

論文

실제 기체 음속과 근사 리만 해법

문성영*, 한상훈**, 최정열***

Real Gas Speeds of Sound and Approximate Riemann Solver

Seong-Young Moon*, Sang-Hoon Han** and Jeong-Yeol Choi***

ABSTRACT

The definition of the speed of sound is reexamined since it is crucial in the numerical analysis of compressible real gas flows. The thermodynamic speed of sound (TSS), a_{th} , and the characteristic speed of sound (CSS), a_{ch} , are derived using generalized equation of state (EOS). It is found that the real gas EOS, for which pressure is not linearly dependent on density and temperature, results in slightly different TSS and CSS. In this formalism, Roe's approximate Riemann solver was derived again with corrections for real gases. The results show a little difference when the speeds of sound are applied to the Roe's scheme and Advection Upstream Splitting Method (AUSM) scheme, but a numerical instability is observed for a special case using AUSM scheme. It is considered reasonable to use of CSS for the mathematical consistency of the numerical schemes. The approach is applicable to multi-dimensional problems consistently.

초 록

압축성 실제 기체 유동 해석에 필수적인 음속의 정의에 대하여 다시 한 번 살펴보고, 열역학적으로 정의되는 음속(이하, 열역학 음속)과 특성 변수 해석을 통하여 정의되는 음속(이하, 고유 음속)을 일반화된 상태 방정식에 대하여 유도하였으며, 압력과 온도, 밀도가 선형적으로 비례하지 않는 실제 기체의 경우 열역학 음속과 특성 음속은 다소의 차이가 있음을 확인하였다. 이 과정에서 Roe의 근사 리만 해법을 다시 유도하여 실제 기체 효과의 수정이 필요한 부분을 살펴보았다. Roe의 근사 리만 해법과 AUSM 플럭스 분할 기법에 열역학적 음속과 특성 음속을 적용하여 비교한 경우 대체로 큰 차이는 없으나 특정한 경우 열역학 음속은 AUSM 방법의 경우 불안정성을 유발하기도 하였다. 수치 기법의 수학적 일관성의 측면에서도 특성 음속을 이용하는 것이 타당한 것으로 보인다. 이상의 방법은 다차원 문제에도 일관된 확장이 가능하였다.

Key Words : Real Gas(실제 기체), Speed of Sound(음속), Roe's Approximate Riemann Solver(Roe의 근사 리만 해법), AUSM(AUSM 기법)

† 2009년 11월 27일 접수 ~ 2009년 12월 17일 심사완료

* 정회원, 부산대학교 항공우주공학과 대학원

** 정회원, 부산대학교 항공우주공학과 대학원
현재 서울대학교 기계항공공학부 대학원

*** 정회원, 부산대학교 항공우주공학과
교신저자, E-mail : aerochoi@pusan.ac.kr
부산시 금정구 장전동 산 30번지

1. 서 론

상태 방정식은 압축성 유동에서 질량, 모멘텀, 에너지 보존 방정식과 더불어 또 하나의 지배 방정식으로 간주된다. 미시적으로는 기체 분자의 부피와 분자간 상호 작용을 무시할 수 있으며 거

시적으로는 압력이 밀도와 온도에 선형적으로 비례하는 이상 기체의 상태 방정식은 오랜 동안 압축성 유체역학에서 편리하게 이용되어왔으며, 대부분의 현대의 수치 해석 기법들은 이상 기체 상태 방정식의 선형 관계식에 근거하여 개발되어져 왔다.

이상 기체 상태 방정식이 많은 열역학적 적용 대상에 대하여 큰 문제없이 이용될 수 있지만, 이상 기체 가정이 유효하지 않은, 즉 압력이 밀도와 온도에 선형적으로 비례하지 않는 실제 기체 효과가 존재하는 문제들이 많이 존재한다. 이 경우 상태 관계를 정확히 기술할 수 있는 실제 기체 상태 방정식을 이용하여 해석을 수행하여야 하며, 따라서 이상 기체를 기반으로 개발된 수치 해석 기법도 수정되어야 한다. 실제 기체 효과를 고려하여야 하는 조건은 미시적으로는 기체 분자 부피와 분자 간 상호 작용이 고려하여야 하며, 거시적으로는 고압, 저온의 상태에서 발생한다. 실제 기체 현상이 존재하는 대표적인 문제로 ‘응축과 증발’ 등 상의 변화를 고려하여야 하는 다상 유동 문제를 들 수 있다. 즉, 극저온 추진제 로켓, 고체/액체 폭발물의 폭발 현상, 증기 터빈 등이 대표적인 예이다[1]. 최근 캐비테이션 문제 등에도 실제 기체 상태 방정식을 이용한 방법이 적용되고 있다[2].

여기에서, ‘실제 기체’라는 용어는 극초음속 공기역학에 쓰이는 ‘실제 기체 효과’와 다르다는 것이 우선 강조되어야 할 것이다. Anderson[3]은 극초음속 공기역학에 사용되는 ‘실제 기체 효과’라는 것은 고온 환경에서 기체 분자의 진동이나 회전 등이 무시되며, 기체의 해리나 이온화를 의미하는 것으로 표현한다. 즉, 이것은 ‘실제 기체 효과’라고 하기보다는 ‘고온 기체 효과’라고 언급하는 것이 더 정확한 용어의 사용일 것이다. 또한, ‘실제 기체’의 용어는 1800년대 이후로 열역학 분야에서 이용되어져 왔다. 다만, 극초음속 문제의 몇몇 경우에 압력이 밀도와 온도에 선형적으로 비례하지 않기 때문에 현재에도 이 용어의 사용에 있어 모호한 면이 없지 않지만, 이 연구에서는 ‘실제 기체’라는 용어를 압력이 밀도와 온도에 선형적으로 비례하지 않는다는 고전적 의미에 국한되어 사용할 것이다.

실제 기체 특성을 고려한 풍상차분법에 관한 연구들이 있었지만, 이것들은 대부분 고온 기체 효과에 연구 중점을 둔 것이며, 실제 기체 상태 방정식은 덜 중요하게 다루어졌다. 심지어 실제 기체 상태 방정식이 고려된 경우라도 플릭스 함수 및 수학적 특성 변화에 대한 열역학적 특성

변화에 대한 열역학적 특성에 관한 영향은 불충분하게 다루어졌다. 특히 실제 기체의 압축성 해법에서 특히 주의하여야 하는 부분은 고유 값의 방향을 결정하는 가장 중요한 변수인 음속이다. 음속은 열역학적으로는 매질을 등엔트로피 조건으로 전파하는 압력 파의 속도로 정의되지만, 압축성 해법에서는 플릭스 Jacobian 행렬의 고유값으로 부터도 정의할 수 있으며, 이상 기체에 대해서 두 음속은 동일하다. 그러나 실제 기체에 대해서는 동일한지 여부를 증명한 문헌을 찾아볼 수 없으며, 연구 논문에 따라 열역학 음속 (TSS)을 이용한 논문이나,[4] 고유 음속 (CSS)을 이용한 연구[5~9], 그 밖에 문헌에 제시된 형식을 이용한 논문[10] 등으로 구분되며, 실제 기체의 음속에 대해 심도 있게 다룬 논문은 의외로 보지 못하다. 따라서 본 연구에서는 실제 기체의 열역학 음속 및 고유 음속을 대하여 다시 한 번 유도하고, 이를 기반으로 일반화된 상태 방정식을 이용한 압축성 유체의 해법을 열역학적 측면 및 수학적 특성 변화를 고려하여 다시 유도하여 해석 결과의 수준을 검토하여 보았다.

