

Lattice Boltzmann 법을 이용한 Cross-Junction 채널 내의 droplet 유동에 관한 수치해석적 연구

박재현* · 서용권**

*동아대학교 대학원 기계공학과

**동아대학교 기계공학과

Numerical Study on the Droplet Flows in a Cross-Junction Channel Using the Lattice Boltzmann Method

JAE-HYOUN PARK* AND YOUNG-KWEON SUH**

*School of Mechanical Engineering, Dong-A University, Busan, Korea

**Mechanical Engineering, Dong-A University, Busan, Korea

KEY WORDS: cross-junction channel(십자 채널) Lattice Boltzmann method(라티스-볼츠만 법), Binary fluid model(이상 유동 모델), Free Energy Model(프리-에너지 모델), parallel computation(병렬 연산)

ABSTRACT: This study describes a simulation of two-dimensional bubble forming and motion by the Lattice Boltzmann Method with the phase field equation. The free energy model is used to treat the interfacial force and deformation of binary fluids system, drawn into a T-junction the micro channel. A numerical simulation of a binary flow in a cross-junction channel is carried out by using the parallel computation method. The aim in this investigation is to examine the applicability of LBM to numerical analysis of binary fluid separation and motion in the micro channel.

1. 서 론

LBM(Lattice Boltzmann Method)은 1980년대 후반 이산격자 상에서 입자들의 상호작용을 바탕으로 한 Navier-Stokes 방정식의 해를 구하는 새로운 수치적 접근법으로 개발된 것으로 일정한 모양의 격자상태를 유지하는 가상의 유체격자(Lattice Gas Cellular Automata)를 만들고 각 격자점에 존재하는 입자의 확률적 분포를 이용하여 유동을 해석하는 것으로 이 방정식을 연속체이론에 따라 전개하면 유체의 유동방정식을 얻을 수 있어 Navier-Stokes 방정식의 해가 얻어진다.

LGCA는 여섯 개의 정삼각형 격자를 연결하여 각 격자점에서 0 또는 1의 값으로서 유체를 나타낸 것으로 정해진 시간 간격에 따라 이웃한 입자 상호간의 충돌법칙에 따라 그 위치가 결정되는 방법이다. 이러한 LGCA는 레이놀즈수가 증가할 경우 계산량이 급격히 증가하는 점, 마하수가 낮고 비압축성 유체 유동해석에 국한 되는 점과 통계적 미소변동으로 인한 해석 오차 등의 단점으로 인하여 주로 저 레이놀즈수와 마하수를 갖는 유체유동해석에 사용되고 있다.

LBM은 LGCA가 가지는 통계적 미소변동으로 인한 해석오차를 제거하는 가장 효과적인 방법 중의 하나로서 McNamara

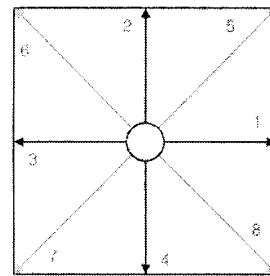


Fig. 1 Direction velocities in D2Q9 model

에 의해서 제안되었다. LBM은 격자점에서 발생하는 통계적 미소변동을 격자점에서 개개의 분산 개체의 조화평균 형식을 취한 평균입자분포함수에 관한 입자의 운동방정식으로부터 계산된 각 방향의 실수의 확률값을 이용하여 제거하였으며, 이 입자분포함수 값의 국소 적분으로 각 격자점의 유체 속도와 밀도를계산하였다. 또한 BGK 완화 모델을 이용하여 알고리즘을 더욱 간단하게 하였다. LBM은 저 레이놀즈수의 유체유동에 대한 해석에서 효과적으로 최근에는 Chen과 Doolen에 의해 개발된 D2Q9가 2차원 유동해석에 사용되고 있다. Navier-Stoke 방정식을 이용하여 물성치를 수치적으로 구하는 기존의 수치해석적인 방법에 비하여 LBM은 Boltzmann 방정식을 이용하여 유체 입자의 확률적인 분포를 계산하고 이를 통해 밀도와 운동량을 구하는 것으로 해석코드의 제작이 간단하고 3차원로의 확장 및 병렬처리가 용이한 장점을 가지고 있다.

