

기체 방전의 시뮬레이션을 위한 FE-FCT를 이용한 준 2차원적 수치 모델

고육희^{a*} · 박인호^b

^a한서대학교 컴퓨터응용물리학과, 충남 356-706

^b인천대학교 물리학과, 인천 402-749

(2008년 10월 14일 받음, 2008년 11월 9일 수정, 2008년 11월 25일 확정)

기체 방전의 수치적 시뮬레이션을 위하여 FE-FCT(Finite-Element Flux-Corrected Transport) 방법을 이용한 준 2차원 수치적 모델을 제시한다. 이 모델에서는 전자와 이온에 대한 1차원 연속방정식을 풀어 시·공간적으로 변하는 전하 분포를 계산하고, 공간 전하 분포에 의한 전기장의 변화는 2차원적 전하 분포를 고려하는 디스크 방법을 적용하여 푸아송(Poisson)방정식을 풀어 계산한다. 다양한 벤치마크 문제에 대해 계산한 결과는 이 모델의 정확성과 적용성을 잘 보여준다. 또 스트리머 방전에 대해 계산한 결과는 앞선 연구 결과와 잘 일치하는 것을 보여 준다.

주제어 : 기체 방전, 시뮬레이션, FE-FCT, FEM

I. 서 론

기체 방전 문제는 많은 경우 전하 밀도와 같은 스칼라량의 수송 및 확산 항을 포함하는 유체방정식(fluid equation)을 푸는 방법으로 다루어진다. 이 때 전하 밀도 같은 물리량들은 반드시 양의 값으로 유지되어야 그 물리적 의미를 잃지 않게 된다. 전하들에 에너지를 공급해주는 전기장은 전하들의 공간적 분포에 따라 결정되는 것으로 일반적으로 푸아송(Poisson) 방정식을 풀어서 구한다. 방전 과정에서 전하 밀도는 이온화 및 재결합 등의 현상으로 인해 시간과 공간적으로 급격하게 변화되고, 이는 전기장을 비선형적으로 변화되게 한다. 이와 같은 방전 과정의 비선형적인 동역학적 특성은 물리량들의 기울기를 매우 급하게 변화시키고, 불연속적으로 만들며, 또 충격파를 불러일으키기도 하여 기체 방전에 대한 수치적 계산을 불안정하게 만든다.

Boris와 Book는 총 개수 밀도가 보존되도록 반확산 선속(anti-diffusive flux)을 도입하여 유체방정식을 푸는 FCT (Flux Corrected Transport) 방법을 제안하였다[1]. FCT는 많은 연구자들에 의해 기체 방전의 계산에 사용되어 왔으며, 그 결과 FCT는 정확하면서 안정적인 해를 얻는 수치적 방법으로 인정받게 되었다[2-3].

유체방정식과 같은 미분 방정식을 이산화(discretization)

시키는 일반적인 방법은 FDM (Finite Difference Method)이다. 물리량들이 급격히 변하는 전극 근방의 sheath 영역이나 이온화 영역에서 수치적 불안정이 발생하지 않으면서도 계산 시간을 줄이기 위해 일반적으로 비균일 계산 격자를 사용한다. 그러나 FDM 방법은 비균일 계산 격자를 적용하여 이산화하는데 상당한 난점이 있다. Lohner[4]는 비균일 격자에서도 정확하고 효율적으로 해를 구하는 이산화 방법으로 FE-FCT를 제안하였다. 이는 유체 역학 문제 풀이에 성공적으로 적용되어왔던 FEM (Finite Element Method)과 FCT 방법과 결합한 것이다. 그는 Zalesak이 제안했던 FCT 알고리즘[5]에서 사용하는 선속 대신에 반확산 요소를 더하는 방법을 사용하였다. Georghiou는 FE-FCT 방법을 스트리머 전파에 적용한 2차원 모델을 발표하였다[6]. 그러나 이 2차원 모델은 매우 긴 계산 시간을 요구하므로 가스 방전이 정상 상태에 이르기 까지 계산하기는 매우 어렵다.

