식이 갖는 장점의 하나인 열역학 제2법칙의 엄밀한 충족을 입증하기 위해, 높은 Knudsen 수를 갖는 1차원 수직충격파에서 엔트로피 및 엔트로피 생성률 결과를 관찰하였다.

## II. 지배 방정식

축대칭 형태의 다화학종 GH 방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다[1].

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho E \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I} \\ \rho E + p \end{pmatrix} \mathbf{u} + \frac{1}{y} \mathbf{H} \quad (1)$$

$$+ \nabla \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \sum_i (\Pi_i + \omega \Delta_i \mathbf{I}) \\ \sum_i \{ (\Pi_i + \omega \Delta_i \mathbf{I}) \cdot \mathbf{u} + \mathbf{Q}_i \} \\ \frac{\rho_i}{\rho} D_{c_i} c_{c_i} \end{pmatrix} + \frac{1}{y} \mathbf{H}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ S_i \end{pmatrix}$$

위의 지배 방정식에서 첨자  $i$ 는 각각의 화학종을 지칭하고, 본 연구에서는 공기를 구성하는  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$ ,  $O$ 의 다섯 가지 화학종을 의미한다. 위 식에서  $D_{c_i}$ 는 화학적 확산 계수,  $c_{c_i}$ 는 전체 유체의 분자량에 대한  $i$ 번째 화학종의 분자량 비를 각각 나타낸다. 이들은 Blottner 화학반응 모델[4]에 사용된다. 우변의  $S_i$ 는 화학반응으로 인한 각 화학종의 밀도 변화를 나타내는 source 항이다.

지배방정식은 대체로 N-S 방정식과 유사하나, 점성 플럭스에 excess normal stress( $\Delta$ )가 포함되어 있는 점과 응력 텐서( $\Pi$ ), 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. 앞서 언급한 화학반응 모델은 N-S 방정식 지배방정식 차원에서 적용되었으며, GH 구성식은 화학반응을 고려한 N-S 방정

식에서 구한 응력 텐서와 열전달 벡터 등의 비보존항들을 초기값으로 하여 GH 이론에 따라 더욱 정확한 값을 구하는 데 사용된다.

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

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

$$\rho \frac{D}{Dt} \left( \frac{\mathbf{Q}'_i}{\rho} \right) = -d_t \mathbf{u} \cdot (\Pi_i + \omega \Delta_i \mathbf{I}) - \mathbf{Q}'_i \cdot \nabla \mathbf{u} - (p_i + \omega \Delta_i) C_p T \nabla \ln T - \Pi_i \cdot \nabla h - \frac{p_i C_{pi} T}{\lambda} q(\kappa) \sum_j \mathbf{Q}'_j \quad (4)$$

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

식 (2)~(5)에서 첨자  $i$ 와  $j$ 는 각각의 화학종을 의미하며,  $k_{T,i}$ 는 열확산 계수,  $\lambda$ 는 열전달 계수와 온도의 곱이다.  $\mathbf{I}$ 는 단위 정사각 행렬이며,  $q(\kappa)$ 는 분자간 충돌에 의한 소산항으로서 엔트로피 증가에 관련된다. 소산항은 다음과 같이 정의된다[5-7].

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

$\kappa$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$\kappa^2 = \frac{g}{k_B T} \sum_i \sum_j \left( \frac{\Pi_i : \Pi_j}{2\mu} + \gamma' \frac{\Delta_i \Delta_j}{\mu_b} + \frac{\mathbf{Q}'_i \cdot \mathbf{Q}'_j}{\lambda} + p D_{ij} \mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j \right) \quad (7)$$

$g$ 는 분자들의 상대속도이며,  $k_B$ 는 볼츠만 상수이다. 식 (7)에서  $\mathbf{d}_i$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$\mathbf{d}_i = \nabla \left( \frac{n_i}{n} \right) + \left( \frac{n_i}{n} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \nabla \ln p \quad (8)$$

식 (2)~(5)의  $\mathbf{J}_i$ 는 소산 플럭스 벡터로 식 (9)

와 같이 분자의 충돌에 의한 소산과 열적 소산의 합으로 정의된다[4].

$$\mathbf{J}_i = -\rho_i \left( \sum_j D_{ij} \mathbf{d}_j - D_{T,i} \nabla \ln T \right) \quad (9)$$

식 (9)에서  $D_{i,j}$ 와  $D_{T,i}$ 는 각각  $i$ 화학종과  $j$ 화학종의 충돌로 인한 소산계수와  $i$ 화학종의 열적 소산계수이다.