II. 상태 방정식 및 음속

2.1 상태 방정식

이상 (Ideal) 기체는 보일-샤를 법칙으로 알려진 이상기체 가정이 유효한 기체로 다음과 같이 정의된다.

$$\frac{pv}{T} = \text{constant} = R \quad (1)$$

이상 기체는 완전 기체 (perfect gas) 라고도 불리며, 열량적 (calorically) 완전 기체와 열적 (thermally) 완전 기체로 분류된다. 열량적 완전 기체는 비열이 일정한 기체를 의미한다.

$$d\epsilon = c_v dT, dh = c_p dT, pv = RT \quad (2)$$

그리고 열적 완전 기체는 비열이 온도만의 함수로 표현되는 기체를 나타낸다.

$$d\epsilon = c_v(T) dT, dh = c_p(T) dT, pv = RT \quad (3)$$

이러한 이상 기체의 가정은 화학반응 유동장의 혼합기체에 대해서도 유효하게 적용된다.

한편, 실제 기체는 단일 구성과 일정한 비열에도 불구하고 이상 기체 방정식을 만족하지 않으므로 상태 방정식은 기체분자가 차지하는 부피와 상호작용에 의한 힘을 고려하여 적용이 되어야 한다. 이런 개념이 처음 제시된 형태가 Van der

Waals 상태 방정식이다. 이 상태 방정식은 기체 분자의 영향과 분자 상호간의 내부적인 힘을 고려한 것으로 다음과 같이 표현된다[1].

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(\bar{v} - b) = \bar{R}T \quad (4)$$

여기서, a, b는 상수로, 기체의 분자간의 힘과 체적을 고려하기 위하여 사용된다. 그러나 위의 Van der Waals 상태 방정식은 상변화 (phase change) 현상을 정확하게 구현할 수 없다. 따라서 보다 개선된 형태의 많은 상태 방정식이 제안되었다. 이러한 상태 방정식들 중 가장 정확하며 일반적으로 표현된 상태 방정식이 Virial 상태 방정식이며, 이것은 압력과 밀도, 온도간의 관계를 다항식의 형태로 구성하여 표현한다[1].

$$\frac{pv}{RT} = 1 + \frac{B(T)}{v} + \frac{C(T)}{v^2} + \dots = \sigma(T, v) \quad (5)$$

위의 식에서 오른쪽의 다항식은 이상 기체에서 벗어난 정도를 나타내는 압축성 계수 (compressibility factor)를 나타낸다. 압축성 계수는 일반적으로 두 개의 열역학 변수의 함수이며, 이상 기체일 경우에는 1 이다. 따라서 실제 기체 상태 방정식을 압축성 계수의 함수를 이용하여 (6)의 형태로 표현할 수 있다.

$$pv = \sigma(T, v)RT, \quad p = \sigma(T, \rho)\rho RT \quad (6)$$

예를 들어, Van der Waals 상태 방정식을 압축성 계수가 포함된 형태로 표현하면 다음과 같이 정의 될 수 있다.

$$\sigma(T, v) = \frac{M_w}{M_w - b\rho} - \frac{a\rho}{M_w^2 RT} \quad (7)$$

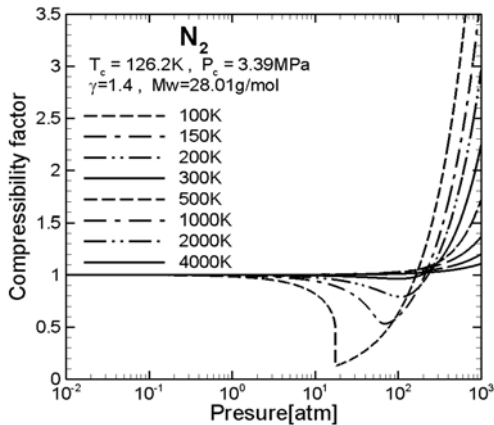


Fig. 1. Compressibility factor of Nitrogen computed by Van der Waals EOS

Fig. 1은 Van der Waals 상태 방정식으로 계산한 질소의 압축성 계수를 압력에 대하여 나타낸 그림이다.

2.2 실제 기체의 열역학 관계식

실제 기체에 대한 내부 에너지와 엔탈피는 두 개의 열역학적 변수의 함수이다.

$$\epsilon = \epsilon(T, v), \quad h = h(T, \rho) \quad (8)$$

여기서 내부 에너지와 엔탈피의 미소 변화량은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} d\epsilon &= \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial T}\right)_v dT + \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial v}\right)_T dv \\ &= c_v(T) dT + \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial v}\right)_T dv \end{aligned} \quad (9a)$$

$$\begin{aligned} dh &= \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T dp \\ &= c_p(T) dT + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T dp \end{aligned} \quad (9b)$$

따라서 실제 기체에 대한 내부 에너지와 엔탈피는 이상 기체의 항에 잉여 항이 더하여진 형태로 표현할 수 있다. 여기서, 이상 기체 항은 온도만의 함수이며, 잉여 항은 실제 기체의 효과를 반영한다. 잉여 항은 내부 에너지, 엔탈피의 정의와 이들의 전미분을 통하여 더 정확하게 표현될 수 있다.

$$\epsilon \equiv q + w, \quad h \equiv \epsilon + pv \quad (10)$$

$$d\epsilon = dq + dw = Tds - pdv \quad (11a)$$

$$dh = d\epsilon + pdv + vdp = Tds + vdp \quad (11b)$$

그런데 내부 에너지와 엔탈피의 전미분을 다음 형태로도 표현할 수 있으며,

$$d\epsilon = \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial s}\right)_v ds + \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial v}\right)_s dv \quad (12a)$$

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right)_p ds + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_s dp \quad (12b)$$

엔트로피의 전미분은 다음과 같으므로,

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v dT + \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T dv = \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T dp \quad (13)$$

식 (13)를 식 (12)에 대입하고 맥스웰 관계식을 적용하여 식 (9)와 식 (12)의 계수를 비교하면, 내부 에너지와 엔탈피의 전미분은 다음의 식 (14)과 같은 형태로 정리된다.

$$de = c_v dT + \left[T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v - p \right] dv \quad (14a)$$

$$dh = c_p dT + \left[v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \right] dp \quad (14b)$$

식 (14)의 편도함수들은 상태 방정식이 주어지면 계산될 수 있다.

