

< 논문 >

수정된 내부 에너지 비평형 1차 외삽 경계조건을 적용한 열 유동 격자 볼츠만 모델에 관한 수치적 연구

정해권* · 하만영† · 김래성** · 이현구** · 이재룡***

(2007년 2월 15일 접수, 2007년 6월 19일 심사완료)

Numerical Simulation of Thermal Lattice Boltzmann Model with a Modified Internal Energy Non-Equilibrium First-Order Extrapolation Boundary Condition

Hae Kwon Jeong, Man Yeong Ha, Lae Sung Kim, Hyun Goo Lee and Jae Ryong Lee

Key Words : Lattice Boltzmann Method(격자 볼츠만 법), Double Population Model(이중 모집단 모델), Natural Convection(자연 대류), Internal Energy Non-Equilibrium First-Order Extrapolation Thermal Boundary Condition(내부 에너지 비평형 1차 외삽 열 경계조건)

Abstract

In this paper, we adapt a modified internal energy non-equilibrium first-order extrapolation thermal boundary condition to the thermal lattice Boltzmann model (TLBM). This model is the double populations approach to simulate hydrodynamic and thermal fields. The bounce-back boundary condition which is a traditional boundary condition of lattice Boltzmann method has only a first order in numerical accuracy at the boundary and numerical instability. A non-equilibrium first-order extrapolation boundary condition has been verified to be of better numerical stability than the bounce-back boundary condition and this boundary condition is proved to be of second-order accuracy for the flat boundaries. The two-dimensional natural convection flow in a square cavity with $Pr=0.71$ and various Rayleigh numbers are simulated. The results are found to be in good agreement with those of previous studies.

1. 서론

최근 들어, 여러 연구자들은 격자 볼츠만 법(Lattice Boltzmann Method)을 이용하여 유체의 물리학적 현상을 모사하기 위해 다양한 모델링을 시도하고 있다. 거시적 연속체 방정식의 이산화에 기

반을 두고 Navier-Stokes 방정식의 해를 구하는 기존 수치해석 기법과는 달리, 격자 볼츠만 법은 미시적 모델과 메조 스케일의 운동방정식에 기초를 두고 있다.⁽¹⁾ 또한 격자 볼츠만 법은 기체 동역학적 이론을 바탕으로 하여, 단일 입자 분포의 변화를 통하여 유동 특성을 나타낸다. 그리고 격자 볼츠만 법은 기존의 수치해석 방법에 비해 안정적이고, 높은 정확도를 가지며, 계산 효율 측면에서 좋은 결과를 보여주고 있다.⁽²⁻⁵⁾ 그러나 격자 볼츠만 법은 실용적인 전산 유체역학 기법으로서 몇 가지 제약을 가지고 있다. 이 단점들 중 한가지는 열전달 문제에 대한 해를 만족스럽게 제안해 줄 수 있는 열 격자 볼츠만 모델(Thermal Lattice Boltzmann

† 책임저자, 회원, 부산대학교 기계공학부

E-mail : myha@pusan.ac.kr

TEL : (051)510-2440 FAX : (051)515-3101

* 부산대학교 대학원 기계공학과

** 부산대학교 기계공학부

*** POSCO 기술연구소

model)이 정립되어있지 않다는 것이다. 많은 연구자들이 이와 같은 단점을 해결하기 위하여 여러 가지의 열 격자 볼츠만 모델을 제안하였다.⁽⁶⁻¹¹⁾ 현재까지 제안된 열 격자 볼츠만 모델은 다중 속도 모델(multi-speed model), 수동적인 스칼라 모델(passive-scalar model), 이중 모집단 모델(double population model) 등 크게 세가지로 나눌 수 있다. 다중 속도 모델은 밀도 분포 함수만을 이용하여 등은 격자 볼츠만 모델(isothermal lattice Boltzmann model)을 직접적으로 확장한 방법이다.⁽⁶⁻⁸⁾ 이 모델은 수치적 불안정성 때문에 좁은 온도 범위 내의 온도 변화에 대해서만 수치해석이 가능하다. 수동적인 스칼라 모델은 다중 속도 모델에 비하여 수치적 안정성이 증대 되었으며, 점성 열 소산과 압축일이 무시될 수 있는 조건하에서 온도는 수동적인 스칼라처럼 변화하는 방정식을 만족시킨다는 사실을 이용하는 모델이다.^(9,10) 이에 반해 이중 모집단 모델은 연속적인 볼츠만 방정식을 시간과 물리적 해석 공간 그리고 운동량 공간에서 이산화한 등은 격자 볼츠만 법과 동일한 방식으로 내부 에너지 분포의 연속적인 변화에 대한 방정식의 이산화를 통해 열 격자 볼츠만 모델을 유도한 것이다. 이 모델은 온도변화를 구하기 위한 독립적인 분포 함수를 사용하기 때문에 수동적인 스칼라 모델과 유사하지만 수치적 안정성은 더욱 증가하였으며, 점성 열 소산 및 압축일을 포함한 모델이다.⁽¹¹⁾ 본 연구는 가장 발달된 형태인 이중 모집단 모델을 바탕으로 하고 있다.

