

〈 논문 〉

# 마이크로 믹서에서 와도 지수에 의한 비용해성 물질의 혼합 예측

맹주성<sup>†</sup> · 조일대\* · 김범중\*

(2004년 10월 7일 접수, 2004년 12월 10일 심사완료)

## Prediction of Degree of Mixing for Insoluble Solution with Vortex Index in a Passive Micromixer

Joo-sung Maeng, Il-dae Cho and Bum-joong Kim

**Key Words :** Vortex Index(와도지수), Mixing Index(혼합지수), Chaotic Advection(혼돈류), Passive Micromixer(정적 마이크로믹서), Insoluble Solution(비용해성 용액)

### Abstract

The "Mixing Index( $D_1$ )" is used as a conventional guidance measuring the degree of mixing for multiphase flows. For the case when insoluble solutions flow in a passive micromixer, a new method to calculate  $D_1$  is proposed. The "Vortex Index( $\Omega_1$ )" is suggested and formulated. We infer that  $\Omega_1$  relates to the degree of chaotic advection. Various arbitrary shaped microchannels were tested to calculate the  $D_1$  and  $\Omega_1$ , and then a simple algebraic equation,  $D_1 = A \exp(B\Omega_1)$ , is obtained. This equation may be used instead of the conventional partial differential equation, concentration equation, to estimate the degree of mixing.

### 1. 서론

생화학분석, 의약품 수송, 생체학 등의 분야에서 사용하는 대부분의 미세유동 시스템에서 중요한 문제는 '어떻게 빠른 시간 내에 물질을 혼합시키는가?' 하는 것이다. 마이크로 영역에서는 분자확산만으로 혼합이 이루어지므로, 흔히 수십 마이크로 미터의 채널 폭을 가지는 유동에서는 혼합이 분자확산에 의해 빠르게 이루어 질 수 있다. 그러나 수백 마이크로미터의 채널 폭을 가지는 미소 유동에서는 분자 확산만으로 믹서에 이용하기에는 혼합시간이 너무 길어지게 된다. 따라서 수동형 믹서의 경우, 유동에 혼돈류(chaotic advection)를 발생시켜 혼합 효과를 강화한다.<sup>(1)</sup>

혼돈류는 흐르는 다상의 물질이 접하는 면을 다

양한 형태로 변화시키게되고 이 결과는 유체와 유체의 경계면을 증가시킬 수 있게 되어 확산 시간을 보다 크게 할 수 있을 뿐 아니라 속도 등 물리량의 구배를 변화시켜 보다 더 빠른 혼합을 유도하게 된다.

혼합의 정도를 알려주는 지표로는 보통 혼합지수( $D_1$ )를 사용한다. 이 지수는 측정하고자하는 단면에서 그 단면의 평균농도 또는 최대농도로부터 각 점의 농도가 얼마나 편차를 가지고 있는지를 계산하는 것이다. 이때 농도는 크게 실험적 방법과 수치적 방법으로 구해진다.

실험적 방법에는 농도에 따라 형광이나 흡광 정도가 다른 물질의 빛의 강도를 측정하거나 굴절을 구배를 측정하여 농도를 구하는 광학적 방법이 주로 사용되고 있다.<sup>(2,3)</sup>

