

격자볼츠만법을 이용한 유체유동의 수치계산방법 Simulation of Fluid Dynamics by the Lattice Boltzmann Method

강호근 · Michihisa Tsutahara
H. K. Kang and M. Tsutahara

1. 서 론

격자볼츠만법(Lattice Boltzmann Method, LBM)은 최근, 유체의 흐름현상을 해석함에 있어 널리 이용되는 수치계산 방법들 중의 하나이다¹⁻⁷⁾. LBM에서 일반적으로 흐름의 영역은 규칙적인 격자에 의해 이산화 되며, 그 격자 상에서 가상입자들(particles)이 충돌(collision)과 병진(movement)을 반복한다. 이때, 입자의 분포함수(distribution function)로부터 유체로서의 거시적인 변수를 결정하여 흐름의 물리적인 파라메타들(density, velocity 및 internal energy)을 구하는 방법으로서, 직접적으로 Navier-Stokes 방정식을 이용하는 다른 수치계산방법과는 사뭇 다르다.

LBM에서는 유체의 열적인 성질을 고려한 열유체모델(thermal fluid model)과 그 외에 비열유체모델(non-thermal fluid model)이 있다. 이 차이는 입자의 충돌과정에 있어서 입자의 운동에너지의 보존 측을 적용하는가 혹은 하지 않는가에 의해 결정한다. 일반적으로 종래의 LBM에서의 열유체모델은 계산 가능한 온도(internal energy)의 범위가 제한되어져 있을 뿐만 아니라 계산이 불안정하게 되는 경우가 있다⁸⁾. 하지만 LBM 모델의 계산을 차분화함으로써 수치계산을 안정적으로 수행할 수가 있다.

앞에서 설명한 바와 같이 규칙적인 격자를 도입하는 것은 이 모델이 등방적(isotropic)인 유체의 성질을 재현하기 위한 목적이지만, 현실적인 문제에서 중요하게 대두되는 복잡한 형상의 경계에 대해서 경계조건을 적용하기에는 어려운 점이 수반된다. 따라서, 이러한 규칙격자에 대해 차분 스킴을 적용하고, 또한 곡선격자에 확장하는 것에 의해서 상기의 어려운 점을 해결할 수가 있다. 이와 같은 방법을 차분격자볼츠만법(Finite Difference

Lattice Boltzmann Method, FDLBM)^{9,10)}이라 하며, 기존의 LBM이 갖는 이점을 계승하고, 한층 계산을 안정하게 수행하기 위한 방법으로 제안되었다.

본 해설에서는 LBM 및 FDLBM에 대한 기본적인 메카니즘을 간략하게 설명한다. 아울러 필자들이 FDLBM을 이용하여 계산된 실제적인 예를 소개한다.

2. 격자볼츠만법(LBM)

2.1 격자 BGK 방정식

LBM에서 입자분포는 실수치(real variables)의 수밀도를 갖는 분포함수 f_{α} 로 표현된다. 시간 t , 위치 벡터 \mathbf{r} 의 격자점에서 일련의 입자운동(충돌과 병진)은 분포함수 $f_{\alpha}(t, \mathbf{r})$ 을 이용하면 다음과 같은 식으로 나타내어진다.

$$f_{\alpha}(t+\tau, \mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha}\tau) - f_{\alpha}(t, \mathbf{r}) + \Omega_{\alpha}(t, \mathbf{r}) \quad (1)$$

여기서 τ 는 시간간격이며, c 는 입자속도를 나타낸다. 식(1)의 우변 제2항의 Ω 는 충돌에 의한 입자분포의 변화를 나타내는 충돌연산자(collision operator)이며, 충돌시에 질량, 운동량 및 에너지가 보존되는 규칙을 따른다. 충돌은 입자간의 상호작용에 의한 운동의 변화이기 때문에, Ω 는 입자분포함수 f 의 합으로 나타낸다. 그러나, 이와 같은 Ω 를 이용한 충돌연산은 복잡하기 때문에 다음과 같은 충돌항을 간략화시킨 방법(격자Bhatnagar-Gross-Krook(BGK)방정식)이 가장 널리 사용된다.

$$f_{\alpha}(t+\tau, \mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha}\tau) - f_{\alpha}(t, \mathbf{r}) - \frac{1}{\phi} [f_{\alpha}(t, \mathbf{r}) - f_{\alpha}^{(0)}(t, \mathbf{r})] \quad (2)$$

여기서 $f_{\alpha}^{(0)}$ 는 국소적인 평형상태에 있어서의 분포함수이며, ϕ 는 단일시간완화계수(relaxation time coefficient)를 나타낸다.

