

論文

열역학 충족 비평형 유체역학 모델을 이용한 희박기체 및 MEMS 유동장 해석

명노신*

Analysis of Rarefied and MEMS Gas Flows Using Thermodynamically Consistent Nonequilibrium Hydrodynamic Models

Rho Shin Myong*

ABSTRACT

Considerable parts of gas flows arising in aerospace vehicles, rocket nozzles, MEMS channels, and thin film growth process are characterized by high thermal nonequilibrium, so that new equations beyond the continuum Navier-Stokes equations are necessary. Owing to the low-density and small scale of the characteristic length, the flowfields belong to various flow regimes; continuum, slip, transitional, and free-molecular. Many computational methods--either fully kinetic (DSMC) or fluid dynamic (moment equations)--have been proposed, but it turned out that some have difficulty in solving low-speed MEMS flows and others fail to satisfy the second law of thermodynamics.

Towards solving this dilemma, an innovative nonequilibrium hydrodynamic computational model is studied that can cover almost all flow regimes in real geometry. Through a critical review of the previous models, the advantages of the new model are identified. Finally, to check its validity, it is applied to some acid test problems; shock structure and internal flow in MEMS channel.

초 록

항공우주비행체나 로켓노즐, MEMS 채널, 박막성장에 관련된 기체유동은 물체특성길이가 아주 작거나 기체밀도가 희박해짐으로 인해 연속체개념으로는 설명할 수 없는 열적 비평형 영역(미끄럼류, 천이류, 자유분자류)에 속하여, 원칙적으로 Navier-Stokes 방정식을 적용할 수 없다. DSMC, 모우멘트 방정식 등 입자나 연속 개념을 바탕으로 한 비평형 유동 해석 모델들이 개발되었지만, DSMC는 저속 MEMS 유동 계산에, 모우멘트식은 열역학 2법칙 충족 문제에 많은 어려움을 겪어왔다.

본 논문에서는 최근 이러한 한계점을 극복할 목적으로 개발된 거의 모든 유동영역에 적용 가능한 해석모델을 다양한 문제에 적용하였다. 기존 모델들과 비교하여 새 모델의 장점을 찾고, 새 모델의 유용성을 검증하기 위해 충격파 구조와 MEMS 채널 내부유동을 해석 및 수치 기법으로 계산하였다.

† 1999년 10월 18일 접수

* 정회원, 경상대학교 항공기계공학과

I. 서 론

높은 고도에서 비행하는 항공우주비행체나 인공위성의 추진장치, 반도체 장치의 박막(thin film) 성장 공정, 마이크로센서나 마이크로노즐 등의 MEMS(Micro-Electro-Mechanical-Systems)에 관련된 기체유동은 연속체 개념으로는 설명할 수 없는 열적 비평형(thermal nonequilibrium) 상태에 속한다. 열적 비평형 문제는 물체 특성크기에 대한 기체입자의 평균자유행로(mean-free-path)의 비를 나타내는 Knudsen 수로 특징 지워지는데 위의 공학문제들은 상대적으로 높은 값을 가져 주로 연속류와 자유분자류 사이의 천이류 영역(transitional regime) 유동에 해당된다. 진공중으로 배기가스를 팽창분사하여 추력을 얻는 인공위성 추진노즐이 대표적이며, 노즐 출구 부근의 연속류에서 팽창이 진행됨에 따라 천이류를 거쳐 입자간 충돌이 거의 없는 자유분자류로 발달하는 아주 복잡한 유동 형태를 보여준다. 천이류는 원칙적으로 Boltzmann 방정식과 같은 기체운동 방정식(kinetic equation)을 풀어야 하지만 Boltzmann 방정식에 대한 직접적인 해석기법 개발은 아주 난해한 것으로 알려져 왔다.

비평형 유동에 관한 연구는 우주개발이 시작된 1960년대부터 활발히 수행되었는데 전통적으로 스페이스 셔틀등 재진입 물체의 공기역학적 가열 문제 해결, 카시니등의 혹성탐사선 기본설계 문제, 인공위성용 우주추진기의 노즐설계등 공력특성이 전체비행체 설계에 큰 영향을 주는 고속비행 물체나 우주비행체 연구[1]에 집중되어 왔다. 최근에는 미소 항공기[2], 유동제어를 위한 미소장치, 생의학용 미소장치(biomedical systems)등 MEMS[3,4,5]에 대한 관심이 커짐에 따라 열적 비평형 연구에 많은 재원과 인력이 투자되고 있다. Breuer[6], Ho[7], Boyd[8]등을 중심으로 한 미소노즐, 미소채널, 미소센서의 기체유동에 관한 기초연구가 대표적이라 할 수 있다.

희박기체 및 MEMS 유동장의 열적 비평형 현상을 이해하기 위해 여러 이론과 해석기법이 제시되어 왔다. 먼저 기체운동학에 기초로 한 방법으로서 Bird[9]가 개발한 DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)가 고속 희박기체유동 계산에 사용되어 왔는데, 다수의 통계적 표본 기체입자를 추적하기 때문에 MD(Molecular Dynamics)와 같은 여타 모사기법에 비해 계산효율이 좋다[10,11]. 하지만 CFD 기법에 비해 계산시간이 많이 걸리고, 최근 중요시되는 저속 MEMS 유동장 계산에는 통계적 불안으로 인해

그 적용이 의문시되어 왔다. 특히 대부분이 연속류이고 희박류가 국부적으로만 존재하는 경우에는 그 계산이 현 슈퍼컴퓨터 성능으로도 비현실적이라 할 수 있다.

이러한 문제들을 해결하기 위해 DSMC를 Navier-Stokes, Euler등 유체 방정식(continuum equations)과 결합하는 혼합기법(hybrid method) [8]을 연구하기 시작했는데, 두 기법의 장점을 간직하기 때문에 높은 효율성을 기대할 수 있다. 하지만 연속과 입자라는 서로 아주 이질적인 개념을 바탕으로 하기 때문에 계산 중간에 어떻게 한 기법에서 다른 기법으로 바꾸어야 할 지, 어떻게 아주 다른 형태의 계산결과(분포함수와 압력등의 열역학 변수)를 교환해야 할 지등 아주 복잡한 문제에 부딪치게 된다. 비평형도를 측정할 신뢰할 만한 변수조차도 개발되지 못한 상황이다.

한편 이러한 입자운동 접근방식과 별개로, 국소 열적 평형(LTE; local thermodynamic equilibrium)에서 조금 벗어난 준평형(near equilibrium) 문제에 적합한 Navier-Stokes 방정식을 높은 비평형 영역까지 유효하게 확장시킨 고차유체 방정식에 대한 연구가 Chapman과 Enskog에 의해 시작되었는데[12,13], 대표적인 것으로는 Burnett 방정식, Grad형 방정식[14,15,16], BGK-Burnett 방정식[17]등이 있다. Navier-Stokes 방정식이 Knudsen 수 전개의 일차승 근사식에 해당됨을 이용하여 Chapman-Enskog 전개기법으로 이차, 삼차 등의 고차방정식을 유도하여 비평형유동 해석모델로 사용하는 것이다. 계산이 효율적이므로 Agarwal[17]등에 의해 충격파 연구나 초고속 유동 해석에 적용되어 왔다. 하지만 결정적인 단점으로서 자연법칙인 엔트로피 생성이 항상 양인 열역학 제 2법칙을 엄밀히 만족시키지 못해 그 적용이 의문시되어 왔다[18]. 그 징후로서 마하수등의 유동변수, 기체종류, 충격파나 급속 팽창류등 다른 물리문제, 기체-고체 경계조건, 사용된 수치기법에 따라 계산이 되지 않거나 타당치 않는 결과가 발생하는 점이 지적되어 왔다. 근래 Augment-Burnett, BGK-Burnett등 새로운 방정식이 제시되었지만, 모두 열역학 제 2법칙을 엄밀히 충족시키지는 못하는 것으로 알려져 물리적으로 타당한 이론모델 및 효율적인 계산모델 개발은 희박기체 및 MEMS 유동연구에 큰 숙제로 남아있다.

