

FDDO 를 이용한 실린더를 지나는 희박기체의 해석

A Numerical Analysis of Rarefied Flow of Cylinder Using FDDO

안 무 영¹, 장 근 식²

M.Y. Ahn and K.S. Chang

The BGK equation, which is the kinetic model equation of Boltzmann equation, is solved using FDDO(finite difference with the discrete-ordinate method) to compute the rarefied flow of monatomic gas. Using reduced velocity distribution and discrete ordinate method, the scalar equation is transformed into a system of hyperbolic equations. High resolution ENO(Essentially Non-Oscillatory) scheme based on Harten-Yee's MFA(Modified Flux Approach) method with Strang-type explicit time integration is applied to solve the system equations.

The calculated results are well compared with the experimental density field of NACA0012 airfoil, validating the developed computer code. Next, the computed results of circular cylinder flow for various Knudsen numbers are compared with the DSMC(Direct Simulation Monte Carlo) results by Vogenitz et al. The present scheme is found to be useful and efficient for the analysis of two-dimensional rarefied gas flows, especially in the transitional flow regime, when compared with the DSMC method.

1. 서론

Euler 방정식, Navier-Stokes 방정식으로 대표되는 거시적 해석(macroscopic level approach) 방법은 유체를 연속체라 가정한 것인데, 지금까지의 공학적인 문제는 유체를 연속체라 가정해도 무리 없는 것이 대부분이었다. 그러나 천이영역을 운항하게 될 비행체의 설계와 반도체와 같은 미세한 기구의 해석 등에 연속체라 가정한 해석방법을 적용하게 되면 상당한 오류를 범할 수 있다.

미시적 해석(microscopic level approach) 방법은 분자간의 동역학(kinetics)을 이용하기 때문에 연속체영역, 천이영역, 자유분자영역 모두에서 적용될 수 있다. 가장 대표적인 수학 모델로는 Boltzmann 방정식이 있으며, 종속변수로 속도분포함수(velocity distribution function)를, 독립변수로 공간좌표, 시간, 속도좌표를 사용한다. Boltzmann 방정식은 비선형 방정식이고 integro-differential type 이기 때문에 알려진 해석하는 극히 제한적이며 일반적으로 근사해나 수치해를 구한다.

Boltzmann 방정식에 적용되는 수치해석 방법 중 가장 대중적인 것은 Bird, Nanbu, Baganoff 등에 의해 발전된 DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)이다[2,3,4,5]. 이 방법은 계산영역을 작은 셀로 나누어 각 셀 안에서 principle of decoupling, 즉 입자의 이동과 충돌을 따로 고려할 수 있는 대표입자를 추적하는 방법이다. DSMC는 많은 연구자들에 의해서 연구가 되어왔고 수치적 이론에 많은 발전이 있어왔으나 principle of decoupling 이 물리적인 의미를 가지려면 격자 간격이 평균자유경로보다 작아야 되는 제한때문에 간단한 문제의 해결에 있어서도 많은 계산시간과 메모리가 소요된다. 특히 연속체영역에 근접하는 Kn 이 작은 유동에 적용하기가 매우 어렵다.

이에 반하여 최근에 연구가 되고 있는 FDDO(finite difference with the discrete-ordinate method)는 격자의 제한이 없으므로 천이영역이 시작되는 Kn 가 작은 유동에 대해서 효율적이고 경제적인 방법이다. Oguchi[6]등에 의해서 제안된 이 방법은 Boltzmann 방정식에 충돌적분모델을 도입하여 적분항을 제거한 후, 불연속좌표법을 이용하여 쌍곡선형 편미분방정식군으로

¹ 한국과학기술원 항공우주공학과 대학원

² 한국과학기술원 항공우주공학과

변환된 kinetic model Boltzmann 방정식에 유한차분법을 적용하는 방법이다. 따라서 기존의 CFD에 응용되던 많은 스킴들을 이용할 수 있으며, 특히 수학적, 물리적으로 의미가 있는 풍상차분법을 사용할 수 있다. 본 연구에서는 충돌적분모델로 Maxwell 분포함수를 이용한 BGK(Bhatnagar-Gross-Krook) 방정식, 유한차분법으로는 Yang[8]과 Ko[9]에 의해서 수정된 Harten-Yee의 유량차분법(Flux Difference Splitting) 계열인 MFA(Modified Flux Approach)형식의 3차 정확도를 갖는 ENO(Essentially Non-Oscillatory) 스킴을 사용하였다. 먼저 NACA0012에 적용하여 Allegre 등에 의해서 수행된 실험치와 검증을 하였으며, 실린더에는 비교적 연속체영역이라 생각할 수 있는 Kn=0.025, 그리고 천이영역인 Kn=0.3, 1.0에 대해서 자유류의 마하수가 5.48인 경우를 적용하였으며, 결과를 Vogenitz 등의 DSMC 결과와 비교하였다[4].

