

◎ 논문

3차원 범용 유동해석 프로그램의 개발 - CLSVOF 상경계면 추적법의 적용

성명호^{*1}, 손기현^{*2}, 허남건^{*3}

Development of a General Purpose Program for 3-D Flows - Implementation of a CLSVOF Interface Tracking Method

M. Sung, G. Son and N. Hur

A general purpose program for computing 3-D flows has been extended for two-phase flows with topologically complex interfaces. The 3-D interfaces are tracked by employing a coupled level set and volume-of-fluid (CLSVOF) method which not only can calculate an interfacial curvature accurately but also can achieve mass conservation well. The program has been tested through the computations of bubbles rising in a liquid. The numerical results are found to compare well with the results reported in the literature.

Key Words: VOF 방법(VOF Method), Level Set 방법(Level Set Method), 기포상승과 합체(Bubble Rise and Merging)

1. 서 론

최근 들어, 컴퓨터의 성능향상과 수치해석방법의 발달과 함께 전산유체역학을 통한 유동해석이 여러 분야에서 이루어지고 있다. 또한, 다양한 분야에 적용될 수 있는 범용 유동해석 프로그램의 개발도 활발히 진행되고 있다. 국내에서는 허남건 등[1]에 의해서 일반 비직교 좌표계를 사용하는 3차원 유동해석 프로그램이 개발되었으며, Spiral tube 내에서의 3차원 유동해석, MIRA model 후미의 저저항 최적설계, 유체·구조물 상호 작용 기법을 이용한 오일펜스의 변형 예측 등에 적용되었다.[2-4] 이 유동해석 프로그램은 일반 비직교 좌표계에 유리한 유

한 추적법 및 비 엷물림 격자계를 사용하며, 압력은 SIMPLE 알고리즘을 사용하여 계산하고 있다.

본 연구에서는 허남건 등[1]이 개발한 유동해석 프로그램에 상경계면 추적법을 적용하여 복잡한 이상유동을 해석할 수 있는 프로그램을 개발하고자 한다. 복잡한 상경계면을 추적하기 위한 수치기법 중에서 대표적인 것으로는 VOF (Volume of Fluid) 방법과 LS(Level Set) 방법이 있다. VOF 방법은 상용 프로그램인 STAR-CD[5]에서 사용되고 있으며 차분화된 제어체적 내에 액상의 체적비로 정의된 VOF 함수를 사용하여 상경계면을 계산한다.[6] 이 방법은 각 상의 체적이 잘 보존되는 장점 때문에 많은 연구에서 사용되고 있으나, 미분이 불연속인 VOF 함수로는 상경계면의 곡률을 정확하게 계산하기 어려운 단점이 있다. 이러한 단점을 개선하기 위하여 상경계면으로부터의 거리로 정의된 LS

* 2002년 9월 27일 접수

*1 서강대학교 대학원 기계공학과

*2 서강대학교 기계공학과

*3 정희원, 서강대학교 기계공학과

함수를 사용하여 상경계면을 계산하는 LS 방법이 제안되었다.[7] 미분이 연속인 LS 함수는 상경계면의 곡률을 정확히 계산할 수 있기 때문에 기포와 액적과 같이 표면장력이 중요한 작은 규모의 이상유동의 해석에 효과적이다. 그러나, 이 방법에서는 각 상의 체적을 일정하게 유지하지 못한다는 또 다른 문제점이 발견되었다. VOF 방법과 LS 방법의 단점을 극복하기 위해, VOF 함수와 LS 함수를 함께 사용하는 CLSVOF (Coupled LS and VOF) 방법이 최근에 제시되었다.[8] 이 방법은 상경계면의 곡률을 정확히 계산할 뿐만 아니라 각 상의 체적도 잘 보존하는 장점이 있다. 그러나, CLSVOF 방법은 VOF 함수의 이류, LS 함수의 이류, VOF 함수와 LS 함수를 이용하여 상경계면의 형상을 결정하는 상경계면의 재구성, LS 함수의 보정 등의 복잡한 알고리즘이 필요하다 또한 이 방법을 위한 상경계면 재구성 알고리즘이 참고문헌[8]에서 명확하게 제시되지 않았기 때문에 CLSVOF 방법을 이상유동의 해석에 실제로 적용된 경우는 참고문헌[8]에 국한되며, 범용 유동해석 프로그램에 적용된 사례는 보고되지 않고 있다.