한편, 열역학적으로 다음과 같이 정의되는 음속은,

$$a_{th}^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (15)$$

식 (14)의 계산에 도입된 미분항을 이용하여 다음과 같이 결정된다.

$$a_{th}^2 = \Gamma_{th} \frac{p}{\rho}, \quad \Gamma_{th} = \frac{c_p}{c_v} \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v / p \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \quad (16)$$

실제 기체 상태 방정식의 일반적인 형태를 이용하면, 위에서 정의한 Γ_{th} 는 압축성 계수 및 압축성 계수의 도함수를 이용하여 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\Gamma_{th} = \frac{c_p}{c_v} \left(1 - \frac{\sigma_v}{\sigma} \right), \quad \sigma_v = v \left(\frac{\partial \sigma}{\partial v} \right)_T, \quad \sigma_T = T \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_v \quad (17)$$

2.3 실제 기체의 Euler 방정식 및 고유값과 음속

실제 기체에 대한 일차원 Euler 방정식은 벡터 형태로 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (e + p)u \end{bmatrix} \quad (18)$$

이상 기체인 경우 압력은 밀도와 온도의 함수로 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$p = \frac{R}{c_v} \left(e - \frac{\rho}{2} u^2 \right) = \rho \frac{R}{c_v} \epsilon(T) \quad (19)$$

$$\epsilon(T) = \int c_v dT \quad (20)$$

압축성 유체 해석을 위한 밀도 기반 고유치 해법의 첫번째 단계는 Jacobian 행렬을 구하는 것이며, 일차원 지배 방정식에 대하여 압력의 도함수를 이용하여 일반화된 형태로 플럭스 Jacobian 행렬을 구하면 다음과 같다.

$$A = \frac{\partial F}{\partial Q} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 + p_\rho & 2u + p_{\rho u} & p_e \\ (p_\rho - H)u & H + p_{\rho u}u & (p_e + 1)u \end{bmatrix} \quad (21)$$

여기서, 압력의 미분 항들은 다음과 같이 정의된다.

$$p_\rho = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_{\rho, \epsilon}, \quad p_{\rho u} = \frac{\partial p}{\partial \rho u} \Big|_{\rho, \epsilon}, \quad p_e = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_{\rho, \rho u} \quad (22)$$

여기서 구한 세 개의 고유 값은 다음과 같다.

$$\Lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\} = \{u, u + a, u - a\} \quad (23)$$

음속은 고유 값으로부터 다음과 같이 정의된다.

$$a_{ch}^2 = p_\rho + p_e h + u p_{\rho u} = p_\rho + p_e (h - u^2) \quad (24)$$

위의 방정식에서 보존 변수에 대한 압력의 미분 항들은 압력이 보존 변수에 대한 함수가 아니기 때문에 연쇄 법칙 (chain rule)에 의해 유도된다. 따라서 상태 방정식으로부터 압력을 다음과 같이 가정하면,

$$p = p(\rho, T) \quad (25)$$

압력의 편도함수는 온도가 매개 변수로 하여 연쇄법칙을 이용하여 유도된다.

$$p_\rho = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_{\rho, \epsilon} = \frac{\partial p}{\partial \rho} \Big|_T + \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\rho \frac{\partial T}{\partial \rho} \Big|_{\rho, \epsilon} \quad (26)$$

여기서, 보존 변수에 대한 온도의 미분항은 내부 에너지를 온도와 밀도의 함수로 전체 에너지의 정의에서 유도된다. 그 결과 압력의 편도함수들은 일반적인 형태의 실제 기체 상태 방정식 (6)을 적용하여 다음과 같이 유도된다.

$$p_\rho = (\sigma - \sigma_v) RT + p_e (u^2 - \frac{\epsilon}{\rho} + \sigma_T RT) \quad (27a)$$

$$p_e = \frac{R}{c_v} (\sigma + \sigma_T), \quad p_m = -u p_e \quad (27b)$$

위의 압력의 미분항들을 식(24)의 음속항에 대입하여 정리하면 다음과 같다.

$$a_{ch}^2 = \Gamma_{ch} \frac{p}{\rho}, \quad \Gamma_{ch} = \left(1 - \frac{\sigma_v}{\sigma} \right) + \frac{R}{c_v} \frac{(\sigma + \sigma_T)^2}{\sigma} \quad (28)$$

2.4 실제 기체 음속의 비교

위에서 유도한 서로 다른 두 음속의 정의는 이상 기체 또는 압축성 계수가 상수라고 가정하면, 동일한 결과로 수렴한다. 그러나 일반적으로는 다른 형태로 표시되어 있으며, 실질적으로 동일한 값을 가지는지 여부는 증명하기 곤란하므로 실제 값을 대입하여 계산하여 보았다.

Fig. 2는 온도 및 압력에 따른 음속의 변화를 그림으로 나타낸 것이다. 계산에 유체는 분자량

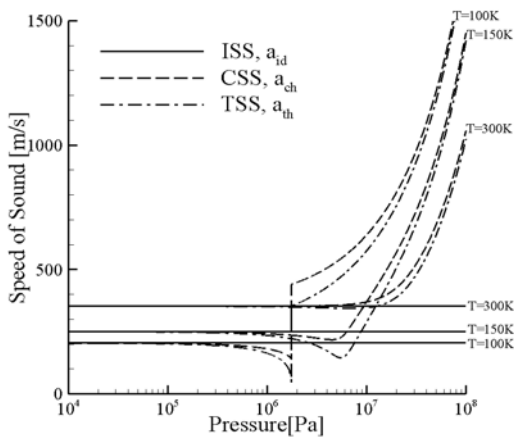


Fig. 2. Various Speed of Sound computed by Van der Waals Equation of state.

28.01 g/mole, 임계 압력 3.39 MPa이고, 임계 온도 126.2 K인 질소(N₂)이며, Van der Waals 상태 방정식을 계산한 것이다.[11] 아래첨자 'ch'는 고유 음속 (TSS)이며, 아래첨자 'th'는 열역학 음속이다. 비교를 위하여 이상 기체의 음속 (ideal gas speed of sound, ISS)을 아래첨자 'id'로 하여 같이 도시하였다.

이 결과에서 아임계 영역인 100 K, 고압 조건에서는 기체의 압력이 증가할수록 음속이 감소하다가 상변화 점을 거치면서 음속이 급격히 증가하고 이후 음속이 연속적으로 증가함을 알 수 있다. 반면 초임계 영역인 150 K 고압 조건에서는 음속이 줄어들었다가 다시 증가 하며, 300 K 고압 조건에서는 지속적으로 증가하는 경향을 보이고 있다. 이 결과에서 고유 음속 (CSS)은 열역학 음속 (TSS)보다 항상 큰 값을 보이고 있지만 대체로 유사한 경향을 보이며, 두 음속의 차이는 상변화 점, 또는 임계점 주변에서 크게 나타나며, 저압 또는 매우 고압의 조건에서는 동일한 값으로 수렴한다. 한편 실제 기체의 음속은 고압 영역이 될수록 이상 기체 음속과는 큰 차이를 보임을 확인 할 수 있다.

