

Lattice Boltzmann 방정식에 의한 1 차 상변이의 가시화

하만영[†] · 김효근^{*}

Visualization of 1st order phase transition by using lattice Boltzmann equation

Man Yeong Ha and Hyo Geun Kim

Abstract

Lattice Boltzmann method is a new numerical method of investigating the fluid flow which have been solved by Navier–Stokes equation recently. It is known that making the single and parallel algorithms of the Lattice Boltzmann equation is easier than those of Navier–Stokes equations. Also, we can simulate the two phase flow using either the "Interaction Potential model" introduced by Shan and Chen. In this paper, we first compared the 3D cavity results of Lattice Boltzmann method with other numerical results for validation and showed the 3D phase transition and its simple application by using the "Interaction Potential model"

Key Words : Lattice Boltzmann method (래티스 볼츠만 방법), 1st order phase transition (1 차 상변이), Interaction potential (상호 포텐셜)

기호설명

b : 격자점에서의 속도벡터의 개수
 c : 입자 속도 크기
 \hat{e} : 입자 속도 벡터
 f : 입자 분포 함수
 $G_{\sigma\sigma}$: 그린 (Green) 함수
 M : 운동량
 p : 압력 ($= \rho c_s^2$)
 S : 서로 다른 물질의 총 개수
 t : 시간
 \bar{u} : (거시적) 속도 벡터
 w : 가중 (weighted) 함수

\bar{x} : 격자 포인트
 V : 상호 작용 인자 (Interaction Potential)
 ρ : 밀도
 σ : 상(phase)
 Ω : 충돌 연산자
 τ : 완화 시간(relaxation time)

1. 서론

최근 전산 유체 기법은 상당히 큰 규모의 유동 현상이나 복잡한 유동을 표현할 수 있을 정도로 발전하였다. 하지만 새로운 전산 유체 해석 기법으로써 LBE (Lattice Boltzmann Equation) 가 최근에 개발되었지만 마이크로 유동이나 미소 화학 반응의 연구등 그 범위가 넓기 때문에 현재 활발한 연구가 진행 중이다. 이러한 LBE 기법은 분자 운동론을 따르는 가상의 입자분포를 이용하여 유동을 해석하는 기법이다. LBE 기법은 Frisch et

[†] 부산대학교 기계공학과
E-mail : myha@pusan.ac.kr

^{*} 부산대학교 기계공학과

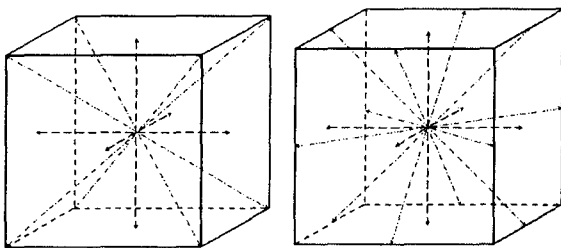
al.⁽¹⁾이 제안한 LGA(Lattice Gas Automata)를 기초로 하고 있으며, LGA 방법에서는 유동을 가상의 격자 공간과 운동량 공간을 가지는 입자로 가정한다. 이러한 입자들의 분포는 Boolean 대수의 형태의 분포함수로 표현되며, 분포함수를 이용하여 거시적인 유동정보를 얻을 수 있다.

그러나 LGA 방법은 그 자체로 발생하는 통계적 오차를 포함할 뿐만 아니라, 인공적인 요소, 즉 갈릴레이 불변량의 부재, 속도에 의존하는 압력항 등으로 인한 비물리적인 요소가 포함되어 있다. 하지만 LBE 기법은 분포함수를 실수로 사용함과 동시에 단일 시간 완화 계수⁽⁴⁾를 사용함으로써, LGA의 단점을 제거함과 동시에 LGA의 장점을 그대로 유지하고 있다. LBE 기법은 입자분포로서 유동을 해석하는 방법으로서 유체유동에 대한 준미시적인 접근방법이라고 할 수 있다.

