

화학반응을 수반하는 극초음속 희박류 유동의 직접모사법 개발

정찬흥^{*1} · 윤성준^{*2}

A DSMC Technique for the Analysis of Chemical Reactions in Hypersonic Rarefied Flows

C. H. Chung and S. J. Yoon

A Direct simulation Monte-Carlo (DSMC) code is developed, which employs the Monte-Carlo statistical sampling technique to investigate hypersonic rarefied gas flows accompanying chemical reactions. The DSMC method is a numerical simulation technique for analyzing the Boltzmann equation by modeling a real gas flow using a representative set of molecules. Due to the limitations in computational requirements, the present method is applied to a flow around a simple two-dimensional object in exit velocity of 7.6 km/sec at an altitude of 90 km. For the calculation of chemical reactions an air model with five species (O₂, N₂, O, N, NO) and 19 chemical reactions is employed. The simulated result showed various rarefaction effects in the hypersonic flow with chemical reactions.

Key Words: 직접모사법(Direct Simulation Monte-Carlo Method), 희박류(Rarefied Gas Flow), 극초음속흐름(Hypersonic Flow), 화학반응(Chemical Reaction), 비평형(non-equilibrium)

1. 서 론

초고속 항공기 및 재활용 우주왕복선 등과 같이 높은 고도에서 극초음속으로 운항하는 비행체의 등장에 따라 열비평형 (thermal nonequilibrium) 및 화학비평형 (chemical nonequilibrium) 상태의 극초음속 희박기체의 유동을 효율적이고 정확하게 분석할 수 있는 해석기법 개발의 필요성이 증대되고 있다.

높은 고도에서 운항하는 비행체 주위의 기체 밀도가 매우 낮은 유동장을 해석하기 위하여는 Reynolds 수가 매우 작아지는 극초음속 흐름에

서 일반적으로 유동장의 구조를 지배하는 중요한 현상인 충격파와 점성효과에 의한 상호작용 외에도, 표면에서의 미끄러짐 현상, 열비평형, 화학비평형 등의 희박기체 효과를 고려하여야만 한다.

재돌입(reentry) 우주선의 경우 비행체 선두 부근의 기체 온도가 10,000~20,000K를 초과하여 공기 분자들의 열해리(thermal dissociation), 재결합(recombination) 및 이온화 등으로 공기의 화학적 성분이 변하게 된다. 또한 기체의 밀도가 매우 낮아 화학적으로 평형상태에 도달하지 못하고 화학비평형 상태에 놓여있게 되며, 기체의 각 에너지 모드에서의 에너지 분포가 서로 달라짐에 따라 병진(translational)온도, 회전(rotational)온도, 진동(vibrational)온도, 이온 및

^{*1} 정회원, 대구대학교 화학공학과

^{*2} 정회원, 국방과학연구소

전자온도 등이 서로 다른 열비평형 상태가 존재한다.

이러한 극초음속 희박기체의 유동을 Navier-Stokes 방정식을 이용하여 해석하기 위하여 화학비평형 기체모델 및 다중온도모델(multiple temperature model) 등을 도입하여 수치해석의 정확도를 어느 정도는 높일 수 있으나, 연속체 이론(continuum theory)을 기초로 한 Navier-Stokes 방정식이 희박기체 영역에서는 성립되지 않는다는 내재적 한계는 극복될 수가 없다.

본 연구의 목적은 Monte Carlo 표본추출 기법으로 실제 기체유동을 모사하여 Boltzmann 방정식을 해석하는, 희박기체 유동장 분석에 가장 유효한 방법의 하나인 직접모사법(Direct Simulation Monte Carlo Method, DSMC)을 [1] 이용하여 화학반응을 수반한 극초음속 희박류를 해석할 수 있는 코드를 개발하고, 이를 재돌입(reentry) 환경의 간단한 저밀도 유장에 적용하고 수치해석하여 이 때에 일어나는 물리적 현상들을 예측하고 이해하는데 있다.

