



LBM을 이용한 2차원 상분리 시뮬레이션

정 노 택*¹

NUMERICAL SIMULATION ON PHASE SEPARATION BY 2D LATTICE-BOLTZMANN METHOD

Rho-Taek Jung*¹

As one of the promising model on the multiphase fluid mixtures, the Lattice-Boltzmann Method(LBM) is being developed to simulate flows containing two immisible components which are different mass values. The equilibrium function in the LBM can have a nonideal gas model for the equation of state and use the interfacial energy for the phase separation effect. An example on the phase separation has been carried out through the time evolution. The LBM based on the statistic mechanics is appropriate to solve very complicated flow problems and this model gives comparative merits rather than the continuum mechanics model.

Key Words : 격자볼츠만방법(Lattice-Boltzmann Method), 상분리(Phase Separation), 2차원 6방향(D2Q6)

1. 서 론

본 논문은 다상류 혼합유체의 흐름을 파악하기 위한 시뮬레이션 방법 중 비교적 새로운 모델링 기법(1980년대 중반)이라 할 수 있는 Lattice-Boltzmann Method(LB법)에 대해 조사하고, 이를 다른 상간(phase to phase)의 분리 시뮬레이션이 가능한 프로그램을 개발하였다

Lattice 방법은 해당입자의 이동경로인 site를 정해 두고 주어진 모델에 의해 “충돌”과 “전진”을 반복해가며 해석을 수행하는데 본 micro적인 접근방법은 결국 macroscopic dynamic 모델화로 확장이 가능하게 된다 LB법은 입자 분포함수의 시간변화율을 나타내는 Boltzmann transport 방정식에 기반을 두고 있으며, 그 변화율이라고 하는 것은 해당 site로 들어오는 입자 수에 나가는 입자수의 차로 표현하게 된다 또한 이 방법은 완벽히 병렬화가 가능하다는 장점도 포함하고 있다 즉 모든 site에서는 똑 같은 계산이 주어지며 discrete 상에 주의의 node만이 계산에 참여하기 때문이다 따라서 대상 형상이 아무리 복잡하더라도 경계조건을 비교적 쉽게 적용 가능하며 결국 전체적으로 빠른 계산능력을 확보할 수 있다

뿐만 아니고, Navier-Stokes(N-S)방정식에서 한계가 있는

long wavelength 와 low frequency 문제에도 적합한 모델이기도 하다.

LB법의 응용사례를 살펴보면 원자력 플랜트내의 방사능 분열 반응시의 복잡한 현상인 core melt, vapor explosion, hydrogen fire, fission product aerosol이 발생하여 실험적으로 현상을 조사연구하기에는 매우 어렵다 따라서 Yasuyoshi[1997] 등은 AMADEUS(Advanced Microscopic Analysis by Discrete and Emergent Computing Schemes for Complex Phenomena in Nuclear plants) 프로젝트를 통하여 LB기법을 이용해 기포의 생성과 성장을 표현하는 비등(沸騰)이상류 시뮬레이션을 미시적(microscopic)으로 제현하였다 따라서 LB법은 비등 이상류와 같은 복잡한 기포형상의 변화등의 마이크로 시뮬레이션에 유용한 전산모사방법임을 입증하였다

뿐만 아니라, 고속도로 차량 흐름 해석(Resnics[1995], Nagel[1997]) 등과 같은 large scale 해석과 생체면역시스템 해석(Chowdhury[1990]), 다공물질 흐름(Buckels[1994]), 기포거동(Nadiga[1996]), 상분리 (Shan[1993], Tanaka[1994], Van[1997], Chen[1991])등의 small scale 해석에도 개발이 진행되고 있는 상황이다.