최근 이러한 이론 및 계산상의 문제점을 해결하고자 Eu[19]가 비가역 열역학(irreversible thermodynamics)과 Boltzmann 방정식에 관한

새로운 이해를 바탕으로 일반유체역학 (generalized hydrodynamics) 이론을 개발하였다. 또한 이 이론을 기초로 열역학적으로 완전한 비평형 유체역학 계산모델이 Myong[21,22]에 개발되었다.

본 연구에서는 새 해석모델을 기존 모델과 비교하여 이론적 타당성을 찾고, 기술적 중요성이 증가하고 있는 고공 회박기체, 대기압 MEMS 유동, 저압 마이크로 기체유동 문제에 적용하여 그 정확성과 효용성을 검증하고자 한다.

II. 해석 모델

기체입자의 상호작용으로 발생하는 여러 물리 현상들은 미시적(microscopic or molecular) 또는 거시적(macrosopic or continuum) 관점에서 해석될 수 있으며, 근사단계에 따라 여러 해석모델들이 사용되어 왔다. 기본개념, 수학적 모델, 해석기법의 차이에 따라 Fig. 1과 같이 분류할 수

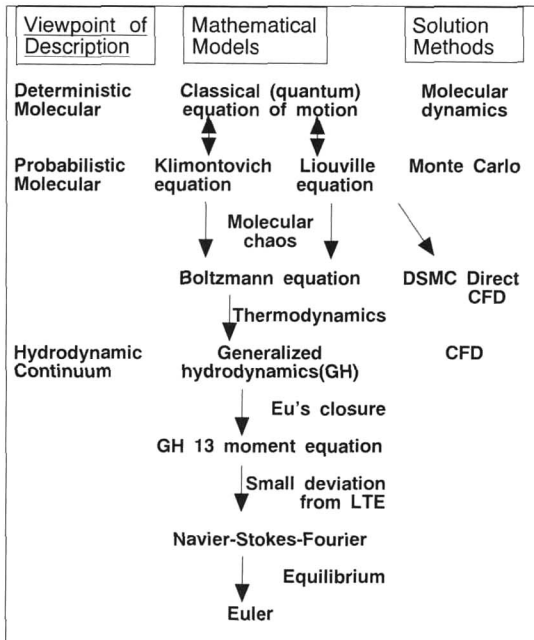


Fig. 1. Mathematical models and solution methods for the description of the motion of gases.

있다. 열거된 대부분의 해석모델들은 아주 복잡한 수학적 형태를 가질 뿐 아니라 사용된 가정이 미묘하기 때문에 연구에 적지 않은 혼란이 있어 왔다.

해석모델은 크게 입자(molecular)와 연속(continuum) 개념으로 나눌 수 있고 입자모델은 다시 결정적(deterministic), 확률적(probabilistic) 모델로 분류할 수 있다. 확률적 모델은 분포함수의 정의에 따라 Klimontovich와 Liouville 방정식으로 나눌 수 있으나, 아주 복잡한 형태여서 해석모델로는 거의 사용되지 않는다. 수치기법은 수학방정식을 이용하는 직접 방법(direct method)과 다수 입자를 사용하여 기체의 운동을 묘사하는 모사방법(simulation method)으로 크게 나눌 수 있다. 잘 알려진 CFD기법은 기본적으로 전자에 속하고, MD, MC, DSMC등은 후자에 해당된다. 일반적으로 실제문제 계산시 많은 입자를 모사해야 하는 입자모델은 연속모델에 비해 아주 비효율적인데, 이로 인해 연속모델의 사용이 의문시되는 문제에만 주로 사용되어 왔다.

Boltzmann 방정식은 비평형 유체 연구에서 가장 중요한 위치를 차지하며, 가장 근본적인 수학 모델인 Liouville 방정식에서 몇 가지 가정을 적용하여 유도될 수 있고, 유체(hydrodynamic) 개념의 모우멘트 방정식(moment equation)의 기본이 된다.

2.1 Boltzmann 방정식

외부 힘이 없는 경우 회박 단위자 기체에 관한 Boltzmann 방정식은 입자의 시간, 위치, 속도에 관한 분포함수 $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ 에 관한 아래의 식으로 표현된다.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\right)f = C(f, f_2) \quad (1)$$

여기서 f_2 는 충돌하는 두입자중 나머지 하나의 분포함수를 나타낸다. 오른쪽 항은 두 입자에 의한 충돌 적분(collision integral)을 나타내며 아주 중요한 물리적 의미를 내포하고 있다. 충돌 적분항으로 인해 Boltzmann 방정식은 시간, 위치, 속도 함수의 비선형 적미분 방정식 형태가 된다. 입자간의 충돌은 항상 분포함수가 비가역 과정을 통해 평형 분포함수로 접근하게 하는 역할을 한다. 이것은 Liouville 방정식에서 Boltzmann 방정식을 유도하는 과정에서 사용된 입자혼돈(molecular chaos) 개념의 직접적인 결과인데, 반 시간역전 불변성(broken time reversal invariance), 정보의 축소(contraction of information)등으로 설명될 수 있다. 이러한 결과들은 역학적 성질(mechanical nature)만을 고려해서는 결코 유도할 수 없고 통계적 가정

(statistical postulate)을 필요로 하기 때문에, Boltzmann 방정식은 Newton 운동 방정식과 같은 역학 방정식과는 근본적으로 다르다. 오히려 Boltzmann 방정식은 희박기체의 거시 과정을 중간관점(mesoscopic view)에서 묘사하는 독립된 기본 방정식(fundamental equation)이라 할 수 있다[19].

기체 운동학이 기체운동 설명에 큰 기여를 한 이유가 열역학과의 직접적 관계에 기인한다는 관점을 통해 비평형 유체모델 연구에 아주 중요한 사실을 얻을 수 있는데, 유체 방정식을 Boltzmann 방정식에서 유도할 때 비가역 열역학 즉 제 2법칙을 엄밀히 만족시켜야 한다는 점이다. 이 점은 거의 모든 이전 연구에서 무시되었거나 중요시되지 않았는데, Boltzmann 방정식으로부터 열역학적으로 완전한 비평형 유체방정식을 유도하는 과정에서 가장 중요한 가이드 라인이 된다.

2.2 DSMC

DSMC[9,20]는 하나의 모사입자가 다수의 실제 입자를 나타내게 하는 통계적 방법을 사용한다. 그러므로 Boltzmann 방정식을 출발점으로 하는 기법들과는 근본적으로 다르다. 입자의 운동과 상호작용을 계산하여 위치와 속도등을 결정하며, 입자운동과 입자간 충돌을 짧은 시간 동안 분리하여 고려한다. 입자운동은 결정적 묘사법으로 계산하고 입자간 충돌은 통계적으로 처리한다. 이러한 방식을 통해 다수의 통계적 표본입자를 고려할 수 있어 다른 입자 모사기법에 비해 계산 효율이 높다. Boltzmann 방정식과 마찬가지로 입자혼돈 및 희박기체 가정이 적용되므로 그 해가 거의 동일하다고 할 수 있다.

DSMC는 통계적 표본입자 개념을 이용하기 때문에 통계오차가 생긴다. 통계오차는 모사입자 개수의 제곱근에 반비례한다. 실제 문제에서 중요한 인자인 계산시간은 모사입자 개수에 비례하므로 통계오차를 줄이기 위해 무한정 모사입자수를 늘일 수 없다. 통계오차 허용범위를 만족하는 범위에서 최소한의 입자를 모사하는 것이 보통이다. 모사입자수외에 DSMC의 계산능력을 결정하는 중요한 인자로서 시간증분(timestep increment) 선택문제가 있다. 이는 DSMC가 기본적으로 외재적 시간전진법(explicit time-marching method)으로 분류되기 때문이다.

