

격자볼츠만방법(LBM)을 이용한 마이크로채널 내의 유동해석

조 경 진^{*1}, 정 재 택^{*2}

The Flow Analysis in a Microchannel using the Lattice Boltzmann Method

K. J. Cho and J. T. Jeong

As an alternative numerical method, the lattice Boltzmann method (LBM) is used to simulate a 2-dimensional pressure driven microchannel flow which comes from frequently in MEMS problems. The flow is assumed to be isothermal ideal gas flow. The flow field is calculated with various Knudsen numbers, pressure ratios and aspect ratios of the microchannel. The LBM can show the fundamental characteristics in microchannel flow such as velocity slip and nonlinear pressure drop.

Key Words: 격자볼츠만방법(LBM), 마이크로채널 유동(Microchannel flow), 누센수(Knudsen number), 속도슬립(velocity slip), 확률분포함수(distribution function), BGK approximation, 압력비(pressure ratio)

1. 서 론

최근 MEMS(microelectromechanical systems)기술의 발전과 더불어 마이크로 스케일의 유체유동에 관한 연구가 활발하게 진행되고 있다. 마이크로 유동에서는 부피 대 표면적의 비가 커짐에 따라 마찰, 점성효과 정전기력 등이 유동현상을 지배하게 된다. 또한 특성길이가 마이크로 단위이기 때문에 유체의 희박(rarefaction) 효과가 중요 변수로 작용하게 된다. 이를 표현하는 무차원 수는 Knudsen 수(Kn)로 특성길이에 대한 분자의 평균자유경로로 표현된다. Kn 수가 0.01까지는 유체를 연속체로 가정할 수 있고 유동은 Navier-Stokes(NS) 방정식으로 모델화된다. 그리고 Kn 수가 증가함에 따라 유동은 slip 유동 영역($0.01 < Kn < 0.1$), 천이 유동 영역($0.1 < Kn < 10$) 그리고 자유분자 유동 영역($Kn > 10$)으로 구분되어진다.[1]

Slip 유동은 속도 경계조건으로 벽면에서 slip 조건을 적용하여 NS 방정식으로 유동 모델화가 가능하다. 그러나 천이 유동이나 자유분자 유동에서는 희박 효과가 중요해지므로 NS 방정식과 같은 연속체 모델을 이용할 수 없다. 따라서 지배방정식은 입자(atomistic) 모델인 볼츠만(Boltzmann) 방정식이 되며 이는 입자의 분포가 확률적으로 표현되고 통계역학 특히 kinetic 이론을 통하여 압력, 속도, 밀도와 같은 거시적 물리량과 연관이 된다.

격자볼츠만방법(lattice Boltzmann method ; LBM)은 유동영역을 정사각형 격자로 나누어서 속도 공간에 대해 이산화된 볼츠만 방정식의 해를 구하는 방법이다. 그리고 여기에서 사용되는 충돌모형은 BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) 근사를 통한 선형 충돌모델을 이용한다.

본 연구에서는 MEMS 장치의 가장 기본적인 요소인 마이크로채널 내의 유동을 LBM을 이용하여 해석하고 채널벽면에서 slip 현상과 유동방향 압력의 비선형적인 분포를 확인한다. 또한, LBM을 사용하여 확대된 마이크로채널 내에서의 유동도 모사해 본다.

*1 학생회원, 전남대학교 대학원 기계공학과

*2 정회원, 전남대학교 기계시스템공학부

*E-mail : jtjeong@chonnam.ac.kr

2. 격자 볼츠만 방법 (LBM)

2.1 격자 볼츠만 방정식

NS 방정식의 해를 구함으로서 거시적인 변수인 속도, 압력 등을 얻는 것과는 달리 kinetic 이론으로부터 유도된 볼츠만 방정식에서는 관심있는 변수가 분포함수 $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$ 이다. BGK 모델을 사용한 볼츠만 방정식은 다음과 같다.[2]

$$\frac{\partial f(\vec{v}, \vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f(\vec{v}, \vec{x}, t) = -\frac{1}{\omega} [f(\vec{v}, \vec{x}, t) - f^{eq}(\vec{v}, \vec{x}, t)] \quad (1)$$

여기서 $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$ 는 위치 및 속도 공간에 분포하는 확률 밀도함수이고, \vec{x} 는 입자의 위치, \vec{v} 는 입자의 속도, t 는 시간, ω 는 충돌에 의한 이완시간 (relaxation time) 그리고 $f^{eq} = f^{eq}(\rho, \vec{u}, T)$ 는 Maxwell-Boltzmann 평형분포함수로 아래와 같이 표현된다.