편미분 방정식을 기본으로 해서 유체현상을 기술하는 종래의 수법에 대해 본 LB 법은 해석입자 관점에서 보면 Molecular Dynamics(MD)보다 크고 Continuum Mechanics(CM)보다 작다(Fig. 1). 각 단계사이에는 모델이 요구되는데

¹ 종신회원, 울산대학교 조선해양공학과

* E-mail: rtjung@ulsan.ac.kr

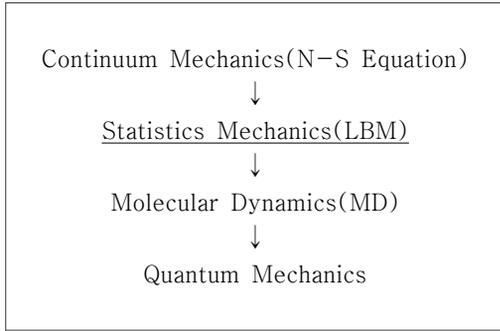


Fig. 1 LBM's portion on the models overall.

Quantum Mechnics와 MD사이에는 Potential 모델이, MD와 Statistics Mechanics(SM)사이에는 Collision 모델이 필요하며, SM과 CM 사이에는 Harmony 모델이 적용된다. 따라서 SM은 CM 보다 물리적으로 엄밀한 표면장력의 표현과 복잡한 경계가 존재하는 경우에 보다 유용한 방식이라 할 수 있다

흔히 사용하고 있는 CFD(Computational Fluid Dynamics) 코드는 거시적(macroscopic)적인 관점에서 연속방정식의 이산화를 기본으로 하지만 LB법은 미시적(microscopic) 모델과 중간적인(mesoscopic) 동역학적 방정식을 배경으로 한다. Navier-Stokes 방정식 또는 비선형미분방정식은 시간 및 공간적 평균을 취하는데, 이때 비등 이상류에서 나타나는 점면마찰과 다른 상(phase)간에 에너지의 교환 등 면을 통한 다이내믹스 문제를 경험적으로 해결하기 위해서는 보다 본질적인 방정식이 요구되기 때문이다.

비압축성문제를 해석 할때 전통적으로 유한차분법(Finite-Difference Method), 유한체적법(Finit-Volume Method), 유한요소법(Finite-Element Method)를 사용한다. 그리고 압력항에 관한 포아슨 방정식(Poisson Equation)을 풀게 된다.

그러나 LB법은 압력을 구하기 위해 많은 계산 반복시간이 필요없으며, 포아슨방정식보다는 상태방정식에 의해 압력이 계산된다. 뿐만아니라 이것은 포아슨방정식을 풀지 않는다는 입장에서 의사 압축 알고리즘(psudo-compressibility algorithm) 또는 ACM(Artificial Compressibility Method)와 유사한 점이 있다.

본 논문에서는 상변화(phase change)와 같은 비선형적이며 복잡한 거동계에 LB법을 적용하기 위해 전산모사 코드를 개발하고, 상분리 시뮬레이션에 적용하였다.

2. Lattice-Boltzmann Method 원고 작성방법

국소분포함수 f_i , 격자의 이동속도 e_i 를 사용하여 Lattice-Boltzmann 방정식을 표현하면 식(1)과 같다.

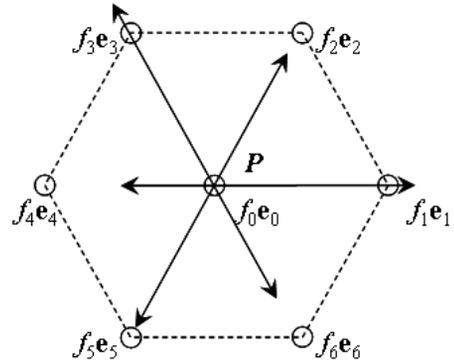


Fig. 2 Momentum distributions in two dimensional triangular site.

