



이원자 기체 유동 해석을 위한 일반유체역학

계산모델 개발

Generalized Hydrodynamic Computational Models

for Diatomic Gas Flows

명노신^{(1)}, 조수용⁽¹⁾

Rho-Shin Myong, Soo-Yong Cho

The study of nonlinear gas transport in rarefied condition or associated with the microscale length of the geometry has emerged as an interesting topic in recent years. Along with the DSMC method, several fluid dynamic models that come under the general category of the moment method or the Chapman-Enskog method have been used for this type of problem. In the present study, on the basis of Eu's generalized hydrodynamics, a computational model for diatomic gases is proposed. The preliminary result indicates that the bulk viscosity plays a considerable role in fundamental flow problems such as the shock structure and shear flow. The general properties of the constitutive equations are obtained through a simple mathematical analysis. With an iterative computational algorithm of the constitutive equations, numerical solutions for the multi-dimensional problem can be obtained.

1. 서론

희박 영역이나 극소 장치에 관련된 기체유동은 기체입자의 미시적 성질이 중요하게 되어 연속체 가정을 바탕으로 하는 기존의 이론을 그대로 사용하는 데는 한계가 있다. 이같은 문제는 50년대 이후 연구되어온 항공우주 분야의 극초음속 유동 [1,14] 뿐만 아니라 진공에 가까운 영역에서 작동하는 각종 장치, 마이크론 단위의 초소형 기계장치에 관련된 유동[2]에서 발견할 수 있다. 이러한 유동장에 관한 연구는 크게 실험과 이론분야 연구로 나뉘어 질 수 있는데 모두 많은 어려움을 겪어 왔다. 실험과 관련해서는 극초음속 희박유

동을 지상에서 모사하는 문제, 극소유동장을 측정할 수 있는 실험장치 개발에 어려움이 있어왔다. 특히 극소유동장 실험은 유량을 측정하는 것이 대부분인데 유동장을 보다 자세히 관찰하기 위해서는 압력, 속도, 벽면 전단력 분포에 관한 정보가 필요한데 초미세 측정장치 개발의 어려움으로 극히 제한된 실험결과만이 이용가능한 상태이다. 이론 연구에서는 모우멘트 법 또는 Chapman-Enskog 법을 기초로 Navier-Stokes 방정식을 확장하려는 여러 시도가 있었지만 만족할 만한 결과를 얻지 못했다. 특히 마하수나 크누센수가 큰 충격파나 급속 팽창 유동에서 열역학 2법칙을 만족시키지 못해 어려움을 겪어 왔다[14]. 이와 달리 편미분 방정식 형태의 수학 방정식을 사용하

1) 경상대학교 수송기계공학부



지 않는 DSMC 기법[3]이 희박기체 유동장 해석에 성공적으로 적용되어 왔다. 하지만 막대한 계산 용량을 필요로 해 실제 공학 문제에는 제한적으로 사용되고 있다.

이같은 어려움을 해결하고자 최근 열역학 2법칙을 엄밀히 만족시키는 Eu의 일반유체역학[5,6]을 기초로 전산유체역학 계산모형을 개발하려는 시도가 있어 왔다. 초기 연구에서는 단원자 기체에 관한 계산모델[8,9,11]과 적절한 미끄럼 경계조건 개발에 주안점을 두었다. 그 주요 결과로는 요소 방정식을 계산하는 알고리즘과 벽면 속도 구배에 관한 정보를 필요로 하지 않는 Langmuir 경계조건 개발[11,12] 등이다. 개발된 계산모델은 충격과 내부구조, 이차원 평판 주위의 충격과 및 경계층 상호작용, 축대칭 노즐 내부의 희박유동[10], 마이크론 크기의 채널 내부 유동장 계산[12]에 성공적으로 적용되었다.

본 연구에서는 개발된 단원자 기체에 관한 모델을 이원자 기체 문제로 확장하고자 한다. 지배방정식과 함께 경계조건을 확장하고 요소방정식을 계산하여 용적(bulk) 점성계수에 관련된 회전 비평형 효과를 알아본다.

