

<학술논문>

DOI <http://dx.doi.org/10.3795/KSME-B.2013.37.7.683>

ISSN 1226-4881

혼성 격자볼츠만 방법을 이용한 공동 형상 내부에서의 혼합 특성에 관한 수치적 연구

신명섭^{*,**} · 전석윤^{**} · 윤준용^{**,†}

* 한양대학교 공학기술연구소, ** 한양대학교 기계공학과

Numerical Investigation of Mixing Characteristics in a Cavity Flow by Using Hybrid Lattice Boltzmann Method

Myung Seob Shin^{*,**}, Seok Yun Jeon^{**}, and Joon Yong Yoon^{**,†}

* Research Institute of Engineering & Technology, Hanyang Univ.

** Dept. of Mechanical Engineering, Hanyang Univ.

(Received January 18, 2013 ; Revised February 28, 2013 ; Accepted April 9, 2013)

Key Words: Hybrid Lattice Boltzmann Method(혼성 격자볼츠만 방법), Multiple-Relaxation-Time(다중완화시간), Cavity flow(공동형상 유동), Mixing Characteristics(혼합 특성)

초록: 본 연구에서는 혼성 격자볼츠만 방법(HLBM)을 이용하여 상판이 일정한 속도로 움직이는 공동 형상 내부에서의 혼합 특성에 대하여 수치적으로 연구하였다. 먼저, 공동 형상에서 기존의 신뢰성 있는 유동장 결과와의 비교를 통해 LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델의 신뢰성을 검토하였다. 두 모델 모두 기존의 연구결과와 유사한 결과를 보였으나, LB-MRT 모델이 LB-SRT 모델보다 높은 Re수에서는 수치적 안정성이 높은 것을 확인하였다. 수치적 안정성이 좋은 LB-MRT 모델을 토대로 유한차분법을 적용한 HLBM을 이용하여 공동 형상 내부에서의 농도장을 수치 해석하였다. Re수와 Pe수를 변화하여 공동 형상 내부의 혼합 특성과 물질 전달 형태에 대하여 파악하였다.

Abstract: In this study, the mixing characteristics in lid-driven cavity flows were studied numerically by using a hybrid lattice Boltzmann method (HLBM). First, we compared the numerical results from single-relaxation-time (LB-SRT) and multi-relaxation-time (LB-MRT) models to examine their reliability. In most of the cavity flow, the results from both the LB-SRT and the LB-MRT models were in good agreement with those using a Navier-Stokes solver for Re=100-5000. However, the LB-MRT model was superior to the LB-SRT model for the simulation of higher Reynolds number flows having a geometrical singularity with much lesser spatial oscillations. For this reason, the LB-MRT model was selected to study the mass transport in lid-driven cavity flows, and it was demonstrated that mass transport in the fluid was activated by a recirculation zone in the cavity, which is connected from the top to the bottom surfaces through two boundary layers. Various mixing characteristics such as the concentration profiles, mean Sherwood (Sh) numbers, and velocity were computed. Finally, the detailed transport mechanism and solutions for the concentration profile in the cavity were presented.

1. 서 론

공동(cavity) 형상에 대한 연구는 지난 수십 년간 여러 공학 분야에서 수치적, 실험적으로 진행되어 왔다. 이러한 이유는 공동 형상의 단순한 기하학적 형상은 공학의 관심이 되는 여러 분야에서 나타나며, 여러 제품에 적용 가능한 형태이

기 때문이다. 특히 사각 공동 유동은 양 모서리에 특이점(singular point)이 존재함에도 불구하고, 기하학적 형상이 단순하면서도 Re수의 변화에 따라 내부 유동에 매우 복잡한 현상을 가지고 있다. 이러한 공동 형상에 대한 유동학적 연구들은 Burggraf⁽¹⁾와 Pan and Acrivos⁽²⁾의 수치해석적 연구를 시작으로 각종 수치해법의 해석 정확도 및 정밀도를 평가하기 위한 척도로 사용되고 있으며, 많은 연구자들에 의하여 연구가 진행되어 왔다.⁽³⁾ 특히 Ghia 등⁽⁴⁾은 고정밀도 분해능

† Corresponding Author, joyoon@hanyang.ac.kr

© 2013 The Korean Society of Mechanical Engineers

Navier-Stokes (N-S) 해석 방법을 사용하여 공동 유동 현상을 모사하였으며, 이 후 수많은 연구자들이 그 결과를 이용하여 새로운 수치해석 방법을 검증해왔다. 그러나 공동 형상에 대한 연구들은 Re수의 증가에 따른 주 와동의 위치와 상·하부에 발생하는 2차, 3차 와동 생성 등의 내부 유동 현상에 대한 것들이 주를 이루고 있다. 이러한 공동 형상에 대한 연구는 현재 물질 및 열전달 분야로 그 영역이 확대되고 있다.

일반적으로 서로 다른 유체간의 혼합(mixing) 혹은 분산(dispersion) 과정은 유체 유동에 의하여 수동적으로 발생하게 된다. 그래서 혼합을 향상시키기 위해서는 인위적으로 순환(circulation) 및 재순환(recirculation) 영역이 발생하도록 유동을 조절하여야 한다. 특히, 공동 형상과 같은 단순한 기하학적 형상을 이용하여 혼합 유동을 발생시키는 장치는 값싸게 대량으로 생산 가능한 장점이 있어 많은 연구 및 산업에서 응용되고 있다. 마이크로 믹서(micro-mixer)에서는 인위적으로 공동 형상과 같은 홈을 채널에 생성하여 혼합을 증대시키고 있다.⁽⁵⁾ 또한, 광식각법(lithography)과 같은 반도체공정에서는 감광액(photoresist) 분포를 통해 실리콘 웨이퍼의 식각(etching)과 부식(corrosion)이 이루어지며, 이 생성된 형태가 공동 형상을 이룬다. 따라서 공동 형상 내부에서의 감광액 분포 현상은 반도체공정에서 정확한 회로 기판을 제작하기 위하여 매우 중요하다. Alkire 등⁽⁶⁾과 Occhialini and Higdon⁽⁷⁾은 반도체 공정에서 발생하는 공동 형상 내부에서의 물질 분포에 대하여 수치적, 실험적으로 연구하였다. 상기 연구자들은 Pe수를 변화하여 공동형상 내부에서의 물질 전달은 주 와동의 회전력과 벽면의 점성 전단응력에 의하여 이루어진다고 보고하였다. Trevelyan 등⁽⁸⁾은 공동 형상에 발생하는 주 와동을 이용하여 회전에 의해 혼합과 반응을 향상하기 위한 특성에 대하여 연구하였으며, 상부면의 확산 경계층 두께가 $Pe^{-1/2}$ 을 나타나는 것을 보고하였다.