한편, 연속체로서의 거시적(macroscopic) 상태

접수일 : 2002년 7월 26일
강호근 : 경상대학교 기계항공공학부
Michihisa Tsutahara : Kobe University

에서의 유체의 변수들은 미시적(microscopic) 상태에서의 입자속도 \mathbf{c}_i 를 갖는 분포함수 f_a 로부터 다음과 같은 관계가 있다.

$$\text{Density: } \rho = \sum_{\mathbf{c}_i} f_a - \sum_{\mathbf{c}_i} f_a^{(0)} \quad (3)$$

$$\text{Momentum: } \rho u_a = \sum_{\mathbf{c}_i} f_a c_{ia} - \sum_{\mathbf{c}_i} f_a^{(0)} c_{ia} \quad (4)$$

$$\text{Energy: } \frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e = \sum_{\mathbf{c}_i} \frac{1}{2} f_a c_a^2 - \sum_{\mathbf{c}_i} \frac{1}{2} f_a^{(0)} c_a^2 \quad (5)$$

여기서 e 는 단위질량당의 내부에너지를 나타낸다. 식(2)에서 국소평형분포함수는 속도 \mathbf{u} 에 관해서 3차항까지 고려하면¹¹⁾,

$$f_a^{(0)} = F_a \rho [1 - 2Bc_{ia}u_a + 2B^2c_{ia}c_{ia}c_{i\beta}u_a u_\beta + B u^2 - 2B^2c_{ia}u_a u^2 - \frac{4}{3}B^3c_{ia}c_{i\beta}c_{i\gamma}u_a u_\beta u_\gamma] \quad (6)$$

와 같다.

2.2 격자형상과 입자분포

LBM에 있어, 공간은 그 등방성과 일정함을 유지할 수 있도록 규칙적인 격자에 의해 일정하게 이산화된다. 예를 들면 2차원에서의 공간격자는 그림1(a),(b)와 같으며, 3차원의 경우, 그림1(c)에 나타난 바와 같이 한 변이 단일길이를 갖는 정 입방체격자를 이용하고 있다.

또한 각각의 격자들에 대한 입자의 속도들은 그림 2, 3 및 4와 같은 속도의 모델을 이용한다.

2.3 거시적 흐름의 지배방정식

거시적 및 연속적인 유체의 운동을 직접적으로 알기 위해 Chapman-Enskog 방법을 이용하여 연속적인 유체의 운동방정식을 도출할 수가 있다. 즉, 식(2)을 시간 t 및 공간좌표 \mathbf{r} 을 중심으로 유속에 관해 2차항까지 Taylor전개를 행하면 다음과 같은 식으로 변형된다.

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + c_{aa} \frac{\partial f_a}{\partial r_a} + \frac{1}{2} \tau c_{aa} c_{a\beta} \frac{\partial^2 f_a}{\partial r_a \partial r_\beta} + \tau c_{aa} \frac{\partial^2 f_a}{\partial t \partial r_a} + \frac{1}{2} \tau \frac{\partial^2 f_a}{\partial t^2} \cong -\frac{1}{\tau \phi} (f_a - f_a^{(0)}) \quad (7)$$

또한, 입자분포가 평형상태에 가까워졌을 때, 분포

함수 f_a 는 Knudsen수에 해당하는 미소량 ε 이 유체를 연속성을 갖는 물질로 볼 수 있는 공간스케일에 있어 입자분포를 고려하는 것을 나타내고 있다.

$$f_a = f_a^{(0)} + f_a^{(1)\varepsilon} + f_a^{(2)\varepsilon^2} + \varepsilon f_a^{(1)} + \varepsilon^2 f_a^{(2)} + \dots \quad (8)$$

위의 식(8)에서, $f_a^{(b)}$ 는 ε 의 1차에 대응하는 비평형 성분이다.