전통적으로 DSMC는 높은 Knudsen 수를 갖는 고공 대기영역의 고속 희박기체 유동에 많이 사용되어 왔다. 재진입 물체의 공력특성 계산등에

정확한 결과를 보여준다. 하지만 높은 Knudsen 수를 갖지만 저속 대기압 유동인 MEMS 계산에는 적합하지 않는 것으로 밝혀졌다. 그 이유는 DSMC의 시간증분값이 기체의 평균충돌시간(mean collision time)을 초과할 수 없어, 아주 작은 평균충돌시간을 갖는 MEMS유동을 계산할 때 막대한 시간을 요구하기 때문이다.

2.3 고차 유체 방정식

Boltzmann 방정식 (1)은 Newton 역학에 입자 혼돈(molecular chaos)이라는 통계적 가정을 결합하여 구한 것이므로 기본 역학이론인 질량, 운동량, 에너지에 관한 쌍곡형 보존법칙(hyperbolic conservation laws)을 만족시킨다. 보존법칙에서 응력텐서(stress tensor)와 열전달 매트릭스(heat flux matrix)만 요소관계식(constitutive relation)으로부터 계산되던 Boltzmann 방정식의 근사해가 될 수 있다. 요소관계식은 열린 시스템이기 때문에 수학적으로 닫힌 시스템이 되려면 한 단계 높은 변수와 관계를 지어주는 식(closure)이 필요하다.

요소관계식은 Boltzmann 방정식에서 유도할 수 있는데 Chapman-Enskog와 Maxwell-Grad의 모우멘트(moment) 기법이 있다. Chapman-Enskog 기법은 분포함수를 Knudsen 수에 대해 아래와 같이 전개하고 Boltzmann 방정식에 대입하여 차수별로 정리하여 요소관계식을 구한다.

$$f = f^{(0)} + \text{Kn} f^{(1)} + \text{Kn}^2 f^{(2)} + \dots \quad (2)$$

차수가 영일 때는 평형 분포함수 $f^{(0)}$ 만 남아 Euler 방정식이 유도되고 일차시에는 Navier-Stokes 방정식이 된다. 이차, 삼차 관계식은 Burnett, Super-Burnett 방정식이라 불려진다.

이와 달리 모우멘트 기법은 Boltzmann 방정식을 속도 모우멘트에 관하여 표현한 Maxwell의 변화 방정식(equation of transfer)을 이용하여 원하는 차수까지 유체 방정식을 유도한다. 원칙적으로 무한대까지 차수를 높이면 Boltzmann 방정식과 같아져야 한다. 5개의 보존변수, 5개의 대칭 응력텐서, 10개의 열전달 매트릭스에 관한 20 모우멘트 방정식을 유도할 수 있으며, 열전달이 벡터로 묘사될 때는 13 모우멘트 방정식이 된다. 나아가 충돌간 걸린 시간(mean free time between collisions or relaxation time)이 아주 작을 때에는 잘 알려진 Navier-Stokes 방정식이 된다. 최근에는 변화 방정식을 사용하지만 소위 Gaussian closure[15]를 이용하는 모우멘트 방정

식[16]이 개발되었다.

이들 고차 유체방정식들은 기본적으로 Navier-Stokes 방정식의 CFD기법을 적용할 수 있어 DSMC와 같은 모사기법에 비해 계산 효율이 아주 높다. 하지만 Boltzmann 방정식의 통계적 전제조건, 입자혼돈 또는 열역학 제 2법칙 부분이 유도 전 단계에서 완전히 빠져 있어 아주 중요한 논리적 취약점을 안고 있다. 이것은 열역학적으로 완전하지만 작은 비평형도 가정 하에서 유도된 Navier-Stokes 방정식에 가려 두 기법의 한계점이 부각되지 못했다. 높은 비평형 문제에도 유효하기 위해서는 가이드 라인인 열역학 제 2법칙을 만족해야 하는데, 위의 거의 모든 고차 유체 방정식은 그렇지 못한 것으로 판명되었다[18]. 그러므로 열역학적으로 완전한 고차 유체 방정식의 개발은 비평형 유동 연구에 큰 숙제로 남아 왔다.

Fig. 2에 비평형 현상에 자주 적용되는 해석 모델을 여러 물리 상태에 관해 요약하였다.

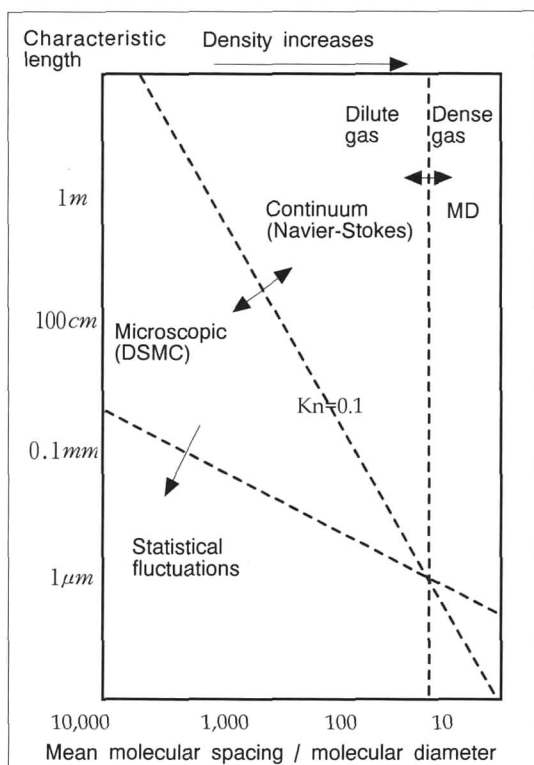


Fig. 2. Regimes of validity of conventional mathematical models.

Navier-Stokes 방정식은 평형에서 조금 벗어난 문제 즉 밀도가 과도하게 낮지 않는 (small

Knudsen number) 문제에, DSMC는 밀도가 낮은 희박기체 문제에 적합하다. MD는 조밀기체에 적합하며 희박기체일 경우 입자간 간격이 너무 커 충돌을 모사하기 위해 수많은 계산을 해야 하기 때문이다. DSMC는 밀도가 높은 경우 모사입자의 개수가 많아져야 하고, 체적 요소당 입자수가 작은 문제 즉 충돌횟수가 적은 경우는 통계적 불안정이 커져 계산에 어려움을 보여준다. 전자는 연속류와 희박기체 영역이 공존할 경우에 생기며 후자는 MEMS 문제에서 발생한다.

III. 일반 유체방정식(Generalized Hydrodynamic Equations)

연속류와 희박기체영역이 공존하는 문제나 MEMS 문제에 적합한 해석모델로는 높은 Knudsen 수에도 유효한 고차 유체방정식을 생각할 수 있다. 그러나 Burnett 방정식, Grad 모우멘트 방정식등 기존 모델들은 높은 Knudsen 수 문제에서 중요하게 되는 열역학 제 2법칙을 엄밀히 만족시키지 못해 그 유용성이 의문시되어 왔다.

이러한 비평형 연구의 큰 숙제를 해결하고자 최근 Eu[19]가 비평형 시스템의 비가역 열역학에 관한 깊은 이해를 바탕으로 일반유체역학 이론을 개발하였다. 즉 자연의 어떤 시스템도 따라야 하는 열역학 제 2법칙을 비가역 과정까지 확대해, 열역학적으로 완전한 고차 유체방정식을 최초로 유도하였다.

3.1 기본 개념

Eu의 일반유체역학은 그 기법에 있어서 Maxwell-Grad의 모우멘트법과 유사하다. 하지만 Boltzmann 방정식의 입자혼돈이라는 통계적 가정의 중요성을 인식하여, 고차 유체방정식을 유도하는 전 과정에 제 2법칙이 엄밀히 적용되도록 하는 점이 가장 중요한 차이점이다. 새 이론의 골격은 비평형 표준 분포함수, 충돌적분 누적 전개(cumulant expansion), Eu's closure 라 할 수 있는데, 궁극적인 역할은 열역학적으로 완전한 닫힌 고차 유체방정식을 이끌어내는 것이다.