격자 볼츠만 법에서 경계조건 선택은 매우 중요하다. 이미 많은 연구를 통해 여러 가지 경계조건이 제안되었으나, 해석하고자 하는 문제에 따라 주의 깊게 선택해야 한다. 경계조건은 격자 의존성과 마찬가지로 수치적 안정성 및 정확도에 영향을 미치는 인자로 작용하므로 등은 격자 볼츠만 모델의 경우, Lattice Gas Automata(LGA)로부터 벽면 경계조건은 점착조건(non-slip)을 만족하기 위해 bounce-back 경계조건을 사용하였다. bounce-back 경계조건은 다공성 물질처럼 복잡한 벽면을 표현하기 용이하며, 격자 볼츠만 법의 기초가 되는 기체 분자 운동론의 원리에도 부합한다. 그러나 격자 볼츠만 법은 2차 정확도를 가지고 있는데 반해 bounce-back 경계조건은 1차 정확도를 가지고 있기 때문에 격자 볼츠만 법의 수치 정확도가 낮아지는 원인이 된다.⁽¹²⁻¹⁴⁾ 이와 같은 bounce-back 경계조건이 가지는 문제점을 해결하고 격자 볼츠만

법의 수치 정확도를 향상시키기 위해 여러 가지 경계조건이 제안되었다. Ziegler⁽¹³⁾는 벽면을 격자와 격자 사이에 위치시킴으로써 2차 정확도를 가지는 bounce-back 경계조건을 제안하였으며, Inamuro et al.⁽¹⁵⁾는 벽 경계조건 계산시 미지수로 남은 입자 분포 함수를 counter slip 속도를 가지는 평형 분포 함수로 가정함으로써 bounce-back 경계조건을 개선하였다. Zou & He⁽¹⁶⁾는 bounce-back 경계조건에 비평형 분포 함수를 추가함으로써 정확도를 2차로 증가시키고 동시에 수치적 안정성을 향상시켰다. Chen et al.⁽¹⁷⁾은 2차 외삽법을 통해 벽면에서의 점착 조건을 만족하는 경계조건을 제안하였으며, Guo et al.⁽¹⁸⁾은 Chen et al.⁽¹⁷⁾이 제안한 2차 외삽 경계조건의 수치적 안정성을 향상시킨 비평형 1차 외삽 경계조건(non-equilibrium first-order extrapolation boundary condition)을 제안하였다. 열 유동을 해석하기 위하여 Zou & He⁽¹⁶⁾는 비평형 분포 함수가 추가된 thermal bounce-back 경계조건을 제안하였다. D’Orazio et al.⁽¹⁹⁾은 Inamuro et al.⁽¹⁵⁾이 제안한 counter slip 기법을 이용하여, 열 격자 볼츠만 모델에 적합한 경계조건(counter slip thermal boundary condition)을 제안하였다. 이 경계조건은 높은 정확도와 수치적 안정성을 가지고 있으나, 복잡한 형상에 대한 적용 가능성에 대한 의문이 제기되고 있다.⁽²⁰⁾ Tang et al.⁽²⁰⁾은 Guo et al.⁽¹⁸⁾의 비평형 1차 외삽 경계조건을 이용하여 열 유동 문제를 해결 가능하게 한 내부 에너지 비평형 1차 외삽 경계조건(internal energy non-equilibrium first-order extrapolation boundary condition)을 제안하였다. Tang et al.⁽²⁰⁾이 제안한 경계조건은 등은 유동에 적용되는 비평형 1차 외삽 경계조건과 마찬가지로 2차의 정확도를 가지고 있으며, 복잡한 형상에 적용이 쉽고, 수치적 안정성도 bounce-back에 비해 크게 향상시켰다.⁽²⁰⁾

본 연구에서는 Guo et al.⁽¹⁸⁾와 Tang et al.⁽²⁰⁾이 제안한 비평형 1차 외삽 경계조건을 사용하여 자연 대류 문제에 접근해보고자 한다. 현재 Tang et al.⁽²⁰⁾이 제안한 비평형 1차 외삽 열 경계조건을 자연 대류 문제에 적용한 예를 찾기 힘들며, 이와 같은 열 유동 문제에 접근하기 용이하도록 경계조건을 수정 및 보완하고자 한다.

2. 이론적 연구

2.1 열 격자 볼츠만 법

격자 볼츠만 법의 지배방정식은 식 (1)과 같은 볼츠

만 방정식(Boltzmann equation)에 기원을 두고 있으며, 기존의 LGA의 지배 방정식을 실수 범위까지 확장함으로써 적용 범위 및 수치적 안정성을 증가시켰다.

$$\partial_t f + (\mathbf{c} \cdot \nabla) f = \Omega, \quad (1)$$

여기서, f_i , \mathbf{x} , c , \mathbf{c}_i , Ω_i 는 각각 밀도 분포 함수(density distribution function), 위치 벡터(position vector), 입자 속도의 크기(lattice speed), 입자 속도 벡터(lattice velocity vector) 그리고 충돌 연산자(collision operator)를 나타낸다. 하첨자 i 는 입자의 방향을 의미하며, 격자 모델(lattice model)에 따라 다르다. 충돌 연산자는 입자의 충돌에 의해 입자 분포가 변화하는 비율을 나타낸다. 이는 매우 복잡한 수학적 메커니즘을 포함하고 있으나, Bhatnagar, Gross and Krook(BGK)이 단일 완화 시간(single relaxation time)을 제안함으로써 다음과 같은 간단한 수식으로 나타낼 수 있다.(single relaxation time BGK 모델)

$$\partial_t f_i + (\mathbf{c} \cdot \nabla) f_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} + \mathbf{F} \quad (2)$$