본 연구에서는 CLSVOF 방법에 필요한 복잡한 알고리즘 정립하고, 이를 비 엿물림 격자계와 SIMPLE 알고리즘을 바탕으로 개발된 범용 유동해석 프로그램에 적용하였다. 프로그램의 검증과 응용 가능성을 시험하기 위해 액체에서 상승하는 단일기포의 거동과 기포의 합체과정을 직교 격자를 사용하여 계산하고 참고문헌에 발표된 결과와 비교하였다.

2. 수치해석

2.1 지배 방정식

정지된 액체층에서 상승하는 기포를 추적하기 위해, 기상에서 음의 값, 액상에서 양의 값을 가지는 LS 함수와 액상의 체적비로 표현되는 VOF 함수를 함께 사용하였다. 기포를 포함하는 유동을 비압축성으로 가정하면, 기체-액체 이상유동의 질량보존, 운동량보존 및 LS 함수(ϕ)의 이류와 VOF 함수(H)의 이류를 지배하는 방정식은 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla p + \rho \vec{g} \quad (2)$$

$$-\sigma x \nabla H + \nabla \cdot \mu [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T] \quad (3)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla H = 0 \quad (4)$$

식 (2)에서 표면장력을 포함하는 항($-\sigma x \nabla H$)은 체적력(body force)의 형태로 삽입되었으며,[9] 상경계면에서의 곡률(κ), 물성치는 아래와 같이 계산된다.

$$\kappa = \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (5)$$

$$\rho = \rho_g(1-H) + \rho_l H \quad (6)$$

$$\mu = \mu_g(1-H) + \mu_l H \quad (7)$$

식 (5)에서는 LS 함수를 이용하여 상경계면의 곡률을 계산함으로써 VOF 방법의 수치적 확산 문제를 보완하였다.

2.2 CLSVOF 방법의 알고리즘

CLSVOF 상경계면 추적법은 VOF 함수의 이류, LS 함수의 이류, 상경계면의 재구성, 재구성된 상경계면으로부터 LS 함수를 보정하는 알고리즘으로 구성되어 있다. VOF 이류 알고리즘에서는 식 (4)를 효과적으로 풀기 위하여 시간에 대해 다음 식과 같이 분리하였다.[8]

$$\frac{H^* - H^n}{\delta t} + \frac{\partial u H^n}{\partial x} = H^* \frac{\partial u}{\partial x} \quad (8)$$

$$\frac{H^{**} - H^*}{\delta t} + \frac{\partial v H^*}{\partial y} = H^* \frac{\partial v}{\partial y} \quad (9)$$

$$\frac{H^{n+1} - H^{**}}{\delta t} + \frac{\partial w H^{**}}{\partial z} = H^* \frac{\partial w}{\partial z} \quad (10)$$

위의 식 (8)-(10)을 더하면 다음과 같은 H 에 대한 보존식을 구할 수 있다.

$$\frac{H^{n+1} - H^n}{\delta t} + \frac{\partial u H^n}{\partial x} + \frac{\partial v H^n}{\partial y} + \frac{\partial w H^{**}}{\partial z} = 0 \quad (11)$$

VOF 함수의 불연속성에 의한 수치확산 없이 식 (8)-(10)을 풀려면 검사체적으로 이루어지는 액상의 부피를 정확히 구하여야 하며, 이를 위해서는 주어진 H 와 상경계면의 법선벡터 ($\vec{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi|$)로부터 상경계면의 형상을 결정하는 과정이 필요하다. 상경계면의 재구성에서 어려운 점은 검사체적 속에 존재할 수 있는 3차원 상경계면 형상이 매우 다양하다는 점이다. 본 연구에서는 이러한 형상을 효과적으로 수식화하기 위해 각 검사체적의 좌표를 식 (12)이 만족되도록 변환하였다.

