

Level Set 방법에 의한 상경계 추적 수치기법 연구

김 원 갑[†], 정 재 동*
세종대학교 항공우주연, *세종대학교 기계공학과

Study on the Phase Interface Tracking Numerical Schemes by Level Set Method

Won-Kap Kim[†], Jae Dong Chung*

ABSTRACT: Numerical simulations for dendritic growth of crystals are conducted in this study by the level set method. The effect of order of difference is tested for reinitialization error in simple problems and authors founded in case of 1st order of difference that very fine grids have to be used to minimize the error and higher order of difference is desirable to minimize the reinitialization error. The 2nd and 4th order Runge-Kutta scheme in time and 3rd and 5th order of WENO schemes with Godunov scheme are applied for space discretization. Numerical results are compared with the analytical theory, phase-field method and other researcher's level set method.

Key words: Crystal Growth(결정성장), Reinitialization(재초기화), Stefan Problem(스테판 문제), Signed Distance Function(부호거리함수), Velocity Extension(속도확장)

———— 기 호 설 명 ————

- c : 비열, [$J/kg \cdot sec$]
- h : 격자 간격, [m]
- k : 열전달계수, [$W/m/K$]
- L : 잠열, [J/kg]
- n : 수직벡터
- t : 시간, [sec]
- T : 온도, [K]
- v, V : 경계면 속도, [m/s]
- x, y : 좌표계, [m]

그리스 문자

- ρ : 밀도, [m^3/kg]
- ϕ : level set 함수
- κ : 곡률, [m^{-1}]

1. 서론

축열시스템은 야간의 값싼 전력으로 열에너지를 축열조에 저장하여 주간에 이용함으로써 경제적으로 에너지 절감에 기여할 수 있으며 환경친화적인 시스템으로 현열축열과 잠열축열로 대별된다. 잠열축열은 상변화물질(PCM)의 상변화시 수반되는 잠열을 이용하는 것으로 현열축열에 비해 열밀도 측면에서 장점을 가진다. 잠열축열 해석을 위해 응고 현상을 이해는 필수적이거나 응고 현상이 본질적으로 매우 복잡하여 열·유동 해석

[†]Corresponding author
Tel.: +82-2-3408-3896; fax: +82-2-3408-3895
E-mail address: wkim@sejong.ac.kr

뿐만 아니라 이동하는 상경계를 추가로 구해야 하는 어려움이 있다.

상변화에 대한 수치해석은 이동격자와 고정격자계에 의존하는 방법으로 대별될 수 있다. 고정격자계를 사용하는 오일러시스템에서는 표면이 좌표의 사이를 이동하기 때문에 수치적인 확산이 일어난다. 고정격자계를 사용하는 방법으로는 유한체적법과 연계하여 사용되는 VOF (Volume of Fraction)법과 Phase field법, Level set법 등을 들 수 있다. 각각의 방법에 대한 장단점과 적용의 한계 등은 문헌을 참고하기로 한다. 반면에 격자가 물질과 함께 이동하는 라그랑지안기법으로는 ALE나 CIP법 등이 있으며, ALE법은 상이한 물질의 경계를 정확하게 포착할 수 있지만, 파도가 부서지는 것과 같이 경계가 분리되는 현상이 발생할 때는 사용이 부적합한 것으로 알려져 있다.

Level set 방법은 다른 해법들에 비하여 2차원이나 3차원으로의 확장이 쉽고 경계면간의 merging이나 splitting의 해석이 비교적 쉽고 이에 따라 점차 그 적용이 증가하고 있다. level set 해법은 경계속도의 계산과 속도확장 (velocity extension), 재초기화 (re-initialization), 온도장의 계산 등이 포함된다. 이러한 각 단계는 여러 연구자들에 의해 각각의 해법들이 제안되고 있으나 여전히 문제를 가지고 있으며 확립된 해법이 없는 실정이다.