비평형 표준 분포함수는 아래의 지수꼴로 표현될 수 있다.

$$f = \exp[-(H + H^{(1)} - \mu)/k_B T] \quad (3)$$

여기서

$$H = \frac{1}{2} m C^2 + m \Psi, \quad H^{(1)} = \sum_{a \geq 1} X_a h_a.$$

위 관계식에서 μ , m , k_B , T , C , Ψ 는 표준 계수, 입자질량, Boltzmann 상수, 온도, 속도 (peculiar velocity), 퍼텐셜 에너지 밀도를 나타낸다. h_a 는 응력텐서, 열전달, 확산율(diffusion flux)등 비평형 물리량을 나타낸다. X_a 는 밀도, 평균속도등 거시변수의 함수로 표현되며 입자속도와 독립적이다.

위의 표준 분포함수는 Chapman-Enskog 전개 시리즈나 Grad 기법과 그 형태에 있어서 유사하지만, 분포함수는 근사식이 아니며 비록 비평형도를 나타내는 $H^{(1)}$ 에 관한 근사식을 사용하더라도 열역학 제 2법칙을 엄밀히 만족시키는 점에서 근본적으로 다르다. 이것은 미리 X_a 를 특정 모양으로 가정한 기존 기법과는 달리 제 2법칙을 만족시키도록 나중에 결정하기 때문에 가능하다. 이 과정에서 Knudsen 수의 효과를 아주 정확하게 감안하는 누적전개 기법이 사용되며, 이를 통하여 물리적으로 합당한 감쇠항(dissipative term)을 유도할 수 있다. 자주 사용되는 BGK 기법의 작은 교란(small perturbation) 가정이 필요없어 큰 교란의 높은 Knudsen 수 문제에도 어려움이 없다. 일반유체역학의 보다 상세한 내용은 Eu의 기체운동학과 비가역 열역학에 관한 교과서[19]나 Myong의 논문[21]에 잘 나타나 있다.

3.2 비평형 유체 지배방정식

보존(conserved) 및 비보존(non-conserved) 변수에 관한 열역학적으로 완전한 유체 계산 모델이 Eu[19]의 일반유체역학을 기초로 Myong[21, 22]에 의해 개발되었는데, 단원자 기체에 대한 무차원 방정식은 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho E \end{pmatrix}_t + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \frac{p}{\gamma M^2} \mathbf{I} \\ (\rho E + \frac{p}{\gamma M^2}) \mathbf{u} \end{pmatrix} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{\Pi} \\ \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{\text{EcPr}} \mathbf{Q} \end{pmatrix} = 0 \quad (4)$$

및 요소관계식

$$\widehat{\Pi} q(c \hat{R}) = \widehat{\Pi}_0 + [\widehat{\Pi} \cdot \nabla \widehat{\mathbf{u}}]^{(2)} \quad (5)$$

$$\widehat{\mathbf{Q}} q(c \hat{R}) = \widehat{\mathbf{Q}}_0 + \widehat{\Pi} \cdot \widehat{\mathbf{Q}}_0 \quad (6)$$

여기서

$$\begin{aligned} \widehat{\Pi} &\equiv \frac{N_\delta}{p} \mathbf{\Pi}, \quad \widehat{\mathbf{Q}} \equiv \frac{N_\delta}{p} \frac{\mathbf{Q}}{\sqrt{T/(2\varepsilon)}}, \\ \nabla \widehat{\mathbf{u}} &\equiv -2\eta \frac{N_\delta}{p} \nabla \mathbf{u}, \quad q(c \hat{R}) = \frac{\sinh(c \hat{R})}{c \hat{R}}, \\ \widehat{R}^2 &= \widehat{\Pi} : \widehat{\Pi} + \widehat{\mathbf{Q}} \cdot \widehat{\mathbf{Q}}, \\ \varepsilon &= \frac{1}{\text{PrEcT}_r/\Delta T}. \end{aligned}$$

잘 알려진 Navier-Stokes-Fourier 관계식은 아래와 같다.

$$\mathbf{\Pi}_0 = -2\eta[\nabla \mathbf{u}]^{(2)}, \quad \mathbf{Q}_0 = -\lambda \nabla \ln T. \quad (7)$$

위의 방정식에서 ρ , $\mathbf{u}$, p , E , $\mathbf{\Pi}$, $\mathbf{Q}$ 은 밀도, 속도, 압력, 총에너지 밀도, 스트레스, 열전달(heat flux)을 나타낸다. $[\nabla \mathbf{u}]^{(2)}$ 는 속도구배 텐서의 주대각선 요소의 합이 영(traceless)인 대칭부분을 나타내며 $[\mathbf{\Pi} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)}$ 는 스트레스와 속도구배 텐서의 상호작용을 묘사한다. 콜론(colon)은 텐서 사이의 이중 내적(double scalar product)을 뜻하고, $N_\delta = \sqrt{2\gamma/\pi} \text{Kn} \cdot M$ 로 표현되는 무차원수 N_δ 과 비가역 과정을 묘사하는 $\widehat{R}$ 은 비평형도를 나타낸다. η, λ 는 점성 및 열전도를 나타낸다. 첨자 r 는 기준(reference) 상태를 나타낸다. c 는 1보다 약간 큰 값을 갖는 상수인데 기체의 종류에 따라 조금씩 달라진다.

위의 방정식들은 Boltzmann 방정식을 충족시키는 보존법칙 (4)와 $\mathbf{\Pi}$, $\mathbf{Q}$ 에 관한 비선형 요소 관계식으로 구성되며, 상태방정식(equation of state)과 함께 수학적으로 닫힌 고차 유체방정식이 된다. 새 방정식은 항상 엔트로피 생성이 양인 것으로 판명되어 열역학 제 2법칙을 엄밀히 만족시킨다. 그 이유는 엔트로피 생성(entropy production) σ_{ent} 이 아래 식과 같이 표현되어 Knudsen 수, 차수, 유동조건등의 모든 경우에 대해 양의 값을 갖기 때문이다.

$$\sigma_{\text{ent}} \sim \widehat{R}^2 q(c \widehat{R}) \quad (8)$$

식 (8), 요소관계식 (5), (6)에 나타난 함수 $q(x)$ 는 엔트로피 생성항을 누적 전개할 때 생성되며, 근본적으로 Boltzmann 충돌적분항 기여를 모든 Knudsen 수에 관해 합한 것을 의미한다. $q(x)$ 는 일반유체역학 이론의 특징을 가장 잘 나타내며 밀도의 양극단, 즉 희박 및 조밀상태를 동시에 다룰 수 있게 한다.

3.3 경계조건

고체표면 근처의 기체 유동을 다루는 경계조건은 비평형 유동연구에서 아주 중요한 위치를 차지한다. 1875년 Kundt와 Warburg에 의해 희박기체 영역에서의 벽면 미끄럼 현상(slip phenomena)이 발견된 이후 유체역학의 중요한 미스터리로 남아 왔다. 식 (7)로 표현된 고전이론에 따르면 속도구배가 커질 때 값을 비율로 벽면응력이 증가하여 기체를 벽면에 항상 고착시키므로, 희박가스 영역에서 기체가 벽면에서 미끄러지는 실험결과와 상충되기 때문이다.

