

확률밀도함수를 사용한 개선된 난류 확산모형에 관한 연구

손창호
기계공학부

<요약>

난류 유동장내의 스칼라 확산의 문제를 해석하기 위해 최근 널리 사용되기 시작하고 있는 확률밀도함수를 사용한 모형들에서 문제점으로 남아 있는 분자수준의 확산에 관한 모형을 개선하기 위하여 Langevin 방정식을 기반으로 하여 조건 평균 스칼라 소산률을 도입함으로써 스칼라의 경계조건을 만족시키는 새로운 모형을 제안하였다. 이 모형을 시험하기 위하여 통계적으로 균일한 천이 난류장 내의 통계적으로 균일한 단일 스칼라의 확률밀도함수의 발달과정을 계산하여 알려진 직접수치모사(DNS)와 비교한 결과 기존의 모형들에 비해 정성적인 특성은 물론 정량적으로도 매우 잘 일치하는 결과를 얻을 수 있었다.

A Study on the Improved Turbulent Diffusion Model using Probability Density Function

Chang Ho Son
Division of Mechanical Engineering

<Abstract>

The use of probability density function in the modeling of scalar diffusion problem in turbulent flow has been wide spread in recent years. But, there remains an enduring problem in models for molecular scale diffusion term. In this study, a new model is proposed which is built from the Langevin equation and is modified by introducing conditional mean scalar dissipation to satisfy scalar boundedness. This model has been tested for the case of statistically homogeneous scalar field embeded on the decaying homogeneous turbulence. It has been found that the result compares well with DNS data.

기호설명

- u : 속도 벡터
- \hat{u} : 유체입자의 속도 벡터
- V : 속도 벡터에 대응하는 표본공간 변수
- ϕ : 스칼라 농도
- ϕ_{\min}, ϕ_{\max} : 스칼라가 가질 수 있는 최소 및 최대값
- $\hat{\phi}$: 유체입자의 스칼라 농도
- ψ : 스칼라 농도에 대응하는 표본공간 변수
- x : 위치 벡터
- f, f_ϕ : 확률밀도함수
- S : 각 스칼라의 source 항
- ε : 난류 에너지 소산률
- ε_ϕ : 단일 스칼라 소산률
- τ : 난류 소산 시간척도
- τ_ϕ : 스칼라 소산 시간척도
- W, W_ϕ : 서로 독립적인 Wiener 과정
- C_ϕ : 모형 상수
- $\langle \dots \rangle$: …의 양상을 평균

I. 서론

난류 유동 중에 포함되어 있는 불순물의 농도, 유체의 온도 등의 스칼라량(scalar)이 확산되어 가는 과정을 예측하는 것은 공해물질의 확산이나 난류 화염의 연소 등 많은 공학적인 문제를 해석하는데 있어서 필수적인 요소이다. 그러나 이러한 확산 과정은 난류의 불규칙성과 스칼라량의 문자 단위 확산이 복합된 문제로 그 구조가 매우 복잡하며, 비교적 낮은 레이놀즈수와 극히 단순한 초기 및 경계조건을 가지는 특수한 경우 직접 수치 모사법인 DNS(direct numerical simulation)를 적용하여 지배방정식의 정밀한 해를 직접 구할 수 있으나, 높은 레이놀즈수와 복잡한 경계조건을 가지는 실용적인 난류 확산의 문제를 예측하기 위해서는 적절한 모형(model)을 사용하는 것이 불가피하다.

현재 사용되고 있는 난류 확산의 모형에는 여러 가지가 있으나, 연소에서와 같이 화학반응이 수반되는 경우, 유동장과 스칼라장의 많은 통계적인 정보가 서로 관계하게 되어 저차의 모멘트만을 사용하는 일반적인 모형으로는 적절한 해석이 어려운 것으로 알려져 있다. 따라서, 이러한 경우 모든 차수의 모멘트 정보를 포함하고 있는 확률밀도함수(PDF)를 사용한 모형을 사용하는 것이 보다 적절할 것이다.⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾ 그러나, 일반적인 모멘트 방법(Reynolds 응력 모형 등)을 적용할 때 여러 개의 방정식(또는 종속 변수)에 독립변수의 개수가 비교적 적은 것과는 달리, PDF 전달방정식(transport equation)은 한 개이며 여기에 나타나는 독립변수의 개수는 매우 많아서 일반적인 차분(difference)에 의한 수치해석의 기법을 적용하기는 어렵다. 이 문제는 Pope⁽⁴⁾이 유체입자 모사(particle simulation)의 기법을 도입함으로서 해결되었으며, 그 이후 PDF

방법은 화학반응이 수반되는 난류 유동에 실용적으로 적용할 수 있는 가장 좋은 방법으로 자리잡았다.

PDF 방법을 사용하는데 있어서의 가장 큰 장점은 지배방정식의 난류 대류항과 화학반응에 의한 생성항을 모형을 사용하지 않고 완벽하게 취급할 수 있다는 것이며, 따라서 저차의 모멘트 방법에서 일반적으로 사용되는 난류 확산계수와 같은 구배에 의한 확산(gradient diffusion) 개념의 모형이 필요하지 않으며, 그 결과 압력 구배항과 스칼라량의 분자수준 확산에 대한 모형만을 필요로 한다. Pope과 그 동료들은 GLM(generalized Langevin Method)이라 부르는 난류 속도장에 대한 PDF 모형을 제안하였으며, 이는 모멘트 방법과는 달리 비교적 다양한 유형의 유동장에 대해 만족스러운 결과를 주는 것으로 알려져 있다.⁽⁴⁾⁽⁵⁾⁽⁶⁾ 이에 반해, 스칼라량의 분자수준 확산에 대해서는 아직은 만족스러운 수준의 모형이 없는 형편이다. 본 연구에서는 이러한 분자 확산의 새로운 모형을 제시하고, 통계적으로 균일한 등방성 난류 유동장에서의 균일한 스칼라장의 PDF 천이과정을 Eswaran과 Pope⁽⁷⁾의 직접수치모사(Direct Numerical Simulation, DNS)의 결과와 비교하여 그 성능을 검토할 것이다.

