

Boltzmann 방정식 기반 CFD 기법

• 경상대학교 교수 명노신 •

I. 서론

유체의 거동을 묘사하는 방식으로 크게 두 가지가 존재한다. 하나는 질량, 모멘텀, 에너지에 관한 보존법칙과 1822년 Navier, Fourier에 의해 제시된 선형 구성관계식에 기초한 통상적으로 Navier-Stokes-Fourier (NSF) 방정식으로 일컬어지는 연속개념의 비선형 편미분 방정식 시스템이다. 종속변수는 밀도, 속도와 같은 측정이 가능한 거시적 열역학 변수들이다. 두 번째는 1867년 Maxwell [1], 최종적으로 1872년 Boltzmann[2]에 의해 완성된 실제 기체 입자의 상공간(Phase Space)에서의 연속확률분포를 다루는 7차원 선형 Stochastic 편미분 방정식 형태의 입자개념의 Boltzmann 방정식에 기초한 방식이다 [3].

연속 방식은 수세기에 걸친 실험과 검증을 통해 그 유용성이 검증되었고, 유체의 거동 설명에 가장 광범위하게 사용되는 모델이다. 반면, 입자 방식은 1940년대의 고고도 희박기체와 관련된 연구로부터 본격적으로

시작된 후, 최근에는 반도체 공정, 진공장치, 초미세 시스템 MEMS 등 여타 분야로 그 관심이 증가하고 있다. 또한 Boltzmann 방정식은 기체 뿐 만 아니라 액체, Granular, 폴리머 유동 등 복잡계 시스템을 이해하는 근간이 되므로, 수학적 측면에서 방정식 해의 Existence와 Decay를 증명하는 연구가 매우 중요한 주제로 남아있다 [4]. 이 증명에 관한 부분적 기여 업적으로 수학 Field 메달 수상자가 최근 2명 배출된 점이 그 중요성을 보여준다. (1994년 P. L. Lions 및 2010년 C. Villani)

Boltzmann 방정식을 다른 입자 방정식 모델과 구분 짓는 가장 중요한 요소는 소위 Molecular Chaos 불리는 가정으로 평균자유행로가 입자간 힘 Range 보다 충분히 커서 한 번 충돌한 입자 짝은 다시 충돌하기까지 수많은 충돌을 거치는 기체상태를 의미한다. 이 가정을 통해 복잡계 시스템에 관한 열역학 자연법칙과 밀접하게 연계될 수 있어, 다른 모델에 비해 매우 유용한 모델이 된다. 그리고 Boltzmann 방정식은 입자 방식이므

로 기본적으로 다루는 자유도는 실제 기체 입자 수를 나타내는 10^{23} 개 단위이므로, Navier-Stokes - Fourier 방정식의 13개 자유도(밀도, 속도벡터, 온도, 점성응력 텐서, 열플럭스 벡터)와 비교할 수 없을 정도로 크다. 이러한 이유로 희박, 마이크로와 같은 실제 문제에 적용되기 위해서는 10^{23} 자유도를 현재의 컴퓨터가 다룰 수 있는 수준으로 대폭 감소시켜야 한다.

이 목적을 위해 현재까지 개발된 대표적 방식으로는 DSMC (Direct Simulation Monte Carlo), LBM (Lattice Boltzmann Method), Gas-Kinetic Scheme, Chapman-Enskog, Moment 기법 등이 있다. 이들 기법들은 다양한 응용을 위해 개발되었고, 개발한 연구자들의 배경도 물리, 물리화학, 수학, 공학 등으로 아주 다양하여, Boltzmann 방정식과 연속 보존 법칙과의 상관관계에 관한 혼돈이 존재해왔다. 대표적인 것으로 연속확률분포에 관한 정상상태의 Boltzmann 방정식의 Kinematic 좌변 항과 Collisional 우변 항을 무차원화시키면 Knudsen 수가 나타나는데,

$$v \cdot \nabla f = \frac{1}{Kn} C[f, f_2], \quad (1)$$

이에 근거하여 희박, 마이크로 문제와 같은 비평형 유동을 분류할 때, Knudsen 수 값에 따라 연속, 슬립, 천이, 자유류 영역으로 나누는 것을 들 수 있다. 이러한 기

준 분류는 속도(마하수)의 크기가 전혀 반영이 되어 있지 않아 보완이 필요하다. 즉, 자연법칙인 모멘텀 보존 법칙의 세 항 (대류, 압력, 점성)을 무차원화시키면,

$$\nabla \cdot \left\{ \rho u u + \frac{1}{\gamma M^2} p I + \frac{1}{Re} \Pi \right\} = 0, \quad (2)$$

Knudsen 수 ($\sim M/Re$) 외에 추가적으로 마하수가 존재하므로 비평형 유동 분류에는 최소 2개의 무차원수를 고려해야 한다 [5]. 이 점은 매우 중요한 함축을 지니는데, 저속인 마이크로 유동은 고속인 고고도 희박 유동에 비해 비평형성($\sim M^2/Re$)이 작아 준평형 NSF 방정식으로 그 해석이 상당부분 가능하게 된다.