따라서 본 연구에서는 응고시 수지상 (dendrite) 성장을 수치적 방법으로 해석하기 위해 level set 방법을 적용한 해석 프로그램을 개발하고 기존의 연구에 의한 결과와 비교, 검증하였다.

2. 이론해석

2.1 지배방정식

대류가 없는 정지된 응고 또는 용해되는 물질에 대한 에너지 방정식은 다음과 같다.

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (1)$$

여기서 c, k 는 각각 비열과 열전도 계수이며 일반

적으로 이 값들은 경계면에 걸쳐 불연속이다. 경계면의 속도 V 는 에너지 보존법칙에 의해 다음과 같이 정의된다.

$$\rho L V = - \left[k_l \frac{\partial T_{liq}}{\partial n} - k_s \frac{\partial T_{sol}}{\partial n} \right] \quad (2)$$

여기서 L 은 잠열이며 n 은 경계면에 수직한 방향을 나타낸다. 경계면의 온도는 다음의 Gibbs-Thomson 관계식으로 주어진다.

$$T(x, t) = -\epsilon_C \kappa - \epsilon_V V \quad (3)$$

여기서 κ 는 경계면의 곡률, ϵ_C 는 표면장력계수이며 ϵ_V 는 분자운동계수이다. 등방성인 경우 이 두 계수는 상수로 취급하며 비등방성인 경우는 다음과 같은 식으로 사용한다.

$$\epsilon_C = \overline{\epsilon_C} (1 - A \cos(k_A \theta + \theta_0)) \quad (4)$$

$$\epsilon_V = \overline{\epsilon_V} (1 - A \cos(k_A \theta + \theta_0)) \quad (5)$$

여기서 $A, k_A, \theta_0, \overline{\epsilon_C}, \overline{\epsilon_V}$ 는 물질에 따라 주어지는 값이며 θ 는 x -축과 경계면의 수직벡터 \vec{n} 과 이루는 각도를 나타낸다. 경계면 상에서의 수직벡터와 곡률은 다음의 식으로 정의된다.

$$\vec{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi| \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \kappa &= \nabla \cdot \vec{n} = \nabla \cdot \left[\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right] \\ &= \frac{(\phi_x^2 \phi_{xx} - 2\phi_x \phi_y \phi_{xy} + \phi_x^2 \phi_{yy})}{(\phi_x^2 + \phi_y^2)^{3/2}} \end{aligned} \quad (7)$$

2.2 Level Set 해법

본 연구에서는 경계면의 위치를 추적하기 위해 level set 함수를 사용한다. 경계면의 밖에서는 양(+)의 값을 가지며 경계면의 안쪽에서는 음(-), 경계면 상에서는 0의 값을 가지는 level set 함수를 ϕ 로 나타내면 이에 대한 지배방정식은 다음과 같다.

$$\phi_t + v_N |\nabla\phi| = 0 \quad (8)$$

여기서 v_N 은 경계면에 수직한 방향으로의 경계면 속도를 나타낸다. 경계면 속도 v_N 이 주어지면 이 방정식을 풀어 시간에 따른 경계면의 이동을 추적할 수 있다. 초기값이나 반복 계산 중에 부호 거리함수를 만들기 위한 재초기화 방정식은 다음과 같다.

$$\phi_t = S(\phi_0)(1 - |\nabla\phi|) \quad (9)$$

$$S(\phi_0) = \frac{\phi_0}{\sqrt{\phi_0^2 + \epsilon^2}} \quad (10)$$

여기서 ϵ 은 격자크기 h 로 하였으며 식(9)를 정상 상태까지 풀면 $|\nabla\phi|=1$ 을 만족하는 함수를 얻을 수 있다. 또한 부호거리함수는 경계면($\phi=0$)부근에서만 그 의미를 가지게 되므로 식(9)의 해를 얻는데 많은 계산시간을 투자하는 것은 의미가 없으며 경계면 근방에서 가까운 위치의 함수값만이 그 의미를 가진다.

