

Lattice Boltzmann 방법을 이용한 압력구동 미세채널 내 비혼합 2상 유체 흐름의 압력강하에 대한 수치적 연구

정수인*, 김귀순**, 강범수***

Numerical Study on The Pressure Drop of Immiscible Two-Phase Flow in The Pressure Driven Micro Channel Using Lattice Boltzmann Method

Soojin Jeong*, Kuisoon Kim** and Beom-soo Kang***

Key Words : Two-phase Flow(2상유동), Lattice Boltzmann Method(격자볼츠만법), Contact Angle(접촉각), Pressure Drop(압력강하), Micro Channel(미세채널)

Abstract

Computer simulation of multiphase flows has grown dramatically in the last two decades. In this work, we have studied the flow characteristics of immiscible two fluids in a 2-D micro channel driven by pressure gradient using multi-phase lattice Boltzmann method suggested by Shan and Chen(1993) considering the fluid-surface interaction. we tried to examine the effects of parameters related to the two phase flow characteristics and pressure drop in the micro channel like contact angle and channel configuration by changing their value. The results of current study could show the lattice Boltzmann method can simulate the behaviors of two phase flow in the region of micro fluidics well.

1. 서론

2상유동 현상은 일상 생활에서부터 근래 중요하게 부각되고 있는 나노 기기 속의 유동현상까지 아주 보편적으로 일어나는 물리현상이다. 그 중에서도 점도, 밀도 등 물성치가 다른 서로 섞이지 않는 2상유체의 유동에는 각 상 사이에 분자간의 상호력이 작용하여 단상유동과는 다른 유동현상이 나타나는데 이 유동을 어떻게 정확히 기술하고 예측하는가 하는 것은 공학적 측면에서 매우 중요한 문제라 할 수 있다.

한편, 분자 운동학 이론의 통계적 방법에 기반을 둔 lattice Boltzmann 방법은 1988년 McNamara 등[1]에 의해 처음 제안된 이래 지난 10여년간 여러 분야의 유체역학 문제에 수치모델로서 또 다른 대안이 될 수 있음이 밝혀져 오고 있으며 여러 연구자들의 많은 관심을 받고 있다. LBM은 보존장 내에서의 일반적인 연속체 유체역학 방정식을 푸는 대신 미시적인 관점에서 유동입자들의 전개 분포함수 변화를 추적함으로써 거꾸로 거시적인 유동변수들의 해를 얻는 방식이다[1].

LBM은 특히 porous medium나 micro flow 등 기존의 연속체 유체역학 접근방식이 쉽게 적용되기 어려운 복합유동 문제에 성공적으로 응용되어 각광받고 있으며 다상유동 문제에서도 VOF나 level set 방법처럼 계면의 기하학적 위상을 특별히 모델링 할 필요 없이 손쉽게 계면의 장력을 적절히 모사할 수 있음이 여러 연구자들에 의해 알려졌다[2,3,4].

본 연구에서는 압력구동 배가 외부 구동력으로 주어진 경우에 대하여 lattice Boltzmann 방법을 이용하여 채널 벽과 일정한 접

촉각을 가지는 미세채널에서의 비혼합 2상유체 유동을 모사해 보고 접촉각이나 채널의 형상 등이 유동의 압력강하에 미치는 영향을 살펴보았다.

2. Lattice Boltzmann 방법

2.1 다상 유동 Lattice Boltzmann 모델

본 연구에서 사용된 다상 유동 LBM은 Shan-Chen이 제안한 pseudo-potential 모델[3,4]로 각각의 상에 대하여 다음의 lattice Boltzmann 방정식을 사용한다.

$$f_i^\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^\sigma(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau_\sigma} [f_i^\sigma(\mathbf{x}, t) - f_i^{\sigma,eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (1)$$

여기서 $f_i^\sigma(\mathbf{x}, t)$ 는 σ 상의 i 번째 입자의 밀도분포함수를 나타내고, τ_σ 는 완화시간이다. 연속체의 경우 이 완화시간은 점성계수와 관련이 있는데, Chapman-Enskog multi-scale expansion을 통해 Navier-Stokes 방정식으로 회복되는 과정에서 동점성계수는 $\nu_\sigma = c_s^2(\tau_\sigma - 0.5)$ 로 구할 수 있다.