또 다른 혼돈은 Boltzmann 방정식의 충돌 항을 대폭 근사시킨 소위 BGK [7] 모델 ($C[f, f_2] \approx -(f - f_0)/\tau$)에 관한 것이다. 이 가정은 복잡한 Boltzmann 충돌 항을 1차 정확도로 근사시킨 것으로, $C[f, f_2]$ 을 거시세계 항으로 변환시키고 Maxwellian 입자 [1] 가정을 도입하여 유도한 충돌 항의 엄밀한 결과와 동일한 점 때문에 [3], 그동안 1차 정확도 이상의 결과를 산출하는 것으로 주장되어 왔다. 하지만 전단유동이 아닌, 마하수 30과 같은 난해한 압축유동에 관한 수치적 적용에서는 모델의 근본적 한계로 인해 수학적 특이성을 갖거나 특이성이 없는 경우에도 1차 이상의 정확도를 보여줄 수 없는 한계가 존재한다[5].

FLOW REGIMES FOR DIFFERENT MACH NUMBER AND REYNOLDS NUMBER COMBINATIONS			
M	R		
	$O(\epsilon)$	$O(1)$	$O(1/\epsilon)$
$O(\epsilon)$	$K = O(1)$. Creeping micro-flow	$K = O(\epsilon)$. Moderate micro-flow	$K = O(\epsilon^2)$. Low M Fanno Flow
$O(1)$	$K = O(1/\epsilon)$. Transonic Free-molecular flow	$K = O(1)$. Transonic micro-flow	$K = O(\epsilon)$. Transonic Fanno Flow
$O(1/\epsilon)$	$K = O(1/\epsilon^2)$. Hypersonic Free-molecular flow	$K = O(1/\epsilon)$. Hypersonic Free-molecular flow	$K = O(1)$. Hypersonic "Fanno" (Transitional) Flow

● 그림 1 ● 두 개 무차원수를 사용한 희박 및 마이크로 영역 분류 [6]

II. 본론

Boltzmann 방정식의 10^{23} 단위 자유도를 실제 공학적 적용을 위해 대폭 감소시켜 Boltzmann 방정식의 원래 해에 근사한 해를 효율적으로 획득할 목적으로 개발된 수치적 기법으로는 입자개념이 강한 순으로 DSMC, LBM, Gas-Kinetic Scheme이 있으며, 순수 거시변수 개념의 Chapman-Enskog, Moment 기법이 있다.

2.1 기법들의 개요

가. DSMC

DSMC는 10^{23} 단위 자유도를 10^3-10^9 단위로 줄이기 위해 한 개의 수치입자가 10^{15} 단위의 실제 기체입자를 대표하도록 가정한 후, 그 수치입자의 움직임과 충돌을 Boltzmann 방정식과 유사하게 Kinematic, Stochastic 처리를 하는 방식이다. 그 다음 계산된 수치입자의 상공간 정보를 다수의 Sampling을 통해 최종적으로 측정이 가능한 거시변수를 구하는 방식으로 1963년 Bird에 의해 제안되었다 [8-10]. Time-Step 크기, Cell 크기, 한 Cell 당 수치입자 수 등이 적절히 선택된 경우는 Boltzmann 방정식에 근접한 해를 제공해준다 [9]. 또한 Polyatomic Molecule과 같은 복잡한 문제에도 그 확장이 Boltzmann 방정식의 이론적 확장보다 용이하여 상대적 장점을 갖는다. 하지만, 한 수치입자가 감당하는 실제 기체입자의 수가 너무 많거나, 저속 유동인 경우에는 무시할 수 없는 수치 및 통계 오차로 인해 정확도가 대폭 감소할 뿐 만 아니라, 계산시간이 기하급수적으로 증가하여 고속인 극초음속 희박 유동 해석에 주로 활용되고 있다.

