

2차원 관내 유동에서 불활성 기체 제거과정의 직접 수치 해석

신 승 원^{*1}

DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF IMMISCIBLE GAS BUBBLE DISPLACEMENT IN 2D CHANNEL

S. Shin^{*1}

Dynamic behavior of immiscible gas bubble attached to the wall in channel flow plays very important role in many engineering applications. Special attention has been paid to micro direct methanol fuel cell(μ DMFC) where surface tension becomes dominant factor with minor gravitational effect due to its reduced size. Therefore, displacement of CO_2 bubble generating on a cathode side in μ DMFC can be very difficult and efficient removal of CO_2 bubbles will affect the overall machine performance considerably. We have focused our efforts on studying the dynamic behavior of immiscible bubble attached to the one side of the wall on 2D rectangular channel subject to external shear flow. We used Level Contour Reconstruction Method(LCRM) which is the simplified version of front tracking method to track the bubble interface motion. Effects of Reynolds number, Weber number, advancing/receding contact angle and property ratio on bubble detachment characteristic has been numerically identified.

Key Words : 수치해석(numerical simulation), 가스제거(bubble displacement), 동적 접촉각(dynamic contact angle), LCRM(Level Contour Reconstruction Method), 마이크로 직접 메탄올 연료전지(μ DMFC)

기호설명

P: 압력 [Pa]
 ρ : 밀도 [kg/m^3]
 μ : 점성계수 [Ns/m^2]
 κ : 곡률 [1/m]
D: 초기 기포의 지름 [m]
 σ : 표면장력계수 [N/m]
 θ_{adv} : 전진각 [rad]
 θ_{rec} : 후진각 [rad]
 V_{in} : 무차원 입구속도 [m/s]
 g : 중력벡터 [m/s^2]
 x_f : 상계면의 위치좌표
 V_f : 상계면의 속도 [m/s]
 u : 속도벡터 [m/s]

1. 서 론

관내에서 벽면에 부착된 기포의 행동특성은 다공성 물질에서의 다상유동 현상 및 혈관 내 기포의 움직임 해석 등 많은 공학문제에 있어 매우 중요한 현상으로 지금까지 다양한 실험 및 수치해석적인 노력이 행하여져 왔다. 특히 최근 기존의 리튬-이온 전지와 달리 환경오염을 일으키지 않고, 충전시간이 불필요한 미래형 전지로 평가 받고 있는 연료전지와 연관되어 그 중요성이 더욱 부각되었다[1-3]. 수소 대신에 좀 더 취급이 쉬운 메탄올이 대체 연료로 관심을 받기 시작하였고 연료전지의 소형화에 따라 그 크기가 작아지면서, 이러한 소형 메탄올 직접 연료전지(micro direct methanol fuel cell)내에서 표면장력의 영향이 증가되고 중력의 영향이 감소하게 되어, 불순물로 생성된 이산화탄소가 연료극에서 떨어지지 않는 현상이 발생하였다. 이는 전기 생산을 방해하고 유동성을 저하시키며 관내에 압력을 상승시켜 연료전지의 효율을 떨어뜨리게 된다. 더불어 메탄올이 이온 교환막을 투과해 공기극에서 반응해 버리는 크로스오버 문제를 더욱 악화시키기도 한다. 따라서 마이크로 직접 연료전지 내에서 발생된 이산화탄소를 효율적으로 제거하는 것은 상용화에 앞서 매우 중요한

접수일: 2007년 4월 30일, 심사완료일: 2007년 8월 16일.

1 정희원, 홍익대학교 기계·시스템디자인공학과

* E-mail: ssshin@wow.hongik.ac.kr

문제이다[1,2].

기존 연료전지의 이산화탄소 제거에 관한 연구로는, 표면장력을 최소화하여 소수성 기체를 제거할 수 있는 평판을 개발한 Meng 등[1,2]이 있으며, 메탄올과 물의 혼합물에 공기를 주입하는 방법을 개발한 Shukla 등[3]에 의한 연구 등이 있다. 그러나 아직까지 마이크로 메탄올 직접 연료 전지에서 발생하는 이산화탄소의 제거에 직접 연관된 연구는 찾아보기 힘들다.