그리고 수치적 해석 방법으로는 질량수송방정식이나 농도방정식인 편미분 방정식을 계산하는 방법이 있다.<sup>(4,5)</sup>

본 연구는 비용해성 물질의 혼합에서 농도방정식으로부터 얻어진 혼합지수와 운동량방정식으로

<sup>†</sup> 책임저자, 회원, 한양대학교 기계공학부

E-mail : jsmaeng@hanyang.ac.kr

TEL : (02)2290-0439 FAX : (02)2298-4634

\* 한양대학교 대학원 기계공학과

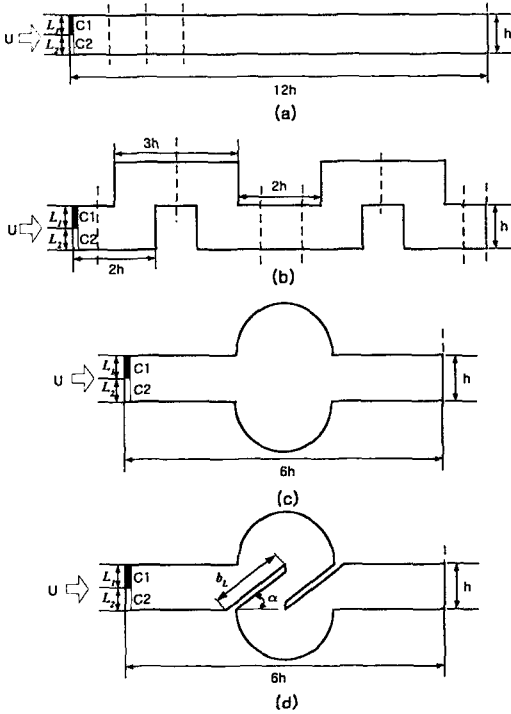


Fig. 1 Schematic view of model geometries for micromixers (a) model 1, (b) model 2, (c) model 3, (d) model 4

부터 얻어진 혼돈효과를 정량화한 값과의 상관관계를 규명한 것이다. 이 관계로부터 얻어지는 수식은 간단한 대수방정식임을 알게 되었고 ‘와도지수( $\Omega_7$ )’라는 용어를 새로이 정의하였다.

이 결과는 혼합지수를 얻기 위하여 편미분 방정식을 수치해석하는 번거로운 과정을 생략하게 해주어 매우 경제적이고 간편할 뿐만 아니라 기존의 학술적 접근 방법의 틀을 깨뜨리고 새로운 방법을 제시 한다는데 중요성이 있다.

## 2. 유동장과 농도장 계산

### 2.1 유동모델

유동장을 혼돈류로 만들기 위하여 다음과 같은 4 가지의 모델을 임의로 선정하였다(Fig. 1).

- (1) 모델 1: 직선형 미소채널(straight microchannel)
- (2) 모델 2: 사각파형 미소채널(square wave microchannel)
- (3) 모델 3: 단면변화형 미소채널(cross section changed microchannel)
- (4) 모델 4: 외팔보형 미소채널(cantilever type micro channel)

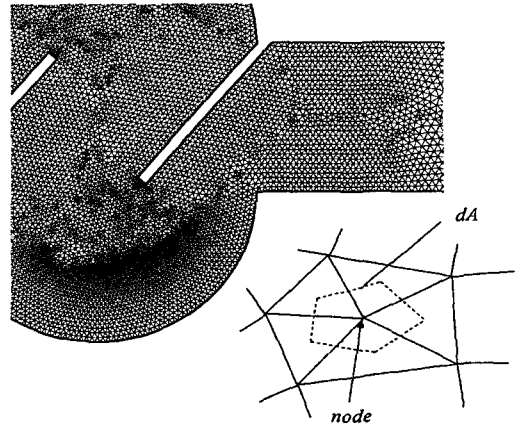


Fig. 2 Unstructured grid for the static mixer

모델 1은 순수히 확산에 의한 혼합이 이루어지는 것이며 모델 2는 확산에 혼돈류를 발생시킨 것으로 다른 모델들의 계산 값을 비교하기 위한 기본으로 하였다. 모델 4는 외팔보의 각과 길이를 변화시켜가면서 수많은 정보를 제공할 수 있도록 하였다.

### 2.2 지배방정식

비용해성 물질의 혼합에서 풀어야 할 방정식은 다음과 같다

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \tag{1}$$

$$\vec{V} \cdot \nabla \vec{V} + \nabla p = \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \vec{V} \quad (\text{Re} = \frac{Uh}{\nu}) \tag{2}$$

$$\vec{V} \cdot \nabla C = \frac{1}{\text{Pe}} \nabla^2 \vec{V} \quad (\text{Pe} = \frac{Uh}{D}) \tag{3}$$

여기서, 경계조건은

$$\text{채널 입구: } U = \text{일정} \quad \frac{C_2}{C_1} = 0.5 \tag{4}$$

$$\text{채널 벽면: } \vec{V} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \tag{5}$$

$$\text{채널 출구: } \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \tag{6}$$

여기서 C는 농도, D는 확산계수,  $\nu$ 는 동점성 계수 그리고 U는 유입속도, h는 채널의 폭을 나타낸다.  $C_1$ 과  $C_2$ 는 입구에 유입되는 두 물질 농도로서 계산을 위하여  $C_2/C_1 = 0.5$ 로 임의의 값을 택하였다. 또한 벽면에서의 농도조건은 zero-flux 조건을 사용하였다.<sup>(5,8)</sup>