여기서 τ , f_i^{eq} 는 각각 단일 완화 시간, 평형 밀도 분포 함수(equilibrium density distribution function)를 나타낸다. \mathbf{F} 는 체적력(body force)을 나타낸다. 시간 및 속도 공간(운동량 공간)으로 이산화된 볼츠만 방정식이 Navier-Stokes 방정식 수준에서 질량 및 운동량 보존을 만족한다면, 최종 이산화 단계는 등은 격자 볼츠만 방정식이 된다. 이와 같은 단계를 볼츠만 에너지 방정식에서도 동일하게 적용할 수 있다.⁽¹¹⁾ 하지만 단일 완화 시간 BGK 모델의 볼츠만 방정식은 만족스럽지 못한 특징이 있다. 즉 f_i 의 2차 모멘트로부터 얻어진 에너지 방정식은 프란틀(Pr) 수를 고정시킬 뿐만 아니라, 열전도도는 동점성 계수(ν)에 의존한다. 이와 같은 문제를 해결하기 위하여 He et al.⁽¹¹⁾는 일반적인 Pr 수를 가지는 유체에도 적용시킬 수 있는 보편적인 수치해법을 제시하였다. 온도나 내부 에너지를 구하기 위하여 식 (3)과 같은 새로운 변수인 내부에너지 밀도 분포 함수를 도입하였다.

g_i , g_i^{eq} 는 각각 내부 에너지 밀도 분포 함수(internal energy density function)와 내부 에너지 평형 밀도 분포 함수(internal energy equilibrium density function)이다.

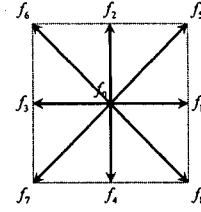


Fig. 1 D2Q9 model

$$g_i = \frac{(\mathbf{c}_i - \mathbf{u})^2}{2} f_i \quad (3)$$

$$\bar{f}_i = f_i + \frac{0.5\Delta t}{\tau_f} (f_i - f_i^{eq}) - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F} \quad (4)$$

$$\bar{g}_i = g_i + \frac{0.5\Delta t}{\tau_g} (g_i - g_i^{eq}) + \frac{\Delta t}{2} f_i Z_i \quad (5)$$

식 (2)를 시간과 공간에 대하여 적분하는 과정에서 식 (4)을 도입함으로써 등은 모델에서의 동점성 계수와 일치하는 식 (6)을 유도하였다. 열 모델의 전개과정에서도 식 (5)를 도입하여 식 (7)을 유도하였다.

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) \quad (6)$$

$$= -w_f [\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + w_f \tau_f \mathbf{F}$$

$$\bar{g}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - \bar{g}_i(\mathbf{x}, t) \quad (7)$$

$$= -w_g [\bar{g}_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] - w_g \tau_g f_i Z_i$$

$w_{f,g} = \Delta t / (\tau_{f,g} + 0.5\Delta t)$ 이다. τ_f , τ_g 는 각각 운동량 완화 시간(momentum relaxation time), 내부 에너지 완화 시간(internal energy relaxation time)이다. 시간 간격 및 격자 간격은 $\Delta t = \Delta x = 1$ 로 정의한다.

Z_i 는 점성 열 소산(viscous heat dissipation)을 의미하며 Z_i 는 다음과 같이 이산화할 수 있다.⁽¹⁴⁾

$$Z_i = (\mathbf{c}_i - \mathbf{u}) \cdot [\partial \mathbf{u} / \partial t + (\mathbf{c}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}] = \frac{(\mathbf{c}_i - \mathbf{u}) \cdot [\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)]}{\Delta t} \quad (8)$$

Fig. 1은 본 연구에서 사용된 비압축성 모델인 D2Q9 모델을 나타낸 것이다. 평형 밀도 분포 함수 및 내부 에너지 밀도 분포 함수는 2차원인 경우는 3차 Gauss-Hermite 구적법을 적용하면 9개의 속도를 가지는 격자 볼츠만 모델을 유도할 수 있다. 식 (9)는 평형 밀도 분포 함수이며, 이에 상응

하는 내부 에너지 평형 밀도 분포 함수는 식 (10) 과 같다. 입자 방향에 따른 속도 성분은 식 (11)로 나타낼 수 있다.

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

$$g_0^{eq} = -\omega_0 \rho e \left(\frac{3\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c^2} \right)$$

$$g_i^{eq} = \omega_i \rho e \left[1.5 + 1.5 \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c^2} + 4.5 \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} - 1.5 \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{c^2} \right]$$

$$i = 1, 2, 3, 4$$

$$g_i^{eq} = \omega_i \rho e \left[3 + 6 \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c^2} + 4.5 \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} - 1.5 \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{c^2} \right]$$

$$i = 5, 6, 7, 8$$

(10)

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} 0 & i = 0 \\ (\cos[(i-1)\pi/2], \sin[(i-1)\pi/2])c & i = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2}(\cos[(i-5)\pi/2 + \pi/4], \sin[(i-5)\pi/2 + \pi/4])c & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (11)$$

ω_i 는 가중 계수(weighting coefficient)이며, 방향에 따라 $i=0$ 의 경우 $\omega_0 = 4/9$, $i=1,2,3,4$ 의 경우 $\omega_i = 1/9$, $i=5,6,7,8$ 의 경우 $\omega_i = 1/36$ 을 나타낸다. e 는 내부 에너지(internal energy)이며, $\rho e = \rho RT_0$ 를 만족한다. 열 모델에서 입자 속도의 크기는 $c = \sqrt{3RT_0}$ 이며, T_0 는 계산 영역 내부 평균 온도, R 은 기체상수이다. 거시적인 밀도(ρ), 속도(\mathbf{u}) 및 내부 에너지(e)는 식 (12)의 구속 조건(constraints)에 의해 결정된다.