지금까지의 대부분의 수치해석적 연구들은 관내에서 벽면에 부착된 액적의 제거에 관련된 것들이다. 특히 유동장내의 다공성 물질의 영향을 파악하기 위하여 단일 기공의 목(single pore throat)에서의 액적행동의 분석이 중요시 되었다. Kang 등[4,5]은 Lattice Boltzman 방법을 사용하여 중력이 작용하는 관내에서 접촉각과 Bond 수, 액적 크기, 밀도의 변화에 따른 액적의 벽면 분리현상을 파악하였고 그에 따른 한계 Bond 수를 제시하였다. 또한 Zhang 등[6]은 front-tracking 방법을 이용하여 Reynolds 수와 Capillary 수를 변화시켜 액적운동의 비선형적 영향을 연구했다. 그러나 벽면에서의 기포분리에 관한 수치해석 연구는 극히 미미한 상태이다. 최근 Norman 등[7]이 경사관내에서 초기에 벽면에 부착되어 있는 기포의 중력장하에서의 분리과정을 해석하였다. Level set 방법이 상표면의 변화를 추적하기 위해 사용되었고, Bond 수, Reynolds 수, 그리고 경사각에 따른 기포의 벽면 분리과정 및 분리 후의 상승과정을 해석하였다. 이 경우 기포는 중력장에 의한 부력의 영향으로 벽면에서 분리되는 경우이다.

따라서 본 연구는 채널에 생성된 “기포” 분리 과정에서의 Weber 수, Reynolds 수, 입구속도, 접촉각, 물성치의 영향을 직접 수치해석 방법을 통해 확인해 보고자 한다.

2. 수치해석 방법

2.1 지배방정식

본 연구에 사용된 질량보존 및 운동량보존 방정식은 다음과 같다. 방정식은 초기 기포의 지름(D)과 속도 \sqrt{gD} 를 각각 길이와 속도의 척도로 선택하고, 액체의 물성치를 이용하여 무차원화하였다.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] \\ = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \\ + \frac{1}{We} \int_A \sigma \kappa \mathbf{n} \delta(x - x_f) dA \end{aligned} \quad (2)$$

여기서 \mathbf{u} 는 속도벡터, P 는 압력, \mathbf{g} 는 중력벡터, 그리고 \mathbf{n} 은 표면에서의 단위 수직 방향벡터, \mathbf{x}_f 는 상계면의 위치 좌표를 나타낸다. 계면에서의 표면장력의 영향은 유한한 두께를 가지는 delta 함수 형태로 표현되었다. Reynolds 수와 Weber 수는 다음과 같이 정의된다.

$$Re = \frac{\rho_L D \sqrt{gD}}{\mu_L}, \quad We = \frac{\rho_L g D^2}{\sigma} \quad (3)$$

여기서 ρ_L , μ_L , σ 는 각각 액체의 밀도, 점성계수, 그리고 표면장력계수를 나타낸다.

물질의 상태량은 한 상에서는 0의 값을 갖고 다른 상에서는 1의 값을 갖는 Heaviside 함수 $I(x,t)$ 를 이용하여 다음과 같이 표현된다[8].

$$\rho(x) = \rho^* + (1 - \rho^*) I(x,t) \quad (4)$$

$$\mu(x) = \mu^* + (1 - \mu^*) I(x,t)$$

여기서 ρ^* , μ^* 는 각각 기체와 액체의 물성치비인, ρ_G/ρ_L , μ_G/μ_L 를 나타낸다. Heaviside 함수는 다음과 같이 poisson 방정식을 통해서 구할 수 있다.