2. 지배방정식

외력이 존재하지 않을 때 단원자분자에 대한 Boltzmann 방정식의 kinetic model을 살펴보자.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla_{\bar{x}} f = \nu(f^N - f) \quad (2.1)$$

여기서 $f(\bar{x}, \bar{v}, t)$ 는 속도분포함수, \bar{v} 는 분자속도, ν 는 충돌주파수(collision frequency), f^N 은 선택된 모델에 따른 적당한 속도분포함수이다. BGK model에서는 Maxwellian 속도분포함수가 사용된다. 충돌주파수는 탄성충돌(elastic collision)을 가정하면,

$$\nu = \frac{nkTPr}{\mu} \quad (2.2)$$

이 된다. 여기서 n 은 수밀도(number density), Pr은 Prandtl Number, k 는 Boltzmann 상수이고, 점성계수는 Power-law를 따른다고 가정한다. 즉,

$$\frac{\mu}{\mu_{\infty}} = \left(\frac{T}{T_{\infty}} \right)^x \quad (2.3)$$

계산시간과 기억용량을 줄이기 위해서 속도분포함수 대신에 reduced distribution function을 도입한다[6,7].

$$\begin{aligned} r(x, y, t, v_x, v_y) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y, t, \bar{v}) dv_z \\ s(x, y, t, v_x, v_y) &= \int_{-\infty}^{\infty} v_z^2 f(x, y, t, \bar{v}) dv_z \end{aligned} \quad (2.4)$$

식(2.3), (2.4)을 이용하여 식(2.1)에 v_z 로 definite integral을 취하고 물리좌표계 (t, x, y) 에서 산좌표계 (t, ξ, η) 로 변환하면 다음과 같은 보존형 식으로 바뀌게 된다[6].

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \xi} + \frac{\partial G}{\partial \eta} = H \quad (2.5)$$

$$Q = J \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}, \quad F = J \begin{bmatrix} Ur \\ Us \end{bmatrix}, \quad G = J \begin{bmatrix} Vr \\ Vs \end{bmatrix}, \quad H = J \begin{bmatrix} \nu(R^N - r) \\ \nu(S^N - s) \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

여기서

$$R^N = \frac{n}{\pi T} \exp \left[-\frac{c_x^2 + c_y^2}{T} \right] \quad (2.7)$$

$$S^N = \frac{n}{2\pi} \exp\left[-\frac{c_x^2 + c_y^2}{T}\right] \quad (2.8)$$

$$v = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} n T^{(1-x)} \frac{\text{Pr}}{Kn} \quad (2.9)$$

이며 U, V 는 contravariant 속도성분이다. 위의 좌표변환에서 Jacobian 과 metric 은 다음과 같이 정의된다.

$$J = x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta$$

$$\xi_x = \frac{y_\eta}{J}, \quad \xi_y = -\frac{x_\eta}{J}, \quad \eta_x = -\frac{y_\xi}{J}, \quad \eta_y = \frac{x_\xi}{J} \quad (2.10)$$

식(2.5)에서 r, s 의 속도좌표에 대한 종속성을 제거하여 쌍곡선형 편미분방정식으로 만들기 위해 불연속좌표법(discrete-ordinate method)을 적용한다[6,7]. 즉, 연속적인 속도좌표에 대한 함수인 속도분포함수를 특정한 속도에 대한 point function 으로 고려하여 준다. 실제적으로 관심 있는 변수는 속도분포함수가 아니라 유체의 밀도, 속도, 온도, 압력과 같은 거시적 유동변수 이므로, 식(2.5)에서 각각의 불연속 속도좌표 (v_x, v_y) 에 대한 r, s 를 구한 후 적절한 수치적분(quadrature)을 통하여 거시적 유동변수들을 구해야 한다. 거시적 유동변수와 r, s 의 관계는 다음과 같다.

$$n(\bar{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} r \, dv_x \, dv_y$$

$$\bar{u}(\bar{x}, t) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} r \bar{u} \, dv_x \, dv_y \quad (2.11)$$

$$3T(\bar{x}, t) = \frac{2}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} s \, dv_x \, dv_y + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} r(c_x^2 + c_y^2) \, dv_x \, dv_y$$

$$p(\bar{x}, t) = nT$$

만약 정해진 시간, 공간에 대해서 모든 r, s 의 값을 알게 되면 식(2.18)에 수치적분(quadrature)을 이용하여 거시적 유동변수를 알아낼 수 있게 된다.

