

## 論文

## GH 방정식을 이용한 희박유동의 수치적 해석

채동석\*, 김종암\*\*, 노오현\*\*, 명노신\*\*\*

## Numerical Analysis of Rarefied Flow by GH Equations

Dongsuk Chae\*, Chongam Kim\*\*, Oh Hyun Rho\*\* and R. S. Myong\*\*\*

## ABSTRACT

This paper describes the efficient numerical methods for solving one of the 13 moment equations, i.e., GH(Generalized Hydrodynamic) equations coupled with modern computational fluid dynamics. Based on developed methods, a few elementary non-equilibrium rarefied flows are solved to produce improved results over those of the Navier-Stokes equations. Through the analysis of one dimensional compression-expansion and plane Couette flows by GH and NS constitutive relations, the unique fluid dynamic characteristics of GH equations are explored. In two dimensional case, a method for solving full GH constitutive relations is developed and, additionally, the effects of slip wall boundary condition of Maxwell-smoluchowski and Eu are investigated. The comparison with results of DSMC methods in one dimensional shock structure and two dimensional supersonic flat plate problem indicates that the present methods give qualitatively more accurate results than NS equations in rarefied flows.

## 초 록

본 논문은 13 모멘트 방정식의 일종인 GH(Generalized Hydrodynamic) 방정식을 전산유체역학과 결합하여 수치적으로 해석할 수 있는 효율적인 방법을 개발하였고 이를 바탕으로 기본적인 비평형 희박유동을 해석하였다. 먼저, 1차원 압축-팽창과 문체와 평면 Couette 유동 문제의 해를 구함으로써 GH 방정식의 유체구성식과 Navier-Stokes 방정식의 선형유체구성식과 비교하고 이를 통하여 GH 방정식이 가지는 특성을 고찰하였다. 2차원 문제의 경우 GH 유체구성식을 완전하게 해석할 수 있는 방법을 개발하였고 미끄럼 벽면조건으로 Maxwell-Smoluchowski 경계조건과 Eu의 경계조건을 부여하여 각각의 벽면조건의 영향을 살펴보았다. 1차원 충격파 구조 문제와 2차원 초음속 평판문제를 해석하고 DSMC 결과와 비교하여 GH 방정식이 희박유동에서 NS 방정식보다 우수한 결과를 주는 것을 확인하였다.

## 1. 서 론

일상에서 흔히 접하게 되는 유동현상을 지배하는 Navier-Stokes 방정식은 기체입자의 평균자유행로(mean free path)가 유동의 특성길이에 비하여 매우 작다는 가정을 전제로 유도된 것으로서 질량, 운동량, 에너지의 보존 방정식과 선형유체구성식(linear constitutive relation) 및 상태방정

식으로 기술된다. 이러한 가정에 의하여 Boltzmann 방정식의 1차 Chapman-Enskog 전개를 수행하면 Navier-Stokes 방정식을 도출할 수 있게 되는데 유동의 비평형도가 증가함에 따라 이 가정은 그 유효성을 상실하게 된다. 유동의 비평형도가 증가하게 되는 대표적인 예는 희박유동으로서 고고도를 재돌입하는 물체주위의 유동과 같이 기체의 밀도가 매우 작은 경우나

† 2000년 8월 7일 접수

\* 정회원, 서울대학교 항공우주공학과 대학원

\*\* 정회원, 서울대학교 항공우주공학과

\*\*\* 정회원, 경상대학교 항공기계공학과

MEMS(Micro Electro Mechanical Systems)와 같이 유동의 특성길이가 작은 문제에서 찾을 수 있다. 비평형유동은 난류와 더불어 유체역학의 가장 도전적인 문제로 여겨져 왔는데 이를 이해하고 해석하기 위하여 많은 연구가들이 다양한 방법으로 개발해 왔다.

이중 대표적인 것은 DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)[1]로서 무수한 기체입자들을 유한한 가상의 대표적 입자로 나타내고 이들을 이동시키고 충돌시켜 샘플링을 통하여 거시적 변수들을 얻는 통계적인 방법이다. DSMC는 입자들의 이동거리가 기체의 평균자유행로보다 작아야 하는 제약으로 연속체에 가까운 영역에서는 계산시간이 매우 방대하여지는 문제점을 가지고 있으며 유동의 속도가 작아질수록 통계량들의 scattering이 증가하여 MEMS와 같은 유동에서는 해를 얻기가 쉽지 않다.[2] 입자의 운동을 통계적으로 기술하는 방법과는 별개로 Burnett방정식계열[3], Grad의 13 모멘트 방법[4]등과 같이 준평형에 적합한 Navier-Stokes방정식을 높은 비평형영역까지 확장한 고차유체방정식의 방법이 있다. 이중 Chapman-Enskog 2차 전개를 통하여 얻게 되는 Burnett방정식계열은 대부분 열역학 제 2법칙을 엄밀하게 만족하지 못하는 비물리적 경향을 나타낼 뿐 아니라 물리적 의미가 모호한 고차의 경계조건을 부여해야 하는 단점이 있다.