격자볼츠만 방법(lattice Boltzmann method, LBM)은 운동학 이론(kinetic theory)을 기반으로 하는 볼츠만 방정식을 이용하여 유체입자의 확률 분포 변화를 통해 유동을 모사하는 새로운 수치 해석 방법으로 미소유동(micro-flow),⁽⁹⁾ 다공질(porous medium) 내부와 다상유동(multi-phase flow)의 유동해석과 난류에서의 오염물질 확산⁽¹⁰⁾ 등과

같이 복잡한 유동(complex flows)⁽¹¹⁾ 분야에 대하여 다양하게 적용되고 있다. 이러한 LBM을 이용하여 대류-확산(convection-diffusion, C-D) 방정식을 수치 해석하는 모델로는 다중-속도(multi-speed) 모델, 수동 스칼라(passive scalar) 모델 등으로 발전 및 적용되고 있다. 다중-속도 모델은 McNamara and Alder⁽¹²⁾에 의해 제안되었으며, 오직 밀도 분포함수만을 이용한다. 2차원인 경우, N-S 방정식을 해석하기 위한 9개의 이산속도와 추가적인 4개의 이산속도를 이용하여 C-D 방정식을 해석하기 때문에 적어도 13개의 다른 입자 이산속도가 필요하다. 그러나 다중-속도 모델은 수치적으로 매우 불안정하며, 그 해석 범위가 작다는 단점이 존재한다. Shan⁽¹³⁾은 다중-속도 모델의 단점을 보완하기 위하여 수동 스칼라(passive scalar) 모델을 제안하였으며, N-S 방정식과 C-D 방정식을 해석하기 위하여 각각의 다른 입자 분포함수를 이용하기 때문에 수치적 안정성이 향상되었다. 그러나 수동 스칼라 모델은 완화시간(τ)에 의하여 수치적 안정성, 효율성의 관계로 Sc(or Pr)수의 범위는 한정적이다. 또한, 이 모델은 C-D 방정식을 해석하기 위한 추가적인 입자 분포함수가 필요하기 때문에 필연적으로 컴퓨팅 파워가 증가하게 된다. 이러한 단점을 보완하기 위하여, Lallemand and Luo⁽¹⁴⁾은 C-D 방정식을 해석하기 위한 추가적인 입자 분포함수 대신에 기존의 유한차분법(finite differential method, FDM)을 이용하는 혼성(混成) 격자볼츠만 방법(Hybrid LBM, HLBM)을 제안하였다. 이 방법은 유동장 해석은 LBGK(or LB-SRT) 혹은 LB-MRT 모델을 이용하고, 농도 분포는 FDM을 이용하는 방법이다. 이 모델은 기존 LB 모델의 단점인 수치적 불안정성과 추가적인 컴퓨팅 파워를 줄일 수 있기 때문에 난류에서의 열(농도) 분포를 해석할 수 있다.⁽¹⁵⁾

본 연구에서는 상관이 일정한 속도로 움직이는 공동 형상 내부에서의 혼합과 물질 전달 현상에 대하여 수치적으로 연구하였다. 먼저, 공동 형상에서 기존의 신뢰성 있는 유동장 결과와의 비교를 통해 LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델의 신뢰성을 검토한다. 각 모델에 대한 신뢰성을 검토하기 위하여 공동형상 중심에서의 속도 분포와 유선, 와도 분포 등의 내부 유동장을 기존 연구결과와 비교하였다. 신뢰성 있는 LBM 모델을 토대로 혼성 격자볼츠만 방법(Hybrid LBM)을 적용하여 농

도장을 수치 해석하였다. 그리고 그에 따른 결과 값들을 분석하여 공동 형상 내부의 혼합 특성과 물질 전달 형태를 파악하고자 한다.

2. 격자 볼츠만 방법(LBM)

2.1 단일 완화시간을 적용한 격자볼츠만 방법

일반적으로 2차원인 경우, LBM에서는 단일 완화시간(single relaxation time, SRT)을 적용한 lattice BGK (or LB-SRT) D2Q9 모델이 널리 사용된다. D2Q9 모델은 2차원이며 각 lattice에서의 위치는 Fig. 1처럼 각 격자점에만 있을 수 있으며, 속도벡터는 정지되어 있는 것을 포함하여 총 9개의 성분으로 이루어져 있다.

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = \Omega_i(x, t) \quad (1)$$

$$\Omega_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \quad (2)$$

여기에서 f_i 는 i 방향의 입자 분포함수 값이고, τ 는 단일 완화시간, f_i^{eq} 는 각 격자점의 평형 분포함수를 뜻한다. $\Omega_i(x, t)$ 는 충돌식이며 Bhatnagar, Gross, and Krook(16)은 단일 완화시간(τ)을 사용하여 단순한 형태의 충돌 식을 제안하였다.

식 (1)과 식 (2)를 통하여, 식 (3)과 같은 LB-SRT (or LBGK) D2Q9 식을 표현할 수 있다.

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \quad (3)$$

식 (3)에서 속도벡터 c_i 는 다음과 같다.

$$c_i = \begin{cases} c \left[\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi\right) \right] & \text{for } i=1 \sim 4 \\ \sqrt{2}c \left[\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi\right) \right] & \text{for } i=5 \sim 8 \end{cases} \quad (4)$$

여기에서 c 는 격자의 속도이며, LBM에서는 일반적으로 등간격 정렬격자(structured grid)를 사용하기 때문에 보통 1로 가정한다. 식 (3)에서의 평

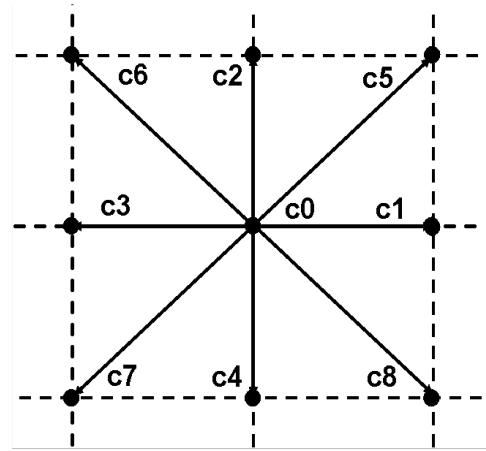


Fig. 1 Velocities vector of D2Q9 model

형 분포함수 $f_i^{eq}(x, t)$ 는 Maxwell 분포를 속도에 대해 Taylor 전개하여, 속도의 2차항까지 나타내며, 식 (5)와 같은 형태로 정의한다.

$$f_i^{eq}(x, t) = \omega_i \rho \left[1 + 3 \frac{c_i \cdot \vec{u}}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(c_i \cdot \vec{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\vec{u} \cdot \vec{u}}{c^2} \right] \quad (5)$$

식 (5)의 ρ 는 유체의 밀도이며, \mathbf{u} 는 유동속도를 뜻하며, 각 지점의 ω_i 는 가중치(weighting) 상수로서 다음과 같은 값을 갖는다.