3. 수치해법

식(2.5)로부터 유량 Jacobian 행렬은 다음과 같다.

$$A = \frac{\partial F}{\partial Q} = \begin{bmatrix} U & 0 \\ 0 & U \end{bmatrix}$$

$$B = \frac{\partial G}{\partial Q} = \begin{bmatrix} V & 0 \\ 0 & V \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

이 행렬의 특성값(eigenvalue)는 다음과 같다.

$$\lambda_1^A = \lambda_2^A = U$$

$$\lambda_1^B = \lambda_2^B = V \quad (3.2)$$

우특성 벡터 행렬을 R 이라 하면 특성 벡터(characteristic vector)는

$$\delta W = R^{-1} \delta Q = \begin{bmatrix} \delta w^1 \\ \delta w^2 \end{bmatrix} = J \begin{bmatrix} \delta r \\ \delta s \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Harten-Yee 의 유량차분분할 계열의 Upwind-ENO 기법을 적용하면, 경계면에서의 수치적 유량항(numerical flux term)은 다음과 같이 표현된다.

$$F_{i+1/2,J}^N = \frac{1}{2} (F_{i,J} + F_{i+1,J} + R_{i+1/2,J} \cdot \Phi_{i+1/2,J}) \quad (3.4)$$

여기서 Φ 은 정확도와 풍상차분 특성을 조절한다.

$$\Phi_{i+1/2,J} = [\phi^1_{i+1/2,J} \quad \phi^2_{i+1/2,J}]^T \quad (3.5)$$

위첨자 l 은 각각의 특성파를 표현하며 다음과 같다.

$$\phi^l_{i+1/2} = g^l_{i+1}(\lambda_l^A_{i+1/2}) + g^l_i(\lambda_l^A_{i+1/2}) - \text{sign}(\lambda_l^A_{i+1/2}) \left\{ \lambda_l^A_{i+1/2} \Delta_x w^l_i + g^l_{i+1}(\lambda_l^A_{i+1/2}) + g^l_i(\lambda_l^A_{i+1/2}) \right\} \quad (3.6)$$

본 연구에서는 3 차 정확도 ENO 스킴을 사용하였다. 3 차 정확도에 대한 g^l 은 참고문헌 [9] 에 설명되어 있다.

시간적분에는 Strang Type 의 작용자 분리 방법을 사용한다. 이는 다차원 확장 방법에 널리 사용된다.

$$\begin{aligned} L_\xi(\Delta t) &: \frac{\partial Q^n}{\partial t} + \frac{\partial F^n}{\partial \xi} = 0 \\ L_\eta(\Delta t) &: \frac{\partial Q^*}{\partial t} + \frac{\partial G^*}{\partial \eta} = 0 \\ L_t(\Delta t) &: \frac{\partial Q^{**}}{\partial t} = -H^{**} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Aliasing 에러를 피하기 위하여 다음과 같이 교번으로 사용한다.

$$Q^{n+2} = L_t(\Delta t) L_\xi(\Delta t) L_\eta(\Delta t) L_\eta(\Delta t) L_\xi(\Delta t) L_t(\Delta t) Q^n \quad (3.8)$$

이 때 Δt 는 CFL 조건을 만족하여야 하며, 또한 분자간 평균충돌시간(mean collision time)보다 작게 해주어야 한다.

4. 결과 및 고찰

4.1 O-type NACA0012 에어포일

Solver 의 검증을 위하여 실험결과가 있는 NACA0012 에어포일 문제를 풀어 보았다. 공간 좌표에 사용한 격자계는 O-type 의 격자계로서 125×45 개의 격자점을 구성하고 있다. 속도좌표에는 11×11 의 격자계를 이용하였으며 수치적분 방법으로는 Gauss-Hermite quadrature[12,13] 를 이용하였다. 벽면에서의 온도는 유동의 전온도(total temperature)로 일정하게 유지되며, 자유류의 마하수는 2.0 이고 Knudsen Number 는 0.03 이다. 이 정도의 Kn 은 천이영역으로 간주될 수 있지만 전체적으로 연속체영역의 특징도 가지고 있다.