본 연구에서는 LBM에 대한 병렬처리의 효과를 분석하기 위

박재현 : 부산광역시 사하구 하단동 840번지 동아대학교

마이크로유동-혼합 국가지정연구실

051-200-6982 p6873@donga.ac.kr

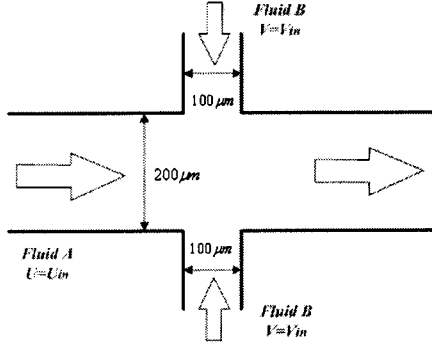


Fig. 2 Numerical Simulation Model

해 Driven-Cavity 유동에 대해서 수치해석을 하였으며 이를 바탕으로 cross-junction 채널 내의 Droplet의 형성 및 거동에 대해 수치해석을 수행하여 특성을 고찰한다.

2. 유동모델 및 수치해석 방법

2.1 유동모델

Fig. 2는 본 연구에서 사용된 유동모델을 나타낸 것이다. 채널의 형태는 cross-junction이며 x -방향의 main 채널의 폭은 $200\mu\text{m}$, y -방향의 sub 채널은 $200\mu\text{m}$ 이다. 본 연구에서 채널내의 droplet의 형성 및 거동을 수치적으로 파악하기 위하여 x -방향의 입구에서는 유체 A가 U_{in} 의 속도로 유입되며, y -방향 입구에서는 유체 B가 V_{in} 의 속도로 각각 유입되는 것으로 하였다. 본 연구에서는 무차원 속도가 사용되었으며 마이크로 채널 내의 유동이기에 때문에 레이놀즈수는 상당히 작은 값을 가진다.

2.2 수치해석 방법

2.2.1 Free Energy Model

유체의 고유 특성이 다른 유체들, 액상-기상과 같은 상태가 다른 두 유체들의 유동과 같은 다양한 이상유동(binary flow)에 대해서 LBM을 이용한 수치해석에서는 이들 유체사이의 경계를 수치모사하기 위해서 많은 방법들이 사용되어 지고 있다. 경계를 추적하는 다양한 방법들은 각각이 장단점을 가지고 있는데, 본 연구에서는 Free energy model을 사용하였다.[1],[2].

Free energy model은 혼합하지 않는 두 개 이상의 유체유동에 대한 수치시뮬레이션에 활용되고 있으며 본 연구에서도 마이크로 채널 내에서 흐르는 두 유체 사이의 거동을 대상으로 하였다.

Fig. 2에서와 같이, x -방향의 입구로 유입되는 유체 A의 밀도를 ρ_A 라 하고 y -방향 입구로 유입되는 유체 B의 밀도를 ρ_B 라 하면 채널 내의 유체의 전밀도(total density) $\rho = \rho_A + \rho_B$ 이며 두 유체의 밀도 차이는 $\varphi = \rho_A - \rho_B$ 와 같이 둘 수 있다. Fig. 1과 같은 래티스 격자 내의 각 i -link에서 ρ 와 φ 를 구하기 위해서 두 개의 distribution 함수 $f_i(r,t)$ 와 $g_i(r,t)$ 가 정의되며 이들 함수는 다음과 같은 single relaxation time

Boltzmann 방정식에 의해서 구해진다.

$$f_i(r + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(r, t) = -\frac{1}{\tau_\rho} [f_i(r, t) - f_i^{eq}(r, t)] \quad (1)$$

$$g_i(r + e_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(r, t) = -\frac{1}{\tau_\varphi} [g_i(r, t) - g_i^{eq}(r, t)] \quad (2)$$

여기서, τ_ρ 와 τ_φ 는 충돌에 의한 독립 완화 계수(independent relaxation parameter)이며 $f_i^{eq}(r, t)$ 와 $g_i^{eq}(r, t)$ 는 i -link에서의 평형분포(equilibrium distribution) 함수와 농도분포함수를 나타낸 것이다. 한편, 유동장 내의 유체의 전밀도와 유체 운동량(fluid momentum)은 다음의 관계로서 정의되어진다.

$$\rho = \sum_i f_i^{eq} \quad (3)$$

$$\varphi = \sum_i g_i^{eq} \quad (4)$$

$$\rho v = \sum_i f_i^{eq} e_i \quad (5)$$

경계를 이루는 두 유체간의 연속방정식은 다음으로부터 구할 수 있다.

