

순차적 반응표면법을 이용한 마이크로 정적 믹서의 최적설계

한석영[†] · 맹주성* · 김성훈**

(2004년 3월 16일 접수, 2004년 6월 17일 심사완료)

Parameter Optimization of a Micro-Static Mixer Using Successive Response Surface Method

Seog-Young Han, Joo-Sung Maeng and Sung-Hoon Kim

Key Words : Micro-Static Mixer(마이크로 정적 믹서), Mixing Index(혼합지수), Response Surface Method(반응표면법), Parameter Optimization(매개변수 최적화)

Abstract

In this study, parameter optimization of micro-static mixer with a cantilever beam was accomplished for maximizing the mixing efficiency by using successive response surface approximations. Variables were chosen as the length of cantilever beam and the angle between horizontal and the cantilever beam. Sequential approximate optimization method was used to deal with both highly nonlinear and non-smooth characteristics of flow field in a micro-static mixer. Shape optimization problem of a micro-static mixer can be divided into a series of simple subproblems. Approximation to solve the subproblems was performed by response surface approximation, which does not require the sensitivity analysis. To verify the reliability of approximated objective function and the accuracy of it, ANOVA analysis and variables selection method were implemented, respectively. It was verified that successive response surface approximation worked very well and the mixing efficiency was improved very much comparing with the initial shape of a micro-static mixer.

기호설명

b_l : 외팔보의 길이
 C : 농도
 D : 확산계수
 D_l : 혼합지수
 h : 채널의 높이
 k : 변수의 개수
 L : 채널의 특성 길이

l : 채널 전체 길이
 n : 전체 실험수
 p : 압력
 r : 혼합영역의 반경
 u : x방향의 속도
 V : 속도
 x_i : 설계변수
 α : 수평선과 외팔보가 이루는 각도
 λ_i : 분할 매개함수
 ϕ : 무차원화된 농도

[†] 책임저자, 회원, 한양대학교 기계공학부

E-mail : syhan@hanyang.ac.kr

TEL. : (02)2290-0456 FAX : (02)2298-4634

* 회원, 한양대학교 기계공학부

** 한양대학교 대학원 자동차공학과

1. 서론

믹서는 일반적으로 2종류 이상의 물질에 외력을 가하거나 또는 구조적인 특징만으로 흐르게

하여 교반시키고 균질의 혼합물을 얻거나 반응을 촉진하는 장치이다. 기존의 산업에서는 효과적이고 빠른 혼합을 위해 믹서 내부에 프로펠러 등의 장치를 장착하여 인위적인 외력으로서 혼합을 돕는 형태의 믹서가 사용된다. 이러한 장치에 의해 효율을 증대시키는 믹서를 능동(active) 또는 동적(dynamic) 믹서라고 한다. 반대로 일정한 유량을 공급하는데 사용되는 압력수두나 펌프 이외의 어떠한 에너지도 공급되지 않는 믹서를 수동(passive) 또는 정적(static) 믹서라고 한다. 마이크로 영역에서는 거시적인 영역에서 쓰이던 방법은 제작상의 문제로 제한적일 수밖에 없으므로 단순한 구조를 갖는 정적 믹서의 형태가 더 효율적⁽¹⁾이라 할 수 있다.

정적 믹서의 특성에 대한 수치해석적 연구들을 살펴보면, Kenics 믹서의 혼합효율 해석^(2,3)과 분할 평판 믹서(partitioned pipe mixer)의 유동과 혼합 거동 해석^(4,5) 그리고 상용 CFD S/W를 이용한 난류 유동 조건하의 Sulzer SMV 믹서의 유동 해석⁽⁶⁾ 등이 있다. 이러한 연구들은 믹서의 혼합효율을 계산하기 위한 유동해석에 관한 것들로 특정한 믹서에 대한 최적설계를 수행한 논문은 거의 찾기 힘들다.