Fig. 1 은 받음각이 없을 때의 결과이다. 계산에 이용된 매개변수들은 단원자 분자에 대한 데이터를 이용하였다. 즉 비열비 $\gamma=1.66667$, Prandtl Number=0.66667, Power-law 의 계수는 0.72 를 사용하였다. Fig. 1(a)는 등밀도 선도로서 Allegre 등에 의해서 1985 년에 수행된 공기에 대한 실험 결과이다[7]. Fig. 1(b)는 FDDO 에 의한 등밀도 선도 계산 결과이다. 에어포일의 윗면과 아랫면에 걸쳐서 풀린 결과지만 Fig. 1(a)와 비교의 용이성을 위해서 윗면의 결과만 나타내었다. 단원자 분자에 대한 매개변수를 이용하였음에도 불구하고 결과가 실험치와 잘 일

치하고 있다. 또한 연속체영역과 같이 에어포일의 전연(leading edge)에서 bow shock 이 형성되어 있음을 볼 수 있다.

Fig. 2 는 같은 유동조건에서 10 도의 받음각이 있을 때의 결과이다. 실험치인 Fig. 2(a)와 비교해서 역시 결과가 잘 일치함을 알 수 있다.

4.2 초음속 실린더 문제

다양한 Knudsen Number 의 초음속 유동이 지나는 실린더 문제에 대해서 계산을 수행하였다. 비교적 연속체영역이라 생각할 수 있는 $Kn=0.025$, 그리고 천이영역인 $Kn=0.3, 1.0$ 에 대해서 자유류의 마하수가 5.48 인 경우의 결과를 Vogenitz 등의 DSMC 결과와 비교하였다[4]. 공간좌표에 사용된 격자는 41×41 이며, 수치적분 방법으로는 Extended Simpson's Rule 을 이용하였다. 이 문제에서와 같이 분자의 속도가 빠른 경우에는 Gauss-Hermite quadrature 를 이용할 경우 계산은 발산하였는데, 이것은 Gauss-Hermite quadrature 를 이용할 경우 분자의 속도가 빠를수록 적분에 이용되는 가중치(weighting factor)가 기하급수적으로 작아지기 때문이다. 따라서 실린더의 벽면에서 고속으로 튕겨 나온 분자들의 속도분포함수가 유입유동(inflow)의 속도분포함수에 영향을 못 미치게 되며, 결국 유입유동은 계속 가속되는 성분만 있게 되어 발산에 이르렀다. Extended Simpson's Rule 과 같은 Newton-Cotes Formula 방식의 수치적분에서는 적분구간이 무한대인 적분을 수행해야 하므로 속도좌표 격자의 갯수뿐 만 아니라 속도좌표의 구간도 정해주어야 한다. 이 때 물리적인 현상을 제대로 반영하지 못한 구간이 정해지면 Gauss-Hermite quadrature 와 같은 이유 때문에 계산은 발산하게 된다. 따라서 kinetic model 방정식의 계산에 있어서는 공간좌표의 격자 못지않게 속도좌표의 계산격자가 중요하게 된다. 이번 계산에 있어서는 속도좌표의 구간은 $-10 \sim 10$ 이고, 21×21 속도격자를 이용하였다. 에어포일과 마찬가지로 실린더 벽면의 온도는 자유류의 전온도로 고정하였다. 또한 계산에 이용된 매개변수들은 단원자 분자에 대한 데이터를 이용하였다.

Fig. 3 은 각각의 Kn 에 따른 밀도 Contour 를 나타내고 있다. Kn 가 0.025 일 때는 연속체영역의 유동과 같이 전면에 강한 bow shock 이 발생하였다. 충격파의 위치는 실린더 지름의 약 0.7 배 앞이다. Kn 이 0.3 일 때의 결과에서는 회박기체의 특성이 나타나고 있다. 충격파는 사라지고 밀도가 연속적인 구배를 갖고 있는 충격층(shock layer)이 형성되고 있음을 볼 수 있다. 전체적인 contour 의 모양은 충격파가 있을 때와 비슷하며, 실린더에 의해서 교란된 정보가 흡입유동(inflow)으로 전달되고 있다. Kn 이 1.0 일 때는 Kn 이 0.3 일 때와 비교하면 충격층의 두께가 더욱 두꺼워져 유동의 구배가 더욱 더 완만하게 원방으로 퍼져있음을 볼 수 있다.