나. LBM

LBM[11]은 Discrete Lattice에 Boltzmann 방정식을 적용시켜 10^{23} 단위 자유도를 일차적으로 감소시킨 후 Lattice 상에서 계산을 수행하는 방식이다. 자

유도를 추가적으로 줄이기 위해 원래의 임의 방향의 속도벡터를 유한개의 이산속도로 대체시킨다. 이러한 이유로 D3Q19 LBM라는 표현은 19개의 속도 방향을 갖는 삼차원 LBM 기법을 의미한다. Boltzmann 방정식의 핵심인 비선형 충돌항 $C[f, f_2]$ 을 그대로 Lattice에 적용시키는 것은 난해하여 1차 정확도의 BGK 모델을 이용하여 단순화시킨 Lattice BGK 기법이 대부분이다. Lattice에서의 계산이 Local이어서 병렬계산이 용이한 점, 다중유동 처리가 연속모델에 비해 단순한 점, NSF 모델에 비해 응력-텐서 종속성 기반 난류모델 개발이 용이한 점 등의 장점으로 준평형 유동장 해석에 활발히 적용되고 있다. 하지만 Boltzmann 충돌 항을 수치입자 도입으로 엄밀하게 계산하는 DSMC와 달리, 1차 정확도에 불과한 BGK 모델이 사용되어 기본적으로 준평형 NSF 연속모델과 같은 수준의 결과밖에 보여줄 수 없다. 또한 충격파가 존재하는 고속 고에너지 유동장 해석에는 적당하지 않는 것으로 알려져 있다.

다. (Unified) Gas-Kinetic Scheme

이 기법은 Xu[12] 등에 의해 제안되었는데, BGK-Boltzmann 방정식과 보존법칙의 Discretized Space 버전을 직접 계산하여 자유도를 감소시킨다. 보존법칙에서 필요로 하는 비보존 변수 점성응력과 열플럭스 정보를 Discretized BGK-Boltzmann 계산을 통해 결정하며, 매 Iteration 마다 상공간 변수 f 와 열역학 공간 변수 W 를 순차적으로 교환하여 Discretized BGK-Boltzmann 해에 포함된 비평형성을 계속적으로 보존법칙에 투영시킨다. 개념상 Lattice BGK 기법과 유사하나, 이산속도벡터에 유한성을 도입하지 않고 NSF-CFD처럼 자연법칙인 보존법칙을 근간으로 하여 충격파를 포함한 고에너지 유동에도 문제없이 적용될 수 있는 것이 장점이다. 하지만 LBM과 동일하게 그 결과의 정확도가 BGK 모

델 정확도에 의해 결정되는 한계가 존재한다. 이러한 이유로 마하수 30 등의 도전적 문제인 경우 코드 수렴성이 급격히 나빠지는 것으로 알려져 있다.

라. Chapman-Enskog

Chapman (1916) 및 Enskog (1917)에 의해 제안된 이 기법은 입자 개념의 Boltzmann 방정식에서 연속 개념의 방정식을 유도한 최초의 시도이다. 핵심 개념은 연속확률변수 f 의 독립변수인 시간과 공간이 거시 보존변수 W 및 그 공간적 미분 DW 으로 표현된다는 가정이다.

$$f(t, r, v) \simeq f(W(t, r), D_{x,y,z}W(t, r), v, \epsilon) \quad (3)$$

이 표현식의 멱급수 전개식을 BGK-Boltzmann 방정식에 대입한 다음, 거시 변수를 유도하기 위해 통계적 평균을 취하고 매개변수 $\epsilon (= Kn)$ 에 관해 차수별로 정리하면, 1차 정확도의 NSF 방정식, 2차 정확도의 Burnett, 3차 정확도의 Super-Burnett 방정식이 유도된다 [14]. 극초음속 Blunt Body 전반부 유동 해석에 성공적으로 적용되었으나, 급격 팽창 유동의 경우 수치 불안정이 발생하고 고차 공간미분 항에 관련된 추가적 고체 경계조건 유도의 어려움으로 인해 실제 공학적 문제에는 제한적으로만 사용되고 있다.

마. Moment Method

입자 개념의 Boltzmann 방정식에서 연속 개념의 방정식을 유도할 수 있는 또 다른 방식으로 1949년 Grad에 의해 제안된 Moment 기법이 있다 [15]. 식 (1)의 Boltzmann 방정식의 각 항에 입자속도 공간에서 통계적 평균($\langle \rangle$)을 취하면, 비보존 변수인 점성응력 텐서에 관한 편미분 형태의 구성 방정식이 유도된다.

