論文

극초음속 공기반응의 수치해석적 특성과 부분 내재적 적분법 적용

김성룡*, 옥호남*, 라승호*, 김인선*

Numerical Characteristics of Hypersonic Air Chemistry and Application of Partially Implicit Time Integration Method

Seong-Lyong Kim*, Honam Ok*, Seung-Ho Ra* and Insun Kim*

ABSTRACT

Numerical characteristics of air chemistry associated with hypersonic flows are described and are compared with those of hydrogen oxygen combustion, applying the partially implicit time integration method to air chemistry. This paper reveals that the time integration of air chemistry needs a chemical Jacobian for stable calculations. However the positive real eigenvalues in air chemistry are relatively smaller than those of hydrogen combustion, and the numerical integration is less sensitive than that with combustion. It is also found that the application of the partially implicit method reduces the computing time without numerical instabilities.

초 록

본 논문은 극초음속 유동과 공력가열 해석에서 나타나는 공기 반응의 수치해석적 특성을 다루고 공기반응을 효율적으로 해석하는 부분 내재적 적분법을 공기반응에 적용하였다. 안정적 계산을 위해 화학반응 자코비안이 필수적임을 밝혔으며 자코비안의 양의 실수 특성치로 인한 수치기법의 경직성은 일반적인 연소반응에 비하여 미약하였다. 공기반응에서 부분 내재적 적분법은 화학종 순서의 종속성이 없었으며 완전 내재적 적분법과 동일한 수렴율과 계산 결과를 보였다. 극초음속 유동해석에 부분 내재적 적분법을 적용하면 전체 연산시간이 감소되었다.

Key Words : Partial Implicit Method(부분 내재법), Hypersonic Flow(극초음속유동) Air Chemistry(공기화학반응)

1. 서 론

극초음속 비행체의 공력가열을 계산하기 위해서는 고온의 공기반응을 해석하여야 한다. 공기반응은 많은 연구자들의 노력으로 물리적 특성이 밝혀져 왔으며 전산유체역학으로 계산할 수 있다 [1]. 그러나 물리적 특성과 달리 공기반응의 수치해석에서 나타나는 고유의 특성은 무시되거나 밝

혀지지 않은 면들이 있다. 본 연구의 목적은 공기반응의 특성을 수소 연소 반응과 비교하여, 공기반응과 공기반응 수치해석의 특성을 분석하고 수치기법의 안정성과 효율성을 제고하려는 데 있다.

일반적으로 화학반응을 해석하는 수치기법은 계산시간간격을 극복하기 위하여 내재적 시간 적분법을 사용한다. 그러나 내재적 시간적분법은 자코비안 행렬을 이용해야하기 때문에 연산시간이 증가한다. 연산시간의 감소를 위해 Eberhardt와 Imlay[2]나 Aro와 Rodrigue[3]은 각각 극초음속 유동이나 대기화학반응 등의 분야에서 새로운

† 2003년 2월 6일 접수 ~ 2003년 5월 7일 심사완료

* 정회원, 한국항공우주연구원

연락처, E-mail : saintl@kari.re.kr

대전시 유성구 어은동 45번지

기법을 선보였다. 부분 내재적 적분법[4]은 이런 노력들의 일환으로 연소반응 초기에 나타나는 수치기법의 불안정성을 감쇄시키고 동시에 연산시간의 감소를 꾀하는 방법이다.

부분 내재적 적분법은 화학 반응항 계산의 내재적 시간 적분법에서 각 반응항의 종속변수의 시간단계를 순차적으로 적용하는 방법으로 연산시간의 많은 부분을 차지하는 화학반응 자코비안을 아래삼각행렬로 유도하여 연산시간을 감소하고자 고안된 방법이다.

부분 내재적 적분법은 대각화 기법 등의 한계를 극복할 수 있고 연소반응의 계산초기에 자주 나타나는 수치기법의 발산과 같은 불안정성을 억제할 수 있으며 연소반응에 적용되었다. 연소반응과 달리 공기 화학반응은 흡열반응이고 화학종의 변화량이 적기 때문에 부분 내재적 적분법이 쉽게 적용될 수 있으며 보다 큰 효과를 거둘 수 있을 것으로 예상된다.

