

< 논문 >

농도분산에 근거한 혼합지수 사용의 문제

서 용 권*

(2006년 3월 27일 접수, 2006년 6월 7일 심사완료)

On the Problem of Using Mixing Index Based on the Concentration Dispersion

Yong Kweon Suh

Key Words : Concentration Dispersion(농도분산), Mixing Index(혼합지수), Chaotic Advection(혼돈적 교반), Unsteady Cavity Flow(비정상 캐버티 유동)

Abstract

In this study, the problem of using the mixing index as a measure of the mixing performance for a certain flow field has been discussed. The flow model subjected to this study is the two-dimensional unsteady lid-driven cavity flow. The transport equation for the concentration within the cavity was solved by using the finite volume method where the convective terms are discretized with the central difference scheme. It was shown that both the concentration dispersion and the mixing index depend highly on the initial distribution of the concentration, and therefore the mixing index obtained from the concentration dispersion equation loses its universal applicability.

1. 서론

최근 마이크로 유체유동에 대한 관심이 증가하면서 낮은 레이놀즈 수에서의 혼합증대에 대한 연구가 많이 이루어지고 있다. 이것은 특히 랩온칩(lab-on-a-chip)과 같은 마이크로 기기 내에서 극히 미량의 서로 다른 유체를 잘 혼합시키는 일은 이후의 화학반응을 위해 필수적이며 또한 전체적인 시료의 처리시간을 단축시키는 데 있어서 결정적 이기 때문이다.⁽¹⁻⁸⁾ 한편, 마이크로 기기 내의 액체 유동은 유속이 빠르지 않고 또한 기기의 스케일이 매우 작기 때문에 레이놀즈 수는 1 과 비슷하거나 1 보다 훨씬 작은 흐름 특성을 보인다. 이같이 낮은 레이놀즈 수에서 흐름은 대부분 층류이고 유동에 의한 자발적인 혼합은 특수한 경우를 제외하면 기대하기 어렵다. 그리고 마이크로 기기의 구조를 단순화 시키기 위해서는 채널 내에 별도의 혼합공

간을 마련하기 보다는 시료가 이송되는 채널 내에서 혼합되도록 하는 것이 유리하다.

이와 같이, 마이크로 채널 내의 낮은 레이놀즈 수의 층류 흐름에서 유체를 잘 혼합시키기 위한 많은 연구가 시도되고 있다. 그러나 혼합효과를 제대로 정량화할 수 있는 도구는 아직 개발되지 않았으며 이를 위한 연구는 하나의 도전과제로 남아 있다고 볼 수 있다. 혼돈적 교반(chaotic stirring)의 분야에서 제시하는 Liapunov 지수의 방법^(9,10)은 보다 엄격하기는 하지만 상당한 계산시간을 요하며 더구나 지역에 따른 국소적 혼합 효과는 제시하지 못하는 단점이 있다. 또한 정규 영역(regular region)도 실제적으로 어느 정도의 혼합효과를 기대할 수 있지만 Liapunov 지수가 0으로 주어지므로, 이 점을 감안해서도 Liapunov 지수가 유동장의 전 영역에 걸쳐 혼합효과를 제대로 잘 반영하고 있다고 말할 수 없다. 다음으로, 현재 가장 많이 사용되고 있는 농도장에 의한 정량화 방법 특히 농도분포의 표준편차에 근거한 농도지수에 의한 정량화 방법⁽¹¹⁻¹⁷⁾은 단순하면서도 계산시간이 비교적 짧게 소요되어 매력적으로 보이지만

* 회원, 동아대학교 기계공학부

E-mail : yksuh@dau.ac.kr

TEL : (051)200-7648 FAX : (051)200-7656

본 연구에서 밝히는 바와 같이 농도의 초기 분포 형상에 따라 농도의 분산효과가 상당히 달리 나타나기 때문에 이 또한 보편타당한 방법이라 볼 수 없다.

본 연구에서는 이와 같이, 종래의 농도분포에 의한 혼합효과 정량화 방법이 안고 있는 문제점을 분석하는 것이 주된 연구목표이다. 이를 위해 매우 단순한 유동장을 대상으로 하여, 수치해석적으로 구한 유동장을 기본으로 농도의 분산을 유한체 적법으로 수치해석하고 그 결과로부터 혼합효과를 나타내는 혼합지수(mixing index)를 구한 뒤 이들을 비교하는 방법을 사용하고자 한다.

2. 혼합을 위한 유동장

본 연구에서 대상으로 삼고자 하는 유동은 Leong and Ottino⁽¹⁸⁾가 실험에 의해 유동가시화 연구를 한 바 있고 Suh⁽¹⁰⁾가 수치해석적으로 그 교반특성을 연구한 바 있는 비정상 캐버티 유동(unsteady driven-cavity flow)이다. 동점성계수 ν 의 비압축성 유체가 가로 L , 세로 H 인 캐버티 내에 담겨져 있는 가운데 캐버티의 상면과 하면이 교대로 미끄럼 운동을 함으로써 그 내부에 발생하는 시간주기적인 유동을 속도벡터 $\mathbf{u}(x, y, t)$ 로 나타내면 아래와 같다.

$$\mathbf{u}(x, y, t) = \cos^2(\pi t/T)\mathbf{u}_1(x, y) \pm \sin^2(\pi t/T)\mathbf{u}_2(x, y) \quad (1)$$

여기서, 모든 변수는 무차원이며, 길이는 캐버티의 가로 L 로써, 유속은 상하면의 최대 속도(U)로써, 시간은 L/U 로써 각각 무차원화하였다. 그리고 이 식에서 나타난 T 는 무차원 주기이다. (x, y) 는 각각 캐버티 가로 및 세로 방향의 무차원 좌표이며, 무차원 속도 벡터 \mathbf{u}_1 과 \mathbf{u}_2 의 각 성분은 아래와 같은 상하 대칭 관계를 가진다.

$$\begin{aligned} u_2(x, y) &= u_1(x, a - y) \\ v_2(x, y) &= -v_1(x, a - y) \end{aligned}$$

