

## 열적, 화학적 비평형 유동해석에서 내재적 시간 적분법의 비교 Comparison of Implicit Time Integration Schemes for the Analysis of Thermal and Chemical Non-equilibrium Flow

◦ 이창호<sup>1)</sup>, 박승오<sup>2)</sup>

Chang Ho Lee and Seung-O Park

In this study, we adopt the point symmetric Gauss-Seidel relaxation algorithm to obtain the steady state solution of the Navier-Stokes equations for the thermal and chemical nonequilibrium flow of air. All of the inviscid, viscous flux Jacobians and thermochemical source Jacobians are included in the implicit part. Numerical simulation is performed for the thermal and chemical nonequilibrium flow over blunt body and computational results are presented. The convergence history and CPU time of the present computation are compared with the LU-SGS scheme which employs the approximate Jacobians.

### 1. 서론

극초음속 비행체의 외부유동이나 추진기관내의 유동해석등에는 고온기체로 인한 열제기체효과의 고려가 필수적이다. 이것은 기본적인 유동 방정식에 기체분자의 해리와 결합, 진동에너지의 여기(excitation), 이온화등 복잡한 물리적 현상의 모델을 포함하는 해석을 의미한다. 이와같은 효과들은 수치해석에서 생성항(source term)으로 존재하여 stiffness 문제를 야기시켜 수치해석을 어렵게 한다. Bussing and Murman[1]은 유동방정식과 화학종 방정식을 결합한 수치해석에서 생성항의 stiffness 문제를 내재적 방법으로 해결할 수 있음을 보였다. Park and Yoon[2]은 LU-SGS 내재적 시간적분법을 적용하여 열적, 화학적 비평형 유동해석을 하였는데, 생성항의 Jacobian 행렬의 역행렬은 계산하는 방법을 사용하였다. Eberhardt and Imlay[3]는 Jacobian 행렬을 근사 대각화하여 원래 LU 방법이 갖는 장점을 갖도록 하였다. 즉 내재항 행렬의 대각항을 scalar화 하여 역행렬을 계산하지 않아도 되므로 매우 빠른 계산이 가능하다. 이들이 제안한 화학적 생성항의 대각화 방법은 물리적인 반응시간을 제대로 반영하지 못해 연소문제등에는 부적합 것으로 발표된 바 있다[4]. 내재적 시간적분법에서 Ok[5]은 비압축성 Navier-Stokes 방정식의 수치해석에 point SGS 방법을 적용하여 LU-SGS 보다 빠른 수렴을 보여 주었다. 이 방법은 LU-SGS 방법이 근사된 비점성 플럭스 Jacobian 만을 사용하는 것과 달리 upwind scheme 에 근거한 비점성 플럭스 Jacobian 과 점성 플럭스 Jacobian 을 사용하고, 내재항 대각항의 역행렬만을 계산하도록 하여 내재적 방법의 엄밀성과 효율성을 갖도록 한 것이다. 본 연구에서는 열적, 화학적 비평형 유동해석에서 내재적 시간적분법으로 point SGS 방법과 LU-SGS 방법을 적용하여 두 방법의 수렴성을 파악하고자 한다. 열화학적 생성항의 Jacobian 은 LU-SGS 방법에서는 Eberhardt 의 방법을 사용하고, point SGS 방법에서는 가능한 근사시키지 않은 식을 만들어서 사용하였다.

### 2. 지배 방정식

5개 화학종( $N_2, O_2, NO, N, O$ )으로 구성된 공기의 유한 화학반응과 병진, 회전에너지 모드는 열적 평형, 진동에너지 모드는 열적 비평형인 시스템을 다룬다. 2-온도 모델을

<sup>1)</sup> 한국과학기술원 항공우주공학과

<sup>2)</sup> 한국과학기술원 항공우주공학과

도입하여 병진온도와 회전온도는 같고, 진동에너지를 나타내는 진동온도는 모든 분자가 같은 값을 갖는 것으로 가정한다. 열적, 화학적 비평형 시스템의 2차원/축대칭 Navier-Stokes 방정식을 보존형으로 쓰면 다음과 같다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial(F-F_v)}{\partial x} + \frac{\partial(G-G_v)}{\partial y} + \alpha(H-H_v) = W \tag{1}$$

여기서  $\alpha=0$ 은 2차원,  $\alpha=1$ 은 축대칭 유동이다. 보존변수 벡터 및 비점성 플럭스 벡터는 다음과 같다.