한편, Eu[5]는 비평형표준함수(nonequilibrium canonical distribution function), 충돌항의 누적전개(cumulant expansion), Eu의 closure를 통하여 13 모멘트 방정식의 일종인 GH(Generalized Hydrodynamic)방정식을 제안하였는데 유도과정에서 모든 차수에 대하여 열역학 제 2법칙이 엄밀히 만족되도록 하였다. GH 방정식은 연속체영역과 free molecular영역의 양극단에서 올바른 특성을 보여줄 뿐 아니라 Navier-Stokes방정식이 필요로 하는 물리량 이외의 정보를 필요로 하지 않는 것을 특징으로 한다. 본 논문은 Eu[5]의 GH 방정식에 근거를 둔 Myong[6]의 computational model을 더욱 확장하여 1차원 및 2차원 희박유동문제를 계산하고 DSMC와 비교하였다. 그리고 2가지 벽면경계조건의 영향을 고찰하였다.

## II. 본 론

### 2.1. 지배방정식

단원자 기체에 대하여 Eu에 의하여 제안한 GH방정식은 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho e_t \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I} \\ (\rho e_t + p) \mathbf{u} \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \Pi \\ \Pi \cdot \mathbf{u} + Q \end{pmatrix} = 0 \quad (1)$$

그리고 GH방정식의 유체구성식은,

$$\rho \frac{D(\Pi/\rho)}{Dt} = -\nabla \cdot \phi_2 - 2[\Pi \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)} - \frac{p}{\eta} \{ \Pi q(k) + 2\eta [\nabla \mathbf{u}]^{(2)} \} \quad (2)$$

$$\rho \frac{D(Q/\rho)}{Dt} = -\nabla \cdot \phi_3 - \Pi \cdot C_p \nabla T + \nabla \cdot (p \mathbf{I} + \Pi) \cdot \frac{\Pi}{\rho} - Q \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{p C_p T}{\lambda} \{ Q q(k) + \lambda \nabla \ln T \} \quad (3)$$

와 같으며 여기서,

$$q(k) = \sinh(k)/k \quad (4)$$

이며, 그리고

$$k = \frac{(mk_B T)^{1/4}}{\sqrt{2} dp} \left[ \frac{\Pi \cdot \Pi}{2\eta} + \frac{Q \cdot Q}{\lambda} \right]^{1/2} \quad (5)$$

여기서  $\Pi$ 는 응력 텐서이며  $Q$ 는 열전달량 벡터를 나타낸다. 또한  $C_p$ 는 정압비열이고  $[\nabla \mathbf{u}]^{(2)}$ 는  $\nabla \mathbf{u}$ 의 traceless symmetric part이다. 그리고  $\eta$ 와  $\lambda$ 는 Chapman-Enskog의 점성계수 및 열전달계수를 나타낸다.  $d$ 는 입자의 지름,  $k_B$ 는 Boltzmann 상수, 콜론은 내적을 의미한다. 식(2),(3)의 오른쪽항의 첫번째 항들은 고차의 모멘트 항으로서 Eu의 closure에 의하여 없애고, 단열근사를 도입하여 시간항들을 무시한다.[5] 이러한 단열 근사식을 적절히 무차원화하면, 식(2)와 (3)은 다음과 같은 표현된다.

$$\hat{\Pi} q(k) = \hat{\Pi}_0 + [\hat{\Pi} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}}]^{(2)} \quad (6)$$

$$\hat{Q} q(k) = \hat{Q}_0 + \hat{\Pi} \cdot \hat{Q}_0 + \frac{1}{2} \text{Pr} \hat{Q} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} \quad (7)$$

여기서  $\hat{\Pi} = a\Pi$ ,  $\hat{Q} = \alpha\beta Q$ 이다. 그리고  $k = c[\hat{\Pi} \cdot \hat{\Pi} + \hat{Q} \cdot \hat{Q}]^{1/2}$ 된다. 또한  $\alpha = M/(pRe)$ ,  $\beta = \sqrt{\frac{2\eta}{\lambda \text{Pr}(\gamma-1)}} \frac{dT}{T_\infty}$ 이다. 또한 하첨자 0는 Navier-Stokes 방정식으로부터 도출된 물리량을 나타낸다. 여기서  $c$ 는 사용된 입자의 모델에 따라 달라지며 1보다 약간 큰 값을 가진다.