평형분포함수는 맥스웰 분포를 이용하여 근사한 값을 사용하는데, 격자(lattice)의 종류에 따라 고유의 값이 알려져 있으며 본 연구에서는 2차원 LBM 해석에서 주로 많이 쓰이는 D2Q9 모델을 사용하였다. D2Q9 모델을 적용하는 경우에는 평형분포함수 $f_i^{\sigma,eq}(\mathbf{x}, t)$ 는 다음과 같이 계산될 수 있다.

$$f_i^{\sigma,eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho_\sigma \left[1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_\sigma^{eq}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_\sigma^{eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}_\sigma^{eq} \cdot \mathbf{u}_\sigma^{eq}}{2c_s^2} \right] \quad (2)$$

* 부산대학교 기계기술연구원, sooin@pusan.ac.kr

** 부산대학교 항공우주공학과, kuskim@pusan.ac.kr

*** 부산대학교 항공우주공학과, bskang@pusan.ac.kr

c_s 는 sound speed로 $c_s = c/\sqrt{3}$ 이고, w_i 는 가중함수로서 아래와 같이 주어진다.

$$w_i = \begin{cases} 4/9, & i = 0 \\ 1/9, & i = 1, 3, 5, 7 \\ 1/36, & i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (3)$$

Figure 1에서 보는 것처럼 D2Q9 격자는 하나의 정지입자, 4개의 직교입자 그리고 4개의 대각방향 입자로 구성되어있다. 각 입자의 속도벡터는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \hat{e}_0 &= (0, 0) \\ \hat{e}_i &= c \left(\cos\left(\frac{i-1}{4}\pi\right), \sin\left(\frac{i-1}{4}\pi\right) \right), \quad i = 1, 3, 5, 7 \\ \hat{e}_i &= \sqrt{2} c \left(\cos\left(\frac{i-1}{4}\pi\right), \sin\left(\frac{i-1}{4}\pi\right) \right), \quad i = 2, 4, 6, 8 \end{aligned} \quad (4)$$

여기서, 입자 속도 크기 $c = \Delta x / \Delta t$ 이며 Δx 와 Δt 는 각각 격자의 크기와 시간간격을 의미한다. 식(2)에서 ρ_σ 는 σ 번째 유체의 밀도를 말하고 그 값은 밀도분포함수가 계산되고나면 $\rho_\sigma = \sum_i f_i^\sigma$ 의 관계식으로부터 구할 수 있다.

거시변수 중에서 속도 \mathbf{u}_σ^{eq} 는 다음과 같이 주어진다.

$$\mathbf{u}_\sigma^{eq} = \mathbf{u}' + \frac{\tau_\sigma \mathbf{F}_\sigma}{\rho_\sigma} \quad (5)$$

위 식에서 \mathbf{u}' 은 모든 상의 합성 속도(composite velocity)로써 다음과 같이 정의된다.

$$\mathbf{u}' = \frac{\sum_\sigma \left(\sum_i \frac{f_i^\sigma \mathbf{e}_i}{\tau_\sigma} \right)}{\sum_\sigma \frac{\rho_\sigma}{\tau_\sigma}} \quad (6)$$

식(3)에서 \mathbf{F}_σ 는 σ 번째 상에 작용하는 힘을 나타내는데 유체-유체간의 상호작용력 $\mathbf{F}_{c,\sigma}$ 와 유체-고체벽면 사이의 흡착력 $\mathbf{F}_{ads,\sigma}$ 의 합으로, $\mathbf{F}_\sigma = \mathbf{F}_{c,\sigma} + \mathbf{F}_{ads,\sigma}$ 로 쓸 수 있다.

σ 번째 유체에 작용하는 유체 사이의 상호작용력은 다음과 같이 나타낼 수 있다[2].

$$\mathbf{F}_{c,\sigma}(\mathbf{x}, t) = - G_{\sigma\bar{\sigma}} \rho_\sigma(\mathbf{x}, t) \sum_i w_i \rho_{\bar{\sigma}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) \mathbf{e}_i \quad (7)$$

여기서 $\sigma, \bar{\sigma}$ 는 유체의 성분을 가리키고 $G_{\sigma,\bar{\sigma}}$ 는 유체 성분간의 상호작용력 크기를 좌우하는 값이다.