$$\sum_i f_i^{eq} e_{i\alpha} e_{i\beta} = c^2 P_{\alpha\beta} + \rho v_\alpha v_\beta \quad (6)$$

$$\sum_i f_i^{eq} e_{i\alpha} = \varphi v_\alpha \quad (7)$$

$$\sum_i g_i^{eq} e_{i\alpha} e_{i\beta} = c^2 \Gamma \Delta \mu \delta_{\alpha\beta} + \varphi v_\alpha v_\beta \quad (8)$$

여기서 $P_{\alpha\beta}$ 는 압력텐서, $\Delta \mu$ 는 두 유체간의 화학적인 포텐셜의 차, Γ 는 유체의 변동성을 나타내는 계수이다.[2]

i -link에서의 평형분포함수 $f_i^{eq}(r, t)$ 와 농도분포함수 $g_i^{eq}(r, t)$ 를 속도에 대해서 2차 정밀도로 표현하면 다음과 같다.

$$f_0^{eq} = A_0 + C_0 v^2 \quad (9)$$

$$f_i^{eq} = A_1 + B_1 v_\alpha e_{i\alpha} + C_1 v^2 + D_1 v_\alpha v_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta} + G_{1,\alpha\beta} e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (i = 1, 2, 3, 4)$$

$$f_i^{eq} = A_2 + B_2 v_\alpha e_{i\alpha} + C_2 v^2 + D_2 v_\alpha v_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta} + G_{2,\alpha\beta} e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (i = 5, 6, 7, 8)$$

$$g_0^{eq} = a_0 + c_0 v^2$$

$$g_i^{eq} = a_1 + b_1 v_\alpha e_{i\alpha} + c_1 v^2 + d_1 v_\alpha v_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (10)$$

$$g_i^{eq} = a_2 + a_2 v_\alpha e_{i\alpha} + c_2 v^2 + d_2 v_\alpha v_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (i = 5, 6, 7, 8)$$

여기서 각 수식에 대한 계수들은 A. Lamura and G. Gonnella의 논문을 참고하였다.[3]

식(1)~(10)을 이용하여 채널 내의 유동장을 해석하기 위해서는 정의되지 않은 변수인 $P_{\alpha\beta}$ 와 $\Delta\mu$ 에 대한 정의를 위해서 Free energy 함수 F 를 도입하며 다음과 같다.

$$F = \int dr \left[\frac{1}{3} \rho \ln \rho + \frac{a}{2} \varphi^2 + \frac{b}{4} \varphi^4 + \frac{\kappa}{2} (\nabla \varphi)^2 \right] \quad (11)$$

한편, Free energy 함수로부터 다음을 구할 수 있다.

$$\text{Surface tension ; } \sigma = \frac{2}{3} \sqrt{-2a\kappa} \quad (12)$$

$$\text{Interfacial width ; } \xi = 2 \sqrt{\frac{2\kappa}{-a}} \quad (13)$$

The chemical potential difference between the two fluids

$$\text{; } \Delta\mu = \frac{\delta F}{\delta \varphi} = a\varphi + b\varphi^3 - \kappa \nabla^2 \varphi \quad (14)$$

$$\text{Pressure tensor ; } P_{\alpha\beta} = p_0 \delta_{\alpha\beta} + \kappa \partial_\alpha \varphi \partial_\beta \varphi \quad (15)$$

$$\text{kinetic viscosity ; } \nu = \Delta t \frac{c^2}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (16)$$

$$\text{macroscopic mobility ; } \Theta = \Gamma \Delta t c^2 \left(\tau_\varphi - \frac{1}{2} \right) \quad (17)$$

2.2.2 Boundary Condition

평형분포함수 $f_i^{eq}(r,t)$ 와 농도분포함수 $g_i^{eq}(r,t)$ 를 구하기 위해서는 입구와 출구, 벽면에서의 경계조건을 정의해주어야 한다. 본 연구에서 벽면에서 사용된 경계조건은 Fig. 3과 같으며 $\tilde{f}_\alpha(x_b, t) = \tilde{f}_\alpha(x_f, t)$ 와 같이 나타낼 수 있다. 여기서 ‘-’는 경계를 중심으로 마주보고 있는 격자점을 나타낸다.[4]

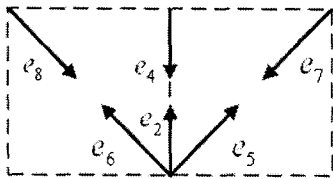


Fig. 3 Bounce back boundary condition

입구조건으로 식(18)을 사용하였으며

$$\tilde{f}_{\alpha_{inlet}} = \tilde{f}_\alpha + 2\omega_\alpha \rho \frac{3}{2} e_\alpha^- u_{inlet} \quad (18)$$

여기서 ω_α 는 weighting factor를 나타낸다.