III. 실제 기체에 대한 Roe의 해법

압축성 유동의 해석과 비압축성 유동 해석 방법의 가장 큰 차이는 충격파 포착 기법이라고 할 수 있으며, FCT (Flux Corrected Transport) 기법 이래 다양한 플럭스 분할 기법이 개발되어 왔다 [12,13]. 그러나 다양한 플럭스 분할 기법 중에 실제로 Roe의 근사 리만 해법[14]이 가장 널리

오랜 기간 사용되어지고 있는 것으로 보이며, [13] 실제 기체가 고려된 충격파 포착 기법을 개발하기 위해서는 가장 널리 쓰이고 있는 Roe의 해법을 대상으로 하는 것이 타당할 것이다.

한편, 플럭스 분할 기법의 기본 원리는 셀 경계면에서의 전달 수송 속도 방향에 근거한 플럭스 함수의 분할이며, AUSM (Advection Upstream Splitting Method) 기법의 경우에는 플럭스 분할이 셀 경계면에서의 마하수에 의하여 결정된다[15]. 따라서 실제 기체 상태 방정식의 적용은 Edwards에 의해 수행된 바와 같이 단지 음속 계산에만 고려하면 되므로 상대적으로 간단하다[10]. 따라서 본 연구에서는 Roe의 해법에 대한 재 유도와 함께 상대적으로 간단한 AUSM 기법을 비교하여 검토하였다.

3.1 실제 기체에 대한 Roe의 해법

이상 기체의 경우 압력은 보존 변수만의 함수로 나타낼 수 있으며, 밀도와 내부 에너지의 함수의 곱으로 간단하게 정리될 수 있으며, 플럭스 벡터 F는 보존변수 Q에 관한 1차 함수로써, 플럭스 분할 기법의 기본 조건이 되는 다음의 관계식이 성립한다.

$$F = A Q, \quad A = \frac{\partial F}{\partial Q}, \quad F(\lambda Q) = \lambda F(Q) \quad (29)$$

그러나 실제 기체의 경우 압력은 밀도와 온도의 비선형 함수가 되며, 보존변수의 함수로 간단히 표현되지 않는다. 즉, 플럭스 벡터 F는 보존변수 Q에 관한 1차 함수가 되지 않기 때문에 실제 기체에 대하여 플럭스 벡터 분할 기법이 기술적으로는 적용 가능할지라도 원칙적으로는 불가능하다는 것을 의미한다. 그러나 플럭스 분할 기법과 달리 Roe의 해법은 이 조건에 제약을 받지 않기 때문에 적용을 고려할 수 있다. Roe의 해법을 적용하기 위한 기본 조건은 다음과 같다[14].

$$1) \quad F_R - F_L = \bar{A}(Q_R, Q_L)(Q_R - Q_L)$$

$$2) \quad \bar{A}(Q, Q) = A(Q) \equiv \frac{\partial F}{\partial Q}, \quad Q_R = Q_L = Q$$

3) 실수의 고유값, 선형의 독립된 고유벡터

따라서 Roe 해법의 첫 단계는 Jacobian 행렬, 고유값, 고유벡터를 구하는 것이며, Jacobian 행렬과 고유값은 식 (21)과 식 (23)로 표현되므로 고유벡터와 고유벡터의 역벡터는 다음과 같이 표현된다.

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u & u+a & u-a \\ u^2 - \frac{p_\rho}{p_\epsilon} h + ua & H - ua \end{bmatrix} \quad (30)$$

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{p_\rho}{a^2} & p_e \frac{u}{a^2} & -\frac{p_e}{a^2} \\ \frac{p_\rho - \alpha u}{2a^2} & -\frac{p_e u + a}{2a^2} & \frac{p_e}{2a^2} \\ \frac{p_\rho + \alpha u}{2a^2} & -\frac{p_e u - a}{2a^2} & \frac{p_e}{2a^2} \end{bmatrix} \quad (31)$$

Roe의 해법에 대하여 위의 조건 (1)을 만족하는 평균값을 구할 수 있다는 전제하에, 수치 플럭스 함수는 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\widetilde{F}_{1/2} = \frac{1}{2}[F(Q_R) + F(Q_L) - |\delta F|] \quad (32)$$

여기서 인공 소산 항은 다음과 같다.

$$|\delta F| = P|A|P^{-1}\delta Q = P|A|\delta W = P|A|(P^{-1}M\delta V) \quad (33)$$

$$= |\lambda_1|\delta w_1 \begin{bmatrix} 1 \\ u \\ u^2 - \frac{p_\rho}{p_e} \end{bmatrix} + |\lambda_2|\delta w_2 \begin{bmatrix} 1 \\ u + a \\ H + ua \end{bmatrix} + |\lambda_3|\delta w_3 \begin{bmatrix} 1 \\ u - a \\ H - ua \end{bmatrix}$$

여기서, M은 보존 변수 Q의 원시 변수 V에 대한 Jacobian 행렬로 다음과 같다.

$$M = \frac{\partial Q}{\partial V} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ u & \rho & 0 \\ e_\rho & \rho u & e_p \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} u \\ \rho \\ p \end{bmatrix} \quad (34)$$

그리고 고유 변수의 변화량은 다음과 같다.

$$\delta W = \begin{bmatrix} \delta w_1 \\ \delta w_2 \\ \delta w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha\delta\rho - \beta/a^2\delta p \\ \frac{1}{2a^2}\{(1-\alpha)a^2\delta\rho + \rho\alpha\delta u + \beta\delta p\} \\ \frac{1}{2a^2}\{(1-\alpha)a^2\delta\rho - \rho\alpha\delta u + \beta\delta p\} \end{bmatrix} \quad (35)$$

여기서,

$$\delta\rho = \rho_R - \rho_L, \quad \delta u = u_R - u_L, \quad \delta p = p_R - p_L. \quad (36)$$

그리고 임시 변수는 다음과 같이 정의한다.

$$\alpha = \frac{p_e(h - e_\rho)}{a^2}, \quad \beta = p_e \cdot e_p \quad (37)$$

이 변수들은 이상 기체에 대해서는 1의 값을 갖는다. 그러나 실제 기체에 대해서는 압력과 전체 에너지의 미분항을 구한 후에 결정된다.

위의 전체 에너지 미분항들은 식 (34)의 원시 변수에 대한 미분으로부터 유도된다. 따라서, 상태 방정식은 이 경우에 온도만에 의해 정의되는 함수로 고려된다. 식 (37)의 에너지에 대한 미분항들은 압력의 미분항을 유도한 방식과 유사하게 유도된다. 압력의 미분항과 에너지의 미분항을

이용하여 임시 변수를 계산하면, α, β 모두 1의 값을 가짐을 증명할 수 있다.

$$\alpha \equiv 1, \quad \beta \equiv 1 \quad (38)$$

따라서 실제 기체에 대한 수치 플럭스의 유도는 압력의 미분항과 음속을 제외하고, 이상 기체의 경우와 동일하게 된다. 수치 플럭스의 모든 변수는 (36)을 제외하고, Roe의 해법에서 조건 (1)을 만족하는 평균값에 의해 결정된다.