믹서 내의 유동현상은 전반적으로 비선형성이 강하고 요동(oscillation)이 심해 해석적으로 민감도를 구하는 것이 매우 어렵다. 또, 구해진다 할지라도 부정확해질 우려가 크기 때문에 민감도 해석을 기반으로 하는 최적설계(gradient based method) 방법은 사용하기 힘들다.⁽⁷⁾

본 논문에서는 외팔보 형태의 마이크로 정적 믹서의 혼합효율을 최대화하기 위해, 농도방정식을 이용한 유동장을 해석한 후 민감도 해석 없이 혼합지수(mixing index)만을 사용하고 인자들간의 교호작용을 고려할 필요가 없는 반응표면법을 적용하여 형상 최적화를 수행하였다. 반응표면법에서는 관심 영역의 범위에 따라 근사 정확도가 달라지므로 순차적인 반응표면 근사로 전체영역에서 순차적으로 작은 부영역을 만들어 최적화를 수행함으로써 정확도를 향상시켰다.

2. 순차적 반응표면법

본 논문에서는 2차 근사반응 함수 생성을 위해

가장 많이 쓰이는 중심합성 계획법⁽⁸⁾을 사용하였다. 또한, 근사함수의 신뢰성 검증은 위해서는 분산분석(analysis of variance), F-검정, 결정계수(R^2), 수정된 결정계수(R^2_{adj}) 등을 이용하였다. 신뢰성 검증 후 신뢰하기 어려운 근사함수에 대해서는 변수선택법⁽⁹⁾에 의해 신뢰성을 향상시켰다.

마이크로 정적 믹서의 최적화 문제는 단순한 부문제(sub-problems)의 연속으로 나누어 생각할 수 있다. 그것은 목적함수와 구속함수의 근사를 사용하여 생성된다. 부영역에서의 근사 최적화도 반응표면법을 사용하였다.

2.1 정식화

마이크로 정적 믹서의 최적화 문제는 다음과 같이 정식화할 수 있다.

$$\begin{aligned} &\text{minimize : } f(x) \\ &\text{within the design space :} \\ &x_{il} \leq x_i \leq x_{iu} \end{aligned} \quad (1)$$

x_{il} , x_{iu} 는 설계변수 x_i 의 기하학적인 상위 및 하위 경계점이다. 이 근사를 k 번째 부문제로 정의하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} &\text{minimize : } f^{(k)}(x) \\ &\text{within the part of design space} \\ &\text{(i.e. subregion):} \\ &x_{il}^{(k)} \leq x_i \leq x_{iu}^{(k)} \quad (2) \\ &x_{il}^{(k)} \geq x_{il}, \quad x_{iu}^{(k)} \leq x_{iu} \quad (3) \end{aligned}$$

$x_{il}^{(k)}$ 와 $x_{iu}^{(k)}$ 는 k 번째 부영역의 x_i 의 경계로 정의한다.

2.2 연속적인 부영역에서의 크기의 조정 (adjustment of size of successive sub-regions)

연속적인 부영역의 크기 ($|x_{iu}^{(k)} - x_{il}^{(k)}|$)는 근사의 정확성에 아주 큰 영향을 미친다. 일반적으로 부영역의 크기가 작을수록 근사의 정확도는 더욱 커진다. 순차적인 최적화 근사에서 부문제 $X^{(k)}$ 의 최적점은 $(k+1)$ 번째 부문제에 대한 시작점이 된다. 새로운 부문제의 과정은 새로운 근

사와 최적해에서 수렴 기준에 도달할 때까지 반복된다. 이제부터는 "반복횟수(iteration)"를 부문제 용어 대신에 사용한다.