II. 공기반응의 부분 내재적 적분법

2.1 무차원 정적반응 지배방정식

공기 반응의 화학적 특성을 파악하고자 한다면 직접 유동방정식과 결합하여 해석하는 것보다 화학반응에 관계되는 부분만을 따로 분리하여 계산하는 것이 훨씬 간단하면서도 효과적이다. 이러한 방법으로 많이 적용되는 것이 무차원 정적반응이다. 정적반응은 일정한 체적을 갖는 용기에 임의의 온도, 압력, 혼합기 상태의 혼합기의 반응 진행을 살펴보는 가상의 반응으로 밀도와 내부 에너지는 보존된다. 유동을 고려하지 않으므로 화학반응과 화학반응 수치기법의 특성을 쉽게 살펴볼 수 있다. 지배방정식은 화학종 방정식, 에너지 방정식, 진동에너지 방정식으로 구성된다. 화학종 방정식은 화학반응에 의한 생성 소멸항 ω_i 로 표현된다.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho_i}{\rho e_{v,i}} \right) = \left(\frac{\omega_i}{\omega_{v,i}} \right)$$

$$\dot{\omega}_i = W_i \sum_{r=1}^{NS} (\nu_{ri}'' - \nu_{ri}') \left\{ k_{f,r} \prod_{j=1}^{NS} C_j^{\nu_{rj}'} - k_{b,r} \prod_{j=1}^{NS} C_j^{\nu_{rj}''} \right\}$$

ρ_i 는 i 번째 화학종의 질량이고 $e_{v,i}$ 는 i 번째 화학종의 진동에너지를 의미한다. k 는 반응계수이고 W_i 는 분자량, C_j 는 화학종의 몰율(concentration)로서 ρ_j/W_j 로 정의된다. ν_{rj} 는 반응상수(stoichiometric constant)이다. 일반적인 반응 모델의 경우 반응상수는 0,1,2 중 하나에 해당한다.

반응계수 k_r 는 아레니우스(Arrhenius)방정식으로 표현된다.

$$k = CT_a^n \exp(-T_{dk}/T_a)$$

C 는 반응율 상수(frequency factor)이고 n 은 반응율 온도지수, T_{dk} 는 활성화 온도(activation temp.)이다. 반응온도 T_a 는 연소와 같은 일반적인 화학 반응에서 병진 온도와 동일하다. 그러나 극초음속 유동에서 병진온도와 반응온도는 다르게 표현하고 반응온도를 병진온도와 진동에너지온도와의 평균온도를 취하는 방법을 택한다.

$$T_a = T_{vi}^q T^{q-1} \quad (0 < q < 1)$$

진동온도는 진동에너지가 나타나는 화학종 개수만큼 있기 때문에 다중온도 모델이 되지만, 계산의 편의성을 위해 모든 진동에너지 온도가 같다는 2-온도 모델이 종종 사용된다.

이원자 분자의 진동에너지는 진동-병진에너지 상호작용에 의한 에너지 전달과 진동-해리에 의한 에너지 전달 두 항의 합으로 표현된다. 진동에너지의 생성항은 다음과 같이 유도된다.

$$\omega_{v,i} = \frac{d}{dt}(\rho_i e_{v,i}) = e_{v,i} \omega_i + \rho_i \frac{de_{v,i}}{dt}$$

$$= e_{v,i} \omega_i + \rho_i \frac{e_{v,i}^{eq}(T) - e_{v,i}(T_{v,i})}{\tau_{v,i}}$$

i 번째 화학종의 진동 에너지는 다음과 같다.

$$e_{v,i}(T_{v,i}) = R_i \left(\frac{\theta_i}{\exp(\theta_i/T_{v,i}) - 1} \right)$$

진동이완시간 $\tau_{v,i}$ 는 다음 식을 적용한다.

$$\tau_{v,i} = \frac{\exp(AT^{-1/3} - B)}{p_i}$$

A, B, θ_i 는 참고문헌[5]에서 찾아볼 수 있다.