다화학종 GH 방정식에서는 단원자 분자와 이원자 분자를 구분하여 기술해야 한다. 이는 단원자 분자의 경우 excess normal stress가 0임을 의미하며, 식 (1)~(5)에서  $\omega$ 를 0으로 설정함으로써 구현할 수 있다[1].

GH 구성식 (2)~(5)는 Eu의 단열 가정[5,7]에 따라  $\Pi$ ,  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{J}$ ,  $\Delta$  등의 비보존항이 밀도, 온도, 압력 등에 비해 월등히 빠르다고 가정할 수 있으며, 이는 좌변의 시간미분항을 0으로 간주할 수 있음을 의미한다. 그 결과 GH 구성식은 비선형 대수 방정식이 되며 수치적 해석자를 이용해 해를 구할 수 있다.

### III. 수치 기법 및 벽면 경계조건

#### 3.1 수치 기법

본 연구에서 사용된 수치 기법을 개괄하면 다음과 같다. 플럭스 분할 기법으로써 AUSMPW+ 기법을 사용하였으며, 정확도의 향상을 위해 2차 MUSCL과 van Albada 제한자를 사용하였다. 시간 적분 기법으로는 LU-SGS를 사용하였다. 5가지의 화학종( $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$ ,  $O$ )의 화학반응은 유동 변화에 비해 상대적으로 매우 느린 현상으로 수렴성을 크게 저하시키게 된다. 본 연구에서는 수렴성을 높이기 위해 화학반응 source항을 내재적 방법으로 처리하였다. GH 구성식의 해를 구하기 위한 수치적 해석자로는 Broydn 기법을 사용하였다[8].

#### 3.2 벽면 경계조건

고체 벽면에서의 미끄러짐 현상(velocity slip)과 온도 불연속(temperature jump)을 반영하는 벽면 경계조건은 희박유동의 해석에 있어 가장 큰 영향을 미치게 된다. 본 연구에서는 다화학종 GH 방정식의 정확성 향상에 미치는 slip-wall 경계조건의 영향을 비교하기 위해 non-slip 경계조건, 단화학종 및 다화학종에 대한 Langmuir 경계조건, 1차 및 2차 정확도를 갖는 Maxwell 경계조건 및 2차 정확도의 Karniadakis 경계조건을 비교하여 해석을 수행하였다.

Langmuir 경계조건[9]은 고체벽면에 충돌하는 기체 분자의 벽면 흡착도를 모델링한 Langmuir의 흡착이론을 토대로 하여 구성되었으며 다음과 같이 기술된다.

$$u = \alpha u_w + (1 - \alpha) u_g \quad (10)$$

$$T = \alpha T_w + (1 - \alpha) T_g \quad (11)$$

위 식에서 첨자  $w$ ,  $g$ 는 각각 벽면 및 벽면에서 가까운 곳에서 유체가 갖는 물성치를 의미한다.  $\alpha$ 의 값은 이원자 분자의 경우, 다음과 같은 식으로 구할 수 있다[9].

$$\alpha = \frac{\sqrt{\beta p}}{1 + \sqrt{\beta p}} \quad (12)$$

$$\beta = \frac{A I}{k_B T} \exp\left(\frac{D_e}{k_B T_w}\right) \quad (13)$$

단원자 분자의 경우는 식 (12)에서 제곱근이 없는 형태가 된다.

