혼합물

Mixture

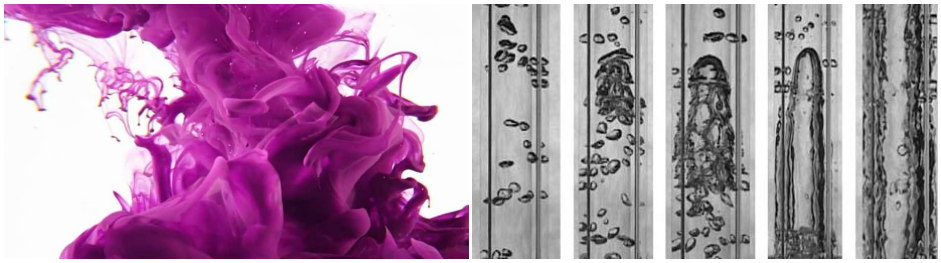
1. Abstract

혼합물은 유체의 혼합이나 확산을 해석하기 위해 사용합니다. 혼합물을 사용하면 다양한 종류의 가스나 액체가 섞이는 현상을 해석할 수 있습니다. 사용방법은 2D, 3D 혼합물 유동해석으로 특성을 생성하고, 혼합물을 정의한 후, 질량분율 경계조건을 통해 값을 지정하여 사용할 수 있습니다.

2. Technology 배경

2-1. 혼합물 해석과 다상 유동 해석

혼합물 해석의 경우는 다양한 종류의 기체나 액체가 섞이는 과정을 보고 싶을 때 진행합니다. 상이 다를 경우는 초반에 섞이는 것처럼 보이지만 시간이 지나면 다시 분리됩니다. 이럴 경우에는 다상 유동 해석을 진행해야 합니다. 물과 기름과 같이 같은 상이지만 섞이지 않는 경우에도 다상 유동 해석에 해당됩니다.



(a) 액체 혼합 (b) 다상 유동

그림 1 유체혼합과 다상유동(예)

유체가 다른 유체에 혼합될 때에는 대류(convection)와 확산(diffusion)에 의해 진행됩니다. 대류는 분자 자체가 이동하는 것을 의미하고 확산은 농도 차이에 의해 농도가 높은 쪽에서 농도가 낮은 쪽으로 분자가 퍼져 나가는 현상을 말합니다.

2-2. 혼합법칙

혼합물의 경우 두 종류 이상의 유체가 섞여있기 때문에 단일 성분의 물성 값과는 다른 값을 가지게 됩니다. 또한 어느 유체가 더 많은 비중을 차지하고 있느냐에 따라서도 그 값이 변경됩니다. 특정공간의 물성 값은 구성하고 있는 유체 비율에 따라 결정되며 이를 계산해주는 것을 혼합법칙이라 합니다. 혼합법칙은 각 물성 값에 따라 다른 계산방식을 사용합니다. 혼합법칙에 따라 계산되는 물성 값은 밀도, 점도,

열전도도, 비열 입니다. 일반적으로 가장 많이 사용되는 방식은 체적가중법이나 질량가중법 입니다. 이는 체적분율이나 질량분율에 따라 물성 값을 적용하는 방식입니다.

특정공간에 포함되어 있는 유체의 질량분율 총합은 1 이 되어야 합니다. 따라서 N 개의 유체혼합을 계산할 경우 실제 방정식은 N-1 개만 계산하게 됩니다. 그 후 각 분율을 빼고 남은 분율이 주요물질의 분율이 됩니다.

3. Technology 이론 소개

3-1. 혼합물 해석

공간상의 온도차이가 존재하는 영역에서 열전달 현상이 발생하는 것과 같이, 특정 물질의 농도 차이가 있는 영역에서는 물질전달(species transport) 현상이 발생합니다.

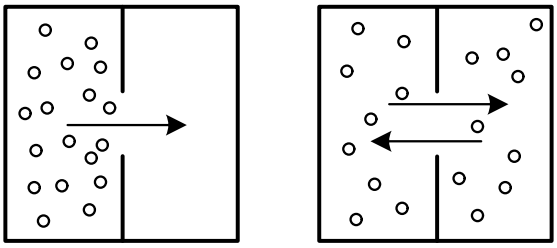


그림 2 농도 차이에 의한 물질전달 현상(확산)

수송방정식(Transport equation)은 물질의 질량분율(mass fraction) 또는 몰(mole)과 같은 농도(concentration)를 스칼라(scalar) 변수로 정의하고 이들의 대류(convection) 또는 이류(advection) 현상과 확산(diffusion) 현상을 표현합니다. 물질전달해석을 이용하면, 동일한 유동장(flow field) 내에서 여러 가지의 물질이 동시에 전달되는 현상을 시뮬레이션 할 수 있습니다. midas NFX CFD 에서는 질량분율을 스칼라 변수로 정의한 수송방정식을 해석하며, 혼합법칙(mixing law)을 이용하여 물질전달 결과와 유동의 흐름이 직접적으로 연성되어 해석이 가능합니다.