Fig. 4 는 stagnation-line 에서의 밀도형상을 나타내며 Vogenitz 등에 의한 DSMC 결과와 비교를 하였다. Kn 가 0.025 인 경우를 살펴보면 충격파의 위치가 서로 다르며 DSMC 결과는 통계학적 변동(statistical fluctuation)이 있고, BGK Model 방정식의 계산 결과는 overshoot 이 있음을 알 수 있다. x 축이 분자의 평균자유경로로 스케일 되어 있는데 Kn 이 작은 경우에는 평균자유경로가 극히 작게 되므로 충격파의 위치가 조금만 차이가 나도 Fig. 4(a)와 같이 차이가 나게 된다. DSMC 결과의 통계학적 변동은 Kn 이 작을 경우 계산시간과 메모리의 제한 때문에 적은 양의 모사 입자를 사용할 수 밖에 없고, 이 때 필연적으로 나타나는 현상이다. Kn 가 0.3 과 1.0 일 때는 DSMC 결과와 비교적 잘 일치하고 있다.

5. 결론

Boltzmann 방정식의 kinetic model 인 BGK 방정식에 FDDO 를 이용하여 실린더 주위를 지나는 회박기체를 해석하였다. 이 방법은 기존의 CFD 스킴들을 이용할 수 있는 장점을 보여

준다. 이를 통하여 다음의 결과를 얻게 되었다.

1. Kn 이 작으면 격자가 작아져야 하는 DSMC 와 달리 BGK 방정식은 Kn 의 크기에 상관 없이 일률적으로 문제를 해결할 수 있으며, DSMC 에 비해서 적은 계산시간과 기억용량이 요구된다.
2. 그러나 Kn 이 커질수록 DSMC 는 격자가 커지고 모사입자수도 줄어들어 효율이 높아 지지만 BGK 방정식은 그렇지 않다. 따라서 희박기체에 대해서 서로 상호 보완적인 기능을 할 수 있다.
3. 단원자 분자에 대한 계산 결과가 공기에 대한 실험치와 비교적 잘 일치한다.
4. 압력, 밀도, 온도 등의 거시적 변수들은 수치적분을 통하여 속도분포함수로부터 구할 수 있다. 이 때 수치적분의 방법과 속도좌표의 격자, 그리고 격자수는 결과에 매우 큰 영향을 미치며, 문제에 따라서 적절한 방법을 선택해야 한다. 일반적으로 더 정확한 Gauss-Hermite quadrature 는 극음속 유동과 같이 분자의 속도가 빠른 경우에는 오히려 부정확한 결과를 주게 되거나 발산하게 된다. Newton-Cotes Formula 방식의 수치적분을 이용할 경우에도 속도좌표의 격자수와 구간을 물리적으로 타당하게 정해주어야 한다.

6. 참고문헌

- [1] W.G.Vincenti and C.H.Kruger,Jr, "Introduction to Physical Gas Dynamics", John Wiley and Sons
- [2] G.A.Bird, "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows", Clarendon Press
- [3] K.Nanbu, "Stochastic Solution Method of the Boltzmann Equation, II", Lecture Notes, KAIST
- [4] F.W.Vogenitz, G.A.Bird, J.E.Broadwell and H.Rungaldier, "Theoretical and Experimental Study of Rarefied Supersonic Flows about Several Simple Shapes", AIAA Journal, Vol.6, No.12
- [5] G.A.Bird, "The Structure of Rarefied Gas Flows past Simple Aerodynamic Shapes", Journal of Fluid Mechanics, Vol.36, Part.3
- [6] D.Q.Xu, H.Honma and T.Abe, "A Numerical Method for a Kinetic Equation and Its Application to Propagating Shock Waves", Computers & Fluids, Vol.19, No.3/4
- [7] J.Y.Yang and J.C.Huang, "High Resolution Schemes for Rarefied Gas Dynamics Using Kinetic Model Equations", AIAA Paper 95-1678
- [8] J.Y.Yang, "Third Order Nonoscillatory Schemes for the Euler Equations", AIAA Journal, Vol.29, No.10
- [9] 고덕권, "고해상도와 고차정확도를 갖는 선형 및 비선형 파동방정식의 수치해석기법 개발", 박사학위논문, 한국과학기술원, 1996
- [10] A.Harten, "High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws", Journal of Computational Physics, Vol.49, No.3
- [11] A.Harten, B.Enquist, S.Osher, and S.Chakravarthy, "Uniformly High Order Accurate Essentially Non-Oscillatory Schemes, III", Journal of Computational Physics, Vol.71, No.2
- [12] B.Shizgal, "A Gaussian Quadrature Procedure for Use in the Solution of Boltzmann Equation and Related Problems", Journal of Computational Physics, Vol.41
- [13] W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling and B.P.Flannery, "Numerical Recipes", Cambridge Univ. Press