$$\nabla^2 I = \nabla \cdot \int_A \mathbf{n} \delta(x - x_f) dA \quad (5)$$

시간에 따른 계면의 변화는 front-tracking의 변형된 형태의 하나인 Level Contour Reconstruction Method (LCRM)[9,10,11]를 이용하여 추적하였다. 유동장 해석을 위해 고정된 격자(Eulerian) 위에 계면의 이동을 추적하기 위한 추가적인 이동 격자(Lagrangian)를 사용하는 front-tracking 방법[8]은 매우 정확한 계면의 추적이 가능하지만, 경계면에서의 기하학적 형상 계산 및 계면의 분리/융합을 위해 이웃한 점들이 서로 논리적으로 연결되어 있어야 한다. 그러나 level set과 front tracking의 hybrid 형태인 LCRM의 경우에는 기본적으로 이동격자계의 성격을 가지지만, 격자구조가 심하게 변형되었을 때 이동격자계를 통해 고정격자계 위의 특정한 level field(heaviside 함수, 거리함수 등)를 통해 이동격자계가 다시 재구성된다[9]. 따라서 front tracking의 큰 단점인 계면격자 사이에 논리적 연결성은 제거하고 물리적 연결성만을 유지하게 되어, 계면구조의 연결성 확보에 필요한 알고리즘의 부담은 없어지고 기존 front-tracking 방법의 정확성은 그대로 유지할 수 있게 된다.

상계면의 움직임은 다음 식을 통해 직접 추적된다.

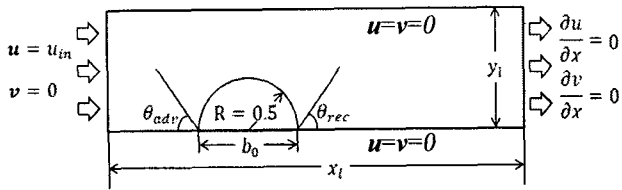


Fig. 1 Simulation geometry

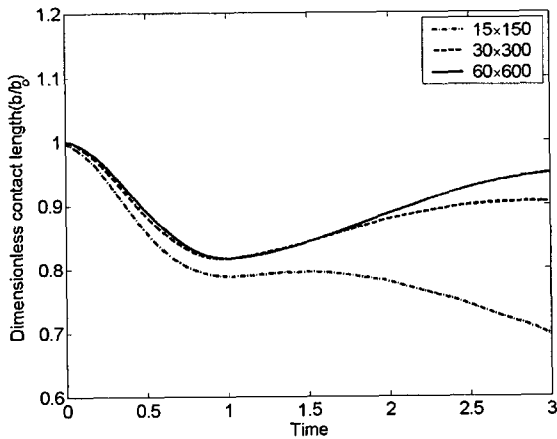


Fig. 2 Dimensionless contact length with different grid resolution

$$\frac{dx_f}{dt} = V_f \quad (6)$$

여기서 V_f 는 2차원 선형보간을 이용해서 구해진 상계면의 속도이다.

2.2 동적접촉각(dynamic contact angle) 모델링

벽면에서의 점착조건을 적용시키면 접촉면에서는 무한한 크기의 전단응력을 받게 된다. 이를 해결하기 위해서, 벽면에서의 상 경계면의 운동은 속도구배에 비례하여 미끄러지게 하는 Navier-Slip 조건을 이용하여 해석하였다.

$$U_w = \lambda \frac{du}{dy} \quad (7)$$

여기서 U_w 는 2차원 문제의 경우 접촉점의 속도를 나타내고, λ 는 미끄럼 계수(slip factor)이다(본 연구의 경우 격자의 크기가 사용되었다). LCRM은 상계면을 직접 추적하므로 접촉점에서의 정확한 정보의 이용이 가능하다. 따라서 접촉점(또는 면)의 위치 및 접촉각의 크기를 정확히 파악하여 계산된 접촉각이 정해진 전진각(θ_{adv})보다 큰 경우 전진각으로 고정하고, 후진각(θ_{rec})보다 작은 경우 후진각으로 고정하였다. 접촉각이 전진각과 후진각 사이에 존재할 경우 자유롭게 움직이도록 하여 동적 접촉각의 영향을 고려하였다.