한편, 식(7)에서 나타난 시간 및 공간의 변수는 미시적-이산적인 스케일을 나타낸다. 이것을 거시적인 시간 및 공간에서의 스케일에 기초한 변수로 바꾸기 위해서 미소량 ε 를 이용해 각 편 미분항을 이하와 같이 나타내면,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \frac{\partial}{\partial r_a} \rightarrow \varepsilon \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \quad (9a,b)$$

와 같다. 식(9)에서 t_1 는 대류나 압력변동의 전파가, t_2 는 점성확산과 같은 보다 부드러운 변화가 관측되는 시간스케일을 의미한다. 따라서 거시적-이산적인 시간 및 공간스케일에서 보여지는 속도 \mathbf{c}_i 를 갖는 입자의 운동을 이용하여, 입자의 질량, 운동량 및 운동에너지에 관해 정리하면 거시적 흐름에서의 지배방정식이 도출된다.

연속방정식:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} (\rho u_a) = 0 \quad (10)$$

운동방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_a + \frac{\partial}{\partial r_{1\beta}} \left(-\frac{\partial p}{\partial r_{1a}} + \frac{\partial}{\partial r_{1\beta}} \left[\mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial r_{1a}} + \frac{\partial u_a}{\partial r_{1\beta}} \right) + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(\lambda \frac{\partial u_a}{\partial r_{1\gamma}} \right) \right] \right) \quad (11)$$

에너지방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(\rho e + p + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) u_a - \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(k^* \frac{\partial e}{\partial r_{1a}} \right) + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left[\mu u_\beta \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial r_{1a}} + \frac{\partial u_a}{\partial r_{1\beta}} \right) + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(\lambda \frac{\partial u_\beta}{\partial r_{1\gamma}} u_a \right) \right] \quad (12)$$

여기서, 압력 p , 점성계수 μ , 제2점성계수 λ 및 열전도계수 k^* 는 각각

$$p = \frac{2}{D} \rho e \quad (13) \quad \mu = \frac{2}{D} \rho e \left(\phi - \frac{1}{2} \right) \quad (14)$$

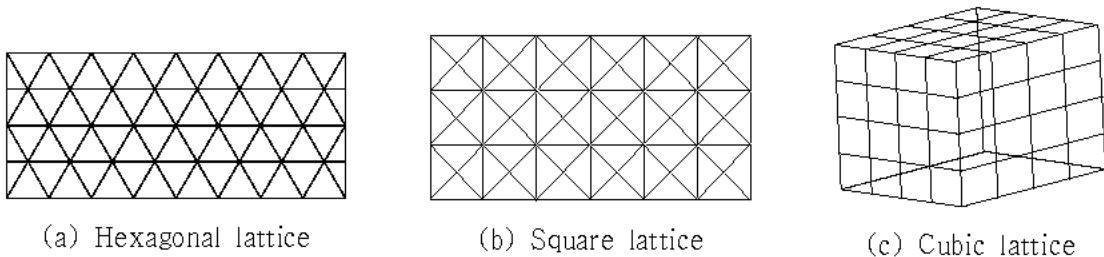
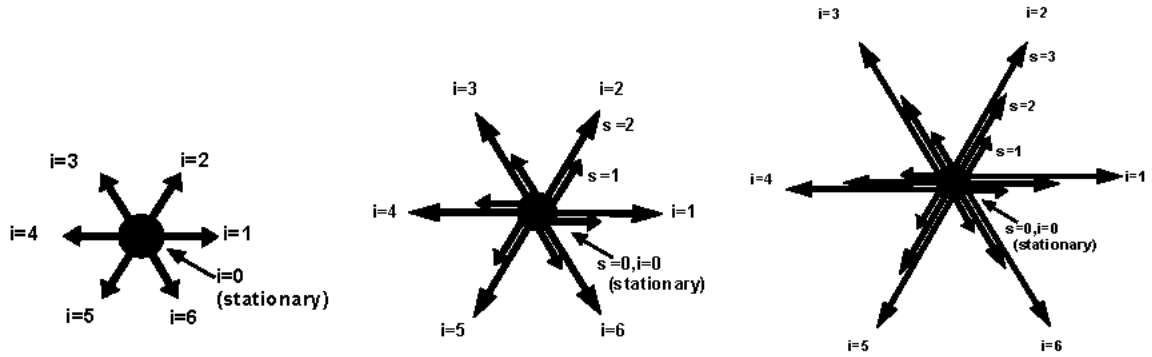
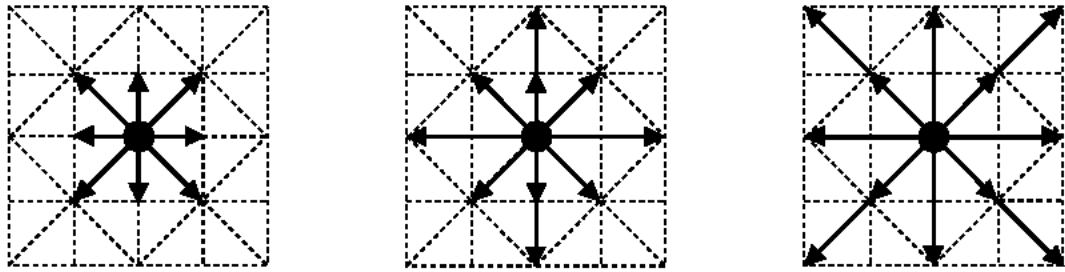


