

마이크로 반응기에서의 수치해석

한국에너지기술연구원

이승재

마이크로 채널을 가지는 마이크로 장치와 기존의 매크로 스케일의 장치를 비교하여 보면 다음과 같은 차이를 보인다.

- 매크로 스케일의 장치에서 유체의 흐름은 난류인 반면, 마이크로 장치내에서의 흐름은 층류이다.
- 마이크로 장치에서는 열과 물질 전달을 위한 확산거리가 작아 열이나 물질 전달의 영향을 받는 반응에 유리하다.
- 마이크로 구조를 가지는 마이크로 장치는 부피에 대한 표면적의 비가 매우 커서 부피에 의한 영향보다는 표면에 의한 영향이 지배적이다.
- 매크로 스케일의 장치와 비교 했을때 상대적으로 마이크로 구조의 재료에 의해 큰 영향을 받아 고체 열전달과 같은 중요한 역할을 하게 된다. 그러므로 마이크로 장치의 설계시 이를 고려하여야 한다.

이러한 마이크로 구조를 가지는 장치는 위의 장점들을 살려서 높은 열 및 물질 전달이 필요한 분야에 여러 가지 목적의 반응기로 사용이 가능하다. 그러나 유체 흐름의 현상은 보다 다양하고 복잡한 가운데, 이러한 현상에서 물질 전달과 화학반응속도의 해석이 필요한 경우들이 많아 진다. 이에 대한 해결을 위하여 마이크로 반응기의 모델링과 수치해석이 필요하다. 매크로 스케일에서는 주로 유체의 흐름이 난류이므로 이를 해석하기 위한 난류 모델이 필요하다. 이러한 난류모델은 난류를 해석하고 예측하는데 많은 도움을 주었지만 난류에 대한 보편적인 모델을 얻기는 어렵다. 반면, 마이크로 구조를 가지는 반응기에서는 유체의 흐름이 층류이므로 반드시 난류모델을 필요로 하지는 않으며, 수치해석을 통하여 비교적 높은 정확도로 유체 흐름을 예측할 수 있다.

1. 마이크로 채널에서의 유체 흐름 영역

우선 마이크로 유체의 시스템을 모델링 하는데 있어서, 한가지 고려하여야 할 것은 매크로 스케일에서 사용해오던 기존의 식들을 마이크로 스케일의 유체 흐름과 열 및 물질 전달을 해석하는데 사용할 수 있는가 하는 문제이다. 대개의 화학공정을 위한

마이크로 구조는 10 μm 이하는 드물며, 100 μm 범위 내의 크기를 가진다. 마이크로 구조 내에서 기체의 흐름에 대한 해석을 위해서는 Navier-Stokes 식과 같은 continuum 흐름에 관련된 식들을 사용할 수 있는지 판단하는 것이 중요하다. 이러한 판단을 위해서는 다음과 같이 정의 되는 Knudsen number의 값을 이용한다.

$$\text{Kn} = \lambda/L$$

Kn은 두개의 길이 개념의 값에 대한 비로 나타나는데, λ 는 분자의 평균 자유 이동거리이며, L은 채널의 지름과 같은 유체 흐름에 대한 특성 길이이다. Kn의 값에 따라 유체의 흐름이 다음과 같이 구분될 수 있다.

- $\text{Kn} \leq 10^{-2}$: continuum flow with no-slip boundary conditions
- $10^{-2} < \text{Kn} \leq 10^{-1}$: continuum flow with slip boundary conditions
- $10^{-1} < \text{Kn} \leq 10$: transition flow
- $\text{Kn} > 10$: free molecular flow

앞의 두개 경우에 대해 Navier-Stokes 식을 사용할 수 있으며, 특히 두 번째의 경우에는 수정된 경계조건이 사용된다. 앞에 제시된 구분 경계값은 정의된 값들이 아닌 경우에 따라 달라질 수 있는 값이지만, 실제의 경우에 적용 가능한 값들을 제시하고 있다. 적절한 경계조건을 가지고 운동량, 열 및 물질 전달을 위한 continuum 모델식들의 numerical solution을 얻기 위해서 CFD (computational fluid dynamics)를 사용한다. 이러한 물리적 모델과 매우 높은 정확도의 해를 얻어내는 수학적 방법들의 사용은 마이크로 구조 내에서의 유체 흐름 현상에 대해 보다 자세한 정보를 얻을 수 있게 해주며, 마이크로 장치의 성능에 대한 보다 합리적인 예측이 가능하게 한다.