σ 번째 유체에 작용하는 표면력은 유체간의 상호작용력과 비

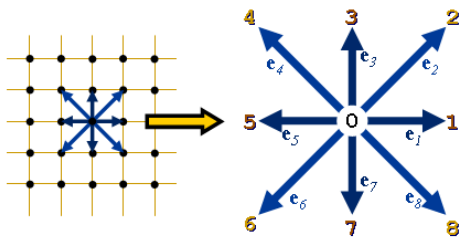


Fig. 1 D2Q9 lattice model : lattice notation & particle velocity vectors

슷한 형태의 다음과 같은 식으로 계산할 수 있다[2].

$$\mathbf{F}_{ads,\sigma}(\mathbf{x}, t) = - G_{ads,\sigma} \rho_\sigma(\mathbf{x}, t) \sum_i w_i \mathbf{s}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t) \mathbf{e}_i \quad (8)$$

식(8)에 사용된 $\mathbf{s}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t)$ 는 일종의 스위치 함수로써 유체-유체 상호작용력 계산 때와는 달리 이웃한 격자가 고체 벽면일 경우 1의 값을 가지고 유체일 경우에는 0의 값을 가진다. 각 유체성분과 벽면사이의 상호작용 강도는 $G_{ads,\sigma}$ 값으로 조절하며 일반적으로 non-wetting 유체일 때는 양의 값을 가지고 wetting 유체일 때는 음의 값을 가진다.

다상유동의 거시변수 중 상태방정식을 나타내는 압력은 다음과 식과 같이 나타낼 수 있다.

$$p = c_s^2 \sum_\sigma \rho_\sigma + \frac{c_s^2}{2} \sum_\sigma \sum_{\bar{\sigma}} G_{\sigma\bar{\sigma}} \rho_\sigma \rho_{\bar{\sigma}} \quad (9)$$

2.2 Laplace 법칙

표면장력 때문에 유체와 유체의 표면을 통과할 때 압력의 불연속이 일어난다. 이 차이가 바로 모세관 압력 P^c 라고 알려져 있고 다공질매질의 다상 유동의 유동행태를 연구하는 데 있어서 아주 기본적인 인자이다. 모세관 압력은 pore 내에서 유체-유체 표면을 고려함으로써 정량적으로 정의된다. 표면을 가로지르는 압력차는 반대편에 가해지는 힘의 균형을 고려하여 정의내릴 수 있다.

$$P^c = P_n - P_w = \frac{\sigma_{nw}}{r} \quad (10)$$

위 식은 모세관 압력을 나타내는 Laplace의 법칙으로 알려져 있고 여기서 r 는 곡률의 평균 반경이다. 이 Laplace 법칙을 사용하면 표면 장력의 값을 계산할 수 있다. Fig. 2는 프로그램 검증을 위해 2-D bubble에 대해 계산한 결과로써 모세관압력이 $1/R$ 에 선형적으로 변하고 있음을 잘 볼 수 있다.

2.3 계산 형상, 조건 및 경계조건

본 연구에서 사용된 계산형상과 경계조건은 Fig. 3과 같다. 곧은 채널형상이며 $L=300$ lu로 모든 계산경우에 대해 동일하다. 채널 높이 $H=30$ lu로 계산 영역은 300×30 lu² 이 기본으로 사용되었다. 두 종류의 유체 A, B는 모두 초기밀도가 2.0으로 Fig.3에서와 같이 초기조건으로 주어지고, 유체와 벽 표면간의 접촉각 조건이 어느 정도 만족 될 때까지는 입출구의 압력을 같도록

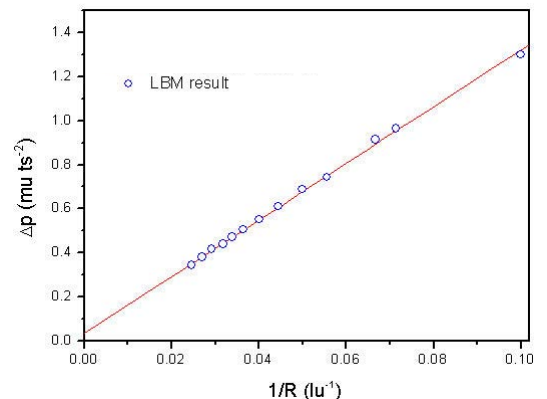


Fig. 2 Laplace law : capillary pressure vs. curvature(1/R)