본 논문에서는 FE-FCT 방법을 기반으로 하는 기체 방전의 시뮬레이션(simulation)을 위한 준 2차원 유체 모델을 제시한다. 본 모델은 2차원 모델에 비해 계산 시간이 짧아 정상 상태까지 계산하기가 어렵지 않으면서도 전하분포의 2차원적 특성을 반영할 수 있는 준 2차원적 모델이다. 기체 방전에서 전하 밀도를 계산하기 위해 사용하는 연속

* [전자우편] whkoh@hanseo.ac.kr

방정식과 같은 대류-확산(convection-diffusion) 방정식에는 원천(Source) 항으로 이온화, 기체 흡착, 재결합, 전자 확산 등이 포함된다. 이 방정식은 FE-FCT 방법으로 이산화하여 수치적으로 계산된다. 전하 분포에 따라 변화하는 전기장은 고전적 디스크 방법(disk method)[7]을 사용하여 준 2차원적 방법으로 계산한다.

II. 수치 모델

가스 방전의 계산에는 전하들의 수송 항과 확산 항을 포함하는 다음과 같은 일반적인 형태의 대류-확산 방정식이 사용된다.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial x} = S \quad (1)$$

$$f = uv, \quad g = D \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2)$$

여기서 u 는 전하 밀도처럼 수송되는 스칼라 양이고, f 는 대류 항이며, g 는 확산 선속을 나타내고, v 는 속력, t 는 시간, x 는 거리를 나타내며, S 는 이온화, 재결합, 흡착 등에 기인한 원천(source)항을 나타낸다. FCT 방법의 기본적인 전략은 흐름이 부드러운 영역에서는 고차 방식(low order scheme)을 사용하지만, 불연속성이 있는 부근에서는 저차 방식(low order)을 사용해서 단조롭게 변하는 해를 얻는 것이다.

고차(high order) 해를 얻기 위해서 일종의 Lax-Wendroff 방법인 2단계 Taylor-Galerkin 법[4]을 사용한다. 식(1)의 해를 구하기 위해서 다음과 같은 방법을 사용하여 시간 t^n 에서 t^{n+1} 로 전진시킨다.

1단계:

$$u^{n+1/2} = u^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f^n}{\partial x} \quad (3)$$

2단계:

$$\Delta u^n = u^{n+1} - u^n = -\Delta t \frac{\partial f^{n+1/2}}{\partial x} \quad (4)$$

식(3), (4)는 계산 영역을 선형 요소로 구분한 후 Galerkin의 가중 나머지 법(weighted residual method)을

사용하여 이산화시킨다. 이렇게 이산화된 식(4)는 식(5)와 같이 나타낼 수 있다.

$$M_C \Delta u^n = R^n \quad (5)$$

여기서 M_C 는 일관된 질량 행렬(consistent mass matrix)이고, Δu^n 는 시간 t^n 에서의 증분 벡터(increment vector)이며, R^n 는 시간 t^n 에서 각 요소가 노드에 기여하는 힘 벡터(force vector)이다. 식(5)에 대각 묶음 질량 행렬(diagonal lumped mass matrix) M_L [8]을 도입하여 고차 해 u^h 를 나타내면 다음 식(6)과 같다.

$$M_L \Delta u^h = R^n + (M_L - M_C) \Delta u^h \quad (6)$$

저차 해 u^l 는 수치적 잔물결(numerical ripple) 등이 발생되지 않게 단순성을 가져야 한다. 이와 같은 단순성은 다음 식(7)과 같이 앞서 언급한 Taylor-Galerkin 방식에 질량 확산(mass-diffusion) 항을 더해주는 방법으로 얻을 수 있다.

$$M_L \Delta u^l = R^n + Diff \quad (7)$$

여기서 $Diff$ 은 질량 확산 항으로 아래 식(8)과 같이 행렬 M_C 과 행렬 M_L 의 차이에 비례하는 것으로 표현할 수 있다.

$$Diff = c_d (M_C - M_L) u^h \quad (8)$$

여기서 c_d 는 확산 계수로 0에서 1사이의 값을 갖는다. 식(6)에서 식(7)을 빼주면 식(9)와 같이 된다.

$$\Delta u^h - \Delta u^l = M_L^{-1} (M_L - M_C) (c_d \Delta u^n + \Delta u^h) \quad (9)$$

식(9)에서는 선속 f 와 g 의 이산화로부터 기인하여 식(1), (4), (7)에 포함되어 있던 항이 모두 소거된 것을 볼 수 있다. 이것은 벡터 R 에 대한 계산을 불필요하게 하여 계산 시간을 크게 단축시키는 역할을 한다. 다음으로는 해의 지나침이나 모자람을 방지하기 위하여 Zalesak에 의해 제안된 방법[5]에 따라 선속 제한(flux-limiting) 과정을 거친다.