단상 유동의 경우와 같이 다상 유동의 경우에도 물질간의 상호작용과 각각의 물성치 변화도 LBE를 이용하여 표현할 수 있다. 서로 다른 물질에 대한 상호작용과 유동을 Rothman 과 Keller 가 LBE를 이용하여 2 상 유동을 표현할 수 있도록 이미 유도하였다.⁽²⁾ 이 방법은 서로 다른 물질 사이의 상경계면에서 부분적으로 등방성을 지니지 않는 압력항을 추가하여 2 상 유동을 표현한 방법이다. 하지만 Shan 과 Chen 은 다른 방법으로 2 상 유동을 LBE를 이용하여 표현할 수 있도록 유도하였다.⁽³⁾ 이는 밀도의 의한 포텐셜을 이용하여 인력 또는 척력을 작용시켜서 충돌연산자에 영향을 주는 방법이다. 다시 말하면 같거나 다른 물질간의 밀도의 크기에 의한 인력과 척력을 이용하여 다른 격자점에 존재하는 운동량에 영향을 주는 방법이다. 본 연구에서는 2 상 유동 방법을 이용하여 2 차원 및 3 차원 에서의 2 상 유동에 대한 일반적인 현상 및 그 상호작용에 대해서 알아보고자 한다.

2. 해석 방법

2.1 절 기본적인 LB equation



(a) D3Q15 (b) D3Q19
Fig 1. The 3 Dimensional lattice models

LBE 기본 방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$f_i^\sigma(\vec{x} + c\hat{e}_i\Delta t, t + \Delta t) = f_i^\sigma(\vec{x}, t) = \Omega_i^\sigma \quad (1)$$

$f_i^\sigma, \vec{x}, c, \hat{e}_i, \Omega_i^\sigma$ 는 각각 σ 상에 대한 입자 분포함수, 격자 벡터, 입자속도의 크기, 입자의 속도 그리고 입자분포와 관련된 σ 상의 충돌연산자(collision operator)로서 입자 분포가 충돌에 의해 변화하는 비율을 의미한다. 일반적으로 사용되는 충돌 연산자는 Bhatnagar, Gross and Krook⁽⁴⁾ 이 제안한 단일 완화 시간 방법을 사용하여 다음과 같이 나타낸다.(LBGK 모델)

$$\Omega_i^\sigma = -\frac{1}{\tau^\sigma} (f_i^\sigma(\vec{x}, t) - f_i^{\sigma,eq}(\vec{x}, t)) \quad (2)$$

여기서 $\tau^\sigma, f_i^{\sigma,eq}$ 는 각각 σ 상에 대한 완화시간 평형분포함수를 의미한다. 여러 가지 종류의 격자에 따라 고유의 평형 분포함수가 있는데 본 연구에서 사용할 격자는 D3Q15, D3Q19, D3Q27 모델이다. 여기서 D는 실제 차원을 나타내고 Q는 격자 벡터의 개수를 나타낸다. Fig 1에 각각 D3Q15와 D3Q19를 나타내었다. 각각의 모델에서 인접한 방향의 속도 벡터는 각각 6개이며 대각선 방향의 속도 벡터는 각각 8개, 12개가 존재한다. D3Q27 모델은 위 두 가지 모델을 서로 조합한 것이다. 여기서 위의 3가지 모델에서 각각의 속도 벡터의 크기는 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} |\hat{e}_0| &= 0 & \text{for rest particle} \\ |\hat{e}_1| &= c & \text{for neighbor particles} \\ |\hat{e}_2| &= \sqrt{2}c & \text{for diagonal particles} \\ |\hat{e}_3| &= \sqrt{3}c & \text{for cubic diagonal particles} \end{aligned} \quad (3)$$

각각의 모델에서 방향 벡터는 아래와 같은 평형 분포를 사용한다.

$$f_i^{\sigma,eq} = \rho^\sigma w_i \left[1 + \frac{3}{c^2} \hat{e}_i \cdot \vec{u}^\sigma + \frac{9}{2c^4} (\hat{e}_i \cdot \vec{u}^\sigma)^2 - \frac{3}{2c^2} \vec{u}^\sigma \cdot \vec{u}^\sigma \right] \quad (4)$$