$$f^{eq} = \alpha \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^3 \exp\left(-\frac{|\vec{v} - \vec{u}|^2}{2RT} \right) \quad (2)$$

여기서 R 는 기체상수, ρ , \vec{u} 그리고 T 는 각각 거시적 밀도, 속도, 온도이다. 또한 분포함수와 거시적 물리량과의 관계는 아래와 같다.

$$\rho = \int f d\vec{v}, \quad \rho \vec{u} = \int \vec{v} f d\vec{v} \quad (3)$$

편의상 reference 시간 t_s , 밀도 ρ_0 속도 (T 에서 이상기체의 평균분자속도)

$c = \sqrt{3RT}$ 로 무차원 한다. 속도 space 를 i 개의 속도들 $\{\vec{c}_i\}$ 로, 또한 공간과 시간에 대해 차분화 시키면 LB 방정식을 얻을 수 있다(이하 식에서는 무차원 표시는 생략한다).[3]

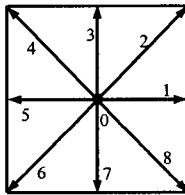


Fig.1 D2Q9모델

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (4)$$

여기서 $\tau = \omega / \Delta t$ 는 무차원 이완시간, $f_i(\vec{x}, t) \equiv f(\vec{x}, \vec{c}_i, t)$ 는 i 방향의 속도와 관련된 분포함수이다. 2차원 9-velocity 정사각 모형(D2Q9)을 이용하면 $\{\vec{c}_i\}$ 는 아래와 같다.

$$\vec{c}_0 = (0, 0)$$

$$\vec{c}_i = c (\cos((i-1)\pi/4), \sin((i-1)\pi/4)) \quad \text{for } i=1,3,5,7$$

$$\vec{c}_i = \sqrt{2}c (\cos((i-1)\pi/4), \sin((i-1)\pi/4)) \quad \text{for } i=2,4,6,8 \quad (5)$$

여기서 $c = \Delta x / \Delta t$ 이고, $\Delta x, \Delta t$ 는 각각 격자상수와 시간간격이다.

평형분포함수는 다음과 같이 근사화된다.[4]

$$f_0^{eq} = \frac{4}{9} \rho \left[1 - \frac{3}{2} \frac{\vec{u}^2}{c^2} \right],$$

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

for $i=1,3,5,7$

$$f_i^{eq} = \frac{1}{36} \rho \left[1 + 3 \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\vec{u}^2}{c^2} \right], \quad \text{for } i=2,4,6,8 \quad (6)$$

식 (4)를 통하여 분포함수를 얻었다면 거시적인 변수들은 다음 식으로 계산되어진다.

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho \vec{u} = \sum_i \vec{c}_i f_i, \quad P = \frac{1}{3} \rho c^2 \quad (7)$$

식 (4)에서 매개변수 τ 는 결정되어야한다. 식 (4)를 Chapman-Enskog multiscale 전개하여 연속체 조건을 취하면 NS 방정식을 얻을 수 있으며 아래와 같은 τ 에 관한 식을 얻을 수 있다.

$$\nu = c_s^2 \Delta t (\tau - 0.5) \quad (8)$$

여기서 ν 는 동점성계수, $c_s = c/\sqrt{3}$ 는 음속이다. 하지만 마이크로 유동에서는 연속체 가정이 깨지므로 식 (8)은 적용할 수가 없고, τ 는 Kn 수와 연관이 되어진다.[5] 입자가 Δt 시간안에 Δx 를 움직일때, 충돌 후 ω 시간 지난뒤 평형상태로의 이완거리가 λ (평균자유경로)가 된다는 가정으로부터

$$\frac{\lambda}{\omega} = \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad \text{or } \lambda = \tau \Delta x \quad (9)$$

을 얻을 수 있다. 마이크로채널에서 $Kn = \lambda/H$ 로 표현되므로 식 (9)로부터 τ 는 계산되어진다.

$$\tau = Kn(N_y - 1) \quad (10)$$

여기에서 N_y 는 채널높이의 노드수이다. 그리고 채널의 유동방향으로 갈수록 압력의 감소로 인하여 Kn 수는 증가하게 된다. 따라서 Kn 수는 아래와 같이 표현되어져 위치에 따라 τ 도 변하게 된다.

$$Kn = \frac{Kn_0}{P^*(x)} \quad (11)$$

여기에서 Kn_0 는 출구에서의 Kn 수 그리고 $P^*(\vec{x}) = P(\vec{x})/P_{out}$ 이다.