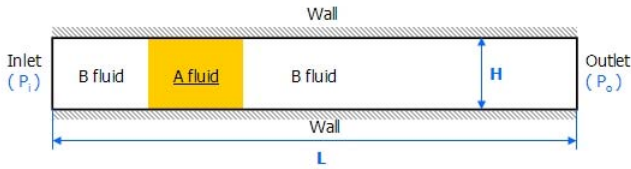


Fig. 3 Configuration of calculation model

두고 계산을 한다. 본 연구에서는 모든 경우에 대하여 2000ts 동안 초기상태가 되도록 계산을 하였다. 입구와 출구의 압력 경계 조건으로는 Zou와 He[9]가 제안한 2차의 경계조건을 사용하였으며 그 외 모든 벽면에는 non-slip 경계조건을 간단히 적용할 수 있는 bounce-back 방법[6]을 사용하였다. 본 연구에서는 τ_a, τ_b 는 모두 1로 주고 계산을 하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1 유체의 접촉각 모사

두 유체간의 표면장력과 각 유체와 벽 사이의 표면장력 값을 포함한 접촉각 계산을 위한 Young's equation은 다음과 같다.

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{sn} - \sigma_{sw}}{\sigma_{nw}} \quad (11)$$

위 식으로부터 Fig. 4에 표시된 접촉각 θ 를 계산해 낼 수 있다. Huang 등[7]은 Shan-Chen 모델을 이용한 lattice Boltzmann 모델에서 접촉각을 쉽게 계산해 낼 수 있도록 식(11)에 유체간의 표면장력 값에는 서로 다른 유체간의 흡착변수와 밀도인자 $G_{ab}[(\rho_1 - \rho_2)/2]$ 를, 유체-고체 경계면의 표면 장력 대신에 각각의 흡착변수 $G_{w,ads}$ 와 $G_{nw,ads}$ 를 사용하는 방식을 제안하였다.

$$\cos \theta = \frac{G_{w,ads} - G_{nw,ads}}{G_{ab} \frac{\rho_1 - \rho_2}{2}} \quad (12)$$

여기서 ρ_1 은 wetting phase의 주성분 밀도 값(main density)이고 ρ_2 는 옅은 농도성분의 밀도 값(dissolved density)이다.

본 연구에서도 고체표면과의 적절한 접촉각 모사를 위해 흡

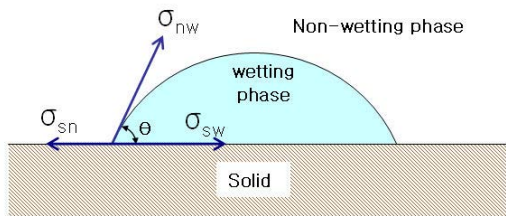


Fig. 4 Contact angle

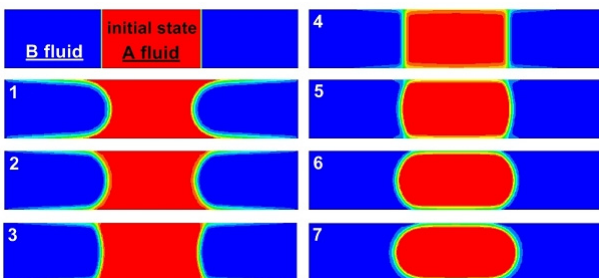


Fig. 5 Various contact angles for multicomponent fluids

TABLE 1. Adsorption parameters and contact angles for A fluid ($G_{ab} = 1.0$ and $G_{a,ads} = -G_{b,ads}$)

case	$G_{a,ads}$	contact angle calculated from eq.(12)	contact angle measured from Fig.5
1	-0.5	0°	-
2	-0.4	36.87°	31°
3	-0.2	66.42°	64°
4	0.0	90°	90°
5	0.2	113.58°	115°
6	0.4	143.13°	148°
7	0.5	180°	-

착변수 $G_{ab}, G_{w,ads}, G_{nw,ads}$ 를 조절하면서 사용하였다. Figure 5에 계산에 사용된 접촉각들의 초기 상태가 나와 있다. Table 1에는 A fluid의 흡착변수 $G_{a,ads}$ 변수 값에 따라 접촉각의 값이 어떻게 변하는지를 식(12)의 결과와 실제 측정결과를 비교하여 나타내었다.

3.2 채널의 접촉각 변화가 유동의 압력강하에 미치는 영향

Figure 6에는 $G_{a,ads}=0.4$ 인 경우에 대한 유동의 압력분포 결과를 나타내었다. 계산결과를 보면 모세관 압력이 계면근처에 작용을 하기 때문에 불연속인 값을 보이고 non-wetting phase 쪽 압력이 wetting phase보다 높게 나온 것을 볼 수 있다.