한편 식(2)의 경계면 속도 V 는 경계면상에서만 정의되는 값이므로 경계면의 이동속도가 구해지면 다음의 방정식으로부터 경계면 근방의 격자에 속도를 확장한다.

$$\frac{\partial v_N}{\partial \tau} + \text{sign}(\phi)(\vec{n} \cdot \nabla v_N) = 0 \quad (11)$$

여기서 $\phi > 0$ 일때 $\text{sign}(\phi) = 1$ 이고 $\phi < 0$ 일때 $\text{sign}(\phi) = -1$ 의 값을 갖는다. 그러나 이 방정식도 정상상태에 도달할 때까지 계산될 필요는 없으며 경계면 부근의 격자점에만 확장하면 되므로 upwind scheme과 같은 1차 정확도의 차분법으로 충분하다. 따라서 본 연구에서는 단 몇 개의 시간스텝만으로 속도확장을 수행하였다.

3. 수치해석

3.1 지배방정식의 차분화

미분방정식을 풀기 위해서 각 지배방정식의 차분화를 수행하는데 식(1)의 온도방정식은 양해법

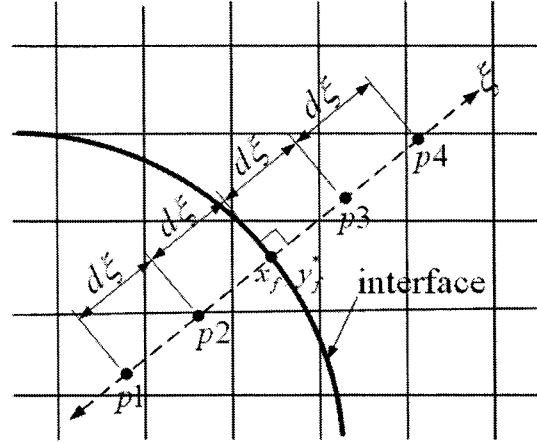


Fig. 1 Schematic diagram of the normal probe technique to calculate gradient at the interface.

으로 푸는 경우 확산항으로 인한 시간스텝의 제한이 있기 때문에 완전음해법을 적용하고 level set 함수와 관련된 식(8)과 식(9), 식(11)은 양해법을 적용하였다. 온도방정식은 시간에 대하여는 후진차분법을 사용한 유한차분법을 적용하였으며 level set 방정식과 재초기화 방정식은 Godunov's scheme을 적용하고 1차 정확도의 차분법과 더불어 3차와 5차 정확도의 WENO scheme을 적용할 수 있도록 하였다.

3.2 수직속도의 계산법

앞 절에서 언급한 바와 같이, 경계면에서의 속도는 식(2)로 계산가능하다. 그러나 경계면이 격자점과 항상 일치하는 것이 아니므로 계산된 경계속도를 어느 위치에 저장할 지를 결정해야 한다. 식()의 좌변 두 번째 항은 경계면에 수직한 방향으로 속도확장 하는 의미를 가지므로 본 연구에서는 Udaykumar et al⁽¹⁾과 같은 normal probe technique을 적용하였다. 이 방법은 Fig. 1에 나타난 바와 같이 경계면이 격자점 (x_i, y_j) 의 부근에 위치한다고 하면 계산된 level set 함수로부터 경계면의 좌표를 구하여 그 경계면 좌표에서의 속도를 구하고 그 값을 격자점 (x_i, y_j) 에 저장하는 방법이다.

3. 결과 및 토론

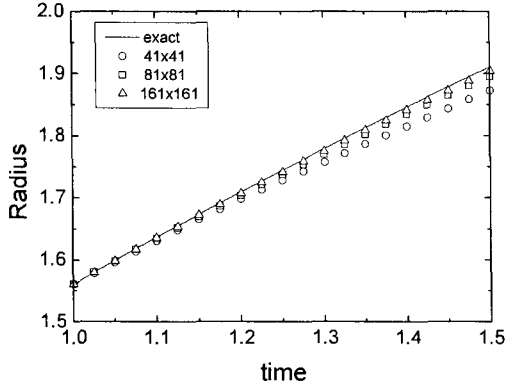


Fig. 2 Radius of 2D Frank sphere with time.