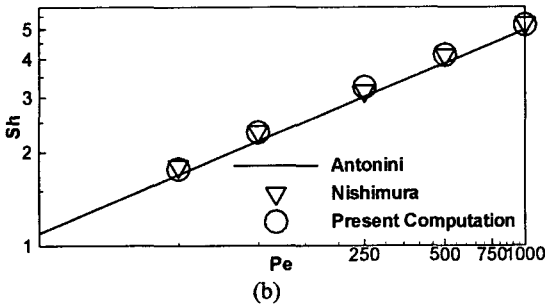
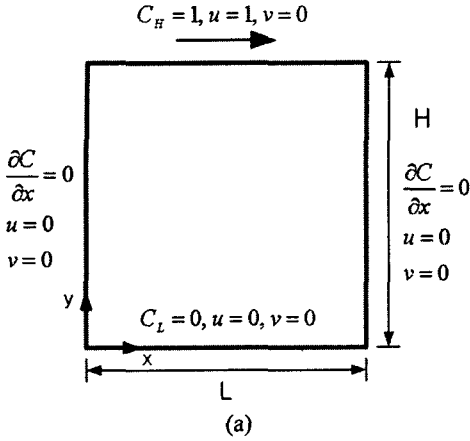


Fig. 3 (a) Schematic view of cavity and boundary condition (b) Comparison of the present and other Sherwood number for cavity

2.3 와도지수와 혼합지수

식 (2)로부터 혼돈류의 효과를 정량화하기 위하여 다음과 같은 새로운 수식을 제시하고

$$\Omega_i = \int_A \left| \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right| dA \quad (7)$$

이 수식을 ‘와도지수’라 명명하였다. 여기서 A 는 채널 입구로부터 혼합 정도를 알고자 하는 단면까지의 면적을 의미한다.

Fig. 2 는 식 (7)의 적분 면적을 보여주기 위한 것으로 dA 에 관한 상세한 설명을 참고문헌 (6)를 참조하기 바란다.

‘혼합지수’는 입구에서의 농도평균을 기준으로 각 단면에서의 표준편차 값을 사용하였으며 그 식은 다음과 같다.

$$D_i = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_i^* - \bar{C}^*)^2} \quad (8)$$

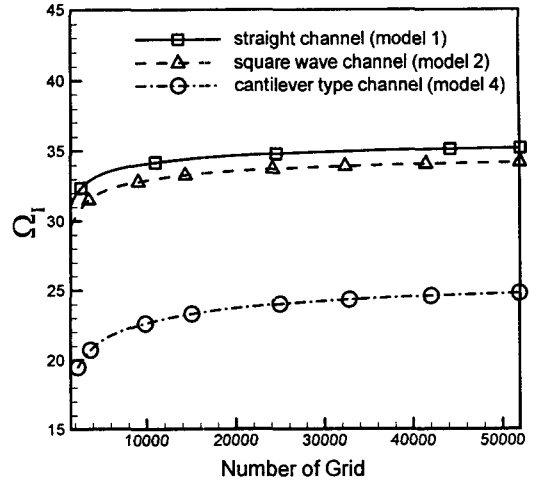


Fig. 4 Grid dependency of vortex index for models

$$C_i^* = \frac{C_i}{C_1}, \quad \bar{C}^* = \frac{C_1^* L_1^* + C_2^* L_2^*}{L_1^* + L_2^*}, \quad L_1^* = \frac{L_1}{h}, \quad L_2^* = \frac{L_2}{h}$$

여기에서  $C_i^*$ 는 기준 농도  $C_1$ 으로 무차원화 된 농도이며,  $\bar{C}^*$ 는 입구에서의 농도 평균을 그리고 N 은 단면에서의 노드 수를 의미한다. 또한  $L_1^*$ 와  $L_2^*$ 는 각각  $C_1$ 과  $C_2$ 의 농도가 유입되는 채널의 높이를 전체 채널 높이 h로 무차원화 것이다.

2.4 수치해석

유동장 해석을 위한 수치해석 기법은 참고문헌 (6)에 제시한 것을 활용하였고, 본 논문에서는 상세한 설명은 생략하기로 한다.