화학반응을 수반한 극초음속 희박류의 해석은 지구에서의 초고속 비행체 뿐만 아니라 우주선의 행성 대기권 부근에서의 거동을 예측하는데도 매우 중요하다. 극초음속 희박류에 대한 실험 및 수치해석은 미항공우주국 Langley 연구소의 Moss 등에 의하여 활발하게 수행되고 있다 [2].

2. 직접모사법

희박류 환경에서의 유장을 분석하기 위하여는 Boltzmann식이 주로 이용되고 있다. Boltzmann식은 기체의 흐름을 미시적 관점에서 입자분포함수를 이용하여 기술한 미적분방정식으로 해석적 풀이는 극히 단순한 문제에만 가능하다. 실용적인 문제에 대한 Boltzmann 방정식의 해석은 난수를 사용하는 표본추출기법인 Monte Carlo 방법을 이용하여 실제기체유동을 직접모사하는 직접모사법[1]이 일반적으로 이용된다.

직접모사법은 1960년대 초반 호주의 Bird [1]에 의하여 개발되었으며, 이 후 미국과 소련의 우주계획에서의 필요성으로 인하여 꾸준한 발전을 해왔으며, 컴퓨터산업의 발달로 인한 전산속도와 용량의 증가에 힘입어, 막대한 전산처리능

력을 요구된다는 단점이 점차 개선됨에 따라서 지난 20여 년간에 비약적인 발전을 한 결과 최근에는 항공우주분야의 다양한 실용적인 문제에 이용되고 있다.

3. 화학반응모델

직접모사법을 이용한 유동해석에서 분자의 충돌시 총 충돌에너지 E_c 가 화학반응이 일어나기 위한 활성화에너지(activation energy) E_a 보다 크게되면 화학반응에 대한 모델링이 필요하게 된다. 특히 극초음속 유동의 경우에는 분자가 갖고있는 에너지가 커서 화학반응이 겹치게 되는 경우가 많다. 미시적 관점에서 물리적으로 정확하고 바람직한 화학반응모델링은 에너지상태와 충격변수(impact parameter)에 따른 미분반응충돌단면적표(differential reaction cross section table)를 구성하여 각각의 충돌에 대하여 이 표에서 해당되는 화학반응이 일어날 확률을 구하는 방법이나, 이는 방대한 실험 데이터와 양자역학적 계산 및 전산용량을 요구하며, 가까운 미래에는 실현이 불가능하다.

현재 많이 사용되고 있는 화학반응 모델은 충돌이론과 현상학적 모델을 근간으로 연속체 가정하의 화학반응속도를 재현할 수 있도록 구성되어 있으며, 대부분 고전적인 충돌이론에 근거하고 있다. 즉, 일반적인 2분자반응 $A+B \leftrightarrow C+D$ 에서 속도상수는 Arrhenius 방정식형태

$$k(T) = \Lambda T^\eta e^{-E_a/kT} \quad (1)$$

로 표시된다. 가변강구 모델의 경우 반응단면적(reactive cross section) σ_R 과 탄성충돌단면적(elastic cross section) σ_T 가 아래의 관계식을 만족하면

$$\frac{\sigma_R}{\sigma_T} = \frac{1/2\pi^{1/2}\epsilon\Lambda T_{ref}^\eta}{\sigma_{ref}(kT_{ref})^{\eta-1+\omega_{AB}}} \times \frac{\Gamma(\bar{\zeta}+5/2-\omega_{AB})}{\Gamma(\bar{\zeta}+5/2-\omega_{AB})} \left(\frac{m_r}{2kT_{ref}} \right) \times \frac{(E_c - E_a)^{\eta+\bar{\zeta}+1/2}}{E_c^{\bar{\zeta}+3/2-\omega_{AB}}} \quad (2)$$

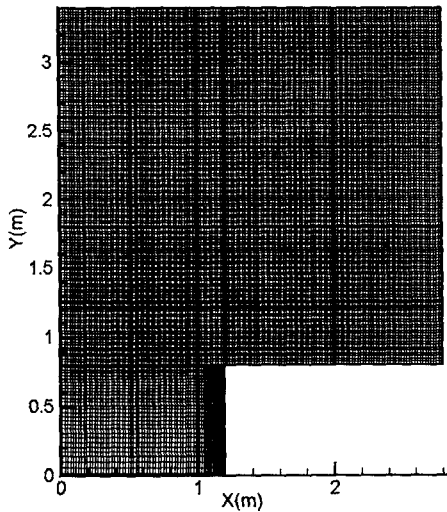


Fig. 1 Cell structure.