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Omega_i(f(\vec{x}, t)) \quad (1)$$

$\Omega_i(f(\vec{x}, t))$ 은 국소지역 충돌함수(본 논문에서는 $i=0\sim6$)이며, Δt 는 단위값을 의미한다

LB법은 Lattice Method의 미시적 운동(microscopic dynamic)을 모델링 하는 것이기 때문에 오히려 정밀한 충돌함수표현은 불필요하며, 복잡할 뿐만아니고, 수치적으로도 비효율적이다. 또한 적당한 등가분포함수를 도입하여 Single-time-relaxion process(Bhatnagar[1986])를 추가하여 식 (2)의 충돌함수를 다시 표현하면

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

f^{eq} 는 국소등가분포함수로서 유체변수값에 의존한다 τ 는 완화 시간으로서 $1/\tau$ 는 등가접근율이다 뿐만아니고 τ 값의 설정에 의해서 유체점성을 선택할 수 있다 그리고 $\sum_i \Omega_i = 0, \sum_i \vec{e}_i \Omega_i = 0$ 되는 질량 보존, 운동량 보존관계가 성립되어야 한다. 속도에 의존하지 않는 압력과 Galilean-invariant convection을 위해서 적절한 등가 분포함수를 선정해야한다. 본 논문에서는 2차원 육변형의 격자계를 채택 하였고 단위 속도 벡터 e_i 는

$$\vec{e}_i = |e_i| \left(\cos \frac{2\pi(i-1)}{6}, \sin \frac{2\pi(i-1)}{6} \right), \quad (3)$$

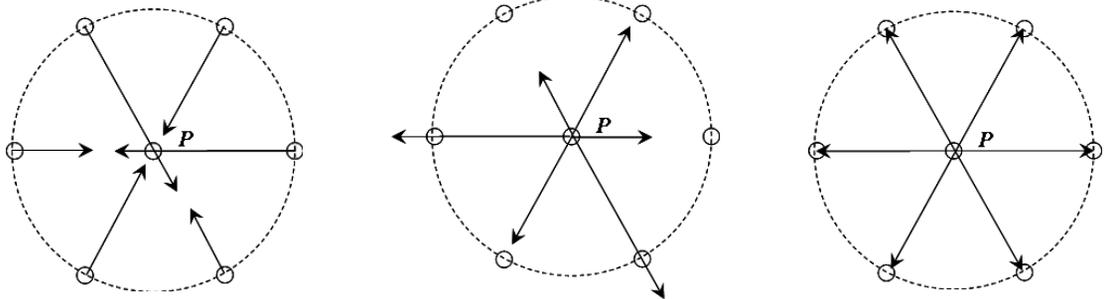
$$i = 1, 2, \dots, 6, |e_i| = 11.0, \text{ where,}$$

$$\vec{e}_i(0, 1, 2, 3, 4, 5, 6) = (0, 0), (1, 0), (1/2, \sqrt{3}/2),$$

$$(-1/2, \sqrt{3}/2), (-1, 0), (-1/2, -\sqrt{3}/2),$$

$$(1/2, -\sqrt{3}/2)$$

로 나타낸다.



(a) Particle momentum that will collide at the site P

(b) Incoming momentum distribution

(c) Outgoing momentum distribution

Fig. 3 The single-time relaxation process.

Fig. 2는 계산상에서 사용된 2차원 삼각형 격자 6방향을 가지고 있다(D2Q6). 각각의 화살표는 지정된 방향으로 움직이는 모멘텀을 의미한다 P점에서의 국소 분포함수인 $f_i(x, t)$ 은 주어진 방향 i 를 따라 입자속도 e_i 로 진행하며 점 P에서의 전체 모멘텀은 국소분포함수를 i 방향에 따라 합산한 것과 같다.

따라서 LB법에서의 입자의 이동법은 크게 전진단계(입자 이동단계)와 충돌단계(f_i^{eq} 의 해석단계)로 이루어진다. 전진단계에 있어 LB법에서 채택하고 있는 단일시간 완화 근사법(single-time-relaxation approximation)은 각각의 lattice에서의 모멘텀 분포는 매 시간 단위에서 등가 분포를 유도한다(Fig. 3에서 보이듯이 각 시간스텝에서 두 단계의 계산이 이루어진다. Fig. 3(a)에서 주위 lattice로 단순 전진단계(hopping)(Fig. 3(b)와 single-time-relaxation collision 법칙에 의해 등가 분포에 가깝게 outgoing distribution이 형성된다. single-time relaxation $\tau = 1$ 일 때, 단일 시간 스텝에서 incoming momentum distribution은 등가 분포(equilibrium distribution)로 바뀌게 된다. 만약, $\tau = 2$ 일 때는 outgoing momentum distribution이 incoming과 equilibrium의 1/2로 분포하게 된다. 따라서 $\tau=1$ 일 때 각 lattice에서의 CFL 조건이 만족하여 안정적인 해를 구할 수 있게 된다.