$$\alpha = \frac{\beta p}{1 + \beta p} \quad (14)$$

다화학종 유동의 경우  $N_2$ 와  $O_2$ 의 흡착도가 각각의 물분류에 비례하므로  $\alpha$ 를 다음과 같이 구할 수 있다[10].

$$\alpha = n_{N_2} \frac{\sqrt{\beta_{N_2} p}}{1 + \sqrt{\beta_{N_2} p}} + n_{O_2} \frac{\sqrt{\beta_{O_2} p}}{1 + \sqrt{\beta_{O_2} p}} \quad (15)$$

위 식에서  $n_{N_2}$ 와  $n_{O_2}$ 는 각각 질소와 산소의 물분류이고  $\beta_{N_2}$ 와  $\beta_{O_2}$ 는 식 (13)에서  $D_e$ 의 값을 질소와 산소의 특성에 따라 달리 도입하여 구한 값이다.  $D_e$ 는 분자가 고체벽면에 흡착될 때 방출하는 에너지로, 질소의 경우  $1.32 \text{ kcal/mol}$ 의 값을 가지며, 산소의 경우  $3 \sim 8 \text{ kcal/mol}$ 의 값을 갖는다. 본 연구에서는 산소의 흡착 에너지로 대략  $5 \text{ kcal/mol}$ 의  $D_e$  값을 사용하였다[11].

1차 정확도의 Maxwell 경계조건은 다음과 같이 서술된다[11].

$$u_g - u_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{\mu}{\rho(2RT_w/\pi)^{1/2}} \frac{\partial u_s}{\partial n} \quad (16)$$

$$T_g - T_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \left[ \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma + 1} \right] \times \frac{k}{\rho R(2RT_w/\pi)^{1/2}} \frac{\partial T}{\partial n} \quad (17)$$

위의 두 식에서  $\sigma$ 는 수용계수(accommodation coefficient)이며, 0에서 1 사이의 값을 갖는다.  $\partial/\partial n$ 은 벽면으로부터 평균자유행정의 거리만큼 떨어진 곳과 벽면 사이의 속도 또는 온도 구배를 의미한다.

2차 정확도의 Maxwell 경계조건은 다음과 같이 기술된다[11,12].

$$u_g - u_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \left[ \frac{\mu}{\rho(2RT_w/\pi)^{1/2}} \frac{\partial u_s}{\partial n} + \frac{1}{2} \frac{\mu^2}{\rho^2(2RT_w/\pi)} \frac{\partial^2 u_s}{\partial n^2} \right] \quad (18)$$

$$T_g - T_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma + 1} \times \left[ \frac{k}{\rho R(2RT_w/\pi)^{1/2}} \frac{\partial T}{\partial n} + \frac{k\mu}{2\rho^2(2RT_w/\pi)} \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} \right] \quad (19)$$

2차 정확도를 갖는 Karniadakis 경계조건은 다음과 같다[11,12].

$$u_g - u_w = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \left[ \frac{\mu}{\rho(2RT_w/\pi)^{1/2}} \frac{\partial u_s}{\partial n} + \frac{\mu^2 \frac{\partial u_s}{\partial n}}{2\rho^2(2RT_w/\pi) \frac{\partial u_s}{\partial n} - \mu\rho(2RT_w/\pi)^{1/2} \frac{\partial^2 u_s}{\partial n^2}} \frac{\partial^2 u_s}{\partial n^2} \right] \quad (20)$$

Karniadakis 경계조건에서는 온도 조건으로서 식 (19)를 동일하게 사용한다.

Langmuir 경계조건의  $D_e$ 는 Karniadakis 조건을 포함한 Maxwell 계열 경계조건의 수용계수와 동일한 역할을 한다. 다만 Maxwell 경계조건의 수용계수는 실험적으로 정의되기가 용이하지 않으며 마치 조율 파라미터와 같은 기능을 하게 되나, Langmuir 경계조건의 흡착에너지 값은 실험에 의해 그 값이 정확히 결정될 수 있다. 덧붙여, GH 방정식에는 밀도 변화에 따른 응력과 열전달량의 변화가 이미 내재되어 있으므로, Maxwell 경계조건과 같이 속도 구배, 온도 구배, 밀도 등을 도입하지 않고 Langmuir 경계조건과 같이 간단한 조건으로도 충분히 정확성을 높일 수 있다[1].