3.1 Frank sphere

엄밀해가 알려져 있는 2차원의 Frank sphere의 결과와 비교하였다. 2차원에서 경계면의 위치는 반지름, $R = S\sqrt{t}$ 로 주어지고 경계면에서의 온도는 $T=0$ 이다. 경계면 외부의 온도분포는 다음의 식으로 주어진다.

$$T = T_{\infty} \left(1 - \frac{F(s)}{F(S)} \right) \quad (12)$$

이고 $s = r/\sqrt{t}$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $F(s) = E_1(s^2/4)$ 이다. 함수 E_1 은 지수적분함수(exponential integral function)으로 주어진다.

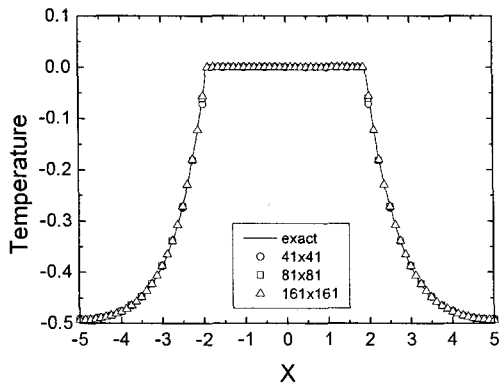


Fig. 3 Temperature profile of the Frank sphere at final time, $t = 1.5$.

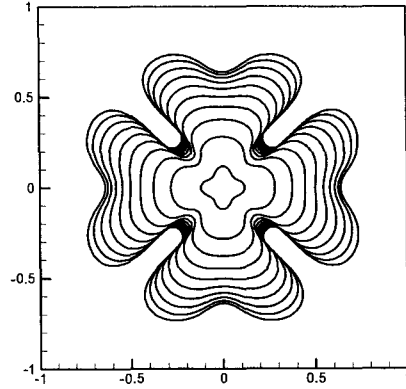


Fig. 4 Growth histories in case of 3rd order WENO with 100x100 grid size.

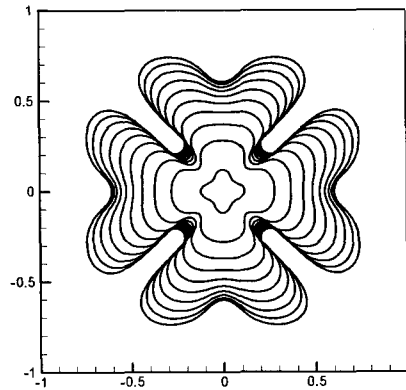


Fig. 5 Growth histories in case of 5th order WENO with 100x100 grid size.

계산 조건으로는 $T_{\infty} = -0.5$, $S = 1.56$ 로 결정하면 초기조건은 $t = 1$ 에서 $R = 1.56$ 이 된다. 계산 영역은 $\Omega = [-5, 5] \times [5, 5]$ 로 결정하였으며 초기의 온도분포는 식(17)의 엄밀해로부터 구하였다. 시간간격은 $\Delta t = 0.0005$ 로 고정하였다.

Fig. 2는 시간에 따른 경계면의 반지름을 나타낸 것으로 격자의 수를 41×41 , 81×81 , 161×161 로 변화시켜 엄밀해와 비교하였다. 그림에서 알 수 있는 바와 같이 격자의 수를 증가시킬수록 엄밀해와의 차이가 감소하고 있다. Fig. 3는 $t = 1.5$ 에서의 대칭면상의 온도분포를 나타낸 그림으로

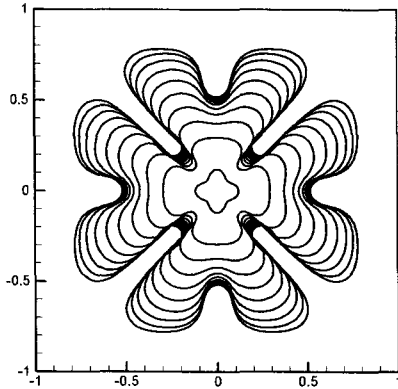


Fig. 6 Growth histories in case of 3rd order WENO with 200x200 grid size.