$$dx_1 \geq dy_1 \geq dz_1 \quad (12)$$

where

$$dx_1 = |n_x| dx; \quad dy_1 = |n_y| dy; \quad dz_1 = |n_z| dz$$

여기서, dx, dy, dz 는 검사체적의 x, y, z 방향의 길이이다. 또한, 액상과 기상의 체적 중 작은 쪽을 택함으로써 상경계면의 존재 가능한 경우의 수를 Fig. 1에 나타낸 것처럼 5가지로 줄일 수 있었다. Fig. 1에 나타낸 삼각뿔의 체적은 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\begin{aligned} 6H_c dx dy dz &= dx_0 dy_0 dz_0 \\ &- \frac{dx_0 dy_0}{dz_0^2} \langle dz_0 - dz \rangle^3 \\ &- \frac{dx_0 dz_0}{dy_0^2} \langle dy_0 - dy \rangle^3 \\ &+ \frac{dx_0 dz_0}{dy_0^2} \langle dy_0 - dy - \frac{dy_0}{dz_0} dz \rangle^3 \\ &- \frac{dy_0 dz_0}{dx_0^2} \langle dx_0 - dx \rangle^3 \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \text{여기서, } H_c &= \min(H, 1-H) \\ \langle a \rangle &= \max(a, 0) \end{aligned}$$

여기서, 검사체적내의 액상에 속해있는 꼭지점에서 상경계면으로부터 가장 먼 꼭지점과 상

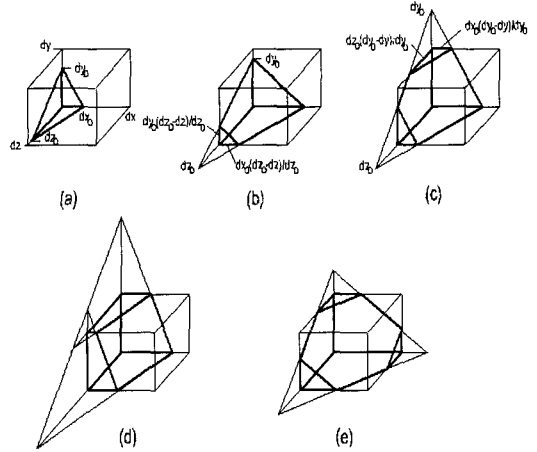


Fig. 1 Five possible interface configurations in three dimensions

경계면간의 거리로 정의된 함수 s 를 도입하면, $|n_x| dx_0 = |n_y| dy_0 = |n_z| dz_0 = s$ 관계식이 성립하므로 식 (13)은 다음과 같이 표현된다.

$$\begin{aligned} 6H_c dx_1 dy_1 dz_1 &= s_c^3 - \langle s_c - dz_1 \rangle^3 \\ &- \langle s_c - dy_1 \rangle^3 \\ &- \langle s_c - dy_1 - dz_1 \rangle^3 \\ &- \langle s_c - dx_1 \rangle^3 \end{aligned} \quad (14)$$

$$\text{여기서, } s_c = \min(s, dx_1 + dy_1 + dz_1 - s)$$

그러므로, 상경계면을 재구성하는 과정은 주어진 H 와 \vec{n} 으로부터 식 (14)를 이용하여 s_c 를 구하는 과정이다. 식 (14)는 s_c 에 대한 3차식이므로 일반적으로 반복계산법을 통해 풀어야 한다.[8] 그러나, 본 연구에서는 식 (14)를 효과적으로 풀기 위해 반복계산이 필요 없는 $s_c \leq dy_1$ 인 경우와 $dy_1 + dz_1 \leq s_c \leq dx_1$ 인 경우에 대해 먼저 계산을 하고, 그 외의 경우에는 Newton의 반복계산법을 이용하였다. 이와 같이 s_c 의 크기에 따라 식 (14)를 분리하는 것은 반복계산이

필요하지 않은 경우가 전체의 80%를 차지하는 기포상승 문제에 매우 효과적이었다.

식 (8)-(10)의 계산에서 필요한 x, y, z 각 방향으로 이루어지는 액상의 부피는 주어진 s_c 와 식 (14)를 이용하여 구할 수 있다. 예를 들면,

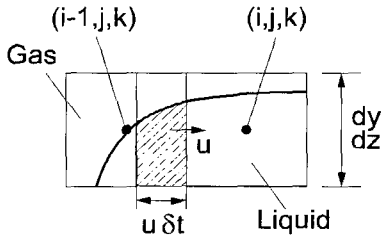


Fig. 2 Schematic for evaluation of the liquid volume advected in x-direction for $u > 0$