기본 유동에 해당하는 속도장 \mathbf{u}_1 은 캐버티의 상면이 $u = -1$ 의 속도를 가지며 나머지 세 면은 속도가 0인 조건에서 얻어지는 유동에 해당한다. 즉, 본 연구의 연구대상 유동모델은 상면과 하면이 각각 최대속도 1로 주기 T 의 미끄럼 반복운

동을 할 때 나타나는 점성유동이다. 단, 식 (1)에서 우변 둘째 항의 부호가 +인 경우에는 상면과 하면이 모두 $-x$ 방향으로 이동하며(counter-rotating case; 역방향 회전), 부호가 -인 경우에는 상면이 $-x$ 방향으로, 하면이 $+x$ 방향으로 이동한다(co-rotating case; 정회전). 레이놀즈 수 $Re = UL/\nu$ 는 충분히 작은 값으로 가정한다. 따라서, 유동을 결정짓는 두 개의 파라미터는 캐버티의 종횡비 $a = H/L$ 와 무차원 주기 T 이다.

본 연구에서 기본 유동장 \mathbf{u}_1 은 Stokes 흐름으로 가정한 지배방정식을 시간에 대한 비정상 접근법으로 수치해석하여 구하였다. 격자계는 압력과 각 속도 성분이 격자 셀의 서로 다른 지점에서 정의되는 엇갈림 격자계(staggered grid)를 채용하였다. 시간 항은 프로그램이 가장 손쉬운 양적 Euler 방법(explicit Euler method)으로 처리하였으며 점성 항은 중심차분으로 처리하였다. 압력 방정식은 ICCG (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient)방법으로 해를 구하였다. 시간 간격 Δt 는 2×10^{-6} 으로 하였으며 수렴시까지 반복횟수는 종횡비 $a = 0.6$, 격자 수 100×60 에서 약 4000 회 정도 소요되었다. 이 때 실 계산시간은 2*2.8GHz의 CPU와 1GB의 Ram이 장착된 PC에서 약 1분 40초 정도이다.

Fig. 1은 앞에서 수치해석에 의해 구한 기본 속도장 \mathbf{u}_1 과 대칭성에 의해 유도한 속도장 \mathbf{u}_2 를 갖고 식 (1)로 구성한 속도장으로서 한 주기 내 대표적인 세 가지 시점에서의 유동양상을 보여주고 있다. 그림은 효율적인 가시화를 위해 속도 벡터들을 많이 축약한 결과이다. (a)는 순전히 상면만에 의해 구동되는 형태, (b)는 역방향 회전의 경우, 하면만에 의해 구동되는 형태, 그리고 (c)는 역방향 회전의 경우 상면과 하면이 같은 속도로 이동하는 시점에서의 속도장에 해당한다. 그리고 (d)는 정회전에서 상면과 하면이 같은 속도 크기로 이동하는 시점에서의 속도장에 해당한다.

3. 농도장 해석과 혼합지수

혼합의 성능을 예측하는 가장 손쉬운 방법 중의 하나는 초기에 임의의 형태로 유동장의 공간에 분포시킨 농도장이 시간과 더불어 어떻게 분산되는지를 알아보는 방법이다. 농도장을 $c(x, y, t)$ 라 두면 그것의 무차원화된 지배 방정식은 다음과 같다.

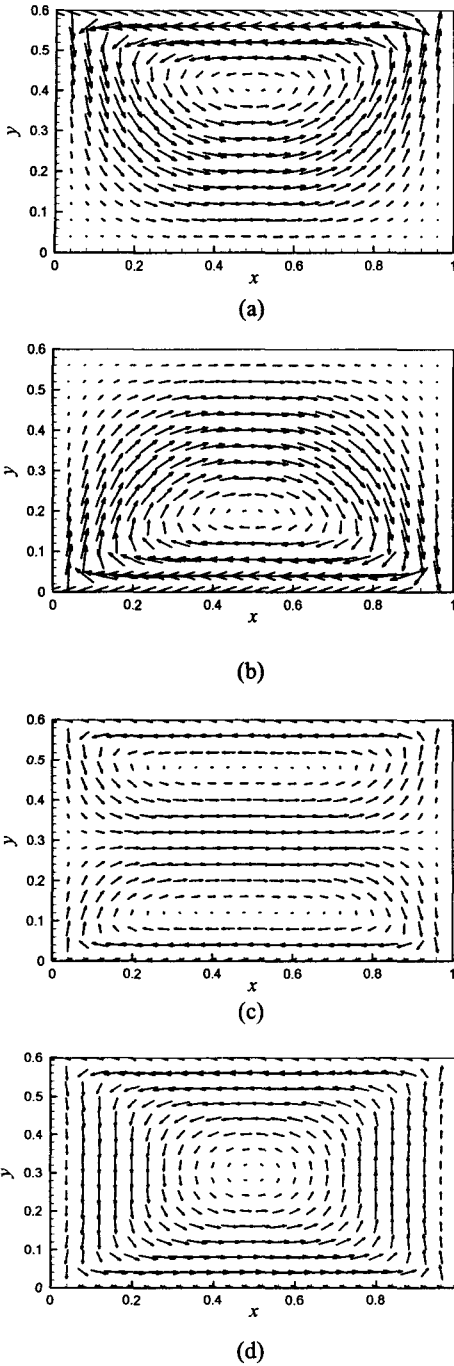


Fig. 1 Velocity vectors of the instantaneous driven-cavity flow at (a) $t = 0$, (b) $t = T/2$ (counter-rotating) and (c) $t = T/4$ (counter-rotating) and (d) $t = T/4$ (co-rotating) given with grids 100×60 at $a = 0.6$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial uc}{\partial x} + \frac{\partial vc}{\partial y} = \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

여기서 Pe 는 Peclet 수로서 농도의 확산계수를 γ 라 할 때 $Pe = UL/\gamma$ 로 정의된다. 농도장의 경계 조건은 일반적으로 경계면에 수직인 방향으로 그 구배가 0이 된다는 Neumann 조건이 사용된다.