Fig. 1에서 k 번째 부문제의 중심점은 $(k-1)$ 번째 부문제의 최적점 $X^{(k-1)*}$ 를 나타내고, $(k+1)$ 번째 부문제의 중심점은 k 번째 부문제의 최적점 $X^{(k)*}$ 를 나타낸다. $(k+1)$ 번째 부영역의 크기는 k 번째의 최적점 $X^{(k)*}$ 과 k 번째 영역의 최소점과 최대점을 이용한 분할 매개변수 (fraction parameter) $\lambda_i^{(k+1)}$ 에 의해 결정된다. Fig. 2를 참고로 하는 부영역에서의 $\lambda_i^{(k+1)}$ 는 다음 식 (4)와 같이 정의된다.⁽⁷⁾

$$\lambda_i^{(k+1)} = \eta + (\gamma - \eta) \frac{\left| x_{i^{(k)*}} - \frac{x_{ii}^{(k)} + x_{iu}^{(k)}}{2} \right|}{\frac{x_{iu}^{(k)} - x_{ii}^{(k)}}{2}} \quad (4)$$

λ_i 는 두 개의 극값 η 와 γ 를 갖는다. 만약 근사 최적값이 $x_{ii}^{(k)}$ 와 $x_{iu}^{(k)}$ 사이의 중앙에 위치하고 선형근사에 대해서는 $\eta = 0.5$ 그리고 $\gamma = 0.8$, 그 밖의 경우에 대해서는 $\gamma = 1.0$ 를 가지게 된다. $\lambda_i^{(k+1)}$ 의 최대값인 $\lambda^{(k+1)}$ ($\lambda^{(k+1)} = \max \lambda_i^{(k+1)}, (i = 1, \dots, n)$)은 모든 설계변수에 적용된다. $(k+1)$ 번째 부영역에 대하여 i 번째 설계변수의 상하위 경계치는 다음과 같이 계산된다.

$$x_{ii}^{(k+1)} = x_{ii}^{(k)*} - \frac{1}{2} \lambda^{(k+1)} (x_{iu}^{(k)} - x_{ii}^{(k)}) \quad (5)$$

$$x_{iu}^{(k+1)} = x_{ii}^{(k)*} + \frac{1}{2} \lambda^{(k+1)} (x_{iu}^{(k)} - x_{ii}^{(k)}) \quad (6)$$

윗 식 (5)와 (6)으로부터 $\lambda^{(k+1)}$ 의 값은 k 번째 반복에서의 전체 영역의 반보다 작아질 수 없고, 또한 k 번째 반복에서의 영역보다 클 수도 없음을 알 수 있다. 이렇게 분할 매개변수 값은 점차 줄어들어 마지막에는 더 이상의 이동이 불가능할 경우까지 내려가게 된다. 자연적으로 반복은 더 이상 계속할 수가 없게 된다.