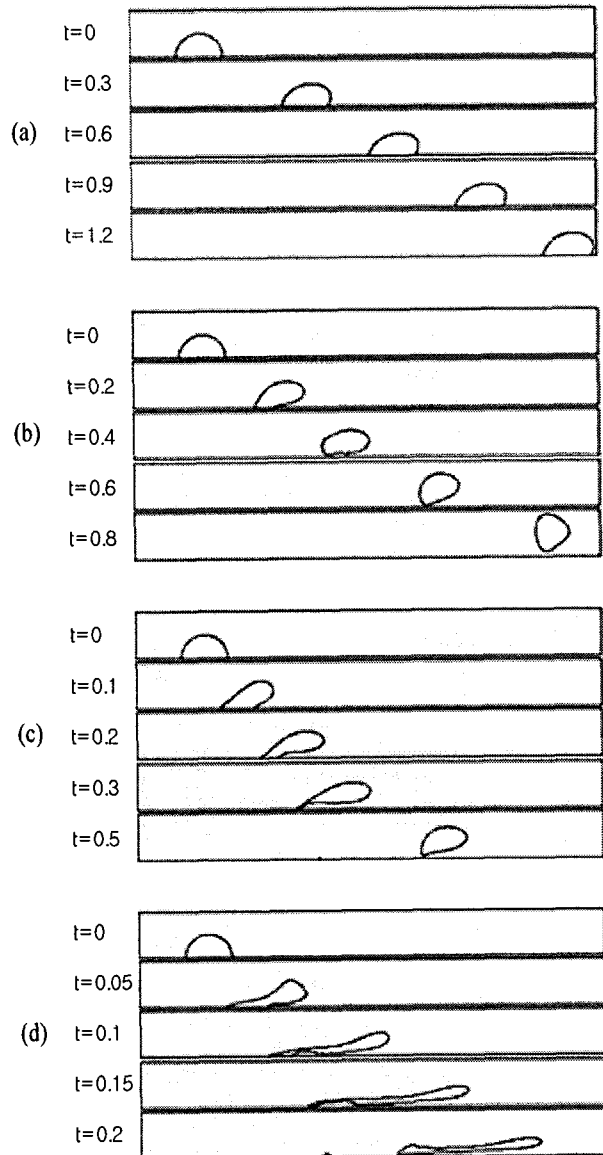


Fig. 3 Interface plot (a) reference case ($Re=100, We=5, V_{in}^*=1.0, \theta_{adv}=\theta_{rec}=90^\circ, \rho_G/\rho_L=0.01, \mu_G/\mu_L=0.1$) (b) decreased receding angle from reference case ($\theta_{rec}=60^\circ$) (c) increased Weber number from reference case ($We=10$) (d) increased inlet velocity from reference case ($V_{in}^*=3.0$)