II. 난류 속도와 스칼라 농도의 통합 확률밀도함수 전달방정식

유동장내 임의의 점에서의 유체의 상태는 세 개의 속도 성분 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ 와 σ 개의 스칼라 농도들 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_\sigma)$ 로 완전히 기술될 수 있다. 따라서 물리적 공간 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ 와 시간 t 에서의 난류장과 스칼라 농도장의 1점 통계정보는 \mathbf{u} 와 $\boldsymbol{\phi}$ 의 통합 확률밀도함수(joint probability distribution function)인 $f(\mathbf{V}, \boldsymbol{\phi}; \mathbf{x}, t)$ 로 완벽하게 표현되며, 여기에서 \mathbf{V} 와 $\boldsymbol{\phi}$ 는 각각 물리적 공간에서 정의된 임의변수 \mathbf{u} 와 $\boldsymbol{\phi}$ 에 대응하는 표본공간 변수이다.

유동장의 천이는 질량, 운동량과 스칼라량의 보존방정식들로 지배되며, 비압축성 뉴턴 유체의 경우 다음과 같다.

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} + u_j \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j} = \gamma_\alpha \frac{\partial^2 \phi_\alpha}{\partial x_j \partial x_j} + S_\alpha(\boldsymbol{\phi}) \quad (3)$$

여기에서 ν 는 동점성계수, p 는 압력이고 γ_α 와 S_α 는 각각 α 번째 스칼라의 분자 확산계수와 생성률(production rate)이며, (3)식에 나오는 그리스 문자 α 에 대해서는 항들

의 합의 의미가 적용되지 않는다.

위의 식들에 표준적인 방법을 적용하여 \mathbf{u} 와 ϕ 에 대한 PDF 전달방정식을 구성하면

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - V_i \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial V_i} \{ \langle A_i | V, \phi \rangle f \} - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \{ \langle \Theta_\alpha | V, \phi \rangle f \} \quad (4)$$

와 같이 되며, 여기에서 A_i 와 Θ_α 는 각각 (2)식과 (3)식의 오른쪽 변이며 $\langle \dots | \dots \rangle$ 는 수직 막대의 오른쪽에 명시된 사건이 일어나는 조건 아래에서 수직 막대 원쪽 임의변수의 평균값(기대값)을 의미한다. 예를 들어, $\langle A_i | V, \phi \rangle$ 는 $\langle A_i | \mathbf{u} = V, \phi = \phi \rangle$ 를 간략하게 표시한 것으로 유체입자의 속도와 스칼라 농도가 각각 $\mathbf{u} = V$ 와 $\phi = \phi$ 인 조건에서 임의변수 A_i 의 평균값을 의미한다. A_i 와 Θ_α 의 조건평균은 (2)와 (3)식으로부터 얻어지며, 압력 p 를 평균압력 $\langle p \rangle$ 와 순간 변동성분 p' 으로 나누면

$$\begin{aligned} \langle A_i | V, \phi \rangle &= - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} - \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \mid V, \phi \right\rangle + \left\langle \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_j} \mid V, \phi \right\rangle \\ \langle \Theta_\alpha | V, \phi \rangle &= \left\langle \gamma_\alpha \frac{\partial^2 \phi_\alpha}{\partial x_i \partial x_j} \mid V, \phi \right\rangle + S_\alpha(\phi) \end{aligned} \quad (5)$$

으로 나타낼 수 있으며, 여기에서도 α 에 대해서는 항들의 합의 의미가 적용되지 않는다.

따라서 (4)식은

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + V_i \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial V_i} + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \{ S_\alpha(\phi) f \} \\ = - \frac{\partial}{\partial V_i} \left\{ \left\langle - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_k} \mid V, \phi \right\rangle f \right\} + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\{ \left\langle \gamma_\alpha \frac{\partial^2 \phi_\alpha}{\partial x_i \partial x_j} \mid V, \phi \right\rangle f \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

으로 표현될 수 있으며, 여기에서 α 가 두 번 이상 나타나는 항들은 α 를 1에서 0까지 변화시키면서 더한 것을 의미한다.

(6)식의 원쪽변 항들은 근사시키지 않은 완전한 표현으로, 각각 PDF의 시간 변화율, 물리적 공간에서 속도에 의한 PDF 수송(transport), V -공간에서 평균압력 구배에 의한 PDF 수송 그리고 ϕ -공간에서 화학반응에 의한 PDF 수송을 나타낸다. 그러나 (6)식의 오른쪽변 항들은 적절한 모형을 필요로 하며, 각각 V -공간에서 압력 변동(pressure fluctuation)과 점성에 의한 PDF 수송, 그리고 ϕ -공간에서 스칼라량의 분자확산에 의한 PDF 수송을 나타낸다. 따라서 (6)식의 오른쪽변을 알 경우 (6)식을 풀어서 f 를 구할 수 있다.

III. 유체입자의 시간 증분형 모형

PDF 방법은 비선형인 난류 대류항과 화학반응의 항을 모형 없이 정확히 취급할 수 있다는 큰 장점을 가지고 있으며, 이것은 현재까지 어떤 다른 방법으로도 이를 수 없는 점이다. 이는 PDF 전달방정식이 기본 방정식의 종속변수를 독립변수로 바꿈으로써 비선형 과정이 선형의 항들로 변환되어 이루어진다. 그 결과, PDF 전달방정식은 높은 차수의 차원(3개의 공간 좌표, 3개의 속도 성분, 0개의 스칼라 종류 및 시간)을 가지게 되며 이 방정식의 해를 얻기 위해 유한차분법과 같은 표준적인 수치해법을 적용한다는 것은 생각하기 어렵다. 따라서 PDF 방법에서 사용할 모형은 수치적인 해법과 관련 지워 개발되어야 한다. Pope⁽⁴⁾은 이를 위하여 유체입자 모사기법(Monte-Carlo 방법을 사용하는 확률과정 모형)을 제안하였고 큰 차원의 문제를 해결하는데 매우 성공적인 것으로 평가되었으며, 현재로서는 PDF 방법을 실용적으로 적용할 수 있는 유일한 방법으로 알려져 있다.