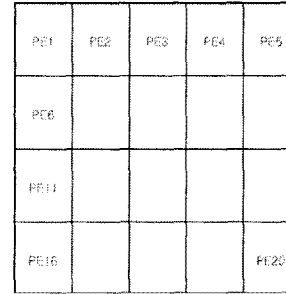
위 조건에 대해서 $i = 1$ 일 때와 $i = i_{max}$ 를 고려해보면 각각 입구와 출구에서의 index로서 1차 정밀도의 경계조건으로 $\tilde{f}_\alpha(1,j) = \tilde{f}_\alpha(2,j)$, $\tilde{f}_\alpha(i_{max},j) = \tilde{f}_\alpha(i_{max}-1,j)$ 로 둘 수 있다. 또한 경계에서의 정밀도를 높이기 위해서 2차 정밀도를 가지는 도록 조건을 정의하면 다음과 같으며 본 연구에서는 출구조건으로 2차 정밀도의 경계조건을 사용하였다.

$$\begin{aligned} \tilde{f}_\alpha(1,j) &= 2\tilde{f}_\alpha(2,j) - \tilde{f}_\alpha(3,j) \\ \tilde{f}_\alpha(i_{max},j) &= 2\tilde{f}_\alpha(i_{max}-1,j) - \tilde{f}_\alpha(i_{max}-2,j) \end{aligned} \quad (19)$$

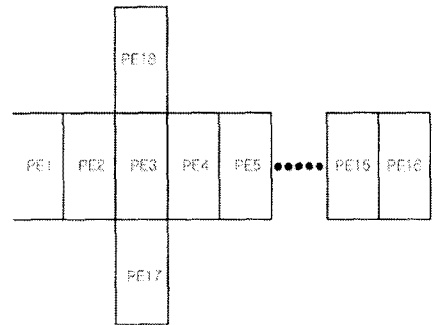
2.2.3 Parallel Computation

LBM의 가장 큰 단점 중의 하나는 레이놀즈수의 증가에 따라서 계산량이 급격히 증가하는 문제이다. 이러한 문제의 해결 방안의 하나로 병렬계산(Parallel computation)이 있으며 본 연구에서는 병렬 계산 기법을 사용하였다.

Fig. 4는 코드의 검증을 위해서 계산한 driven cavity 유동과 채널 내의 유동에 대한 PE(Processing Element)의 배치를 나타낸 것이다. Driven-Cavity 유동에서는 20개의 PE를, cross-junction 유동에서는 18개의 PE를 사용하여 계산을 수행하였다. 병렬계산에 있어서 주의할 점은 PE간의 데이터 교환에 따른 수렴성의 문제가 발생할 수 있는데 본 연구에서는 이웃한 PE들 간에 격자를 중첩시키는 방법을 사용하여 이러한 문제를 해결하였다.



(a) Driven-cavity flow



(b) Cross-junction channel flow

Fig. 4 Processing Elements distribution for (a) driven cavity flows and (b) Cross-junction channel flows

3. 결 과

3.1 해석기법의 검증 - Driven cavity flow

본 연구에 사용된 LBM코드의 코드 및 병렬분할방법에 대한 정확도를 검증하기 위해 2D $Re=1000$ 일 때의 Driven-cavity 유동을 해석하였다.

Fig. 5는 streamline(a)과 cavity의 도심을 통과하는 두 수직선

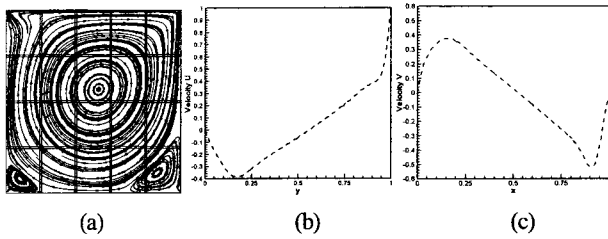


Fig. 5 Streamline(a) and comparison of u, v velocity profile along center lines, horizontal velocity profile(b) and vertical velocity profile(c) at $Re=1000$

에 대해 수평방향속도 분포(b)와 수직방향속도 분포(c)를 나타낸 것이다. Streamline을 나타낸 Fig. 5(a)에서 수직, 수평상의 직선은 각 PE의 계산영역에 대한 경계를 나타낸 것으로 본 연구에서 사용한 PE간의 격자 겹침법이 유용함을 나타내고 있다. 한편 Ghia 등[5]의 결과와 비교하여 u, v 속도가 잘 일치함을 알 수 있다.