Fig. 1 Lattices used in the lattice Boltzmann method



(a) 2D7V(1-speed) model (b) 2D13V(2-speed) model (c) 2D19V(3-speed) model
 Fig. 2 Particles for 2D FHP(hexagonal) lattice



(a) 2D9V model (b) 2D13VQ model (c) 2D13VC model

Fig. 3 Particles for 2D square lattice

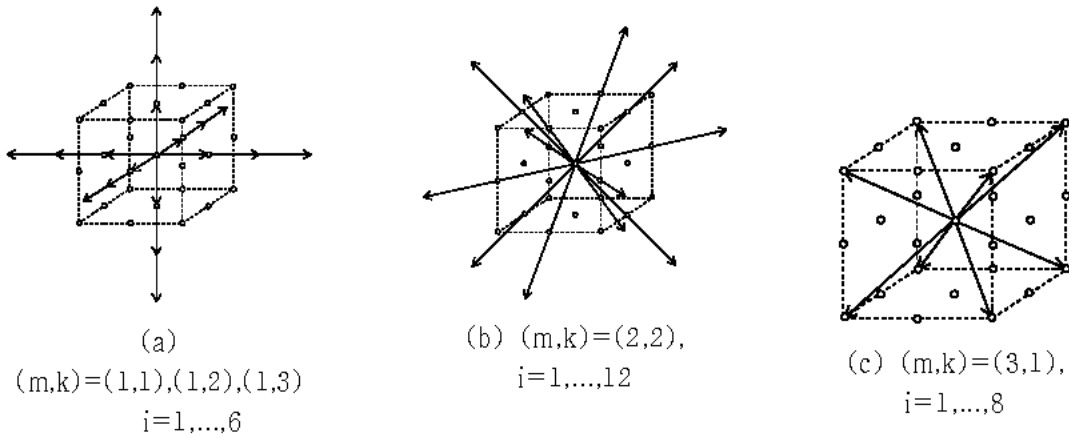


Fig. 4 Particles for 3D cubic lattice(m=1: directions along the sides, m=2: directions to the centers of the sides, m=3: directions to apices; k: integer times base speed)

$$\lambda = -\frac{4}{D^2} \rho c t \left(\phi - \frac{1}{2} \right)$$

$$x^* = -\frac{2(D+2)}{D^2} \rho c t \left(\phi - \frac{1}{2} \right)$$

와 같다.

3. 차분 격자볼츠만법(FDLBM)

한편, LBM에 압축성 유체모델을 이용할 때, 분포함수의 실수치 값이 (-)로 변함으로서 계산이

(15) 불안정하는 경우가 있다. 그러나 계산 시, 차분방법을 도입함으로써 연산을 상당히 안정화시킬 수가 있다.