본 관계식에서 밀도는 $\rho(x, t) = m \sum_i f_i$ (m 은 각입자의

Table 1 Appropriately chosen equilibrium distribution.

f_i^{eq}	
$i = 1 \sim 6$	$A + B u_\alpha + C u^2 + D u_\alpha u_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta} + F_\alpha e_{i\alpha} + G_{\alpha\beta} e_{i\alpha} e_{i\beta}$
$i = 0$	$A_0 + C_0 U^2$

질량)으로, 운동량은 $\rho u = \sum_i f_i \bar{e}_i$ 으로 나타낼 수 있다. LB법에서 입자분포의 값의 제한조건은 오직 $f_i \geq 0$ 이다.

Table 1은 본 상분리 연구를 위해서 채택한 등가함수 f_i^{eq} 의 모델 식(Orlandini[1995])을 나타내고 있다. u 는 속도, e 는

Table 2 The direction matrix of the unit velocity e .

i	1	2	3	4	5	6
e_{ix}	1	1/2	-1/2	-1	-1/2	1/2
e_{iy}	0	$\sqrt{3}/2$	$\sqrt{3}/2$	0	$-\sqrt{3}/2$	$-\sqrt{3}/2$
$e_{ix} e_{ix}$	1	1/4	1/4	1	1/4	1/4
$e_{iy} e_{iy}$	0	3/4	3/4	0	3/4	3/4
$e_{ix} e_{iy}$	0	$\sqrt{3}/4$	$-\sqrt{3}/4$	0	$\sqrt{3}/4$	$-\sqrt{3}/4$
$e_{ix} e_{ix} e_{ix}$	1	1/8	-1/8	-1	-1/8	1/8
$e_{iy} e_{iy} e_{iy}$	0	$3\sqrt{3}/8$	$3\sqrt{3}/8$	0	$-3\sqrt{3}/8$	$-3\sqrt{3}/8$
$e_{ix} e_{ix} e_{iy}$	0	3/8	-3/8	0	-3/8	3/8
$e_{iy} e_{ix} e_{ix}$	0	$\sqrt{3}/8$	$\sqrt{3}/8$	0	$-\sqrt{3}/8$	$-\sqrt{3}/8$

Table 3 The coefficient list of the equilibrium in the Table 1.

Coeff.	Value
A	$[P_0 - \kappa(\rho \nabla^2 \rho)/2]/3$
B	$\rho/3$
C	$-\rho/2$
D	$2\rho/3$
f_α	0
G_{xx}	$\frac{1}{3} \kappa \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^2 \right]$
G_{yy}	$-G_{xx}$
G_{xy}	$\frac{2}{3} \kappa \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial y} \right)$
A_0	$\rho - 6A$
C_0	$\rho/3$

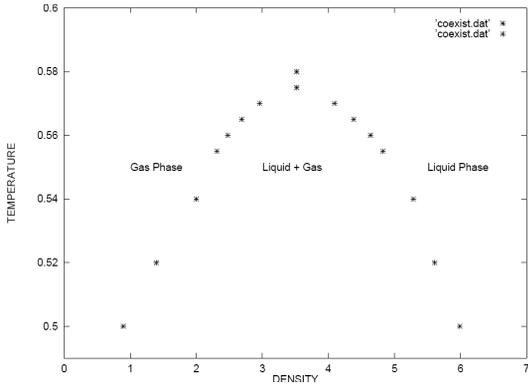


Fig. 4 Phase separation according to several temperatures.