3.2 실제 기체에 대한 Roe의 평균

현재, 조건 (1)을 만족하는 평균 상태는 정해지지 않았다. Roe의 평균이라고 불리는 평균값은 보존 변수 Q와 플럭스 함수 F가 Z라고 정의된 매개 변수의 2차 함수라는 발견을 근거로 하여 유도되어진다[14].

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ (e+p)u \end{bmatrix}, \quad Z = \sqrt{\rho} \begin{bmatrix} 1 \\ u \\ H \end{bmatrix} \quad (39)$$

이것은 이상기체일 경우 압력이 식 (21)과 같이 명백히 보존 변수의 양함수라는 사실에 근거하고 있다. 그러나 실제 기체일 경우에는 압력이 보존 변수의 단순한 양함수가 되지 않으며, 실제 기체에 대한 평균값의 일반적인 해는 존재하지 않는다. 따라서 이것을 해결하기 위한 유일한 방법은 근사를 이용하는 것이다. 이를 위하여, 압축성 계수와 그 미분항들이 셀 경계면에서 국부적으로 일정하다는 가정을 도입하게 된다. 그러면, 다음의 Roe의 평균 공식이 실제 기체에 대해서도 유효하게 적용할 수 있을 것이다.

$$\rho_{1/2} = \sqrt{\rho_L \rho_R}$$

$$u_{1/2} = \frac{\sqrt{\rho_R} u_R + \sqrt{\rho_L} u_L}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}} \quad (40)$$

$$H_{1/2} = \frac{\sqrt{\rho_R} H_R + \sqrt{\rho_L} H_L}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}$$

완전한 수치 플럭스 계산을 위하여 식 (40)에서의 평균값을 이용하여 토탈 엔탈피의 정의로부터 평균 온도를 계산할 수 있다. 온도가 밀도, 속도, 토탈 엔탈피에 대한 음함수이기 때문에 반드시 반복해법을 이용하여 계산하여야 한다.

IV. 열역학 음속 및 고유 음속의 비교

4.1 준일차원 노즐 유동 해석

실제 기체 효과를 적용한 해석의 정확성을 검증하기 위하여 간단한 노즐 유동에 대한 계산을

수행하였다. 사용된 노즐의 면적 관계식은 다음과 같다.

$$s(x) = 1.398 + 0.347 \tanh(0.8x - 4) \quad (41)$$

여기서 노즐의 입구는 $x=0$ 에 위치하고 출구는 $x=10$ 이다. 사용된 기체는 질소 (N_2)이고, 기체의 분자량은 28.01 g/mole, 비열비는 1.4 이다. 압력의 비선형성만을 고려하기 때문에, 위와 같은 일정한 비열비를 가정하였다. 초음속으로 유동이 유입되어 충격파 없이 유출되는 조건에 대하여 100개의 격자를 사용하였다. 이 조건에서 모든 고유 값은 양이므로 Rankine-Hugoniot 관계식을 이용하여 이론 해 (analytic solution)를 구할 수 있으므로, 반복 해법을 통하여 이론 해를 구한 후 전산 유체 해석 결과와 비교에 이용하였다. 전산 유체 해석에는 앞서 기술한 Roe의 해법과 더불어 고차 정확도를 유지하기 위하여 3차 정확도의 MUSCL-TVD (Monotone Upstream Centered schemes for Scalar Conservation Laws - Total Variable Diminishing) 기법을 이용하였다[16].

Fig. 3과 Fig. 4는 입구 유동 조건이 $P=100$ atm, $T=200$ K, $u=450$ m/s로 압축성 계수가 0.7898로 이상 기체에서 다소 먼 조건일 때의 결과이다. Fig. 3에서와 같이 수치 해법을 통한 결과와 해석해가 일치함으로부터 수치 해법의 정확성을 확인 할 수 있다. 수치 해법을 적용함에 있어서 사용된 고유 음속과 열역학 음속을 적용한 결과는 정확도에 있어 큰 차이를 보이지는 않았지만, Fig. 4의 결과에서 볼 수 있듯이 수렴성에 있어서 고유 음속을 사용한 계산 결과가 열역학 음속을 사용한 결과보다 25% 정도 반복 계산 시간이 줄어드는 것을 볼 수 있다.

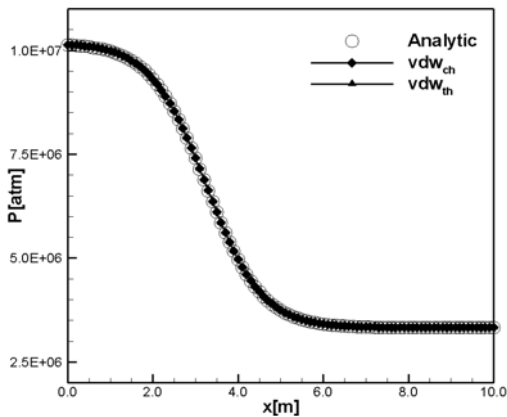


Fig. 3. Comparison of Pressure profiles for real gas EOS and analytical solution at far from ideal gas condition

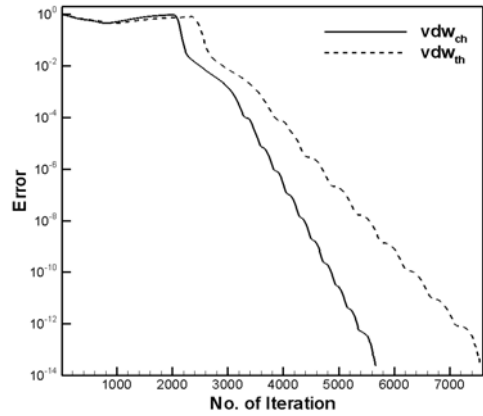


Fig. 4. Comparison of Convergence histories for Quasi-one dimensional nozzle flow computed by Characteristic speed of sound, Thermally speed of sound

4.2 충격파 관 문제에서의 비교

준 일차원 노즐 문제와 마찬가지로 충격파 관 문제에 대해서도 두 가지 음속의 영향을 살펴보았다. 압력비 10, 밀도비 8인 Sod의 충격파 관 문제에 대하여 열역학 음속과 고유 음속을 적용하여 계산하고 이를 이상 기체의 결과와 비교하였으며, Roe 기법과 AUSM 기법을 비교하였다.