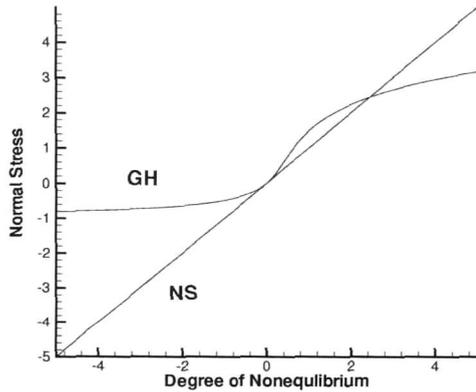


그림 1. GH 방정식과 NS 방정식의 수직응력

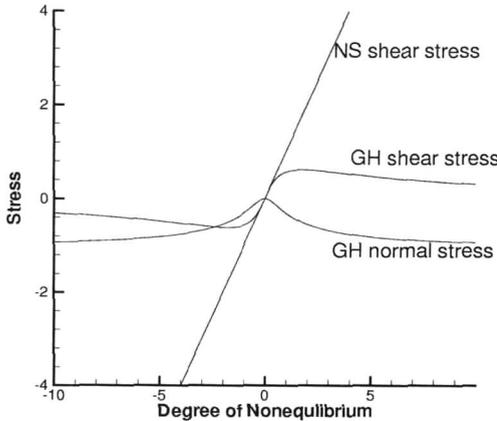


그림 2. GH 방정식과 NS 방정식의 전단응력

## 2.2. 수치해법

식(6), (7)에서 알 수 있듯이 준식은 음함수 형태일 뿐만 아니라 매우 비선형적이므로 일반적인 방법으로 풀 수 없다. Myong은 참고문헌[6]에서 1차원의 경우 위의 방정식이 비교적 간단히 표현되는 것에 착안하여 x 방향의 1차원 충격파문제와 y 방향의 1차원 Couette유동에서의 GH 유체구성식을 반복적 방법에 의하여 해를 구하였다. 그리고 2차원의 경우 1차원 충격파 문제의 해로부터 구하여진  $\hat{\Pi}_{xx}$ ,  $Q_x$ 와 1차원 Couette유동해로부터 나온  $\hat{\Pi}_{xy}$ ,  $\hat{\Pi}_{xx}$ 를 선형적으로 결합하여 식(1)에 필요한 응력 및 열전달량을 효율적으로 구하였다.[7] 1차원 충격파 문제에서 식(6), (7)은

$$\hat{\Pi}_{xx}q(k) = (\hat{\Pi}_{xx} + 1) \hat{\Pi}_{xx0} \quad (8)$$

$$\hat{Q}_{xx}q(k) = (\hat{\Pi}_{xx} + 1) \hat{Q}_{x0} + \frac{3}{4Pr} \hat{Q}_x \hat{\Pi}_{xx0} \quad (9)$$

이 되며, 여기서  $\hat{\Pi}_{xx}$ ,  $Q_x$ 를 구한다. 또한 1차원 Couette문제인

$$\hat{\Pi}_{xx}q(k)^2 = -\frac{2}{3} (\hat{\Pi}_{xx} + 1) \hat{\Pi}_{xx0}^2 \quad (10)$$

$$\hat{\Pi}_{xy} = \text{sign}(\hat{\Pi}_{xy0}) \sqrt{-\frac{2}{3} (\hat{\Pi}_{xx} + 1) \hat{\Pi}_{xx0}} \quad (11)$$

로부터  $\hat{\Pi}_{xy}$ ,  $\hat{\Pi}_{xx}$ 를 구하여 위의 값과 선형적으로 결합한다. 본 연구에서는 Secant방법의 다차원 확장인 Broyden 방법[8]을 사용하여 어떠한 근사도 하지 않고 유체구성식인 식(6),(7)의 해인  $\hat{\Pi}_{xx}$ ,  $\hat{\Pi}_{xy}$ ,  $\hat{\Pi}_{yy}$ ,  $Q_x$  및  $Q_y$ 를 동시에 구하였다. 반복적 방법의 일종인 Newton-Raphson 방법은 매번 기울기를 구하여야 하므로 비효율적일 뿐만 아니라 종종 발산하는 양상을 나타내었다. 이 경우 사용된 초기값은 1차원 문제를 선형적으로 결합하여 구하여진 응력 및 열전달량의 값을 사용하였다. 각각의 방법으로 2차원 평판문제에 적용한 결과를 2.4에 보였다.

