

다상 유동 및 연소 해석에서 Lattice Boltzmann 방법의 응용 가능성에 대한 고찰

허 강열
포항공과대학교 기계공학과

Application of the lattice Boltzmann method to multiphase flow and combustion analysis

KangYul Huh

Mechanical Engineering Department,
Pohang University of Science and Technology

Key Words: lattice Boltzmann method, lattice gas automata, 다상 유동, 연소

Abstract

LBM은 분자 운동을 직접 모사하지 않고 통계 역학적 원리에 기초하여 주어진 격자 구조 아래서 입자들의 단순 이동, 충돌 과정의 반복에 의해 유동을 모사하는 방법이다. 이미 다양한 열유동 현상들에 대한 응용 결과가 발표되었으며 병렬화, 단순한 프로그래밍 등의 장점으로 인해 앞으로 연소, 다상 유동, micro/nano 스케일 유동 등의 해석에 많은 가능성을 지니고 있다. 아직 국내에서는 이에 대한 소개가 제대로 이루어지지 못해 관련 분야의 연구자들이 충분한 관심을 갖고 있지 않은 것으로 생각되어 본 논문에서 LBM 방법에 대한 개략적인 소개를 시도하였다.

1. 서 론

유동 현상은 미소 관점에서 수많은 분자들의 운동에 의해 이루어지며 hyperbolic 특성을 지니는 Boltzmann 식에 의해 기술될 수 있다. 그러나 초회박기체 영역 이외의 경우 모든 분자 운동을 기술하는 것은 비현실적인 접근 방법이다. Knudsen 수가 충분히 작은 경우 연속체

가정 하에서 continuity, Navier-Stokes, 에너지 보존식 등의 편미분 방정식을 만족하게 된다. 이와 같은 연속체 가정에 의한 elliptic 특성을 지니는 보존식들을 시간과 공간에 대해 이산화 하여 얻어지는 선형 혹은 비선형 matrix 식의 해를 구하는 방법이 현재까지 전산유체 해법의 근간을 형성하여 왔다.

1986년 Uriel Frisch, Brosl Hasslacher, Yves Pomeau[1]은 lattice gas automata의

기본 원리로서 질량과 속도의 크기가 같고 속도의 방향만이 한정된 인위적 격자 방향을 따라 움직이는 입자들에 의해 거시적인 유동의 재현이 가능하다는 것을 입증하였다. 그 후 lattice gas automata (LGA)[1, 2]와 이를 평균한 형태인 lattice Boltzmann method (LBM)[3, 4, 5]을 전산 유동 해석에 응용하기 위한 연구가 활발히 이루어지고 있으며 다양한 물리적 현상에 확장 적용하거나 결과의 신뢰성을 검증하기 위해 노력하고 있다. 최근에는 일본, 중국에서도 관련 학술 논문이 나오고 있으며 독일에 소재한 Exa Corp.에서는 LGA 기법에 대한 국제 특허[6]를 보유하고 자동차 엔진 내부 및 외부 유동 해석에 적용 가능한 상용 패키지를 개발하여 이미 국내에도 보급한 바 있다. 아직 국내에서 관심을 갖고 활발한 연구가 이루어지지 못하고 있는 상황은 이 방법이 지니고 있는 가능성과 중요성에 비추어 볼 때 앞으로 문제가 있으므로 본 논문에서 LGA와 LBM에 대한 개략적인 원리와 응용 사례, 앞으로의 발전 방향에 대해 간략히 소개하고자 한다.

2. LGA와 LBM의 개요

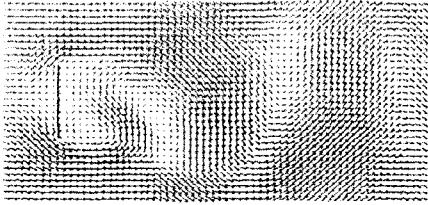
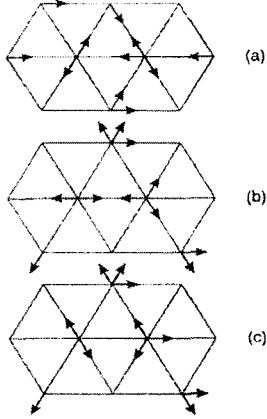
LGA와 LBM은 mesoscopic 방법으로 불리며 실제 분자 운동의 스케일보다 훨씬 큰 시간과 공간격자 구조 내에서 인위적인 동일한 입자들의 이동과 충돌 과정의 반복으로서 모사하게 된다. LGA에서는 Lagrangian하게 각각의 입자를 따라 가면서 입자의 수와 운동량을 평균하여 밀도 및 속도 벡터를 구하는 반면 LBM에서는 LGA 식을 각각의 격자점을 잇는

연결선 위에 입자가 존재할 확률에 대한 식으로 변환하여 격자점 간의 이동과 충돌 과정을 모사하는 방법이다. 따라서 LGA와 LBM은 분자 레벨의 스케일과 macro 레벨 스케일의 중간 정도에 위치하여 양쪽 특성을 모두 지니고 있으므로 표면장력, 상변화등의 경계면에서의 물리적 현상, 경계 조건 처리, 다상 유동, 계산의 병렬화 등에 유리한 장점이 있다.