정적반응에서 에너지의 입출입이 없기 때문에 진동에너지를 포함한 총에너지 e_{total} 는 반응의 전후를 통하여 보존된다.

$$\frac{de_{total}}{dt} = 0$$

공기를 구성하는 질소(N_2)와 산소(O_2) 화학종으로 구성되는데, 온도의 상승에 따라 두 분자의 상호 화학 반응을 통해 여러 화학종이 생성 소멸된다. 이 때 나타나는 화학종은 N_2 , O_2 , N , O , NO , NO_2 , N_2O , 등 여러 가지가 있지만, 극초음속 유동에 의미가 있는 화학종은 N_2 , O_2 , N , O , NO 의 다섯 가지이다. 나머지 화학종은 화학 반응 특성시

간이 너무 짧거나 늦어 공해물질 생성에는 중요하지만 극초음속 유동의 물리적 성질에 미치는 영향은 극히 미미하다. 만약 온도가 9,000K 정도까지 상승하면 각 분자가 여기상태로 변하여 5화학종과 이의 여기상태 그리고 전자(e-)를 포함한 11개 화학종(N₂, O₂, N, O, NO, N₂⁺, O₂⁺, N⁺, O⁺, NO⁺, e-)을 고려하여야 한다. 그러나 실제 문제에 있어서 대기권 재돌입 비행체를 제외하면 11개 화학종을 모두 고려하는 경우는 거의 없기 때문에 5개 화학종 모델로도 충분하다.

현재까지 많은 5화학종 반응 모델이 발표되었지만 비교적 최근에 사용되고 있는 모델은 다음과 같다.

5개의 화학종 중 두개의 화학종은 질량보존의 법칙과 연속방정식을 통해 나중에 구해지므로 3개의 화학종만을 고려하는데, 일반적으로 O, N, NO의 3 화학종만이 직접적인 계산 대상이 된다. 원칙적으로 5개의 화학종 중 임의의 3개만을 택해도 아무런 차이가 없어야 한다. 그러나 나중에 구해지는 2개의 화학종에는 각 방정식의 오차가 모두 더해질 수 있으므로 약간의 오차가 있더라도 해의 정확성에 큰 문제를 야기하지 않는, 즉 화학반응 전 과정을 통해 가장 많은 성분을 차지하는 O₂와 N₂를 나중에 계산하는 것이 정확성과 수렴성에 유리하다. 질량보존의 법칙과 공기 구성 원자의 보존 법칙은 실제 계산에서 다음의 식으로 구현된다.

$$\rho = \sum_{i=1}^{NS} \rho_i$$

$$\frac{2X_{O_2} + X_O + X_{NO}}{2X_{N_2} + X_N + X_{NO}} = \frac{0.21}{0.79}$$

여기에서 X 는 몰분율을 의미한다.

2.2 화학반응 자코비안과 부분 내재적 적분법

비평형 반응의 화학반응식의 일반적인 표현식과 반응 자코비안은 다음과 같이 표현된다.

$$\omega_i = \omega_i(Y_1, Y_2, \dots, Y_N)$$

$$R_{ij} = \frac{\partial \omega_i}{\partial Y_j}, \quad (i, j = 1, N)$$

Y_j 는 종속변수로서 화학종 질량과 진동에너지들

의미하고, ω_i 는 각각의 생성항을 나타낸다. N 은 종속변수의 총 개수이다.

진동에너지는 2원자 이상으로 구성된 모든 분자에 적용되므로 NO, O₂, N₂의 3개 진동에너지항을 풀어야 한다. 경우에 따라서 간단한 계산을 위해 진동에너지 온도를 모두 같다고 가정하여 하나의 진동 에너지 방정식만을 고려할 수도 있다. 따라서 반응항에 포함되는 종속변수는 적게는 4개에서 많게는 6개까지 포함된다.