본 연구에서는 위 지배방정식의 시간적분으로 4개의 Runge-Kutta 방법을 사용하였으며, 시간 간격은 $\Delta t = 0.001$ 로 설정하였다. 공간미분 항의 처리를 위해 우선 유한차분법과 유한체적법의 두 가지를 사용하여 수치해석하고 해석 결과 농도의 보존원리가 성립되는지를 체크하였다. (본 해석에서는 경계면에 수직인 방향의 농도 구배가 0이므로 항상 일정한 평균 농도 값을 보여야 한다.) 유한차분법에서는 속도와 농도가 동일한 격자점에서 정의되는 표준격자망을 사용하고 모든 공간미분을 중심차분으로 차분화하였으며, 유한체적법에서는 농도와 속도성분이 각각 서로 다른 점에서 정의되는, 즉 앞의 유동장 해석시 사용한 것과 동일한, 엇갈림형 격자계를 사용하였고 농도 중심 셀을 둘러싼 경계에서의 농도는 주위 농도의 값을 사용하여 풍상차분법 혹은 보간법의 원리로 구하였다. 해석 결과 유한차분법의 경우에는 대류 항의 비보존형으로 인해 공간평균 농도 값이 시간과 더불어 계속 변화하였으나, 유한체적법의 경우에는 예측한 대로 그 값이 늘 일정한 결과를 보였다. 따라서 본격적인 해석에서는 농도의 보존원리가 만족되는 유한체적법을 채용하였다. 한편 유한체적법에서도 대류 항을 이산화할 때 농도 셀의 가장자리에서의 농도를 구하는 방법에 따라 4가지의 스킴을 비교하여 보았다. 부록은 1차원 대류-확산 방정식의 경우에 이들 방법이 얼마나 큰 오차를 보이는지 분석한 것이며 이를 토대로 본 연구에서는 중심차분(2-점 보간)의 스킴을 주로 사용하였다.

초기 농도분포는 전 영역의 반을 농도 1로 나머지 반을 0으로 설정하였으며, 그 분포는 다양하게 바꾸어 가면서 계산을 수행하였다. 유한체적법에서 선형보간에 의해 셀 경계의 농도를 구하는 경우에는 농도의 overshoot 현상(농도가 1보다 커지거나 0보다 작아지는 현상)을 피할 수 없다. 이러한 현상은 격자 수에 비해 상대적으로 Pe 수가 높은 경우에 발생하며, 수치해석을 위한 각 파라미터 조건마다 과도한 overshoot가 발생하지는 않는지 늘 확인하도록 하였다. 그러나, 부록에서 1차원 농도수송방정식을 대상으로 하여 보다 자세히 분석한 바와 같이, 이러한 overshoot 현상은 장

시간 뒤의 농도분산 효과에 미미한 영향을 미치는 것으로 판단된다.

앞에서 수치적으로 구한 농도장의 분포형태 변화는 혼합효과를 정량화하는 데 사용된다. 이를 위해 사용되는 것이 소위 혼합지수이다. 혼합지수는 여러가지로 정의할 수 있으나 가장 많이 사용되는 형태는 아래와 같다.⁽¹⁵⁻¹⁷⁾

$$D = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i,j} (1 - c_{i,j} / \bar{c})^2} \quad (2)$$

여기서, $c_{i,j}$ 는 (i, j) 격자점에서의 순간 농도, \bar{c} 는 공간평균 농도, N 은 농도가 정의된 전체 격자 수로서 (i, j) 방향의 격자 수를 각각 I, J 라 할 때 $N = I \times J$ 와 같다. 이렇게 정의된 혼합지수는 혼합이 많이 될수록 0 에 접근한다.

본 연구의 주된 관심사는 혼합지수 D 가 농도의 초기분포에 따라 어떻게 달라지는지를 확인하는 일이다. 이를 위해 농도의 초기분포를 아래와 같이 주로 두 가지 형태로 달리 하여 수치해석 하였다.

수직분리형(VS, Vertical Separation);

$$c(x, y, 0) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \leq y < a/2 \\ 0.5 & \text{for } y = a/2 \\ 1 & \text{for } a/2 < y \leq a \end{cases}$$

수평분리형(HS, Horizontal Separation);

$$c(x, y, 0) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \leq x < 1/2 \\ 0.5 & \text{for } x = 1/2 \\ 1 & \text{for } 1/2 < x \leq 1 \end{cases}$$

Fig. 2 는 두 가지 형태의 농도분포를 비교하여 보인 그림이다.

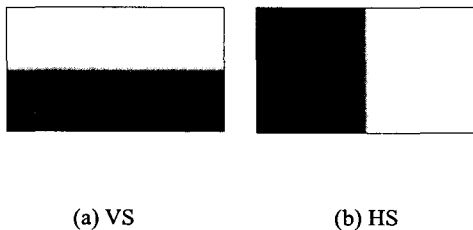


Fig. 2 Two different types of initial condition for the concentration distribution used in the simulation; $c = 0$ for black and $c = 1$ for white

4. 결과 및 검토

본 수치해석에서 Peclet 수는 $Pe = 10,000$ 으로, 중형비는 $a = 0.6$ 으로 고정시켰다.

우선 대류 항의 처리에 관한 스킴을 비교하여 보았으며 Fig. 3 은 그 결과로서, 혼합지수의 시간 변화이다. 그림에 의하면, 1 차 풍상차분법은 상당히 큰 감쇄를 보이고 있다. 부록에서 1 차원 방정식에 대한 엄밀해를 기준으로 분석한 바와 같이 1 차 풍상차분법의 경우에는 인위적인 감쇄효과가 과도하기 때문에 이러한 결과를 보인다. 중심차분의 결과는 나머지 다른 두 개의 스킴과 그다지 차이가 나지 않는다. 부록에서도 보인 바와 같이, 중심차분은 스킴이 단순하며 또한 장시간 후의 오차도 문제시 되지 않으므로 본 연구에서는 중심차분