Fig. 1[2]은 2차원 평면 상의 육각형 격자에서 LGA의 기본 원리를 나타낸다. Fig. 1의 (a)는 초기 조건으로서 각 화살표는 각 격자점에서 화살표 방향으로 움직이는 입자들을 나타낸다. (b) 그림은 한 시간 스텝 후 단위 격자 간격을 이동한 후의 입자들의 위치와 방향을 나타낸다. (c) 그림은 입자들 간의 충돌 직후 상태를 나타내며 이 때 충돌은 입자의 개수와 각 격자점에서의 총 운동량이 보존되도록 일어났음을 알 수 있다. 이와 같이 단순한 입자의 이동, 충돌 과정의 반복 계산을 통해 임의의 복잡한 유동 현상을 모사할 수 있다. Fig. 2는 LGA 방법으로 얻어진 평판 후류의 유동 결과로서 해의 stochastic한 진동을 없애기 위해 각 속도 벡터는 육각형 2차원 격자계에서 16x16 격자점들에 대한 평균을 나타낸다.

LGA의 입자 보존식은 다음과 같이 기술된다[2].

$$n_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{r}, t) + \Delta t [n(\mathbf{r}, t)]$$



Frisch 등은 정상 상태에서 입자 밀도의 평형값을 다음과 같이 평균 밀도와 유동 속도에 대한 Fermi-Dirac 함수로서 나타낼 수 있음을 보였으며 이는 각 격자점들 간의 연결선에 하나의 입자만이 존재할 수 있도록 규정한 것에 기인한다[5].

$$\langle n_i \rangle = \frac{\rho}{6} + \frac{2\rho}{6} e_{i\alpha} u_\alpha + \rho G(\rho) Q_{i\alpha\beta} u_\alpha u_\beta + O(u^3)$$

$$\text{where } G(\rho) = \frac{16-2\rho}{36-\rho}$$

$$Q_{i\alpha\beta} = e_{i\alpha} e_{i\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta}$$

LGA 방법의 문제점으로서 stochastic 방법으로서 지나는 과도한 noise가 있으며 rest particle을 도입함으로써 점도를 낮출 수 있으나 일반적으로 LBM에 비해 높은 Reynolds수 유동을 재현하기 어렵다. LGA는 통계역학적으로 엄밀한 평형 조건에 기초함으로써 Boltzmann의

H-theorem에 의해 무조건적인 안정성 (stability)이 보장되는 반면 Galilean invariance를 만족시키지 못하므로 유동 속도가 클 경우 문제가 될 수 있다.

LBM은 LGA 식을 평균함으로써 얻어지는 입자의 존재 확률에 대한 해를 구하는 방법으로서 LGA가 입자의 유무에 대한 Boolean 변수에 대한 식인 반면 LBM에서는 확률에 대한 floating 변수를 다루게 되므로 상대적으로 더 큰 memory와 계산 시간이 요구된다. 충돌 과정을 LGA에서와 같이 가능한 모든 경우를 직접 고려하지 않고 Boltzmann 식의 BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) 모델에서와 같이 평형 상태로의 relaxation 과정으로 모사함으로써 충돌 계산이 훨씬 간편해 진다. LBM에서의 보존식은 다음과 같다[4].

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i, t+1) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{r}, t) - \bar{f}_i(\mathbf{r}, t))$$

Chapman-Enskog에 의한 multi-scaling 전개식에서 평균 유동 속도가 입자의 운동 속도, 즉 음속에 비해 충분히 작다는 가정 하에 공간상에서의 등방성과 Galilean invariance를 충족시키기 위한 평형 분포를 유도하면 일반적인 경우 다음과 같은 분포 함수가 얻어진다[5].

$$E_i(\rho, \mathbf{u}) = \begin{cases} \rho \left(\frac{1-d_n}{b} + \frac{D}{c^2 b} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{D(D+2)}{2c^4 b} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{Du^2}{2c^2 b} \right), & i=1, \dots, b \\ \rho \left(d_n - \frac{u^2}{c^2} \right), & i=0 \end{cases}$$

이 분포 함수는 다음의 질량과 운동량 보존식을 만족시킨다.