(16)

FDLBM의 기초가 되는 이산화 BGK방정식은 속도분포함수 f_i 를 이용한 형태로서 다음과 같다.

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_i = -\frac{1}{\phi} (f_i - f_i^{(0)}) \quad (17)$$

Chapman-Enskog확장에 의한 Navier-Stokes 방정식을 도출할 때, 수송계수에서 $(\phi - 1/2)$ 는 ϕ 로 바뀐다. 이때, 동점성계수 μ 와 완화계수 ϕ 사이

의 관계는

$$\mu - \frac{2}{D} \rho e \phi \quad (18)$$

와 같다. 여기서, 공학적으로 중요하게 다루되는 고Re수 흐름에 대해서, $\mu \ll 1.0$ 의 값을 만족해야한다. 만일, 시간적분에 Euler의 1차의 전진차분을 이용하면,

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{r}) - f_i(t, \mathbf{r}) + \Delta t \left[-c_{ia} \frac{\partial f_i(t, \mathbf{r})}{\partial x_a} - \frac{1}{\phi} (f_i(t, \mathbf{r}) - f_i^{(0)}(t, \mathbf{r})) \right] \quad (19)$$

와 같으며, Δt 는 시간간격이다. 식(19)의 충돌항(우변 제2항)의 계산에 있어 안정성의 조건은

$$\frac{\Delta t}{\phi} < 2.0 \quad (20)$$

와 같이 주어지며, 분포함수가 평형에 의해서 국소 평형분포 함수에 근접하는 조건이다. 결국, 식(18)과 (20)의 관계로부터 고Re수 흐름을 계산할 때에는 시간간격 Δt 를 작게 취할 필요가 있으며, 이러한 경우 많은 연산시간의 증대를 가져온다.

따라서, 이와 같은 문제점들을 해결하기 위한 방법으로서, ϕ 와 μ 의 관계를 이용해 이산BGK방

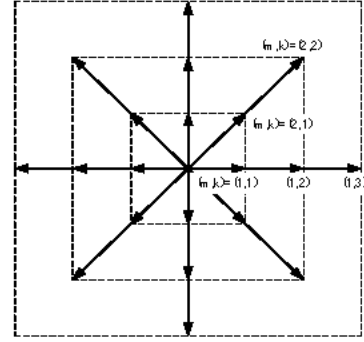


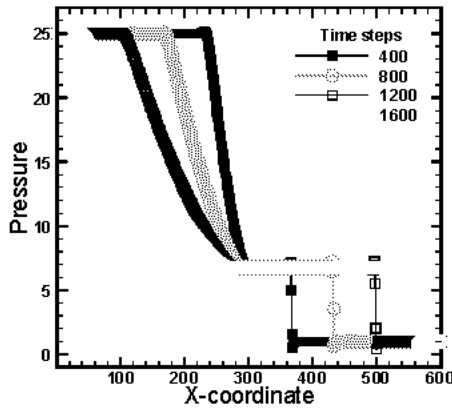
Fig. 5 Distribution of moving particles in 2D 21V model

정식(17)에 2차의 항을 추가하면¹²⁾,

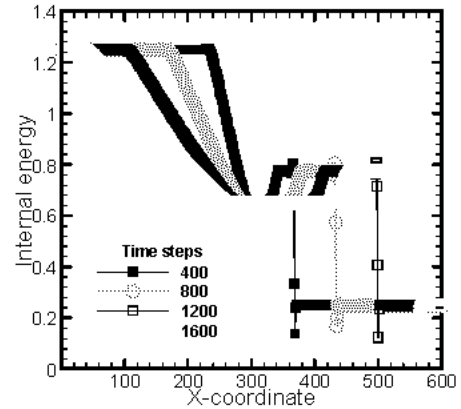
$$\frac{\partial f_i(t, \mathbf{r})}{\partial t} + c_{ia} \frac{\partial f_i(t, \mathbf{r})}{\partial x_a} - \frac{ac_{ia}}{\phi} \frac{\partial}{\partial x_a} (f_i(t, \mathbf{r}) - f_i^{(0)}(t, \mathbf{r})) - \frac{1}{\phi} (f_i(t, \mathbf{r}) - f_i^{(0)}(t, \mathbf{r})) \quad (21)$$