이러한 문제를 해결하기 위해 소위 Maxwell-Smoluchowski 기법이 많이 사용되어 왔다. 이 기법은 1879년 Maxwell의 벽면-가스입자 상호작용(surface-gas molecular interaction)에 관한 근사해법에 기초로 하며, 등온유동인 경우 아래의 미끄럼속도에 관한 무차원 관계식으로 표현된다.

$$u = u_w + \frac{2 - \sigma_m}{\sigma_m} \frac{\text{Kn}}{p} \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)_w \quad (9)$$

첨자 w 는 벽면(wall)을 나타낸다. 미끄럼속도는 Knudsen 수, 국소 압력, 벽면에 평행한 속도성분의 수직방향 구배 $\left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)$, 조절계수(accommodation coefficient) σ_m 에 정해진다. $\sigma_m = 1$ 인 경우는 완전 확산반사(perfect diffusive reflection)로 불리며 유한한 미끄럼 량을 나타낸다. 실제 계산에서는 1 또는 1보다 작은 값들이 사용된다.

이 기법은 단순한 반면 많은 문제점을 안고 있다. 계산 정확도에 따라 그 값이 상당히 유동적인 속도구배와 잘 정의되지 않는 조절계수 개념을 이용하기 때문이다. 조절계수는 특정 물질표면의 특정기체에 대해 유일하게 정의되는 것이 아니라 문제에 따라 임의로 정해져야 하는데, 그

값에 따라 미끄럼정도가 상당히 차이가 생겨[27] 그 정확도가 의문시되어 왔다. 이러한 점은 (9)식을 유도할 때 사용된 평균자유행로 기법(mean-free-path method)의 준평형 가정의 한계를 고려해 보면 자명해진다. 다시 말해 위 기법은 복잡한 비선형 고체-가스입자 상호작용의 하나의 근사해에 불과하다고 할 수 있다. 한편 Beskok등에 의해 (9)식의 일차보정을 한 차수 높은 소위 이차보정 미끄럼유동 관계식이 개발되었다[23]. 하지만 일차 정확도에 불과한 Navier-Stokes 방정식에 고차 조건을 적용하는 것은 논리적으로 타당하지 않고, 위에서 언급된 문제점을 그대로 간직하고 있어 거의 사용되지 않는다.

이러한 기존 경계조건의 문제점을 해결하기 위해 본 연구에서는 화학반응에 관한 이론을 이용한다. 벽면과 열적 평형을 이루는 입자의 퍼센트 α 는 다음과 같이 표현될 수 있다[22].

$$\alpha = \frac{\beta p}{1 + \beta p} \quad (10)$$

여기서 β 는 화학반응 상수와 같은 역할을 하는데 아래와 같이 고체면 온도와 상호작용 변수로 나타낼 수 있다.

$$\beta = \frac{A l_r / \text{Kn}}{k_B T_w} e^{\frac{D_e}{k_B T_w}} \quad (11)$$

A 는 평균면적(mean area of a site), D_e 는 퍼텐셜 변수, l_r 는 평균자유행로를 나타낸다. A, D_e 는 고체면의 재질과 기체입자의 종류에 의해 실험으로 정해진다. (10)과 (11)식으로부터 α 가 정해지면 아래 식에서 미끄럼을 감안한 경계조건을 구할 수 있다.

$$u = \alpha u_w + (1 - \alpha) u_r \quad (12)$$

$$T = \alpha T_w + (1 - \alpha) T_r \quad (13)$$

Maxwell 관계식과는 달리 조절계수, 속도나 온도구배에 관한 정보가 필요 없는 것이 특색이다.

Fig. 3에 압력에 따른 α 값의 변동을 요약하였는데, 희박영역에서 평형을 이루는 입자 비율이 적어짐을 확인할 수 있다.

IV. 전산유체역학 기법

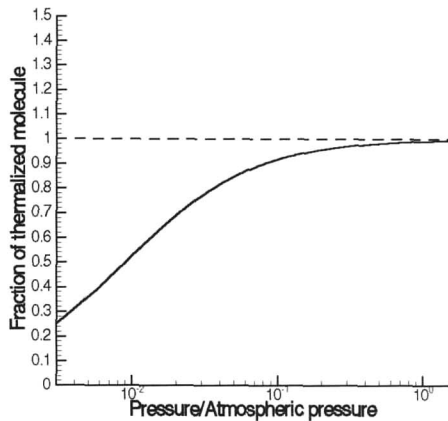


Fig. 3. Fraction of molecules reaching thermal equilibrium in the interface as function of pressure in logarithmic scale ($L = 1\mu m$, $T_w = 300K$).

보존법칙 (4)에 대한 수치기법은 비평형 물리 변수 Π , Q 값이 주어지면 기존의 Navier-Stokes 방정식 전산기법을 그대로 사용할 수 있어 아주 효율적이다. 요소 관계식 계산에 관한 알고리즘만 첨가하면 된다.

4.1 요소관계식 계산

주대각선 항의 합이 영인 대칭 텐서 Π 에 대한 식 (5)는 5개의 변수를, 벡터 Q 에 관한 식 (6)은 3개의 변수를 가지므로, 요소 관계식은 열역학적 힘(thermodynamic forces) $\nabla(u, T)$, 압력 p , 온도 T 에 종속인 총 8개의 방정식이 된다. 왼쪽항의 엔트로피 생성에 관련된 $q(c\hat{R})$ 때문에 8개의 방정식은 복잡하게 결합된 비선형 방정식 형태가 되어, 온도구배에 의한 기체의 열적 응력(thermal stress)과 같은 고차원 효과를 설명할 수 있다. 뿐만 아니라 복잡한 형태에도 불구하고 삼차원의 한 단면에서의 값은 반복기법(method of iterations)으로 쉽게 구할 수 있음이 증명되었다[21]. 이차원인 경우 열역학적 힘 (u_x, v_x, w_x, T_x) 과 열역학 변수 (p, T) 에 의한 6개 비평형 변수 (Π, Q_x) 의 값을 $(u_x, 0, 0, T_x)$ 와 $(0, v_x, w_x, 0)$ 두 개의 열역학적 힘에 의한 것으로 근사하는 것이다. 전자는 가스가 압축

또는 팽창하는 문제를 나타내며 후자는 전단유동을 나타낸다. Fig. 4에 압축(충격파) 또는 팽창하는 유동에서의 요소 관계식 해를 열전달이 영인 경우에 대해 나타내었다. 열전달이 영이 아닌 일반적인 경우도 이와 유사한 성질을 보여 준다. N_δ/p 이 곱해진 것을 감안하면 압력이 낮을수록, 비평형도가 높을수록, 수직속도 구배가

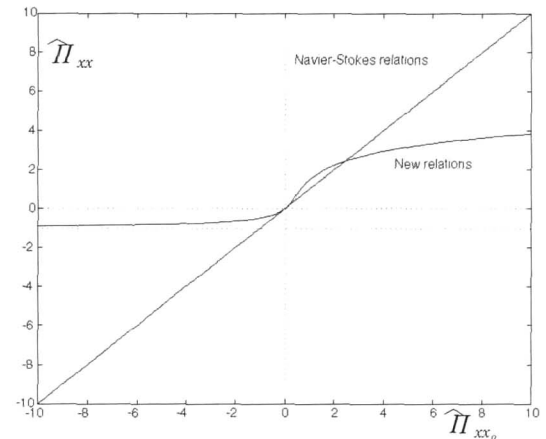


Fig. 4. Nonlinear normal stress relation in expanding gas and compressed gas (shock wave).

커질수록 응력관계식이 Navier-Stokes의 선형관계에서 벗어나는 것을 알 수 있다.

