

3차원 무작위 걸음마 입자추적 모형을 이용한 거친 균열에서의 용질이동에 관한 수치적 연구

A Numerical Study on Solute Transport in Rough Fracture using 3-D Random Walk Particle Tracking Model

정우창* · 박영진** · 최인호*** · 송재우****

1. 서 론

단일 균열에서의 용질이동은 2차원 또는 3차원으로 고려될 수 있다. 2차원에서는 유체가 균열내를 일정한 유속분포를 나타내며 흐른다고 가정하는 것이며, 3차원에서는 그림 1에서처럼 포물선 형태의 유속분포를 도입할 필요가 있으며, 이러한 유속분포는 식 (1)로 표현된다.

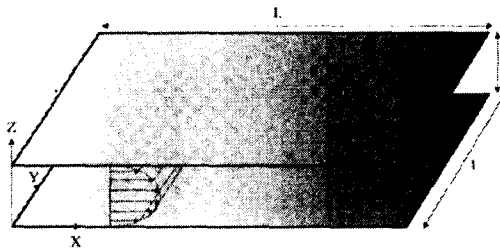


그림 1. 단일 균열내 포물선 형태의 유속분포

$$u_x(z) = \frac{3}{2} U \left(1 - \frac{4z^2}{a^2} \right) \quad (1)$$

여기서, $U[m/s]$ 는 평균유속이며, $a[m]$ 는 간극이다. 식 (1)은 서로 마주보는 균열벽에서는 유속이 0이며, 중심에서 $\frac{3}{2} U$ 가 됨을 의미한다.

그림 1에서처럼 균열의 길이가 L 이며 평균유속이 U 일 때 Hull 등(1987)은 유체흐름의 조건에 대한 몇 가지 기준을 제시하였다. 만약 체류시간이 임계시간 $\left(\frac{L_{crit}}{U} = \frac{6a^2}{\pi^2 D_m} \right)$ 보다 작으면, 용질이동은 non-fickian 형태를 나타내며, 3차원으로 처리해야 하며, 반대의 경우 즉, 분자확산이 큼으로 인해 용질의 농도가 균질하게 될 때 용질이동은 fickian 형태를 나타내며, Taylor-Aris의 분산(Aris, 1956)을 이용하면서 2차원으로 처리할 수 있다. 본 연구에서는 전자의 경우에 대한 3차원 무작위 걸음마 모형의 개발을 통해 균열 내를 이동하는 용질이 균열벽면의 거칠기와 입자의 크기에 따라 변화되는 거동양상을 조사하였다.

2. 거친 균열의 발생

본 연구에서 사용된 균열은 64×64 의 격자망으로 이루어진 $10cm \times 10cm$ 의 정사각형이며, self-affine 프랙탈 기법을 이용하여 균열벽의 거칠기를 표현하였다. 거칠기의 분포는 통계학적 매개변수인 평균과 표준편차를 통해 발생되며, 거칠기의 정도는 프랙탈 차원에 의해 표현된다. 균열 내의 간극분포는 서로 마주보는 두

* 홍익대학교 토목공학과 겸임교수
** 서일대학 토목과 조교수
*** 서일대학 토목과 부교수
**** 홍익대학교 토목공학과 교수

개의 균열벽면의 거칠기를 표현하기 위해 사용된 두 평균값 사이에 간격 a 로써 정의된다. a 가 감소함에 따라 부분적으로 서로 접하는 영역이 발생되며, 이를 흐름이 발생되지 않는 접촉영역으로 고려하였다. 그림 2는 프랙탈 차원이 2.3, 거칠기 분포의 평균값이 $1.0 \times 10^{-4} \text{m}$, 표준편차가 $5.0 \times 10^{-5} \text{m}$ 그리고 a 가 $1.0 \times 10^{-4} \text{m}$ 일 때 발생한 거친 균열을 나타낸 것이다.