공기반응에 대한 반응 자코비안 R 은 내재적 시간 적분법을 적용할 때 쓰이며 다음의 식에서 유도된다.

$$\begin{aligned} \omega_1^{n+1} &= \omega_1(Y_1^{n+1}, Y_2^{n+1}, \dots, Y_N^{n+1}) \\ \omega_2^{n+1} &= \omega_2(Y_1^{n+1}, Y_2^{n+1}, \dots, Y_N^{n+1}) \\ &\vdots \\ \omega_N^{n+1} &= \omega_N(Y_1^{n+1}, Y_2^{n+1}, \dots, Y_N^{n+1}) \end{aligned}$$

비평형 공기반응의 자코비안에 대한 자세한 유도는 참고문헌[5]에 기술되어 있다. 본 연구에서 위와 같은 자코비안은 완전 내재적 자코비안 혹은 완전 내재적 시간 적분법(fully implicit time integration method)이라 칭한다.

부분 내재적 적분법은 내재적 방법의 시간단계(n 과 $n+1$)를 종속변수에 순차적으로 적용하는 방법으로 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \omega_1^{n+1} &= \omega(Y_1^{n+1}, Y_2^n, \dots, Y_N^n) \\ \omega_2^{n+1} &= \omega(Y_1^{n+1}, Y_2^{n+1}, Y_3^n, \dots, Y_N^n) \\ \omega_i^{n+1} &= \omega(Y_1^{n+1}, Y_2^{n+1}, \dots, Y_i^{n+1}, Y_{i+1}^n, \dots, Y_N^n) \\ \omega_N^{n+1} &= \omega(Y_1^{n+1}, \dots, Y_N^{n+1}) \end{aligned}$$

이에 따른 자코비안은 완전 내재적 자코비안과 달리 아래 삼각 행렬로 나타난다.

$$R = \begin{pmatrix} \frac{\partial \omega_1}{\partial Y_1} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\partial \omega_2}{\partial Y_1} & \frac{\partial \omega_2}{\partial Y_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \omega_N}{\partial Y_1} & \frac{\partial \omega_N}{\partial Y_2} & \dots & \frac{\partial \omega_N}{\partial Y_N} \end{pmatrix}$$

위에서 보듯이 부분 내재적 적분법은 화학종의 순서에 종속적이다. 공기 화학반응의 특성과 부분 내재적 적분법의 응용성을 알기 위하여 화학 반응만을 고려하는 무차원 정적 반응에 우선 적용하도록 하겠다.

2.3 무차원 정적 반응

정적반응을 위한 초기조건으로 4,000K에 10기압의 N₂-O₂ 공기 혼합기로 가정하였다. 실제 문

그림 1. 공기 정적반응의 화학종 변화

그림 2. 공기 정적 반응의 온도변화

그림 3. 외재적 기법과 내재적 기법의 최대 허용시간간격 변화

제에서 이런 고온의 공기는 매우 드문 예이지만 화학반응을 빠르게 진행시키기 위해 4,000K로 설정하였다. 4,000K의 온도에서 공기는 급격한 비평형 상태로 변화하였다가 일정한 시간이 지난 후 평형 상태에 도달한다. 화학종 순서는 O, N, NO, $E_{v,NO}$, E_{v,O_2} , E_{v,N_2} 이고 각 시간 단계마다 Newton 반복법을 사용하여 시간 정확도를 높였다. 화학반응식은 참고문헌[6]에 나와 있는 17 화

학반응식을 적용하였다. 계산은 Newton 반복법이 포함된 내재적 적분법이 적용되었고 시간간격은 초기 0.1μsec에서 매 시간간격마다 10%씩 증가시켰다.

그림 1은 화학종의 변화를, 그림 2는 평형 온도와 진동에너지 온도를 나타낸다. 초기 N_2 - O_2 공기 혼합기가 고온에 노출되면 N_2 , O_2 가 해리되어 N, O, NO가 급격히 생성된다. 급격한 생성과정은 10^{-5} 초까지 진행되고, 10^{-5} 초 이후로 화학종의 변화는 진동에너지 온도와 평형온도의 변화를 따라 좀더 완만히 변화한다.