전기장은 디스크 방법[7]을 사용하여 준 2차원적인 방법으로 계산한다. 여러 실험 결과에 따르면 기체 방전은 많은 경우에 가는 실모양의 기하학적 모양으로 발생하여 원통형의 대칭성을 가지며, 곡률반경이 더 큰 쪽의 전극 근방에서 방전 반지름이 더 크게 나타난다. 본 모델에서는 이와 같은 방전의 특성을 고려하기 위해 방전이 절단된 원뿔의 형태로 발생한다고 가정한다. 또한 방전 단면에서의 전하 밀도는 균일하다고 가정하면, 전하 분포는 균일한 디스크로 표현할 수 있다. 이 때 공간 전하 분포로 결정되는 전기장은 디스크 모양의 전하 분포 함수를 적분하여 얻을 수 있다. 즉, 축상의 한 지점 x 에서 전기장의 축 방향 성분은 다음 식(10)과 같이 나타낼 수 있다.

$$E_S(x) = \frac{1}{2\epsilon_0} \left[\int_{-x}^0 \rho(x+x') \left(-1 - \frac{x'}{\sqrt{x'^2 + r_d^2}} \right) dx' + \int_0^{d-x} \rho(x+x') \left(1 - \frac{x'}{\sqrt{x'^2 + r_d^2}} \right) dx' \right] \quad (10)$$

여기서 ϵ_0 는 자유공간에서의 유전율이고, d 는 양극과 음극 사이의 거리이며, ρ 는 알짜 전하밀도(net charge density), r_d 는 디스크 전하의 반경을 나타낸다. 전하에 영향을 미치는 총 전기장은 공간 전하에 의한 전기장 E_S 에 라플라시안(Laplacian) 전기장 E_L 을 더해서 구하여야 한다. 예를 들어 구-평면(sphere-plane) 모양의 전극에서의 방전인 경우에는 라플라시안 전기장은 식(11)과 같이 주어진다.

$$E_L(x) = \frac{2V_0}{r_a + 2(d-x) \ln[(r_a + 2d)/r_a]} \quad (11)$$

여기서 V_0 는 적용 전압을, r_a 는 구모양의 전극의 반지름을 나타낸다.

계산에 사용하는 공간 격자의 크기 Δx 와 시간 간격 Δt 는 CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 조건을 만족하도록 결정한다.

III. 계산 결과

개발된 수치 모델의 정확성 및 안정성을 입증하기 위해

여러 조건 아래서 테스트를 수행한다. 먼저 사각형, 반원형, 중형 등의 여러 모양의 파동의 전파에 대해서, 그리고 일정한 속력, 변하는 속력, 사인과 형태로 변하는 속력의 파동 및 확산을 하는 파동의 전파에 대하여 테스트한다.

Figure 1은 진폭이 1.0 cm, 폭이 0.2 cm인 사각형 파동이 일정한 속력 $v = 1 \text{ cm/s}$ 로 $x = 0.3 \text{ cm}$ 에서 출발하여 전파되는 것을 나타낸 것이다. 계산 결과 시간 $t = 0.5 \text{ s}$ 에서의 파동은 수치적 잔물결이나 불안정성이 없이 안정된 것을 보여주고 있다.

Figure 2는 일정한 속력 $v = 1 \text{ cm/s}$ 를 갖는 반원형 파동의 전파에 대한 테스트 결과이다. 이 테스트는 위상 에러(phase error)를 체크하기 위한 것이다. $t = 0$ 에서 전파되기 시작한 반원형 파동이 $t = 0.5 \text{ s}$ 까지 전파된 후에도 거의 위상 에러가 발생되고 있지 않은 것을 보여 주고 있다.