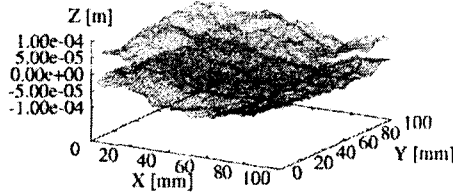


그림 2. 서로 마주보는 두 개의 프랙탈 균열벽의 발생을 통한 거친 균열

3. 유속장의 발생

본 연구를 통해 개발된 3차원 무작위 걸음마 모형을 적용하기 위해서는 구성된 각각의 격자망에서의 유속 $u_x(z)$ 와 u_y 를 결정할 필요가 있다. 이를 위해 정상상태의 흐름조건과 주어진 경계조건을 통해 5절점 유한차분법을 이용하여 x 방향과 y 방향에 대한 유속벡터를 구하였다(Jeong 등, 2001).

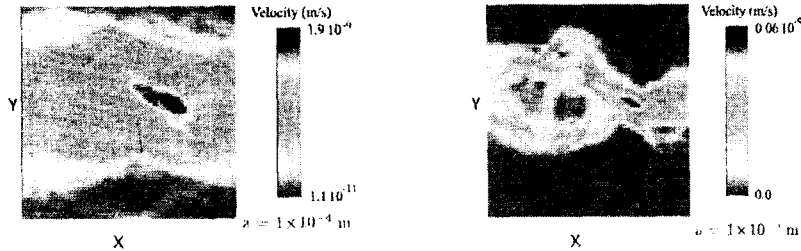


그림 3. 평균간극 $1.0 \times 10^{-4} \text{m}$ (좌측)과 $1.0 \times 10^{-5} \text{m}$ (우측)으로부터 계산된 유속장

그림 3은 평균간극 $1.0 \times 10^{-4} \text{m}$ (좌측)과 $1.0 \times 10^{-5} \text{m}$ (우측)으로부터 계산된 유속장을 나타낸 것으로서 평균간극 a 가 감소함에 따라 접촉영역이 나타나며, 흐름은 이러한 접촉영역을 우회하면서 진행되는 것을 볼 수 있다.

4. 3차원 무작위 걸음마 모형

본 연구에서 사용된 3차원 무작위 걸음마 모형은 다음과 같이 표현된다.

$$X^j = \sum_{i=0}^{n-1} [u_x^i(z^j) dt + \delta \xi_{i,D_n}^x] \quad (2)$$

$$Y^j = \sum_{i=0}^{n-1} [u_y^i dt + \delta \xi_{i,D_n}^y] \quad (3)$$

$$Z^j = \sum_{i=0}^{n-1} (\delta \xi_{i,D_n}^z) \quad (4)$$

여기서, $\delta \xi_{i,D_n}$ 는 평균 0과 표준편차 $\sqrt{2D_m dt}$ 의 Gaussian 분포를 가지는 난수이며, $D_m [m^2/s]$ 은 분자확산계

수이며, Stokes-Einstein 방정식을 통해 각각의 입자직경에 따라 독립적으로 계산된다.

5. 모형의 거동

본 절에서는 용질이동과 확산에 대한 균열벽의 거칠기 그리고 입자의 크기에 대한 영향을 3차원 무작위 걸음마 모형의 적용을 통해 고찰한다.

그림 4는 네 가지 서로 다른 프랙탈 차원(D_f)에 대해 파과곡선의 양상(좌측)과 시간에 따른 종방향 확산 계수의 변화(우측)를 나타낸 것이다. 사용된 평균간극과 표준편차는 각각 $1.0 \times 10^{-4}m$ 와 $5.0 \times 10^{-4}m$ 이다. D_f 는 각각 2.0, 2.3, 2.5 그리고 2.9이다.