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_0 = 4/9 \\ \omega_{1 \sim 4} = 1/9 \\ \omega_{5 \sim 8} = 1/36 \end{cases} \quad (6)$$

각 격자점에서의 유체 밀도와 운동량은 다음과 같이 분포함수의 합으로 나타낸다.

$$\rho(x, t) = \sum_i f_i(x, t) \quad (7)$$

$$\rho(x, t) \vec{u}(x, t) = \sum_i c_i f_i(x, t) \quad (8)$$

LBM에서의 압력은 식 (9)와 같은 상태방정식으로 표현되며, 동점성 계수(ν)는 식 (10)과 같이 완화시간(τ)의 함수로 정의된다.

$$p(x, t) = C_s^2 \rho, \quad C_s^2 = c^2/3 \text{ for } D2Q9 \quad (9)$$

$$\nu = C_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \Delta t \quad (10)$$

또한, LBM에서의 레이놀즈(Reynolds, Re) 수는 다음과 같은 식으로 나타낸다.

$$Re = \frac{6U_l N_l}{2\tau - 1} \quad (11)$$

여기서 U_l 은 유체속도, N_l 은 특성길이에 대한 LBM에서의 격자수, τ 는 완화시간을 의미한다.

그리고 LBM에서의 한 계산시간(t)에 대한 계산 단계는 충돌(collision) 단계와 이류(stream) 단계로 구분할 수 있다. 충돌은 식 (2)의 충돌 연산자를 계산하는 단계이며, 이류는 충돌 연산자에서 구해진 새로운 분포함수를 다음 격자점으로 분산시켜 주는 단계이다. 이 두 단계가 끝나고 계산영역의 경계에서 경계조건을 계산하는 것으로 LBM의 계산이 마무리 된다.

2.2 다중 완화시간을 적용한 격자볼츠만 방법

단일 완화시간으로 충돌항을 단순화한 기존의 LB-SRT 모델은 단순하고 적용이 용이하다는 장점을 가지고 있어 현재에도 대부분의 LBM 해석에 이용되고 있다. 그러나 높은 Re수의 유동해석과 급격하게 큰 구배를 보이는 영역인 정체점(stagnation point)과 날카로운 코너(sharp convex corner)와 같은 형상적으로 특이점인 영역의 유동해석에서는 수치해가 진동(spatial oscillations)하는 현상에 의하여 수치적인 안정성이 떨어지는 단점을 갖고 있다. 이러한 LB-SRT 모델의 단점을 보완하기 위하여 각 유동 현상에 따라 각각의 다른 완화시간을 적용시켜주는 다중 완화시간(multi-relaxation-time, LB-MRT) 모델이 d'Humieres(17)에 의하여 제안되었다.

d'Humieres은 거시적인 물리량의 새로운 변수 \bar{R} 과 입자 분포함수 \bar{F} 를 D2Q9 모델인 경우에 대하여 다음과 같이 정의하였다.

$$\bar{R} = (\rho, e, \epsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T \quad (12)$$

$$\bar{F} = (f_0, f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_7, f_8)^T \quad (13)$$

여기서 행렬 \bar{R} 에서의 ρ 는 유체 밀도, e 는 에너지, ϵ 는 에너지의 제곱, j_x 와 j_y 는 x, y 방향의 질량 유속(또는 운동량 밀도), q_x 와 q_y 는 x, y 방

향의 에너지 유속(flux), p_{xx} 와 p_{xy} 는 각 전단응력 텐서(viscous shear stress)의 대각(diagonal)과 비대각(off-diagonal) 요소들을 나타낸다.

\bar{R} 과 \bar{F} 는 행렬식 \bar{M} 을 사용하여 다음과 같은 관계를 갖고 있다.

$$\bar{R} = \bar{M}\bar{F} \quad (14)$$

여기서 \bar{M} 은 분포함수를 식 (12)와 같은 9개의 모멘트 성분으로 구성시켜주는 9×9 행렬식이며, 다음과 같이 나타낸다.

$$\bar{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & 2 & -1 & 2 & -1 & 2 & -1 & 2 \\ 4 & -2 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (15)$$

LB-MRT 모델은 거시적인 물리량들을 식 (14)처럼 $\bar{M}\bar{F}$ 의 단순한 행렬식 곱으로 나타내며, 입자 충돌 전·후의 질량과 운동량 보존은 각 lattice에서 국부적으로 보존이 된다. LB-MRT 모델도 LB-SRT 모델과 같은 두 가지 과정(충돌과 이류)을 수행한다. LB-MRT 모델은 다음과 같은 충돌 과정을 수행한다.

$$\bar{R}^* = \bar{R} - \bar{S}(\bar{R} - \bar{R}^{eq}) \quad (16)$$

여기서 '*'는 충돌 후의 상태임을 나타내며, \bar{S} 는 LB-MRT 모델의 완화계수들로서 9×9 대각 행렬식이고, 충돌 전·후의 질량 보존과 운동량 보존을 위해서는 \bar{S} 의 요소 중 $s_0 = s_3 = s_5 = 0$ 이어야 한다.

$$\bar{S} = \text{diag}(0, s_1, s_2, 0, s_4, 0, s_6, s_7, s_8) \quad (17)$$

여기서 $s_7 = s_8 = 1/\tau$ 로서 LB-SRT 모델의 유체 동점성 계수(ν)와 같으며, 나머지 s_1, s_2, s_4, s_6 는 각 물리적 현상에 따라 0과 2 사이의 값으로 선택한다. 만약 $s_1 = s_2 = s_4 = s_6 = s_7 = s_8$

$= 1/\tau$ 이면, 간단하게 LB-MRT 모델을 LB-SRT 모델로 변환할 수 있다.

식 (16)에서의 평형상태 \bar{R}^{eq} 은 각각의 서로 다른 값을 가지게 되며 다음과 같이 표현된다.

$$\begin{cases} e^{eq} = -2\rho + 3(u^2 + v^2) \\ \epsilon^{eq} = \rho - 3(u^2 + v^2) \\ q_x^{eq} = -u \\ q_y^{eq} = -v \\ p_{xx}^{eq} = u^2 - v^2 \\ p_{xy}^{eq} = uv \end{cases} \quad (18)$$

충돌 과정이 완료된 후, 이동 과정이 일어나기 전에 \bar{R}^* 을 \bar{F}^* 의 형태로 변환하여 나타내면 식 (3)의 LB-SRT 모델과 같은 형태로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\bar{F}^* = \bar{M}^{-1} \bar{R}^* = \bar{F} - \bar{M}^{-1} \bar{S}(\bar{R} - \bar{R}^{eq}) \quad (19)$$

LB-MRT 모델에서의 거시적 물리량인 유체 밀도, 운동량, 압력과 동점성 계수는 LB-SRT 모델과 같은 과정으로 식 (7) ~ 식 (10)을 이용하여 나타낸다.

2.3 혼성(混成) 격자볼츠만 방정식(HLBE)

본 연구에서는 두 물질의 질량은 같고, 두 물질 사이의 상호작용이 없다고 가정한 Passive Scalar 방법을 사용하였다. 전체에 대한 유동장은 분포함수 f_i 를 통해 표현되며, 농도 확산을 해석하기 위한 농도 분포는 유한차분법(FDM)을 이용하였다.