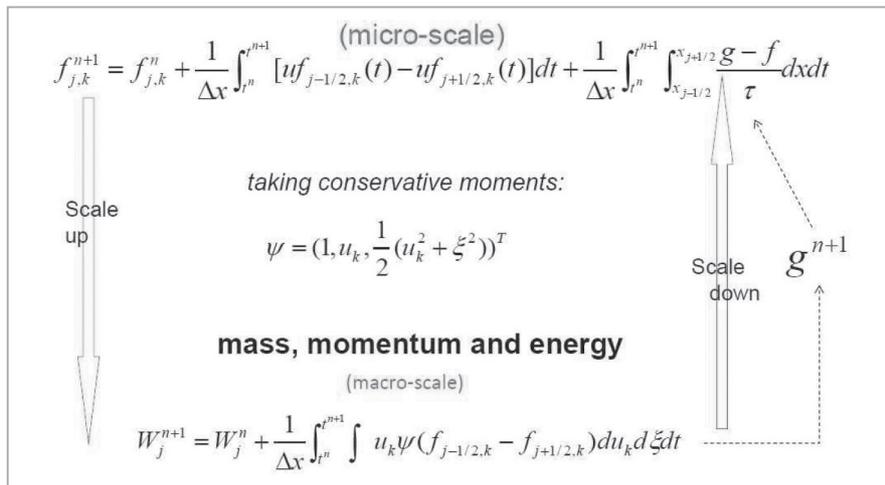
$$u \cdot \nabla \Pi + \nabla \cdot \Psi + 2[\Pi \cdot \nabla u]^{(2)} + 2p[\nabla u]^{(2)} = \langle [mcc]^{(2)} C[f, f_2] \rangle \quad (4)$$

좌변의 고차항 $\nabla \cdot \Psi$ 과 우변의 충돌항 $\langle [mcc]^{(2)} C[f, f_2] \rangle$ 에 Closure가 필요한데, Grad는 연속확률함수 f 를 다항식으로 전개한 다음 최초 3개 항만 고려하여 소위 Grad의 13 Moment 방정식을 유도하였다. 하지만 이 방정식은 높은 마하수 충격파 내부구조에서 수학적 특이성을 갖는 것으로 밝혀져 [16], 이 후의 Levermore [17] 등의 후속연구에도 불구하고 미해결 문제로 남아왔다.

2.2 Moment CFD 기법

가. Exact Moment 방정식 유도

충격파 내부구조의 수학적 특이성을 해결할 수 있



● 그림 2 ● Unified Gas-Kinetic Scheme 개념 [12]

는 실마리는 1980년 Eu에 제안된 Generalized Hydrodynamics [18, 19] 이론에 찾을 수 있다. Eu는 충격파와 같은 높은 비평형 문제에서의 비가역 열역학의 절대적 역할을 인지하여 충돌 항 $\langle [mcc]^{(2)} C[f, f_2] \rangle$ 를 처리할 때 비평형 엔트로피 생성이 항상 양이 되도록 하는 연속확률함수 f 를 지수함수 형태의 Canonical 식을 제안하여 엄밀하게 Boltzmann 방정식을 연속개념으로 변환한 Moment 방정식을 유도하였다.

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \Pi + \nabla \cdot \Psi + 2[\Pi \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)} + 2p[\nabla \mathbf{u}]^{(2)} \quad (5)$$

$$= (1/\beta g) \sum_{l=1}^{\infty} R_{12}^{(2l)} X_2^{(l)} q(\kappa_1^{(\pm)}, \kappa_2^{(\pm)}, \dots)$$

나. New Closure 및 충격파 수학적 특이성 해결

최근 Myong [5]은 식 (5)에서 Closure가 하나가 아닌 두 군데 필요한 것과 Eu의 연속개념 Exact Moment 방정식이 충격파 내부구조에서 어떻게 거동하는 지에 관한 이해를 바탕으로 고 마하수 충격파 내부구조의 수학적 특이성을 규명하고 그 해결방안을 제시하였다. 즉, 기체입자의 이동(Kinematics)과 충돌(Dissipation) 항들에 대한 일관되지 못한(Unbalanced) 처리가 충격파 특이성의 궁극적인 원인을 규명하였다. 예를 들어, (5)식의 양변을 1차 정확도로 근사시킬 경우 NSF 방정식이 유도되어 수학적 특이성은 존재하지 않으나, 좌변을 2차 정확도, 우변을 1차 정확도로 근사시킬 경우 좌변의 Quadratic 항인 $2[\Pi \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)}$ 이 압축 유동의 경우 발산하게 되어 높은 마하수에서 항상 수학적 특이성이 존재하게 된다. 또한 이와 관련하여 그 수학적 편이성으로 인해 수많은 연구자들이 애용해 왔던 1867년에 제안된 Maxwell 기체입자 단순모델이 1차 정확도인 동시에 Exact 모델이어서 오히려 이 모델 사용이 특이성 원인을 발견하는데 주된 걸림돌이었음을

밝혀내었다.