식 (8)을 차분화된 검사체적 ($dV = dx dy dz$)에 대해 적분하고 정리하면 다음의 식을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned}
 H_i^* dV &= H_i^n dV & (15) \\
 &- (u \delta t H^n dy dz)_{i-1/2} + (u \delta t H^n dy dz)_{i+1/2} \\
 &+ H_i^* [(u \delta t dy dz)_{i+1/2} - (u \delta t dy dz)_{i-1/2}]
 \end{aligned}$$

여기서, $(u \delta t H^n dy dz)_{i-1/2}$ 는 Fig. 2에 표시된 바와 같이 x 방향으로 이루어지는 액상의 부피를 나타내며, 식 (14)에 donor cell $(i-1, j, k)$ 의 s_c , \vec{n} 그리고 dx 를 $u \delta t$ 로 치환한 값을 대입하여 구할 수 있다.

LS 함수는 미분이 연속이기 때문에 식 (3)을 차분화하는 것은 간단하다. 그러나, 계산된 LS 함수는 각 상의 체적을 잘 보존하지 않기 때문에 재구성된 상경계면으로부터 LS 함수를 기하학적으로 보정하였다.

3. 계산결과 및 검토

3.1 단일기포의 상승

먼저, 본 연구에서 개발한 CLSVOF 상경계면 추적법을 이용한 이상유동 해석용 프로그램의 타당성을 확인하기 위하여 정지된 액체에서 상승하는 단일기포의 거동에 대해서 계산을 수행하였다. 지배방정식의 각 변수들을 무차원화하기 위하여 기포의 반지름 R 과 속도 \sqrt{gR} 을

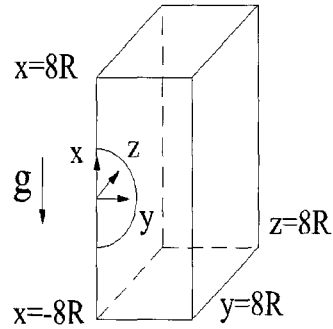


Fig. 3 Computational domain

Table 1 Comparison of the dimensionless terminal velocities of rising bubbles

| Case | Re | We | Ryskin and Leal[10,11] | present study |
|------|------|------|------------------------|---------------|
| (a) | 1.34 | 14.3 | 0.374 | 0.363 |
| (b) | 5.87 | 4.13 | 0.852 | 0.858 |
| (c) | 27.6 | 0.61 | 1.814 | 1.728 |

대표값으로 이용하였다. 계산영역은 Fig. 3에서 나타낸 바와 같이 $16R \times 8R \times 8R$ 이며, 사용된 계산격자의 수는 $66 \times 34 \times 34$ 이다. 계산 중에 기포가 계산영역 밖으로 벗어나는 것을 방지하기 위하여 계산영역을 기포의 속도와 함께 이동하였다. 경계조건으로는 slip 조건을 모든 경계면에 적용하고, 정지된 액체 내에 구형의 기포를 삽입함으로 계산을 시작하였다. 또한, 계산에 사용한 매개변수로는 기포면에 정렬된 body-fitted 격자를 사용한 Ryskin 과 Leal [10,11]의 수치해석 결과와 비교하기 위하여 $\rho_g / \rho_l = 0.001$, $\mu_g / \mu_l = 0.01$ 및 Table 1에 서술된 3가지 조건을 사용하였다.

Fig. 4는 Case(a)에 대한 시간에 따른 기포

상승속도의 변화를 나타낸다. 기포의 속도는 정지상태에서 선형적으로 증가하다가 기포가 부력, 표면장력 및 점성 마찰력의 균형에 적합한 형상으로 변형되면서 상승속도가 시간에 따라 변하지 않는 정상상태에 이르게 된다. 만약, 기포의 부피가 계산과정에서 보존이 되지 않는 경우에는 기포의 크기에 따라 상승속도가 변하기 때문에 일정한 종단속도를 얻을 수 없게 된다.