진동에너지는 화학종의 생성과정이 마무리되어 가는 10^{-6} 초에서 발생하여 각각 화학종마다 서로 다른 경향성을 갖고 차이가 벌어진다. 그림 2에서 NO의 진동에너지 온도는 평형온도보다 커지나 N_2 , O_2 의 진동에너지 온도는 평형온도보다 낮게 변한다. 차이가 벌어진 각 화학종의 진동에너지 온도는 0.1초에서 평형온도와 같아진다. 0.1초는 화학종의 평형과 에너지 평형이 이루어지는 열화학적 평형시간이 된다.

2.4 시간 적분법에 따른 시간간격 비교

화학반응의 수치해석은 시간간격의 제한 때문에 내재적 적분법이 선호된다. 내재적, 외재적 시간적분법의 차이는 두 방법의 이론적 최대 허용 시간 간격을 비교하여 확인한다. 최대 허용 시간 간격은 방정식을 자코비안으로 선형화하여 선형화된 방정식의 팽창인자(Amplification factor)가 1을 넘지 않는 최대값으로 정의한다. 예를 들어 내재적 기법에 대한 최대시간간격은 다음과 같이 구해진다.

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial t}\right)^{n+1} = \Omega^{n+1}$$

$$\frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t} = \Omega^{n+1} \approx \Omega^n + R(Q^{n+1} - Q^n)$$

Q^{n+1} 는 팽창행렬 G 를 이용해 $Q^{n+1} = GQ^n$ 로 정의하고 생성항 Ω 를 자코비안 R 으로 $\Omega = RQ$ 로 다시 근사하면 위 식은 다음과 같다.

$$(G - I)Q^n = \Delta t R G Q^n \quad (I - \Delta t R)G = I$$

$$\Delta t_{\max} = \text{eigen value}(G) \leq 1$$

외재적 기법도 같은 과정으로 구한 후 최대 시간 간격을 구해 그림 3에 비교하였다.

그림 3의 대부분의 시간 단계에서 내재적 기법의 시간간격이 외재적 기법에 비하여 거의 10^3 배에 달한다. 이는 공기반응 해석에서 내재적 시간 적분법이 적용되어야 계산에 필요한 적절한 시간간격을 확보할 수 있음을 보여준다.

그림 3의 허용시간간격은 내재항 특성치로 구한 이론적 최대 시간간격이고 실제 시간간격은 물리적 정확도를 확보하기 위해 이보다 작은 경우가 많다. 시행착오법으로 실제의 최대 시간간격을 확인해 보면 외재적 기법은 1nsec이고 내재적 기법은 1μsec으로 그림 3의 경향성이 확인된다. 더욱이 내재적 적분법의 경우 매 시간간격마다 시간 간격이 10%씩 증가하기 때문에 그림 3의 결과와 유사해진다.

2.5 화학반응 특성치 분석

수치해석에서 화학반응이 야기하는 불안정성 중에서 계산 초기의 시간간격의 제한 등은 화학반응으로 인한 특성치 변화에 기인하는 경우가 많다[4]. 일반적으로 화학반응 자코비안의 특성치는 복소수로 나타나며, 양의 실수 특성치가 화학반응의 경직성을 일으킬 수 있고 음의 실수는 주로 수치기법의 시간 간격을 결정짓는다.

공기 정적 반응에 대한 화학반응 자코비안 특성치는 그림 4에 시간의 진행과 함께 나타냈다. 공기반응과 비교하기 위하여 수소 2몰과 산소 1몰의 혼합기를 같은 조건에서 계산하여 그림 5에 나타냈다.

그림 4와 5에서 수소-산소 연소반응은 매우 빨리 격렬하게 진행되는 반면에 공기 반응은 상대적으로 느리게 진행됨을 알 수 있다. 연소반응은 점화만 되면 열을 발생하며 자발적으로 반응이 진행되고 반응율도 크지만, 공기반응은 반응에 참여하는 화학종의 몰분율도 작고 반응율도 작다.