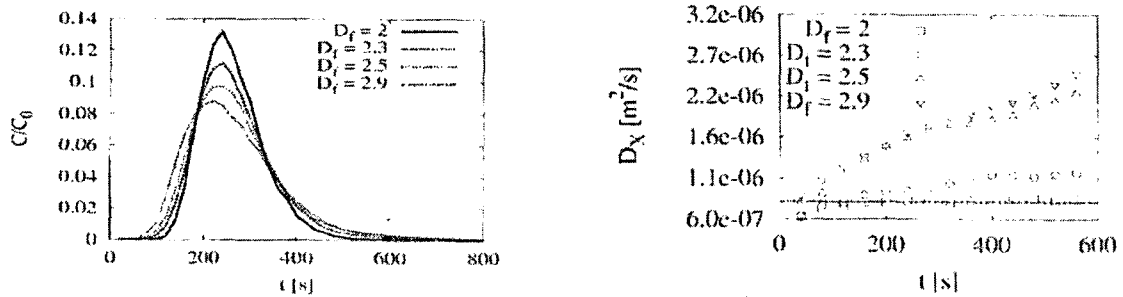


그림 4. 서로 다른 프랙탈 차원(D_f)에 대한 파과곡선(좌측)과 종방향 확산계수의 시간에 따른 변화(우측)

프랙탈 차원이 증가할수록 균열벽의 거칠기는 증가하며, 그에 따라 그림 4의 좌측에서 알 수 있듯이 입자들은 평균적으로 보다 빠르게 이동되며, 보다 확산되는 경향을 나타낸다. 이러한 확산경향은 그림 4의 우측에 나타난 것처럼 계산된 종방향 확산계수를 통해서도 알 수 있다. D_f 가 2.0의 매우 매끄러운 균열벽의 경우 종방향 확산계수값은 매우 빠르게 접근값에 도달하며, 2.3인 경우 접근되는 경향을 보이나 2.0보다 덜 빠르게 도달된다. 그러나 D_f 가 2.5와 2.9인 경우 확산계수값은 접근되는 경향이 없으며, 계속적으로 증가하는 양상을 나타낸다. 이러한 현상은 Grindrod와 Lee(1996)의 결과와 일치한다. 결국 프랙탈 차원이 증가함에 따라 유속장은 보다 비균질화되며, 이에 따라 입자의 확산도 증가한다.

다음은 입자의 직경에 대한 영향으로써 본 연구에서 사용된 입자의 직경은 1.0, 10.0, 100.0 그리고 1000.0 nm. 용질입자는 길이 10cm 그리고 폭 2.2cm 또한 $500\mu m$ 의 일정한 간극분포를 가진 균열을 통해 평균속도 $1.0 \times 10^{-5}m/s$ 이동한다. 본 수치실험에서는 다음과 같은 2가지 과정을 고려한다: i) 각각의 입자직경은 각각의 서로 다른 분자확산계수값을 포함하고 있으며, ii) 경계조건은 입자의 직경에 따라 다르게 적용된다.