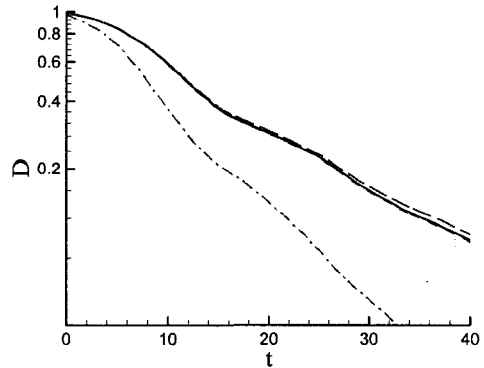


Fig. 3 Effect of the convective schemes [dash-dot; 1st-order upwind, long-dash; 2-point interpolation (central difference), dash; 3rd-order upwind, solid; 4-point interpolation] on the mixing index for the VS case at $T = 4$ and $I \times J = 100 \times 60$

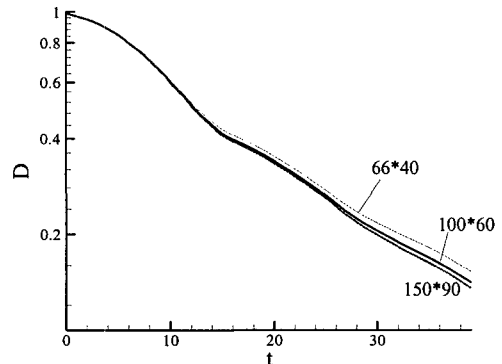


Fig. 4 Effect of the grid size on the mixing index given by using the central difference scheme for the convective terms. The other parameters are the same as in Fig. 3

을 주로 사용하여 수치해석하였다.

다음으로, 높은 Peclet 수에서 격자 수를 얼마로 하는 것이 타당한지를 결정하기 위해 $a=0.6$, $Pe=10,000$ 에서 격자 수를 66×40 , 100×60 및 150×90 의 세 가지로 바꾸어 수치해석하였으며 Fig. 4 는 혼합지수로 그 결과를 나타낸 것이다. 이 결과로부터 $a=0.6$, $Pe=10,000$ 에서는 격자 수를 100×60 로 하여도 그다지 큰 문제는 없다고 판단된다.

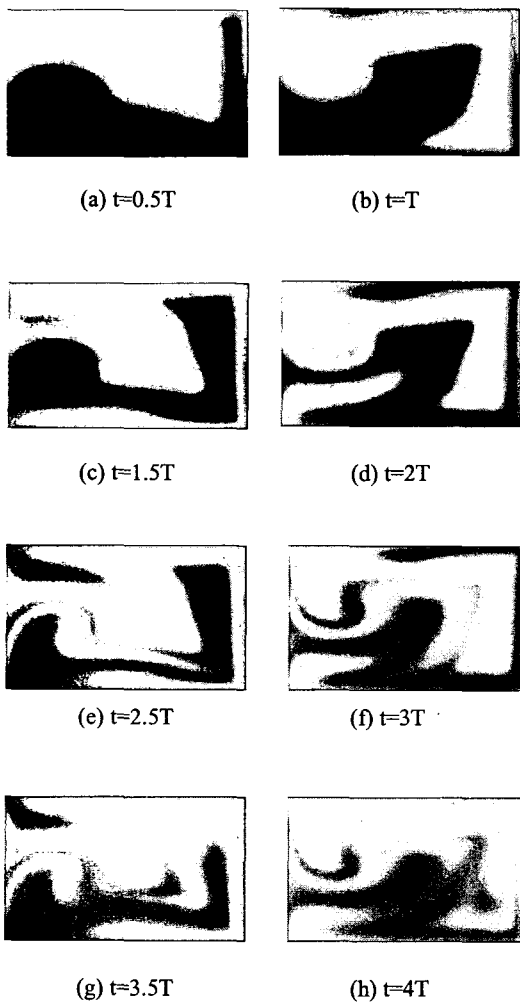


Fig. 5 Development of the concentration distribution for the VS case at the same parameter set as in Fig. 3

Fig. 5 는 앞과 같은 조건에서 수치해석한 결과로서 시간변화에 따른 농도의 분포변화를 보인 것이다. 이 파라미터 조건에서는 Suh⁽¹⁰⁾의 연구결과에서도 보인 바와 같이 모든 영역이 혼돈적 교반의 상태에 있기 때문에 교반이 매우 양호한 것으로 기대할 수 있으며 이 그림으로부터도 그것을 확인할 수 있다. 그리고 시간의 경과와 더불어 물질의 신장(stretching)과 접힘(folding) 현상을 어느 정도 확인할 수 있으며, 또한 이에 따라 높은 농도와 낮은 농도의 경계에 해당하는 줄무늬(striation)도 점차 가늘어지는 것을 볼 수 있다. 이러한 줄무늬의 모양은 바로 불안정 다양체(unstable manifold)에 해당한다. 즉, 동일한 시간위상($t=mT+\phi$ 로 놓고 볼 때 임의의 정수 m 에 대해 위상 ϕ 가 같은 시점)에서는 이 줄무늬의 모양은 시간의 경과와 더불어 변하지 않으며 앞에서 언급한 불안정 다양체 즉 불변 다양체(invariant manifold)에 접근한다.

이제 농도의 초기 분포에 따른 분산효과를 살펴보도록 한다. Fig. 6 은 두 가지 서로 다른 초기 농도분포의 각각에서 두 가지의 서로 다른 주기에 대해 수치해석한 결과로서 혼합지수의 시간변화를 나타낸다. 그림에서 나타난 바와 같이, $T=4$ 에서는 초기 농도의 분포에 따른 혼합효과가 크게 다르지 않다. 그러나, $T=2$ 에서는 현격한 차이를 보이고 있다. 즉 VS 에 비해 HS 의 초기조건에서 혼합이 훨씬 더 잘되는 것으로 나타난다. 이와 같이, 낮은 T 에서 초기 농도에 따라 혼합지수가 크게 다른 근본적인 이유는 $T=2$ 에서는 유동영역 내에 혼돈적 교반(chaotic stirring)을 일으키는 혼돈영역(chaotic region)과 그렇지 못한 정규영역(regular region)이 혼재해 있기 때문이다. (혼돈영역과 정규영역에 대한 보다 자세한 설명은 다음 단락에서