Figure 3은 속력의 방향이 변하는 경우에 대한 테스트로

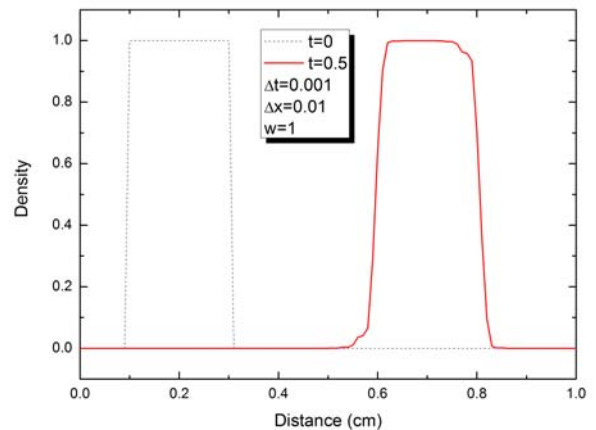


Figure 1. Square wave test with constant speed.

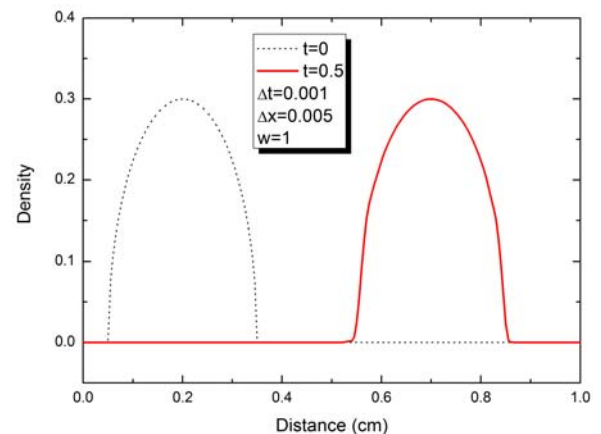


Figure 2. Convection of a semi circle wave test with constant speed.

$x = 1.8\text{cm}$ 에서 $x = 2.2\text{cm}$ 까지의 폭을 갖는 사각형 펄스가 속력 $v = 2.5(x - 2)\text{cm/s}$ 로 전파하는 것을 나타낸 것이다. 왼쪽 부분($x < 2\text{cm}$)과 오른쪽 부분($x > 2\text{cm}$)의 속도의 방향이 서로 반대가 되어, 각각 왼쪽 방향과 오른쪽 방향으로 전파된다. $t = 0.5\text{s}$ 에서의 펄스의 모양은 4차 정밀도를 갖는 upwind FDM으로 계산한 결과와 비교해보면 잘 일치하는 것을 알 수 있다[9].

다음으로는 빠른 속력으로 변하는 파동의 전파에 대하여 테스트 한다. Figure 4는 진폭 10, 폭 0.2cm의 펄스가 $x = 0.05\text{cm}$ 에서 출발하여 빠르게 전파해가는 모습을 보여 준다. 펄스의 속력은 $v = 1 + 9\sin^8\pi x\text{cm/s}$ 로 공간적으로 매우 급격하게 변하는 경우로 기체 방전에 대한 시뮬레이션에서 유사한 경우를 발견할 수 있다. 그림에서 $t = 0.12\text{s}$ 와 $t = 0.24\text{s}$ 에서 펄스의 모습은 본 모델이 수치적 잔물결이나 불안정성이 없다는 것을 다시 보여 준다.

확산을 포함하는 경우에 대한 테스트를 하기 위하여 아래와 같이 처음 $x = 0.25\text{cm}$ 에 최대값을 갖는 가우시안(Gaussian) 펄스를 생각하자.

$$u(x, t = 0) = 10 \exp\left[-\frac{(x - 0.25)^2}{4Dt_0}\right] \quad (12)$$

이 펄스의 속력 $v = 2 \times 10^7\text{cm/s}$, 확산 계수 $D = 5 \times 10^5\text{cm}^2/\text{s}$, $t_0 = 1.81 \times 10^{-9}\text{s}$ 라 할 때 시간 t 초 후의 펄스는 식(13)과 같이 나타낼 수 있다.

$$u(x, t) = 10 \left(1 + \frac{t}{t_0}\right)^{-1/2} \exp\left[-\frac{(x - 0.25 - vt)^2}{4D(t_0 + t)}\right] \quad (13)$$

Figure 5는 이 가우시안 펄스의 8초 후에 모습을 수치적 방법과 해석적 방법으로 계산하여 나타낸 것이다. 그림에서 점선은 정확한 해이고, 굵은 실선은 수치 해이다. 두 해는 구분하기가 힘들 정도로 거의 완벽하게 일치한다.