$$Q = \begin{Bmatrix} \rho_i \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho e_v \end{Bmatrix} \quad F = \begin{Bmatrix} \rho_i u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho E + p)u \\ \rho e_v u \end{Bmatrix} \quad G = \begin{Bmatrix} \rho_i v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho E + p)v \\ \rho e_v v \end{Bmatrix} \tag{2-4}$$

점성플럭스 벡터, 열화학적 생성항( $W$ ) 및 축대칭에 의한 생성항( $H, H_v$ ) 벡터는 각각 다음과 같다.

$$F_v = \begin{Bmatrix} -j_{ix} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x \\ -q_{vx} \end{Bmatrix} \quad G_v = \begin{Bmatrix} -j_{iy} \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{yx} + v\tau_{yy} - q_y \\ -q_{vy} \end{Bmatrix} \tag{5-9}$$

$$W = \begin{Bmatrix} w_j \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ w_v \end{Bmatrix} \quad H = \frac{1}{y} \begin{Bmatrix} \rho_i v \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ (\rho E + p)v \\ \rho e_v v \end{Bmatrix} \quad H_v = \frac{1}{y} \begin{Bmatrix} -j_{iy} \\ \tau_{xy} - \frac{2}{3}y \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu v}{y} \right) \\ \tau_{yy} - \tau_{\theta\theta} - \frac{2}{3} \frac{\mu v}{y} - \frac{2}{3}y \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\mu v}{y} \right) \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y - \frac{2}{3} \frac{\mu v^2}{y} - \frac{2}{3}y \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\mu v^2}{y} \right) - \frac{2}{3}y \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu \mu v}{y} \right) \\ -q_{vy} \end{Bmatrix}$$

여기서  $E$ 와  $e_v$ 는 각각 단위 질량당 전에너지 및 진동에너지이고,  $w_j$ 는 각 화학종의 질량 생성률,  $w_v$ 는 진동에너지 모드의 생성항이다. 열전달률은 다음과 같이 정의하는데, 여기서  $T$ 는 병진온도,  $T_v$ 는 진동온도를 나타낸다.

$$q_{x_k} = -(k_i + k_r) \frac{\partial T}{\partial x_k} - k_v \frac{\partial T_v}{\partial x_k} + \sum_{i=1}^{NS} j_{ixk} h_i \tag{10}$$

혼합기체의 점성계수와 병진, 회전 및 진동 열전도계수는 참고문헌[6]의 방법을 사용하여 계산하고 확산계수는 Schmit 수를 0.5로 가정하여 계산하였다. 기체는 열적 완전기체의 혼합물로 가정하여 다음과 같은 상태방정식으로 표현된다.

$$p = \sum_{i=1}^{NS} \rho_i R_i T_i = \rho RT \tag{11}$$

### 2.1 생성항

다음과 같이 5 개 화학종에서 이온화를 제외한 17 개의 화학 반응식을 다룬다.



화학반응률 계수는 2 온도 모델로 표현된 Dunn and Kang 의 모델 [7]을 사용한다.

진동에너지 생성항은 다음과 같다.

$$w_v = Q_{T-v} + Q_{V-D} \quad (13)$$

여기서 첫 번째 항은 진동-병진에너지 상호작용에 의한 에너지 전달을 의미하며, 두 번째 항은 진동-해리의 상호작용을 의미한다.

$$Q_{T-v} = \sum \frac{\rho_i (e_{vi}^* - e_{vi})}{\tau_i} \quad Q_{V-D} = \sum w_i e_{vi} \quad (14)$$

진동이완시간  $\tau_i$ 는 Millikan and White 의 모델 [8]을 사용한다.

### 3. 수치 해법

지배방정식을 일반곡선좌표계  $(\xi, \eta)$ 로 변환하여 셀중심 유한체적법을 적용하여 계산한다. 비점성 수치플릭스는  $\xi$  방향은 AUSM 으로,  $\eta$  방향은 Roe 스킴으로 계산하는데, 원서변수를 셀경계면에 외삽하는 MUSCL 기법을 적용하여 2 차의 공간정확도를 얻을 수 있도록 하고, minmod 제한자를 사용한다. 점성 플릭스는 중앙차분식으로 계산한다.