반응이 느리게 일어나면 반응특성시간이 길어지고 반응특성시간의 역수의 의미를 갖는 음의 실수 특성치를 작게 만든다. 따라서 공기반응의 음의 실수 특성치가 연소반응보다 작은 것은 반응특성시간의 차이에 기인한다고 볼 수 있다.

화학반응 자코비안의 특성치 중에서 수치기법의 안정성에 영향을 주는 끼치는 것은 양의 실수 특성치이다[7]. 이론적으로 양의 실수 특성치를 갖는 부분은 행렬분리하여 외재적 기법으로 시간적분해야하지만 실제로 불가능하기 때문에 모두 내재적으로 처리하면서 수치기법에 불안정성을 야기하는 것이다.

그림 4와 5의 두 반응에서 나타난 양의 실수와 음의 실수 특성치 차이를 비교해 보면, 공기반응의 특성을 파악할 수 있다. 공기반응의 양의 실수 특성치는 음의 실수 특성치보다 약 $O(10^3)$ 작지만, 연소반응에서 그 차이는 $O(10)$ 에 불과하다. 따라서 공기반응이 연소반응보다 양의 실수 특성치에 의한 불안정성이 나타날 여지가 적다는 것을 알 수 있다.

그림 4. 공기 정적반응의 화학반응 자코비안 특성치 변화

그림 5. 수소-산소 정적 반응의 화학반응 자코비안 특성치 변화

2.6 정적반응의 부분 내재적 적분법

화학반응 해석에서 부분 내재적 적분법의 장점은 아래 삼각행렬로 인한 연산시간의 감소와 양의 실수 특성치로 인한 불안정성의 제거에 있다. 무차원 정적연소를 부분 내재적 적분법으로 계산하는 것은 화학반응 자코비안을 아래삼각행렬만을 쓴다는 점만 제외하면 완전 내재적 적분법과 동일하다. 부분 내재적 적분법과 같은 근사 자코비안을 쓰는 방법은 비정상 문제에 직접적으로 적용하기 곤란하므로 뉴턴 반복법을 적용하여 시간 정확도를 높여야 한다.

그림 6은 평형온도와 NO 화학종을 비교한 것으로 부분 내재적 적분법과 완전 내재적 적분법의 결과는 완벽히 일치한다. 부분 내재적 적분법은 화학종 순서에 종속적이므로 화학종 순서를 바꾸어 계산해 보았다. 화학종 순서를 원래의 O, N, NO, Ev_{NO} , Ev_{O_2} , Ev_{N_2} 와 이를 뒤바꾸어 계산한 결과를 그림 7에 나타냈다.

그림 6. 정적연소의 완전 내재법과 부분 내재법 온도 및 NO 질량분을 변화

그림 7. 화학종 순서를 바꾸었을 경우의 정적연소 온도와 비평형온도 변화

두 결과는 모두 동일하며 계산에 허용된 최대 시간간격도 별다른 차이가 없었다. 그림에서 보여주는 두 가지 배열 이외에도 공기화학반응에서 구현될 수 있는 배열의 경우의 수는 720개에 달하므로 모두 확인할 수는 없지만 다양한 초기조건에 대하여 서로 다른 화학종 배열에 대한 계산에서도 화학종 순서가 미치는 영향은 나타나지 않았다. 그러므로 연소반응과 달리 공기 반응에서 화학종 순서의 영향은 미미하다고 판단된다. 부분 내재적 시간 적분법의 자코비안 특성치는 항상 음의 실수만 존재한다[4]. 따라서 부분 내재적 방법과 완전 내재적 적분법의 이론적 허용 시간간격은 음의 실수 특성치를 비교하여 파악할 수 있다. 그림 8에 연소반응과 공기반응에 대한 부분 내재적 적분법의 음의 실수 특성치를 완전 내재적 방법과 비교하여 나타냈다. 연소반응은 부분 내재적 적분법의 특성치가 약간 작기 때문에 더 큰 시간간격을 취할 수 있지만, 공기반응은 두 방법의 음의 실수 특성치가 거의 비슷하기 때문에 시간간격의 차이는 없다. 실제

그림 8. 공기반응과 수소-산소 연소 반응의 음의 실수 특성치 비교

공기반응에 대한 계산에서 두 방법의 시간간격은 1μsec로 동일하다. 이는 앞 절에서 설명되었듯이 공기반응에서 양의 실수 특성치로 인한 불안정성이 작아 계산에 큰 영향을 미치지 않기 때문인 것으로 사료된다.