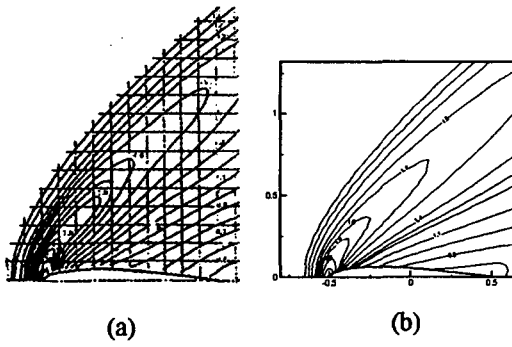


Fig. 1 NACA0012 밀도 Contour
 ($M = 2.0, Kn = 0.03$)
 (a) experiment, (b) computation

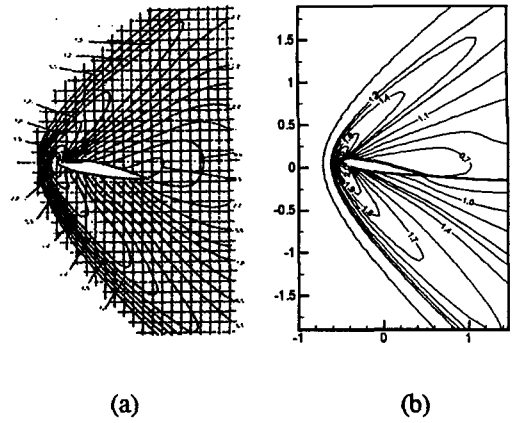


Fig. 2 NACA0012 밀도 Contour
 ($M = 2.0, Kn = 0.03, \alpha = 10^\circ$)
 (a) experiment, (b) computation

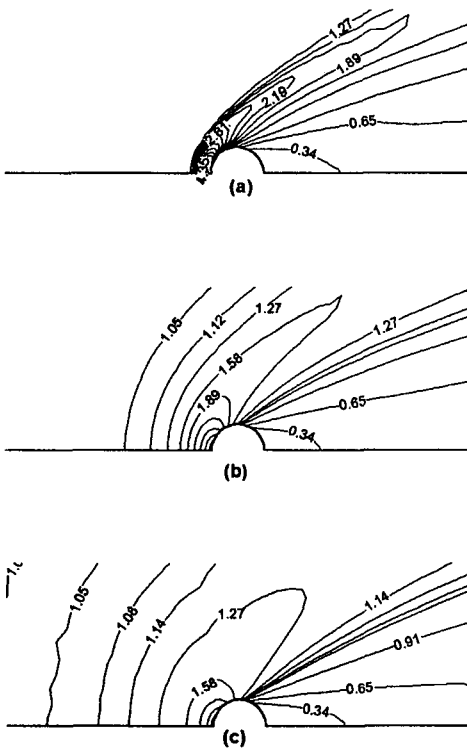


Fig. 3 실린더 주위의 유동 ($M_\infty = 5.48$)
 (a) $Kn=0.025$, (b) $Kn=0.3$, (c) $Kn=1.0$

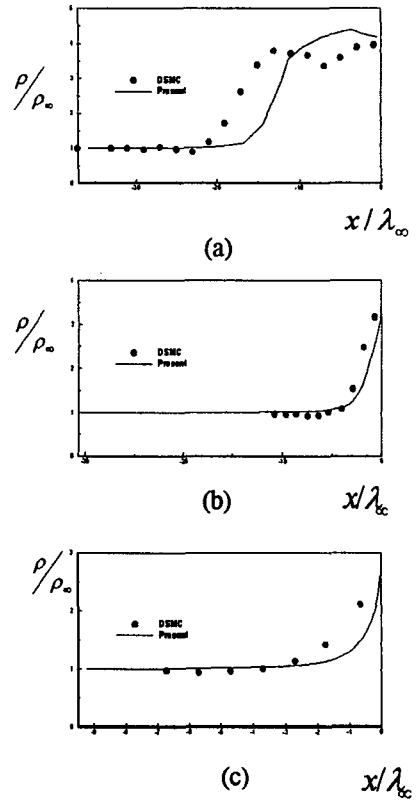


Fig. 4 Stagnation-line 에서의 밀도형상
 (a) $Kn=0.025$, (b) $Kn=0.3$, (c) $Kn=1.0$