## IV. 수치해석 결과 및 고찰

### 4.1 축대칭 극초음속 희박유동

스페이스 셔틀의 앞전을 모델로 쌍곡선 단면의 축대칭 형상에 대한 극초음속 희박유동을 해

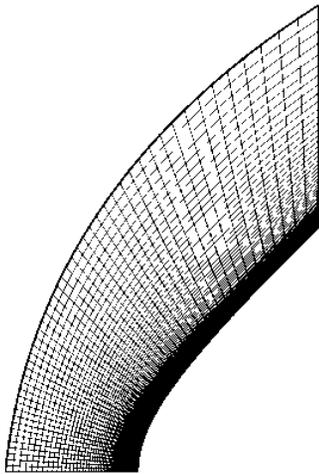


그림 1. 스페이스 셔틀 앞전 형상 및 격자계

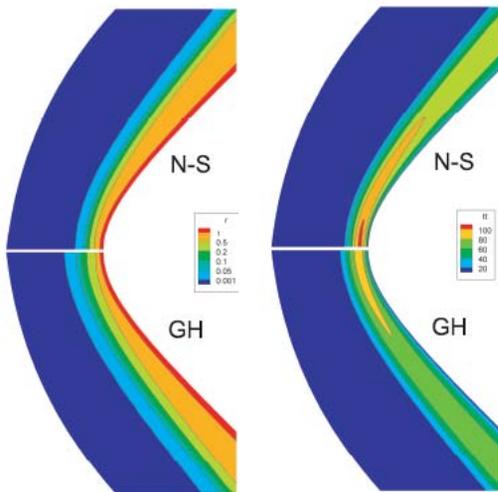


그림 2. 스페이스 셔틀 앞전 주위의 등밀도선(왼쪽, 로그 척도)과 등온선(오른쪽) 분포

석하였다. 자유류 조건은  $M=25.3$ ,  $Re=170$ ,  $Kn=0.227$ ,  $T_w=223K$ ,  $T_\infty=560K$ 이다[13]. 스페이스 셔틀의 앞전 형상은 쌍곡선 회전체이며, 곡률 반경은 1.362m, 접근선의 각도는  $42.5^\circ$ 이다. 레이놀즈수는 앞전 곡률반경을 기준으로 한 값이다. 그림 1에 사용된 격자계를 도시하였으며, 격자수는  $51 \times 81$ 개이다.

그림 2는 각각 무차원화된 등밀도선(로그 척도)과 등온선 분포를 도시한 것이다. 밀도가 로그 척도임을 감안할 때 대부분의 유체 밀도가 스페이스 셔틀 앞전 표면에 집중되어 나타남을 알

수 있다. 이는 밀도가 낮은 희박유동에서 충격파가 생기지 않는 점을 잘 보여주는 결과이다. N-S 방정식과 GH 방정식의 결과를 비교해 보면, GH 방정식의 결과에서 밀도와 온도 모두 N-S 방정식 결과보다 더 넓은 영역에 걸쳐 점진적인 변화를 보이고 있음을 알 수 있다. 희박유동에서는 분자간의 충돌이 충분하지 않아 온도 등의 물리량이 변화하는 데 상당한 시간이 소요된다. N-S 방정식의 결과에서 보이는 것과 같은 급격한 변화는 물성치 변화에 소요되는 시간이 상대적으로 짧음을 의미하며 GH 방정식에 비해 비평형성이 적게 나타남을 의미한다. 희박유동에서 일반적으로 보이는 비평형 특성을 고려할 때, GH 방정식의 결과와 같이 넓은 영역에 걸쳐 유동의 물리량이 변화하는 것이 정성적 측면에서 물리적으로 더욱 타당하다고 여겨진다.