와 같이 변경되어질 수가 있다. 또한, ϕ 와 μ 의 관계는

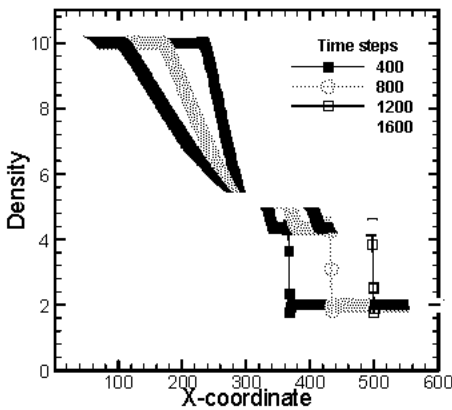
$$\mu - \frac{2}{D} \rho e (\phi - a) \quad (22)$$



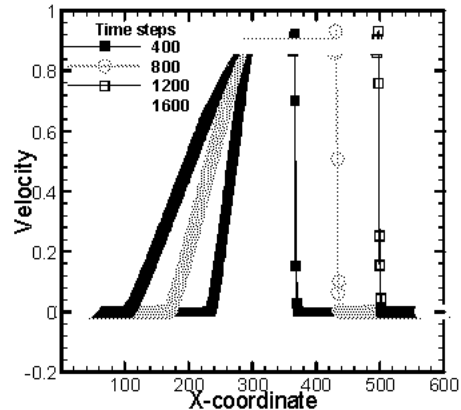
(a) Pressure



(b) Internal energy



(c) Density



(d) Flow velocity

Fig. 6 Flow field in a shock tube simulated with 2D21V model by FDLBM (Ms=2.22)

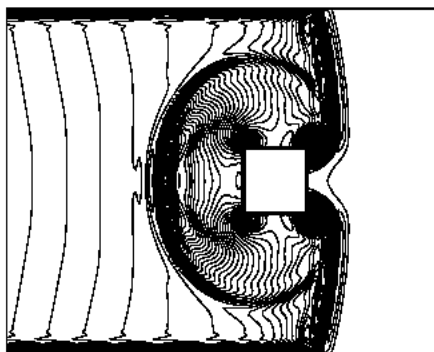
와 같이 변경된다. 즉, 임의의 계수 a 를 적당히 바꿈으로서, 작은 점성계수에서의 흐름에 대해서도 ϕ 를 충분히 크게 설정할 수가 있으며, 아울러 조건(20)을 만족할 수 있는 시간간격을 크게 취할 수가 있어 실제의 연산시간을 크게 단축할 수가 있다.

4. 수치계산 예

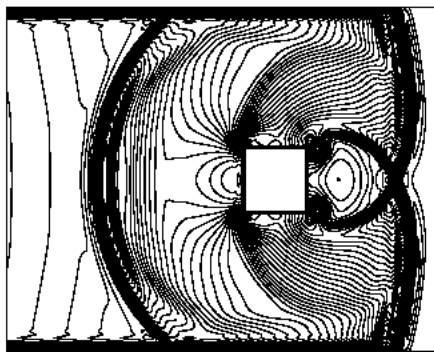
다음의 수치계산 예는 식(21)의 FDLBM을 이용하여 얻어진 결과들이다. 이하의 모든 계산에서 2차원 21속도모델(2D21V)이 이용되었다(그림 5). 시간항에 대하여 2차정도의 Runge -Kutta 방법과 대류항에 대하여 3차정도의 up-wind 스킴이 이용되었다.