HLBE를 이용하여 농도 분포를 해석하기 위해서는 다음과 같은 무차원 대류-확산(C-D) 방정식을 수치적으로 해석하여야 한다.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u^* \frac{\partial \theta}{\partial x} + v^* \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{Re Sc} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \quad (20)$$

여기서 ‘*’는 무차원 변수이며, 모든 변수들은 lattice에서의 물리량을 말한다. θ 는 무차원인 농도로 다음과 같이 정의한다.

$$\theta = \frac{C - C_{initial}}{C_{boundary} - C_{initial}} \quad (21)$$

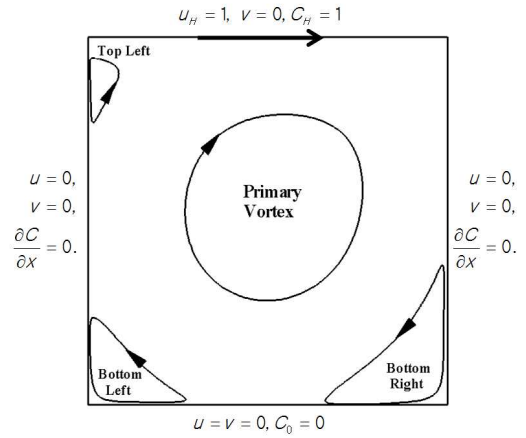


Fig. 2 Schematic view of the 2-D lid-driven cavity flow

식 (20)의 쌍곡선 편미분 방정식(hyperbolic partial differential equations)인 무차원 대류-확산 방정식을 수치적으로 해석하기 위해서는 여러 가지 유한차분법의 양해법(explicit)을 이용하여 해석할 수 있다. 본 연구에서는 식 (20)의 각 편미분항을 Euler's FTCS (forward-time central-space) 방법을 이용하여 이산화하였다.

LBM을 이용하여 해석한 유체 속도를 유한차분법에 적용하기 위해서는 수치적 안정성 문제 때문에 유한차분법의 시간 Δt^{FD} 과 속도, 확산계수와와의 관계는 다음과 같은 제한조건이 있다.⁽¹⁵⁾

- 1) CFL(Courant-Friedrichs-Lewy) 조건;

$$\Delta t^{FD} < \Delta x / u \quad (22)$$

- 2) 확산계수 조건 ;

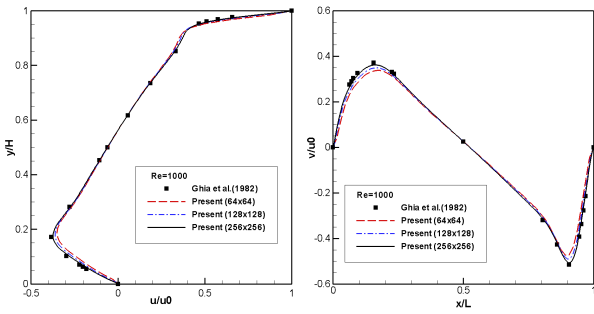
$$\Delta t^{FD} < \Delta x^2 / (2D) \quad (23)$$

위의 식 (22)와 식 (23)을 이용하면 이산화시간 Δt^{FD} 를 확산계수와 속도로 다음과 같은 제한조건이 정의된다.

$$\Delta t^{FD} < \frac{2D}{u^2} \quad (24)$$

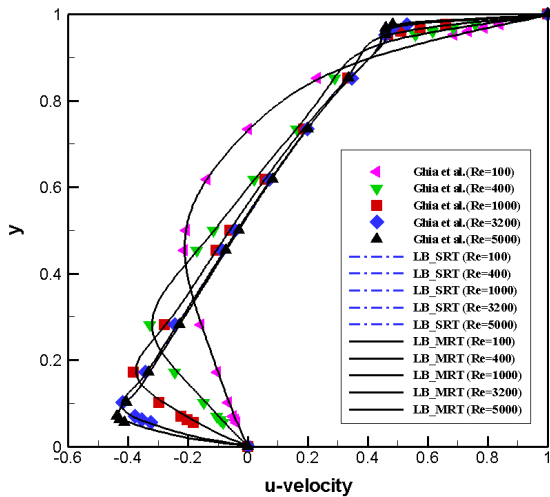
3. 수치계산 방법 및 조건

본 연구에서는 신뢰성 있는 유동 모델을 선택하고자 정사각형 공동 형상 내부 유동에 대하여

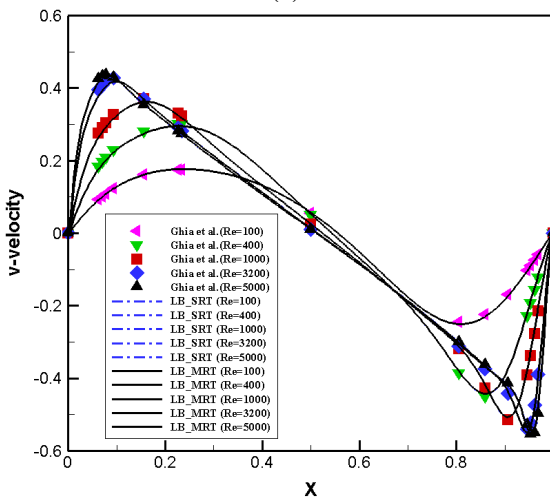


(a) u-velocity profiles (b) v-velocity profiles

Fig. 3 The typical test of grid sensitivity when Re=1000



(a)



(b)

Fig. 4 (a) velocity profiles for u along the vertical geometric centerline of the cavity; and (b) velocity profiles for v along the horizontal geometric centerline of the cavity

LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델을 수치 해석하여 그 결과를 비교하였다. 비교된 정확한 유동장 모

델을 토대로 농도 확산을 수치계산하기 위하여 HLBE 모델을 적용하여 농도장을 수치 계산하였다. Fig. 2은 정사각형 공동 형상 내부의 대표적 유동 형태와 경계조건을 나타낸 개략도이다. LBM에서의 경계조건은 기존 CFD 방법에서 사용하는 방법을 그대로 적용할 수 없다. 그래서 본 연구에서는 상부를 제외한 모든 벽면에 점착 (No-Slip)하는 조건으로 2차 정확도를 가진 “mid-grid bounce-back scheme”을 사용하였으며, 상판에서의 조건은 상판 속도($U_H=1$)를 토대로 매 계산 시간마다 평행분포 함수 f_i^{eq} 로 유지시켜주었다. 또한, 농도 경계조건으로는 왼쪽과 오른쪽 벽면에서는 물질전달이 이루어지지 않는다고 가정하여 Neumann ($\partial C/\partial x = 0$) 조건을 사용하였으며, 상·하부 벽면은 $C_H = 1.0$, $C_0 = 0.0$ 인 Dirichlet 조건을 사용하였다.