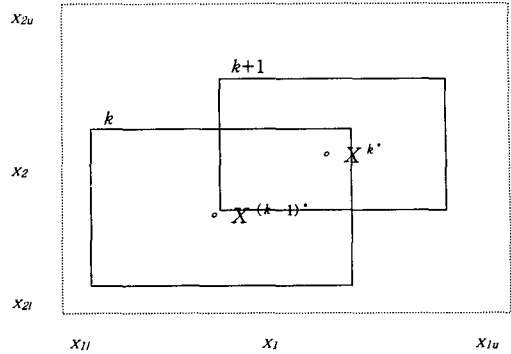


Fig. 1 Size of the k -th sub-region

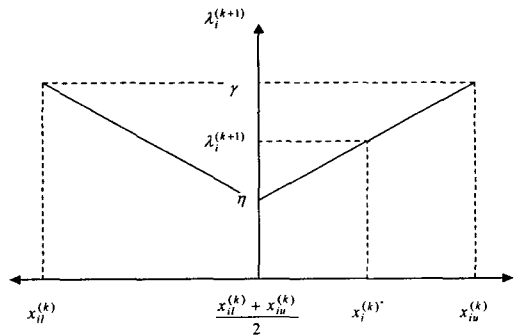


Fig. 2 Fraction parameter

3. 문제 정식화

3.1 마이크로 정적 믹서의 구조

본 연구에서 형상 최적화의 대상으로 선정한 모델은 마이크로 영역에서 유용한 매우 단순한 Fig. 3과 같은 구조를 갖는다. 채널 내 양쪽에 각각 대칭인 형상의 외팔보가 위치하여 유동의 방향을 급격히 변화시켜 혼합의 효과를 증대시키게 된다. 믹서의 모든 길이는 입구의 높이 h 에 대해 무차원화 하였으며, 보의 길이는 b_1 로 정의한다. 또한 입구에서 출구까지의 총길이 l 은 $6h$ 이다.

α 는 수평선과 외팔보가 이루는 각도이며, $C1$ 과 $C2$ 는 혼합되는 두 유체의 농도를 의미한다.

3.2 유동방정식 및 입력조건

유동해석 모델은 2차원 정상 비압축성 유동으로 가정하였고, 질량 및 운동량 방정식 그리고 밀도와 점성이 혼합과정에 따라 변하지 않는 비용

해성 유체의 혼합을 나타내기 위한 농도방정식 (concentration equation)을 무차원인 형태로 표현하면 다음 식 (7)과 같다.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot V &= 0 \\ V \cdot \nabla V + \frac{1}{\rho} \nabla p &= \frac{1}{Re} \nabla^2 V \\ V \cdot \nabla C &= \frac{1}{Pe} \nabla^2 C \end{aligned} \quad (7)$$

여기서, p 는 정압, V 는 속도벡터, C 는 농도를 나타낸다. Pe (Peclet number)는 혼합의 대류적 영향과 확산적 영향의 비율을 나타내며 식 (8)과 같이 정의된다.

$$Pe = \frac{uL}{D} \quad (8)$$

여기서, u 는 x 방향의 속도, L 은 채널의 특성길이, D 는 확산계수이다.

유체해석을 위해서는 비압축성 유동의 복잡한 형상에서 양질의 격자를 만들 수 있는 비정렬 격자 해법⁽¹⁰⁾을 적용하였다. 그리고 Demirdzic and Muzafertija⁽¹¹⁾가 제안한 방법을 격자점 중심법에 적용하였다. 속도의 경우 입구에서는 단면에 수직하여 일정한 속도 조건을 주었고 출구에서는 Neumann조건으로 주었다. 그리고 모든 고체벽면에서는 고착 경계조건을 주었으며 출구 중앙 격자점을 고정압력으로 주었다. 농도의 경우 입구에서 $C1$ 과 $C2$ 에 서로 다른 일정한 값으로 주었고 출구 및 벽면에서는 Neumann조건을 주었다.

믹서 내의 혼합효율을 최대화하기 위하여 입구에서 $C1$ 과 $C2$ 의 농도를 가지는 두 물질을 채널내에 혼합하여 출구에서의 농도와 의 표준편차를 목적함수로 한다. 본 연구에서는 이 값을 무차원화하여 혼합지수(mixing index)를 사용하였다. 채널내 유동해석을 위한 입력값은 Table 1과 같다.

3.3 최적화 과정

입구에서 $C1$ 과 $C2$ 의 농도를 가지는 두 물질을 채널 내에서 혼합시켜 혼합효율을 최대화 하는 문제는 출구에서의 농도의 편차를 최소화하는 최적화 문제로 정식화 할 수 있다. 본 연구에서는 혼합효율을 평가하기 위해 Liu⁽¹²⁾ 등이 제안한 혼합