위 식 (4)에서 w_i 는 가중 함수를 나타내는 것으로서 각각의 모델마다, 각각의 속도벡터마다 다르다. 위의 각각의 모델에 대한 평형 분포 함수의 가중함수는 식 (5),(6),(7)과 같이 나타낼 수 있다.

$$w_i = \begin{cases} w_0 = 2/9 \\ w_1 = 1/9 \\ w_2 = 1/72 \end{cases} \quad (5)$$

$$w_i = \begin{cases} w_0 = 1/3 \\ w_1 = 1/18 \\ w_2 = 1/36 \end{cases} \quad (6)$$

$$w_i = \begin{cases} w_0 = 8/27 \\ w_1 = 2/27 \\ w_2 = 1/54 \\ w_3 = 1/216 \end{cases} \quad (7)$$

식 (5),(6),(7)은 각각 D3Q15, D3Q19,D3Q27에 대한 가중함수를 나타내고 있다. 또한 각각의 모델에서 속도 성분의 크기는 각각 $(0,1, \sqrt{3})$, $(0,1, \sqrt{2})$, $(0,1, \sqrt{2}, \sqrt{3})$ 을 나타낸다.

위에서 제시된 분포 함수를 이용하여 거시적인 유동 변수인 밀도, 속도와 압력을 구할 수 있으며, 이는 아래 식 (8), (9)와 같이 나타낼 수 있다. 이러한 관계는 미시적인 관점에서 정의되는 각각의 모델에 대한 입자분포 함수와 거시적인 관점에서의 유동 변수의 관계를 나타내며, 두 가지 관점에 대한 일종의 구속 조건(constraints) 라고 볼 수 있다.

$$\rho^\sigma = \sum_{i=0}^b f_i^\sigma = \sum_{i=0}^b f_i^{\sigma,eq} \quad (8)$$

$$\rho^\sigma \bar{u}^\sigma = \sum_{i=0}^b \hat{e}_i f_i^\sigma = \sum_{i=0}^b \hat{e}_i f_i^{\sigma,eq} \quad (9)$$

2.2 phase model (Shan & Chen model)

Shan 과 Chen 이 제안한 다상 유동 모델⁽³⁾에서는 유체의 밀도차에 의해서 주위 유체에 미치는 운동량의 영향을 고려하기 때문에, 식 (9)에서 그러한 영향을 포함하는 항을 추가하여야 한다. 먼저 유체의 밀도에 대한 상호작용인자 \mathcal{V} 을 아래와 같이 정의할 수 있다.

$$\mathcal{V}(\bar{x}-\bar{x}') = G_{\sigma\sigma'} \phi^\sigma(\bar{x}) \phi^{\sigma'}(\bar{x}') \quad (10)$$

여기서 $G_{\sigma\sigma'}$ 는 Green function 이라고 하며 상호작용인자의 크기를 나타내고, $\phi^\sigma [= F^\sigma(\rho^\sigma)]$ 는 유체 밀도를 독립 변수로 하여 효과적인 포텐셜을 표현하기 위한 함수이다. Green function 은 식 (11)과 같이 나타낼 수 있는데, $G_{\sigma\sigma'}$ 의 부호로써 인력과 척력을 구분할 수 있다. 또한 식 (11)에서 보는 바와 같이 $G_{\sigma\sigma'}$ 는 주변 격자의 위치에 따라 그 크기가 달라지는데, 이러한 영향에 의해서 하나의 격자가 받는 운동량의 변화는 식 (12)와 같다.

$$G_{\sigma\sigma'} = \begin{cases} 3G & \text{for } |\hat{e}_i|=1 \\ 2G & \text{for } |\hat{e}_i|=\sqrt{2} \\ G & \text{for } |\hat{e}_i|=\sqrt{3} \end{cases} \quad (11)$$

$$\frac{d\bar{M}^\sigma}{dt}(\bar{x}) = -\phi^\sigma(\bar{x}) \sum_{\sigma=1}^S G_{\sigma\sigma'} \sum_{i=0}^b \phi^{\sigma'}(\bar{x}+\hat{e}_i) \hat{e}_i \quad (12)$$