한편 농도방정식 해법에 대한 정밀도 검증은 Fig. 3에 나타내었다.<sup>(7,8)</sup> Fig. 3(a)는 검증에 사용된 cavity의 형상과 경계조건이며, Fig. 3(b)는 검증 결과로서 직선은 Antonini<sup>(7)</sup>의 실험값을 이용한 준이론적 수식의 결과이고, 삼각형은 Nishimura<sup>(8)</sup>의 수치해석 값을 표시한 것이다. 이때 벽면에서 물질 전달 비율로 사용되는 Sherwood 수는 다음과 같이 정의된다.

$$Sh = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{\partial C}{\partial y} dx \Big|_{y=0 \text{ or } H}$$

본 논문의 결과와 매우 잘 일치하고 있음을 알 수 있다.

Fig. 4는 와도지수를 이용한 각 모델의 격자의 의존성을 나타낸 것이다. 모델 1은 25000개, 모델 2

는 32300개, 그리고 모델 4 에 대해서는 32800개의 격자를 사용하여 계산하였다. 이것은 전체 격자 수가 1.5 배 증가했을 때 와도지수의 상대오차가 1% 이내가 되는 격자 수를 기준으로 하였다.

2.4.1 와도지수와 혼합지수와의 관계

$\Omega_1$  와  $D_1$  의 관계를 고찰하기 위하여 우선적으로 model 1 과 model 2 의 유동장 해석을 수행하였다. 그리고 Fig. 1 에 점선으로 표시한 바와 같이 여러 단면에서  $\Omega_1$  는 식 (2)인 운동량 방정식으로부터 계산하고,  $D_1$  는 식 (3)인 농도방정식으로부터 계산된 C 를 식 (8)에 적용하여 그 값들을 Fig. 5 에 나타내었다.

그림에서 보는 바와 같이  $\Omega_1$  와  $D_1$  는 서로 지수 관계가 있음을 알 수 있으며 다음과 같은 관계식 모형을 만들고 회귀분석을 하였다.

$$D_1 = A \exp(B\Omega_1) \tag{9}$$

여기서 A 는  $\Omega_1$  가 0 일 때의 값, 즉 채널입구에서의  $D_1$  값이므로 식 (8)과 입구조건을 대입하여 구하면 다음과 같다.

$$A = |C_1^* - C_2^*| \frac{\sqrt{L_1^* L_2^*}}{L_1^* + L_2^*} \tag{10}$$

회귀분석 결과는 Table 1 에 나타내었다. 이때 프로그램은 Microsoft Excel 2002 를 사용하였으며, 유의수준은 5%, 신뢰구간은 95% 에서 분석하였다.

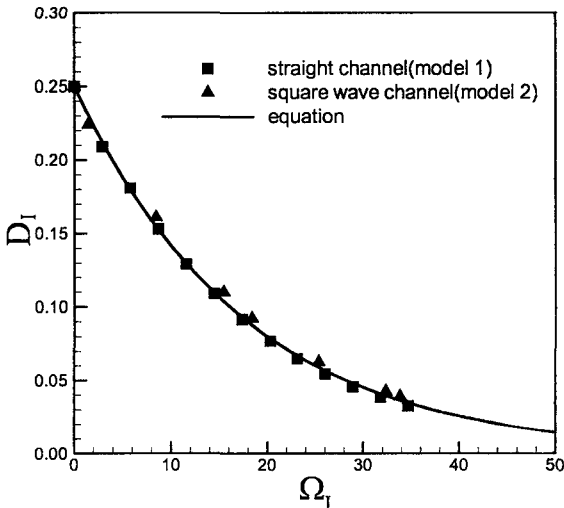


Fig. 5 The relation of vortex index and mixing index in channels and square wave channels (Re=10, Pe=100)

Table 1 The result of regression analysis on relation of vortex index and mixing index

	Values
Correlation coefficient(r)	0.99765
Coefficient of determination( $R^2$ )	0.99530
Adjusted coefficient of determination( $R_a^2$ )	0.94267
Coefficient(B)	-0.05686
F	4023
P-value	$1.28297 \times 10^{-22}$