#### 3.1 내재적 시간 적분법

지배방정식의 공간이산화식에 Euler backward implicit 식을 적용하고, 이식에 Newton iteration 방법을 적용하면 시간에 대해 정상상태(steady state) 계산을 하는 경우 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\left[ \frac{I}{J\Delta t} + \left( \frac{\partial R}{\partial Q} \right)^n \right] \Delta Q^n = -R^n(Q) \quad (15)$$

여기서  $\Delta Q^n = Q^{n+1} - Q^n$  이고,  $R$  은 잔류벡터이다. 왼쪽의 내재항에서 잔류벡터의 Jacobian 을 평가할때 비점성 플릭스를 공간 1 차정확도로 하면 잔류벡터의 계산에는 5 개의 계산점만이 영향을 주게 되므로 다음과 같은 식이 된다.

$$C_1 \Delta Q_{i,j}^n + C_2 \Delta Q_{i-1,j}^n + C_3 \Delta Q_{i,j-1}^n + C_4 \Delta Q_{i+1,j}^n + C_5 \Delta Q_{i,j+1}^n = -R_{i,j}^n \quad (16)$$

이식의 왼쪽 행렬은 block penta-diagonal 이 되어 직접 계산하는 것은 너무 어렵게 된다. 따라서 본 연구에서는 point 개념의 symmetric Gauss-Seidel 방법을 적용하여 이식을 풀도록 한다. 즉 계산점  $(i, j)$  의 모든 항들은 오른쪽으로 옮겨서 전 계산영역을 대칭이 되게 forward sweep 과 backward sweep 하여 계산함으로써 새로 계산된 값들이 계산 과정에 반영되게 한다.

Forward sweep

$$C_1 \Delta Q_{i,j}^n = -R_{i,j}^n - C_2 \Delta Q_{i-1,j}^n - C_3 \Delta Q_{i,j-1}^n \quad (17)$$



backward sweep

$$C_1 \Delta Q_{i,j}'' = C_1 \Delta \dot{Q}_{i,j}'' - C_4 \Delta Q_{i+1,j}'' - C_5 \Delta Q_{i,j+1}'' \quad (18)$$

### 3.2 Point SGS 방법

내재항의 잔류벡터 계산에서 비점성 플럭스를 Steger-Warming 스킴으로 계산하고, 점성 플럭스는 혼합미분항을 무시하면 플럭스 Jacobian 으로 구성된 각 계수는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{I}{J\Delta t} - A_{i-1/2,j}^- + A_{i+1/2,j}^+ - B_{i,j-1/2}^- + B_{i,j+1/2}^+ + A_{v_{i-1/2,j}} + A_{v_{i+1/2,j}} + B_{v_{i,j-1/2}} + B_{v_{i,j+1/2}} - C_{i,j} \\ C_2 &= -A_{i-1/2,j}^+ - A_{v_{i-1/2,j}} \quad C_3 = -A_{i,j-1/2}^+ - A_{v_{i,j-1/2}} \\ C_4 &= A_{i+1/2,j}^- - A_{v_{i+1/2,j}} \quad C_5 = A_{i,j+1/2}^- - A_{v_{i,j+1/2}} \end{aligned} \quad (19)$$

여기서  $A, B$ 는 비점성 플럭스 Jacobian 이며,  $A_v, B_v$ 는 점성 플럭스 Jacobian 이고,  $C$ 는 열화학적 생성항 벡터  $W$ 의 Jacobian 으로 다음과 같이 계산한다.

$$C = \frac{\partial W}{\partial Q} = \frac{\partial W}{\partial Q} \Big|_{T, T_v} + \frac{\partial W}{\partial T} \Big|_{T_v} \frac{\partial T}{\partial Q} + \frac{\partial W}{\partial T_v} \Big|_T \frac{\partial T_v}{\partial Q} \quad (20)$$

### 3.2 LU-SGS 방법

이 방법은 계수 행렬을 대각화 근사하는 것으로 각 계수는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{I}{J\Delta t} + \sigma(A) + \sigma(B) - C_{i,j} \\ C_2 &= -A_{i-1,j}^+ \quad C_3 = -B_{i,j-1}^+ \\ C_4 &= A_{i+1,j}^- \quad C_5 = B_{i,j+1}^- \end{aligned} \quad (21)$$

여기서  $\sigma = \beta r(A)$  이며  $\beta \geq 1$ ,  $r$ 은 플럭스 Jacobian 의 spectral radius 이다. 그리고  $A^\pm$ 는 양의 값 또는 음의 고유값을 갖도록 근사시킨다. 계수  $C_1$  에서 행렬의 대각항만이 남게 하기 위해 Eberhardt 는 Jacobian  $C$ 를 다음과 같이 근사시킨다.

$$C \cong -diag\left(\frac{1}{\tau_i}\right) \quad \frac{1}{\tau_i} = \gamma \left[ \sum_{j=1}^{NS} \left( \frac{\partial w_i}{\partial \rho_j} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (22)$$

$\gamma$ 는 이완상수이다.