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i \bar{f}_i \\ \rho \mathbf{u} &= \sum_i \bar{f}_i \mathbf{c}_i \end{aligned} \quad (12)$$

$$\rho e = \sum_i \bar{g}_i - \frac{\Delta t}{2} \sum_i f_i Z_i$$

열 유속(heat flux)은 식 (13)으로 나타낼 수 있으며, 동점성 계수(kinematic viscosity) 및 열확산 계수(thermal diffusivity)는 식 (14)와 같이 나타낼 수 있다.

$$\mathbf{q} = \left(\sum_i \mathbf{c}_i \bar{g}_i - \rho e \mathbf{u} - \frac{\Delta t}{2} \sum_i \mathbf{c}_i f_i Z_i \right) \frac{\tau_g}{\tau_g + 0.5\Delta t} \quad (13)$$

$$\nu = \tau_f RT_0, \quad \alpha = 2\tau_g RT_0 \quad (14)$$

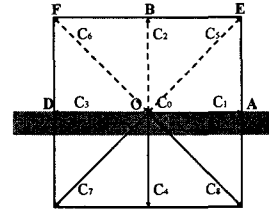


Fig. 2 Schematic plot of particle velocity at wall boundary

격자 볼츠만 법에서 사용된 모든 변수는 격자 간격(Δx)과 기준 속도($c = \sqrt{3RT_0}$)로 무차원화 되어 있다.⁽²¹⁾

2.2 비평형 외압 경계조건

식 (6)으로부터 두 가지 계산 단계를 도출할 수 있다. 식 (6)의 우변은 충돌항(collision)으로써 입자의 충돌에 의한 입자 분포의 변화에 관한 항이며, 좌변은 병진항(streaming)으로써 입자의 충돌 이후 인근 격자로 입자의 진행을 의미한다. 격자 볼츠만 법은 식 (15)의 입자의 충돌과 병진에 의한 결과로 유동 특성을 나타낸다. 열 특성을 나타내기 위해서는 식 (7)을 식 (16)과 같은 방식으로 전개하여 계산한다.

$$\text{collision: } \bar{f}_i^+(\mathbf{x}, t) = (1 - \omega_f) \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) + \omega_f \bar{f}_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$$

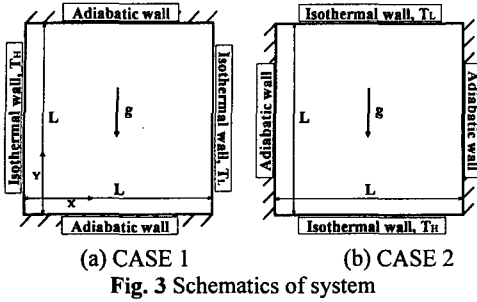
$$\text{streaming: } \bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \bar{f}_i^+(\mathbf{x}, t) \quad (15)$$

$$\text{collision: } \bar{g}_i^+(\mathbf{x}, t) = (1 - \omega_g) \bar{g}_i(\mathbf{x}, t) + \omega_g \bar{g}_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$$

$$\text{streaming: } \bar{g}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \bar{g}_i^+(\mathbf{x}, t) \quad (16)$$

Guo et al.⁽¹⁸⁾가 제안한 비평형 1차 외압 경계조건과 Tang et al.⁽²⁰⁾이 제안한 내부 에너지 비평형 1차 외압 경계조건은 각각 식 (15)와 식 (16)의 충돌 과정과 유사한 형태를 가지며 각각 식 (17), (18)과 같다. \bar{f}_i^+ , \bar{g}_i^+ 는 충돌 이후의 밀도 분포 함수, 내부 에너지 분포 함수를 나타낸다. 식 (9)와 식 (10)에 나타났듯이, 식 (17)에서 사용된 평형 밀도 분포 함수(f_i^{eq})는 밀도(ρ)와 속도(\mathbf{u})의 함수이며, 식 (18) ~ 식 (20)에서 사용된 내부 에너지 평형 밀도 분포 함수(g_i^{eq})는 밀도(ρ), 속도(\mathbf{u}), 그리고 온도(T)의 함수이다.

$$\begin{aligned} \bar{f}_i^+(O, t) &= f_i^{eq}(\rho(B), \mathbf{u}(O), t) \\ &+ (1 - \omega_f)[f_i(B, t) - f_i^{eq}(B, t)] \end{aligned} \quad (17)$$



(a) CASE 1 (b) CASE 2
Fig. 3 Schematics of system

$$\begin{aligned} \bar{g}_i^+(O, t) = & g_i^{eq}(\rho(B), \mathbf{u}(O), T(O), t) \\ & + (1 - \omega_g)[g_i(B, t) - g_i^{eq}(B, t)] \\ & - \omega_g \tau_g f(O)_i Z_i(O) \end{aligned} \quad (18)$$

Fig. 2는 벽 인근에서 입자의 방향 및 분포를 나타낸다. DOA는 점착 조건을 만족하는 벽을 나타내며, c_i 는 입자의 방향을 의미한다. bounce-back 경계조건은 F, B, E에서의 f_i 값을 모두 필요로 하지만, 본 연구에 사용된 비평형 1차 외삽법은 오직 B점에서의 f_i 값을 필요로 한다. 식 (17)에 나타나있듯이 벽에서의 $\rho(O)$ 값이 알려져 있지 않기 때문에 인접한 격자의 밀도를 벽에서의 밀도로 대체하기 위하여 $\rho(B)$ 를 사용하였다.