식(1)의 비점성항은 향상된 BGK기법[9]에 사용하여 이산화하였으며 고차의 공간 정확도를 위하여 MUSCL기법을 적용하였다. 유체구성식에 필요한 Navier-Stokes의 응력 및 열전달량은 중심차분에 의하여 이산화하였다. 그밖의 시간간격의 결정이나 시간적분방법은 기존의 Navier-Stokes 코드에서 사용하던 것을 그대로 사용하여도 무방하다. 벽면조건으로 회박기체의 벽면미끄럼 현상을 기술하기 위하여 많이 쓰이는 Maxwell-Smoluchowski 벽면경계조건[10]과 Eu의 벽면조건[11]을 부여하였다. 2차의 항과 thermal creep 효과를 무시하면 무차원화가 되기전의 Maxwell-Smoluchowski 벽면조건은

$$u_s - u_w = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{1}{\rho \sqrt{2RT_w/\pi}} \tau_s \quad (12)$$

$$T_s - T_w = \frac{2 - \sigma_t}{\sigma_t} \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma + 1} * \frac{1}{R \rho \sqrt{2RT_w/\pi}} (-q_n) \quad (13)$$

와 같으며 여기서  $\sigma$ 는 accommodation 계수로서 대부분의 경우 경험적으로 결정된다. 그리고, 하첨자  $s, n$ 은 각각 벽면에 평행, 수직인 성분을

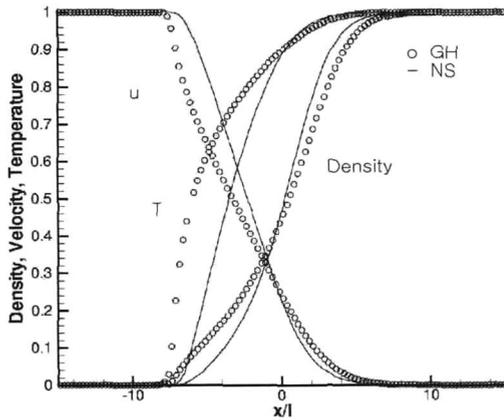


그림 3. M=10 에서의 충격파 구조

의미한다.  $w$ 는 벽면에서의 값을 나타낸다.  $\tau_s$ 와  $q_n$ 은 각각 벽면에서의 Navier-Stokes 방정식의 응력과 열전달량을 나타낸다. 한편,  $Eu$ 의 벽면 경계조건에서의 벽면에서 열적평형에 도달하는 입자의 비율은

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

이며, 여기서  $\beta$ 는 벽면의 온도와 특정한 기체와 벽면간의 상호작용에 따라 결정되며  $p$ 는 압력이다. 기체-벽면상호작용과 화학적 반응을 같게 놓으면

$$\beta = \frac{Al}{k_B T_w} \exp \frac{D_e}{K_B T_w} \quad (15)$$

이며, 여기서  $A$ 는 평균면적,  $D_e$ 는 potential 파라미터이며 실험에 의하여 결정될 수 있으며 벽면에서의 물리량은

$$T_s = \alpha T_w + (1 - \alpha) T_\infty \quad (16)$$

$$u_s = \alpha u_w + (1 - \alpha) u_\infty \quad (17)$$

와 같이 표현된다. 기체와 벽면을 아르곤-알루미늄으로 하면

$$D_e = 1.32 \text{ kcal/mol}, A = 5 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2 \text{ 이다.}$$

### 2.3. GH 방정식의 특성

본 절에서는 식(8),(9)와 식(10),(11)을 이용하여 GH 방정식이 갖는 특징을 NS 방정식과 비교하여 고찰하였다. 그림. 1은 식(8)과 (9)를 이용하여 구한 GH 방정식의 응력을 보여주고 있다. 비평