Fig. 5는 전단속도 구배만 존재할 경우의 요소 관계식 해를 보여준다. Fig. 4와 마찬가지로 압력이 낮을수록, 비평형도 및 전단속도 구배가 커

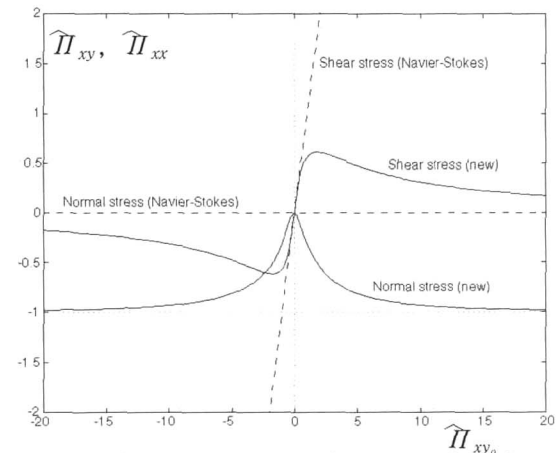


Fig. 5. Nonlinear stress relations under shear velocity gradient.

절수록 응력관계식이 Navier-Stokes의 선형관계에서 벗어나, 어느 이상 값에서는 응력이 감소하기 시작하고 수직응력(normal stress)이 생성되는 것을 알 수 있다. 반면 Navier-Stokes 관계식에서는 전단속도 구배만으로 결코 수직응력이 생길 수 없다. 이 점은 물리적으로 아주 중요한데, 비평형도가 아주 큰 경우 전단응력이 작아져 속도의 미끄럼현상이 나타날 수 있음을 보여준다. 즉 지금까지 큰 속제로 남아 왔던 회박영역에서의 미끄럼현상을 Fig. 5의 비선형 관계식으로 간단히 설명할 수 있는 것이다.

4.2 유한체적법

보존법칙 (4)는 닫혀진 공간에 적용되기만 하면 사용된 좌표계에 관계없이 성립한다. 직교좌표계는 간단하지만 곡면 주위의 유동과 같은 복잡한 문제에는 적용하기 어렵다. 하지만 유한체적법을 이용하면 비직교 영역을 아무런 어려움 없이 다룰 수 있다. 이것은 보존법칙의 회전불변(rotational invariance) 성질에 기인한 것으로 임의 단면의 수치플럭스를 직교면의 수치플럭스로 자유롭게 변환할 수 있기 때문이다.

(x, y, z) 공간에서 유한체적 $V_{i,j,k}$ 의 l -번째 격자면을 ΔS_l 라하고 (n, s, t) 를 격자면에 수직, 평행한 벡터라 하면, 격자면과 직교면의 관계는 z 축 중심 회전각 $\theta^{(z)}$ 과 y 축 중심 회전각 $\theta^{(y)}$ 에 의해 결정된다. 유한체적의 중심이 항상 격자면 왼쪽에 위치하도록 하면, 유한체적 $V_{i,j,k}$ 에 관한 보존변수 U 의 쌍곡형 법칙 (4)는 시간증분 Δt 에 대해 아래와 같이 표현된다.

$$U_{i,j,k}^{n+1} = U_{i,j,k}^n - \frac{\Delta t}{V_{i,j,k}} \sum_{l=1}^N R_l^{-1} F_{T_l}^n \Delta S_l \quad (14)$$

여기서

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad F_{T_l} = \begin{pmatrix} \rho u_n \\ \rho u_n^2 + \frac{p}{\gamma M^2} \\ \rho u_n u_s \\ \rho u_n u_t \\ (\rho E + \frac{p}{\gamma M^2}) u_n \end{pmatrix}_l +$$

$$\frac{1}{\text{Re}} \begin{pmatrix} 0 \\ \Pi_{nn} \\ \Pi_{ns} \\ \Pi_{nt} \\ \Pi_{nn} u_n + \Pi_{ns} u_s + \Pi_{nt} u_t + \frac{1}{\text{EcPr}} Q_n \end{pmatrix}_l.$$

회전 매트릭스 R 과 (x, y, z) 좌표공간의 응력 텐서는 다음과 같다[24,25].

$$R = R^{(y)} R^{(z)} \\ \Pi = R^{-1} \Pi^* R$$

여기서 Π^* 는 (n, s, t) 좌표상의 응력텐서를 나타내며 $R^{(y)}, R^{(z)}$ 는 아래와 같이 정의된다.

$$R^{(y)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta^{(y)} & 0 & \sin \theta^{(y)} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin \theta^{(y)} & 0 & \cos \theta^{(y)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ R^{(z)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta^{(z)} & \sin \theta^{(z)} & 0 & 0 \\ 0 & -\sin \theta^{(z)} & \cos \theta^{(z)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4.3 수치 경계조건

고체면에는 (12), (13)의 경계조건과 수직방향의 압력변화가 영이라는 기계적 평형조건을 적용한다. 자유면과 같은 기타 수치 경계면은 Euler 방정식과 동일하게 취급한다.

V. 적 용

3, 4 절에서 개발된 일반 유체역학 해석기법의 정확도와 효율성을 알아보기 위해 기존의 해석기법으로 계산하기 쉽지 않는 문제들을 고려하였다. 비평형 문제는 물리적으로 크게 회박기체와 미소(MEMS) 유동으로 분류할 수 있는데, 그 이유는 모두 무시할 수 없는 크기의 Knudsen 수를 갖지만 비평형도와 밀접한 관련이 있는 N_δ 값에서 큰 차이가 나기 때문이다. (회박기체일때 $O(10^{-1})$, 미소유동일때 $O(10^{-5})$.) 또한 요소관계식에서 크게 세 가지 경우에 비선형 성질이

부각되는 것을 알 수 있는데, 급작 팽창과 압축(충격파), 전단유동이 그러한 경우이다. 이를 바탕으로 마하수가 높은 경우 계산이 아주 어려워지는 일차원 충격파 구조 문제와 벽면 미끄럼현상이 중요시되는 이차원 MEMS 채널유동을 선택하였다.

기체는 N_2 , O_2 등이 혼합된 공기의 특징을 잘 나타내는 Argon으로 하였고, 고체표면은 Aluminum으로 가정하였다. Argon 기체의 점성계수는 분자간 힘을 나타내는 지수 $\nu=9$ 로 표현되고 기체상수는 $R=208.15 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ 이다. Ar-Al 인 경우 $A=5 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ 이며 $D_e=1.32 \text{ kcal/mol}$ 이다. 수치 플럭스 계산은 van Leer's flux vector splitting 기법을 사용하였고, 차분법으로는 MUSCL-Hancock 기법을 사용하여 정상상태해를 구하였다.

5.1 충격파 내부구조

기체가 비가역 과정을 통해 순간적으로 압축되어 밀도등의 보존변수들이 급격히 변하는 면을 충격파로 일컫는데, 두께가 평균자유행로의 크기에 필적할 정도로 작아 큰 Knudsen 수값을 갖는다. 충격파를 전후로 기계적 에너지가 열에너지로 변환되어 엔트로피가 증가하기 때문에 그 내부구조는 높은 비평형도를 갖는 유동으로 특징지워진다. 이러한 이유로 충격파 내부구조 문제는 비평형 해석모델의 리트머스 시험지라 할 수 있다. 특히 해의 정확도에 지대한 영향을 끼치는 고체면 경계조건을 고려할 필요가 없어, 계산결과를 실험이나 다른 결과와 비교할 때 매우 신뢰성이 높다고 할 수 있다.

식 (5)와 (6)으로 표현되는 일반유체역학의 마하수에 따른 보존변수 분포등 충격파 구조 계산 결과는 이전 논문[21]에 잘 나타나 있다. 여기서는 그 물리적 의미를 중점적으로 살펴보고자 Fig. 6에 충격파 내부의 비평형도 분포를 나타내었다. 마하수가 15인 경우를 선형(Navier-Stokes) 요소관계식과 비교해 보면, 대부분의 영역에서 비평형도가 선형 관계식보다 큰 것을 알 수 있다. 이점은 Maxwellian 입자인 경우 Boltzmann 방정식에서 직접 유도한 Elliott[26]의 이론결과--충격파 내부에 Boltzmann 비평형 결과가 선형 결과보다 큰 영역이 항상 존재함--와 일치하는 것으로 현 결과의 신빙성을 증명해준다.