일반적인 2분자반응에서 위의 속도상수가 만족되는 것을 미시적 관점에서의 충돌속도 및 충돌 에너지분포를 이용하여 증명할 수 있다 [1]. 여기서 Λ 와 η 는 상수, E_a 는 활성화에너지 (activation energy), ε 은 대칭인자(symmetry factor), k 는 Boltzmann 상수, $\bar{\zeta}$ 는 평균 내부 자유도(internal degrees of freedom), ω_{AB} 는 충돌분자의 평균 가변강구모델지수 (VHS exponent), E_c 는 충돌에너지이다. 적절한 분자모델과 충돌채취기법을 이용하여 선택된 충돌 쌍 (collision pair) AB의 충돌에너지 E_c 가 활성화 에너지 E_a 보다 큰 경우 일어나는 화학반응 알고리즘의 개요는 다음과 같다.

- (a) 식 (2)에 의하여 화학반응이 일어날 확률 (steric factor) $P_r = \sigma_R/\sigma_T$ 을 구한다.
- (b) 발생된 난수가 P_r 보다 작은 경우 화학반응이 일어난다. 이 경우 충돌에너지 중에서 반응에 필요한 에너지를 가감한 후 나머지 에너지를 적당한 방법으로 병진 및 내부에너지 모드에 분배한다. 분자 A와 B의 표식을 생성분자 C와 D로 바꾼다. 해리 반응의 경우 해당 분자를 해리시킨다.
- (c) 발생된 난수가 P_r 보다 큰 경우 화학반응은 일어나지 않고, 에너지만 교환하는

Table 1. Molecular parameters

	ω_p	$T_{ref}(K)$	$d_p (\times 10^{10}m)$
O ₂	0.1660	1,000	3.4060
N ₂	0.2250	1,000	3.5760
O	0.2580	1,000	2.9530
N	0.2860	1,000	2.9370
NO	0.2410	1,000	3.4800

일반적인 충돌과 같게 처리한다.

4. 계산영역 및 수치해석

화학반응을 수반한 극초음속 희박류를 분석하기 위하여 높이 1.6m의 2차원 직사각형 물체 주위의 재돌입(reentry) 환경에서의 저밀도 유장을 수치해석 하였다. 계산영역은 14개의 세부영역(subregion)으로 분할되었으며, sampling을 하기위한 셀을 구성하기 위하여 각 세부영역은 다음과 같은 좌표변환을 사용하여 Fig.1과 같이 총 20,000개의 셀(cell)로 분할되었다.

$$\eta = \frac{1 - e^z}{1 - e^t} \quad (3)$$

여기서 z 는 x 및 y 방향의 무차원 거리이며, t 는 격자간격을 조절하기 위한 상수로, 직사각형 전면에서의 높은 밀도변화에 적용하기 위하여 사용되었다.

수치해석은 시스템공학연구소의 CRAY C90을 이용하여 수행되었다. 정상상태에서 평균 모사입자의 수는 약 60만개이고, 정상상태에 도달하기까지는 약 2.0 CPU 시간이 소요되었다. 정상상태에서의 계산속도는 약 $1.95 \mu \text{ sec}/\text{timestep} \cdot \text{molecule}$ 이다. Sampling은 매 5 timestep 마다 행하여졌고, sampling 횟수는 3,000으로 4.9 CPU 시간이 소요되었다.

5. 결과 및 검토

직접모사법을 수행하기 위해서는 분자모델, 충돌표본채취기법, 에너지교환모델 등 여러 모델과 기법들이 필요하다. 본 연구에서는 분자모델링으로 총충돌단면이 분자의 병진 에너지에

Table 2. Freestream condition

Velocity	7630 m/s
Density	3.42×10^{-6} kg/m ³
Temperature	188 K
Composition	20.9% O ₂ 78.7% N ₂ 0.4% O

비례하는 가변강구모델을 [3] 사용하였고, 충돌 표본채취기법으로 비시계수법을 [4] 사용하였다. 내부에너지 교환 모델로는 Larsen-Borgnakke 현상학적 모델을 [5] 사용하였다. 공기 조성 분자의 분자변수를 Table 1에 나타내었으며, 혼합 기체의 가변강구모델지수 (VHS exponent)는 0.2가 사용되었다.