2.2 알고리즘 및 경계조건

2.2.1 알고리즘

- 초기화 단계 : 주어진 초기값 ρ, \vec{u} 을 이용하여 식 (6)으로부터 평형분포 f_i^{eq} 를 구한 후 $f_i = f_i^{eq}$ 로 놓는다.

- 재분포 단계 : 입구와 출구에서 조건에 따른 분포함수로 재분포시킨다. 유동영역으로부터의 외삽법을 이용한다.

- 충돌 단계 : 식 (4)의 우변항을 계산한다.

$$f_i^*(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)],$$

여기서 $f_i^*(\vec{x}, t)$ 는 충돌 후의 분포함수이다.

- 전파 단계 : 식 (4)의 좌변항을 계산한다.

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}\Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x}, t)$$

- 경계조건 적용 : 벽면에서의 경계조건으로 bounce-back 경계조건을 적용한다.

- 거시적 물리량 계산 : 식 (7)을 이용하여 모든 위치에서의 ρ, \vec{u}, P 를 구한다.

- 종료여부 판단단계 : 평형분포함수로 도달할 때까지 재분포단계로 돌아가 반복 수행한다. 평형분포함수로 도달하면 거시적 물리량을 계산하고 프로그램을 멈춘다.

2.2.2 경계조건

입구와 출구, 그리고 solid wall 에서의 분포함수는 먼저 유동영역으로부터 전파된 분포함수는 식 (4)로부터 계산되어지는 반면 경계외부에서 유동영역으로 전파되어오는 분포함수는 존재하지 않으므로 입구와 출구에서는 다음과 같이 미지의 분포함수를 결정할 수 있다.

$$\begin{cases} f_1(0, y, t) = f_1^{eq}(\rho, \vec{u}, 0, y, t) \\ f_2(0, y, t) = f_2^{eq}(\rho, \vec{u}, 0, y, t) \text{ at inlet} \\ f_8(0, y, t) = f_8^{eq}(\rho, \vec{u}, 0, y, t) \end{cases} \quad (12)$$

$$\begin{cases} f_4(L, y, t) = f_4^{eq}(\rho, \vec{u}, L, y, t) \\ f_5(L, y, t) = f_5^{eq}(\rho, \vec{u}, L, y, t) \text{ at outlet} \\ f_6(L, y, t) = f_6^{eq}(\rho, \vec{u}, L, y, t) \end{cases} \quad (13)$$

여기서 L은 마이크로채널의 길이이다. \vec{u} 는 유동영역으로부터 외삽으로 결정된다. 그리고 벽면에서의

slip 속도의 표현을 위해 다음과 같은 bounce-back 경계조건을 적용한다.

$$\begin{cases} f_2(x, 0, t) = f_6(x, 0, t) \\ f_3(x, 0, t) = f_7(x, 0, t) \\ f_4(x, 0, t) = f_8(x, 0, t) \end{cases} \text{ at lower wall} \quad (14)$$

$$\begin{cases} f_6(x, H, t) = f_2(x, H, t) \\ f_7(x, H, t) = f_3(x, H, t) \\ f_8(x, H, t) = f_4(x, H, t) \end{cases} \text{ at upper wall} \quad (15)$$

3. 결 과

3.1 단순 마이크로채널 유동

연속체 모델인 NS 방정식에 slip 경계조건을 적용하여 Arkilic 등은 단열되고 긴 마이크로채널의 slip 영역내의 유동을 이론적으로 구하였다.[5]

$$P^* = \frac{P(x)}{P_{out}} = -6\alpha Kn_0 + \{ (6\alpha Kn_0)^2 + (P_r^2 + 12\alpha Kn_0 P_r)(1 - \frac{x}{L}) + (1 + 12\alpha Kn_0) \frac{x}{L} \}^{\frac{1}{2}} \quad (16)$$

$$\frac{u(y)}{u} = \frac{(y^2/H^2) - (y/H) - Kn}{-(1/6) - Kn} \quad (17)$$

여기에서 σ 는 유동방향의 운동량 accommodation으로 보통 1로 놓는다. 그리고 P_r 은 출구압력에 대한 입구에서의 압력비이다. 나타나는 특징은 유동방향으로 압력(밀도) 감소로 인하여 채널방향으로 평균속도의 증가가 있으며 유동방향으로 벽에서의 no slip 속도도 증가한다는 것이다.[6]

LBM에서 Kn_0 가 0.5, 출구와 입구에서의 압력비가 2.5 일 경우, 유동방향으로 벽에서의 slip이 일어나고 속도가 증가함을 확인할 수 있었다.(Fig.2)