그림 3에 정체 유선 상에서의 무차원 밀도(로그 척도)를 각 벽면 경계조건에 따라 계산한 결과를 도시하였다. 동일한 다화학종 GH 수치해석자를 사용하였으나, 벽면 경계조건에 따라 밀도 분포에 차이가 있음을 확인할 수 있다. Non-slip 경계 조건의 결과는 전체적으로 과도하게 높은 밀도 분포를 보이고 있어 희박유동의 해석에 적합하지 않음을 알 수 있다. 단화학종 및 다화학종 Langmuir 모델의 경우, 큰 차이는 발견하기 어려우나 근소하게 다화학종 Langmuir 모델이 DSMC 결과에 근접함을 알 수 있었다.

Maxwell 계열 경계 조건에 국한해서 살펴보면, 1차 정확도와 2차 정확도 모델의 차이 역시 크지 않았으나, 2차 정확도 모델의 결과가 정체 점 근처에서 상대적으로 더 낮은 밀도 분포를 보였다. 한편 Karniadakis 모델과 Maxwell 2차 정

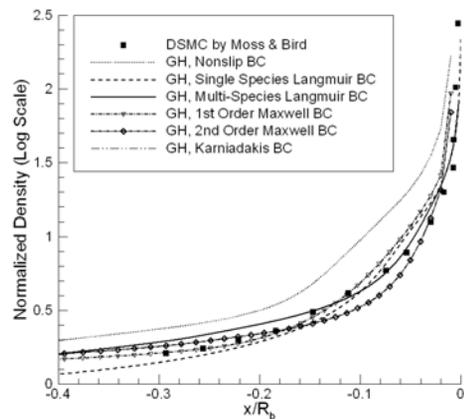


그림 3. 각 벽면 경계조건의 정체 유선 밀도 분포 비교

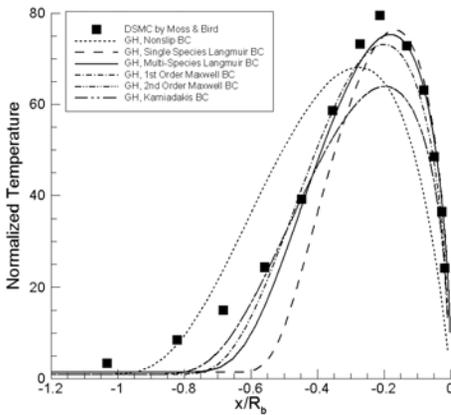


그림 4. 각 벽면 경계조건의 정체 유선 온도 분포 비교

확도 모델은 거의 동일하여 그림 3에서는 겹쳐져서 표현될 정도로 차이가 없는 밀도 및 온도 분포를 보였다. Karniadakis 모델이 Maxwell 2차 정확도 모델과 동일한 온도 경계조건을 사용하고 속도 경계조건만 차이가 남을 감안할 때(식 (20) 참조), 극초음속 유동에서는 속도 경계조건보다 온도 경계조건이 더 주요한 영향을 미치는 것을 알 수 있다. 그림 4는 정체 유선을 따라 무차원화된 온도분포를 도시한 것이다. Non-slip 경계조건 결과는 온도 변화 시작 위치와 최고 온도점 위치는 가장 전진해 있으나 최고 온도 값이 낮게 분포하여 slip 경계조건에 비해 차이를 많이 보였다. DSMC와 가장 유사한 결과를 보인 것은 다화학종 Langmuir 모델과 1차 정확도의 Maxwell 모델이었다. 2차 정확도의 Maxwell 모델은 지나치게 낮은 최대 온도 값과 과도하게 넓게 퍼진 분포를 보였다. 극초음속 유동의 해석에 있어 온도는 열전달량에 따른 온도의 구배임을 감안할 때, 1차 정확도의 Maxwell 경계조건이나 다화학종 Langmuir 경계조건으로 충분한 결과를 보이고 있다고 할 수 있다. 반면 여러 화학종을 고려하지 않은 이원자 분자 GH 방정식이나 단화학종 Langmuir 경계조건은 정확도 면에서 만족스럽지 못한 결과를 보였다.