본 연구에서는 격자 의존도 검사를 수행하기 위하여, 한쪽 벽면을 64 ~ 256 lattice로 변화하여 수치해석을 수행하였다. Fig. 3에서 보는 것처럼, Re=1000일 때의 중심에서의 속도(u, v) 분포는 격자수가 256개 이상인 경우, 기존의 Ghia 등⁽⁴⁾의 수치계산 결과와 거의 차이가 발생하지 않았다. 그래서 계산영역의 격자수는 256×256 ($N_x \times N_y$)으로 총 65,536개의 lattice를 사용하였다. 그리고 모든 lattices에서의 각 변수(u, v, C)들의 잔류(residual)가 10^{-8} 이하인 경우를 정상상태로 가정하여 수치계산을 수행하였다.

4. 결과 및 고찰

4.1 2차원 정사각 공동 형상에서의 유동 결과

2차원 정사각 공동 유동은 양 모서리에 특이점이 존재함에도 불구하고, 단순한 형상을 가지면서도 Re수 변화에 따라 내부 유동에 매우 복잡한 현상을 가지고 있다. 이러한 유동현상은 각종 수치해법의 해석 정확도 및 정밀도를 평가하기 위한 척도로 사용되고 있다. 그래서 본 연구에서는 LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델의 수치결과를 기존의 연구 결과와 비교하여 신뢰성 있는 격자분츠만 모델을 선택하고자 한다.

Fig. 4는 공동 형상의 수직, 수평 중심선에서의 속도 분포를 Ghia 등⁽⁴⁾의 연구결과와 비교하여 나타낸 것이다. LB-SRT와 LB-MRT 두 모델 모두 Ghia 등의 연구결과와 거의 같은 속도 분포를 보

Table 1 Comparison of the properties of the primary vortex; the stream function ψ and the location of the center

Re	Reference	Primary Vortex		
		ψ	x/L	y/H
100	LB-SRT	-0.103	0.6172	0.7381
	LB-MRT	-0.103	0.6172	0.7379
	Ghia [4]	-0.103	0.6172	0.7344
	Hou [18]	-0.103	0.6196	0.7373
400	LB-SRT	-0.113	0.5547	0.6055
	LB-MRT	-0.113	0.5547	0.6055
	Ghia [4]	-0.114	0.5547	0.6055
	Hou [18]	-0.112	0.5608	0.6078
1000	LB-SRT	-0.118	0.5313	0.5661
	LB-MRT	-0.118	0.5313	0.5662
	Ghia [4]	-0.118	0.5313	0.5625
	Hou [18]	-0.118	0.5333	0.5647
3200	LB-SRT	-0.123	0.5183	0.5423
	LB-MRT	-0.122	0.5187	0.5440
	Ghia [4]	-0.120	0.5165	0.5469
5000	LB-SRT	-0.121	0.5154	0.5353
	LB-MRT	-0.121	0.5156	0.5349
	Ghia [4]	-0.120	0.5117	0.5352
	Hou [18]	-0.121	0.5176	0.5373

이고 있다. 또한 Table 1에서는 각 Re수에 따른 유동함수(stream-function) 값과 주 와동의 중심 위치(X,Y)를 본 연구 결과와 기존 연구 결과들(Ghia 등,⁽⁴⁾ Hou 등⁽¹⁸⁾)을 함께 정리하여 나타내었다. LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델 모두 기존 연구결과들과 약 1%미만의 차이를 나타내고 있다.

Fig. 5은 Re수가 1000, 3200, 5000일 때의 두 모델에 대한 유선분포를 보여주고 있다. 상판이 왼쪽에서 오른쪽으로 이동함으로써 공동 형상 중간부분에 시계방향으로 회전하는 주 와동(primary vortex)이 발생한다. Re수가 증가함에 따라 주 와동의 회전방향과는 다르게 반시계방향으로 밀면 양 모서리에 추가적인 와동(secondary vortices: BL, BR)이 발생하며, 점점 그 크기가 증가하는 현상을 볼 수 있다. 또한 낮은 Re수 (Re=1000 이하)에서는 왼쪽 상단부분에 추가적인 와동(Top Left, TL)이 발생하지 않지만, Re수가 1000이상인 경우에는 반시계방향으로 회전하는 추가적인 와동이 발생하는 것을 볼 수 있다. Re수가 1000 ~

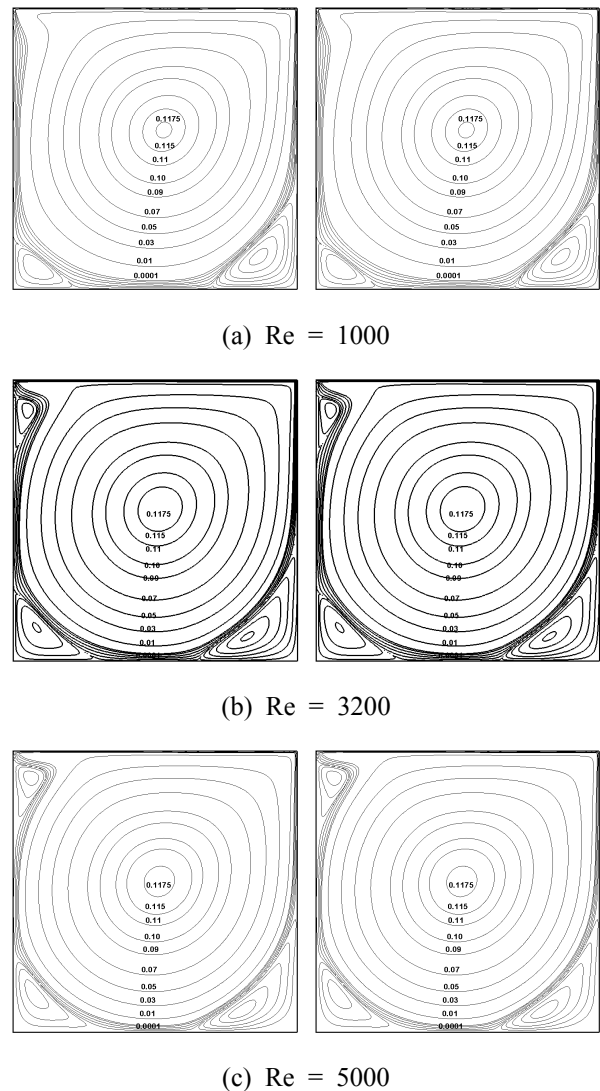
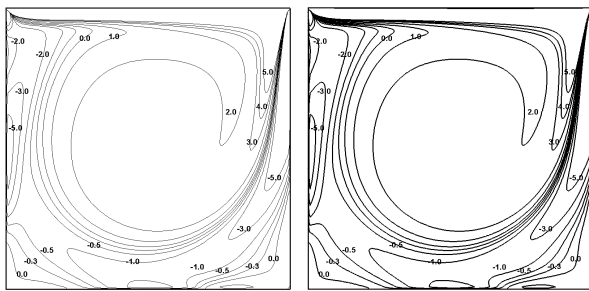


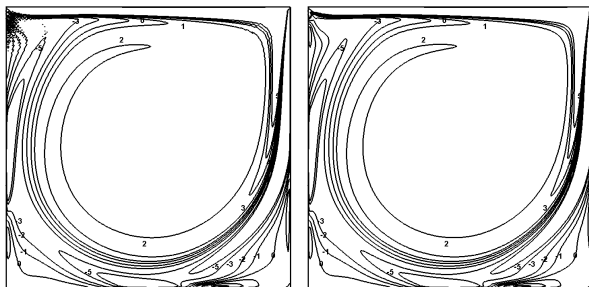
Fig. 5 Streamlines of the driven cavity flow at various Reynolds numbers. (left side: LB-SRT, right side: LB-MRT)

5000에서의 유선분포는 LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델 모두 대체로 거의 유사한 유동형태를 보이고 있다.