Fig. 5는 $T=300$ K, $P=1$ atm인 이상 기체 조건에 대한 충격파 관을 해석한 결과이다. 결과에서 볼 수 있듯이 이 조건은 이상 기체로 볼 수 있는 조건이므로 고유 음속을 사용한 경우에 있어서는 이상 기체의 해석 결과와 거의 차이가 나지 않지만, 음속의 정의에 민감한 AUSM 기법에 열역학

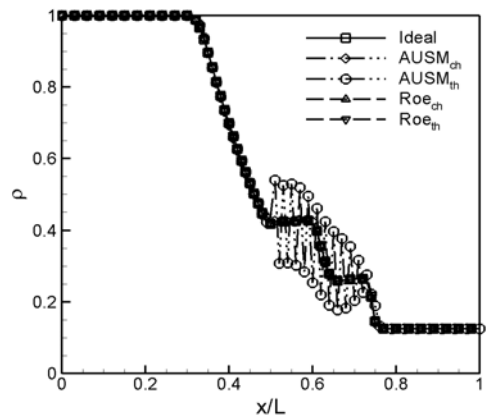


Fig. 5. Comparison of density profiles with characteristic speed of sound and thermally speed of sound at ideal gas condition

음속을 사용한 경우에는 특정한 경우에 한하여 음속의 작은 차이에 의하여 해가 진동하는 결과가 관찰되기도 하였다.

이상의 결과로부터 실제 기체 효과를 고려한 음속을 사용할 경우 계산의 효율성이나 해의 안정성 측면에서 열역학 음속 보다는 고유 음속을 사용하는 것이 나은 것으로 판단된다.

V. 인공 소산항의 수정에 대한 평가

실제 기체 상태 방정식을 전산 유체 해석에 반영함에 있어 가장 간단한 접근 방법은 인공 소산항 등의 수식화 과정이 필요한 부분은 그대로 두고 보존 변수로부터 원시 변수로의 재구성 과정에서 상태 방정식을 적용하는 방법이다. 특히 앞서 유도한 수정된 Roe 의 해법은 MUSCL 외삽에 의한 변수의 재구성 및 Roe 의 평균에 의한 평균값의 재구성 과정에서 반복 계산이 필요하여 많은 계산 시간이 요구되므로, 이 부분을 회피 할 수 있다면 더욱 편리할 수 있다. 따라서 이상 기체의 인공 소산 항을 그대로 이용한 해석 방법 (ideal 로 표시)과 새로운 수식화 과정에 의한 인공 소산항을 이용한 경우 (real 로 표시)를 1차원 문제에 대하여 비교하였다.

5.1 충격파 관에 대한 적용

첫 번째 적용문제로 Sod의 충격파 관 문제에서 질소를 작동 유체로 가정하고 100개의 격자점을 사용하여 계산하였다. 충격파 관 문제의 시간에 대한 정확한 결과를 위하여, 시간 적분에 대해 4차 정확도 Runge-Kutta 방법이 사용하였다. 비교를 위하여 AUSM 방법을 사용하였으며, AUSM 방법은 음속만을 수정하여 실제 기체에 대한 인공 소산 항을 수식화 할 수 있었다.

충격파 관의 고압부에 대한 기준 조건으로는 $T=300$ K, $P=0.1$ MPa를 사용하였다. Fig. 6은 100 시간 단계 후의 밀도 분포를 나타낸 것이다. 이 조건은 유동 조건이 이상 기체 상태와 크게 차이가 나지 않기 때문에 결과는 적절한 것으로 보여진다. 따라서 이상 기체 점성항이나 실제 기체 점성항은 거의 동일하다. Fig. 7은 표준화된 압축성 계수를 나타낸 것으로 이상 기체로부터 0.1% 이하로 벗어난 것을 보여준다.

두 번째 적용은 위와 동일한 압력과 밀도비를 고려하였으나, 고압부 기준 조건은 실제 기체 효과를 살펴보기 위하여 $T=150$ K, $P=5.0$ MPa로 설정하였다. Fig. 8은 Sod의 충격파 관 문제에 대한 밀도 분포를 나타낸 것이고 Fig. 9는 압축

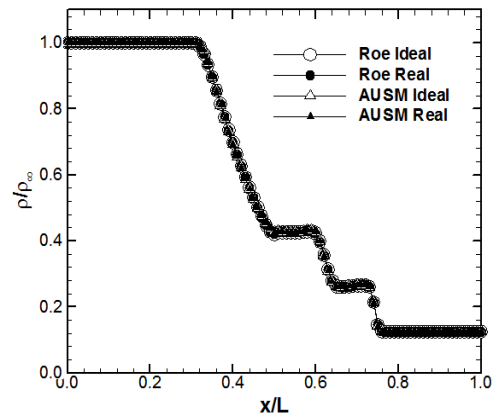


Fig. 6. Density profiles for Sod's shock-tube problem

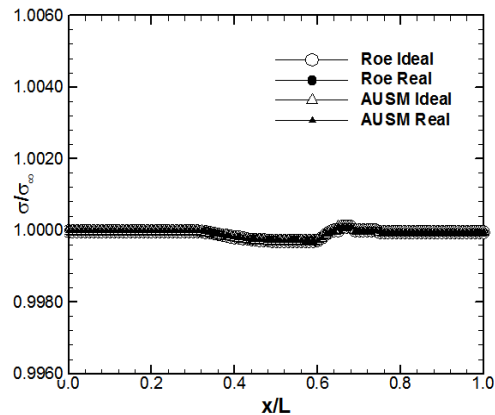


Fig. 7. Normalized profiles of the compressibility factor for Sod's shock-tube problem

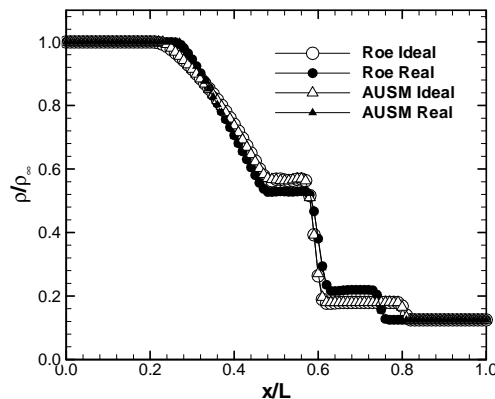


Fig. 8. Density profiles for Sod's shock-tube problem at a low temperature and high-pressure condition

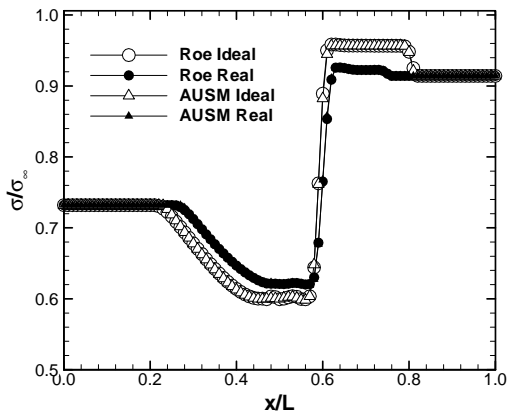


Fig. 9. Normalized profile of the compressibility factor at a low temperature and high pressure condition