Tang et al.⁽²⁰⁾은 열 경계조건에 대해서도 등은 경계조건과 같이 인접한 격자의 밀도를 벽에서 가지는 밀도로 대체하였다. 그러나 실제로 벽에서 밀도인 $\rho(O)$ 는 f_i 를 계산하는 과정에서 결정되기 때문에 g_i 를 계산하는 과정에서 $\rho(O)$ 는 이미 알려진 값이다. Tang et al.⁽²⁰⁾이 사용한 내부 에너지 평형 분포 함수(g^{eq})는 식 (19)와 같이 수정될 수 있다. 따라서 본 연구에서는 식 (18)을 식 (20)과 같이 수정하여 계산을 실시하였다.

$$g_i^{eq}(O, t) = g_i^{eq}(\rho(O), \mathbf{u}(O), T(O), t) \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \bar{g}_i^+(O, t) = & g_i^{eq}(\rho(O), \mathbf{u}(O), T(O), t) \\ & + (1 - \omega_g)[g_i(B, t) - g_i^{eq}(B, t)] \\ & - \omega_g \tau_g f(O)_i Z_i(O) \end{aligned} \quad (20)$$

3. 결과 및 고찰

3.1 문제의 정의

열 격자 볼츠만 모델 또는 열 경계조건을 제안한 많은 연구자들은 경계조건의 타당성을 검증하기 위하여 자연대류 문제에 먼저 접근했다. He et al.⁽¹¹⁾는 이중 모집단 모델을 제안하면서 thermal bounce-back

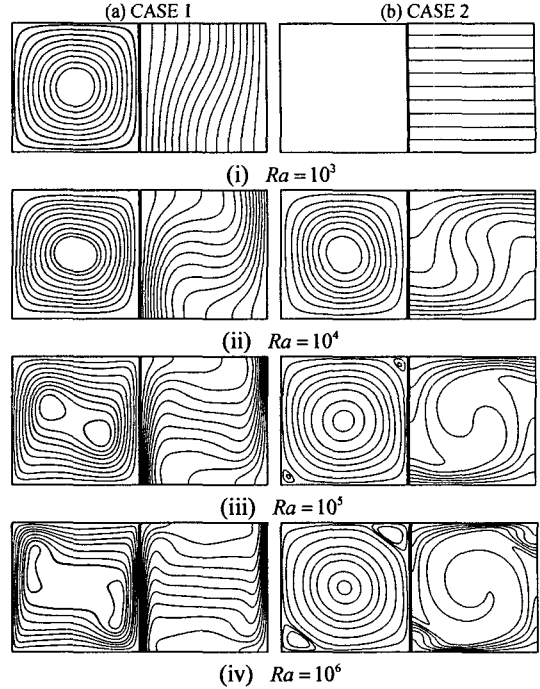


Fig. 4 Streamlines and Isotherms for different Rayleigh numbers

경계조건을 이용하여 자연대류 문제를 해석함으로써 모델을 검증하였다. Guo et al.⁽²²⁾는 수동적인 스칼라 방정식을 이용하여 온도 분포 함수를 정의하고 자신이 제안한 비평형 1차 외삽 등은 경계조건에 적용하였으며, D'Orazio et al.⁽²¹⁾은 counter slip thermal 경계 조건을 이용하여 자연 대류 문제에 접근하였다. 이전 연구자들과 마찬가지로 방식은 본 연구에서는 수정된 내부 에너지 비평형 1차 외삽법을 자연 대류 문제에 적용하였다.

Guo et al.⁽¹⁸⁾와 Tang et al.⁽²⁰⁾에 의해 제안된 경계조건을 적용하기 위하여 정사각 캐비티 형상의 밀폐계 내부에서의 수직/수평 벽의 온도 구배가 존재하는 자연 대류 현상에 대해 계산을 수행하였다. Fig. 3에서 CASE 1은 수직 벽의 온도 구배가 존재하는 경우이며, CASE 2는 수평 벽의 온도 구배가 존재하는 경우로써 순수 Rayleigh-Benard 자연 대류와 같다. 식 (21)과 같이 정의되는 Ra 수는 $10^3 \sim 10^6$ 의 범위 내에서 변화하며, Pr 수는 0.71로 고정하였다. 여기서 $\Delta T = T_H - T_L$ 이다. 계산 영역 및 경계 조건은 Fig. 3에 나타내었다. 두 개의 평행 평판 사이의 높이와 폭은 L 이다.

$$Ra = \frac{g\beta\Delta TL^3}{\nu\alpha} = \frac{(\sqrt{g\beta\Delta TL})^2 L^2}{\nu\alpha}, \quad Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (21)$$