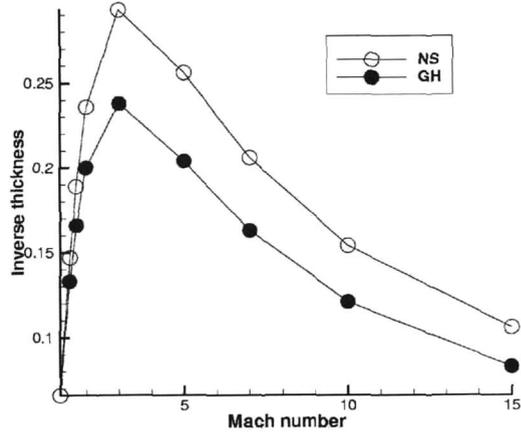


그림 4. 마하수에 따른 충격파 두께의 역수

형도가 작은 영역에서는 NS 방정식의 응력보다 큰 값을 가지다가 비평형도가 증가할수록 작아지는 것을 알 수 있다. 비평형도가 매우 큰 영역에서는  $\widehat{T}_{xx} + p > 0$ 이 만족되며 이것은 free molecular limit에 해당된다. Grad의 13 모멘트 방정식의 경우는 응력이 특이점을 보이게 되는데 이것은 특정 마하수 이상에서 충격파 구조의 해를 구할 수 없는 원인이라고 판단된다. 그림. 2는 식(10),(11)을 사용하여 구한 GH 방정식의 전단 응력을 보여준다. NS 방정식의 수직응력이 0이 되는 것과는 달리 GH 방정식의 수직응력은 비평형도가 증가하면서 일정한 값을 갖게 된다. 전단응력은 비평형도에 따라 증가, 감소함을 볼 수 있는데 이러한 경향은 기체-벽면 상호작용과는 별도로 벽면의 미끄럼 현상이 유체역학적인 특성만으로도 기술될 수 있음을 의미한다.[6,12] 어느 경우에도 비평형도가 작을 경우 즉,  $Kn$ 수가 매우 작을 경우 GH 방정식이 NS 방정식의 특성을 띄게 되는 것도 확인할 수 있다.

### 2.4. 수치해석 결과

1차원 충격파 구조 문제는 유체구성식의 형태가 간단하여질 뿐 아니라 벽면조건과 같이 모호한 경계조건을 필요로 하지 않으므로 지배방정식이 갖는 희박기체에서의 타당성을 검토하기에 매우 적합한 문제이다. 본 논문에서는 Maxwell 기체에 대하여 충격파 구조를 계산하였다. Grad의 13 모멘트방법을 포함한 다양한 모멘트방법이 그 복잡성에도 불구하고 특정한 마하수 이상에서는 특이점의 존재로 인한 불안정성을 드러낸 반면



용된 시험분자의 개수는 약 35000개 정도이다. DSMC용 격자는  $100 \times 60$ 으로 각각의 cell이 4개의 subcell을 가지고 있다. 아르곤 기체의 기준 지름은  $4.092 \times 10^{-10}$ 이며 VHS exponent는 0.81을 사용하였다. 계산에 사용된 기준 온도는 300K이다. NS의 결과는 앞전에서 특이점을 갖는 양상을 보이는 반면 나머지 방법에 의한 결과는 유한한 값을 가지는 것을 볼 수 있다. GH 유체구성식을 근사한 방법[7]은 앞전에서부터 서서히 증가하다가 다시 감소하는 마찰계수의 경향을 보여주며 GH 유체구성식을 완전하게 계산한 현재의 방법은 DSMC의 결과와 같이 앞전에서 약간의 점프가 발생한 후 감소하는 것을 볼 수 있다. 열전달량 계수도 마찰계수와 비슷한 양상을 보이므로 여기에는 신지 않았다. 그림 6은 평판의 온도선도( $T/T_\infty$ )를 나타내었다. DSMC의 결과와 GH의 결과가 정성적으로 잘 일치하는 것을 보이고 있다. 다만 DSMC의 결과에서 평판 표면에 계산 cell이 많지 않은 이유로 온도구배를 GH의 결과만큼 포착하지 않고 있다. NS의 결과는 충격파가 더욱 날카롭게 포착되는 점과 충격파의 기울기 급격하게 형성되는 점을 제외하고는 GH의 결과와 큰 차이가 없으므로 본 논문에서는 신지 않았다.