III. 극초음속 유동계산

3.1 지배 방정식과 수치기법

극초음속 유동의 지배 방정식은 일반적인 연소 반응 방정식과 동일하다. 다만 화학종 방정식 외에 진동에너지 방정식이 포함되어 전체적으로 방정식 개수가 증가하게 된다. 열화학적 비평형 유동장에 대한 압축성 Navier-Stokes 방정식을 직교 좌표계에서 보존형으로 표현하면 다음과 같다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = \frac{\partial F_{vi}}{\partial x_i} + S, \quad i=1,2,3.$$

Q 는 유동변수 벡터를 의미하고, F_i , F_{vi} 는 각각 비점성 및 점성 유속(flux) 벡터를 나타낸다. 그리고 S 는 화학반응의 생성항 벡터이다. 각각의 정의는 다음과 같다.

$$Q = [\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, \rho E, \rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{ns-1}, \rho E_v]^T$$

$$S = [0, 0, 0, 0, 0, \dot{S}_1, \dots, \dot{S}_{ns-1}, \dot{S}_v]^T$$

각 항에 대한 자세한 서술은 앞장과 참고문헌 [5,6]에서 찾을 수 있다. 다만 계산의 편의를 위해 정적반응과 달리 진동에너지 온도는 모두 같다는 2-온도 모델을 사용하였다.

3.2 전산유체 수치기법

부분 내재적 적분법은 공간차분법에 상관없이

적용할 수 있다. 그러나 시간 적분법에서 부분 내재적 적분법이 연산효율을 얻으려면 화학반응 자코비안으로 행렬연산이 부가되는 LU-SGS (Lower Upper Symmetric Gauss Seidel)[8]나 DADI (Diagonalized Alternating Directional Implicit)[9] 적분법에 더 효과적이다. 원칙적으로 어떠한 시간적분법에도 적용가능하다. 본 연구에서 비교적 최근에 개발된 AUSMPW+ 기법[10]을 공간차분법으로, LU-SGS 기법을 시간적분법으로 사용하였다.

극초음속 공력가열 해석에서 해의 정확성과 수렴성은 격자계에 크게 의존적이다. 이를 피하기 위해 벽면 경계에서 격자계의 크기를 격자레이놀즈수가 $O(1)$ 이 되도록 설정해주어야 한다.

3.3 해석 결과

화학종 순서는 정적계산과 동일하게 설정하였으며 화학반응 자코비안에 에너지 방정식 항이 포함되는 점이 다르다. 계산 조건은 동결유동 계산에 많이 적용되는 문제인 마하수 16.34 자유류 온도 52K, 벽면온도 294.4K인 문제를 자유류 온도를 500K로 높여 비평형 반응으로 계산하였다. 화학반응식은 정적연소의 17 반응식을 적용하였다. 계산에서 CFL 수는 0.4이다.

그림 9은 두 기법의 수렴곡선으로 동일한 수렴율을 보였다. 참고문헌[4]에서 연소반응을 해석하면 해가 어느정도 정착된 후 두 방법의 수렴율이 동일하였으나 그림 9와 같은 공기 반응에서 계산의 시작점으로부터 두 방법의 수렴율이 같다는 점이 특징이다. 이는 공력가열이 발생하는 마하수가 매우 크다는 특징과 CFL 수가 낮게 설정된 결과로도 볼 수 있는 데, 부분 내재적 적분법이 물리적 시간간격이 작을 경우 매우 효과적이라는 사실과 일치한다.

그림 10은 각각 수렴된 해의 O 질량분율과 진동에너지 분포로서 완전 내재적 방법과 부분 내재적 기법이 동일한 결과를 보인다.