유동 문제에 Monte-Carlo 방법을 자연스럽게 적용하기 위하여 유체입자를 따르는 양들에 대해 생각하기로 하자. $\hat{x}_i(\mathbf{x}_0, t)$ 를 시간이 t_0 일 때 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ 에 위치해 있던 유체입자의 시간 $t(t_0 \leq t)$ 에서의 위치라 하고, 유체입자의 속도와 스칼라 농도를 각각 $\hat{u}_i(\mathbf{x}_0, t)$ 과 $\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}_0, t)$ 라 하자. 즉,

$$\begin{aligned}\hat{u}_i(\mathbf{x}_0, t) &= u_i[\hat{x}(\mathbf{x}_0, t), t] \\ \hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}_0, t) &= \phi_\alpha[\hat{x}(\mathbf{x}_0, t), t]\end{aligned}\quad (7)$$

이다.

미소한 시간 간격 dt 사이에 유체입자의 위치 변화량은 정의에 의해

$$d\hat{x}_i = \hat{u}_i dt \quad (8)$$

이고, (2)와 (3)식으로부터 시간 dt 사이의 유체입자의 속도증분 $d\hat{u}_i$ 와 스칼라 농도증분 $d\hat{\phi}_i$ 는 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$d\hat{u}_i = \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \langle u_i \rangle}{\partial x_j \partial x_j} \right] dt + \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_j} \right] dt \quad (9)$$

$$d\hat{\phi}_\alpha = \left[\gamma_\alpha \frac{\partial^2 \langle \phi_\alpha \rangle}{\partial x_j \partial x_j} \right] dt + \left[\gamma_\alpha \frac{\partial^2 \phi'_{\alpha}}{\partial x_j \partial x_j} \right] dt + S_\alpha(\hat{\phi}) dt \quad (10)$$

윗식에서 $u_i = \langle u_i \rangle + u'_i$, $\phi_\alpha = \langle \phi_\alpha \rangle + \phi'_{\alpha}$ 이고 대괄호 속의 값은 $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}$

에서 정의된 값이며 a 에 대해서는 항들의 합의 의미가 적용되지 않는다.

Lagrangian 접근방식을 사용하는 PDF 방법은 2개의 분리된 모형들, 즉 점성과 압력변동에 의한 유체입자의 속도증분(velocity increment, (9)식)에 대한 모형과 분자확산에 의한 유체입자의 스칼라 농도증분((10)식)에 대한 모형을 필요로 한다.

1. 속도 모형

속도증분에 대한 모형으로는 분자의 브라운 운동과 유체입자의 무작위적인 운동 사이의 유사성을 출발점으로 하여 Langevin 방정식을 이용한 Chung⁽⁸⁾의 모형과 Navier-Stokes 방정식을 출발점으로 하여 Langevin 방정식을 일반화한 Pope⁽⁴⁾의 모형(GLM) 등이 있다. 이 중에 특히 GLM은 난류의 비등방성과 평균 속도구배 등의 역할을 포함하고 있어서 다양한 종류의 난류 유동에 성공적으로 시험되었고 현재 표준적인 모형으로 자리잡고 있으며 그 형태는 다음과 같다.

$$d\hat{u}_i = \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \langle u_i \rangle}{\partial x_j \partial x_j} \right] dt + G_{ij} (\hat{u}_j - \langle u_j \rangle) dt + (C_0 \langle \varepsilon \rangle)^{1/2} dW_i \quad (11)$$

여기에서, $\langle \varepsilon \rangle$ 은 난류 에너지의 평균 소산율(mean dissipation rate)이고 $W_i(t)$ 는 기본적인 확률과정(stochastic process)인 등방성 Wiener 과정이다. 또한, C_0 는 Kolmogorov의 관성영역(inertial subrange)에서의 법칙을 따르는 구조함수(structure function)로부터 얻어지는 양의 상수이며, G_{ij} 는 난류의 지역 평균값들로 표현되는 2차원 텐서 함수로 자세한 표현은 Haworth와 Pope의 논문에서 찾아 볼 수 있다.⁽⁴⁾

2. 스칼라 모형

유체입자의 스칼라 농도의 변화는 전적으로 분자수준의 확산에 의해 일어난다. 그러나 분자 확산은 난류에 의해 크게 왜곡되는 스칼라 농도 구배에 의해 지배되며 그 결과 전반적인 분자 확산의 상승을 초래한다. 이러한 분자 확산에 대한 만족할 만한 모형의 부재는 PDF 방법을 사용하여 난류 속에서의 물질 혼합을 기술하는데 있어서 주요한 장애로 파악되고 있다.

새로운 모형을 개발하려 할 때, 그 모형에 의해 나타날 결과를 명확히 평가하기 위해서 매우 단순한 유형의 유동에 대해 생각하는 것이 필요하다. 따라서 본 연구에서는 통계적으로 균일한 난류 유동장 속의 통계적으로 균일한 스칼라 농도장에 대하여 생각하기로 한다. 즉 스칼라 PDF 인 f_ϕ 를 포함한 모든 1 점 통계치는 물리적인 공간의 좌표 x 에 무관하다. 또한, 단순성을 위하여 단일 스칼라 성분만이 있는 경우를 생각하고 화학반응은 포함시키지 않기로 한다. 이 경우, 스칼라 PDF f_ϕ 의 전달방정식은

$$\frac{\partial f_\phi}{\partial t} = -\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} [\langle \varepsilon_\phi | \phi \rangle f_\phi] \quad (12)$$

와 같이 단순히 표현될 수 있으며, $\langle \varepsilon_\phi | \phi \rangle$ 는 조건부 평균 스칼라 소산율이다.