4.1 Shock tube 흐름(12)

압축성유체의 특유의 현상인 충격파는, 속도, 압력 및 온도가 불연속으로 변화하는 면이다. 2차원 shock tube는 평면내에서 얇은 벽면에 의해 고압기체의 영역과 저압기체의 영역으로 나뉘어져 있

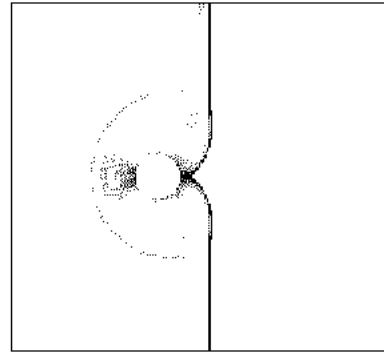


(a) 2200 time steps

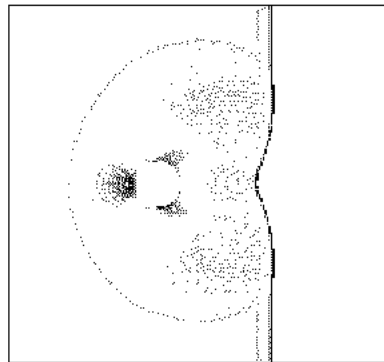


(b) 2400 time steps

Fig. 7 Unsteady shock wave passing through the rectangular column. $Ms=2.215$, $p_4/p_1=25.0$



(a) 1350 time steps



(b) 1760 time steps

Fig. 8 Unsteady shock wave passing through the circular cylinder. $Ms=2.043$, $p_4/p_1=15.0$

으며, 계산시작과 동시에 벽면을 순간적으로 제거하여 급격한 압력구배에 의해 발생하는 충격파를 발생시킨다.

계산에 사용된 격자형식은 정방격자(그림 3 참조)를 이용하였으며, 이때의 격자수는 600×40 을 주었다. 또한, 계산초기단계에서 압력비 (p_4/p_1)는 25배를 주었다. 그림6은 shock tube의 중앙지점에서의 각 물리량의 변화를 나타내고 있다. 충격파는 5~6개의 격자점에서 나타나며, 충격파 후미에 어떠한 진동도 보이지 않는다. 이러한 결과들은 이론적인 결과와 잘 일치함을 보인다.

4.2 충격반사파(shock reflection)(12)

그림 7과 8은 2차원 shock tube의 저압측에 설치된 물체를 통과하는 충격파 및 충격반사파의 반사형태를 시간발전과 더불어 보여주고 있다.

4.3 유체소음(acoustic sound)(13)

흐름은 유체속에 물체가 존재하는 경우, 흐름과 물체의 간섭에 의한 유체음(acoustic sound)이

발생한다. 이러한 흐름현상의 대표적인 예로서, 유체와 원주의 간섭에 의한 유체음(aeolian tone)이 발생하며, 이러한 것은 Karman와의 발생과 밀접한 관계가 있는 것으로 알려져 있다.

흐름장의 대상으로서 2차원 원주 주위의 흐름을 생각한다. 계산에서는 원주중심을 원점으로 한 극좌표를 이용하며, 계산영역은 원주직경의 400배로 하였다(그림 9). 이때 사용된 격자는 $(r \times \theta) = (201 \times 121)$ 이다.

그림10는 $Re=150$ 및 $Mach=0.2$ 에서 흐름의 압력분포 Δp 를 나타내고 있으며, 원주후방에서 주기적인 Karman와가 발생하는 것을 알 수가 있다. 흐름은 왼쪽으로부터 들어오며, 음파의 방출은 마치 이중극음(dipole sound)의 형태를 보이며, 상류측의 압력이 하류측의 압력보다 더 높다. 이것은 일정유속에 의한 Doppler효과에 의해서 생각된다. 또한 각 방향 모두에서 압력이 원주중심으로부터 거리 r 에 관해 $r^{-1/2}$ 에 비례해서 감소하는 것을 알 수가 있으며, 선형 이론예측과도 잘 일치한다.

5. 결 론

전산유체역학(computational fluid dynamics: CFD)의 새로운 계산방법으로서, 열-유체 모델을 보다 실제적인 유동장에 적용하기 위해, 압축성 유체에 대한 격자 BGK모델을 이용한 LBM 및 FDLBM의 기본개념이 설명되었다. 아울러, 이러한 모델을 이용하여 간단한 2차원 계산이 소개되었다.