5.2 MEMS 채널 내부유동

특성길이 $1.2 \mu\text{m}$, 속도 20 cm/s 인 전형적인 MEMS 채널은 아래의 무차원값을 갖는다.

$$\text{Re} = 2.02 \times 10^{-2}, \quad M = 6.5 \times 10^{-4}, \\ \text{Kn} = 0.052, \quad N_\delta = 3.48 \times 10^{-5}$$

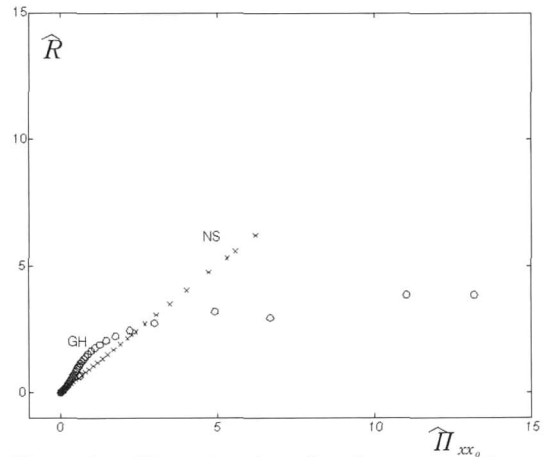


Fig. 6. The level of departure from thermodynamic equilibrium in shock structure problem.

무차원값 계산에 사용된 기준치는 채널 출구의 상태이며, 기준속도는 면적 평균 유선방향 속도이다. 이러한 영역에서는 요소 관계식 (5), (6)이 Navier-Stokes 관계식 (7)로 간단해진다. 그 이유는 N_δ^2 에 관계된 항은 무시될 수 있고 $q(c\hat{R})$ 의 값은 N_δ 이 아주 작을 때 1이 되기 때문이다. 하지만 Knudsen 수가 0.052로 무시할 수 없으므로 벽면-가스입자 상호작용에 의한 미끄럼 경계조건을 고려해야 한다. 경계면에서의 높은 Knudsen 수 효과를 알아보기 위해 폭에 대한 길이비가 h 인 채널 내부 정상 등온유동을 고려하면, 지배방정식은 아래와 같다.

$$h \frac{\partial(pu)}{\partial x} + \frac{\partial(pv)}{\partial y} = 0, \quad (15)$$

$$\frac{h}{N_\delta} \frac{dp}{dx} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (16)$$

기존의 Maxwell 경계조건 (9)는 고정면에 대해 아래와 같이 표현된다.

$$u_{\text{boundary}} = \frac{2 - \sigma_m}{\sigma_m} \frac{\text{Kn}}{p} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w \quad (17)$$

식 (15)-(17)을 대칭조건, 벽면수직방향 속도 영의 조건을 이용하여 해석하면 [3,6], 아래의 상미분 방정식을 얻을 수 있는데, $(\sigma = (2 - \sigma_m)/\sigma_m)$

$$\frac{d^2(p^2)}{dx^2} = -12\sigma \text{Kn} \frac{dp}{dx} \quad (18)$$

채널내부의 속도 및 압력분포는 다음과 같이 구해진다. ($p_{x=0} = p_{\text{in}}, p_{x=1} = 1$)

$$u = -\frac{3}{\delta} \frac{dp}{dx} [(1 - 4y^2) + 4\sigma \frac{\text{Kn}}{p}] \quad (19)$$

$$x = \frac{(p_{\text{in}} - p)(p_{\text{in}} + p + 12\sigma \text{Kn})}{(p_{\text{in}} - 1)(p_{\text{in}} + 1 + 12\sigma \text{Kn})} \quad (20)$$

큰 Kn 값을 가질 때는 아래의 선형형태가 된다.

$$x = \frac{p_{\text{in}} - p}{p_{\text{in}} - 1} \quad (21)$$

한편 새 경계조건 (12)는 아래와 같다.

$$u_{\text{boundary}} = \frac{1}{1 + \beta p} \quad (22)$$

여기서 Argon인 경우 $\beta = 10.584/\text{Kn}$ 이며, 새 경계조건에 관한 미분방정식은 아래와 같다. ($\delta = 24 N_\delta / h$)

$$\frac{d^2(p^2)}{dx^2} = \frac{\delta}{(1 + \beta p)^2} \frac{dp}{dx} \quad (23)$$

속도 및 압력분포는 아래의 식으로 표현된다.

$$u = -\frac{3}{\delta} \frac{dp}{dx} (1 - 4y^2) + \frac{1}{1 + \beta p} \quad (24)$$

$$x = 1 + \frac{2}{D} \left[\frac{p^2 - 1}{2} + \frac{\delta}{\beta^2 D} (p - 1) - \left(\frac{1}{\beta} - \frac{\delta}{\beta^2 D} \right) \frac{\delta}{\beta^2 D} \ln \frac{\beta^2 D p + \beta D - \delta}{\beta^2 D + \beta D - \delta} \right] \quad (25)$$

여기서 D 는 아래의 비선형식에서 결정된다.

$$\frac{D}{2} + \frac{p_{\text{in}}^2 - 1}{2} + \frac{\delta}{\beta^2 D} (p_{\text{in}} - 1) - \left(\frac{1}{\beta} - \frac{\delta}{\beta^2 D} \right) \frac{\delta}{\beta^2 D} \ln \frac{\beta^2 D p_{\text{in}} + \beta D - \delta}{\beta^2 D + \beta D - \delta} = 0$$

큰 Kn 값을 가질 때는 아래의 식이 된다.

$$x = 1 + \frac{2}{\delta} \left[p - 1 - \frac{D}{\delta} \ln \frac{\delta p + D}{\delta + D} \right] \quad (26)$$

여기서

$$\frac{\delta}{2} + p_{\text{in}} - 1 + \frac{D}{\delta} \ln \frac{\delta + D}{\delta p_{\text{in}} + D} = 0$$

이 식은 항상 $(-)\delta p_{\text{in}}$ 보다 작은 D 값을 해로 갖는다. 참고로 연속체 해($\text{Kn} = 0$)는 (20)과 (25)식으로 부터 모두 아래의 간단한 압력분포 형태가 된다.

$$x = \frac{p_{\text{in}}^2 - p^2}{p_{\text{in}}^2 - 1} \quad (27)$$

Fig. 7에 (21), (26) 및 (27)로 표현되는 압력분포를 나타내었다. 기존 및 새 경계조건의 가장 큰

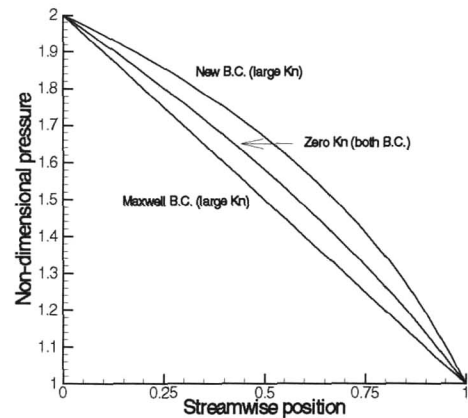


Fig. 7. Pressure distribution in a long MEMS channel ($\delta = 2.5, p_{\text{in}} = 2, \sigma = 1$).

차이점은 회박도 또는 Knudsen 수에 따른 압력 분포 비선형성의 변동이다. 새 이론은 회박도가

증가함에 따라 비선형성이 증가하는 반면 기존 이론결과[3,6]는 감소하여 서로 상반된 결과를 보여준다. UCLA Ho 그룹의 연구[28, Fig. 9]에 따르면 실험결과는 비선형성이 증가하는 새 경계조건 이론과 일치하는 것으로 밝혀졌다. 이것은 물리적 직관과도 일치하는 것으로, 회박도가 커질수록 채널내부의 기체흐름은 채널벽면 효과를 작게 받아 채널입구 압력이 멀리까지 보존되려는 경향이 커져 비선형성이 증가할 것이기 때문이다. 결론적으로 현재의 MEMS 채널유동 계산은 (10)-(13)으로 표현되는 새 경계조건의 물리적 타당성 및 가능성을 보여준다고 할 수 있다.