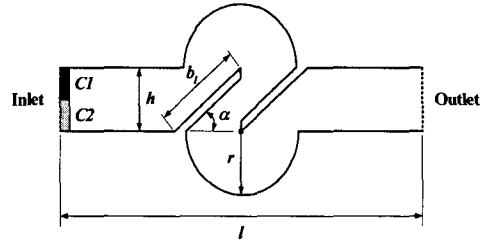


Fig. 3 Shape of a micro-static mixer

Table 1 Input data for CFD analysis

$C1$	1	Reynold number	10
$C2$	0.5	Peclet number	250
\bar{C}	0.75	N	26

지수(mixing index) 식 (9)를 사용하였다.

$$D_I = \sqrt{\frac{1}{N} \sum (\phi_i - \phi_{max})^2} \quad (9)$$

여기서 N 은 단면에서 혼합지수를 측정하기 위해 나눈 전체 데이터의 수이고, ϕ_i 와 ϕ_{max} 는 각각 무차원화된 i 번째의 농도 값과 N 개의 데이터 중 농도의 최대값을 의미한다. 혼합의 정도가 높을수록 D_I 는 작은 값을 가지며, 완전히 혼합된 상태에서는 0이 된다.

결정해야 할 형상 설계변수는 보의 길이(b)와 각도(α)이다. 변수의 기하학적인 구속조건을 살펴보면 각도는 0~90°전체의 영역으로 CFD 해석을 하여본 결과 CFD 해석이 가능한 22°에서부터 70°로 결정되었고, 주어진 각도에 따라 식 (10)로부터 기하학적인 길이를 구할 수 있다.

$$b_l = \sin \theta + \cos \theta + \sqrt{\sin 2\theta} \quad (10)$$

그리고 입구높이보다 작은 경우는 혼합에 크게 영향을 미치지 않으므로 하한값은 1로 하였다.

위와 같은 설계변수와 목적함수를 가진 최적해를 구하기 위해 순차적 반응표면 근사법을 사용하였다. 각 변수는 선형변환 시키고 각 부영역마다 3수준 중심합성 계획법을 실시한다. 반응표면 모델로는 2차 근사를 사용하고 R_{adj}^2 값이 0.90보다 낮을 경우 항을 추가, 제거하면서 재해석하고

Table 2 History of iteration by successive response surface method

iter number	initial region				optimum point		results		RSM/CFD	two iter.
	lower	upper	lower	upper	length	angle	RSM	CFD		
1	1.30	1.50	33.75	58.25	1.50	33.75	0.0524	0.0473	0.11	
2	1.40	1.60	22.50	45.00	1.53	35.13	0.0483	0.0649	0.26	0.27
3	1.47	1.59	29.58	41.68	1.55	37.79	0.0317	0.0865	0.63	0.25
4	1.51	1.59	33.19	42.40	1.51	33.19	0.0638	0.0618	0.03	0.40
5	1.47	1.55	29.59	37.80	1.47	33.19	0.0638	0.0613	0.94	0.01
6	1.43	1.51	30.88	35.50	1.51	34.38	0.0524	0.0617	0.15	0.01
7	1.47	1.55	32.63	36.13	1.55	34.54	0.0595	0.0580	0.03	0.06
8	1.43	1.51	33.02	35.10	1.47	33.02	0.0570	0.0401	0.02	0.04
9	1.45	1.49	31.98	34.06	1.49	33.33	0.0412	0.0563	0.17	0.13
10	1.47	1.51	32.66	34.00	1.51	33.68	0.0530	0.0468	0.06	0.12
11	1.49	1.53	33.17	34.19	1.49	33.17	0.0469	0.0459	0.02	0.23
12	1.47	1.51	32.66	33.68	1.49	33.17	0.0574	0.0459	0.25	0.00
13	1.47	1.51	32.92	33.42	1.51	32.92	0.0517	0.0355	0.45	0.29
14	1.49	1.53	32.67	33.17	1.51	32.92	0.0459	0.0355	0.29	0.00
15	1.50	1.52	32.86	32.98	1.51	32.98	0.0347	0.0352	0.02	0.01
16	1.50	1.52	32.92	33.04	1.51	32.98	0.0400	0.0352	0.13	0.00
17	1.50	1.52	32.95	33.01	1.51	32.98	0.0454	0.0352	0.32	0.00
18	1.50	1.52	32.97	32.99	1.51	32.98	0.0357	0.0352	0.01	0.00