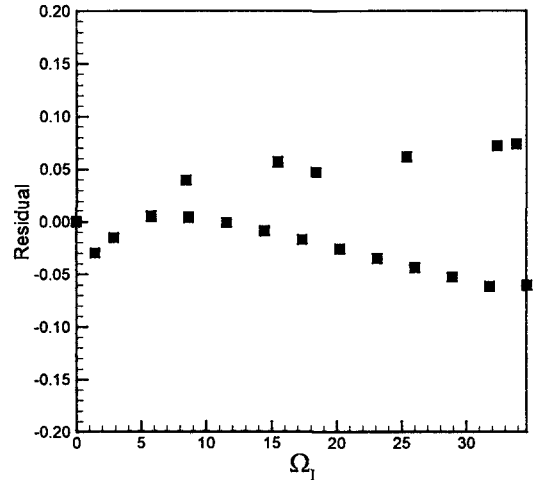


Fig. 6 The residual plot for regression analysis on relation of vortex index and mixing index

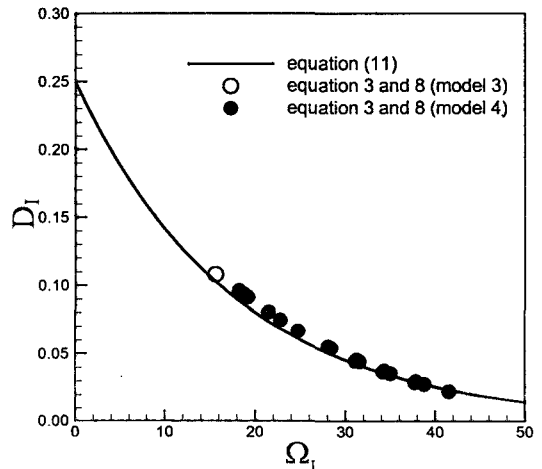


Fig. 7 Verification for the relation of vortex index and mixing index (Re=10, Pe=100)

**Table 2** The values of vortex index and mixing index for various lengths and angles of the cantilever beam in static mixer(model 3 and 4)

length of the beam ( $b_l$ )	angle of the beam ( $\alpha$ ) [degree]	$\Omega_l$	$D_l$
0	0	15.61412	0.10769
0.4	40	18.20616	0.09605
0.4	50	18.70065	0.09365
0.4	60	19.17374	0.09133
0.8	40	21.48061	0.08028
0.8	50	22.80053	0.07447
0.8	60	24.77790	0.06658
1.2	40	28.09283	0.05515
1.2	50	28.44064	0.05407
1.2	60	31.13621	0.04455
1.4	40	31.57233	0.04419
1.4	50	31.29764	0.04553
1.4	60	34.20555	0.03659
1.6	40	35.03648	0.03554
1.6	50	34.32415	0.03748
1.6	60	37.75251	0.02891
1.8	40	38.79095	0.02766
1.8	50	37.86252	0.02972
1.8	60	41.55421	0.02229

회귀분석 결과 및 식 (10)로부터  $Re=10, Pe=100$  일 때 식 (11)과 같은 지수식을 얻을 수 있었다.

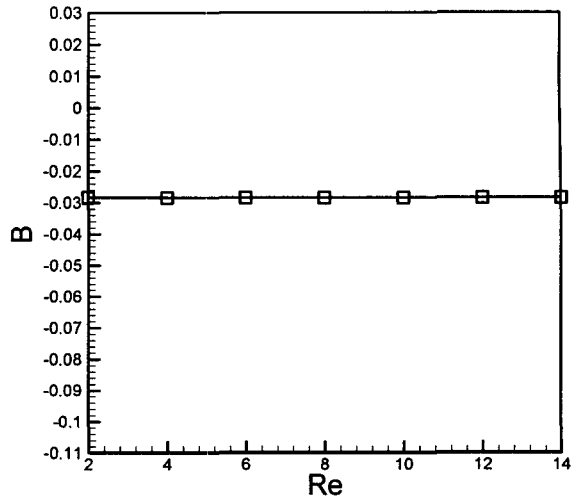
$$D_l = 0.25 \exp(-0.05686\Omega_l) \quad (11)$$

이때 결정계수 ( $R^2$ )  $\approx 1$  이고 P-value  $\ll 0$  이므로 회귀직선이 상당히 유의함을 알 수 있다.