접촉각의 변화가 유동의 압력강하에 미치는 영향을 알아보기 위해 몇 개의 접촉각 조건에서 압력강하와 Re수 사이의 관계를 Fig. 7에 나타내어 보았다.

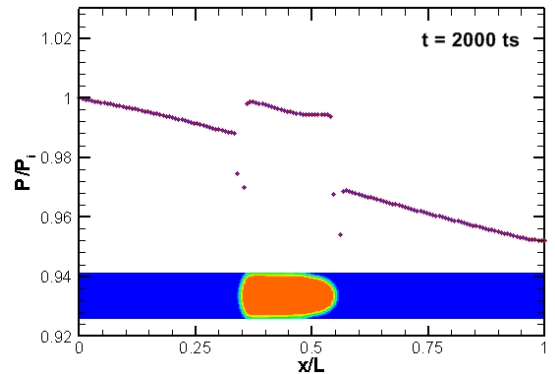


Fig. 6 Pressure distribution along the channel center line

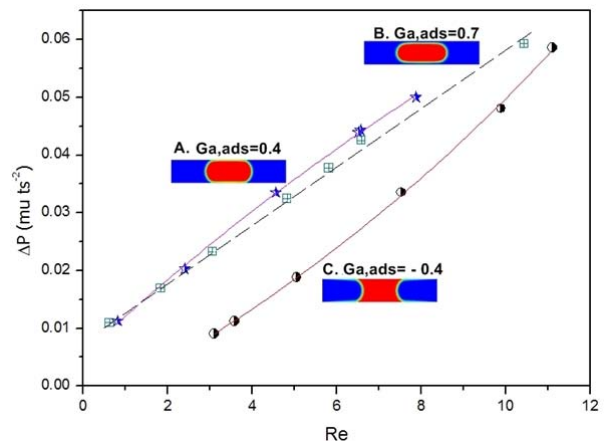


Fig. 7 Pressure gradient plot with Reynolds numbers

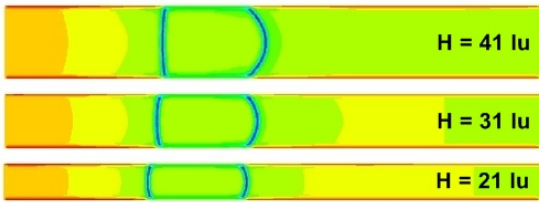


Fig. 8 Flow configuration with three different channel height:
(a) H = 40 lu (b) H = 30 lu (c) H = 20 lu

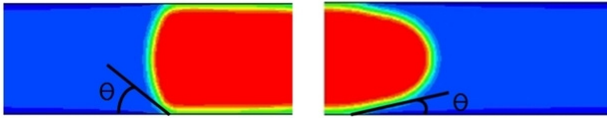


Fig. 9 Change of contact angles at advancing and receding

Figure 7에서 “A fluid”가 친수성($G_{a,ads}=-0.4$)인 C의 경우가 소수성인 A 경우보다 같은 Reynolds수에서 압력강하량이 더 작음을 볼 수 있다. 그리고, 소수성 유동 A, B중에서는 $G_{a,ads}=0.7$ 인 B의 경우가 0.4인 경우보다 압력강하가 작았다. 이는 C와 같이 plug flow 주위에 액막이 둘러싸고 있는 wet plug flow의 경우는, B와 같은 dry plug flow에서 추가적으로 일어나는 moving wetting line의 영향으로 인한 마찰에너지 소산이 없다는 이치영 등의 결과[8]와 같은 경향을 보이고 있다.

3.3 채널의 높이와 압력차가 유동의 압력강하에 미치는 영향

Figure 8은 같은 압력구배와 같은 접촉각을 가지도록 조건을 주고 채널의 높이만 달리하여 계산한 결과이다. 그림에서 보듯이 채널의 직경이 증가됨에 따라 접촉각이 줄어드는 것을 관찰 할 수 있는데 이는 식(10)에서 볼 수 있듯이 모세관압력이 줄어들기 때문이다. 그리고 Fig. 9에서 흡입시의 접촉각이 배수시의 접촉각보다 크다는 것 또한 볼 수 있다. 이 현상은 접촉각 이력(contact angle hysteresis)이라고 널리 알려진 현상으로, 이것이 미세채널의 2상유동에서 높은 압력손실을 가져온다는 연구 결과들이 있다[8].