5.3 계산 효율성

일반유체역학 전산 프로그램은 기본적으로 Navier-Stokes 프로그램과 동일하다. 유일한 차이점은 열역학 변수와 힘으로부터 응력과 열전달을 계산하는 독립된 알고리즘이 추가로 필요로 하는 것인데, 전체 계산에 차지하는 시간은 작은 것으로 드러났다. 충격파 내부구조 계산을 통해 확인해 본 결과 Navier-Stokes 코드에 비해 약간의 추가 계산시간을 필요로 하였다. Burnett과 같은 다른 고차 유체방정식 전산코드에 비하면 아주 효율적이라 할 수 있다. 메모리면에서도 요소관계식 계산 알고리즘이 메모리를 전혀 필요로 하지 않으므로 Navier-Stokes 코드 메모리만으로 충분히 경제적이라 할 수 있다.

VI. 결론 및 토의

기술적, 학문적 중요성이 증대하고 있는 회박 및 MEMS 기체유동에 관한 기존 해석모델의 문제점을 살펴보고, 물리적으로 타당하며 효율적인 새 모델 개발의 방향을 제시하였다. 이론적으로 모든 Knudsen 수에 대해 유효한 일반유체역학 해석모델 (4)-(6)을 충격파 내부구조 문제에 적용하여 그 결과를 분석하였다. 비평형 현상을 다루어 열역학 제 2법칙의 중요성을 확인하였으며, 새 고체 경계조건 (10)-(13)을 MEMS 채널유동에 적용하여 새 조건이 기존의 문제점을 극복하는 것을 발견하였다. 새 해석모델의 가장 중요한 특징으로는 열역학 제 2법칙을 엄밀히 만족시키는 것을 들 수 있으며, 매우 안정된 시스템인 Navier-Stokes 방정식을 높은 비평형 영역까지 성공적으로 확장시켜 회박 및 MEMS 유동영역에 적용 가능함을 확인하였다. 마지막으로 실제 공학문제 계산을 위해 삼차원 전산유체역학 기법을 개발하였다.

새 해석모델은 단위자 기체모델과 열적 비평형 문제를 다루었기 때문에 앞으로 이원자(diatomic) 기체와 같은 복잡기체 모델, 회전(rotational) 및 진동(vibrational) 비평형 문제등으로 확장이 필요하다. 이론적으로 일반유체역학은 단위자나 이원자등의 기체종류, 회박이나 조밀등의 기체상태에 무관하게 성립하므로 확장에 별 어려움이 없을 것으로 예상되지만 실제 연구를 통해 확인되어야 할 것이다. 또한 MEMS 유동은 아주 작은 M^2/Re 값을 가져 수치계산의 수렴성이 좋지 않으므로, 저속유동의 수렴속도 향상을 위한 연구도 병행되어야 할 것이다.

후 기

본 연구의 일부분은 한국과학재단 특정기초연구(과제번호 1999-2-305-001-3)의 지원을 받아 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참고문헌

1. Ivanov, M. S. and Gimelshein, S. F., "Computational Hypersonic Rarefied Flows," *Annual Review in Fluid Mechanics*, Vol. 30, pp. 469-505, 1998.
2. Janson, S. W., Helvajian, H., and Breuer, K. S., "MEMS, Microengineering and Aerospace Systems," AIAA Paper 99-3802, 1999.
3. Arkilic, E. B., *Measurement of the Mass Flow and Tangential Momentum Accommodation Coefficient in Silicon Micromachined Channels*, Ph.D. Dissertation, MIT, Cambridge, 1997.
4. Gad-el-Hak, M., "The Fluid Mechanics of Microdevices--The Freeman Scholar Lecture," *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 121, pp. 5-33, 1999.
5. Harley, J. C., Huang, Y., Bau, H. H., and Zemel, J. N., "Gas Flow in Micro-Channels," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 284, pp. 257-274, 1995.
6. Arkilic, E. B., Schmidt, M. A., and Breuer, K. S., "Gaseous Slip Flow in Long Microchannels," *Journal of Microelectromechanical Systems*, Vol. 6, No. 2, pp. 167-178, 1997.
7. Ho, C. M. and Tai, Y. C., "Micro-Electro-Mechanical-Systems (MEMS) and Fluid Flows," *Annual Review in Fluid Mechanics*,

Vol. 30, pp. 579-612, 1998.

8. George, J. D. and Boyd, I. D., "Simulation of Nozzle Plume Flows Using a Combined CFD-DSMC Approach," AIAA Paper 99-3454, 1999.

9. Bird, G. A., *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, Oxford, England, 1994.

10. 정찬홍, "팽창희박류의 분석에 있어서 FDDO와 직접모사법의 비교," 한국전산유체공학 회지, 제 1권, 제 1호, pp. 142-149, 1996.

11. 김병곤, "진공중으로 팽창하는 자유 분류의 비평형 특성," 한국항공우주학회지, 제 27권, 제 2호, pp. 38-50, 1999.

12. Chapman, S. and Cowling, T. G., *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University Press, New York, 1970.

13. Vincenti, W. G. and Kruger, C. H., *Introduction to Physical Gas Dynamics*, John Wiley & Sons, New York, 1967.

14. Grad, H., "On the Kinetic Theory of Rarefied Gases," *Communications on Pure and Applied Mathematics*, Vol. 2, pp. 331-407, 1949.

15. Levermore, C. D., "Moment Closure Hierarchies for Kinetic Theories," *Journal of Statistical Physics*, Vol. 83, pp. 1021-1065, 1996.

16. Brown, S., *Approximate Riemann Solvers for Moment Models of Dilute Gases*, Ph.D. Dissertation, The University of Michigan, Ann Arbor, 1996.

17. Agarwal, R., Yun, K., and Balakrishnan, R., "Beyond Navier Stokes: Burnett Equations for Flow Simulations in Continuum-Transition Regime," AIAA Paper 99-3580, 1999.

18. Comeaux, K. A., Chapman, D. R., and McCormack, R. W., "An Analysis of the Burnett Equations Based on the Second Law of Thermodynamics," AIAA Paper 95-0415, 1995.

19. Eu, B. C., *Kinetic Theory and Irreversible Thermodynamics*, John Wiley & Sons, New York, 1992.

20. Oran, E. S., Oh, C. K., and Cybyk, B. Z., "Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications," *Annual Review in Fluid Mechanics*, Vol. 30, pp. 403-441, 1998.

21. 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.

22. Myong, R. S., "A New Hydrodynamic Approach to Computational Hypersonic Rarefied Gasdynamics," AIAA Paper 99-3578, 1999.

23. Beskok, A., Karniadakis, G. E., and Trimmer, W., "Rarefaction and Compressibility Effects in Gas Microflows," *Transactions of the ASME*, Vol. 118, pp. 448-456, 1996.

24. Toro, E. F., *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, New York, 1997.

25. Goodbody, A. M., *Cartesian Tensors: With Applications to Mechanics, Fluid Mechanics and Elasticity*, Ellis Horwood Ltd., Chichester, England, 1982.

26. Elliott, J. P., "On the Validity of the Navier-Stokes Relation in a Shock Wave," *Canadian Journal of Physics*, Vol. 53, pp. 583-586, 1975.

27. Lord, R. G., "Direct Simulation of Rarefied Hypersonic Flow over a Flat Plate with Incomplete Surface Accommodation," *Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 160, pp. 221-228, 1992.

28. Pong, K., Ho, C., Liu, J., and Tai, Y., "Non-linear Pressure Distribution in Uniform Microchannels," in *Appl. of Microfabrication to Fluid Mechanics*, ASME Winter Annu. Meet., pp. 51-56, Chicago, IL, 1994.