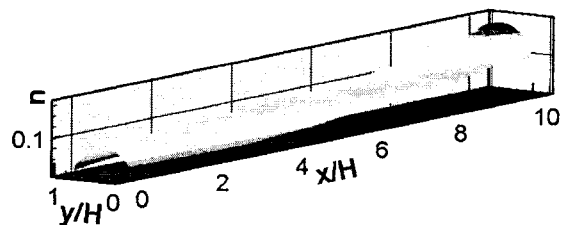


Fig.2 유동방향의 속도 ($Kn_0=0.5, P_r=2.5$)

그리고 압력분포가 비선형분포임을 알 수가 있으며 (Fig.3), 입구와 출구에서의 속도가 Arkilic et al. 의 결과와 차이가 보이는 것은 Arkilic et al. 의 결과가

연속체 가정을 사용한 slip 영역에서 유효한 값이기 때문에 생기는 결과이다. 또한 벽면에서의 slip 현상을 관찰할 수 있었다.(Fig.4)[7]

확대된 마이크로채널에서의 유동도 모사를 하였으며 Kn_0 수에 따라 다른 속도분포를 나타내었다. 특징은 Kn_0 가 커지면 와류가 나타나지 않는다는 점이다.(Fig.5, Fig.6)

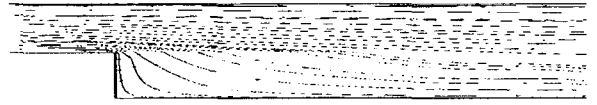


Fig.6 $Kn_0=0.5$ 유선

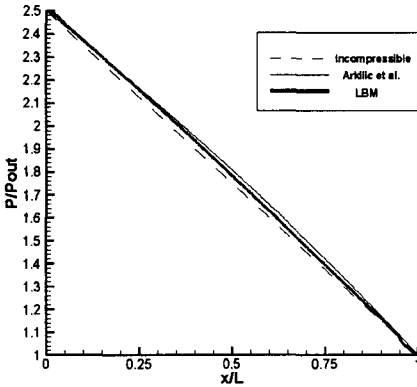


Fig.3 Center line 압력분포 ($Kn_0=0.5, P_r=2.5$)

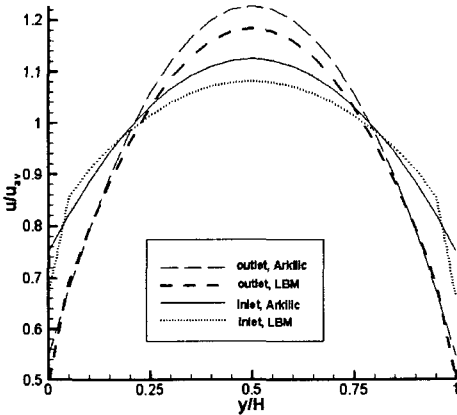


Fig.4 입구/출구 속도분포 ($Kn_0=0.5, P_r=2.5$)



Fig.5 $Kn_0=0.08$ 유선

4. 결 론

LBM을 이용하여 마이크로채널 내의 유동을 모사와 함께 Arkilic 등의 연속체 가정하의 해석해와 비교하였다. Kn 수로 표현되는 희박성으로 인하여 나타나는 압력의 비선형분포와 벽에서의 slip 을 모사하였다.

LBM을 이용한 유동모사에 있어서 경계조건은 매우 중요한 요소이며, 안정성 문제가 발생하기 쉬우므로 최근에는 implicit 방법이 연구되고 있다.

참고문헌

- [1] Schaaf, S. and Chambre, P., *Flow of Rarefied Gases*, Princeton Uni. Press, Princeton (1961)
- [2] Bhatnagar, P.L, et al, "A model for collision processes in gases.", *Phys. Rev.* Vol.94, (1954), p.511.
- [3] Wolf-Gladrow, D.A., *Lattice-gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction*, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1725, Springer, Berlin (2000)
- [4] He, X., and Luo, L.S., "A priori derivation of the lattice Boltzmann equation", *Physical Rev. E*, Vol.35, (1997), p.6333.
- [5] Lim, C.Y. et al., "Application of lattice Boltzmann method to simulate microchannel flows", *Physics of Fluids*, Vol.14, (2002), p.2299.
- [6] Arkilic, E.B. et al., "Gaseous slip flow in long microchannels", *J. of Microelectromechanical Systems*, Vol.6, (1997), p167.
- [7] Fan, Q, "DSMC simulations of gaseous flows in microchannels", *Proceedings of 5th ASME/JSME joint thermal Engineering Conference*, (1999)