본 연구에서 수행된 계산에 대한 유동조건인 고도 90 km에서의 자유류 조건을 Table 2에 나타내었다. 경계조건으로는 대칭면에 대한 specular 조건과 벽면에 대한 완전적용(full thermal accommodation) 산란반사(diffuse reflection) 조건을 주었고, 원방경계조건으로 자유흐름조건을 주었다. 하류 쪽 경계는 벽면에 근접한 극히 일부분을 제외하고는 극초음속 흐름이므로 외계에서 경계 내로 진입하는 입자를 무시할 수 있다고 가정하였다. 표면 온도는 350K로 일정하다고 가정하였으며, 표면에서의 화학반응은 고려하지 않았다. 공기모델은 5종(O₂, N₂, O, N, NO)의 구성분자 사이의 19가지 화학반응 모델을 [6] 채택하였으며 그 반응식을 Table 3에 나타내었다.

먼저 전반적인 유장의 구조와 희박류의 특성인 열비평형 상태를 살펴보기 위하여 등밀도 선도, 등압력 선도 및 등온 선도를 각각 Fig. 2, Fig. 3 및 Fig. 4에 나타내었다. Fig. 2에서 등밀도 선도는 밀도를 자유류에서의 밀도로 나눈 값에 밀이 10인 대수를 취한 값 $\log_{10}(\rho/\rho_0)$ 이다. 실제로 밀도는 정체점 부근에서 급격히 증가하므로 변화가 물체표면 근처의 극히 좁은 부분에서 일어나므로 대수를 취하지 않으면 등밀도 선이 물체표면 근처에만 그려진다. 밀도는 정체점에서 자유류에서의 값에 비하여 약 100배까지 증가한다. Fig. 3에서 압력은 충격파를 통

과하며 자유류 값의 약 900배로 급격히 증가하여 표면근처에 도달할 때 까지 거의 일정하게 유지된 후 표면에서의 냉각으로 약간 더 증가하였다. Fig. 4에는 병진온도, 회전온도, 진동온도 및 전체온도의 등온도 선도를 나타내었으며, 각 에너지 모드 사이에 상당한 열비평형이 존재함을 알 수 있다.

직접모사법으로 계산된 수치해석 결과의 정량적 분석을 위하여 중심축에서의 밀도, 속도, 물분율 및 온도변화를 Fig. 5~Fig. 8에 나타내었다. 그림들로부터 희박류에서의 충격파는 불연속적이 아니라 변화가 급격한 연속적인 현상이며, 정체점으로부터 약 0.7m에서 0.8m 사이에 존재함을 알 수 있다. 밀도의 경우 충격파를 통과하며 자유류 밀도의 약 10배정도 증가한 후 정체점 직전의 0.1m 사이에서 100배까지 증가하였다. 속도는 충격파를 통과하며 약 15%로 감소된 후 정체점에서 0이 될 때까지 점진적으로 감소하였다. Fig. 7은 중심선에서의 병진, 회전, 및 진동온도 사이의 열비평형 현상을 보여주고 있다, 충격파의 존재가 병진온도에 가장 먼저 영향을 미쳐 충격파 0.2m 전부터 병진온도가 증가하기 시작하여 약 29,500K 까지 증가한다. 병진온도는 충격파를 통과하며 약 19,000K까지 증가하고 진동온도는 병진온도보다 늦게 증가를 시작하여 약 14,000K 까지 증가하였다. 충격파를 통과하여 분자의 내부에너지가 증가하면서 화학반응이 일어나기 시작하여 주위에서 많은 반응에너지를 흡수하므로 온도는 급격히 감소한 후, 정체점까지의 밀도가 높은 지점에서는 세가지 온도 모두가 같은 열평형을 이룬다음 온도가 낮은 표면과의 접촉으로 더욱 온도가 낮아진다.