CASE 1의 좌/우 수직 벽, CASE 2의 하/상 수평 벽의 온도는 각각 고온 및 저온으로 고정하였다. 각 CASE의 단열벽(adiabatic wall) 경계조건의 이산화는 2차 정확도를 가지는 전진/후진 차분법을 적용하였다. 등온 유체 경계조건은 식 (17)을 적용하였다. D'Orazio et al.⁽²¹⁾는 고온 벽의 온도를 $T_H = 20$, 저온 벽은 $T_L = 1$ 로 설정하였으며, CASE 1에서 $Ra = 10^3, 10^4$ 의 경우 129×129 , $Ra = 10^5, 10^6$ 의 경우 205×205 의 격자 수를 사용하였다. 본 연구에서도 같은 조건으로 CASE 1과 CASE 2의 격자 수와 벽 온도를 결정하였으며, 격자 수에 의해 L 이 결정되기 때문에, $Ra = 10^3, 10^4$ 일 때 $L = 128$ 이며, $Ra = 10^5, 10^6$ 의 경우 $L = 204$ 이다. 유체의 밀도 변화를 고려하기 위해 식 (22)의 Boussinesq 가정을 사용하여 체적력(\mathbf{F})을 정의하였다.

$$\mathbf{F} = \frac{\mathbf{G} \cdot (\mathbf{c}_i - \mathbf{u})}{RT} f_i^{eq}, \quad \rho \mathbf{G} = \rho \beta g (T - T_0) \mathbf{j} \quad (22)$$

\mathbf{G} 는 단위 질량당 작용하는 외력(external force acting per unit mass)이며, β 는 열팽창 계수(thermal expansion coefficient)이다. g 는 중력을 의미하고, \mathbf{j} 는 중력의 반대 방향을 가리킨다. 점성 열 소산을 무시하고, 자연 대류를 해석하기 위한 충돌항과 구속 조건은 각각 식 (23), 식 (24)로 표현된다.⁽¹¹⁾

$$\bar{f}_i^+(x, t) = (1 - \omega_f) \bar{f}_i^-(x, t) + \omega_f \bar{f}_i^{eq}(x, t) + \omega_f \tau_f \mathbf{F} \quad (23)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i \bar{f}_i \mathbf{c}_i + \frac{\rho \mathbf{G} \Delta t}{2} \quad (24)$$

3.2 특성 속도

식 (21)에서 Ra 수를 정의할 때 중력(g)과 체적 팽창 계수(β)는 미지수로 남아있다. He et al.⁽¹¹⁾와 D'Orazio et al.⁽²¹⁾는 $v^* = \sqrt{\beta g_0 \Delta T L}$ 를 특성 속도(Characteristic velocity)로 정의하고 특성 속도를 이용하여 Ra 수를 결정하였다. 특성 속도는 체적력에 포함되어 충돌 단계뿐만 아니라 구속 조건에서 중력의 영향을 조절하는 역할을 한다. 또한 특성 속도는 격자 수 및 형상 그리고 Ra 수와 같이 중력을 포함하는 무차원수의 변화에 따라 다른 값을 가지게 된다. 그러므로 특성 속도는 문제의 정의에 따라 주의 깊게 결정해야 한다. 본 연구에서 사용된 열확산 계수와 특성 속도 그리고 Ra 수, Pr 수의 관계는 식 (25)와 같으며,

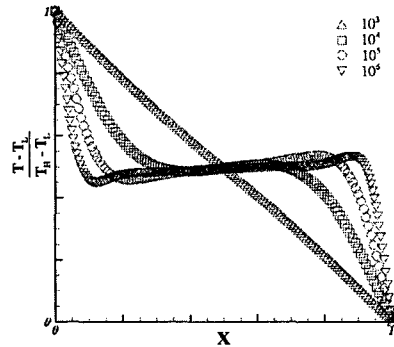


Fig. 5 Normalized temperature profiles at $y/L=0.5$ In CASE 1 $\triangle: 10^3, \square: 10^4, \circ: 10^5, \nabla: 10^6$

격자 볼츠만 법의 유동 및 열 특성을 나타내는 충돌 완화 시간 τ_f 와 τ_g 는 식 (26)으로 표현된다.

$$\frac{\alpha}{L} = \frac{\sqrt{\beta g \Delta T L}}{\sqrt{Ra Pr}} \quad (25)$$

$$\tau_f = \frac{V^* L}{RT_0} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}}, \quad \tau_g = \frac{V^* L}{2RT_0 \sqrt{Ra Pr}} \quad (26)$$

$$V_d = \frac{v}{Pr L} = \begin{cases} 0.3667 \times 10^{-3}, & Ra = 10^3 \text{ \& } 10^4 \\ 0.2301 \times 10^{-3}, & Ra = 10^5 \text{ \& } 10^6 \end{cases} \quad (27)$$

D'Orazio et al.⁽²¹⁾는 CASE 1과 동일한 조건에서 특성속도를 결정하기 위해, 확산속도 V_d 를 이용하였다. 완화 시간을 $\tau_f = 0.1$, $\tau_g = 0.0704$ 와 같이 고정된 후 Ra 수에 따른 최적 격자 수와 그에 따른 특성 속도를 결정하였다. 본 연구에서 사용한 확산 속도는 식 (27)로 정의된다. 식 (27)의 확산 속도를 이용하여 동점성 계수를 구한 후 식 (25), 식 (26)에 대입하여 계산을 실시한다.

CASE 2의 경우, CASE 1과 동일한 확산 속도를 적용하였으며, CASE 2를 격자 볼츠만 법으로 계산하고자 하는 경우, CASE 1에 비해 특성속도는 비교적 쉽게 결정된다. 모멘텀 및 내부 에너지 완화시간은 CASE 1을 계산할 때와 같은 값을 사용하였다.