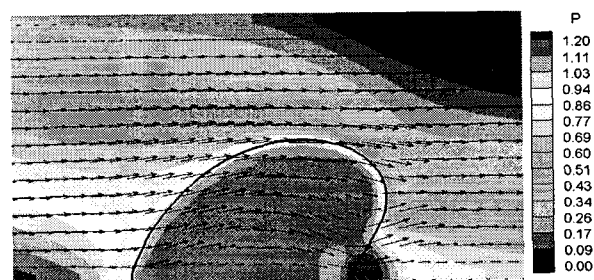


Fig. 4 Velocity and pressure distribution of reference case at $t=1.0$

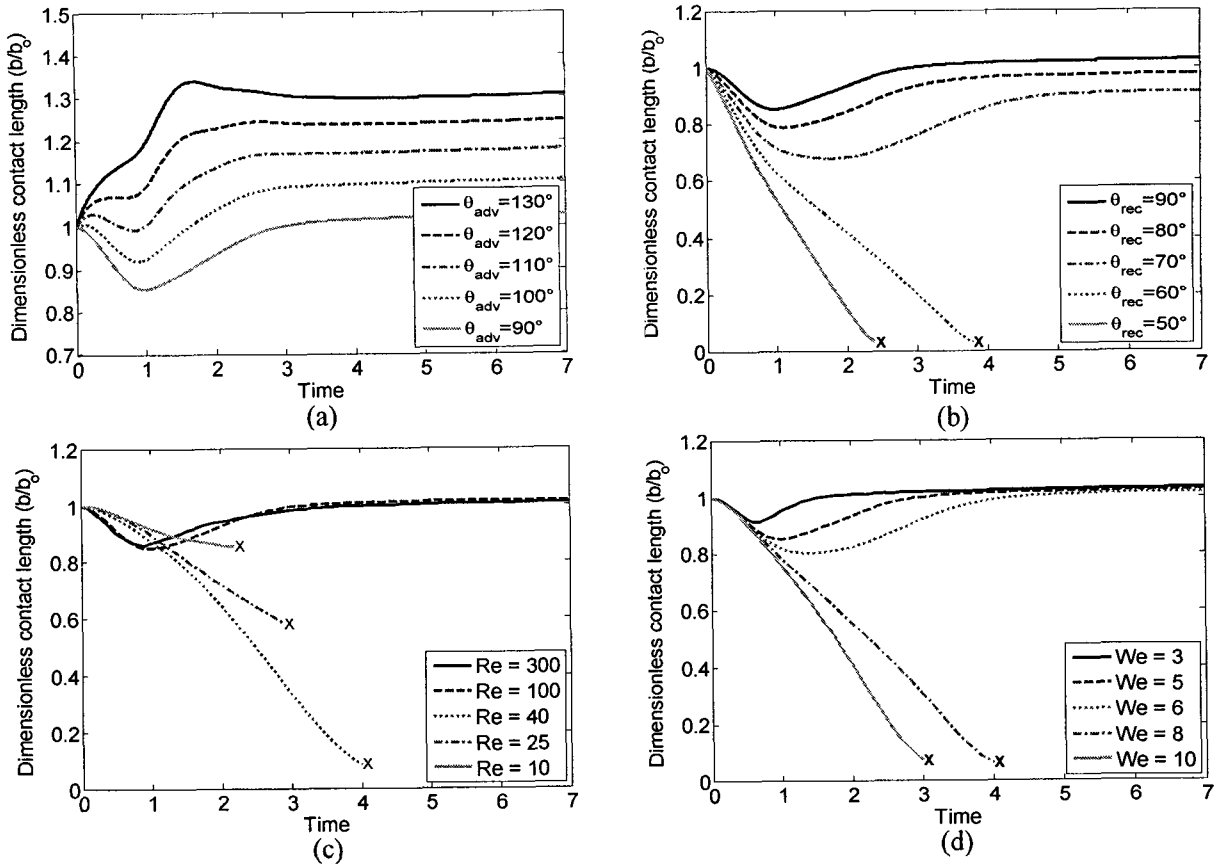


Fig. 5 Dimensionless contact length vs. time at different (a) θ_{adv} (b) θ_{rec} (c)Re (d)We

2.3 수치적분방법(numerical integration)

Navier-Stokes 방정식은 Chorin[12]의 projection method를 사용하여 시간에 따라 적분한다. 지배 방정식 (2)는 다음과 같이 이산화된다.

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\rho} (\mathbf{A}^n + \mathbf{F}^n) - \frac{1}{\rho} \nabla p \tag{8}$$

여기서 확산항과 대류항 및 중력항을 A항으로, 표면장력의 항은 F항으로 표현하였다. 운동량 방정식은 우선 다음과 같이 두 개의 항으로 분리된다.