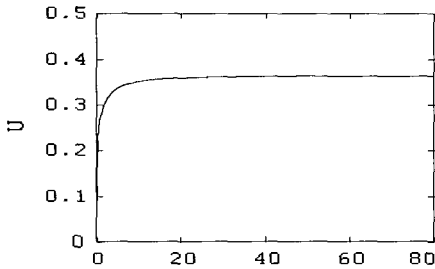


Fig. 4 Bubble rise velocity for Case(a)

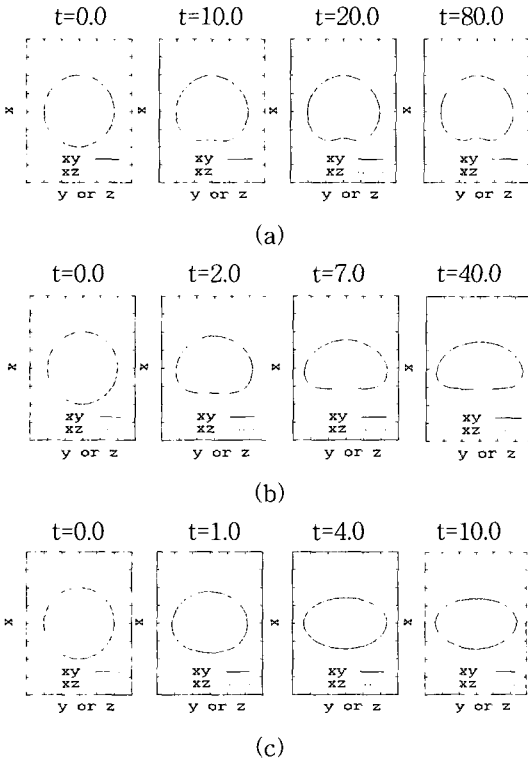


Fig. 5 Bubble rise patterns for three cases

기포의 형상은 Fig. 5(a)에 나타난바와 같이 초기에는 완전한 구형의 형태를 가지고 있으나,

종단속도에 이르면 하단부가 오목한 형태로 변하는 것을 볼 수 있다. Case(b)와 Case(c)의 경우도 상승속도가 일정한 종단속도에 도달할 때까지 계산을 수행하였으며, 기포형상의 변화는 Fig. 5(b)-(c)에 나타내었다. Reynolds 수가 크고, Weber 수가 작을수록 기포의 종단면 형상은 타원형으로 변함을 볼 수 있다. 세 가지 경우에 계산된 기포의 형상은 x - y 평면과 x - z 평면이 서로 완벽하게 대칭이며, 전체 계산시간동안 $t=0.0$ $t=2.0$ $t=5.0$ $t=7.0$

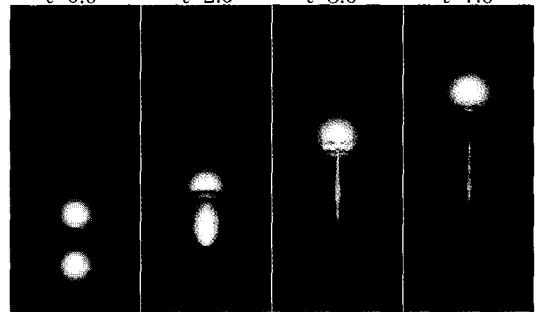


Fig. 6 Axisymmetric bubble merger pattern

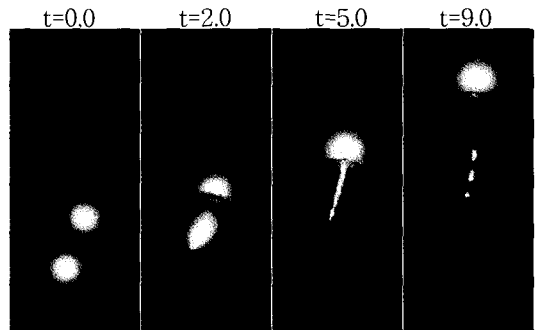


Fig. 7 Non-axisymmetric bubble merger pattern

기포의 체적변화는 0.01%이내였다. 또한, Table 1에 나타난바와 같이 기포의 상승속도를 body-fitted 격자를 사용한 Ryskin 과 Leal [10,11]의 결과와 비교하였을 때, 5%편차 내에서 잘 일치하였다.