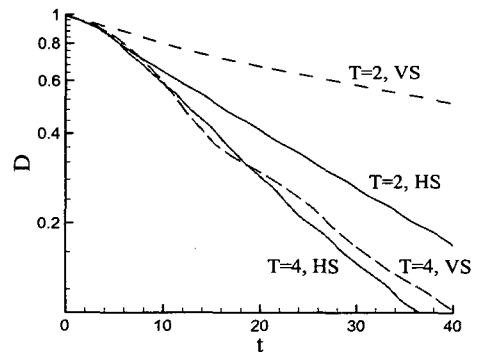


Fig. 6 Mixing index obtained for four cases of parameter set to show the dramatic difference in the mixing index at low T depending on the initial c -distribution pattern

추가하였음.) Fig. 7 은 $T=2$ 와 $T=4$ 에서의 Poincare 단면을 보여주고 있는데, 앞에서 언급한 바와 같이 $T=2$ 에서는 혼돈영역과 정규영역이 공존해 있음을 확인할 수 있다. 참고로, 여기서 제시한 Poincare 단면은 영역 내에 초기에 45 개의 입자를 규칙적인 배열로 공간 내에 끌고루 분포시킨 뒤 500 주기 동안 입자의 궤적을 추적하고 각 주기의 마지막 시점에서 이들 입자의 위치를 저장한 뒤 그래픽 툴로써 그 점들의 위치를 나타낸 것이다. 즉 Fig. 7 의 Poincare 단면은 각각 22,500 개의 점으로 구성된 것이다. 정규영역 내의 유체입자들은 그 외부의 혼돈영역에 속한 입자들과 혼합되는 일이 없다. 따라서 초기 농도분포가 VS 형태인 경우에는 정규영역 내에는 모든 위치에서 농도가 1 이거나(상부의 정규영역) 아니면 농도가 0 인(하부의 정규영역) 형태를 거의 그대로 유지함으로써 Fig. 8(a)와 같이 전체적으로 보면 농도가 큰 지역과 농도가 작은 지역이 상하로 분할된 형태를 보이게 된다. 한편, 정규영역 내에서는 초기부터 균질한 농도로 구성되어 있고 이후 더 이상 농도 값이 변하지 않기 때문에(물론 혼돈영역과 인접한 지역에서는 확산효과가 있어 부분적으로 농도가 변하기는 하지만) 정규영역 자체 내의 혼합효과는 파악할 수 없다.

한편, 정규영역과 혼돈영역의 구분에 대한 보다 자세한 설명을 한다면 다음과 같다. 두 영역은 혼돈이론의 가장 기본적인 입장에서 설명할 수 있다. 즉, 초기에 임의의 지점에서 매우 가까이 위치한 두 유체 입자가 시간과 더불어 멀어지는 정도를 관찰한다고 할 때 만약 두 입자간의 거리가 시간에 대해 지수적으로 멀어진다면 이는 혼돈적 거동을 보인다고 말하고 이러한 성질을 보이는 영역을 혼돈영역이라 부른다. 만약 두 입자간의 거리가 선형적으로 증가하거나 혹은 변하지 않는 경우에는 정규영역이라 부른다. 물론 두 입자간의 거리는 초기에는 지수적으로 변할 수도 있지만 시간이 충분히 흐른 뒤의 거리변화를 기준으로 하여 이를 판단한다. 한편, 주어진 유동장이 비압축성인 경우에는 이러한 구분이 바로 혼합특성과 직결된다. 왜냐하면 두 입자 사이의 거리가 빠른 시간 내에 서로 멀어진다는 것은, 다른 한편으로, 초기에 멀리 떨어진 다른 두 입자가 같은 빠르기로 가까이 다가온다는 것을 의미하기 때문이다. 즉 (혼돈영역에서는) 서로 다른 위치에 있던 유체가 빠른 시간 내에 서로 가까이 만나기 때문에 혼합특성이 양호하다고 볼 수 있는 것이다.

다른 한편으로, 초기 농도분포가 HS 형태인 경

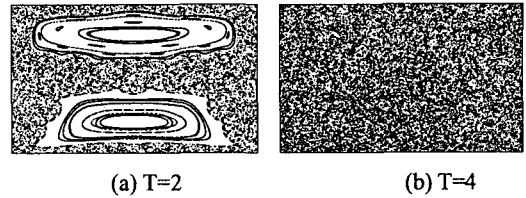


Fig. 7 Poincare sections at two different values of T

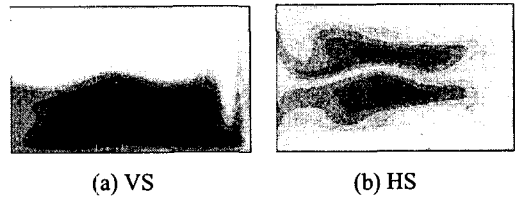


Fig. 8 Concentration distribution at $t=20T$ for two different initial c -distributions for $T=2$; black for $c \leq 0.1$ and white for $c \geq 0.9$

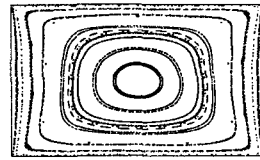


Fig. 9 Poincare section of the co-rotating case at $T=1$

우에는 상하의 정규영역 각각에서 초기부터 농도 1 과 농도 0 이 반씩 자리잡고 있기 때문에[Fig. 7(a)의 Poincare 단면 참조] 정규영역 내의 전단변형(shear strain)효과로 인한 어느 정도의 혼합효과는 기대할 수가 있다. Fig. 8(b)에서 상부 지역과 하부 지역이 거의 고른 농도분포를 보이고 있음은 바로 이러한 이유 때문이다. 이와 같이 초기의 농도 분포에 따라 이후의 혼합효과가 매우 달리 보인다는 것은 이 후의 농도분산의 형태나 그 정도를 갖고 혼합효과를 정량화한다는 것은 보편타당성이 없음을 의미한다.