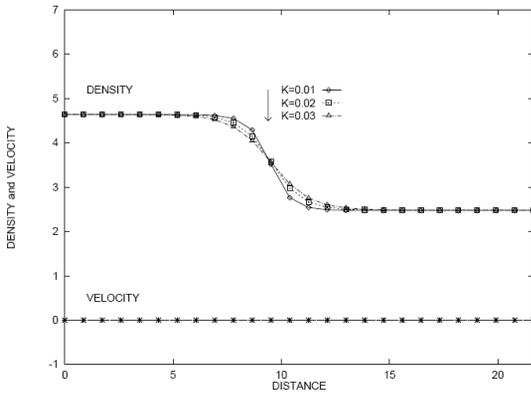


Fig. 5 Interface sharpness according to the interfacial energy.

방향을 나타내는 site 속도성분이다. ϵ 요소들을 Table 2에 그리고, f^{eq} 각항의 계수는 Table 3에 정리하였다. Table 3의 압력은 $P_0 = \rho / (1 - \rho b) - a\rho^2$ 로 a,b 는 van der Waals 변수 (intermolecular attraction, molecular volume)를 사용하였으며, 여기서 κ 는 interfacial energy를 나타낸다.

3. 계산 사례

먼저 모델의 특징을 파악하기 위하여 grid 50x50의 2차원에서 온도를 0.5에서 0.58까지 변화시켜가며, 밀도에 따른 상변화를 조사하였다(Fig. 4). 예를들어, T가 0.56일 경우에는 Gas phase의 밀도인 2.47과 Liquid phase의 밀도인 4.63로 안정적으로 나뉘어 지게 된다. 그리고 Fig. 5에는 온도 T가 0.56일 때에 interface energy κ 의 값에 따라 경계면의 기울기가 바뀌어 지는 것을 알 수 있다. 즉 interface energy가 크면 클수록 경계면의 기울기가 완만해 진다는 것을 알 수 있다. 가로축은

격자의 간격을 나타낸다

상기 특성에 따라 2차원 삼각형격자에 내에서 상분리 시뮬레이션을 수행 하였다. 상하좌우 cyclic 경계조건을 적용하고 Table 4에 나타내고 있는 변수들을 적용하여 상분리 수치계산을 수행한 결과를 Fig. 6에 나타내었다. Fig. 6 은 일정온도 하에서 두 immisible 유체가 시간에 따라 두 유체로 밀도분리가 진행되고 있는 모습을 나타내고 있다 즉 포화상태의 온도 상에서 액체와 기체상이 시간에 따라 분리되는 시뮬레이션을 수행하였다. 초기 밀도 분포에 시간의 $t=0$ 에서 밀도의 분포를 $\rho_{ini} = 3.5 + (random - 0.5)$ 로 주었으며, 흰색 부분은 ρ_{max} 가 4.0이며, 검은색 부분은 ρ_{min} 이 3.0의 값을 가진다. 따라서 경계면의 값은 $3.0 < \rho < 4.0$ 사이 값이며, 계산 중 항상 2개의 cell 내에 경계면이 유지 됨과 동시에 열역학적 요소를 경계면에서 지속시키며, 상분리를 진행시키고 있다. Time step 100에서 작은 영역에서 상분리가 시작되어, 점점 ρ_{min} 과 ρ_{max} 의 영역이 뚜렷이 구분되어지는 양상을 띄고 있다. Time step 5000이 넘어 가면 입자간의 충돌과 전진이 느려지고 있으며, 상분리간에 있어 두 유체간에 평형상태를 유지하게 된다.

4. 결론

이상류 상분리 기초 현상 파악을 위하여 LBM (Lattice-Boltzmann Method)을 이용한 수치시뮬레이션 기법을 개발하였다. 상간의 보다 정확한 분리묘사를 위해서는 종전의 N-S(Navier-Stokes) Solver 접근방식인 연속체 (continuum)보다는 입자 개념에 근접한 방식인 Lattice적인 발상이 필요하게 되었다. LB법은 N-S의 해법보다 비교적 손쉽게 상간의 경계면을 구분 지으며, 경계간의 열역학적 요소를 동시에 시뮬레이션이 가능하게 되었다. 있다. 또한 시뮬레이션 진행은 “충돌”과 “전진”이라는 단순개념이므로 사용자가 쉽게 프로그래밍할 수 있는 장점이 있으며, 복잡한 stencil을 사용하지 않으며

Table 4 Parameters values for the test simulation.