2. 지배 방정식 및 경계조건

2.1 이원자 기체 일반유체역학 방정식

보존(conserved) 및 비보존(non-conserved) 변수에 관한 열역학적으로 완전한 유체 계산 모델을 Eu[5,7]의 일반유체역학을 기초로 유도하면, 이원자 기체에 대해 무차원 방정식이 다음과 같이 표현된다.

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

및 요소관계식 (constitutive relations)

$$\widehat{\Pi} q(c\widehat{R}) = (1 + f_b \widehat{\Delta}) \widehat{\Pi}_0 + [\widehat{\Pi} \cdot \nabla \widehat{\mathbf{u}}] \quad (2)$$

$$\widehat{\Delta} q(c\widehat{R}) = \widehat{\Delta}_0 + \frac{3}{2} f_b (\widehat{\Pi} + f_b \widehat{\Delta} \mathbf{I}) : \nabla \widehat{\mathbf{u}} \quad (3)$$

$$\widehat{\mathbf{Q}} q(c\widehat{R}) = (1 + f_b \widehat{\Delta}) \widehat{\mathbf{Q}}_0 + \widehat{\Pi} \cdot \widehat{\mathbf{Q}}_0 \quad (4)$$

여기서

$$\begin{aligned} \widehat{\Pi} &\equiv \frac{N_\delta}{p} \mathbf{\Pi}, \quad \widehat{\Delta} \equiv \frac{N_\delta}{p} \Delta, \\ \widehat{\mathbf{Q}} &\equiv \frac{N_\delta}{p} \frac{\mathbf{Q}}{\sqrt{T/(2\varepsilon)}}, \quad \nabla \widehat{\mathbf{u}} \equiv -2\eta \frac{N_\delta}{p} \nabla \mathbf{u}, \\ \varepsilon &= \frac{1}{\text{PrEcT}_i/\Delta T}. \end{aligned}$$

비선형 인자 $q(c\widehat{R})$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$q(c\widehat{R}) = \frac{\sinh(c\widehat{R})}{c\widehat{R}},$$

$$\widehat{R}^2 = \widehat{\Pi} : \widehat{\Pi} + \frac{4}{5f_b} \widehat{\Delta}^2 + \widehat{\mathbf{Q}} \cdot \widehat{\mathbf{Q}}.$$

잘 알려진 Navier-Stokes-Fourier 관계식은 아래와 같다.

$$\mathbf{\Pi}_0 = -2\eta[\nabla \mathbf{u}]^{(2)}, \quad \mathbf{Q}_0 = -\lambda \nabla \ln T. \quad (5)$$

용적 점성계수에 관한 준평형 요소관계식은 다음과 같다.

$$\Delta_0 = -\eta_b \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (6)$$

Stokes 가정에 관련된 2차 점성계수[4]는 본 유도식에서는 아래와 같다.

$$\eta_b = \frac{2}{3} \eta.$$

위의 방정식에서 $\rho, \mathbf{u}, p, E, \mathbf{\Pi}, \Delta, \mathbf{Q}$ 은 밀도, 속도, 압력, 총에너지 밀도, 전단응력, 초과 수직 응력, 열전달(heat flux)을 나타낸다. $[\nabla \mathbf{u}]^{(2)}$ 는 속도구배 텐서의 주대각선 요소의 합이 영인 대칭부분을 나타내며 $[\mathbf{\Pi} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{(2)}$ 는 스트레스와 속도구배 텐서의 상호작용을 묘사한다. 콜론(colon)은 텐서 사이의 이중 내적을 뜻하고,

$N_\delta = \sqrt{2\gamma/\pi} Kn \cdot M$ 로 표현되는 무차원수 N_δ 과 비가역 과정을 묘사하는 \widehat{R} 은 비평형도를 나타낸다. η, η_b, λ 는 전단, 용적 점성계수와 열전도를 나타낸다. 첨자 r 는 기준(reference) 상태를 나타낸다. c 는 1보다 약간 큰 값을 갖는 상수인데 기체의 종류에 따라 조금씩 달라진다. f_b, γ, Pr 는 전단 점성계수에 대한 용적 점성계수의 크기, 비열비, Prandtl 수를 나타내며 이원자 질소 기체인 경우 4/5, 7/5, 14/19의 값을 갖는다.