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_\alpha \rho u_\alpha &= 0 \\ \partial_t \rho u_\alpha + \partial_\beta \rho u_\beta u_\alpha &= \\ -\partial_\beta \left[\frac{\rho(1-d_0)}{D} c^2 \delta_{\alpha\beta} \right] &+ \nu \partial_\beta \partial_\beta \rho u_\alpha + \partial_\alpha \zeta \partial_\beta \rho u_\beta \end{aligned}$$

여기서 shear viscosity와 bulk viscosity는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{c^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right)}{D+2} \\ \zeta &= \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \left[\frac{2c^2}{D+2} - c^2 \frac{(1-d_0)}{D} \right] \end{aligned}$$

LBM은 평균화된 분포 함수에 대한 식의 해를 구하므로 LGA에 비해 noise가 없는 반면 임의적으로 평형 분포를 가정했기 때문에 조건부의 안정성을 갖게 된다. LGA에서와 마찬가지로 경계 조건의 처리가 용이하며 기존 CFD 방법에 비해 표면 장력, 상변화 등의 interface 현상이 중요시되는 경우 유리한 이점이 있다.

3. 응용 사례

(1) Sudden Expansion

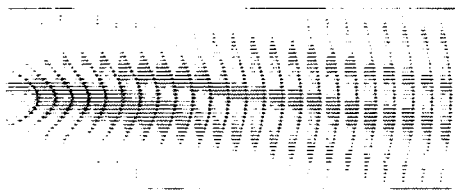


Fig. 3 Nx=385, Ny=49, 등속 등압 경계조건

Fig. 3은 본 연구실에서 수행한 평면상 sudden expansion에서의 간단한 유동

계산 결과를 나타낸다.

(2) 다상 유동[7]

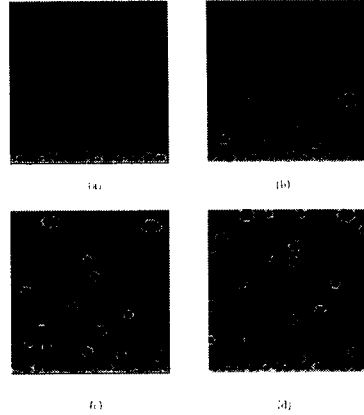


Fig. 4 폴 보일링 밀도 분포 계산 결과

Fig. 4는 200×200개의 격자점으로 이루어져 있으며 양 옆면은 순환경계조건, 윗면은 standard bounce-back 경계조건을 적용하였으며 아래면은 상변화를 고려한 bounce-back 경계조건을 적용하여 이상유동을 계산한 결과이다.

(3) DNS 난류 모사[4]

Fig. 5는 초기 레이놀즈 수는 10,000, 512×512개의 격자로 가장 큰 소용돌이가 80번 회전하는 동안 계산한 DNS결과이다. 오른쪽 위의 그림은 pseudospectral 방법으로 계산한 vorticity 함수이며 오른쪽 아래 그림은 LBM으로 계산한 vorticity 함수이다. 왼쪽 위의 그림은 pseudospectral 방법(점선)과 LBM(실선) 계산에 의한 에너지 스펙트럼을 비교한 것이며 왼쪽 아래 그림은 시간에 따른 enstrophy 함수를 비교한 것이다.

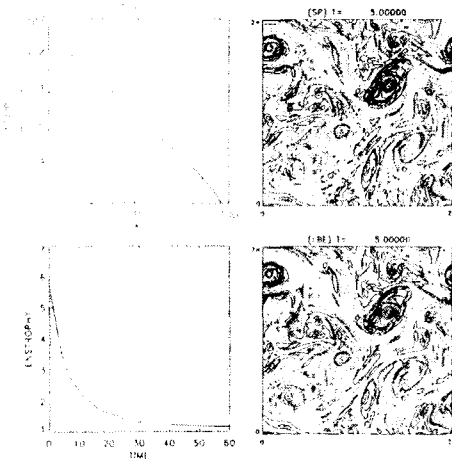


Fig. 5 a comparison of the vorticity distributions from a pseudospectral method and the LBM

(4) PowerFlow(Exa Corp.)[6]

Fig. 6은 Exa에서 자사의 특허인 digital physics 기술에 기반을 두고 개발한 유동 해석 프로그램인 PowerFLOW로 자동차 엔진의 흡입 밸브와 실린더 안의 유동을 계산한 결과이다.