이와 같은 단순한 문제에서는 임의의 초기 PDF가 시간이 지남에 따라 종 모양의 가우스 분포(Gaussian distribution)와 매우 유사한 형태로 변화되어 가며, 난류 분자 확산의 모형은 이러한 기본적인 성질을 가져야 할 것이다. 여기에서 앞으로 모형에서 사용될 난류 소산 시간척도(time scale) τ 와 스칼라 소산 시간척도(time scale) τ_ϕ 를 다음과 같이 정의하고, 기존의 난류 분자 확산 모형들의 문제점에 대해 간략히 살펴보기로 한다.

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{\langle u'_i u'_j \rangle}{2 \langle \varepsilon \rangle} \\ \tau_\phi &= \frac{\langle \phi'^2 \rangle}{2 \langle \varepsilon_\phi \rangle} \end{aligned} \quad (13)$$

기존의 가장 단순한 스칼라 분자 확산(농도증분)의 모형은 Dopazo와 O'Brien이 제안한 LSME(Linear Mean Square Estimation) 모형으로 다음과 같다.⁽⁹⁾

$$d\hat{\phi} = -\frac{\hat{\phi} - \langle \phi \rangle}{2 \tau_\phi} \quad (14)$$

이 모형은 유체입자의 농도가 지역 평균농도와의 차이에 비례하여 지역 평균값으로 접근해 간다는 물리적 의미를 가지며 매우 단순하다는 장점을 가지고 있으나, 임의의 초기 PDF는 시간이 지나도 그 형상을 그대로 유지하는 결정적인 결함을 가지고 있다.

확률혼합모형(Stochastic Mixing Model)은 Curl⁽¹⁰⁾이 제안한 이후 많은 수정을⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾ 거쳐 현재 가장 널리 사용되고 있는 모형으로 LSME 모형의 결함을 피할 수 있다. 한 개의 유체입자 쌍의 스칼라 농도를 $\hat{\phi}_1$ 과 $\hat{\phi}_2$ 라 할 때, 짧은 시간 dt 사이에 그 유체입자들의 스칼라 농도가 $\hat{\phi}_1(t + dt) = \hat{\phi}_2(t + dt) = \frac{1}{2}[\hat{\phi}_1(t) + \hat{\phi}_2(t)]$ 으로 될 확률은 dt/τ_t 이고, 농도의 변화가 없을 ($d\hat{\phi}_1 = d\hat{\phi}_2 = 0$) 확률이 $1 - (dt/\tau_t)$ 이 되도록 유체입자의 쌍(pair)들을 무작위로 선택하여 유체입자들 사이의 혼합을 모사하는 방식이다. 여기에서 τ_t 는 시간척도로 스칼라 농도 분산(variance)의 소멸률(decay rate)이 정확히 얻어질 수 있도록 적절히 선정되어야 한다. 이 모형을 따르는 유체입자는 이산된(discrete) 시간에 불연속적으로 농도가 변하므로 실제 유체입자의 거동과는 전혀 다르지만 실제 계의 상태와 유사한 확률계를 구성함으로써 임의의 초기 PDF를 종 모양의 곡선으로 접근시킨다. 그러나 이 곡선은 가우스 분포곡선과는 상당히 다르며, 특히 가우스

분포의 커토시스는 3인 사실에 비해 이 분포곡선의 커토시스(kurtosis)는 무한대이다. 이 기본적인 모형은 여러 방법을 사용하여 가우스 분포에 더 가깝게 되도록 수정되어 사용되고 있으나, 근본적으로 모든 유체입자가 혼합과정에 참여할 기회를 충분히 가지지 못한다는 점에서 볼 때 긴 꼬리와 큰 커토시스를 갖는 PDF의 문제점은 계속 남아 있다.

3. 새로운 스칼라 모형의 제안

속도증분의 모형인 GLM의 기본이 되는 Langevin 방정식은 임의의 초기 PDF를 가우스 분포로 접근시킨다. 따라서 스칼라 농도증분의 모형에서도 이 방정식을 이용한다면 확률 혼합모형이 보여주는 문제점을 극복할 수 있을 것으로 기대되며, 다음과 같은 형태의 Langevin 모형을 생각해 볼 수 있다.

$$d\hat{\phi} = -\frac{G}{\tau_\phi}(\hat{\phi} - \langle \phi \rangle)dt + [C_\phi \langle \varepsilon_\phi \rangle]^{1/2} dW_\phi \quad (15)$$

여기에서 G 와 C_ϕ 는 결정되어야 할 양의 모형 상수이고, W_ϕ 는 독립적인 Wiener 과정이다. (10)식의 오른쪽 첫째 항은 LSME 모형과 같은 스칼라 농도의 결정된 변화량(deterministic change)을 나타내며, 두 번째 항은 평균값이 0이고 분산이 $C_\phi \langle \varepsilon_\phi \rangle dt$ 인 무작위 변화량을 나타낸다. 이 모형은 확률 혼합모형과는 달리 변화가 연속적이며 실제 유체입자의 스칼라 농도 변화와 유사하다. 상수 G 는 초기 PDF가 시간이 지남에 따라 δ -함수로 접근해 가는 속도를 결정하고, C_ϕ 는 임의의 PDF가 가우스 분포의 형상으로 변화해 가는 속도를 결정한다. 이 모형은 정성적으로 바람직한 대부분의 특성을 지니고 있지만, 한 가지 문제점을 안고 있다. 그것은 일반적으로 스칼라량이 가질 수 있는 최대와 최소의 경계값이 존재하는데 반해, 이 모형에 의해 최종적으로 지향해 가는 PDF인 가우스 분포는 모든 값의 스칼라량에서 확률밀도를 가진다는 점이다.,

위에서 언급된 Langevin 모형의 문제점을 해결하기 위해 다음과 같은 일반적인 확률 확산과정(stochastic diffusion process)을⁽¹⁴⁾⁽¹⁵⁾ 살펴보기로 한다.