성 계수를 나타낸 그림이다. 이 결과는 이상 기체를 벗어난 조건에서 파의 전파 특성이 이상 기체와는 상당히 다르게 나타남을 보여 준다. 이 결과에서 Roe의 해법과 AUSM 해법은 거의 동일한 결과를 보여 주어 두 방법 모두 실제 기체에 적용함에 무리가 없음을 알 수 있다. 그러나 두 해법 모두에서 파의 전파 속도나 값의 크기를 볼 때 인공 소산 항에 실제 기체 수정을 반영한 방법과 이상 기체의 소산 항을 그대로 이용한 결과는 차이를 보이고 있어 인공 소산항을 수정하지 않고 기존의 해법을 그대로 이용하는 것은 무리가 있음을 알 수 있다. 인공 소산 항에 실제 기체 수정을 반영하는 경우 AUSM 기법은 음속만 수정하면 되기 때문에 편리하고, 계산 시간 면에서 장점이 있을 수 있으나 앞 절에 해의 진동이 있을 수 있는 결과를 볼 때 사용에 주의가 필요한 것으로 보인다.

5.2 준 일차원 노즐 유동에 대한 적용

새로이 유도된 해법의 수렴성을 파악하기 위하여 준 초음속 유입 아음속 유출 조건을 가지는 일차원 노즐 유동을 살펴보았다. 입구 마하수는 1.25, 출구 마하수는 0.45 이다. 작동 유체로는 이산화탄소 (CO₂), 입구 조건으로는 T=4,000 K, P=20 MPa 로 설정 하였다. 충격파 관과 같은 수치적 방법을 이용하였으며 CFL수는 0.9로 설정 하였다. 충격파 위치를 비교하기 위하여 이상 기체의 결과를 함께 도시하였다. Fig. 10은 수렴된 밀도 분포를 보여 주며 팽창부에 형성된 충격파를 살펴볼 수 있다. 이 결과에서 주어진 조건에

대하여 실제 기체 효과를 반영한 해석은 충격파의 위치가 다소 후퇴하여 있으며 밀도 수준도 다소 낮음을 알 수 있다. 이 결과에서 충격파 포착 능력에 있어 새로이 유도된 해법도 전혀 문제가 없음을 알 수 있으나 인공 소산 항을 수정하지 않은 결과는 해석의 진행에는 별 문제가 없지만, 해의 결과는 실제 기체 효과를 반영한 해법과 다소 차이가 남을 알 수 있다.

해법의 수렴성을 비교한 그림은 Fig. 11에 나타내었다. 이 결과는 이상 기체 해법과 비교하여 실제 기체 수정이 이루어지 해법은 10% 가량 느린 수렴성을 보여 주었지만 대체로 우수한 수렴성을 보여 주었다고 판단된다. 그러나 실제 기체 수정을 적용하지 않은 해법은 수렴 경향은 비슷하지만 수렴성에서 상당한 문제를 보여주고 있다. 이상의 결과를 살펴 볼 때 실제 기체 압축성 유동 해석에서 정확성과 수렴성의 모든 측면에서 인공 소산항의 수정은 필수적이라고 여겨진다.

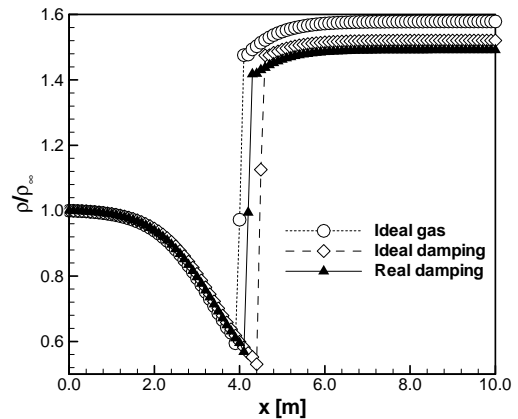


Fig. 10. Density profiles for quasi-one dimensional nozzle flow

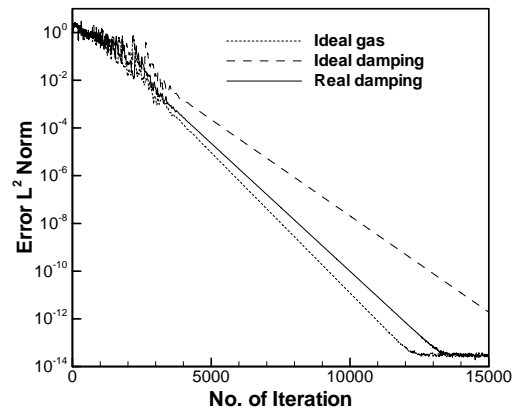


Fig. 11. Convergence histories for quasi-one dimensional nozzle flow

VI. 다차원 유동으로의 확장

다음 단계로, 이차원 유동에 대하여 실제 기체 수정을 적용하였다. 이차원 수치 플럭스의 실제 기체 수정은 일차원의 경우와 동일한 방법으로 1) 압력 미분항의 수정, 2) 음속의 수정, 3) Roe의 평균값, 4) 보존 변수에서 원시 변수의 계산에 실제 기체 상태 방정식 반영의 내용으로 수정하였다. 일차원 해석과 다른 점이라면 효율적인 해석을 위해 적용된 LU-SGS 내재적 해법에서 압력 미분항의 수정을 반영한 것이다. 본 해석은 2차원 확장에 의한 해석 코드 작동 특성만을 살펴보기 위한 것으로 무딘 물체 주위의 초음속 유동 및 축소 확대 노즐 유동에 대하여 적용하여 보았다. 반구형 형상에 대한 축대칭 초음속 유동의 조건으로는 $T=300\text{ K}$, $P=0.6\text{ MPa}$ 인 입구 조건으로 마하수 10의 질소 유동을 고려하였으며 고온 기체 효과는 고려하지 않았다. Fig. 12는 이상 기체의 결과와 비교를 위한 압력 분포도로 이차원 궁형 충격과 포착 특성도 문제가 없음을 보여준

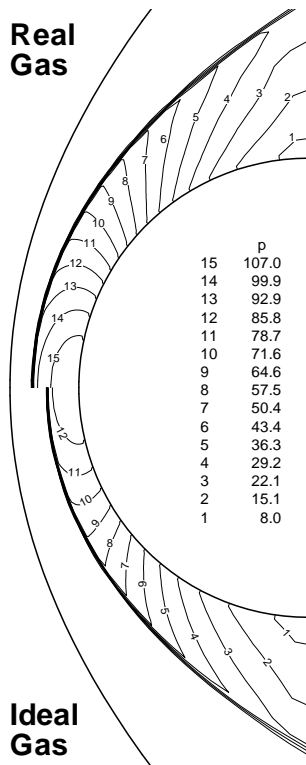


Fig. 12. Comparison of normalized pressure contour plots for real gas and ideal gas solutions

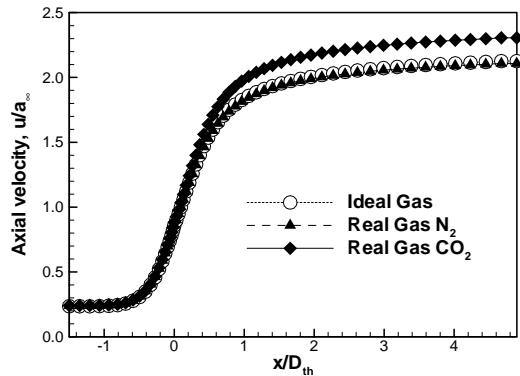


Fig. 13. Axial velocity distribution along the centerline of a convergent-divergent nozzle

다. 이 결과에서 실제 기체의 충격과 위치가 이상기체 보다 돌출된 이유는 충격과 후방의 고압 조건에서 압축성 계수가 1보다 큰 값을 가지므로 압력이 이상기체 보다 크게 예측된 결과로 여겨진다.