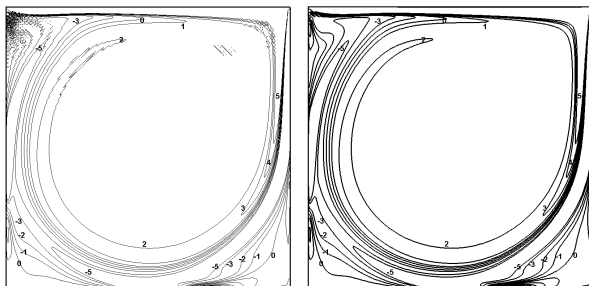
Fig. 6은 Re수가 1000, 3200, 5000일 때의 LB-SRT과 LB-MRT 두 모델의 와도(vorticity) 형태이다. Re수가 1000인 경우에는 두 모델 모두 같은 와도 형태를 보이고 있으나, Re수가 3200인 경우, LB-SRT 모델에서는 상단의 양쪽 특이점 부분에서 와도의 형태가 ‘요동(jiggle)’치는 것을 볼 수 있다. 또한 Re수가 증가함으로써 특이점 부분에서 시작되는 이러한 현상이 주 와동 부분으로 전파되고 있다. 이러한 현상은 LBM으로 공동형상을 모사한 기존의 Hou 등⁽¹⁸⁾의 연구결과



(a) Re = 1000



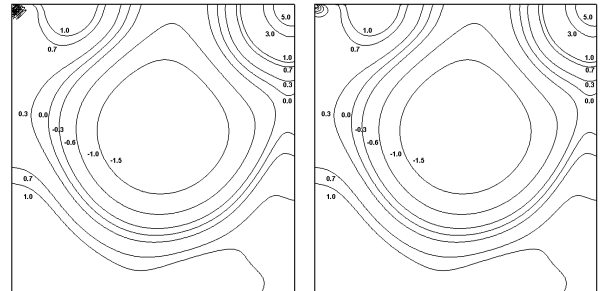
(b) Re = 3200



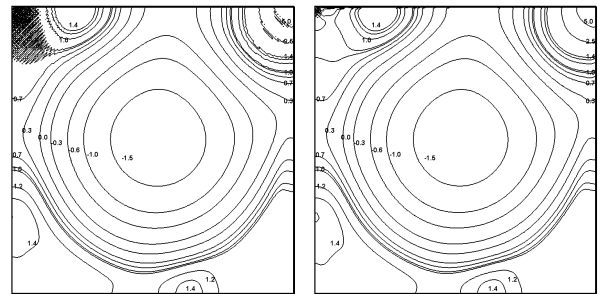
(c) Re = 5000

Fig. 6 Contour plots of vorticity at various Reynolds numbers. (left side: LB-SRT, right side: LB-MRT)

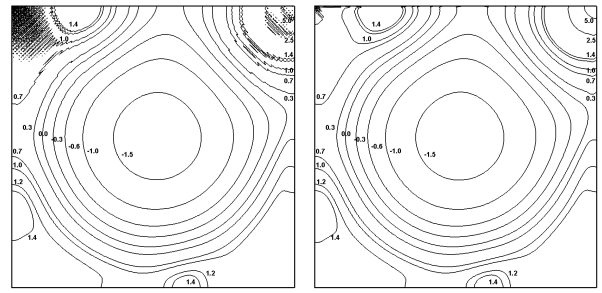
에서도 나타나고 있다. LB-SRT 모델이 정확하게 유동장을 모사하기 위해서는 Ma 수는 작아야 하며, 밀도 변화는 완만하게 변화하여야 한다. 즉, LB-SRT 모델은 약간의 압축성 효과를 가진 근사적인 비압축성 모델이라고 할 수 있다. 공동 형상에서는 Re 수의 증가로 인하여 특이점 부분에 급격하게 변화하는 와도 구배가 발생하게 된다. 그래서 특이점인 영역에서는 수치해가 진동하는 영향으로 인하여 LB-SRT 모델은 와도 형태를 정확하게 모사하지 못한다고 할 수 있다. 이에 반하여 LB-MRT 모델은 LB-SRT 모델보다 수치해의 진동이 감소하기 때문에 정확하게 공동 형상의 와도 형태를 모사한다고 할 수 있다.



(a) Re = 1000



(b) Re = 3200



(c) Re = 5000

Fig. 7 Contour plots of pressure deviation multiplied by 1,000 at various Reynolds numbers. (left side: LB-SRT, right side: LB-MRT)

Fig. 7은 Re 수가 1000, 3200, 5000일 때의 LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델의 압력 편차 (pressure deviation, $P_d = C_s^2(\rho - \bar{\rho})$) 분포를 보여주고 있다. 시인성(visibility)을 높여주기 위하여 모든 압력편차 값에 1,000배를 확대하여 나타내었다. 앞서 본 바와 같이 Re 수가 3200인 경우, 특이점 부근에서는 LB-SRT 모델이 와도 형태를 정확하게 예측하지 못하는 양상과 유사하게 압력 편차 또한 비슷한 결과를 보여주고 있다. Re 수가 1000이상으로 증가함에 따라서 특이점 부근에서 발생한 압력 편차의 ‘요동’이 중심지역으로 전파되고 있다. LBM에서의 압력은 상태방정식 ($P = \rho C_s^2$)으로 정의된다. 하지만 LB-SRT 모델

은 약간의 압축성 효과를 가지고 있기 때문에 급격한 밀도 변화가 발생하는 특이점 부근에서는 정확한 압력을 구할 수 없게 되어, 수치해가 진동하는 현상을 보인다. 이것은 유동에 특이점이 존재하는 경우, 높은 wave수인 short wave-length 영역이 수치해의 해상도에 직접적인 영향을 미치는 것을 의미한다. LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델 모두 앞서 본 바와 같이 Re수가 1000이하인 낮은 wave수의 long wave-length 영역에서는 동등한 해상도를 보이지만, 수치해의 높은 정확도에 영향을 주는 높은 wave수인 short wave-length 영역에서는 LB-SRT 모델보다 LB-MRT 모델이 높은 해상도를 보여준다. 이러한 결과를 토대로 공동형상 유동에서는 Re수가 증가함에도 불구하고 LB-MRT 모델이 LB-SRT 모델보다 수치해의 안정성과 정확성이 우수하다고 사료된다.