3.2 기포의 합체

본 연구에서 개발한 프로그램의 해석가능성을 시험하기 위해 두 기포간의 합체과정을 해석하였다. 계산 조건은 Table 1의 Case (a)를 사용하였다. Fig. 6은 동일한 축 상에 위치한 두 기

포의 합체과정을 3차원 형태로 나타내었다. 아래에 위치한 기포의 상단부가 먼저 변형되면서 시간이 지남에 따라 위의 기포에 빨려들어 가듯이 합체가 일어난다. 두 기포가 다른 축 상에 위치한 경우의 합체과정은 Fig. 7과 같다. 이 경우에도 Fig. 6과 같은 합체과정이 나타나지만, 두 기포의 중심축이 합체과정을 통해 기포반경의 약 50%정도 오른쪽으로 치우침을 볼 수 있다. 합체과정에서 생긴 기포의 불규칙한 형상은 표면장력에 의해 복원되어 Fig. 5(a)의 정상상태와 같은 형상으로 변함을 볼 수 있다. 두 기포의 합체과정의 계산과정에서 기포의 체적변화는 0.01%이내였다.

4. 결 론

본 연구에서는 비 엷물림 격자계와 SIMPLE 알고리즘을 사용하여 개발된 기존의 3차원 범용 유동해석 프로그램의 적용범위를 이상유동해석으로까지 확장하기 위해 CLSVOF 상경계면 추적법을 적용하였다. 프로그램의 검증을 위하여 정지된 액체 중에서 상승하는 단일기포의 거동 및 기포의 합체과정에 대한 계산을 수행하였다. 기포의 종단속도는 body-fitted 방법을 사용하여 얻은 결과와 비교하면 5%편차 내에서 잘 일치하였으며, 기포합체를 포함한 전체의 계산 중에 기포의 체적변화는 0.01%이내였다. 그러므로, 상경계면의 곡률을 정확히 계산하며, 각 상의 체적보존이 잘되는 CLSVOF 상경계면 추적법이 범용 유동해석 프로그램에 적용될 수 있음이 입증되었다. 본 연구는 이상유동의 해석이 가능한 범용 프로그램을 개발하는 초기단계로서 CLSVOF 상경계면 추적법을 직교 좌표계에 대해서만 적용하였지만, 향후 일반 비직교 좌표계로 확장할 예정이다.

후 기

본 연구는 과학기술부의 공학용 해석 소프트웨어

개발사업의 연구비 지원(M1-012900001)으로 수행되었으며, 이에 관계자 여러분께 감사 드립니다.

참고문헌

- [1] 허남건, 조원국, 윤성영, 김광호, "일반 비직교 좌표계를 사용하는 3차원 범용 유동해석 프로그램의 개발," *대한기계학회논문집*, 18권 (1994), pp.3345-3356.
- [2] 허남건, 김성원, "Spiral Tube 내에서의 3차원 유동해석," *한국전산유체공학회지*, 4권 (1999), pp.27-33.
- [3] 허남건, 김옥, "MIRA Model 후미의 저저항 최적설계," *한국전산유체공학회지*, 4권 (1999), pp.34-40.
- [4] 김태균, 김옥, 허남건, "유체·구조물 상호작용 기법을 이용한 오일 펜스의 변형 예측," *한국전산유체공학회지*, 4권 (2000), pp.16-22.
- [5] STAR-CD, version 3.10 Manual, Computational Dynamics LTD., (1999)
- [6] Hirt, C.W. and Nichols, B.D., "Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries," *J. Comput. Phys.*, Vol.39 (1981), pp.201-225.
- [7] Sussman, M., Smereka, P. and Osher, S., "A Level Set Approach for Computing Solution to Incompressible Two-Phase Flow," *J. Comput. Phys.*, Vol.114 (1994), pp.146-159.
- [8] Sussman, M. and Puckett, E.G., "A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows," *J. Comput. Phys.*, Vol.162 (2000), pp.301-337.
- [9] Brackbill, J.U., Kothe, D.B. and Zemach, C., "A Continuum Method for Modeling

Surface Tension," *J. Comput. Phys.*, Vol. 110 (1992), pp.335~354.

[10] Ryskin, G. and Leal, L. G., "Numerical Solution of Free-Boundary Problems in Fluid Mechanics, Part 1," *J. Fluid Mech.*, Vol.148 (1984), pp.1-17.

[11] Ryskin G. and Leal, L.G., "Numerical Solution of Free-Boundary Problems in Fluid Mechanics, Part 2," *J. Fluid Mech.*, Vol.148 (1984), pp.19-35.