연산시간은 부분 내재적 방법이 약 10% 가까운 감소를 보인다. 이는 화학반응 자코비안의 각 항을 모두 구한 후 행렬연산에만 부분 내재적 기법을 적용시킨 결과이므로 만약 자코비안을 구하는 과정까지 적용하면 연산시간의 감소폭은 더 커질 것으로 사료된다.

그림으로 나타내지 않았지만 화학종 순서의 영향은 역시 나타나지 않았다. 극초음속 유동의 수렴성은 화학반응 자코비안보다 격자계의 영향을 더 받는 것으로 나타난다. 연소반응에 대한 해석[4]에서 부분 내재적 적분법은 화학종 순서의 영향

그림 9. 부분 내재적 기법의 수렴곡선 비교

그림 10. 부분 내재적 기법의 화학종과 온도 비교

도 받지만, 시간간격의 영향을 더 받는 것으로 알려져 있다. 따라서 극초음속 유동과 같이 유동 특성시간이 매우 짧아지게 되면 부분 내재적 적분법에 미치는 시간간격의 영향이 작아져 완전 내재적 기법과 동일한 특성을 보이게 된다.

IV. 결 론

본 연구는 극초음속 유동해석에서 나타나는 공기 화학반응의 수치해석적 특성을 이론적으로 분석하여 내재적 방법이 외재적 방법에 비하여 10^3 배의 시간 간격을 적용할 수 있으며, 화학반응으로 인한 시간간격 제한을 극복하려면 자코비안이 필수적으로 포함되어야 함을 밝혔다. 그리고 수소-산소 연소반응의 특성치와 비교하여 공기반응이 양의 실수 특성치로 인한 수치기법의 경직성이 약함을 밝혔다.

공기반응을 효율적으로 해석하기 위해 부분 내재적 적분법을 적용하였다. 화학반응 특성을 파악하는 정적반응에서, 부분 내재적 적분법은 고유의 단점인 화학종 순서의 종속성이 나타나지 않았고 완전 내재적 적분법과 동일한 결과를 구

할 수 있었다. 극초음속 유동 해석에서 부분 내재적 기법은 완전 내재적 기법과 동일한 수렴성과 동일한 결과를 보였다. 또한 화학종 순서의 영향이 나타나지 않았고 실제 계산에서 10%의 연산시간을 감소할 수 있었다.

참고문헌

- [1] Park, C., *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*, Wiley, New York, 1990.
- [2] Eberhardt, S., and Imlay, S., "Diagonal Implicit Scheme for Computing Flows with Finite Chemistry," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 6, No. 2, 1992, pp. 208-216.
- [3] Aro, C. J., and Rodrigue, G. H., "Preconditioned Time Differencing for Stiff ODEs in Diurnal Atmospheric Kinetics," *Computer Physics Communication*, Vol. 92, No. 1, 1995, pp. 27-53.
- [4] 김성룡, *화학반응 유동해석을 위한 부분 내재적 시간적분법 연구*, 박사학위논문, 서울대학교. 2001.
- [5] 전희전, *Upwind 기법을 이용한 열적 화학적 비평형 유동장 해석*, 석사학위논문, 서울대학교, 1992.
- [6] 이준호, *AUSMPW+ 기법과 반응기체 모델을 이용한 극초음속 충격파 상호작용 수치해석*, 박사학위논문, 서울대학교, 1999.
- [7] Venkateswaran, S., Deshpande, M., and Merkle C. L., "The Application of Preconditioning to Reacting Flows Computations," AIAA 95-1673, 12th CFD Conference, 1995.
- [8] Yoon, S., and Jameson, A., "Lower-Upper Symmetric-Gauss-Seidel Method of the Euler and Navier Stokes Equations," *AIAA Journal*, Vol. 26, No. 9, 1988, pp. 1025-1026.
- [9] Coakley, T. J. , " Implicit Upwind Methods for the Compressible Navier-Stokes Equations," *AIAA Journal*, Vol. 23, No. 3, 1983, pp. 374-380.
- [10] 김규홍, *극초음속 유동해석을 위한 다차원 고차 내삽기법 개발*, 박사학위논문, 서울대학교, 2001.