2.2 Langmuir 경계조건

기체-벽면 상호작용에 의한 벽면 미끄럼 현상은 기본적으로 기체입자와 벽면표면을 구성하는 고체입자의 상호작용을 분석하는 미시적 관점에서 다루어져야 할 주제이다. 이 문제는 흡착(adsorption) 현상[13]으로 불리어지는 물리화학 현상과 깊은 관련이 있는데 입자의 크기와 비슷한 특성길이 범위에서 일어난다. 기본적인 개념은 기체-벽면 상호작용을 고체표면 위의 기체입자 막(film)으로 설명하는 것인데, 기체입자가 고체표면에 부딪칠 때 곧바로 탄성적으로 반사하지 않고 표면 원자간 힘에 의해 짧은 시간 동안 표면에 압축된 다음 발산하는 사실로부터 거시적 관점에서의 속도 미끄럼을 유도한다. 이러한 설명을 통해 이원자 기체에 관한 아래의 평형상태 표면 비율 α , 속도 및 온도 미끄럼을 계산할 수 있다[11,12].

$$u = \alpha u_w + (1 - \alpha) u_r \tag{7}$$

$$T = \alpha T_w + (1 - \alpha) T_r \tag{8}$$

여기서

$$\alpha = \frac{\sqrt{\beta p}}{1 + \sqrt{\beta p}}, \quad \beta = \frac{Al}{k_B T_w} \exp\left(\frac{D_e}{k_B T_w}\right).$$

3. 계산모델

요소 관계식 (2)-(4)는 압력, 속도 및 온도 구배에 관한 14개의 변수에 관한 10개의 비선형 대수 방정식 형태이다. 비평형 정도에 상관없이 성립하는 보존법칙 (1)의 비보존 변수를 계산하기 위해서는 요소 관계식을 풀어야 한다. 이 과정에서 가장 중요한 기본 유동은 팽창 및 압축, 전단 흐름이다. 단원자 기체에 관한 이전 연구를 확장하

면 다음과 같이 요약된다.

3.1 압축 및 팽창 유동

평면문제인 경우로 국한하면 주어진 열역학 힘 $(u_x, 0, T_x)$ 에 대해 $(\widehat{\Pi}_{xx}, \widehat{\Delta}, \widehat{Q}_x)$ 값을 구하는 문제가 된다. 단원자 기체 문제와 유사한 알고리즘으로 아래 대수 방정식을 풀 수 있다.

$$\widehat{\Pi}_{xx} q(c \widehat{R}) = (1 + f_b \widehat{\Delta} + \widehat{\Pi}_{xx}) \widehat{\Pi}_{xx0},$$

$$\widehat{\Delta} q(c \widehat{R}) = [3(\widehat{\Pi}_{xx} + f_b \widehat{\Delta}) + 1] \widehat{\Delta}_0,$$

$$\widehat{Q}_x q(c \widehat{R}) = (1 + f_b \widehat{\Delta} + \widehat{\Pi}_{xx}) \widehat{Q}_{x0}.$$

여기서

$$\widehat{R}^2 = \frac{3}{2} \widehat{\Pi}_{xx}^2 + \frac{4}{5f_b} \widehat{\Delta}^2 + \widehat{Q}_x^2,$$

$$\widehat{\Delta}_0 = \frac{3}{4} f_b \widehat{\Pi}_{xx0}.$$

3.2 전단 유동

속도 구배만 존재하는 전단 흐름에서는 주어진 열역학 힘 $(0, v_x, 0)$ 에 대해 $(\widehat{\Pi}_{xx}, \widehat{\Pi}_{xy}, \widehat{\Delta})$ 값을 구하는 문제가 된다.

$$\widehat{\Pi}_{xx} q^2(c \widehat{R}) = -\frac{2}{3} \left[\left(1 - \frac{9}{2} f_b\right) \widehat{\Pi}_{xx} + 1 \right] \widehat{\Pi}_{xx0}^2.$$

여기서

$$\widehat{R}^2 = 3 \widehat{\Pi}_{xx} \left[\left(1 + \frac{45}{4} f_b\right) \widehat{\Pi}_{xx} - 1 \right].$$