3.3 해석 결과

Fig. 4는 $Ra = 10^3 \sim 10^6$ 의 범위에서 CASE 1과 CASE 2의 유선과 등온선 분포를 나타낸다. CASE 1의 경우, Fig. 4(a)에서 보여준 것처럼 Ra 수가 증가함에 따라 유동은 주로 서로 다른 온도를 가지는 벽 인근에서 발생하며, 캐비티의 중심 부분에

Table 1 The comparison of the present calculation for surface-averaged Nusselt number at the hot wall with the previous results in CASE 1 and CASE 2

<i>Ra</i>	Surface averaged Nusselt number at the hot wall (\overline{Nu})						
	Present	Ref. (21)	Ref. (24)	Ref. (25)	Ref. (26)	Difference(%)	
CASE 1	10^3	1.118	1.117	1.118	1.118	-	0
	10^4	2.249	2.235	2.246	2.243	-	+0.13
	10^5	4.553	4.504	4.525	4.519	-	+0.61
	10^6	8.767	8.767	8.821	8.800	-	-0.61
CASE 2	10^3	1.000	-	1.00	-	-	0
	10^4	2.170	-	2.16	-	2.195	+0.46
	10^5	3.925	-	3.91	-	-	+0.38
	10^6	6.329	-	6.30	-	-	+0.46

서는 유동이 발생하지 않는다. CASE 2의 경우, Fig. 4(b)에서 보여준 것처럼 $Ra = 10^3$ 일 때 캐비티 내부의 열전달은 전도에 의해 지배되며 등온선이 수평 방향으로 평행하고 수직방향으로 일정한 구배를 가지게 된다. Ra 수가 $Ra_c = 1708$ 보다 커지게 되면 부력에 의한 유동이 발생하게 된다.⁽²³⁾ Ra 수가 증가함에 따라 유동의 가속으로 인해 상하부 벽면에서의 온도 경계층은 얇아지며, 온도 구배는 증가한다.⁽²³⁾ Fig. 5는 CASE 1에서 캐비티 중심에서의 수평 방향에 따른 무차원 온도를 나타내며, 벽 근처에서의 온도 구배를 잘 묘사하고 있다. Fig. 5는 CASE 1에서 캐비티 중심에서의 수평 방향 ($y/L = 0.5$)에 따른 무차원 온도를 나타내며, 벽 근처에서의 온도 구배를 잘 묘사하고 있다.

Table 1은 본 연구 결과를 타 연구자들의 결과와 비교한 것이다. 고온 벽에서 구한 평균 \overline{Nu} 값은 타 연구자들의 결과를 잘 나타내고 있다. Lee & Ha⁽²⁴⁾의 수치적 정확도가 높은 다 영역 스펙트럴 방법(multi-domain spectral method)의 결과와 비교하였을 때, CASE 1의 최대 오차는 0.61%이며, CASE 2의 경우 0.46%이다. 고온 벽에서의 국소 Nu 수(Nu)와 평균 Nu 수(\overline{Nu})는 식 (28)과 같이 정의되었다.

$$Nu = -\frac{L}{\Delta T} \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{Hot\ wall}, \quad \overline{Nu} = \frac{1}{L} \int_0^L Nu ds \quad (28)$$

4. 결론

본 연구에서는 수정된 비평형 1차 외삽 열 경계 조건을 자연 대류 문제에 적용하기 위한 연구를 수행하였다.

(1) 벽에서 고정된 온도 조건뿐만 아니라 단열 조건까지 일반적인 차분법을 이용한 온도 및 열 유속을 경계조건에 직접 입력하는 방법을 사용함으로써 컴퓨터 코드의 간결성을 확보하였다. 격자 볼츠만 법의 병렬 계산시 단순화 된 경계조건으로인하여 연산 시간의 단축 및 수치적 안정성을 증가시킬 수 있으며, 2차 정확도의 확보를 통한 격자볼츠만 법의 고유 정확도를 유지할 수 있다.⁽²⁰⁾

(2) 비평형 1차 외삽 열 경계조건은 충돌 계산 루틴과 유사한 형태를 가진다. 경계를 제외한 계산 영역에서는 충돌 단계를 거친 후 각 격자에서의 밀도($\rho(\mathbf{x}, t)$)가 제약조건에 의하여 결정된다. 그러나 경계에서는 밀도가 미지수로 남기 때문에 등온 격자 볼츠만 법에서는 인근 격자의 밀도를 경계의 밀도로 가정한다. Tang et al.⁽²⁰⁾은 내부 에너지 분포 함수 계산시 경계에서의 밀도를 미지수로 간주하여 계산하였으나, 그러나 밀도 분포 함수를 계산한 후, 경계에서의 밀도($\rho(O, t)$)는 더 이상 미지수가 아니다. 인근 격자의 밀도를 경계에서의 밀도로 가정하여 사용한 것에 비해 이미 알려진 밀도를 사용함으로써 연산의 안정성에 심각한 영향을 미칠 수 있는 미지수를 제거하였기 때문에 보다 안정적인 경계조건 계산이 가능하였다.