한편, 정회전의 경우에는 낮은 주기에서도 HS, VS 의 두 가지 조건에서 모두 양호한 혼합을 기대할 수 있다. 그 이유는 낮은 주기에서 발견되는 정규영역이, Poincare 단면(Fig. 9)을 통해 확인할 수 있는 바와 같이, 영역의 가운데를 중심으로 하나만 존재하기 때문이다. 그러나 이러한 형태의 유동도 농도의 초기조건에 따라 혼합효과가 좋지 않게 보이는 경우를 얼마든지 찾아낼 수 있다. 이를 위해 농도의 초기조건이, Fig. 10 에서 보인 바와



Fig. 10 The 3rd type of the initial condition for the concentration distribution used in the simulation; horizontally separated with three regions(called HS3). $c = 0$ for black and $c = 1$ for white

같이, 가운데의 1/2 영역이 농도 0 으로 설정되는 3 개-지역 수평분리(앞으로 HS3 라 부름)의 형태에 대한 수치해석 결과를 제시한다.

Fig. 11 은 $T=1$ 에서 VS 의 경우와 HS3 의 경우에 대한 혼합지수를 나타낸 것이다. VS 분포인 경우 역회전에서 혼합지수가 매우 높은(따라서 혼합 효과가 나쁜) 결과를 보이는 것은 지금까지 앞에서 제시한 다른 결과와 같다. 그러나 이 경우 정회전을 적용시키면 그림에서 보는 바와 같이 혼합 효과가 우수한 것을 알 수 있다. 그 이유는 앞에서 언급한 바와 같이 정회전의 경우에는 정규영역이 상하로 분리되지 않고 가운데를 중심으로 하나만 존재함으로써 정규영역 내에서도 높은 농도와 낮은 농도가 반씩 자리잡고 있기 때문이다.

그러나 영역이 수평방향으로 3 개로 나누어진 상태에서 가운데 1/2 이 낮은 농도로 초기조건이 설정되는 HS3 의 경우(Fig. 10)에는 그 반대로 역회전의 경우가 훨씬 더 낮은 혼합지수를 보이며 정회전의 경우에는 오히려 혼합지수가 높게 나타난다. 전자의 이유는 농도의 경계가 상대적으로 길어져서 그것이 농도분산에 유리하게 작용하기 때문이며, 후자의 이유는 정규영역의 대부분이 초기에 거의 낮은 농도로만 설정되기 때문이다.

Fig. 12 는 정회전에서 초기 농도분포가 VS 및 HS3 의 형태인 경우에 대해 $t = 40T$ 시점에서의 혼합양상을 보인 것이다. VS 의 경우에는 정규영역 내에서 높은 농도와 낮은 농도가 서로 맞물려 회전하며 태극모양의 무늬를 보이고 있다. 이는 정규영역의 중심에서 혼합효과가 가장 좋지 않음을 의미한다. 그러나 중심에서 멀어질수록 전단변형의 효과가 작용하여 양호한 혼합으로 나타난다. 그리고 HS3 의 경우에는 정규영역의 상당부분이 낮은 농도로 채워지며 이로 인해 비록 전단변형이 작용하는 지점이지만 농도의 분산이 제대로 이루어지지 않은 특징을 보이고, 이에 따라 혼합지수는 Fig. 11 에서 보는 바와 같이 높은 값을 나타낸다.

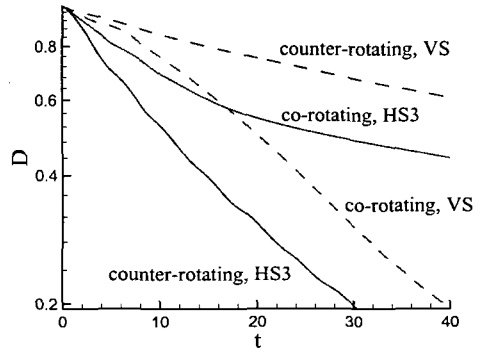


Fig. 11 Mixing index obtained for four cases of parameter set at $T=1$. HS3 denotes the horizontally-separated initial distribution with three regions (Fig. 10)

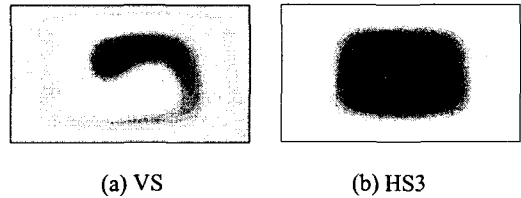


Fig. 12 Concentration distribution at $t=40T$ for two different initial c -distributions for $T=1$ with the co-rotating case; black for $c \leq 0.2$ and white for $c \geq 0.8$

본 논문은 혼합지수를 사용함에 따른 문제점을 제시한 것으로서, 혼합성능을 예측할 때 혼합지수를 사용하고자 한다면 초기 조건에 따라 그 결과가 다를 수 있기 때문에 농도의 초기분포를 다양하게 하여 지수를 구할 필요가 있음을 이해할 수 있다. 그리고 이러한 문제점이 없으면서 빠른 시간 내에 혼합효과를 예측할 수 있는 혼합효과 정량화에 대한 추가적인 연구가 필요하다.

5. 결 론

본 연구에서는 캐버티 내 비정상 스톱스 유동을 대상으로 하여 혼합효과를 정량화하기 위한 혼합지수를 수치해석에 의해 구하고 그 결과로부터 혼합지수를 사용하여 혼합효과를 예측하는 데 있어서 예상되는 문제점들을 제시하고 분석하였다. 본 연구를 통해 얻어진 결론을 요약하면 아래와 같다.

(1) 캐버티 유동이 역회전인 경우, 전 영역이 혼돈적 교반의 특징을 보이는 $T=4$ 에서는 초기의 농도 분포와 관계없이 혼합지수는 낮은 값을 보이며 따라서 양호한 혼합효과를 잘 예측하고 있다.

(2) 캐버티 유동이 역회전인 경우, 유동장의 일부가 정규영역의 특징을 보이는 $T=2$ 에서는 초기의 농도분포가 수직분리형인 경우에는 높은 혼합지수를(따라서 불량한 혼합효과를) 그리고 수평분리형인 경우에는 낮은 혼합지수를(따라서 양호한 혼합효과를)보이며, 이에 따라 혼합효과의 예측에 있어서 일관성이 없다.