전단 응력 $\widehat{\Pi}_{xy}$ 와 초과 수직 응력 $\widehat{\Delta}$ 는 아래의 응력 관계식으로부터 구할 수 있다.

$$\widehat{\Pi}_{xy} = \text{sign}(\widehat{\Pi}_{xy0}) \left[-\frac{3}{2} \left[\left(1 - \frac{9}{2} f_b\right) \widehat{\Pi}_{xx} + 1 \right] \widehat{\Pi}_{xx} \right]^{1/2},$$

$$\widehat{\Delta} = -\frac{9}{2} f_b \widehat{\Pi}_{xx}.$$

4. 용적 점성계수 효과

압축 및 팽창 유동에서의 회전 비평형에 의한 용적 점성계수 효과를 Fig. 1과 2에서 살펴 볼 수



있다. Fig. 1는 주어진 $\widehat{\pi}_{xx0}$ (수평축) 대한 Navier-Stokes, 단원자 및 이원자 일반유체역학 관계식으로 계산된 $\widehat{\pi}_{xx}$ 을 나타낸다. 양의 값을 갖는 영역은 압축 과정, 음의 값을 갖는 영역은 팽창 과정을 나타낸다. 용적 점성계수로 인해 수직 응력값이 상당히 달라짐을 알 수 있다. 이 성질로 인해 이원자 기체 충격파 구조가 단원자인 경우와 달라질 것으로 예상된다. Fig. 2는 이원자 기체의 수직 응력 $\widehat{\pi}_{xx}$ (수평축)와 초과 응력 $\widehat{\Delta}$ 의 관계를 보여 주며 Fig. 1의 이원자 기체 수직 응력 값으로부터 초과 응력을 계산할 수 있다.

Fig. 3은 경계층에서 발생하는 전단속도 구배 $\widehat{\pi}_{xy0}$ 에 대한 요소 관계식을 보여준다. 수직 응력에 대한 회전 비평형 효과는 미미하지만 전단 응력에 대해서는 그렇지 않음을 알 수 있다. 기체의 종류에 상관없이 선형 관계식보다는 작은 전단 응력 값을 가지나, 그 값이 이원자 기체에서 크게 나타남을 알 수 있다.

5. 결론

Eu의 일반유체역학 이론을 바탕으로 이원자 기체에 관한 비평형 계산모델을 개발하였다. 잘 알려진 Navier-Stokes 방정식과의 관계를 규명하고 기본 유동장에 관한 요소 관계식을 유도하였다. 유도된 유체역학 방정식을 해석하여 회전 비평형 효과를 알아보았고 단원자 기체에 관한 연구를 확장하여 다차원 CFD 기법을 위한 계산 알고리즘을 개발하였다.

후 기

본 연구는 한국과학재단 특정기초연구(과제번호 1999-2-305-001-3)와 2001년도 두뇌한국21 사업의 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 (1998), pp. 469-505.
- [2] Ho, C. M. and Tai, Y. C.,

"Micro-Electro-Mechanical-Systems (MEMS) and Fluid Flows," Annual Review in Fluid Mechanics, Vol. 30 (1999), pp.11-22.

[3] Bird, G. A., Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, Clarendon Press, Oxford, England, 1994.

[4] White, F. M., Viscous Fluid Flow, McGraw Hill, 1974.

[5] Eu, B. C., Kinetic Theory and Irreversible Thermodynamics, John Wiley & Sons, New York, 1992.

[6] Al-Ghoul, M., and Eu, B. C., "Generalized Hydrodynamics and Shock Waves," Physical Review E, Vol. 56, No. 3 (1997), pp. 2981-2992.

[7] Eu, B. C., and Ohr, Y. G., "Generalized Hydrodynamics, Bulk Viscosity, and Sound Wave Absorption and Dispersion in Dilute Rigid Molecular Gases," Physics of Fluids, Vol. 13, No. 3 (2001), pp. 744-753.

[8] Myong, R. S., "Thermodynamically Consistent Hydrodynamic Computational Models for High-Knudsen-Number Gas Flows," Physics of Fluids, Vol. 11, No. 9 (1999), pp. 2788-2802.