그림 5는 정체 유선 상에서의 각 화학종별 밀도 분포를 도시한 것이다. 실선으로 표시된 GH 방정식의 결과를 보면, 정체점 부근에서  $N_2$ 와  $O_2$ 는 N-S 방정식의 결과에 비해 더 높은 값을 보이고  $O$ ,  $N$ ,  $NO$ 는 더 낮은 값을 보였다. 이는  $N_2$  및  $O_2$  분자가  $O$ ,  $N$ ,  $NO$  등으로 변화하는 화학반응이 GH 방정식 결과에서 더 적게 일어났음을 의미한다. 희박기체에서는 분자간의

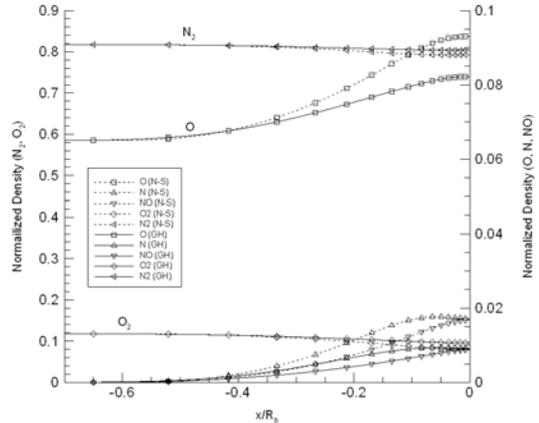


그림 5. 정체 유선 상에서의 화학조성 비교

충돌이 상대적으로 작음을 고려할 때 화학 반응이 상대적으로 적게 일어날 수밖에 없으므로, N-S 방정식의 결과에 비해 GH 방정식의 결과가 물리적으로 더 타당한 결과임을 알 수 있다.

#### 4.2 GH 방정식의 엔트로피 특성

GH 방정식의 대표적인 장점으로 꼽을 수 있는 것이 열역학 제 2법칙을 절대로 위배하지 않는다는 점이다[5,6]. 열역학 제 2법칙의 위배는 초기 Burnett 방정식이 가진 단점이었으며, GH 방정식에서는 이와 달리 Chapman-Enskog 확장으로부터 유도되지 않고 비평형 분포함수를 새로운 형태로 가정함으로써 열역학 제 2법칙을 엄밀하게 만족한다. 정성적 측면 외에 정량적으로도 엔트로피 값을 올바르게 예측할 수 있는지 알아보기 위해, 1차원 충격파 구조 문제를 해석하여 기준에 알려져 있는 연구 결과와 비교를 수행하였다. Mach 수는 1.4, Knudsen 수는 1.0이다.

압축성 유동에서 엔트로피 및 엔트로피 생성률(entropy production rate)은 다음과 같이 정의된다[14].

$$S = S_0 + \rho R \left[ \frac{1}{\gamma - 1} \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) - \ln \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right] \quad (21)$$

$$\dot{S} = \frac{\Phi_{vis}}{T} + \frac{\mu}{Pr} \frac{\gamma R}{\gamma - 1} (\nabla T \cdot \nabla T) \quad (22)$$

그림 6에 1차원 충격파의 무차원화된 엔트로피 결과를 도시하였다. 참고를 위해 ES-BGK 기법을 사용한 Chigullapalli 등의 연구 결과[15]와 비교하였으며, N-S 방정식 및 GH 방정식의 결과가 거의 유사한 엔트로피 분포를 보이고 있음을