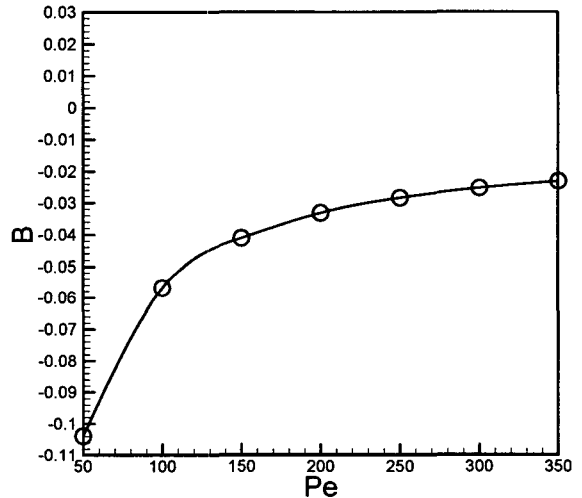
Fig. 6는 잔차(residual)에 대한 그래프로 대략 0에서 대칭적으로 나타나고 모두  $\pm 2$  이내에 있으며 특별한 경향을 보이지 않으므로 회귀모형이 이 자료에 잘 적합한다는 결론을 내릴 수 있다.

위의 결과에 대한 보다 일반성을 관찰하기 위하여 Model 3와 다양한 외팔보각을 갖는 Model 4의 출구 단면에 식 (11)를 적용시키고 편미분방정식으로 부터 계산된 결과와 비교하였다. 외팔보각과 길이의 변화와 계산된  $\Omega_l$ 와  $D_l$ 의 값을 Table 2에 나타내었다.

Fig. 7는 Model 3과 Model 4에서 식 (11)의 결과와 편미분 방정식들의 해를 비교한 것으로 잘 일치하고 있음을 보여준다. 따라서 임의의 형상을 갖는 경우에도 ‘와도지수’와 ‘혼합지수’는 지수형 관계를 갖는다는 사실을 알 수 있다.



(a)



(b)

**Fig. 8** Effects of the Reynolds number (a) and Peclet number(b) on coefficient B

2.4.2 레이놀즈 수(Re)와 페클릿 수(Pe)의 영향  
식 (9)와 식 (10)로부터 A는 채널 입구의 영향을 받는 값이므로 레이놀즈 수와 페클릿 수는 상수 B에 영향을 줄 것으로 생각된다. 따라서 앞의 수행과정을 반복하여 레이놀즈 수와 페클릿수를 독립적으로 변화시켜 B값의 변화를 Fig. 8에 도시화하였다.

Fig. 8(a)는 Pe가 250으로 일정할 때 Re의 변화에 따른 B값의 변화를 나타낸 그래프로 Re가 B값에 아무런 영향을 미치지 못함을 알 수 있다. 이것은 레이놀즈 수의 변화가 와도에 영향을 미쳐 와도지수로 표현됐기 때문으로 생각된다.

**Table 3** The result of regression analysis on relation of Peclet number and coefficient B

	Values
Correlation coefficient( <i>r</i> )	1.00000
Coefficient of determination( <i>R</i> <sup>2</sup> )	1.00000
Adjusted coefficient of determination( <i>R</i> <sub>a</sub> <sup>2</sup> )	1.00000
slope( <i>a</i> )	-4.71546
intercept( <i>b</i> )	-0.00960
F	1656897
P-value	1.28297×10 <sup>-22</sup>

Fig. 8(b)는 Re 가 10 으로 일정할 때 Pe 과 B 와의 관계를 나타낸 그래프로 Pe 가 B 를 결정하는 주된 변수임을 알 수 있다.

따라서 Pe 와 B 의 관계식을 얻기 위해 다음과 같은 모형을 제안하여 회귀분석하였다.

$$B = a + \frac{b}{Pe}$$

Table 3는 B 에 대한 회귀분석의 결과로 결정계수 (*R*<sup>2</sup>)=1 이고 P-value<<0 이므로 회귀직선이 상당히 유의함을 알 수 있으며 식은 다음과 같다.