Fig. 8에는 중심선에서의 각 화학 종의 물분율을 나타내었다. 충격파 이전까지는 자유류 상태의 조성이나, 충격파를 통과하며 산소원자와 질소 원자로 해리된다. 산소의 경우는 거의 100%가 해리되며, 질소는 온도가 낮은 표면의 영향으로 정체점 부근에서 약간 증가한다. 해리된 산소원자와 질소원자의 재결합 반응으로 산화질소가 생성되며, 최고 물분율은 약 4%였다.

6. 결론

난수를 사용하는 표본추출기법인 Monte

Table 3. Chemical reaction model.

No.	Reaction (Energy in J)	Rate Coefficient $k(T) = aT^b \exp(-E_A/kT)$	
		aT^b	$-E_A/k$
1	$O_2 + N + 8.197 \times 10^{-19} \rightarrow 2O + N$	$5.993 \times 10^{-12} T^{-1}$	-59370
2	$O_2 + NO + 8.197 \times 10^{-19} \rightarrow 2O + NO$	$5.993 \times 10^{-12} T^{-1}$	-59370
3	$O_2 + N_2 + 8.197 \times 10^{-19} \rightarrow 2O + N_2$	$1.198 \times 10^{-11} T^{-1}$	-59370
4	$O_2 + O_2 + 8.197 \times 10^{-19} \rightarrow 2O + O_2$	$5.393 \times 10^{-11} T^{-1}$	-59370
5	$O_2 + O + 8.197 \times 10^{-19} \rightarrow 2O + O$	$1.498 \times 10^{-10} T^{-1}$	-59370
6	$N_2 + O + 1.561 \times 10^{-18} \rightarrow 2N + O$	$3.187 \times 10^{-13} T^{-0.5}$	-113000
7	$N_2 + O_2 + 1.561 \times 10^{-18} \rightarrow 2N + O_2$	$3.187 \times 10^{-13} T^{-0.5}$	-113000
8	$N_2 + NO + 1.561 \times 10^{-18} \rightarrow 2N + NO$	$3.187 \times 10^{-13} T^{-0.5}$	-113000
9	$N_2 + N_2 + 1.561 \times 10^{-18} \rightarrow 2N + N_2$	$7.968 \times 10^{-13} T^{-0.5}$	-113000
10	$N_2 + N + 1.561 \times 10^{-18} \rightarrow 2N + N$	$6.900 \times 10^{-8} T^{-1.5}$	-113000
11	$NO + N_2 + 1.043 \times 10^{-18} \rightarrow N + O + N_2$	$6.590 \times 10^{-10} T^{-1.5}$	-75550
12	$NO + O_2 + 1.043 \times 10^{-18} \rightarrow N + O + O_2$	$6.590 \times 10^{-10} T^{-1.5}$	-75550
13	$NO + NO + 1.043 \times 10^{-18} \rightarrow N + O + NO$	$1.318 \times 10^{-8} T^{-1.5}$	-75550
14	$NO + O + 1.043 \times 10^{-18} \rightarrow N + O + O$	$1.318 \times 10^{-8} T^{-1.5}$	-75550
15	$NO + N + 1.043 \times 10^{-18} \rightarrow N + O + N$	$1.318 \times 10^{-8} T^{-1.5}$	-75550
16	$NO + O + 2.719 \times 10^{-19} \rightarrow O_2 + N$	$5.279 \times 10^{-21} T^{1.0}$	-19700
17	$N_2 + O + 5.175 \times 10^{-19} \rightarrow NO + N$	1.120×10^{-16}	-37500
18	$O_2 + N + 2.719 \times 10^{-19} \rightarrow NO + O$	$1.598 \times 10^{-18} T^{0.5}$	-3600
19	$NO + N + 5.175 \times 10^{-19} \rightarrow N_2 + O$	2.490×10^{-17}	

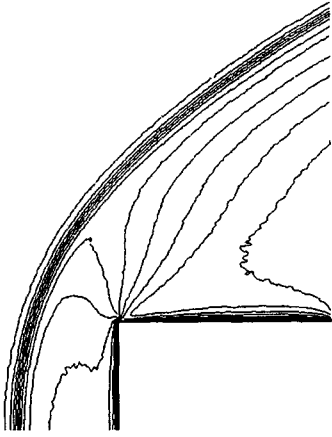


Fig. 2 Density contours.