그림. 7, 8은  $M=12.9$ ,  $Kn=0.0067$ ,  $T_w/T_\infty=5.4$ 인 경우의 극초음속 평판의 벽면 경계조건에 따른 마찰계수를 나타내고 있다. 전반적으로 Maxwell-Smoluchowski 벽면조건이 Eu의 벽면조건보다 더 큰 미끄럼현상을 나타내는 것을 확인 할 수 있었다. Maxwell-Smoluchowski 벽면조건은 accommodation 계수 같은 경험적인 입력을 요구하며 Beskok[10]이 지적인 바와 같이 벽면에서의 vorticity의 부호가 바뀌면서 발생하는 수치적 불안정성을 종종 나타낼 수 있는 반면 Eu의 경계조건은 경험적인 입력변수도 필요로 하지 않으며 어떠한 조건하에서도 강건하게 계산되었다. 본 논문의 방법으로 계산한 마찰계수는 앞전에서 점프를 한 후 약간 증가하다가 감소하는 등 비슷한 조건하에서 계산된 참고문헌[13]의 DSMC결과와 정성적으로 잘 일치한다.

### III. 결 론

본 연구에서는 GH 방정식을 통한 수치적 계산을 수행하여, 1차원 충격파 구조문제에 적용한 결과, NS 방정식보다 우수한 해를 얻을 수 있었

으며, 2차원의 경우 유체구성식을 완전히 풀 수 있는 방법을 제안하여 DSMC의 결과와 더 정성적으로 일치하는 결과를 얻을 수 있었다. 그러나, 이 방법은 Broyden 방법을 적용하는 과정에서 NS방정식을 해석하는 경우보다 약 두 배의 계산 시간이 소요되므로 경우에 따라서는 Myong[7]의 방법을 이용하여도 무방하리라고 판단된다. 그 이유는 2차원 평판문제에서 알 수 있듯이 NS방정식을 제외한 다른 방법들의 해가 크게 차이나지 않는 것에서 찾을 수 있다. 이상으로부터 개발된 GH 방정식의 수치해법은 MEMS내의 유동, 고고도에서 운용되는 비행물체 및 인공위성의 추력기 등 다양한 비평형 희박유동에서 적용될 수 있으리라 판단되며 3차원으로의 확장도 큰 무리 없이 될 것으로 기대된다. 본 논문에서 적용된 GH 방정식은 단원자 분자의 가정으로부터 출발하였으므로 다원자 분자의 기체에 적용하기 위해서는 체적점성계수나 회전온도 등과 같은 분자의 회전을 고려한 모델링이 필요하리라 판단된다.[5,14]

### 참고문헌

1. G.A. Bird, "Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows", Oxford University press, 1994
2. E.S. Oran, C.K. Oh, and B.Z. Cybyk, "Direct Simulation Monte Carlo : Recent advances and applications", Ann. Rev. Fluid Mech., Vol. 30, pp 403, 1998
3. R. Agarwal, K. Yun, and R. Balakrishnan, "Beyond Navier-Stokes: Burnett equations for flow simulations in continuum-transition regime", AIAA paper 99-3580, 1999
4. H. Grad, "On the kinetic theory of rarefied gases", Comm. Pure Appl. Math., Vol. 2, pp 331, 1949
5. B.C. Eu, "Kinetic theory and irreversible thermodynamics", John wiley and sons, New York, 1992
6. R.S. Myong, "Thermodynamically consistent hydrodynamic computational models for high-Knusden number flows.", Phys. Fluids, Vol. 11, pp 2788, 1999
7. R.S. Myong, "A new hydrodynamic approach to computational hypersonic rarefied gasdynamics", AIAA paper 99-3578, 1999
8. W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky,

and W.T. Vetterling. Numerical recipes, Cambridge University Press, New York, 1986

9. D. Chae, C. Kim, and O.h. Rho, "Development of an improved gas-kinetic BGK scheme for inviscid and viscous flow", Journal of Computational Physics, Vol. 158, pp 1, 2000

10. A. Beskok and G.E. Karniadakis, "Modeling separation in rarefied gas flows", AIAA paper, 1997

11. D.K. Bhattacharya and B.C. Eu, "Nonlinear transport processed and fluid dynamics: Effect of thermoviscous coupling and nonlinear transport coefficients on plane

Coutte flow of Lennard-Jones fluids", Physical Review A, Vol. 35, pp 821, 1987

12. M. Al-Ghoul, and B.C. Eu, "Generalized hydrodynamics and shock waves", Physical Review E, Vol. 56, pp 2981, 1997

13. T.G. Elizarova, I.A. Graur, J.C. Lengrand, and A. Chpoun, "Rarefied gas flow simulation based on quasigas dynamics equations", AIAA journal, Vol. 33, pp 2316, 1995

14. F.E. Lumpkin, "Development and evaluation of continuum models for translational-rotational nonequilibrium", Ph.D. dissertation, Stanford university, 1990