Figure 6은 식(14)와 같은 선형 전기장 내에서 충격파가 전파되는 것을 계산한 결과를 나타낸 것이다.

$$E = Ax, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (14)$$

여기서 A 는 상수이며, 전기장의 최대값은 10^4 으로 하고 계산하였다. 유체는 이와 같은 전기장 내에서 $x = 0$ 를

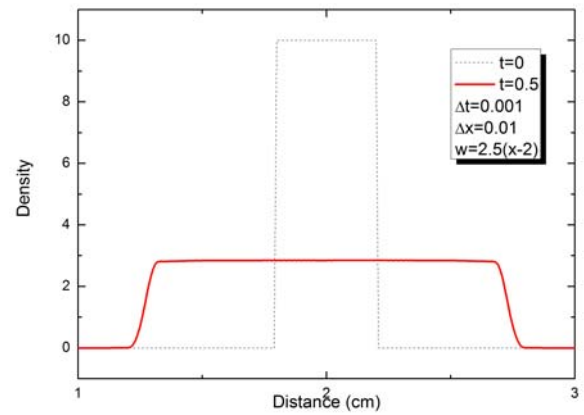


Figure 3. Convection of a square wave with sign changing speed of the form $v = 2.5(x - 2)\text{cm/s}$ at $t = 0.5\text{s}$.

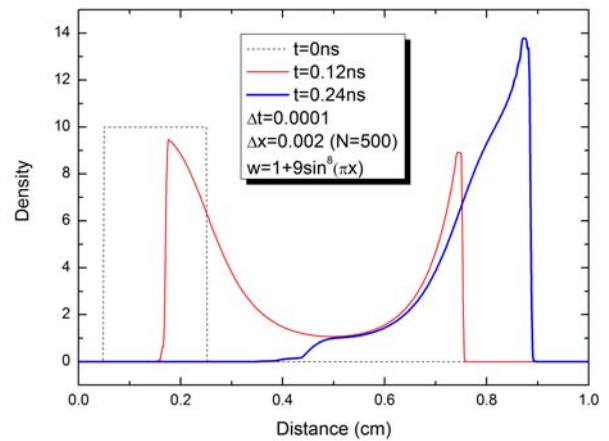


Figure 4. Convection of a wave with a rapidly varying speed of the form $v = 1 + 9\sin^8\pi x\text{cm/s}$.

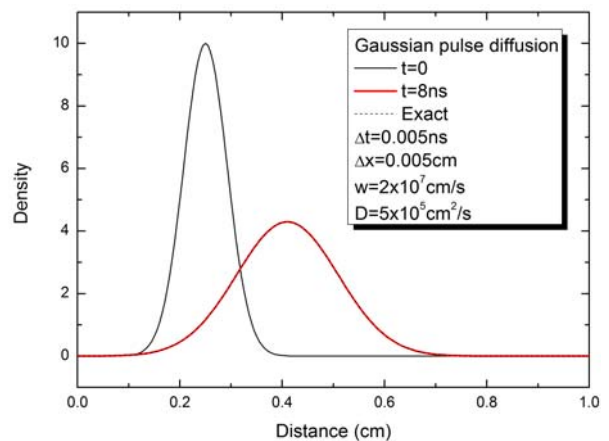


Figure 5. Propagation of a Gaussian pulse with speed $v = 2 \times 10^7\text{cm/s}$ and $D = 5 \times 10^5\text{cm}^2/\text{s}$.

향해 운동하며 압축된다. 해석적 해는 식(14)의 전기장을 대입한 식(1)의 방정식을 풀어서 구할 수 있는 것으로 식

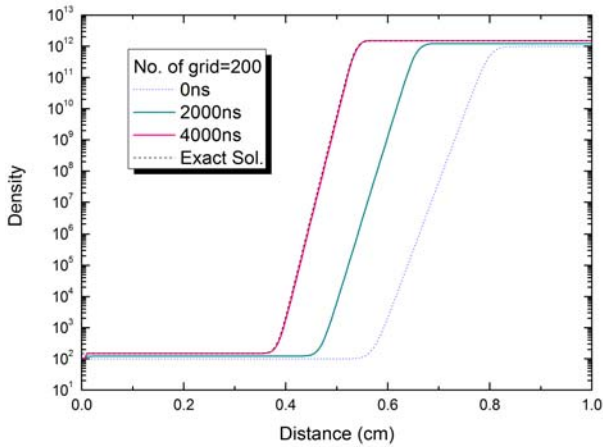


Figure 6. Shock wave transport in linear field $E = Ax$.