엄밀해의 분포와 잘 일치하고 있음을 나타낸다. 그림에는 나타나지 않았으나 엄밀해로부터 구한 경계면의 속도를 사용한 경우에는 41×41의 격자로도 엄밀해와 매우 잘 일치하는 결과를 보였다. 따라서 Fig. 2에서 41×41의 경우에 나타나는 오차는 경계면의 속도를 구할 때 2차 정확도의 보간법을 사용하였기 때문인 것으로 경계면 속도의 계산에 보다 높은 차분법을 사용하면 적은 격자수에서도 보다 정확한 결과를 얻을 수 있을 것으로 판단된다.

3.2 차분화 정도의 영향

Fig. 4와 Fig. 5는 격자가 x, y 방향으로 각각 100×100일 때 $\epsilon_C = 0.001$, $\epsilon_V = 0$ 인 경우에 대하여 level set 함수의 차분화를 3차 정확도의 WENO와 5차 정확도의 WENO로 하였을 때의 그림이다. 초기 seed의 형상은 다음과 같이 설정하였다.

$$x(s) = (R + P \cos(8\pi s)) \cos(2\pi s) \quad (13a)$$

$$y(s) = (R + P \cos(8\pi s)) \sin(2\pi s) \quad (13b)$$

이고 여기서 $R = 0.1$, $P = 0.02$ 이다. 시간간격은 $\Delta t = 0.0002$, $T_\infty = -0.5$ 이며 계산영역의 경계조건으로 Neumann 조건을 적용하였다. 두 그림을 비교하면 5차의 WENO scheme을 적용한 경

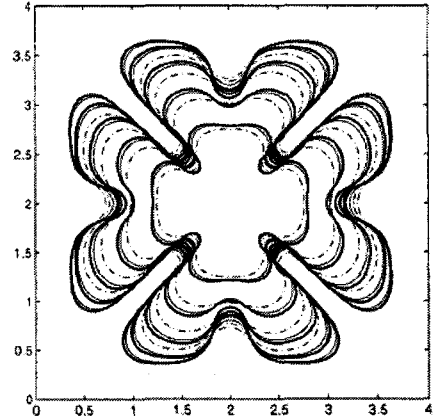


Fig. 7 Unstable solidification by Udaykumar et al⁽¹⁾.

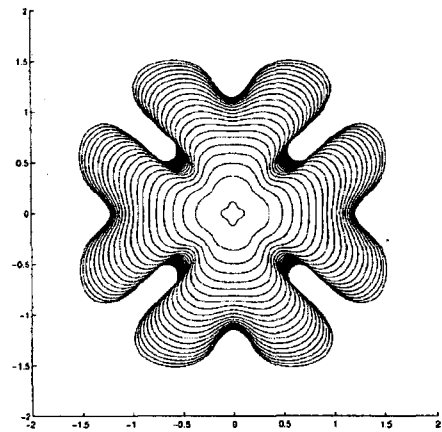


Fig. 8 Unstable solidification by Gibou et al⁽²⁾.

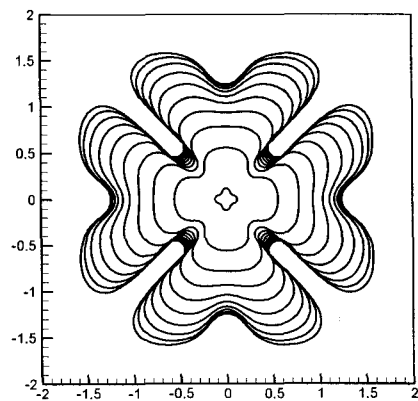


Fig. 9 Unstable solidification by present study.