다. 2차 정확도 Implicit NCCR 모델 및 DG 기법

특이성 원인규명 후 NSF 방정식으로 알려진 Navier (1822), Fourier (1822), Stokes (1845) 1차 정확도 선형이론에 기초한 유체역학 기본 방정식을 높은 비평형 (희박 및 마이크로) 문제로 성공적으로 확장한 Implicit 대수형태의 2차 정확도 구성관계식(Nonlinear Coupled Constitutive Relation; NCCR)을 최초로 유도하였다[5, 20].

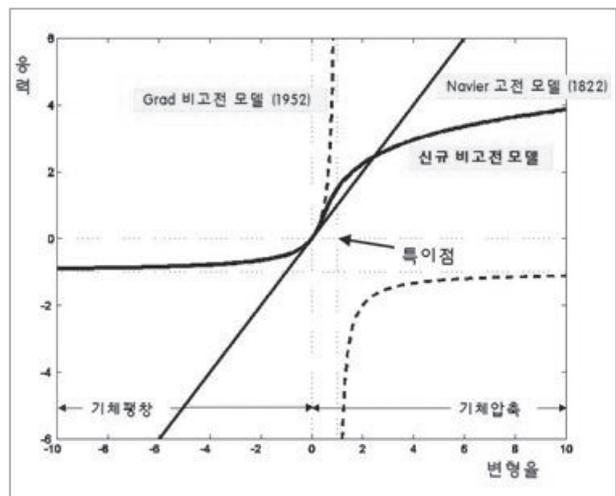
$$2[\Pi \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)} + 2p[\nabla \mathbf{u}]^{(2)} \quad (6)$$

$$= -p/\mu_{NS} \Pi \sinh \kappa_1 / \kappa_1, \kappa_1$$

$$\sim T^{1/4} / p (\Pi : \Pi / \mu_{NS} + \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q} / T / \kappa_{NS})^{1/2}$$

식 (6)의 우변에 나타나는 $\sinh \kappa_1 / \kappa_1$ 인자는 압축 유동의 경우 충격파의 수학적 특이성을 해소시키는 역할을 하는 반면, 팽창, 전단 유동의 경우는 그 역할이 미미하다. 이를 통해 비평형에서는 구성 방정식의 역할이 매우 다르게 나타나는 고도의 복잡성이 존재함을 알 수 있다 [5].

식 (6)로 표현되는 NCCR을 먼저 표준 CFD 기법인 2차 정확도 유한체적법 (FVM)에 적용한 다음



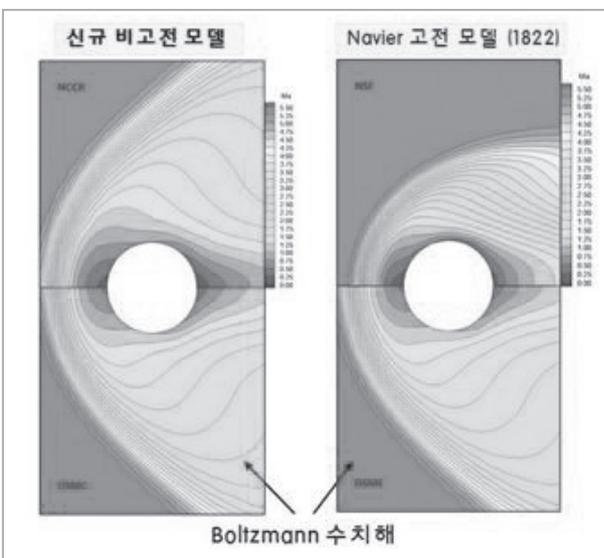
● 그림 3 ● Navier 고전, (특이성 간직) Grad 비교전, (특이성 해결) NCCR 비교전 모델의 구성관계식 비교 [5]