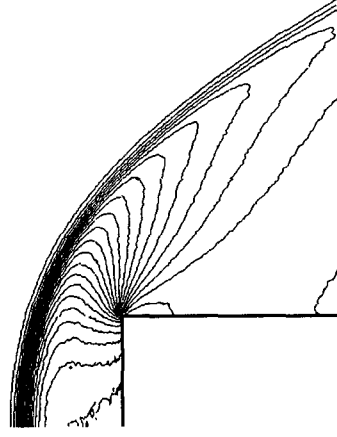
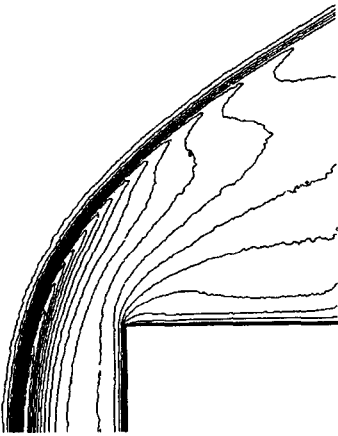
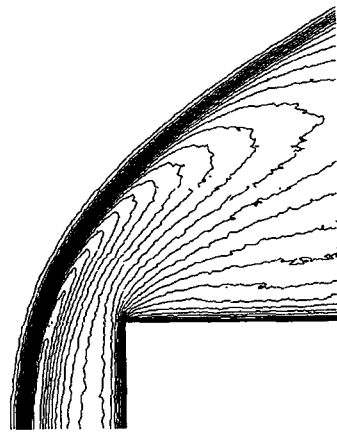


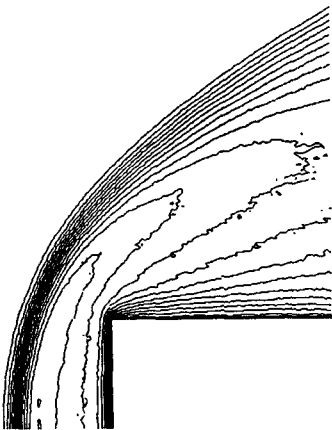
Fig. 3 Pressure contours.



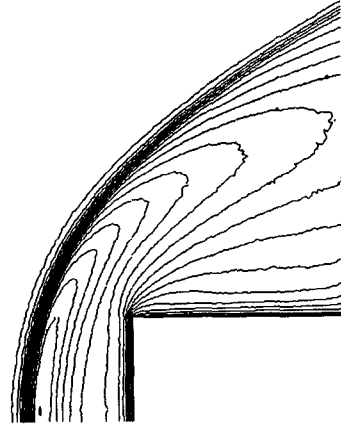
(a) Translational temperature.



(b) Rotational temperature.



(c) Vibrational temperature.



(d) Overall temperature.

Fig. 4 Temperature contours.

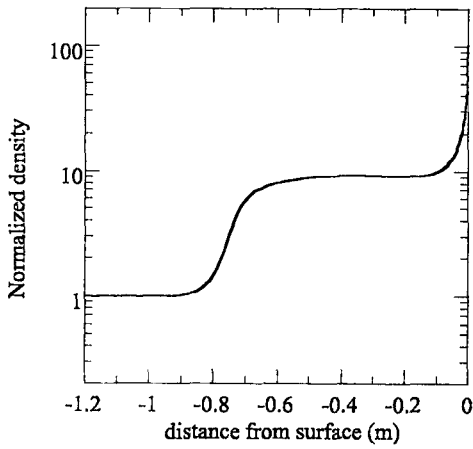


Fig. 5 Density variation along the centerline.