## 4. 계산 및 결과

자유류가 arc jet 유동조건인 반구(hemi-sphere) 형상물체의 열적, 화학적 비평형 유동 해석을 계산모델로 하였다 [9]. 반구의 반지름은 1 m 이고 벽면온도는 1000 K 로 일정하며 non-catalytic 조건으로 하였다. 격자수는 벽면과 평행방향은 30, 벽면수직방향은 80 으로 하였으며, 자유류 조건은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} u_\infty &= 2780 \text{ m/s} \quad p_\infty = 140.3 \text{ N/m}^2 \quad T_\infty = 2050 \text{ K} \quad T_{v\infty} = 2050 \text{ K} \\ c_{N2_\infty} &= 0.7367 \quad c_{O2_\infty} = 0.1443 \quad c_{NO_\infty} = 0.067 \quad c_{N_\infty} = 0.0 \quad c_{O_\infty} = 0.052 \end{aligned}$$

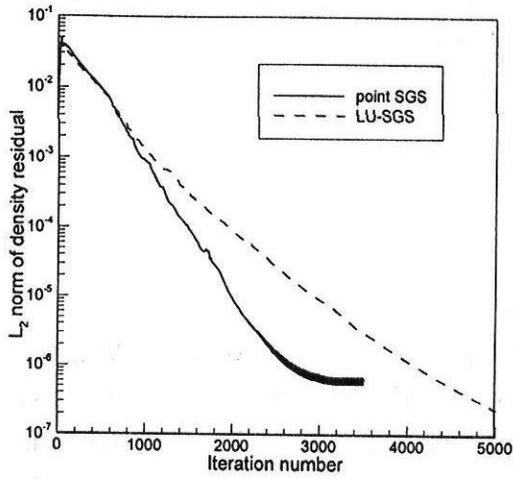
계산은 point SGS 방법과 LU-SGS 방법을 동일한 조건에서 수행하였다. 수렴판정은 혼합기체 밀도의  $L_2$  norm으로 하고, CFL 수는 10으로 하였다. Fig.1a는 x 축을 반복계산 수로 하였을 때의 2 가지 방법의 수렴과정을 보여준다. point SGS는 LU-SGS보다 빠르게 에러가 감소하다가 약 3000 번의 반복계산에서 감소가 정지하였다. 반면에 LU-SGS는 point SGS 보다는 계산횟수가 많지만 에러는 계속 감소하였다. Point SGS는 계산과정에서 이완계수를 사용하지 않았는데 참고문헌[10]에 의하면 비점성 및 점성 플럭스 Jacobian이 동결상태로 되면 수렴을 방해하는 것으로 알려져 있어 적절한 이완계수의 도입이 필요한 것으로 보인다. 또한 Jacobian의 구성에서 사용한 가정조건의 검토도 필요하다. Fig.1b는 x 축을 CPU time으로 했을 때의 수렴과정을 보여준다. LU-SGS는 대각항의 scalar inversion을 하므로 계산시간이 훨씬 적게 소요되어 같은 에러로 감소하는 데는 point SGS보다 약 30%가 감소하였다. Fig.2는 정체유선에서의 산소원자의 질량분률 분포 및 병진, 진동온도 분포를 나타낸 것이다. 충격파를 지나면서 산소분자의 해리로 인해 원자의 질량분률은 증가하다가 벽면부근에서 거의 일정한 값을 보여준다. 즉 Fay-Riddell 식의 가정조건인 동결상태가 유지되고 있음을 알 수 있다. 진동온도는 충격파를 지나면서 병진온도보다 낮은 값을 보이다가 병진온도와 같은 값을 갖는데 이것은 진동에너지가 평형상태로 도달됨을 알 수 있다. Fig.3은 벽면에서의 열전달률을 Fay and Riddell 식의 결과와 비교한 것이다. 병진, 회전 및 진동 에너지에 의한 각 열전달률의 분포와 전체 열전달률의 분포를 나타내고 있으며, 전체 열전달률은 Fay and Riddell 식의 결과와 잘 일치하고 있다.