우가 tip splitting이 일어난 부분의 곡률이 보다 강하게 나타나고 있음을 알 수 있다. Fig. 6은 200×200 의 격자계에서 5차 정확도의 WENO scheme을 적용한 결과로서 Fig. 5의 경우보다 tip splitting이 발생한 부분의 곡률이 크게 나타나고 있다. 또한 여기서는 나타내지 않았으나 200×200 의 격자계에서는 3차 정확도의 WENO scheme의 결과와 정확히 일치하는 하는 것을 알 수 있었다. 따라서 같은 조건에서 고차의 scheme이 적은 격자수에서도 높은 정확도를 보이며 이것은 비정상 문제의 해석에서 전산시간의 절약에서 중요하다.

다음은 본 연구의 결과와 기존 연구의 수치해석적 계산결과를 비교하였다. Fig. 7은 Udaykumar et al⁽¹⁾의 Phase-field method에 의한 결과로서 $\epsilon_C = 0.002$, $\epsilon_V = 0.002$ 일 때 그림에서 가는 실선이 200×200 의 격자계를 사용하여 계산된 결과이며 Fig. 8은 같은 조건에서 Gibou et al⁽²⁾의 level set method에 의하여 계산된 결과이다. 세 경우가 거의 동일한 결과를 보이고 있어 차이를 찾아보기 힘들다.

4. 결 론

2차원 수지상 결정의 성장에 대한 수치해석을 수행하여 다음과 같은 결과를 얻었다. 엄밀해가 알려져 있는 Frank sphere와의 비교에서 격자의 크기를 증가시키에 따라 엄밀해에 근접해 가는 것을 보였다. 5차의 WENO scheme을 사용할 때 격자가 적은 경우, 오차는 주로 경계면 속도의 계산법의 정확도에 의존한다.

같은 조건에서 Phase-field method에 의한 결과와 이전 연구자의 level set method에 의한 결과와 비교함으로써 본 연구의 결과가 타당성있음을 보였다.

후 기

본 논문은 학술진흥재단의 대학중점연구소 지원사업(No.D00247)에 의하여 수행되었으며 이에 감사한다.

참고문헌

1. Udaykumar, H. S., Mittal, R. and Shyy Wei, 1999, Computation of Solid-Liquid Phase Fronts in the Sharp Interface on Fixed Grids, *Journal of Computational Physics*, vol. 153, pp.535-574.
2. Gibou, F., Fedkiw, R. P., Cheng, L. and Kang, M., 2002, A Second Order Accurate Symmetric Discretization of the Poisson Equation on Irregular Domains, *Journal of Computational Physics*, vol. 176, pp.205-227.
3. Li, Z. and Soni, B., 1999, Fast and Accurate Numerical Approaches for Stefan problems and Crystal Growth. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 35, pp.461-484.
4. Chen, S., Merriman, B., Osher, S. and Smerka, P., 1997, A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problems, *Journal of Computational Physics*, vol.135, pp.8-29.
5. Osher, S. and Sethian, J. A., 1988, Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi Formulations, *Journal of Computational Physics*, 79, pp.12-49.
6. Sussman, M., Smereka, P. and Osher, S., 1994, A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow, *Journal of Computational Physics*, vol. 114, pp.146-159.
7. Sethian, J. A., 2001, Evolution, Implementation and Application of Level Set and Fast Marching Methods for Advancing Fronts, *Journal of Computational Physics*, vol.169, pp.503-555.
8. Udaykumar, H. S., Mao, L. and Mittal, R., 2002, A Finite-Volume Sharp Interface Scheme for Dendrite Growth Simulations: Comparison with Microscopic Solvability Theory, *Numerical Heat Transfer, part B*, vol. 42, pp.389-409.