[9] 명노신, "열역학 층류 비평형 유체역학 모델을 이용한 희박기체 및 MEMS 유동장 해석," 한국항공우주학회지, 28권 4호 (2000), pp. 35-47.

[10] Chae, D., Kim, C., Rho, O. H., and Myong, R. S., "Analysis of Rarefied Nozzle Flow by Generalized Hydrodynamic Equations," AIAA Paper 2001-0894.

[11] Myong, R. S., "A Computational Method for Eu's Generalized Hydrodynamic Equations of Rarefied and Microscale Gasdynamics," Journal of Computational Physics, Vol. 168 (2001), pp. 47-72.

[12] Myong, R. S., "Velocity-Slip Effect in Low-Speed Microscale Gas Flows," AIAA Paper 2001-3076.

[13] Langmuir, I., Surface Chemistry, Chemical Reviews, Vol. 13 (1933), p. 147.

[14] Lumpkin III, F. E., Chapman, D. R., and Park, C., "A New Rotational Relaxation Model for Use in Hypersonic Computational Fluid



Dynamics," AIAA Paper 1989-1737.

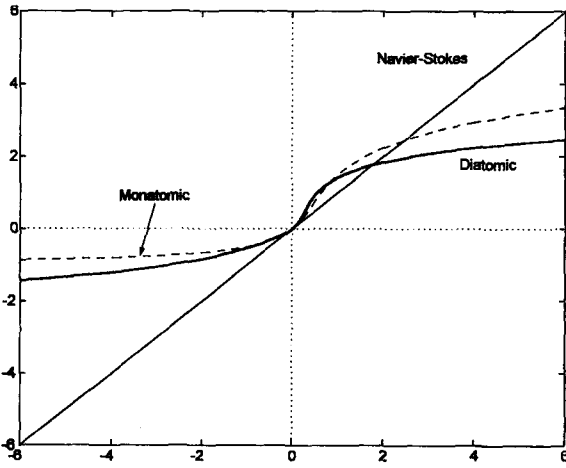


Fig. 1. Nonlinear normal stress relations in expanding gas and compressed gas.

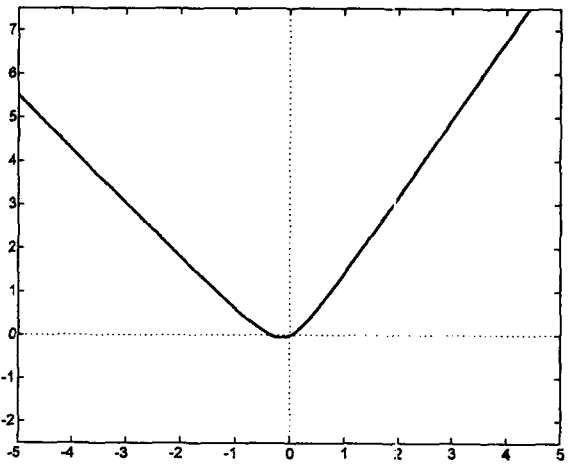


Fig. 2. Shear stress and excess normal stress relation in a diatomic gas.

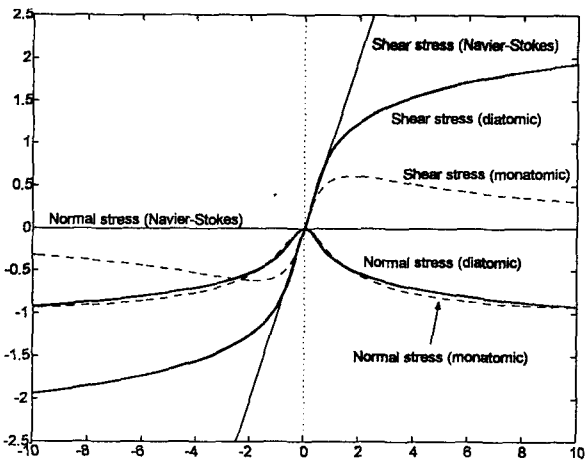


Fig. 3. Stress relations under shear velocity gradient.