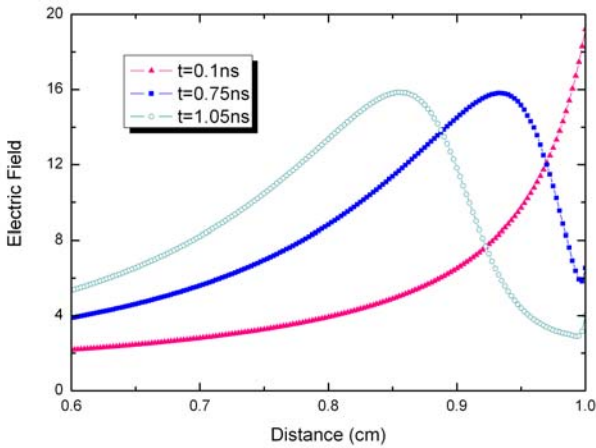


Figure 7. Electric field magnitude in the streamer propagation calculation for the first 1.05ns.

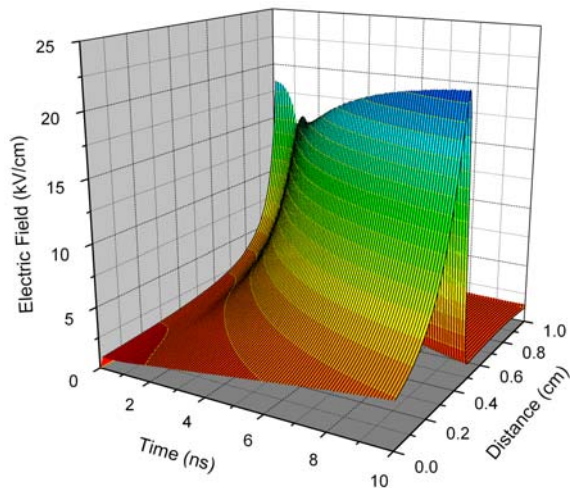


Figure 8. Electric field magnitude in the streamer propagation calculation for the first 10 ns.

(15)와 같이 얻어진다.

$$u(x, t) = n_0(xe^{At})e^{At} \quad (15)$$

여기서 $n_0(x)$ 는 초기의 밀도 분포로, $n_1 = 10^2$, $n_2 = 10^{12}$ 일 때 식(16)과 같다.

$$n_0(x) = n_1 + \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{x - x_0}{0.02} \right) \right] n_2 \quad (16)$$

그림에서 보는 바와 같이 계산 결과 얻어진 충격파의 곡선은 정확한 해의 곡선과 거의 일치한다. 이는 본 모델이 충격파의 전파에서도 안정적인 해를 구할 수 있는 모델임을 보여주는 것이다.

코로나 방전에 대한 본 모델의 적용성을 테스트하기 위하여 침-평판(point-plane) 전극 구조의 질소 기체 방전에 대하여 계산을 수행하였다. 전극 사이의 간격은 1 cm, 구 모양 침의 곡률 반경은 0.05 cm일 때, 침 전극에 3 kV의 전압을 걸어 주어 계산한 결과는 Figure 7, 8, 9와 같다. Figure 7은 $t = 1.05 ns$ 까지 시간에 따른 전기장의 분포를 나타낸 것이고, Figure 8은 $t = 10 ns$ 까지 시간에 따른 전기장의 분포를 3차원 그래프로 나타낸 것이다. 양극 근방의 고전압 영역에서 발생된 스트리머(streamer)가 시간이 지남에 따라 음극 쪽으로 전파되는 것을 보여주고 있다. Figure 9는 전기장과 전자 밀도의 시공간적 분포를 나타낸 것이다. 전기장의 크기가 최대값을 갖는 위치에서 전자 밀도도 최대값을 갖는 것을 알 수 있다. 즉, 전기장이 최대가 되는 지점에서 이온화가 활발히 발생하여 전자 밀도도 최대가 되며, 이것이 음극 방향으로 전파되는 것이다. 이는 코로나 방전에서 스트리머의 특성[10,11]을 잘 나타내 주