Parameter(s)	Value(s)
Site grid	150×150
Grid type	triangular
Interfacial energy(κ)	0.01
Van der waals(a,b)	(0.184,0.095)
Temperature(T)	0.56
Relaxation time(τ)	1.0
Boundary type	Cyclic

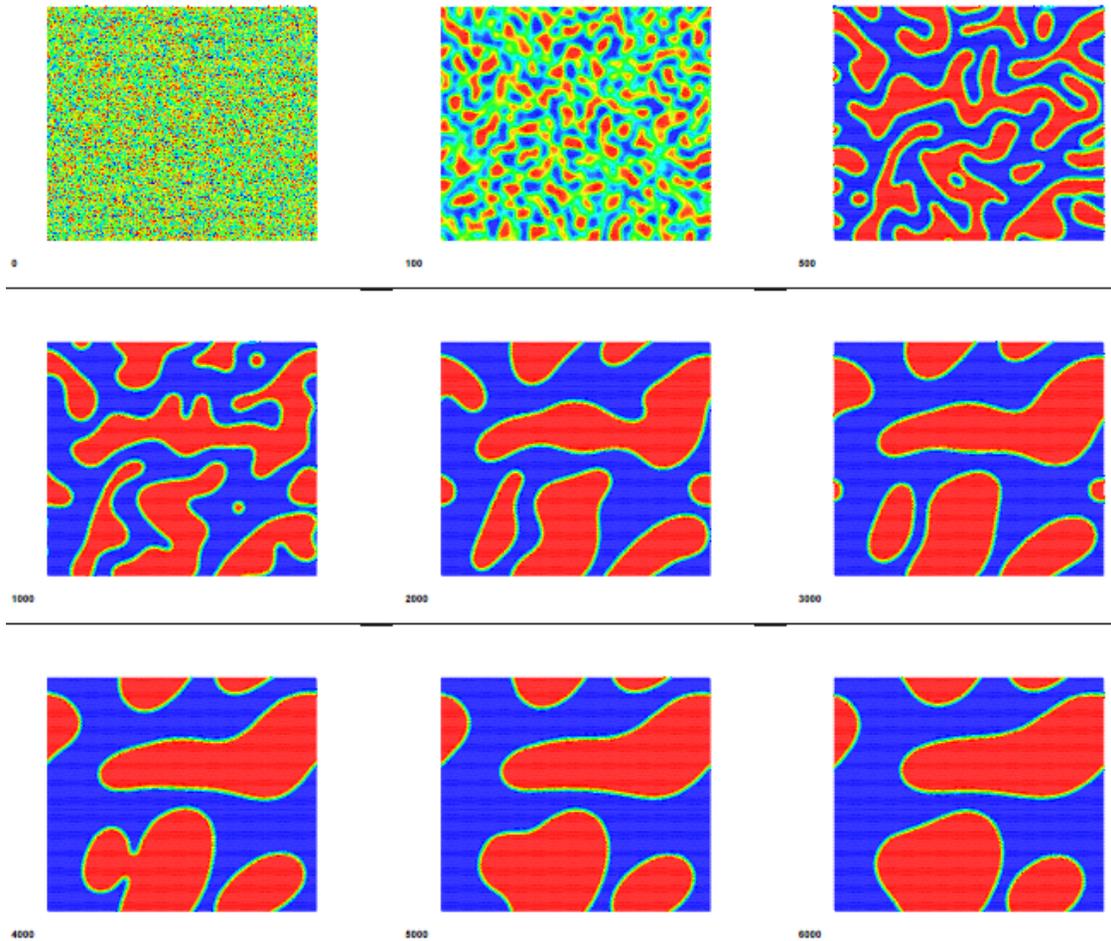


Fig. 6 The phase separation of the two immiscible fluids by using LB method on a 150×150 lattice. Shown are the time evolution of the number density distribution at $t=0, 100, 500, 1000, 2000, 3000, t=4000, 5000, 6000$. Density variation is shown with the minimum in blue(gas phase) and the maximum in red(liquid phase).