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\rho} (\mathbf{A}^n + \mathbf{F}^n) \tag{9}$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \tag{10}$$

여기서 $\tilde{\mathbf{u}}$ 는 입력항의 영향을 생략한 경우의 새로운 속도 항이고, 식 (9)를 통해 다음 같이 계산된다.

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^n + \frac{\Delta t}{\rho} (\mathbf{A}^n + \mathbf{F}^n) \tag{11}$$

입력항은 식 (10)에 divergence를 취하고 질량보존 방정식을 적용함으로써 얻을 수 있다. 이는 압력에 대한 다음과 같은 Poisson 방정식을 만든다.

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} \tag{12}$$

Pre-conditioner로 Choleski decomposition이 사용된 BICGSTAB (Bi-conjugate gradient stabilized) 반복 수렴법이 압력장의 계산에 사용되었다[13].

다음 시간에서의 속도는 식 (10)을 이용하여 아래와 같이 구할 수 있다.

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}} - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla p \tag{13}$$

3. 결과 및 토론

본 연구에서 계산영역은 z방향으로 무한히 긴 2차원 채널로 가정하였다(Fig. 1). 무차원 지름이 1인 기포를 계산 초기에 반원의 형태로 입구근처에 배치하였고, 채널의 높이는 기포의 지름으로, 길이는 기포의 움직임이 충분히 관찰될 수 있을 정도의 길이인 지름의 10배 정도를 선택하였다. 위아래 벽면은 점착 조건을 사용하였고, 출구는 개방조건(open condition)을 사용하였다. 이러한 조건에서 실험변수가 되는 Reynolds 수, Weber 수, 전/후진 점착각, 물성치 비, 무차원 입구속도 등을 변화시켜서 그 차이점을 관찰하였다.

격자수에 따른 계산결과의 영향을 파악하기 위해 밀도비는 0.01, 점도비는 0.1, Reynolds 수는 100, Weber 수는 5, 기포반지름은 0.5, 전진각, 후진각을 모두 90°, 그리고 입구 무차원 속도는 1.0인 경우를 기준 조건으로 정하고, 격자의 수가 15×150, 30×300, 60×600인 경우에 대하여 시간에 따른 무차원 접촉길이의 변화를 관찰하였다(Fig. 2). 약간의 오차를 보이지만 계산시간을 고려하여 30×300의 격자수를 본 연구에서 기본격자수로 설정하였다. 이 경우 질량손실은 1.5%내외이고 기포의 시간에 따른 변화를 Fig. 3 (a)에 보였다. 또한 $t = 1.0$ 에서의 속도장 및 압력장을 Fig. 4에 나타내었다.

Fig. 5 (a), (b)는 전진각과 후진각의 변화에 따른 바닥면에서 기포의 무차원 접촉길이의 변화를 시간에 따라 나타낸 그림이다. 전진각의 경우 그 크기가 증가함에 따라 접촉길이가 더 커지면서 기포가 바닥에 더 밀착하게 된다. 후진각은 어느 정도의 범위까지는 접촉길이가 약간씩 작아지다가 어떤 임계값보다 작아지면 기포가 벽면에서 분리된다. 그림에서 알수있듯이 기포의 분리 과정에서 전진각 보다 후진각의 영향이 더 큰 것을 확인하였다. 후진각이 60°인 경우 시간에 따른 기포의 거동을 Fig. 3 (b)에 나타내었다. 기준조건과 비교하여 벽면 분리과정이 매우 빠르게 진행되는 것을 볼 수 있다.

기포 분리과정에서 Reynolds 수 및 Weber 수의 영향을 Fig. 5 (c), (d)에 나타내었다. Weber 수가 증가할수록 기포의 분리 과정이 빨리 진행되는 것에 비해, Reynolds 수는 그 값이 작아질수록 기포분리 과정에 대한 영향이 증가했다. Reynolds 수가 커질수록 외부유체의 점성력의 영향이 작아져 기포분리 과정에 대한 영향이 감소하였고, Weber 수가 증가함에 따라 표면 장력의 영향이 작아지므로 기포제거가 원활히 이루어졌기 때문이다. Weber 수가 10인 경우의 기포의 시간에 따른 궤적을 Fig. 3 (c)에 보였다. 후진각을 감소시킨 경우와 비슷하지만 분리되는 계면이 좀 더 길게 늘어짐을 보인다.