4.2 사각 공동 내부에서의 혼합 특성

본 연구에서는 앞 절의 연구결과를 토대로 공동형상 유동을 정확하게 모사하는 LB-MRT 모델을 선택하여 유동장을 해석하였으며, 두 물질간의 혼합을 모사하기 위하여 Euler's FTCS을 적용한 혼성 격자볼츠만(HLBE) 방법을 이용하여 농도장을 수치 계산하였다.

본 연구에서는 공동 형상 내부로 다른 물질이 전파되어 혼합되는 유동을 모사하였다. 모사의 정밀도를 비교하기 위하여 상·하부 벽면에서 내부로 물질이 전달되는 양을 정량적으로 표현하는 무차원 수인 평균 Sh(Sherwood)수를 계산하여 기존 Antonini 등(19)의 연구결과와 비교하였다. 상·하부 벽면에서의 평균 Sh수는 다음과 같이 정의된다.

$$Sh_a = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{\partial C}{\partial y} dx \Big|_{y=0 \text{ or } H} \quad (25)$$

Fig. 8은 Re=1000일 때, Pe수에 따른 평균 Sh수의 변화를 나타낸 것이다. Antonini 등의 연구결과와 본 연구의 결과가 대체로 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 이것을 통해 HLBE 모델이 공동형상 내부의 농도분포를 잘 모사하고 있다고 할 수 있다.

Fig. 9은 공동 형상 상부에서 다른 물질이 전파되어 혼합되는 농도 형태를 나타낸 것이다. 유동

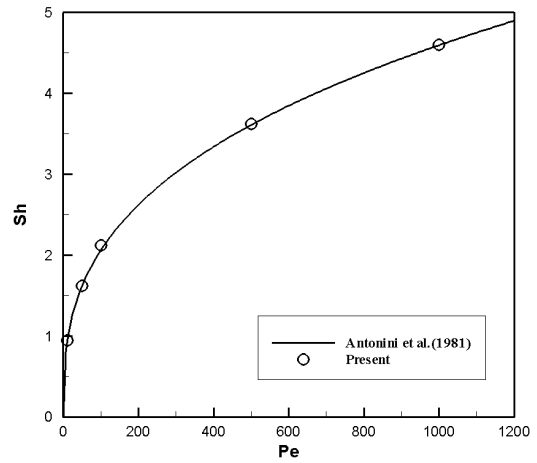


Fig. 8 Average Sherwood number for various Peclet numbers at Re=1000

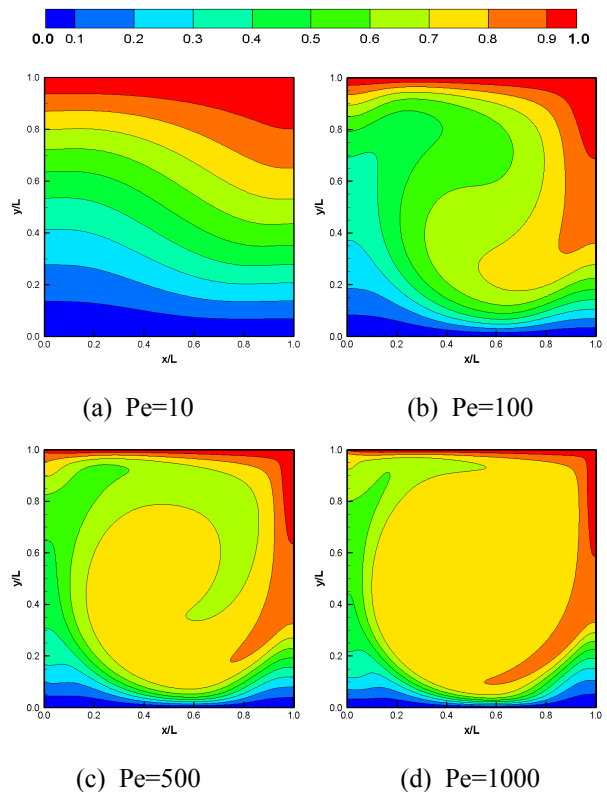


Fig. 9 Concentration contour of the lid-driven cavity flow for various Peclet numbers at Re=5000

조건은 공동 형상 내부에 재순환 유동이 발생하는 Re수가 5000인 경우이며, 대류와 분자적 확산의 비로 정의하는 Pe(= uH/D)수는 10, 100, 500, 1000으로 변화하였다. Pe수가 10인 경우에는 분자확산의 강도가 매우 강하기 때문에 회전 유동이 농도장에 미치는 영향이 매우 작다. 즉, 대류

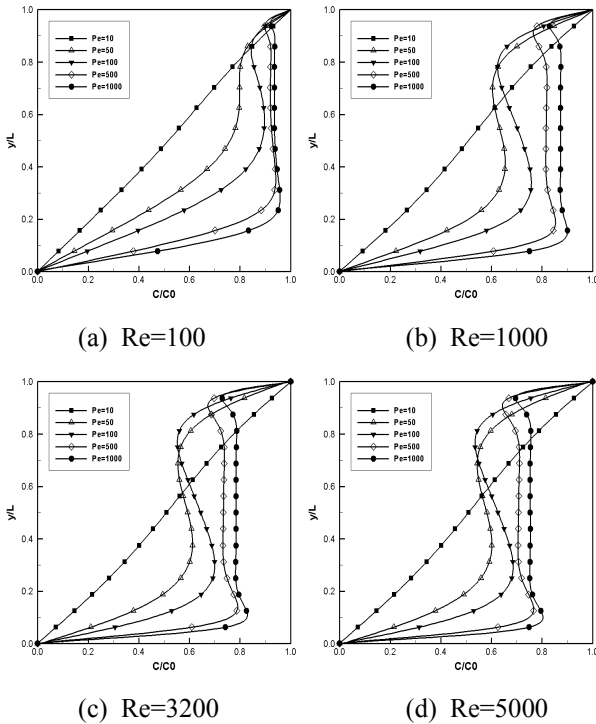


Fig. 10 Concentration profiles along the vertical geometric centerline at various Peclet numbers

의 영향보다는 분자확산의 영향이 강해서 순수 분자확산(pure diffusion)의 형태를 보이고 있다. 점점 Pe수가 증가함에 따라 분자확산보다 대류의 영향이 커져 공동 형상 내부에 발생하는 회전유동을 따라서 농도가 회전하면서 물질을 전달하는 것을 볼 수 있다. Pe수가 500일 때의 농도 분포는 중심에 회전하는 주 와동의 유동 형태를 확인할 수 있도록 강한 대류의 영향을 받고 있음을 확인할 수 있다. 특히 Pe수가 1000인 경우에는 Fig. 6(c)에서의 Re=5000인 유동 형태와 거의 비슷한 농도분포를 보인다. 이것은 미비한 분자확산의 영향으로 인하여 농도 분포가 회전하는 유동의 형태를 그대로 따라가면서 혼합이 이루어진다. 농도 값이 0.7이상인 농도 분포 또한 대류의 영향을 많이 받는 Pe=1000인 경우가 확산의 영향이 강한 Pe=10 보다 더 넓게 분포하는 것을 볼 수 있다. 이러한 결과를 토대로 서로 다른 두 물질의 혼합에서는 분자적 확산 영향보다는 대류의 영향을 증대시키는 유동 형태로 형상을 설계하는 것이 혼합 성능을 증대할 수 있다고 사료된다.