$$d\hat{\phi}(t) = M(\hat{\phi}, t)dt + [D(\hat{\phi}, t)]^{1/2} dW_\phi \quad (16)$$

여기에서 표류항 M 과 확산항 D 는 $\hat{\phi}$ 와 t 의 함수이며, D 는 음이 아니다. 이 식은 D 가 일정하고 M 이 $\hat{\phi}$ 의 선형 함수인 특별한 경우, Langevin 방정식으로 된다. 새로 제안될 모형에서 M 은 유체 입자의 스칼라 농도가 ϕ -공간에서 평균값을 향하여 표류하는 것을 나타내며, Langevin 모형에서 사용된 것을 그대로 사용하기로 한다. 확률 확산과정에서 시간에 따른 $\hat{\phi}$ 의 궤적은 연속적이므로 $\hat{\phi}$ 가 주어진 경계값 $\hat{\phi} = \phi_{\min}$ 이나 $\hat{\phi} = \phi_{\max}$ 의 밖으로 벗어나기 위해서는 이를 경계값들 중 하나를 지나야 한다. $\hat{\phi}$ 가 경

계값 밖으로 벗어나도록 만드는 항은 확산항이므로 $D(\hat{\phi}, t)$ 를 $\hat{\phi}$ 의 경계값과 그 바깥에서 0이 되도록 선택한다면 시간이 흐르더라도 $\hat{\phi}$ 가 주어진 경계값 밖으로 벗어나는 일이 일어나지 않을 것으로 기대해 볼 수 있다. 그러나 이것은 충분한 조건은 아니며 정확하게 말하자면 최소 경계치 근처에서 근사적으로 $D \sim (\hat{\phi} - \phi_{\min})^m$ 의 형태를 가지고 $m > 1$ 이어야 한다.⁽¹⁴⁾ 이것은 최대 경계치 근처에서도 비슷하게 성립된다. 따라서 이러한 성질을 만족시키는 적당한 함수 D 를 찾을 수 있다면 $\hat{\phi}$ 가 경계치 밖으로 벗어나는 일 없이 그 PDF가 시간이 지남에 따라 가우스 분포와 비슷한 형태로 접근하도록 만들 수 있을 것이다.

한 편, 물리적 공간에서 난류 유동 속의 스칼라장은 연속적이고 미분 가능하므로, 임의의 순간에 물리적 공간에서 $\hat{\phi} = \phi_{\min}$ 또는 $\hat{\phi} = \phi_{\max}$ 지점의 스칼라 구배는 항상 0이다. 이 사실은 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} = \phi_{\min} \rangle = \langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} = \phi_{\max} \rangle = 0$ 으로 이어지며, 여기에 덧붙여 함수 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle$ 가 $m > 1$ 의 성질을 가지고 있다고 가정하면 (15)식에서 $\langle \varepsilon_\phi \rangle$ 를 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle$ 로 대체함으로써 다음과 같은 확률 확산과정에 근거한 바람직한 모형을 얻을 수 있다.

$$d\hat{\phi} = -\frac{G}{\tau_\phi}(\hat{\phi} - \langle \phi \rangle)dt + [C_\phi \langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle]^{1/2}dW_\phi \quad (17)$$

이 모형이 완성되려면 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle$ 이 함수 형태로 알려지거나 ε_ϕ 에 대한 추가적인 모형을 필요로 한다. 본 연구에서는 복잡성과 과다한 수치 계산을 피하기 위하여 전자를 선택하기로 한다.

초기에는 2종 δ -함수 형태의 PDF를 가지는 통계적으로 균일한 스칼라장에 대하여 O'Brien과 Jiang은 사상법(mapping closure)을 적용하여 다음과 같은 조건부 스칼라 구배 평균 (또는 조건 평균 스칼라 소산을 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle$)의 엄밀해를 얻었다.⁽¹⁶⁾

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle &= A(t) \cdot E(\hat{\phi}) \\ &= A(t) \cdot \exp \left[-2 \left\{ \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{\phi_{\max} - 2\hat{\phi} + \phi_{\min}}{\phi_{\max} - \phi_{\min}} \right) \right\}^2 \right] \end{aligned} \quad (18)$$

여기에서 $A(t)$ 는 시간만의 함수이고 $E(\hat{\phi})$ 는 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle$ 의 모양을 결정하는 함수이다. 이 결과는 DNS 계산 결과와 매우 잘 일치하는 것으로 확인되어 있으며, 경계값 근처에서 $m > 1$ 이므로 $D(\hat{\phi}, t)$ 의 필요한 조건을 충족시킴을 알 수 있다. 이 식은 모든 경우에 유효한 조건부 스칼라 평균 소산을 나타내는 것은 아니지만, 새로 제안할 모형은 단

순히 모형에 불과할 뿐 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle$ 의 정확성이 필수적인 요소라는 근거는 없으며 실제로 대부분의 스칼라 확산은 초기에 2중 δ -함수 형태의 PDF를 가지므로 (17)식의 $\langle \varepsilon_\phi | \hat{\phi} \rangle$ 을 위의 표현식으로 대체하는 것을 고려할 수 있다. 위의 논의에 근거해 다음과 같은 새로운 모형을 제안하기로 한다.

$$d\hat{\phi} = -\frac{G}{\tau_\phi}(\hat{\phi} - \langle \phi \rangle)dt + [a(t)C_\phi \langle \varepsilon_\phi \rangle E(\hat{\phi})]^{1/2}dW_\phi \quad (19)$$

여기에서 $a(t) = A(t)/\langle \varepsilon_\phi \rangle$ 이며, 앞으로 결정되어야 할 시간의 함수이다.