[21], 최근에는 복잡 형상 유동에 용이하게 적용될 수 있고, 저속 유동 계산에도 적합한 최신 수치기법인 불연속 갤러킨 (Discontinuous Galerkin; DG) 기반의 효율적 전산해석코드가 개발되었다 [22]. 비보존 변수인 점성응력을 추가적 종속변수로 고려해야 하는 점과 점성 수치플럭스 계산 시 Implicit 2차 구성관계식을 적절히 처리하는 것이 핵심이다. 약 100 km 고도 (Kn=0.5)에서 음속의 5.5배 속도로 비행하는 극초음속 원형 비행체를 해석하고 (정확하나 계산시간이 많이 소요되는) DSMC 해와 비교하여 기존 이론 대비 매우 정확한 해를 효율적으로 계산할 수 있음이 확인되었다. 고고도에서 비행하는 항공우주비행체 (예, 사드 상층방어 미사일시스템, 인공위성 추진장치), 마이크론 단위의 미소기계장치, 진공장치 등의 공학적 설계에 가까운 시기에 적용될 수 있을 것으로 판단된다.

2.3 경계조건 및 V & V

가. 경계조건

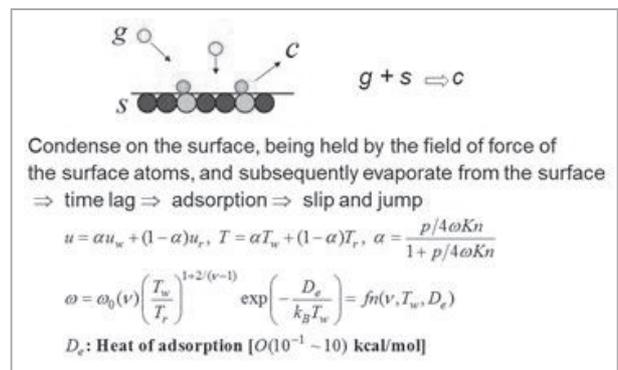
비평형 유동에 관한 적절한 고체벽면 경계조건을 개



● 그림 4 ● 고고도 극초음속 실린더 유동장 해석 [5]

발하는 것은 매우 어렵다. 벽면으로 부터 멀리 떨어진 두 기체입자 사이의 충돌을 묘사할 목적으로 유도된 Boltzmann 방정식과 해당 DSMC는 고체입자와 기체입자 사이의 상호작용을 정확하게 묘사할 수 없다. 원칙적으로 고체입자와 기체입자를 고려하는 분자동역학 (Molecular Dynamics) 연구가 요구되나, 아직까지 Boltzmann 기반 CFD 기법에 적용될 만한 정확한 경계조건은 개발되지 않았다.

일반적으로 고체벽면 경계조건은 준평형 유동보다 비평형 유동 해석에서 훨씬 중요한 역할을 한다. Knudsen 수가 증가할 경우 벽면 부근에서 NSF 모델의 No-Slip 조건이 더 이상 유효하지 않기 때문이다. 또한 Bulk 유동의 비평형성은 Kn*M에 의해 측정되나, 고체 벽면 효과는 Knudsen 수에 의해 결정되기 때문에 고 Knudsen 수 유동의 경우 Slip 경계조건이 큰 영향을 준다. 대기 공기 유동의 경우 중고도가 시작되는 고도 약 60 km 부근부터 Knudsen 수가 0.005에 도달하여 고체 벽면에서의 고체입자와 기체입자 사이의 상호작용에 의한 속도슬립 (Velocity Slip)과 온도점프 (Temperature Jump)를 고려해야 한다. DSMC 등 입자개념의 확률분포함수 기반 계산모델의 경우, 고체벽면 경계조건은 조절계수 (Accommodation Coefficient) 개념에 기초한 Diffusive Wall 조건이 주로 사용된다 [8]. 연속 개념 모델의 경우 잘 알려진



● 그림 5 ● Dirichlet-Type Langmuir Slip/Jump 모델 [23]

Neumann-Type Maxwell-Smoluchowski 모델[1]이 가장 광범위하게 사용되고 있고, Myong에 의해 제안된 Dirichlet-Type Langmuir 모델[23]도 Moment 기법 외에 LBM [24] 등으로 그 사용범위가 확대되고 있다.