(3) 캐버티 유동이 정회전인 경우, 대부분의 영역이 정규영역인 $T=1$ 에서도 HS 와 VS 분포 모두에서 낮은 혼합지수를 보이지만 수평으로 3 개의 영역으로 나누어지는 초기 농도분포 즉 HS3 에 대해서는 높은 혼합지수를 보이므로 여전히 일관성이 없다.

(4) 종합적으로, 같은 유동장인데도 불구하고 혼합지수의 값은 농도의 초기조건에 따라 상당히 다른 값을 제시하고 있기 때문에 혼합효과를 예측하는 양으로 혼합지수를 사용하는 데는 문제가 있으며, 이를 부분적으로 해결하는 방법으로서, 농도의 초기분포를 다양하게 하면서 농도지수를 구하는 방법을 추천할 수 있다.

후 기

본 연구는 한국과학재단 지정 국가지정연구실 사업의 지원으로 수행되었음.

참고문헌

(1) Yi, M. and Bau, H. H., 2003, "The Kinematics of Bend-Induced Mixing in Micro-Conduits," *Int. J. Heat Fluid Flow*, Vol. 24, pp. 645~656.

(2) McQuain, M. K., Seale, K., Peek, J., Fisher, T. S., Levy, S., Stremler, M. A. and Heselton, F. R., 2004, "Chaotic Mixer Improves Microarray Hybridization," *Anal Biochem.*, Vol. 325, pp. 215~226.

(3) Chang, C-C and Yang, R-J, 2004, "Computational Analysis of Electrokinetically Driven Flow Mixing in Microchannels with Patterned Blocks," *J. Micromech. Microeng.*, Vol. 14, pp. 550~558.

(4) Kim, D. S., Lee, S. H., Kwon, T. H. and Ahn, C. H., "A Serpentine Laminating Micromixer Combining Splitting/Recombination and Advection," *Lab on a Chip*, Vol. 5, pp. 739~747.

(5) Grumann, M., Geipel, A., Riegger, L., Zengerle, R. and Ducree, J., 2005, "Batch-Mode Mixing on Centrifugal Microfluidic Platforms," *Lab on a Chip*, Vol. 5, pp. 560~565.

(6) Howell, P. B., Mott, D. R., Fertig, S., Kaplan, C. R., Golden, J. P., Oran, E. S. and Ligler, F. S., 2005, "A Microfluidic Mixer with Grooves Placed on the Top and Bottom of the Channel," *Lab on a Chip*, Vol. 5, pp. 524~530.

(7) Qian, S. and Bau, H. H., 2005, "Theoretical Investigation of Electro-Osmotic Flows and Chaotic Stirring in Rectangular Cavities," *Appl. Math. Modelling*, Vol. 29, pp. 726~753.

(8) Wu, H-Y and Liu, C-H, 2005, "A Novel Electrokinetic Micromixer," *Sensors and Actuators*, A 118, pp. 107~115.

(9) Ottino, J.M., 1989, *The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos and Transport*, Cambridge University Press.

(10) Suh, Y. K., 1995, "Chaotic Stirring of an Alternately-Driven-Cavity Flow," *Trans. of the KSME (B)*, Vol. 19, No. 2, pp. 537~547.

(11) Jaworski, Z. and Dudczak, J., 1998, "CFD Modelling of Turbulent Macromixing in Stirred Tanks, Effect of the Probe Size and Number on Mixing Indices," *Computers Chem. Engng*, Vol. 22, Suppl., pp. S293~S298.

(12) Devahastin, S. and Mujumdar, A. S., 2001, "A Study of Turbulent Mixing of Confined Impinging Streams Using a New Composite Turbulence Model," *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 40, pp. 4998~5004.

(13) Niamuy, C. and Devahastin, S., 2005, "Effects of Geometry and Operating Conditions on the Mixing Behavior of an In-Line Impinging Stream Mixer," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 60, pp. 1701~1708.

(14) Feger, C., Gelorme, J. D., McGlashan-Powell, M. and Kalyon, D. M., 2005, "Mixing, Rheology and Stability of Highly Filled Thermal Pastes," *IBM J. Res.*, Vol. 49, No. 4/5, pp. 699~707.

(15) Maeng, J-S, Cho, I-D and Kim, B-J, 2005, "Prediction of Degree of Mixing for Insoluble Solution with Vortex Index in a Oassive Micromixer," *Trans. of the KSME (B)*, Vol. 29, No. 2, pp. 232~238.

(16) Lee, D. S., Kim, H. G., Ha, M. Y., Park, Y. H. and Park, I. M., 2005, "Mixing Effect by the Geometry of Static Mixer with Turbulent In-Situ Mixing Process," *Trans. of the KSME (B)*, Vol. 29, No. 12, pp. 1307~1312.

(17) Kim, Y., An, S. and Maeng, J., 2006, "The Effect of Karman Vortex for Mixing in a Micro-Channel with an Oscillating Micro-Stirrer," *Trans. of the KSME (B)*, Vol. 30, No. 2, pp. 144~152.

(18) Leong, C. W. and Ottino, J. M., 1989, "Experiments on Mixing due to Chaotic Advection in a Cavity," *J. Fluid Mech.*, Vol. 209, pp. 463~499.