후 기

이 논문은 정부(교육인적자원부)의 재원으로 한국 학술진흥재단의 지원을 받아 수행된 연구임. (KRF-2005-041-D00152)

참고문헌

(1) Chen, S. and Doolen, G. D., 1998, "Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows", *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 30, pp. 329~364

- (2) Martinez, D. O., Matthaeus, W. H., Chen, S. and Montgomery, D. C., 1994, "Comparison of Spectral Method and Lattice Boltzmann Simulations of Two-Dimensional Hydrodynamics", *Phys. Fluids*, Vol. 6, pp. 1285~1298
- (3) Hou, S., Zou, Q., Chen, S., Doolen, G. D. and Cogley, A., 1995, "Simulation of Cavity Flow by the Lattice Boltzmann Method", *J. Comput. Phys.*, Vol. 118, pp. 329~347
- (4) He, X., Luo, L. S. and Dembo, M., 1996, "Some Progress in Lattice Boltzmann Method. I. Nonuniform mesh Grids", *J. Comput. Phys.*, Vol. 129, pp. 357~363
- (5) He, X. and Doolen, G. D., 1997, "Lattice Boltzmann Method on Curvilinear Coordinates System: Flow Around a Circular Cylinder", *J. Comput. Phys.*, Vol. 134, pp. 306~315
- (6) McNamara, G. and Alder, B., 1993, "Analysis of the Lattice Boltzmann Treatment of Hydrodynamics", *Physica A*, Vol. 194, pp. 218~228
- (7) Alexander, F. J., Chen, S. and Sterling, J. D., 1993, "Lattice Boltzmann thermohydrodynamics", *Phys. Rev. E*, Vol. 47, R2249
- (8) Chen, Y., Ohashi, H. and Akiyama, M. 1994, "Thermal Lattice Bhatnagar-Gross-Krook Model Without Nonlinear Deviations in Macrodynamic Equations", *Phys. Rev. E*, Vol. 50, pp. 2776~2783
- (9) Bartoloni, A., Battista, C. and Cabasino, S., 1993, "LBE Simulation of Rayleigh-Benard Convection on the APE100 Parallel Processor", *Int. J. Mod. Phys. C*, Vol. 4, pp. 993~1006
- (10) Shan, X., 1997, "Simulation of Rayleigh-Benard Convection Using a Lattice Boltzmann Method", *Phys. Rev. E*, Vol. 55, pp.2780~2788
- (11) He, X., Chen, S. and Doolen, G. D., 1998, "A Novel Thermal Model for the Lattice Boltzmann Method in Incompressible Limit", *J. Comput. Phys.*, Vol. 146, pp. 282~300
- (12) Cornubert, R., d'Humières D. and Levermore, D. 2002, "A Knudsen Layer Theory for Lattice Gases", *Physica D*, Vol. 47, pp.241~259
- (13) Ziegler, D. P., 1992, "Boundary Conditions for Lattice Boltzmann Simulations", *J. Stat. Phys.*, Vol.71, pp.1171~1177
- (14) He, X., Zou, Q., Luo, L. S. and Dembo, M., 1997, "Analytic Solutions of Simple Flows and Analysis of Nonslip Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann BGK Model", *J. Stat. Phys.*, Vol. 87, No. 1-2, pp.115~136
- (15) Inamuro, T., Yoshino, M. and Ogino, F., 1995, "A non-slip Boundary Condition for Lattice Boltzmann Simulations", *Phys. Fluids*, Vol.7, No.12, pp. 2928~2930
- (16) Zou, Q. S. and He, X. Y., 1997, "On Pressure and Velocity Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann BGK Model", *Phys. Fluids*, Vol.9, No.6, pp.1591~1598
- (17) Chen, S., Martinez, D. and Mei, R., 1996, "On Boundary Conditions in Lattice Boltzmann Methods", *Phys. Fluids*, Vol.8, No.9, pp.2527~2536
- (18) Guo, Z. L., Zheng, C. G. and Shi, B. C., 2002, "Non-equilibrium Extrapolation Method for Velocity and Pressure Boundary Conditions in the Lattice Boltzmann Method", *Chinese Phys.*, Vol.11, pp.366~374
- (19) D'Orazio, A., Succi, S. and Arrighetti, C., 2003, "Lattice Boltzmann Simulation of Open Flows with Heat Transfer", *Phys. Fluids*, Vol.15, No.9, pp.2778~2781
- (20) Tang, G. H., Tao, W.Q. and He, Y. L. 2005, "Thermal Boundary Condition for the Thermal Lattice Boltzmann Equation", *Phys Rev E*, Vol.72, 016703
- (21) Guo, Z. L., Shi, B. and Zheng, C., 2002, "A Couple Lattice BGK Model for the Boussinesq Equations", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.39, pp.325~342
- (22) Drazin, P. G. and Reid, W. H., 1981, "Hydrodynamic Stability", Cambridge University Press
- (23) Lee, J. R. and Ha, M. Y., 2005, "A Numerical Study of Natural Convection in a Horizontal Enclosure with a Conducting Body", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 48, pp.3308~3318
- (24) D'Orazio, A., Corcione, M. and Celata, G. P., 2004, "Application to Natural Convection Enclosed Flows of a Lattice Boltzmann BGK Coupled with a General Purpose Thermal Boundary Condition", *Int. J. Thermal Science*, Vol. 43, pp. 575~586
- (25) Davis, De Vahl, 1983, "Natural Convection of Air in a Square Cavity A Benchmark Numerical Solution", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.3, pp.249~264
- (26) Brown, W., 1973, "Heat Flux Transition at Low Rayleigh Number", *J. Fluid Mech.*, Vol.60, pp.539~559