식(18)로부터 스칼라 PDF 전달방정식을 유도하면

$$\frac{\partial f_\phi}{\partial t} = \frac{G}{\tau_\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} [(\phi - \langle \phi \rangle) f_\phi] + \frac{1}{2} a(t) C_\phi \langle \varepsilon_\phi \rangle \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} [E(\phi) f_\phi] \quad (20)$$

으로 되며, 이 식에 ϕ 와 $(\phi - \langle \phi \rangle)$ 를 각각 곱한 후 ϕ 의 전구간에 걸쳐 적분하면 다음과 같은 관계식을 얻는다.

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \phi \rangle}{dt} &= 0 \\ \frac{d\langle \phi'^2 \rangle}{dt} &= -2\frac{G}{\tau_\phi} + a(t) C_\phi \langle \varepsilon_\phi \rangle \int_{-\infty}^{\infty} E(\phi) f_\phi(\phi; t) d\phi \end{aligned} \quad (21)$$

이들 중, 첫째 식은 통계적으로 균일한 스칼라장에 대해 당연히 성립된다. 그러나 둘째 식은 스칼라 평균 소산율의 2배가 되어야 하므로 다음과 같이 G 가 결정된다.

$$G = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} C_\phi a(t) \int_{-\infty}^{\infty} E(\phi) f_\phi(\phi; t) d\phi \quad (22)$$

임의의 스칼라장에서 조건 평균 스칼라 소산율의 실제 값은 일반적으로 식(18)과 다를 수 있으므로 $a(t)$ 는 임의의 시간의 함수로 정할 수 있으나, 식(18)을 도입한 원 뜻을 살리도록 정하기로 한다. 즉,

$$\langle \varepsilon_\phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \varepsilon_\phi | \phi \rangle d\phi = A(t) \int_{-\infty}^{\infty} E(\phi) d\phi \quad (23)$$

이므로

$$a(t) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} E(\phi) f_\phi(\phi; t) d\phi \right]^{-1} = \langle E(\hat{\phi}) \rangle^{-1} \quad (24)$$

가 되고, 따라서 $G = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} C_\phi$ 로 결정된다.

IV. 결과

통계적으로 균일한 난류장 속의 균일한 단일 스칼라장의 PDF 천이는 ϕ 와 t 만으로 결정된다. 따라서, 이와 같은 단순한 경우에는 독립변수가 두 개 뿐이므로 일반적인 유한차분법을 사용하여 PDF 전달방정식을 직접 풀어 PDF의 천이과정을 조사할 수 있다. 이 경우, 위에서 도입한 새 스칼라 모형은 다음과 같은 스칼라 PDF 전달방정식으로 표현된다.

$$\frac{\partial f_\phi}{\partial t} = \frac{1}{\tau_\phi} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} C_\phi \right) [(\phi - \langle \phi \rangle) f_\phi] + \frac{1}{2} C_\phi a(t) \langle \varepsilon_\phi \rangle \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} [E(\phi) f_\phi] \quad (25)$$

이 모형을 평가하기 위하여 비감쇠 균일 등방성 난류장 속의 균일 스칼라장 천이를 계산하여 Eswaran과 Pope의 DNS 계산 결과와의 비교를 시도하였다. 계산을 위한 초기의 PDF는 <Fig.1>과 같이 Eswaran과 Pope이 보고한 결과 중 가장 이른 시간의 자료를 사용하였다. 그들이 사용한 PDF의 실제 초기조건은 2중 δ -함수를 가공하여 부드럽게 펼친 형상으로, 원래 의도했던 스칼라의 경계 -1 과 1이 다소 확대되어 있었기 때문에 본 모형을 사용한 계산에서는 각각 -1.3 과 1.3이 사용되었다. 계산중 각 시간 증분마다 $E(\phi) \cdot f_\phi(\phi; t)$ 를 적분하여 $a(t)$ 를 구하였으며 여기에서 나오는 3중 대각선 행렬을 풀어 f_ϕ 를 구하였다. 모형상수 C_ϕ 는 2.0에서 5.0 까지 1.0 간격으로 변화시켜가면서 계산하였지만 PDF 천이 계산의 결과는 모두 DNS의 결과와 비교적 잘 일치하여 모형상수의 선정에 따른 민감도가 매우 작음을 알 수 있었다. 이 와 함께 스칼라 경계의 제한을 두지 않은 단순한 Langevin 모형도 함께 계산하여 비교하였다.