Fig. 10은 각 Re수에서 Pe수를 10에서 1000까지 변화하였을 때의 공동 형상의 중심선 (x=0.5)에서의

수직 농도 분포를 보여주고 있다. 움직이는 상부면 보다 고정된 밀면의 확산 경계층 두께가 두꺼운 것을 볼 수 있는데 이것은 움직이는 상부면 보다 밀면에서의 전단응력(shear stress)이 강하게 나타나기 때문이라고 할 수 있다. 그리고 Re수가 일정한 경우, Pe수가 증가함에 따라 상·하부면 모두 확산 경계층 두께가 얇아지고 있다. 이것은 확산 경계층의 두께가 Pe수의 함수로 나타나기 때문이다. Trevelyan 등⁽⁸⁾의 연구에 의하면 확산 경계층 두께는 상부에서 $O(Pe^{-1/2})$ 정도이며, 밀면은 $O(Pe^{-1/3})$ 을 나타낸다고 보고하였다. 본 연구 결과도 Trevelyan 등의 연구결과와 비슷하게 상·하부면의 확산 경계층 두께가 상이(相異)한 분포를 보이고 있다. 또한, Re수가 100에서 5000으로 증가하면 농도 분포가 약간 다른 현상을 보이고 있다. 이것은 공동 형상 중심에서 회전하는 주 와동의 강도가 증가하게 되어 회전하는 영역이 넓어지는 대류작용에 의해서 발생하는 현상 때문이라 사료된다.

5. 결론

본 연구에서는 상관이 일정한 속도로 움직이는 공동 형상 내부에서의 유동형태와 물질 전달 현상에 대하여 수치 계산하였다. 신뢰성 있는 기존 연구결과와 LBM의 두 모델(LB-SRT, LB-MRT)을 비교하여, LB-SRT 모델과 LB-MRT 모델 모두 Re수가 5000이하인 유동에서는 기존의 Navier-Stokes solver의 유동해석 결과와 대체로 유사한 결과를 보였다. 그러나 Re수의 증가함에 따라 LB-SRT 모델은 특이점 영역에서 수치해의 요동이 발생하여 중심으로 전파되는 현상을 파악하였다. 이를 통해 특이점이 존재하는 유동조건에서는 LB-SRT 모델보다는 LB-MRT 모델이 더 정확한 것으로 나타났다. 그리고 공동 형상 내부의 농도분포를 통해 상부의 확산 경계층 두께는 $O(Pe^{-1/2})$ 이며, 물질이동 및 혼합은 분자적 확산보다는 대류의 영향이 지배적이라 할 수 있다. 이러한 공동 형상의 확산과 대류에 대한 수치계산 결과를 토대로 교반기(or 혼합기), 반응기 설계에 있어서의 기초자료 또는 참고자료로 사용하는데 적합한 것으로 판단된다.

참고문헌

(1) Burggraf, O.R., 1966, "Analytical and Numerical

- Studies of the Structure of Steady Separated Flows," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 24, pp. 113~151.
- (2) Pan, F., and Acrivos, A., 1967, "Steady Flows in a Rectangular Cavities," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 28, pp. 643~655.
- (3) Shankar, P.N., and Deshpande, M.D, 2000, "Fluid Mechanics in the Driven Cavity," *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 32, pp. 93~136.
- (4) Ghia, U., Ghia, K.N., and Shin, C.T., 1982, "High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method," *Journal of Computational Physics*, Vol. 48, pp. 387~411.
- (5) Nguyen, N.-T., and Wu, Z., 2005, "Micromixers - A Review," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, Vol.15, pp. R1~R16.
- (6) Alkire, R.C, Deligianni, H., and Ju, J.B, 1990, "Effect of Fluid Flow on Convective Transport In Small Cavities," *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 137, pp. 818~824.
- (7) Occhialini, J.M. and Higdon, J.J.L, 1992, "Convective Mass Transport from Rectangular Cavities in Viscous Flow," *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 139, pp. 2845~2855.
- (8) Trevelyan, P.M.J., Kalliadasis, S., Merkin, J.H., and Scott, S.K., 2001, "Circulation and Reaction Enhancement of Mass Transport in Cavity," *Chemical Engineering Science*, Vol. 56, pp. 5177~5188.
- (9) Shin, M.S., Byun, S.J., and Yoon, J.Y., 2010, "Numerical Investigation of Effect of Surface Roughness in a Microchannel," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 34, No. 5, pp. 539~546.
- (10) Shin, M.S., Byun, S.J., Kim, J.H., and Yoon, J.Y., 2011, "Numerical Investigation of Pollutant Dispersion in a Turbulent Boundary Layer by Using Lattice Boltzmann-Subgrid Model," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 35, No. 2, pp. 169~178.
- (11) Chen, S. and Doolen, G.D., 1998, "Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows," *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 30, pp. 329~364.
- (12) McNamara, G., and Alder, B., 1993, "Analysis of the Lattice Boltzmann Treatment of Hydrodynamics," *Physica A*, Vol. 194, pp. 218~228.
- (13) Shan, X., 1997, "Simulation of Rayleigh-Bénard Convection Using a Lattice Boltzmann Method," *Physical Review E*, Vol. 55, pp. 2780~2788.
- (14) Lallemand, P., and Luo, L.S., 2003, "Hybrid Finite-Difference Thermal Lattice Boltzmann Equation," *International Journal of Modern Physics*, Vol. 17, pp. 41~47.
- (15) Treeck, C.V., Rank, E., Krafczyk, M., Tolke, J., and Nachtwey, B., 2006, "Extension of a Hybrid Thermal LBE Scheme for Large-Eddy Simulations Of Turbulent Convective Flows," *Computers & Fluids*, Vol. 35, pp. 863~871.
- (16) Bhatnagar, P.L, Gross, E.P. and Krook, M., 1954, "A Model for Collision Processes in Gases. I : Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component System," *Physical Review*, Vol. 94, No. 5, pp. 511~525.
- (17) d'Humieres, D., 1992, "Generalized Lattice Boltzmann Equation," in *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations*, ed. by Shizgal, D, and Weaver, D.P, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 159, AIAA, Washington DC, pp. 450~458.
- (18) Hou, S., Zou, Q., Chen, S., Doolen, G., and Cogley, A.C., 1995, "Simulation of Cavity Flow by Lattice Boltzmann Method," *Journal of Computational Physics*, Vol. 118, pp. 329~347.
- (19) Antonini, G., Gelus, M., Guiffant, G., and Zoulalian, A., 1981, "Simultaneous Momentum and Mass Transfer Characteristics in Surface-Driven Recirculating Flows," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 24, pp. 1313~1323.