2. 직사각형 마이크로 채널에서의 유체 흐름

마이크로 채널에 흐르는 유체는 마이크로 채널의 기하학적 모양에 있어서 매크로 스케일에서의 유체와 다른 점을 갖는다. 매크로 스케일에서의 유체는 파이프와 같이 원형의 단면을 갖는 유로를 통해 전달되는 반면, 마이크로 채널은 제작 방법에 따라 직사각형이나 사다리꼴의 단면 모양을 갖는다. 그리고, 마이크로 반응기의 경우에는 대개 여러개의 평행한 마이크로 채널에 유체를 고르게 분배하기 위한 유체 유입부가 준

채한다. 먼저 직사각형의 마이크로 채널에서 유체의 흐름을 살펴보면, 비압축성 층류의 가정하에 analytical solution이 얻어질 수 있다. 그러나 series expansion의 형태로 나타나는 유속분포식은 실제 적용이 용이하지 않아 다음과 같은 approximate solution의 형태로 사용된다.

$$u(x, y) = u_{\max} \left[1 - \left(\frac{x}{a} \right)^s \right] \left[1 - \left(\frac{y}{b} \right)^r \right]$$

여기서 실제 직사각형 채널의 폭과 깊이는 각각 $2a$ 와 $2b$ 이며, u 는 local flow velocity, u_{\max} 는 maximum velocity 이고, s 와 r 은 b/a 에 의존하는 값이다. 종종 유속의 분포 보다 주어진 채널 길이에 대한 압력강하를 결정하기 위한 마찰계수가 중요할 수 있다. 이러한 마찰계수는 직사각형의 채널에 대해 다음과 같이 유도된 단순화된 식을 사용하여 계산된다. 이와 같이 계산된 마찰계수는 analytical solution과 0.05% 이하의 차이를 보여 매우 정확한 값을 얻을 수 있다.

$$f = \frac{24}{\text{Re}} \left(1 - 1.3553\alpha + 1.9467\alpha^2 - 1.7012\alpha^3 + 0.9564\alpha^4 - 0.2537\alpha^5 \right)$$

여기서 α 는 1이하로 정의되는 aspect ratio이며, Reynolds number (Re)에 들어가는 길이는 hydraulic diameter이다. 직사각형 채널에 대한 대부분의 유속분포식은 유체의 흐름이 완전히 발달된 상태로 가정한다. 즉 유체가 흐르는 방향에 대해 유속의 변화가 없다고 가정하는 것이다. 그러나 이러한 가정은 채널의 입구 부분에 대하여 유효하지 않으며, 실제 입구에서의 유속분포가 점차 완전 발달된 유속분포로 변화하게 된다. 마찬가지로 압력강하와 마찰계수 또한 완전발달된 흐름에서와 입구부분에서 차이를 보인다. 일반적으로 입구 흐름에서의 단위길이당 압력강하가 완전발달된 흐름에서의 것보다 더 큰 것으로 나타난다.

3. 다중 마이크로 채널에서의 유체 분포

마이크로 채널은 열교환이나 화학반응을 위하여 여러개의 마이크로 채널이 평행하게 배열하게 된다. 이때 가장 큰 문제가 되는 것이 각각의 마이크로 채널에 유체를 균등하게 흐르도록 하는 것이다. 잘못된 유체의 분배는 마이크로 채널마다 체류시간이 달

라져 마이크로 반응기 내에서 일어나는 화학반응에 대해 원하는 생성물의 분포를 얻기 어렵다. 또한 다른 여러 부반응이 일어나 부산물이 생성되는 경우에는 생성물의 선택도를 높이기 위하여 반응 영역에서의 유체 접촉시간을 가능한 잘 조절하여야 한다. 이렇게 각각의 마이크로 채널에 균일한 유체의 분배를 위하여 가장 많이 사용되는 방법은 폭이 넓은 유입구로부터 좁은 마이크로 채널로 유체가 흐르도록 디자인하는 것이다. 이러한 3D의 다중 채널 모델을 2D로 단순화하여 계산한 결과, Reynolds number가 매우 낮은 30이하인 범위에서도 유체 분배를 위한 유입부에서 유체가 재순환되는 영역이 나타나는 것으로 보고 되었다. 또 다른 연구에서는 유체의 재순환 영역이 존재함에도 불구하고, 서로 다른 채널 사이에 약 2%의 유속의 변화가 있음이 CFD 수치해석을 통해 조사되었다. 그밖에 마이크로 채널에 균일한 유속을 분배하기 위한 유입부의 형태에 따른 영향이 조사되었다. 이때, 유체의 흐름이 등압이고 재순환 영역이 없다면 각각의 마이크로 채널에 대해 세부영역으로 나누어 단순한 계산이 가능하다. 이러한 계산 결과로부터 서로 다른 마이크로 채널에서의 유속이 0.1 % 이하의 차이를 보이는 최적화된 유체 유입부의 형태를 제시하였다. 그러나 다중 채널을 가지는 반응기에 대하여 저차원의 모델을 사용하는 접근은 효과적인 방법일 수는 있지만, 사용범위에 있어서 매우 제한적이다. 특히 앞서 언급한 바와 같이 유체의 재순환 영역이 존재하는 경우에는 이러한 단순한 가정에 의한 접근이 불가능하다.