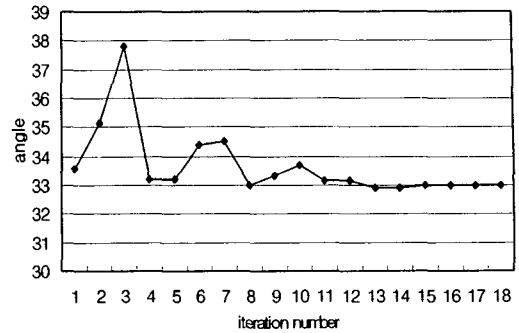


Fig. 6 History of iteration of the angle

순차적 반응표면 근사과정 도중에 비선형성이 강한 문제는 변수선택법으로 근사함수의 신뢰성을 높이려 해도 제한된 2차함수로서는 표현이 불가능한 경우도 있을 수 있다. 구해진 근사함수에서 변수선택법으로도 신뢰수준에 이르지 못한 반복횟수에서는 9점 중 목적함수 값이 최소인 최적점으로 다음 반복횟수의 중심점으로 잡고, 최적화를 진행시킨다.

수렴 기준은 그 반복횟수에서의 실제값 (CFD 해석 결과)에 대한 반응표면 근사값의 비, 그리고 바로 전 반복횟수에서의 실제값과의 차이가 3% 이내일 때와, 더 이상의 영역이동이 불가할 경우 까지 반복이 진행되었을 때로 하였다.

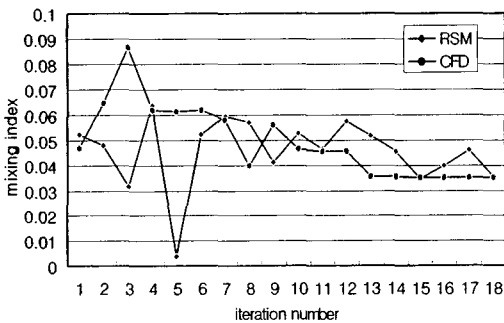


Fig. 4 History of iteration of the mixing index

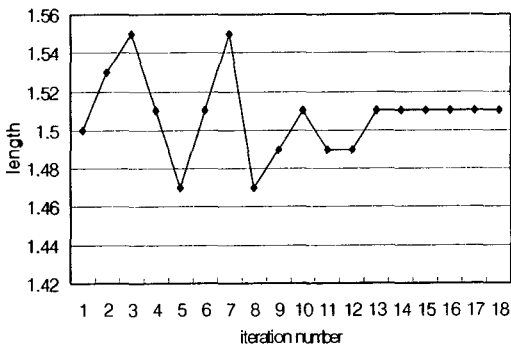


Fig. 5 History of iteration of the length

각 항의 t-test를 통하여 불필요한 항을 제거시키는 변수선택법을 적용하였다. 근사화된 모델의 최적값은 Newton-Rhapon법을 이용하여 구하였다.

3.4 최적화 결과

초기 설계점은 길이 1.4h, 각도 45°에서 시작하였고, 최적화 계산 결과는 Table 2에 정리하였다. 15번째 반복횟수에서 일차 수렴조건을 만족하였으며, 아직 영역이동이 가능하므로 계속적인 영역이동을 수행한 결과 18번째 반복횟수에서 이차 수렴조건을 만족하였다. 두 수렴조건을 만족하는 15번째와 18번째의 최적해를 비교해보면 두 결과는 정확히 일치함을 알 수 있다.