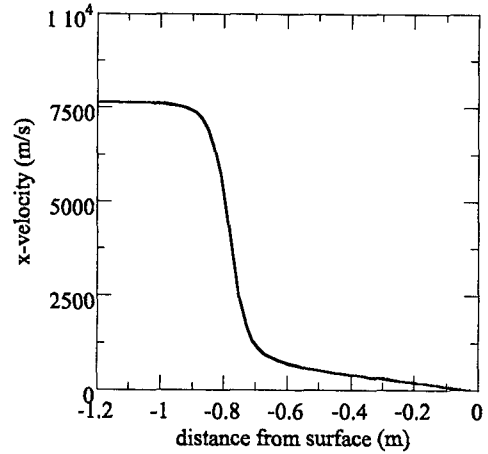


Fig. 6 X-velocity variation along the centerline.

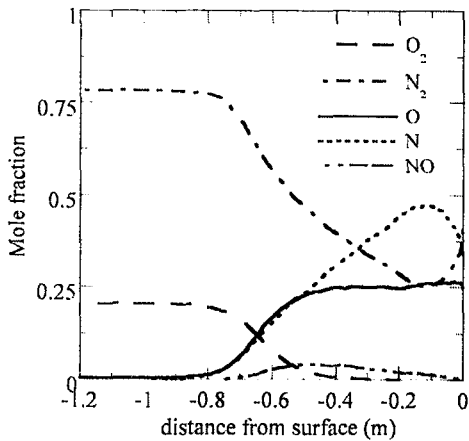


Fig. 7 Variation of mole fractions along the centerline.

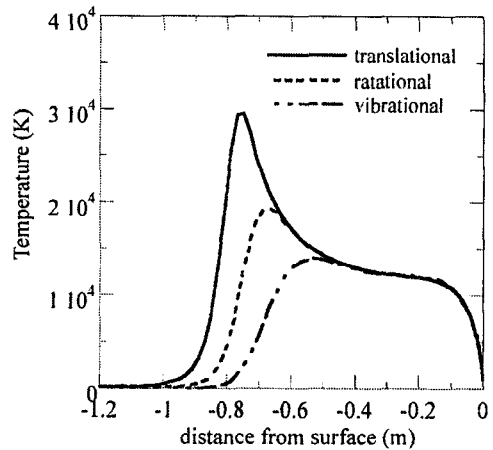


Fig. 8 Temperature variations along the centerline.

Carlo방법으로 실제기체유동을 모사하여 Boltzmann방정식을 해석하는 직접모사법을 이용하여 화학반응을 수반한 극초음속 희박류를 분석할 수 있는 코드를 개발하였다.

전산시간과 용량의 제약으로 고도 90km에서 7.6km/s로 지구궤도에 재진입하는 단순 2차원 물체주위의 유장을 해석하였으며, 희박류충격파의 특징인 열비평형 효과를 잘 나타내었다. 실제 기체의 경우를 더욱 정확하게 수치해석하기 위하여는 이온화와 복사(radiation)에 의한 에너지의 변환도 고려하여야 하며, 정확한 화학반응모델에 대한 연구도 이루어져야 할 것이다.

후 기

본 연구는 '98년도 국방과학연구소의 기초연구비 지원 "저밀도 공기역학 해석 기법 연구" (과제번호 ADD-98-5-5)에 의한 결과의 일부이며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] Bird, G. A., Molecular Gas Dynamics and The Direct Simulation of Gas Flows, Oxford University Press, London, 1994.

- [2] Moss, J. N., "Rarefied Hypersonic Flows: Simulation Experiment, and Application," Rarefied Gas Dynamics, Proceedings of the 19th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 1995, Vol. 2, pp. 1123-1132.
- [3] Bird, G. A., "Monte Carlo Simulation in an Engineering Context," Rarefied Gas Dynamics, AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 74, 1981, pp. 239-255
- [4] Bird, G. A., "Perception of Numerical Methods in Rarefied Gasdynamics," Rarefied Gas Dynamics, AIAA Progress in Aeronautics and Astronautics, Vol. 118, 1989, pp. 211-226
- [5] Borgnakke, C. and Larsen, P. S., "Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture," Journal of Computational Physics, Vol. 18, 1975, pp. 405-420
- [6] Moss, J. N., Bird, G. A., and Dogra, V.K., "Nonequilibrium Thermal Radiation for an Aeroassisted Flight Experiment Vehicle," AIAA Paper 88-0081, January 1988.