여기서 $\frac{d\bar{M}^\sigma}{dt}(\bar{x})$ 는 상에 대한 운동량의 변화율, S 는 서로 다른 물질의 개수를 나타낸다. 식 (9)에서 밀도에 의한 운동량의 변화를 포함하여 여러 가지 종류의 유체에 대한 속도를 다시 구하면 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$\rho^\sigma(\bar{x}) \bar{u}^\sigma(\bar{x}) = \rho^\sigma(\bar{x}) \bar{u}(\bar{x}) + \tau^\sigma \frac{d\bar{M}^\sigma}{dt}(\bar{x}) \quad (13)$$

3. 결과 및 고찰

3.1 2 차원에서의 1 차 상 변이

Fig 2는 2 차원에서의 시간에 따른 밀도의 변화를 나타낸 것이다.

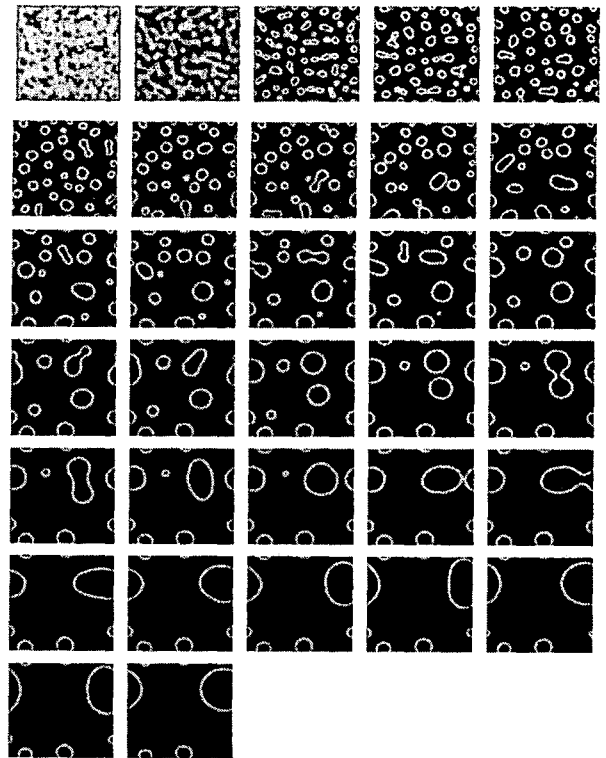


Fig 2. Time history of density field for 2D square lattices

붉은 색은 높은 밀도를, 푸른 색은 낮은 밀도를 나타낸 것이다. 시간이 경과함에 따라서 높은 밀도를 가진 영역은 주변의 영역에 대해서 인력이 작용하고 있으므로 주위의 높은 밀도영역은 점점 더 끌려 가게 된다. 이로 인해서 주변의 높은 밀도 영역은 점점 더 그 크기가 커지고 이에 따라서 주변에 미치는 인력 또한 커지게 된다. 하지만 높은 밀도를 가지는 부분은 그 밀도가 더 높아지지 않고 일정한 밀도값을 유지하게 되는데 이는 위해서 언급한 Green Function 때문이다. 또한 주변의 낮은 밀도값 또한 Green Function 으로 인해서 일정한 밀도를 유지하게 되는데 높은 밀도값과 낮은 밀도값의 차이는 Green Function 에 대한 함수의 형태로 나타나게 된다.

또한 고밀도 영역은 모두 원의 형태를 띄고 있는데 이것은 격자의 성질 때문이다. 격자를 생성시킬 때에는 항상 등방성의 성질을 유지하여야만 하며, 이 성질을 고려하지 않을 경우에는 물리적인 현상을 제대로 관찰할 수 없기 때문이다. 또한 두 개 이상의 고밀도 영역이 서로 합쳐질 때에는 고밀도 영역에 대한 관성이 그대로 영향을 미치기 때문에 그러한 영향으로 원의 형태가 변하긴

하지만 곧 원의 형태로 되돌아 오는데 이는 격자의 등방성으로 인한 특성 때문이다.