최적해는 보의 길이 1.51h, 각도 32.98°에서 혼합지수 0.0352로 구해졌으며, 초기 설계치인 길이 1.4h, 각도 45°에서의 혼합지수 0.1220에 비해 약 250% 향상되었다. 반복횟수에 따른 혼합지수의 변화를 Fig. 4에, 형상 변수인 보의 길이의 변화를 Fig. 5에, 그리고 보의 각도의 변화를 Fig. 6에 각각 나타내었다.

4. 결론

농도가 다른 두 유체의 혼합효율을 최대화 하기 위한 외팔보 형태의 단순한 구조를 갖는 마이크로 정적 믹서의 형상 최적화를 수행한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 순차적 반응표면 근사기법이 마이크로 정적 믹서와 같이 비선형성이 강하고 요동이 심한 유동장의 형상 최적화에 효율적으로 적용됨을 확인하였다.

(2) 최적해는 보의 길이 1.51h, 각도 32.98°에서 혼합지수 0.0352로 구해졌으며, 초기 설계치인 길이 1.4h, 각도 45°에서의 혼합지수 0.1220에 비해 약 250% 향상된 결과를 얻었다.

참고문헌

- (1) Pahl, M. H. and Muschelknautz, E., 1982, "Static Mixers and their Applications," in *Proc. Int. Chem. Eng.*, Vol. 22, No. 2, pp. 197~205.
- (2) Avalosse, T. and Crochet, M. J., 1997, "Finite-Element Simulation of Mixing ; 2. Three Dimensional Flow through a Kenics Mixer," *Journal of AIChE*, Vol. 43, pp. 588~597.
- (3) Ling, F. H. and Zhang, X., 1995, "A Numerical Study on Mixing in the Kenics Static Mixer," *Chem. Eng. Comm.*, Vol. 136, pp. 119~141.
- (4) Khakhar, D. V., Franjione, J. G. and Ottino J.M., 1987, "A Case Study of Chaotic Mixing in Deterministic Flows : The Partitioned Pipe Mixer," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 42, No. 12, pp. 2909~2936.
- (5) Ling, F. H., 1993, "Chaotic Mixing in a Spatially Periodic Continuous Mixer," *Phys. Fluids A*, Vol. 5, No. 9, pp. 2147~2160.
- (6) Lang, E., Dritina, P., Strisiff, F. And Fleishli M., 1995, "Numerical Simulation of the Fluid Flow and the Mixing Process in a Static Mixer," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, No. 12, pp. 2239~2250.
- (7) Bennett, J. A. and Park G. J., 1995, "Automotive Occupant Dynamics Optimization," *Shock And Vibration*, Vol. 2, No. 6, pp. 471~489.
- (8) Box, G. E. P. and Willson K. B., 1951, "On the Experimental Attachment of Optimum Conditions," *Journal of the Royal Statistical Society-Series B*, Vol. 13, pp. 1~14.
- (9) Hong, K. J., Jeon K. K., Cho Y. S., Choi D. H. and Lee S. J., 2000, "A Study on the Construction of Response Surfaces for Design Optimization", *Journal of KSME A*, Vol. 24, No. 6, pp. 1408~1418.
- (10) Jessee, J. P. and Fiveland, W. A., 1996, "A Cell Vortex Algorithm for the Incompressible Navier-Stokes Equation on Non-orthogonal Grids," *Int. J. Numer. Meth. Fluid*, Vol. 23, pp. 271~293.
- (11) Demirdzic, I. and Muzaferija, S., 1995, "Numerical Method for Couples Fluid Flow, Heat Transfer and Stress Analysis Using Unstructured Moving Meshes with Cells of Arbitrary Topology," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 125, pp. 235~255.
- (12) Liu, R. H., Stremmer, M. A., Sharp, K. V., Olsen, M. G., Santiago, J. G., Adrian, R. J., Aref, H. and Beebe D. J., 2000, "Passive Mixing in a Three Dimensional Serpentine Microchannel," *Microelectromechanical SYST.*, Vol. 9, pp. 190~197.