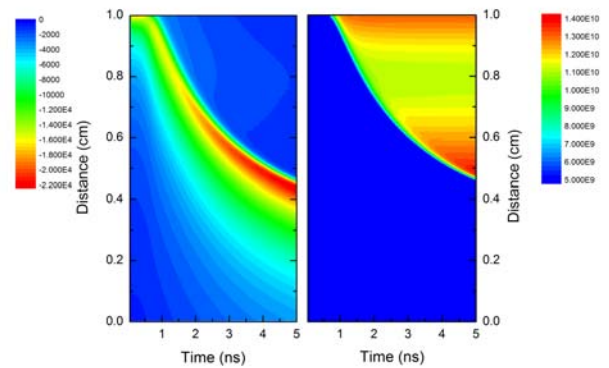


Figure 9. Electric field magnitude and electron density in the streamer propagation calculation.

고 있는 것으로 우리 모델의 신뢰성을 입증하는 것이다.

IV. 결론

본 논문에서는 기체 방전의 시뮬레이션을 위한 준 2차원적 유체 모델을 제시하였다. 이 모델은 FE-FCT (finite-element flux-corrected-transport) 방법을 기반으로 1차원 대류-확산 방정식을 계산하여 전하의 밀도 분포를 구한다. 전하 분포로 결정되는 전기장은 디스크 방법을 사용하여 준 2차원적으로 계산한다. 수치 코드는 객체지향 언어인 C++ 언어로 개발하여, 신속성과 편이성 및 재사용성을 높게 하였다. 여러 가지 벤치마크 프로그램에 대한 테스트 계산 결과는 본 모델의 정확성과 안정성을 보여주었으며, 또한 코로나 기체 방전에 적용하여 계산한 결과는 앞선 연구 결과들과 잘 일치하여 모델의 신뢰성을 입증하였다. 결론적으로 이 모델은 기체 방전 연구에 적용할 수 있는 정확성과 안정성을 갖는 신뢰할 수 있는 수치적 모델이다.

감사의 글

본 연구는 2006년 인천대학교 자체연구비 지원에 의하여 수행되었음.

참고문헌

- [1] J. P. Boris and D. L. Book, *J. Comput. Phys.* **11**, 38 (1973).
- [2] A. A. Kilikovsky, *J. of Phys. D: Appl. Phys.* **30**, 1515 (1997).
- [3] W. H. Koh, I. H. Park, *J. Kor. Phys. Soc.* **41**, 920 (2002).
- [4] R. Lohner, K. Morgan, J. Peraire, and M. Vahdati, *Int. J. Numer. Methods Fluids* **17**, p. 1093 (1987).
- [5] S. Zalesak, *J. Comput. Phys.* **31**, p. 335 (1979).
- [6] G. E. Georghiou, R. Morrow and A. C. Metaxas, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, 2453 (2000).
- [7] A. J. Davies, C. S. Davies and C. J. Evans, *Proc. IEEE.*, **118**, 816 (1972).
- [8] R. Lohner, K. Morgan and O. C. Zienkiewicz, *Int. J. Numer. Methods Fluids* **4**, 1043 (1984).
- [9] R. Morrow and L. E. Carm, *J. Comput. Phys.* **57**, 127 (1985).
- [10] 박승자, 박인호, 고육희, *한국진공학회지*, **13**, 132, (2004).
- [11] 엄환섭, *한국진공학회지*, **15**, 117 (2006).

A Quasi Two-Dimensional Model for Gas Discharge Simulation Using FE-FCT Method

Wook Hee Koh^{a*} and In-Ho Park^b

^a*Department of Computer and Physics, Hanseo University, Chungnam 356-706*

^b*Department of Physics, University of Incheon, Incheon 402-749*

(Received October 14, 2008, Revised November 9, 2008, Accepted November 25, 2008)

A quasi two-dimensional model for numerical simulation of gas discharge is presented, based on the finite-element flux-corrected transport method. A one-dimensional continuity convection-diffusion equation coupled Poisson's equation is solved to calculate the charge density variation and the electric field is evaluated by the classical disk method. Results calculated for various benchmark problems verify the accuracy of the proposed model and illustrate its performance. This model has been applied to a streamer simulation, and the results are shown to agree well with previously published results.

Keywords : Gas discharge, Numerical simulation, FE-FCT, FEM

* [E-mail] whkoh@hanseo.ac.kr