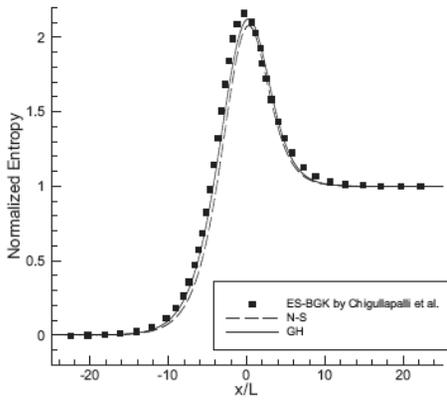


그림 6. 1차원 충격파에서의 생성 엔트로피 비교

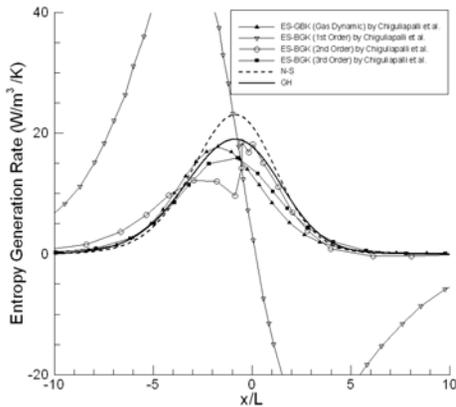


그림 7. 1차원 충격파에서의 엔트로피 생성률 비교

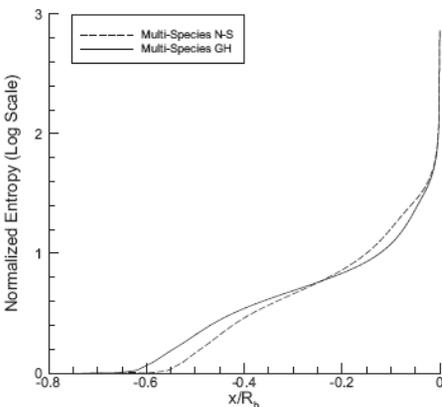


그림 8. 스페이스 셔틀 앞전의 정체 유선 상 엔트로피 분포

알 수 있다. 생성 엔트로피의 값이 같은 경우라 해도 엔트로피의 생성률은 달라질 수 있으며, 유동의 비평형 현상은 엔트로피 생성률을 통해 더욱 잘 드러나게 된다.

그림 7에 ES-BGK 기법[16]에 의한 엔트로피 생성률과 N-S 방정식, GH 방정식에 의한 엔트로피 생성률을 각각 비교하여 도시하였다. GH 방정식의 결과는 N-S 방정식의 결과와 비교하여 상대적으로 낮은 생성률을 보였으며, 3차 정확도의 ES-BGK 결과에 더 가까운 분포를 보였다. 이는 GH 방정식에 의한 엔트로피 생성이 N-S 방정식의 경우보다 더 적게 이루어짐을 의미하며, 희박유동에서 줄어든 분자간 충돌 빈도를 잘 반영하는 결과임을 알 수 있다.

그림 8에는 앞 장의 스페이스 셔틀 앞전 문제와 관련하여 정체 유선 상의 엔트로피 분포를 도시한 것이다. 전반적으로 GH 방정식으로 구한 엔트로피 분포가 더 넓은 영역에 완만한 기울기로 퍼져 있음을 알 수 있다.

## V. 결 론

본 연구에서는 다화학종 기체의 화학반응을 고려한 GH 방정식을 유도하였으며, 이를 바탕으로 축대칭 다화학종 GH 수치해석자를 수치기법화 하고, 전산유체역학 수치기법화를 수행하였다. 본 연구를 통해 처음으로 개발된 다화학종 GH 수치해석자의 정확성을 향상시키기 위한 노력의 일환으로, 여러 가지 slip-wall 경계조건을 비교하였다. 여러 화학종의 존재를 고려한 다화학종 Langmuir 경계조건과 1차 정확도의 Maxwell 경계조건의 경우, DSMC 결과와 근접한 밀도 및 온도 분포를 보였다. 본 연구에서는 이러한 GH 방정식의 특성에 따라, Maxwell 조건 및 Karniadakis 조건 등의 조율 파라미터를 필요로 하는 경계조건을 적용하지 않고도, 상대적으로 간단한 형태의 다화학종 Langmuir 경계조건만으로도 충분한 정도의 정확도를 확보할 수 있다는 점을 입증하였다.