3.2 Cross-junction channel flow

Cross-junction 채널 내의 binary flow에 대한 수치해석을 위해 저 레이놀즈수와 마하수를 얻기 위해서 $\rho_A = \rho_B = 1$, $\tau_p = \tau_q = 0.7883$, $\Gamma = 1.2$, $\kappa = 0.05$, $a = -b = -0.05$, $c = 1$, $\Delta t = 1$ 로 두었으며 격자계는 각 PE에 대해서 25×50 이다.

Fig. 6은 main channel과 sub channel의 입구유속을 변화에 따른 채널 내의 droplet 형성을 비교한 것으로 main 채널과 sub 채널의 입구유속이 약 1:6일 경우에 droplet이 형성됨을 알 수 있다.

Fig. 7은 $U_{in}=0.005$, $V_{in}=0.03$ 로 두었을 때의 droplet이 형성되는 과정을 시간의 변화에 따라 수치모사한 것이다. droplet의 형성이 주기적이며 생성되는 droplet의 크기가 일정함을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서 Free energy 모델을 사용한 Lattice Boltzmann 법과 병렬 연산기법을 이용하여 cross-junction 채널 내의 droplet 유동에 대한 수치모사를 수행하였다. 병렬연산기법과 코드의 검증에 위한 2D driven-cavity 유동에 대한 해석결과는 선행 연구결과와 잘 일치하였으며 이로부터 격자 겹침법에 의한 병렬연산기법의 정확성을 확인할 수 있었다. 또한 cross-junction 채널 내의 droplet 형성 및 발달은 입구 유속에 크게 의존하며 형성된 droplet은 주기적이며 또한 일정한 크기를 나타낸다.

후 기

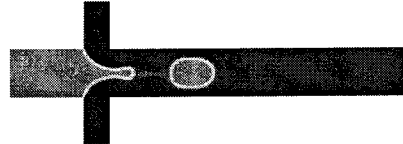
본 연구는 한국과학재단의 국가지정연구실사업에 의한 지원으로 수행되었음.



(a) $U_{in}=0.01, V_{in}=0.02, im=25, jm=50$



(b) $U_{in}=0.01, V_{in}=0.03, im=25, jm=50$



(c) $U_{in}=0.005, V_{in}=0.03, im=25, jm=50$

Fig. 6 Formation of droplet for the inlet velocity

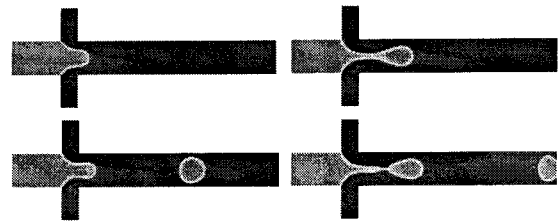


Fig. 7 Formation of droplet, $U_{in}=0.005, V_{in}=0.03$

참 고 문 헌

- D.Yu, R.Mei, L.S. Lou and W. Shyy (2003). "Viscous flow computations with the method of Lattice Boltzmann equation", *Progress in Aerospace Science*, Vol. 39, p329-367
- A. Xu, G. Gonnella and A. Lamura (2003). "Phase-separating Binary Fluids under Oscillatory Shear", *Phys. Rev. E* 67
- A. Lamura and G. Gonnella (2001). "Lattice Boltzmann Simulations of Segregating Binary Fluid Mixtures in Shear Flow", *Physica A* 294, 295
- P. Yuan (2000). "Thermal Lattice Boltzmann Two-Phase Flow Model for Fluid Dynamics", Chongqing University
- Ghia, U., Ghia, K.N. and Shin, C.T. (1982). "High Re Solution for Incompressible Flow Using the Navier-stokes Equation and a Multigrid Method", *J. of Comput. Phy.*, Vol 48, pp. 387-411.

2000년 0월 0일 원고 접수

2000년 0월 0일 최종 수정본 채택