## 5. 결론

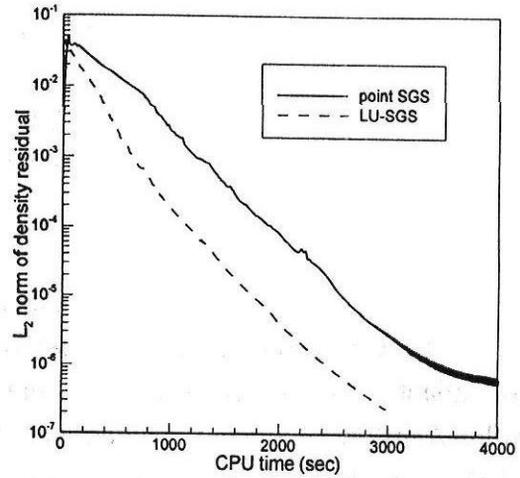
몽투한 물체주위 유동의 열적, 화학적 비평형 Navier-Stokes 방정식의 수치해석에서 내재적 시간적분법으로 point SGS 방법과 LU-SGS 방법을 적용하였다. Point SGS는 엄밀한 Jacobian의 적용으로 LU-SGS보다 적은 반복횟수가 소요되지만 완전기체인 경우보다 증가된 방정식 수로 인해 역행렬의 계산에 시간이 많이 소요되었으며, 효율적인 계산을 위한 Jacobian의 구성은 연구가 더 필요하다. Eberhardt의 근사 Jacobian 방법은 일부 단점이 발표되었지만 LU 방법의 장점을 유지시켜 빠른 계산을 보여주었다.

## 참고문헌

- [1] Bussing, T.R.A. and Murmann, E.M., AIAA J. 26-9 (1988), p1070.
- [2] Park, C. and Yoon, S., J. Spacecraft, 28-1 (1991), p 31.
- [3] Eberhardt, S. and Imlay, S., J. Thermophysics and Heat Transfer, 6-2 (1992), p208.
- [4] Ju, Y., AIAA J. 33-8 (1995), p1418.
- [5] Ok, H., Ph.D Thesis, Univ. of Washington, 1993
- [6] Gupta, R.N. et al., NASA-RP 1232, (1990)
- [7] Ma, Y. and Zhong, X., AIAA paper 99-0416 (1999)
- [8] Park, C., J. Thermophysics and Heat Transfer, 7-3 (1993), p385.
- [9] Goken, T., J. Thermophysics and Heat Transfer, 10-2 (1996), p234
- [10] "Computational Methods in Hypersonic Aerodynamics", Edited by Murthy, K.S., Kluwer Academic Publishers, 1991



(a)



(b)

Fig. 1 Convergence history of point SGS and LU-SGS scheme

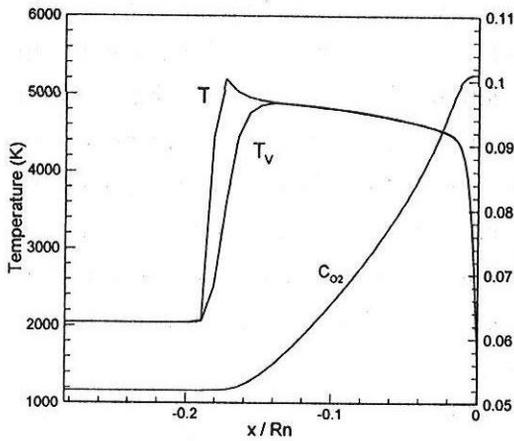


Fig. 2 Temperature and mass fraction distributions along the stagnation line

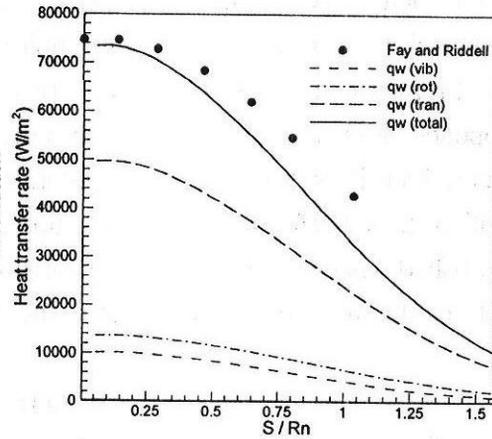


Fig. 3 Heat transfer rate distributions along the wall