입구 무차원 속도의 변화에 따른 기포 접촉길이의 변화를 Fig. 6 (a)에 나타내었다. 입구 무차원 속도가 1.5정도에서 처음으로 기포분리가 일어났고 속도가 증가할수록 그 영향이

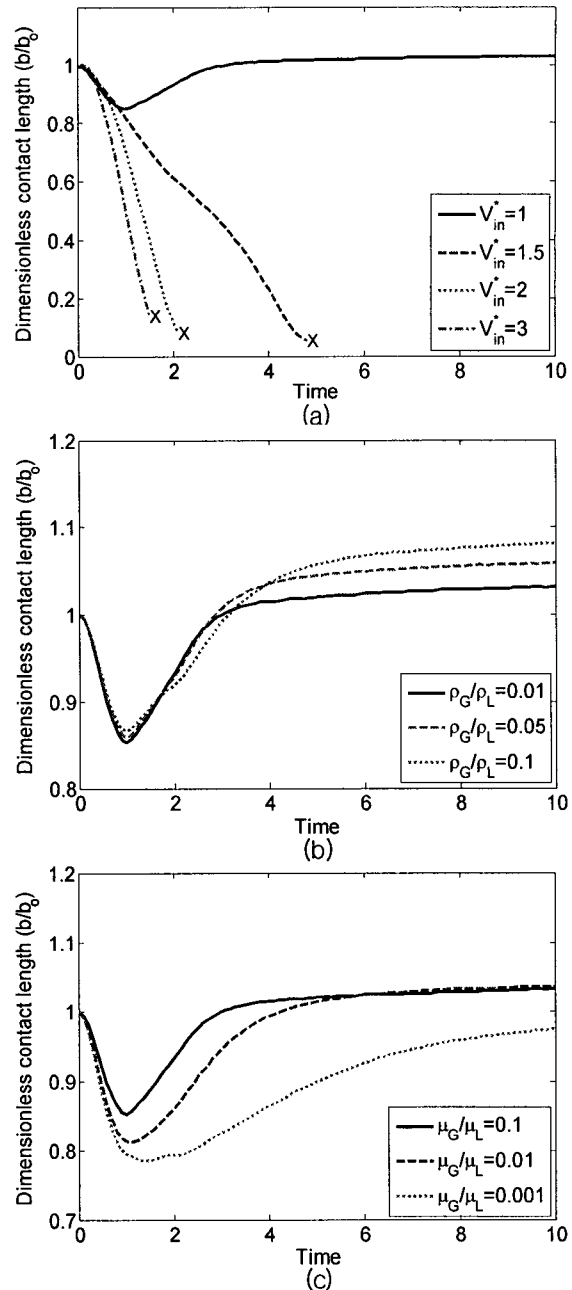


Fig. 6 Dimensionless contact length vs. time at different (a) V_{in}^* , (b) ρ_G/ρ_L , (c) μ_G/μ_L

커졌다. 이 경우 시간에 따른 기포의 움직임을 Fig. 3 (d)에 보였다. 입구유속이 증가하는 경우 기포가 매우 길게 늘어나면서 결국 분리되고, 벽면에 작은 기포를 남기게 된다.

물성치 변화의 영향은 Fig. 6 (b), (c)에서 관찰할 수 있다. 밀도비와 점도비의 변화는 기포 분리 과정에 거의 영향을 주지 않는다는 것을 확인하였다. 점도비 변화의 경우 접촉길이의 변화과정에서 시간적 차이를 약간 보이지만, 밀도비 변화의 경우 그 영향이 거의 없음을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구는 2차원 관내 유동장하에서 벽면에 부착되어 있는 기포의 분리과정에 대한 Reynolds 수, Weber 수, 물성치 비, 입구속도, 그리고 전진각 및 후진각 크기의 영향을 직접 수치 해석을 통해 파악하고자 하였다.