4. 마이크로 반응기에서의 열전달

마이크로 반응기에 있어서 열교환 현상은 마이크로 반응기 내에서 열적 확산거리가 짧은 이유로 열전달과 온도 분포의 조절이 가능하다는 점에서 중요하다. 이러한 점에서 공정의 설계시 열전달 현상에 대한 모델링과 수치해석을 이용하여 합리적인 예측을 할 수 있도록 하는 것이 중요하다. 대개 마이크로 반응기 내부의 온도 분포를 수치해석으로 얻을 때는 유체와 고체 벽 물질에서의 온도장을 고려하게 된다. 특히 마이크로 반응기에서 고체 벽의 물질에 의한 영향이 기존의 매크로 스케일에서의 영향보다 크게 작용하므로 수치해석에서 이에 대한 고려가 필요하다.

열전달에 대한 지배방정식은 대류와 확산에 의한 항들로 구성된다. 대개 유체에 대해서는 대류현상이 지배적이며, 고체 벽에 대해서는 대류현상은 없고 오로지 전도현상에 의해서만 열전달이 일어난다. 때때로 에너지 방정식 또는 엔탈피 방정식으로 불리우는 열전달 방정식은 다음과 같이 나타낸다.

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u_i \frac{\partial e}{\partial x_i} \right) + p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \dot{q}_v + \dot{q}$$

여기서 e 는 열에너지 밀도, ρ 는 mass 밀도, u_i 는 유속, p 는 압력, T 는 온도, k 는 열전도도, \dot{q}_v 는 viscous dissipation에 의한 열원, \dot{q} 는 그밖의 열원을 나타낸다. 비압축성 유체에 대해 다음과 같이 단순화된 방정식이 사용될 수 있다.

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho C_p} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \dot{q}_v + \dot{q} \right]$$

여기서 C_p 는 정압 비열이며, viscous dissipation항은 다음과 같이 유체 운동에너지가 열로 전환되는 것으로 표현될 수 있다.

$$\dot{q}_v = \frac{\mu}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right)^2$$

여기서 μ 는 dynamic viscosity이다. 한가지 강조할 것은 앞의 엔탈피 방정식이 가장 일반적인 형태는 아니라는 점이다. 가령, 열전도도가 매체에 대해 비등방성일 수 있으며, 따라서 열전도도는 scalar 형태가 아닌 tensor의 형태로 표현되어야 할 것이다.

Navier-stokes 방정식과 엔탈피 방정식을 함께 푸는 것은 매우 복잡한 일이다. 일반적으로 점도가 온도의 함수이므로 비압축성 유체일지라도 이러한 복잡성은 마찬가지이다. 그러나 많은 경우에 있어서 이 같은 상호의존성이 무시될 수 있다. 예를 들어 마이크로 유체 시스템에서 온도 변화가 매우 작아 점도가 일정하다고 가정될 수 있다. 이 같은 경우에 속도장은 온도장과 독립적으로 해석될 수 있다. 계산된 속도를 앞의 엔탈피 방정식에 삽입하고, 에너지 밀도 e 를 온도 T 로 표현할 때, 비열이 온도에 일정하다면 엔탈피 방정식은 T 에 대해 선형적으로 나타난다. 이 같은 방법으로 비선형 Navier-stokes 방정식보다 훨씬 쉽게 계산할 수 있다.

일반적으로 많은 형태를 보이고 있는 직사각형의 채널에서 열전달 현상이 많이 조사되고 있다. 유속 분포의 경우와 같이 직사각형의 채널에서의 온도 분포도 analytical solution을 구할 수 있다. 그러나 하나의 채널 형태에서 온도 분포를 얻는 것은 유속분

포를 얻는 것보다 매우 복잡한 문제가 있다. 유속에서는 채널 벽에서 zero velocity 경계 조건을 줄 수 있으나, 온도장에서의 벽 경계 조건값은 여러 가지가 될 수 있다. 벽에서의 경계값으로 heat flux나 한 온도를 줄 수도 있고, 한편으로는 직사각형의 네 개의 벽에 대해 서로 다른 경계 조건을 줄 수도 있다. 이러한 복잡성 때문에 열전달과 관련하여 다음과 같이 정의되는 Nusselt number가 사용된다.

$$Nu = hD_h/k$$

여기서 D_h 는 hydraulic diameter, k 는 열전도도, h 는 열전달계수이다. Nusselt number는 열전달 효율과 관련된 무차원양으로 열적 흐름과 수력학적 흐름의 발달 정도와 경계조건에 따라 그 값이 달라진다.

참고문헌

- Volker Hessel, Steffen Hardt and Holger Löwe, “Chemical Micro Process Engineering – Fundamentals, Modelling and Reactions”, Wiley-VCH, 2004