$$B = -\left(0.0096 + \frac{4.71546}{Pe}\right) \quad (12)$$

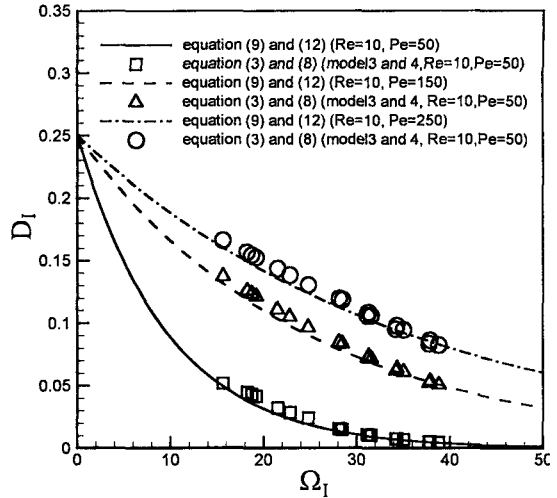
Fig. 9는 모델 3 과 모델 4 에서 식 (10)과 식 (12)를 이용하여 식 (9)에서 얻은 결과와 편미분 방정식들의 해를 비교한 것으로 잘 일치하고 있음을 보여준다. 따라서 임의의 형상을 갖는 경우 뿐만 아니라 임의의 Pe 를 가질 때에도 ‘와도지수’와 ‘혼합지수’는 지수형 관계를 갖는다는 사실을 알 수 있다.

### 3. 결론

본 연구는 마이크로 믹서에서 비용해성 물질의 혼합을 다루었다. 먼저 수치해석과 회귀분석을 통해 농도장을 대표하는 혼합지수와 속도장을 대표하는 와도지수의 관계를 규명하였다. 다음으로 Re 와 Pe 가 이 관계에 미치는 영향에 대해 연구하였으며 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) “와도지수”와 “혼합지수”는 대수적 관계에 있으며 그 식은 다음과 같다.

$$D_i = A \exp(B\Omega_i)$$



**Fig. 9** Verification for the relation of vortex index and mixing index for various Peclet numbers

(2) 계수 A 는 입구의 농도조건에 의해 그리고, 계수 B 는 Pe 에 따라 결정된다. 이렇게 만들어진 대수방정식은 편미분방정식인 농도방정식을 대신 하여 사용할 수가 있다.

$$A = |C_1^* - C_2^*| \frac{\sqrt{L_1^* L_2^*}}{L_1^* + L_2^*}$$

$$B = -\left(0.0096 + \frac{4.71546}{Pe}\right)$$

(3) 미소유동공학에서 혼합도를 예측하기 위한 학술적 접근방법으로 “와도지수”를 이용하는 새로운 방법을 개척하였다.

### 참고문헌

- (1) Liu, R. H., Mark, A. S., Kendra, V. S., Michael, G. O., Juan, G. S. and Ronald, J. A., 2000, “Passive Mixing in a Three-Dimensional Serpentine Microchannel,” *J. MEMS*, Vol. 9, No. 2, pp. 190~197.
- (2) Beebe, J. D., Adrian, J. R., Olsen, G. M., Stremmer, A. M., Aref, H. and Jo, B., 2001, “Passive Mixing in Microchannels : Fabrication and Flow Experiments,” *Mec. Ind.*, Vol. 2, No. 2, pp. 343~348.
- (3) Costin, D. C. and Synovec, E. R., 2002, “Measuring the Transverse Concentration Gradient Between Adjacent Laminar Flow in a Microfluidic Device by a Laser-Based Refractive Index Gradient Detector,” *Talanta*, Vol. 58, No. 3, pp. 551~560.
- (4) Liu, Y. Z., Kim, B. and Sung, H., 2003, “Two-Fluid Mixing in a Microchannel,” *KSCFE Journal*, Vol. 8,

- No. 2, pp. 16~23.
- (5) Wu, Z., Nguyen, N. and Huang, X., 2004, "Nonlinear Diffusive Mixing in Microchannels: Theory and Experiments," *J. Micromech. Microeng.*, Vol. 14, No. 4, pp. 604~611.
- (6) Choi, H., Lee, D. and Maeng, J., 2003, "A Node-Centered Pressure-Based Method for All Speed Flows on Unstructured Grids," *Numerical heat transfer Part B, Fundamentals*, Vol. 44, No. 2, pp. 165~186.
- (7) Antonini, G., Gelus, M., Guiffant, G. and Zoulalian, A., 1981, "Caracteristiques des Transferts Simultanés de Masse et de Quantité de Mouvement dans des Écoulements de Recirculation Forcée," *Int. J. Heat Mass transfer*, Vol. 24, No. 8, pp. 1313~1323.
- (8) Nishimura, T. and Kunitsugu, K., 1997, "Fluid Mixing and Mass Transfer in Two-Dimensional Cavities with Time-Periodic Lid Velocity," *Int. J. Heat and Fluid Flow*, Vol. 18, No. 5, pp. 497~506.