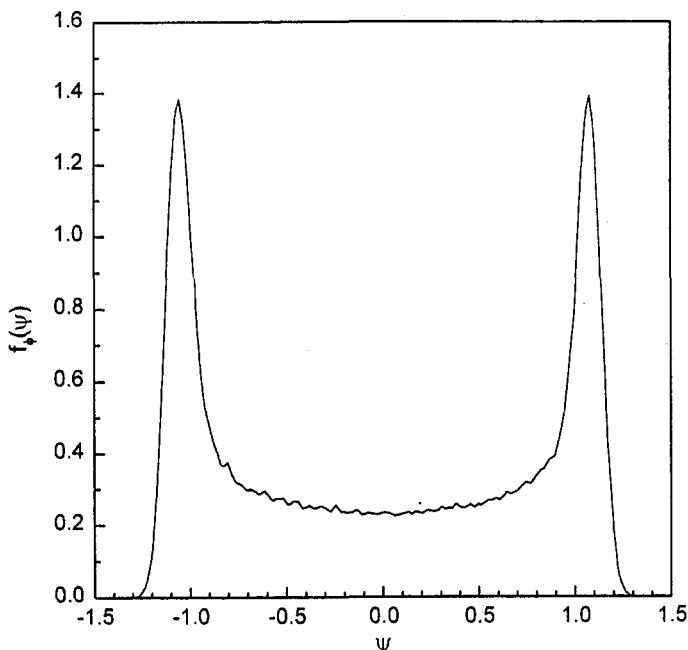
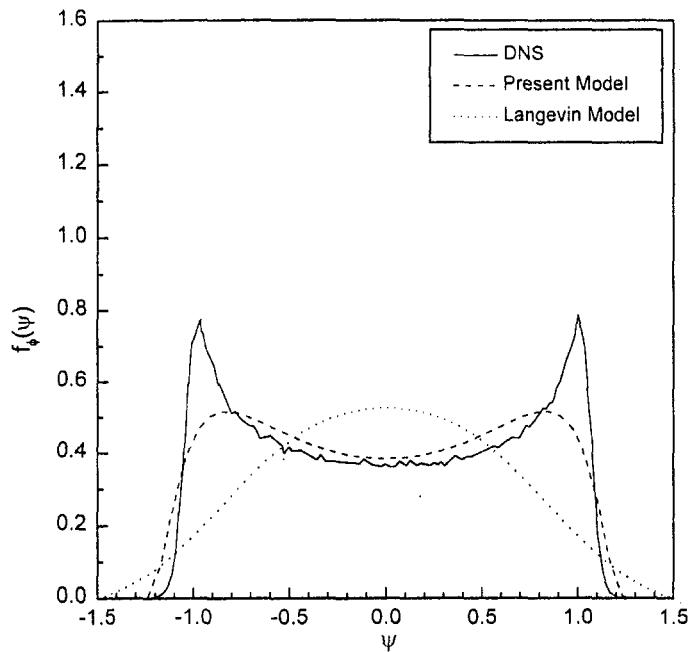
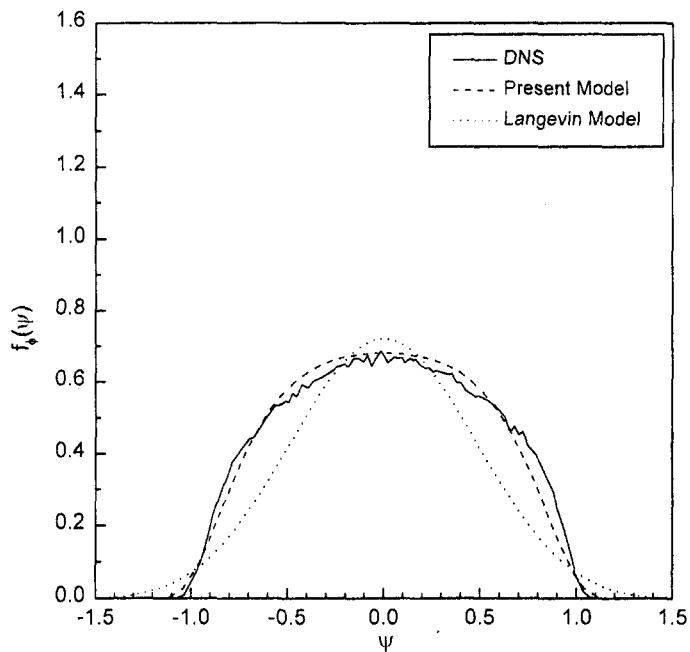
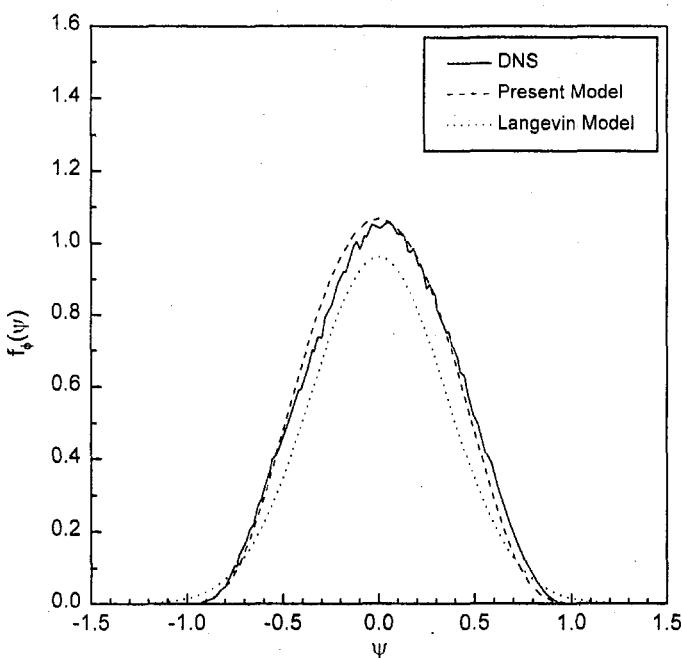
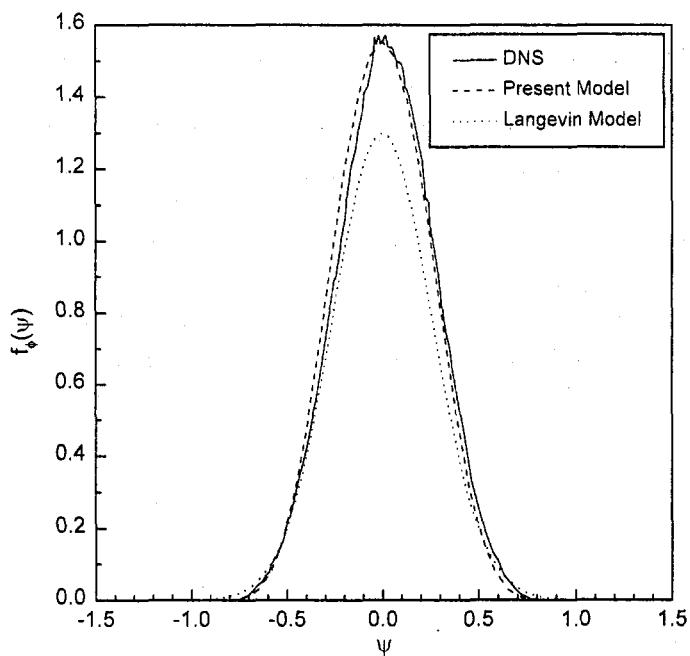