그 결과로 Reynolds수가 증가할수록 기포 제거가 어렵고 이동속도가 느려지고, Weber 수를 증가시킬수록 기포 제거가 더 효과적으로 이루어짐을 알 수 있었다. 접촉각은 전진각보다는 후진각의 변화가 기포 제거에 더 큰영향을 주었고, 입구 속도를 증가시킬수록 기포제거가 더 원활히 일어남을 확인하였다. 마지막으로 물성치 변화에 대한 영향은 거의 없었다.

본 연구는 2차원 관내 유동에 국한된 경우로 좀 더 정확한 현상의 파악을 위해 3차원으로의 확장이 반드시 필요하다. 또한, 변수 선택 시 좀더 실제 디자인 조건에 적합한 값들의 선택이 필요하고, 현재 이에 대한 연구가 진행 중이다.

후 기

이 논문은 2006년 정부(교육인적자원부)의 재원으로 한국 학술진흥재단의 지원을 받아 수행된 연구임(KRF-2006-331-D00063).

참고문헌

- [1] 2003, Meng, D., Kim, J., and Kim C., "A distributed breather for micro direct methanol fuel cell," *Proc. IEEE Int. Conf. Micro Electro Mechanical Systems* (Kyoto January), pp.534-537.
- [2] 2006, Meng, D., Kim, J., and Kim C., "A degassing plate with hydrophobic bubble capture and distributed venting for microfluidic devices," *J. Micromech. Microeng.*, Vol.16, pp.419-525.
- [3] 2002, Shukla, A.K., Jackson, C.L., Scott, K., and Murgia, G., "A solid-polymer electrolyte direct methanol fuel cell with a mixed reactant and air anode," *J. Power Sources.*, Vol.111, pp.43-51.
- [4] 2002, Kang, Q., Zhang, D., and Chen, S., "Displacement of a two- dimensional immiscible droplet in a channel," *Physics of fluids.*, Vol.14, pp.3203-3214.
- [5] 2005, Kang, Q., Zhang, D., and Chen, S., "Displacement of a three- dimensional immiscible droplet in a duct," *J. Fluid Mech.*, Vol.545, pp.41-66.
- [6] 2006, Zhang, J., Miksis, M., and Bankoff, S., "Nonlinear dynamics of a two- dimensional viscous drop under shear flow," *Phys of fluids.*, Vol.18, pp.072106.
- [7] 2005, Norman C. and Miksis, M., "Gas bubble with a moving contact line rising in and inclined channel at finite reynolds number," *Physica D*, Vol.209, pp.191-204.
- [8] 2001, Tryggvson, G., Bunner, B., Esmaeeli, A., Juric, D., Al-Rawahi, N., Tauber, W., Han, J., Nas, S., and Jan, Y., "A front tracking method for the computations of multiphase flow," *J. Comput. Pys.*, Vol.169, pp.708-759.
- [9] 2002, Shin, S. and Juric, D., "Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity," *J. Comput. Phys.*, Vol.180, pp.427-470.
- [10] 2005, Shin, S., Abdel-Khalik, S., Daru, V., and Juric, D., "Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method," *J. Comput. Phys.*, Vol.203, pp.493-516.
- [11] 2007, Shin, S. and Juric, D., "High order level contour reconstruction method," *J. Comput. Phys.*, Vol.180, pp.427-470.
- [12] 1968, Chorin, J., "Numerical solution for the Navier -Stokes equations," *Math, Comput.*, Vol.22, pp.745-762.
- [13] 2003, H.A., Van der vorst, "Iterative krylov methods for large linear systems," *Cambridge Monographs on Appliea and Computational Mathematics.*