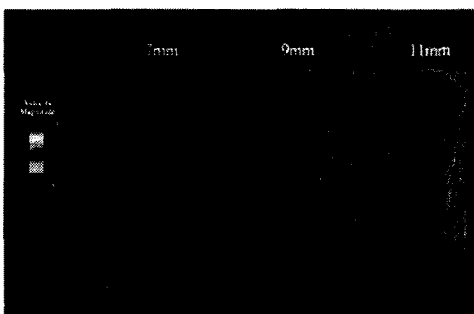


Fig. 6 Streamlines through valve centerline for all three intake ports.

4. 결론

LBM은 프로그램이 매우 단순하며 비압축성 유동 등 몇 가지 경우에서 기존의 FVM 방법에 비해 효율적인 계산이 가능하다는 사실이 입증되어 있고 또한 완벽한 병렬화가 가능하다. 본 논문에서 예시한 경우들 외에도 최근 연소[8, 9], 상변화[7, 10], shock[11]을 포함하는 초음속 유동 등의 여러 다양한 물리 현상에 대한 연구 결과가 발표되고 있다. 실제적인 응용 분야에서는 Exa Corp.에서 이루어지는 연구 외에는 대부분 LBM에 의한 연구가 주류를 이루고 있다. 새로운 물리 현상을 모사하기 위해 LBM을 확장하거나 새로운 응용 케이스에 대한 적용과 검증 연구들이 이루어지고 있다. 연소 반응의 경우 등은 가정에 의해 밀도 변화가 무시될 수 있는 경우에 대해서는 이미 LBM 적용 결과가 발표된 바 있으나 일반적으로 연소 반응 시에 수반되는 급격한 온도와 밀도의 변화를 포함한 경우에 대해서는 아직 적용되지 못하고 있다. 이와 같은 문제를 극복하기 위해 LBM과 기존의 FVM 방식을 결합하여 결과를 얻은 사례가 발표되었으나 LBM의 장점을 충분히 살리기는 어려울 것으로 생각되며 앞으로 이 방향으로 연구가 이루어져야 할 것으로 생각된다. 일반적으로 온도 변화를 모사하기 위해 속도의 방향에 대해서 뿐 아니라 속도의 크기에 대해서도 일정한 개수의 집합을 정의하고 이로부터 입자의 내부 운동에너지를 합으로서 온도 변화를 모사하는 방법과 에너지를 추가의 입자의 스칼라 양으로서 독립적으로 해를 구한 후 유동식과 결합시키는 두 가지의 방법이 있을 수 있다. 전자의 경우 실제 물리 현상에는 충실한 반면 넓은 범위의 온도 변화

를 재현하기 어려운 점이 있다. 화학 반응은 일반적으로 각각의 화학종에 대해 독립적인 분포 함수를 정의하고 충돌 과정과 화학 반응을 수반하는 충돌을 차례로 일으킴으로써 모사할 수 있으나, 어려운 문제는 에너지 보존 및 상태 방정식을 통한 유동장과의 상호 결합을 적절히 반영하는 부분이라 할 수 있다.

참고문헌

- [1] Frisch, U., Hasslacher, B., and Pomeau, Y. *Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations*. Phys. Rev. Lett. **56**, 1986, pp1505-1508
- [2] Daniel H. Rothman and Stephane Zaleski. *Lattice-Gas Cellular Automata simple models of complex hydrodynamics*. Cambridge university press
- [3] Benzi R., Succi S. and Vergassola M. *The lattice Boltzmann-equation - theory and applications*. Phys. Rep. **222**:145-97
- [4] Shiyi Chen and Gary D. Doolen. *Lattice Boltzmann method for fluid flows*. Annu. Rev. Fluid Mech. 1998. **30**:329-64
- [5] James Maxwell Buick. *Lattice Boltzmann methods in interfacial wave modelling*. PhD thesis, The University of Edinburgh, 1997.
- [6] www.exa.com
- [7] Koji Kono, Tatsumi Ishizuka, Hiroshi Tsuda, Atsushi Kurosawa. *Application of lattice Boltzmann model to multiphase flows with phase transition*. computer physics communications. **129**. 2000. pp110-120
- [8] Olga Filippova and Dieter Hänel. *A novel lattice BGK approach for low mach number combustion*. Journal of computational physics. **158**. 2000. pp 139-160
- [9] S. Chen, S. P. Dawson, G. D. Doolen, D. R. Janecky and A. Lawniczak, *Lattice methods and their applications to reacting systems*. Computers chem. engng. v. **19**, n.6/7 pp 617-646, 1995
- [10] Gunstensen AK, Rothman DH. *Lattice Boltzmann studies of immiscible two phase flow through porous media*. J. Geophys. Res. **98**. pp 6431-41
- [11] Chenghai Sun. *Simulation of compressible flows with strong shocks by an adaptive lattice Boltzmann model*. Journal of computational physics. **161**. 2000. pp 70-84