Fig. 1 Initial Scalar PDF at $t=0.0266s$

Fig. 2 Scalar PDF at $t=0.0836s$ Fig. 3 Scalar PDF at $t=0.1596s$

Fig. 4 Scalar PDF at $t=0.2356s$ Fig. 5 Scalar PDF at $t=0.3154s$

<Fig.2>는 $C_\phi=3.0$ 인 경우 시간이 $t = 0.0836$ 초 일 때의 PDF 계산 결과이다. DNS가 날카로운 두 개의 정점을 보여주는데 반해 본 모형을 사용한 계산은 보다 부드럽고 낮은 두 개의 정점을 보여준다. 이것은 유한차분법을 사용한 계산과정에서 발생한 수치적 확산과, 초기 PDF가 2중 δ -함수가 아니라는 사실로부터 나타난 것으로 보이지만 현재 통상적으로 사용되는 다른 모형들에 비해서는 본 모형이 훨씬 정확한 PDF를 예측함을 보여준다. 또한, 단순한 Langevin 모형을 사용할 경우에는 스칼라의 경계를 이탈할 뿐만 아니라 PDF의 형태도 DNS의 예측과 큰 차이를 보임을 알 수 있다. <Fig.3>부터 <Fig.5>까지는 $C_\phi=3.0$ 인 경우 그 이후의 PDF 변화를 보여주며, 시간이 경과함에 따라 점차적으로 정규분포 곡선에 가까워지는 DNS의 결과와 비교하여 본 모형의 결과가 매우 잘 일치함을 알 수 있다.

V. 결론

본 연구에서는 일반적인 확률 확산과정을 도입하여 유체입자의 스칼라값 시간증분에 대한 난류 확산의 모형을 제안하였다. 현재 통용되고 있는 여러 종류의 PDF 난류 확산의 모형들이 균일한 난류 스칼라장의 PDF를 시간이 경과함에 따라 정규분포에 가까운 형태로 이완시키지 못하는 것과 비교하여 제안된 모형은 이를 충족시킴과 더불어 스칼라의 경계가 유지되는 만족할만한 특성을 보여주었다. 특히 DNS의 결과와 비교할 때 다른 모형들에 비해 본 모형을 사용한 계산이 월등히 잘 일치하는 결과를 얻었다. 이와 같은 성능의 개선은 스칼라 조건 평균 소산율 $\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle$ 을 모형에 도입함으로써 이루어졌으며, 본 연구에서는 이 항을 직접 모형화하는 시도 없이 2중 δ -함수로부터 천이하는 스칼라에 대한 스칼라 조건 평균 소산율의 염밀해를 사용하였다. 대부분의 스칼라 확산의 문제들은 초기의 PDF가 2중 δ -함수인 경우이므로 이 접근 방법은 매우 유용하게 사용될 수 있을 것이다. 이에 반해 단순한 Langevin 모형은 스칼라의 경계를 이탈할 뿐만 아니라 DNS의 결과와는 동떨어진 PDF의 형태를 보인다. 본 모형은 모든 유체 입자가 확산에 참여하므로 확률 혼합모형에 비해 계산량이 증가하는 단점을 가지고 있지만 종래의 모형이 가지고 있는 단점을 크게 개선해 준다는 점에서 사용할 만한 가치가 있다. 한편 2중 δ -함수가 아닌 다른 형태의 초기 PDF의 문제에서도 본 모형이 만족스러운 결과를 만들어 낼 수 있을기에 관해서는 앞으로 더 많은 연구가 진행되어야 할 수 있을 것이며, 추후 스칼라 소산율에 대한 적절한 모형이 개발된다면 이로 대체하여 본 모형에 적용시킴으로써 더 넓은 범위의 난류 확산의 문제에 효과적으로 적용할 수 있을 것이다.

참고문헌

- [1] E. E. O'Brien, "The probability density function approach to reacting turbulent flows" Turbulent Reacting Flows, Ch.5, Springer-Verlag, 1980
- [2] S. B. Pope, "PDF methods for turbulent reactive flows" Prog. Energy Combust.

- Sci., vol.11, pp.111, 1985,
- [3] D. C. Haworth and S. H. El Tahry, "Probability density function approach for multidimensional turbulent flow calculations with applications to in-cylinder flows in reciprocating engines" AIAA J., vol.29, pp.208, 1991
- [4] D. C. Haworth and S. B. Pope, "A generalized Langevin model for turbulent flows" Physics of Fluids, vol.29, pp.387, 1986
- [5] S. B. Pope and Y. L. Chen, "The velocity-dissipation probability density function model for turbulent flows" Physics of Fluids A, vol.2, pp.1437, 1990
- [6] S. B. Pope, "Application of the velocity-dissipation probability density function model to inhomogeneous turbulent flows" Physics of Fluids A, vol.3, pp.1947, 1991
- [7] V. Eswaran and S. B. Pope, "Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar" Physics of Fluids, vol.31, pp.506, 1988
- [8] P. M. Chung, "A simplified statistical model of turbulent, chemically reacting shear flows" AIAA J., vol.7, pp.1982, 1969
- [9] C. Dopazo and E. E. O'Brien, "An approach to the autoignition of a turbulent mixture" Acta Astronaut, vol.1, pp.1239, 1974
- [10] R. L. Curl, "Dispersed phase mixing: I. theory and effects of simple reactors" AIChE J., vol.9, pp.175, 1963
- [11] S. B. Pope, "An improved turbulent mixing model" Combust. Sci. Technol., vol.28, pp.131, 1982
- [12] J. Janica, W. Kolbe and W. Kollmann, "Closure for the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields" J. Non-Equilib. Thermodyn., vol.4, pp.47, 1978
- [13] C. Dopazo, "Relaxation of initial probability functions in the turbulent convection of scalar fields" Physics of Fluids, vol.22, pp.20, 1979
- [14] S. Karlin and H. M. Taylor, A Second Course in Stochastic Process, Academic Press, 1981
- [15] C. W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods, Springer-Verlag, 1985
- [16] E. E. O'Brien and T.-L. Jiang, "The conditional dissipation of an initially binary scalar in homogeneous turbulence" Physics of Fluids A, vol.3, pp.3121, 1991