Figure 10에서는 접촉각($G_{a,ads}=0.2$)인 경우 시간에 따라 각 유체 상간의 계면 형상과 압력선도를 나타낸 그림이다. 계산 초기에는 접촉각의 변화가 크다가 시간이 뒤로 흐를수록 무너지는 것을 알 수 있다.

Figure 11은 접촉각은 같도록 주고 구동압력을 서로 다르게 준 경우 시간 $t=3000ts$ 일 때의 결과를 비교한 것이다. 압력차를 크게 줄수록 계면의 반경이 작아지고 접촉각이 줄어드는 것을 볼 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 최근 2상유동 해석에 많이 사용되고 있는 Shan-Chen-type 다상유동 lattice Boltzmann 방법을 이용하여 압력 차로 구동되는 2차원 미세채널 유동해석을 수행하였다. 개발된 프로그램은 2-D Laplace' Law를 잘 모사하고 있으며 벽과 유체간의 흡착변수를 이용하여 원하는 접촉각을 대체로 잘 모사할 수 있었다. 서로 섞이지 않는 2상 유동의 양식을 살펴 볼 수 있었으며 유체의 젖음성이 압력강하에 미치는 영향과 채널의 높이에 의한 영향을 고찰하여 보았다. static contact angle이 유동의 전진 혹은 후퇴에 따라 일정한 변화를 보이는 접촉각 이력현상도 관찰하였으며 유동 내에 moving wetting line의 존재가 유동의 압력 강하에 많은 영향을 끼침을 알 수 있었다.

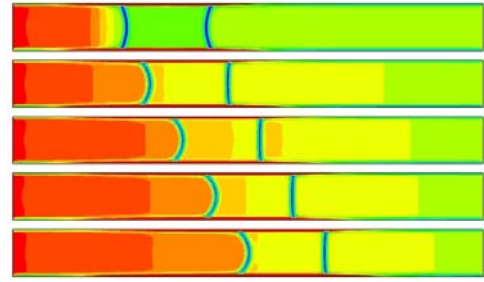


Fig. 10 Pressure contour and interface between components at different calculation times :
(a)100ts (b)1000ts (c)2000ts (d)3000ts (e)4000ts

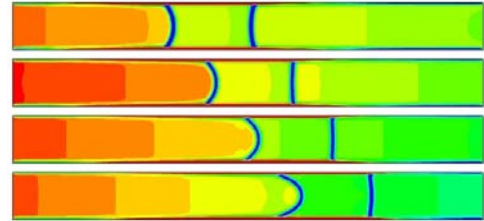


Fig. 11 Pressure contour and interface between components at various pressure gradients : (a) $dp=0.05\mu\text{ts}^{-1}$
(b) $dp=0.1\mu\text{ts}^{-1}$ (c) $dp=0.15\mu\text{ts}^{-1}$ (d) $dp=0.2\mu\text{ts}^{-1}$

후 기

본 논문은 한국과학재단 특정기초연구(R01-2003-000-10139-0) 지원으로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] G. McNamara and G. Zanetti, "Use of the Boltzmann equation to simulate lattice gas automata", Physical Review Letters, vol. 61 (1988), pp.2332-2335
- [2] N. S. Martys and H. D. Chen, "Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method", Physical Review E, vol. 53 (1996), pp.743-750
- [3] X. Shan and G. Doolen, "Multi-component lattice-Boltzmann model with interparticle interaction", J. Stat. Phys., vol. 81 (1995), pp.379-393
- [4] X. Shan and H. Chen, "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components", Physical Review E, vol.47 (1993), pp.1815-1819
- [5] Q. Zou and X. He, "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model", Phys. Fluids, vol.9 (1997), pp.1591-1598
- [6] D. P. Ziegler, "Boundary Conditions for lattice Boltzmann simulations", J. Stat. Physics, vol.71 (1993), pp.1171-1177
- [7] H. Huang, D. Thorne, Jr., M. Schaap and M. Sukop, "Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models", Physical Review E, vol.76 (2007), pp.????
- [8] 이치영, 이상용, "원형 미소 채널 내 계면장력이 Plug flow 압력강하에 미치는 영향에 관한 실험적 연구", 대한기계학회 2007년 추계학술대회논문집 (2007), pp.171-176