아울러 GH 방정식의 대표적인 장점인 열역학 제 2법칙의 항상적인 충족을 입증하기 위해, 1차원 충격파 구조 문제를 대상으로 엔트로피 및 엔트로피 생성률을 해석 및 비교하였다. 이를 통해 N-S 방정식보다 GH 방정식이 분자간 충돌의 감소와 같은 희박유동의 특성을 잘 반영하였으며, 그 결과 더 낮은 엔트로피 생성률을 보임을 확인할 수 있었다.

## 후 기

본 연구는 두뇌한국 21사업과 교육과학기술부의 우주기초원천기술개발 사업(NSL, National Space Lab)의 지원으로 수행되었습니다(S10801000121-08A0100-12110).

## 참고문헌

- 1) Jae Wan Ahn and Chongam Kim, "An Axisymmetric Computational Model of Generalized Hydrodynamic Theory for Rarefied Multi-species Gas Flows", *J. Comp. Phys.*, 228(11), 2009, pp. 4088~4117.
- 2) R. S. Myong, "A Computational Method for Eu's Generalized Hydrodynamic Equations of Rarefied and Microscale Gas Dynamics", *J. Comp. Phys.*, 168, 2001, pp. 47~72.
- 3) R. S. Myong, "A Generalized Hydrodynamic Computational Model for Rarefied and Microscale Diatomic Gas Flows", *J. Comp. Phys.*, 195, 2004, pp.655~676.
- 4) R. N. Gupta, J. M. Yos, R. A. Thompson and K. P. Lee, "A Review of Reaction Rates and Thermodynamic and Transport Properties for an 11-Species Air Model for Chemical and Thermal Nonequilibrium Calculations to 30,000K", NASA RP-1232, 1990.
- 5) B. C. Eu, "Kinetic Theory and Irreversible Thermo-dynamics", Wiley, New York, 1992.
- 6) B. C. Eu, "Transport Coefficients of Fluids", Springer, Berlin, 2006.
- 7) R. S. Myong, "A Generalized Hydrodynamic Computational Model for Rarefied and Microscale Diatomic Gas Flows", *J. Comput. Phys.* 195, 2004, pp. 655~676.
- 8) W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, "Numerical Recipe in Fortran 77", Cambridge Univ. Press, London, 1993.
- 9) R. S. Myong, J. M. Reese, R. W. Barber and D. R. Emerson, "Velocity Slip in Microscale Cylindrical Couette Flow: The Langmuir Model", *Phys. of Fluids*, 17-087105, 2005.
- 10) A. W. Adamson, "Physical Chemistry of Surfaces", JohnWiley & Sons, New York, 1982.
- 11) A. Beskok and G. E. Karniadakis, "Simulation of Heat and Momentum Transfer in Complex Microgeometries", *J. Thermophys. and Heat Transfer*, 8(4), 1994, pp. 647~655.
- 12) G. E. Karniadakis and A. Beskok, "Micro Flows", Springer, New York, 2002.
- 13) J. N. Moss and G. A. Bird, "Direct Simulation of Transitional Flow for Hypersonic Reentry Conditions", 22nd AIAA Aerospace Science Meeting, Reno, NV, 1984, paper AIAA 84-0223.
- 14) G. F. Naterer and J. A. Camberos, "Entropy and the Second Law Fluid Flow and Heat Transfer Simulation", *J. Thermophys. and Heat Transfer*, 17(3), 2003, pp. 360~371.
- 15) S. Chigullapalli, A. Venkattraman, A. A. Alexeenko, and M. S. Ivanov, "Non-Equilibrium Flow Modeling Using High-Order Schemes for the Boltzmann Model Equations", 40th Thermophysics Conference, Seattle, Washington, 2008, paper AIAA 2008-3929.