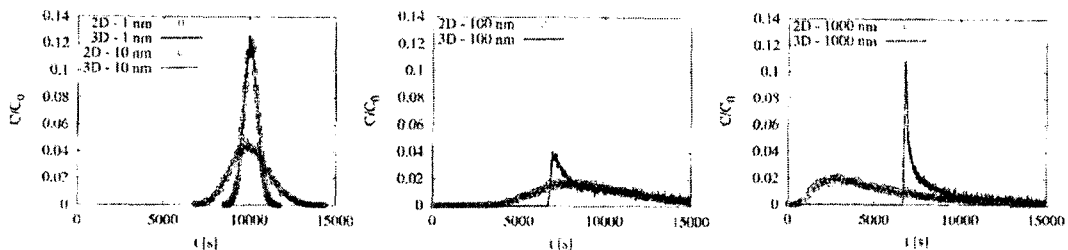


그림 5. 서로 다른 직경의 입자에 대한 2차원과 3차원 무작위 걸음마 모형으로부터 계산된 파과곡선

그림 5는 서로 다른 직경의 입자에 대한 3차원 무작위 걸음마 모형으로부터 계산된 파과곡선으로 2차원 모형으로부터 얻어진 결과와 비교한 것이다. 입자직경 1.0과 10nm의 경우 두 모형으로부터 계산된 결과는 거의 동일하다. 이는 입자직경이 1.0nm인 경우 분자확산계수는 $1.87 \times 10^{-10} m^2/s$ 이며, 10.0nm인 경우 분자확산계수는 $1.87 \times 10^{-11} m^2/s$ 이며, 이들 값들에 해당되는 임계시간은 각각 812와 8127초로 평균체류시간 10000초보다 작다. 따라서, 이런 경우 Taylor-Aris의 확산법칙이 적용될 수 있다. 100 그리고 1000nm의 보다 큰 직경의 입자의 분자확산계수는 각각 $1.87 \times 10^{-12} m^2/s$ 그리고 $1.87 \times 10^{-13} m^2/s$ 이며, 이에 대한 임계시간은 81273과 812736초이다. 이는 평균체류시간보다 큰 값이며, Taylor-Aris의 확산법칙이 적용될 수 없다.

2차원 무작위 걸음마 모형은 Taylor-Aris의 확산계수가 입자의 크기에 따라 증가하기 때문에 입자의 도달시간은 매우 짧다. 이러한 결과는 평균유속 U 는 $-\left(\frac{a}{2} - r\right)$ 과 $\left(\frac{a}{2} - r\right)$ 사이에서 계산된다는 사실에 기인한다. 여기서 $r[m]$ 은 입자의 반경이다. 그 대신 3차원 무작위 걸음마 모형은 중심에서의 유속 $\left(\frac{3}{2}U\right)$ 보다 빠르게 이동되지 않는 입자를 부여한다. 이론적인 도달시간은 $\frac{2L}{3U}$ 를 통해 계산되며, 계산된 값은 6666.6초이다. 이는 그림 5에서처럼 3차원 모형을 통해 얻어진 결과와 거의 일치한다. 두 모형 사이의 이러한 차이는 서로 다른 확산계수를 이끈다. 즉, 100nm의 입자직경일 경우 2차원 모형에서는 $D_x = 6.36 \times 10^{-8} m^2/s$ 그리고 3차원 모형에서는 $D_x = 4.30 \times 10^{-8} m^2/s$ 그리고 1000nm의 입자직경일 경우 2차원 모형에서는 $D_x = 6.36 \times 10^{-7} m^2/s$ 그리고 3차원 모형에서는 $D_x = 8.64 \times 10^{-8} m^2/s$ 이다. 따라서, 2차원 무작위 걸음마 모형이 3차원 모형보다 확산계수를 과대평가하는 경향이 있다.

6. 결 론

본 연구에서는 거친 균열에서의 유체흐름을 통한 용질이동에 대한 3차원 무작위 걸음마 모형을 개발하였으며, 수치모의 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

- ① 2차원 모형과 3차원 모형의 선택은 고려된 문제(입자의 크기, 균열의 차원 등)에 따라 매우 중요하다.
- ② 균열의 거칠기가 증가할 때 유로화 현상이 지배적이며, 입자는 보다 빨리 도달되며, 확산은 증가한다.
- ③ 보다 큰 직경의 입자가 평균적으로 보다 빠르게 이동하며, 그에 따라 확산도 커진다.

참고문헌

- Aris R. (1956). *On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube*, Proc. Roy. Soc. London A 235, pp. 67-77
- Jeong W.-C., Cho Y.-S. Song J.-W. (2001), "A Numerical Study of Fluid Flow and Solute Transport in a Variable-Aperture Fracture Using Geostatistical Method", Journal of KSCE Civil Engineering, Vol. 5, No. 4, pp. 357-369
- Hull L.C., Miller J.D., Clemo T.M (1987). "Laboratory an simulation studies of solute transport in fracture network", Water Resources Research, Vol. 23, No. 8, pp. 1505-1513