나. V & V

공학적 설계의 토대가 되는 준평형 NSF 모델의 경우 해당 CFD 코드의 완성도가 어느 정도 성숙단계에 접어들어 코드의 신뢰성을 점검하는 검증(Verification & Validation; V & V [25]) 연구가 활발히 이루어지고 있다. 하지만 Verification 용 해석해가 거의 존재하지 않는 점, 속도 슬립 등 비평형 유동에서 중요한 물리량에 관한 실험적 결과가 거의 존재하지 않아 Validation이 어려운 점 등으로 인해 Boltzmann 방정식 및 그 근사 수치모델에 관한 검증 연구는 거의 이루어지지 못해 왔다. 예를 들어, DSMC의 경우는 어떤 수학 방정식에도 기초하지 않아 Verification 예는 찾아볼 수 없으며, Validation의 경우에도 항력 등의 Integrated Quantity에 관한 비교연구들이 대부분이어서 NSF-CFD 수준의 V & V 연구가 필요한 단계에 접어들었다. 이러한 필요성을 인식하여 최근 Myong [26]은 DSMC도 유한한 격자 및 입자 갯수 조건하에서는 Boltzmann 방정식을 계산하는 근사모델이므로 Sampling 후 DSMC에서 산출된 거시변수들이 보존법칙을 충족시키는 정도를 정량적으로 측정하여 DSMC에 관한 Verification 연구를 수행하였다.

III. 결론

DSMC 기법은 입자개념, Chapman-Enskog, Moment 기법은 연속개념 측면에서 NSF 모델이 다루지 못하는 높은 비평형 유동을 묘사하고자 하는

Boltzmann 방정식 기반의 수치기법이다. 반면, 1차 정확도 BGK 충돌모델에 기초한 LBM, Gas-Kinetic 기법은 NSF 모델이 유효한 영역을 포함한 일부 확장된 영역을 기존의 NSF-CFD 기법보다 효율적으로 묘사하고자 하는 Boltzmann 방정식 기반의 수치기법이라 할 수 있다. 이러한 차이로 인해 각 기법의 V & V 방식에서 차이가 존재한다.

BGK 기반 모델의 경우 NSF 결과와 유사하거나 일부 개선된 결과를 보여주는 것으로 성공적인 검증으로 간주될 수 있으나, DSMC와 Moment 기법은 그 예측결과가 원래의 Boltzmann 방정식 해 (또는 실험적 관찰)에 얼마나 근접하느냐와 함께 NSF 모델보다 항상 개선된 해를 제공하느냐를 동시에 보여주어야 성공적인 검증으로 간주되는 도전적 문제가 된다. 1차 정확도의 NSF 모델보다 항상 더 정확한 해가 산출되는 것을 증명하는 것이 더 어려운 경우가 허다하다. 이러한 이유로 정확한 V & V 연구에서는 실험결과와의 비교 이외에 NSF 모델 결과와의 동시 비교가 절대적으로 요구된다.

연속개념의 Moment 기법에 비해 입자개념의 DSMC는 막대한 계산시간이 소요된다. 이러한 단점을 보완하기 위해 평형에 근접한 영역 해석에는 NSF-CFD 기법, 그 외에는 DSMC 입자기법을 적용하는 Hybrid 기법이 최근 개발되고 있다 [27, 28]. 전혀 다른 종속변수 (거시변수 및 연속확률변수)의 차이점에 인한 수치적 불안정성을 감소시키기 위해 Overlapped 격자 시스템을 도입하는 것이 일반적이 추세이다. 하지만 이 과정 중에 도입된 복잡성과 최종 계산결과가 준평형과 높은 비평형성 계산영역을 나누는 Breakdown Parameter에 매우 민감한 점 등의 다양한 이유로 인해, Hybrid DSMC-NSF 계산결과가 순수 DSMC 결과보다 오히려 더 많은 시간이 소요되는 경우가 종종 발생하여, 향후 보다 개선된 기법에 관한 연구가 절대적으로 필요하다.