참 고 문 헌

1. U. Frisch and D. d'Humieres, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau and J. P. Rivet, "Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions", Complex Systems, 1, pp. 599~632, 1987
2. S. Wolfram, "Cellular Automaton Fluids I; Basic Theory," Journal of Statistical Physics., 45, pp. 471~89, 1986
3. D. H. Rothman and S. Zaleski, "Lattice Gas Cellular Automata," Cambridge U.P. 1997
4. B. Chopard and M. Droz, "Cellular Automata Modeling of Physical Systems", Cambridge University Press, 1998
5. D. A., Wolf-Gradrow, "Lattice-Gas Automata and Lattice Boltzmann Models", Lecture Notes in Mathematics, Springer, 2000
6. Y. H. Qian, S. Succi and S. A. Orszag, "Recent Advances in Lattice Boltzmann Computing", Annual Review of Computational Physics III, D. Strauffer ed. World Scientific, pp. 195~242, 1995
7. S. Succi, "The Lattice Boltzmann Equa-

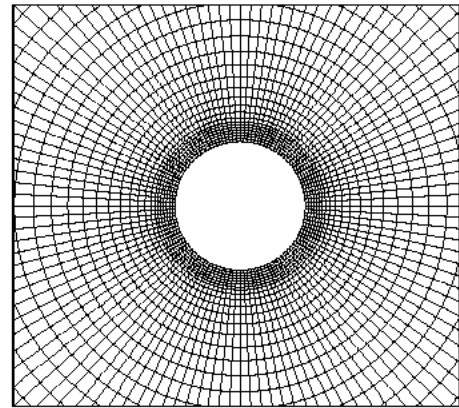


Fig. 9 Calculation lattice

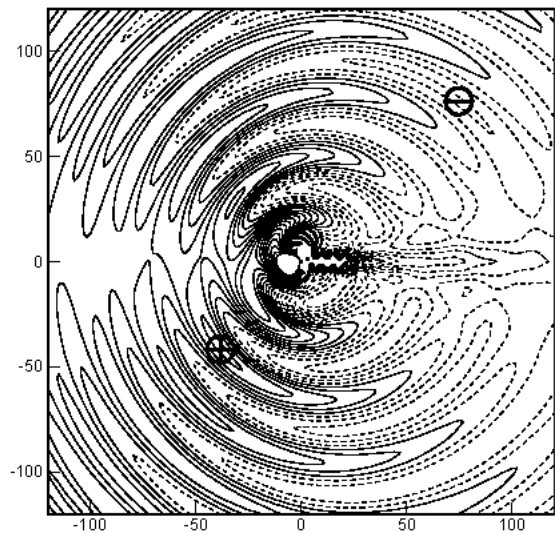


Fig. 10 Contours of sound pressure by FDLBM at $t=133$. $Re=150$, $Ms=0.2$. The pressure contour level is $-3.0 \times 10^{-4} \leq \Delta p \leq 3.0 \times 10^{-4}$. Solid line : positive, dotted: negative

- tion for Fluid Dynamics and Beyond", Oxford University Press, 2001
8. M. Tsutahara, N. Takada and T. Kataoka, "Lattice Gas and Lattice Boltzmann Methods", Corona-sha, 1999(in Japanese)
 9. N. Cao, S. Chen, S. Jin and D. Martinez, "Physical Symmetry and Lattice Symmetry in the Lattice Boltzmann Method", Physical Review E, 55, pp. 21~24, 1997
 10. T. Seta, K. Kono, D. Martinez and S. Chen, "Lattice Boltzmann Scheme for Simulating Two-Phase Flows", JSME, B, 65-634, pp. 1955~1963, 1999
 11. M. Tsutahara and H. K. Kang, "A Discrete Effect of the Thermal Lattice BGK Model", Journal of Statistical Physics, Vol 107, No 1/2, pp. 479~498, 2002
 12. H. K. Kang, M. Tsutahara, K. D. Ro and Y. H. Lee, "Numerical Simulation of Shock Wave Propagation using the Finite Difference Lattice Boltzmann Method", KSME International Journal, Vol 16, No 10, pp. 1327~1335, 2002
 13. 강호근 외3명, "차분격자 볼츠만법을 이용한 유체음의 특성에 관한 수치계산", 대한기계학회 2002년도 추계학술대회 강연논문집, 2002