부 록

농도의 1 차원 지배방정식 즉 대류-확산 방정식 (convection-diffusion equation)은 아래와 같이 쓸 수

있다.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial uc}{\partial x} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (A-1)$$

이 방정식의 수치해석을 위해 주어진 영역을 $0 \leq x \leq 6$ 으로 잡고 양 끝 경계에서 농도의 구배가 0 인 조건을 적용한다. 지배방정식의 이산화를 위해 유한체적법을 적용하며 각 격자 셀의 중심에서 농도 c 가 정의되고 셀의 경계에서 속도 u 가 정의되는 엇갈림형 격자계를 사용한다. 그러면 위 방정식의 이산화 결과는 아래와 같다.

$$\frac{dc_i}{dt} = -\frac{u_e c_e - u_w c_w}{\Delta x} + \frac{c_{i-1} - 2c_i + c_{i+1}}{Pe \Delta x^2} \quad (A-2)$$

위 식에서 우변 첫 항의 c_e 와 c_w 의 산정방법은 수치해석의 결과에 중요한 영향을 미친다. 여기서는 1차 풍상차분법, 3차 풍상차분법, 2-점 보간법 (혹은 중심차분법), 및 4-점 보간법을 사용하였을 때 각 방법에서 발생하는 오차를 살펴보도록 한다. 단, 시간에 대한 적분에는 정밀도가 높은 4 계의 Runge-Kutta 의 방법을 적용한다. c_e 를 산정하는 것을 예로 들어 각 방법의 관련 알고리즘을 제시한다. 먼저, 1차 풍상차분법은 아래와 같다.

$$c_e = \begin{cases} c_i & \text{if } u_e \geq 0 \\ c_{i+1} & \text{if } u_e < 0 \end{cases}$$

3차 풍상차분법의 알고리즘은 아래와 같다.

$$c_e = \begin{cases} (6c_i + 3c_{i+1} - c_{i-1})/8 & \text{if } u_e \geq 0 \\ (6c_{i+1} + 3c_i - c_{i+2})/8 & \text{if } u_e < 0 \end{cases}$$

그리고, 가장 흔히 사용되는 2-점 보간법 혹은 중심차분법은

$$c_e = \frac{1}{2}(c_i + c_{i+1})$$

와 같으며, 끝으로 4-점 보간법을 위한 알고리즘은 다음과 같다.

$$c_e = \frac{1}{9}(9c_i + 9c_{i+1} - c_{i-1} - c_{i+2})$$

점성 항을 위한 이산화에는 항상 중심차분법을 적용하였다.

속도 $u(x,t)$ 로는 아래와 같은 함수를 사용함으로써 수치해석 대상 공간이 시간과 더불어 점차 커져야 하는 문제점을 해소하였다.

$$u(x,t) = \cos(2\pi t/T)$$

그러면, 식 (1)에 대한 엄밀해는 아래와 같다.

$$c(x,t) = \frac{1}{2}[1 + \text{erf}(\xi)]$$

$$\xi = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Pe}{t}}(x - X(t)),$$

$$X(t) = 3 + \frac{T}{2\pi} \sin(2\pi t/T)$$

Fig. A1 은 $Pe = 10,000$, $T = 2\pi$ 의 파라미터 조건에서 격자 수를 $I = 600$ 으로 하고 시간 간격을 $\Delta t = 0.002$ 로 하였을 때 각 스킴의 적용에 따른 rms 오차 ϵ_{rms} 을 나타낸 것이다. 여기서 ϵ_{rms} 는

$$\epsilon_{rms} = \sqrt{\frac{1}{I} \sum_{i=1}^I (c_i - c_i^{exc})^2}$$

이다. 그림을 보면, 1차 풍상차분법은 인위적인 감쇄효과로 인해 전 시간영역에 걸쳐 상대적으로 상당히 큰 오차를 보이고 있다. 나머지 3 개의 스킴은 시점에 따라 약간씩 다른 양상을 보이는데 초기에는 중심차분에 비해 3차 풍상차분과 4-점 보간법이 보다 우수하지만 나중에는 이것이 뒤바뀐다. 결국 이것은 3차 풍상차분법도 인위적인 감쇄효과가 발생함을 뜻한다. 장시간 후의 오차를 기준으로 본다면 따라서 3차 풍상차분법이 중심차분이나 4-점 보간법에 비해 바람직하지 못하다고 말할 수 있다.

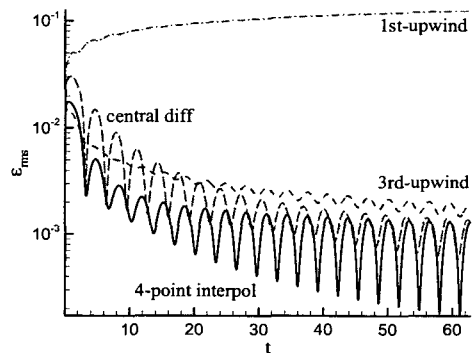


Fig. A1 Numerical error of each scheme used for discretization of the convective term. $Pe = 10,000$, $T = 2\pi$, $I = 600$, $\Delta t = 0.002$

위 그림에서 계산의 초기에 발생하는 중심차분법에서의 오차는 수치적 진동에 기인한다. Fig. A2 는 $t=3T/4$ 때 얻어진 c 의 공간분포를 보이고 있다. 그림에서 알 수 있듯이 중심차분에 의한 결과는 상당한 진동을 보이고 있다. 진동의 면에서 본다면 1 차 풍상차분, 4-점 보간법, 중심차분법의 순이다. 그러나 이러한 진동의 형상이 장시간 후의 해의 오차에는 그다지 큰 영향을 미치지 않는다는 사실을 두 그림으로부터 유추할 수 있다.

결론적으로, 장시간 후의 감쇄효과가 주된 관심이라면 풍상차분법보다는 중심차분이나 4-점 보간법이 보다 효과적이다. 또한 코드작성이 매우 단순하고 오차 면에서도 4-점 보간법에 비해 크게 뒤지지 않는 중심차분이 가장 매력적이라 말할 수 있다.

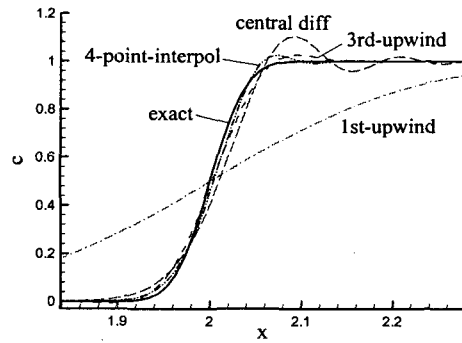


Fig. A2 Profile of the concentration $c(x,t)$ obtained numerically by using 4 different schemes for the discretization of the convective term compared with the exact solution. Parameters are the same as in Fig. A1