참고문헌

- [1] Maxwell, J. C., "On the Dynamical Theory of Gases," Philosophical Transactions of Royal Society of London, Vol. 159, p. 49, 1867.
- [2] Boltzmann, L., "Further Studies on the Thermal Equilibrium of Gas Molecules," Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften, Vol. 66, pp. 275-370, 1872.
- [3] Truesdell, C., and Muncaster, R. G., Fundamentals of Maxwell's Kinetic Theory of a Simple Monatomic Gas, Academic Press, New York, 1980.
- [4] Gressman, P. T., and Strain, R. M., "Global Classical Solutions of the Boltzmann Equation with Long-Range Interactions," Proceedings of the National Academy of Sciences, Vol. 107, No. 13, pp. 5744-5749, 2010.
- [5] Myong, R. S., "On the High Mach Number Shock Structure Singularity Caused by Overreach of Maxwellian Molecules," Physics of Fluids, Vol. 26, No. 5, 056102, 2014.
- [6] Arkilic, E. B., Schmidt, M. A., and Breuer, K. S., 'Gaseous Slip flow in Long Microchannels,' Journal of Microelectromechanical Systems, Vol. 6, p. 167, 1997.
- [7] Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., and Krook, M., "A Model for Collision Processes in Gases, I," Physical Review, Vol. 94, p. 511, 1954.
- [8] Bird, G. A., Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation Monte Carlo of Gas Flows, Oxford Science, 1994.
- [9] Wagner, W., "A Convergence Proof for Bird's Direct Simulation Monte Carlo Method for the Boltzmann Equation," Journal of Statistical Physics, Vol. 66, pp. 1011-1044, 1992.
- [10] Bird, G. A., The DSMC Method, CreateSpace, 2013.
- [11] Succi, S., The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond, Clarendon Press, Oxford, 2001.
- [12] Xu, K., and Huang, J. C., "A Unified Gas-Kinetic Scheme for Continuum and Rarefied Flows," Journal of Computational Physics, Vol. 229, No. 20, pp. 7747-7764, 2010.
- [13] Chapman, S. and Cowling, T. G., The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases, Cambridge University Press, London, 1970.
- [14] Ohwada, T., and Xu, K., "The Kinetic Scheme for the Full-Burnett Equations," Journal of Computational Physics, Vol. 201, pp. 315-332, 2004.
- [15] Grad, H., "On the Kinetic Theory of Rarefied Gases," Communications on Pure and Applied Mathematics, Vol. 2, p. 331, 1949.
- [16] Grad, H., "The Profile of a Steady Plane Shock Wave," Communications on Pure and Applied Mathematics, Vol. 5, p. 257, 1952.
- [17] Levermore, C. D., and Morokoff, W. J., "The Gaussian Moment Closure for Gas Dynamics," SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol. 59, No. 1, p. 72, 1998.
- [18] Eu, B. C., Kinetic Theory and Irreversible Thermodynamics, John Wiley & Sons, New York, 1992.
- [19] Eu, B. C., Transport Coefficients of Fluids, Springer, Heidelberg, 2006.
- [20] Myong, R. S., "Thermodynamically Consistent Hydrodynamic Computational Models for High-Knudsen-Number Gas Flows," Physics of Fluids, Vol. 11, No. 9, pp. 2788- 2802, 1999.
- [21] Myong, R. S., "A Computational Method for Eu's Generalized Hydrodynamic Equations of Rarefied and Microscale Gasdynamics," Journal of Computational Physics, Vol. 168, pp. 47-72, 2001.
- [22] Le, N. T. P., Xiao, H., Myong, R. S., "A Triangular Discontinuous Galerkin Method for Non-Newtonian Implicit Constitutive Models of Rarefied and Microscale Gases," Journal of Computational Physics, Vol. 273, pp. 160-184, 2014.
- [23] Myong, R. S., "Gaseous Slip Model Based on the Langmuir Adsorption Isotherm," Physics of Fluids, Vol. 16, No. 1, pp. 104-117, 2004.

- [24] Kim, H. M., Kim, D., Kim, W. T., Chung, P. S., and Jhon, M. S., "Langmuir Slip Model for Air Bearing Simulation Using the Lattice Boltzmann Method," IEEE Transactions on Magnetics, Vol. 43, p. 2244, 2007.
- [25] Oberkampf, W. L., and Roy, C. J., Verification and Validation in Scientific Computing, Cambridge University Press, 2010.
- [26] Myong, R. S., "Impact of Computational Physics on Multi-scale CFD and Related Numerical Algorithms," Computers & Fluids, Vol. 45, No. 1, pp. 64-69, 2011.
- [27] Schwartzenuber, T. E., Scalabrin, L. C., and Boyd, I. D., "A Modular Particle-Continuum Numerical Method for Hypersonic Non-equilibrium Gas Flows," Journal of Computational Physics, Vol. 225, pp. 1159-1174, 2007.
- [28] Josyula, E., Arslanbekov, R., and Kolobov, V. I., and Gimelshein, S. F., "Evaluation of Kinetic/Continuum Solver for Hypersonic Nozzle-Plume Flow," Journal of Spacecraft and Rockets, Vol. 45, No. 4, pp. 665-676, 2008.

한재흥 편집위원 jaehunghan@kaist.edu

김태규 편집위원 taegy@chosun.ac.kr