다차원 유동의 다음 적용 대상은 면적비 52.5인 중형의 수축-확산 노즐이며 초음속 완전 팽창을 가정하였다. 작동유체로는 이산화탄소와 질소를 고려하였으며, 초기 조건은 $T=300\text{ K}$, $P=0.6\text{ MPa}$ 을 가정하였다. Fig. 13은 수축-확산 노즐의 중심선을 따르는 축방향 속도분포를 나타낸 것이다. 이 결과로부터 주어진 조건에서 질소는 이상기체와 거의 동일한 거동을 보이지만 이산화탄소에서는 압축성 계수가 1보다 작아지는 실제 기체 효과가 나타나 팽창 속도가 이상기체보다 크게 나타남을 알 수 있다. 이상의 결과에서 실제 기체 해석 방법을 다차원으로 확장함에도 별무리가 없는 것으로 보이며, 향후 구체적인 문제에 대한 적용을 통하여 검증이 수행될 것이다.

VII. 결론

압축성 유체 해석에 필수적인 음속의 정의에 대하여 다시 한 번 살펴보고, 열역학적으로 정의되는 음속 (이하, 열역학 음속)과 특성 변수 해석을 통하여 정의되는 음속 (이하, 고유 음속)을 유도하여 비교하여 보았다. 압력과 온도, 밀도가 선형적으로 비례하지 않는 실제 기체의 경우 열역학 음속과 고유 음속은 다소의 차이가 있음을 Van der Waals 상태 방정식에 대하여 확인하였다. 이 과정에서 Roe의 근사 리만 해법을 다시

유도하여 실제 기체 효과의 수정이 필요한 부분을 살펴보았다. Roe의 근사 리만 해법과 AUSM 플릭스 분할 기법에 열역학적 음속과 특성 음속을 적용하여 비교한 경우 대체로 큰 차이는 없으나 특정한 열역학 음속은 AUSM 방법의 경우 불안정성을 유발하기도 하는 것으로 보인다. 수치 기법의 수학적 일관성의 측면에서도 특성 음속을 이용하는 것이 타당한 것으로 보인다. 아울러 인공 소산 항에 대한 실제 기체 수정은 정확도는 물론 수렴성의 측면에서도 필수적이라고 여겨진다. 이상의 방법을 이차원 문제에 적용하여 다차원 유동에서도 일관된 확장이 가능함을 확인 하였으며 계속된 연구에서 구체적인 문제에 대한 적용을 통하여 검증을 수행할 것이다.

후 기

본 연구는 정부의 재원으로 한국과학재단이 지원하는 우주기초원천기술개발사업 (과제번호 2008-2006283)과 방위사업청 및 국방과학연구소가 지원하는 수중운동체 특화연구센터 (과제번호 SM-22)의 연구비 지원을 받았으며, 그 지원에 감사드립니다.

참고문헌

- 1) Black, W. Z., and Hartley, J.G., *Thermodynamics, 2nd Edition*, Harper Collins, 1991, New York.
- 2) Edwards, J. R., Franklin, R.K. and Liou, M.-S., "Low-Diffusion Flux Splitting Methods for Real Fluid Flows with Phase Transitions", *AIAA Journal*, Vol. 38, No.9, 2000, pp. 1624-1633.
- 3) Anderson, J. D. Jr., *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*, McGraw-Hill, 1989.
- 4) Meng, H and Yang, V., "A Unified Treatment of General Fluid Thermodynamics and Its Application to a Preconditioning Scheme", *Journal of Computational Physics*, Vol. 189, 2003, pp. 277-304.
- 5) Mottura, L., Vigevano, L. and Zaccanti, M., "An Evaluation of Roe's Scheme Generalizations for Equilibrium Real Gas Flows", *Journal of Computational Physics*, Vol. 138, 1997, pp. 354-399.
- 6) Vinokur, M. and Liu, Y., "Nonequilibrium

Flow Computations. 1. Analysis of Numerical Formulations of Conservation Laws", *Journal of Computational Physics*, Vol. 83, 1989, pp. 373-397.

7) Grossman, B. and Cinnella, P., "Flux Split Algorithms for Flows with Non-equilibrium Chemistry and Vibrational Relaxation", *Journal of Computational Physics*, Vol. 88, 1990, pp. 131-168.

8) Shuen, J. S., Liou, M. S. and van Leer, B., "Inviscid Flux-Splitting Algorithms for Real Gases with Non-equilibrium Chemistry", *Journal of Computational Physics*, Vol. 90, 1990, pp. 371-395.

9) Glaister, P., "An Analysis of Averaging Procedures in a Riemann Solver for Compressible Flows of a Real Gas", *Computers & Mathematics with Applications*, Vol.33, No 3, 1997, pp. 105-119.

10) Edwards, J. R., Franklin, R. K. and Liou, M.-S., "Low-Diffusion Flux-Splitting Methods for Real Fluid Flows with Phase Transitions", *AIAA Journal*, Vol. 38, No. 9, 2000, pp. 1624-1633.

11) Bruce E. Poling, Jhon M. Prausnitz, John P. O'connell, *The Properties of Gases and Liquids, 5th Edition*, McGraw-Hill, 2000.

12) Hirsch, C., *Numerical Computation of Internal and External Flows, Vol. 2*, Wiley, New York, 1990.

13) 원수희, 정인석, 신재렬, 최정열, "무딘 물체 주위 고마하수 유동해석의 문제점과 해결책", *한국항공우주학회지*, 제34권 제6호, 2006년 6월, pp. 18~28.

14) Roe, P. L., "Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes", *Journal of Computational Physics*, Vol. 43, 1981, pp. 357-372.

15) Liou, M. S., and Steffen, C. J., "A New Flux Splitting Scheme", *Journal of Computational Physics*, Vol. 107, 1993, pp. 23-39.

16) Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion Part I: Validation", *AIAA Journal*, Vol. 38, No 5, May 2000, pp. 1179-1187.