로 Message Passing Interface화에 용이하다는 특징이 있다

본 논문에서 LB법을 이용한 시뮬레이션으로 모델의 특성을 파악하고, 상분리에 적용하여 시간에 따른 밀도변화를 확인하였으며, 본 LBM을 이용한 상분리 모델이 van der Waals의 free energy를 잘 묘사하고 있다는 것을 알 수 있다 LB법은 경계면이 움직이거나 복잡한 경계면을 가지고 있는 물체 주위의 유동 해석 및 상경계를 비교적 손쉽게 다룰 수 있다는 장점이 있어 향후 LB 개념을 도입한 다상유동에 적용사례가 확장되리라고 판단한다.

그러나 user application이 쉬운 반면, LB법을 적용시에 문제에 따른 등가 함수(f^{eq})의 모델링이 주의깊게 이루어져야 한다. 따라서 등가 함수 모델링을 시도 하기 전에 해석하기 위한 물리적 현상을 엄밀히 파악하는 것이 필요하다 향후 본

논문의 수치해석적 결과를 동일한 물리적 파라미터를 이용한 실험적 검증이 수반되어야 한다

후 기

이 논문은 2009년 울산대학교 조선해양공학부 세계일류화 사업(SOTOP : Ship & Ocean Top rank in the world): 의 부분 지원으로 이루어 졌음.

참고문헌

- [1] 1986, Bhatnagar, P.L., Gross, E.P. and Krook, M., "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation,"



- Physical Review Letters*, Vol.56, pp.1505-1508.
- [2] 1994, Buckels, J.J., Hazlett, R.D., Chen, S., Eggert, K.G., Grunau, W. and Soll, W.E., "Toward Improved Prediction of Reservoir Flow Performance - Simulating Oil and Water Flows at the Pore Scale," *Los Alamos Science*, No.22, pp.112-121.
- [3] 1991, Chen, S., Doolen, G.D., Eggert, K., Grunau, D. and Loh, E.Y., "Discrete model of fluid dynamics," *Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences*, 2, edited by A.S. Alves, pp.232-248.
- [4] 1990, Chowdhury, D. and Stauffer, D., "Systematics of the models of immune response and autoimmune disease," *Journal of Stat. Phys.*, Vol.59, pp.1019-1042.
- [5] 1996, Nadiga B.T. and Zaleski S., "Investigations of a two-phase fluid model," *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, Vol.15, no.6, pp.885-896.
- [6] 1997, Nagel, K. and Barrett, C.L., "Using Microsimulation Feedback for Trip Adaptation for Realistic Traffic in Dallas," *Int. J. Mod. Phys. C*, Vol.8, pp.505-525.
- [7] 1995, Orlandini, E., Swift, M.R. and Yeomans, J.M., "A lattice Boltzmann model of binary-fluid mixtures," *Europhysics Letters*, Vol.32(6), pp.463-468.
- [8] 1995, Resnics, M., "Turtles, Termites, and Traffic Jams - Explorations in Massively Parallel Microworlds," *A Bradford Book*, MIT Press.
- [9] 1993, Shan X. and Chen H., "Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phased and components," *Physical Review E*, Vol.47, No.3, pp.1825-1819.
- [10] 1994, Tanaka H., "Double phase separation in a confined, symmetric binary mixture: Interface quench effect unique to bicontinuous phase separation," *Physical Review Letters*, Vol.72, No.23, pp.3690-3693.
- [11] 1997, Van Wachem, B.G.M., Bakker, A.F., Schouten, J.C., Heemels M.W. and De Leeuw, S.W., "Simulation of Fluidized Beds with Lattice Gas Cellular Automata," *J. Comp. Phys.*, Vol.135, pp.1-7.
- [12] 1997, Yasuyoshi, K., Koji, K. and Takeshi, S., "Amadeus project and microscopic simulation of boiling two-phase flow by the Lattice-Boltzmann Method," *International Journal of Modern Physics C*, Vol.8, No.4, pp.843-858.