3.2.3 3차원에서의 1차 상변이

Fig 3 은 3 차원 cubic lattice 에서의 1 차 상변이를 나타낸 것이다. 3 차원의 경우에는 2 차원 처럼 단면만을 표현하기 보다는 일정한 밀도를 가진 면을 입체적으로 표현하는 것이 상 변이 과정을 더 뚜렷이 볼 수 있다. 3 차원의 상 변이 과정도 2 차원과 마찬가지로 고밀도의 영역과 저 밀도의 영역이 존재하는데 고밀도 영역에서는 인력이 크게 작용하기 때문에 주변의 영역에서 밀도를 끌어당기게 된다. 그래서 고밀도 영역은 그 크기가 점점 커지게 된다. 또한 고밀도 영역은 모두 구의 형태를 띄고 있는데 이 또한 cubic lattice 의 특성으로서 등방성을 띄고 있기 때문이다. Fig 3 의 마지막 그림에서는 구의 형태를 띄고 있지만 정육면체의 각 변은 주기 경계 조건으로 인해서 모두가 연결되어 있는 상태이다.

4. 결 론

LBE 를 이용한 다상 유동 모델인 Shan & Chen 모델로 2 상 유동에 대해서 1 차 상변이에 대한 모사를 수행하였다. 2 차원과 3 차원에서 모두 고밀도와 저밀도의 영역이 존재하였으며 저밀도에서 고밀도의 이동현상을 관찰할 수 있었다. 또한 등방성을 지니는 격자로 인해서 고밀도의 영역이 2 차원에서는 원의 형태로, 3 차원에서는 구의 형태로 나타나는 것을 볼 수 있었다. 또한 밀도도 Green Function 에 따라서 고밀도와 저밀도의 영역에서 일정하게 유지되는 것을 관찰할 수 있었다

참 고 문 헌

- (1) U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau, 1986, "Lattice gas automata for Navier-Stokes equation," *Physical Review Letters*, Vol. 56, No. 14, pp 1505~1508.
- (2) D. H. Rothman and J. Keller, 1998, "Immiscible cellular-automaton fluids," *J. Stat. Physics*, Vol 52, No. 3~4, pp 1119~1127
- (3) X. Shan and H. Chen, 1993, "Lattice- Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components," *Physical Review E*, 47(3), pp 1815-1819
- (5) P. Bhatnagar, E. Gross and M. Krook, 1954, "A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one component systems," *Physical Review* 94 (3), pp 511-525.511-525.

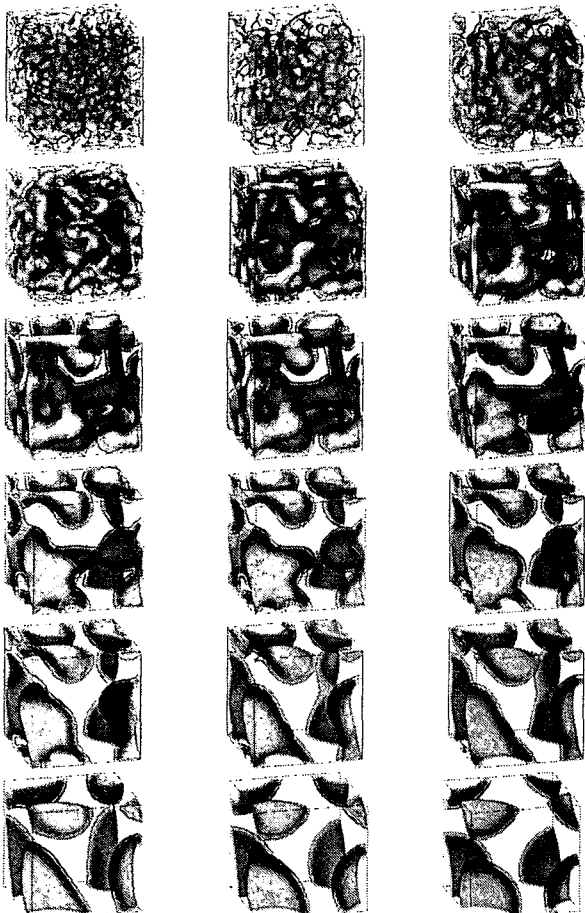


Fig 3. Time history of density field in a 3D cubic lattices