3-2. 지배방정식

물질의 확산에 의한 유속은 농도 구배(gradient)와 확산계수(diffusivity)의 곱으로 이루어지며, 이를 픽의 제 1 법칙(Fick's First Law)이라 합니다.

$$\mathbf{j}^c = -D\nabla c \qquad (3.2.1)$$

c : 몰농도

D : 확산계수

화학반응과 마찬가지로 확산은 온도 증가에 의해 활성화 되기 때문에, 확산계수는 다음과 같이 온도 의존적인 성질을 가지는 경우가 많습니다.

$$D = D_0 e^{-E_a/RT} \qquad (3.2.2)$$

물질의 확산에 의한 유속을 연속방정식(continuity equation)에 적용하면 픽의 제 2 법칙(Fick's Second Law)이 됩니다.

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{j}^{c}=\frac{\partial c}{\partial t}-\nabla\cdot(D\nabla c)=0 \tag{3.2.3}$$

midas NFX CFD 에서는 위 식에 대류항, 반응항(reaction term) 및 생성항(production term)을 추가한 일반적인 형태의 물질전달방정식을 계산합니다. 이류계수는 항상 1 로 사용됩니다.

$$f_1(\frac{\partial \phi_k}{\partial t}+\mathbf{u}\cdot\nabla\phi_k)-\nabla(f_2\nabla\phi_k)+f_3\phi_k=f_4 \quad in\ \Omega \tag{3.2.4}$$

$\phi_k=\overline{\phi}$ $\quad on\ \Gamma_d$

$\mathbf{n}\cdot f_2\nabla\phi_k=\overline{f}$ $\quad on\ \Gamma_n$

ϕ_k : k 번째 물질 농도

f_1 : 이류계수

f_2 : 확산계수

f_3 : 반응계수

f_4 : 생성항

속도 $\mathbf{u}$ 의 계산 시 난류모델을 포함한 경우에는, 난류에 의한 확산 활성화 현상을 고려합니다.

$$f_1(\frac{\partial \phi_k}{\partial t}+\mathbf{u}\cdot\nabla\phi_k)-\nabla(f_2\nabla\phi_k+\frac{\nu_t f_1}{Sc_t}\nabla\phi_k)+f_3\phi_k=f_4 \tag{3.2.5}$$

ν_t : 난류 동점도 (turbulent kinematic viscosity)

Sc_t : 난류 Schmidt 수

3-3. 혼합법칙

midas NFX CFD 에서는 물질전달과 유동의 흐름을 연성하여 해석할 수 있도록 혼합법칙을 이용하여 유동장의 물리량을 계산합니다. 혼합법칙을 통해 계산된 물리량은 유동을 해석하는데 적용되고, 이렇게 계산된 유동을 통하여 다시 물질의 전달이 이루어집니다.

3-3-1. 밀도 계산에서의 혼합법칙

물질전달 문제에서 밀도는 물질의 혼합상태에 따라 계산됩니다. 이 때 적용할 수 있는 혼합법칙은 이상기체, 비압축성 이상기체, 체적 가중법이 있습니다. 각각에 대한 계산은 다음과 같습니다.

► 체적 가중법

$$\rho = \frac{1}{\sum_i \frac{m_i}{\rho_{s_i}}} \tag{3.3.1}$$

m_i : i 번째 물질의 질량 분율
ρ_{s_i} : i 번째 물질의 밀도

► 이상기체 혼합법칙

$$\rho = \frac{p_{\text{op}} + p}{RT\sum_i \frac{m_i}{M_i}} \tag{3.3.2}$$

p_{op} : 기준 압력(operating pressure)
R : 기체 상수(gas constant)
M_i : i 번째 물질의 몰질량

► 비압축성 이상기체 혼합법칙

$$\rho = \frac{p_{op}}{RT\sum_i \frac{m_i}{M_i}} \tag{3.3.3}$$

3-3-2. 점도 계산에서의 혼합법칙

midas NFX CFD 에서 점도는 상수로 사용하거나, 질량가중법 혹은 이상기체 혼합법칙을 이용하여 계산합니다. 비압축성 혼합물 가정을 하는 경우 질량가중법을 이용하여 다음의 식과 같이 계산합니다.

$$\mu = \sum_i m_i \mu_i \tag{3.3.4}$$

이상기체 가정의 경우 다음과 같은 이상기체 혼합법칙으로 계산합니다.

$$\mu = \sum_i \frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j \phi_{ij}}, \quad \phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)\right]^{1/2}} \tag{3.3.5}$$

3-3-3. 열전도도 계산에서의 혼합법칙

열전도도는 점도와 마찬가지로 상수로 사용하거나, 질량가중법 혹은 이상기체 혼합법칙을 이용하여 계산합니다. 질량가중법의 경우 열전도도를 다음의 식과 같이 계산합니다.

$$k = \sum_i m_i k_i \tag{3.3.6}$$

이상기체 가정의 경우 점도와 마찬가지로 다음과 같은 이상기체 혼합법칙으로 계산합니다.

$$k = \sum_i \frac{x_i k_i}{\sum_j x_j \phi_{ij}}, \quad \phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{k_i}{k_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)\right]^{1/2}} \tag{3.3.7}$$

3-3-4. 비열 계산에서의 혼합법칙

비열은 상수로 이용하거나 질량가중법만을 이용하여 혼합물에서의 비열을 계산합니다. 질량가중법의 경우 다음과 같이 계산합니다.

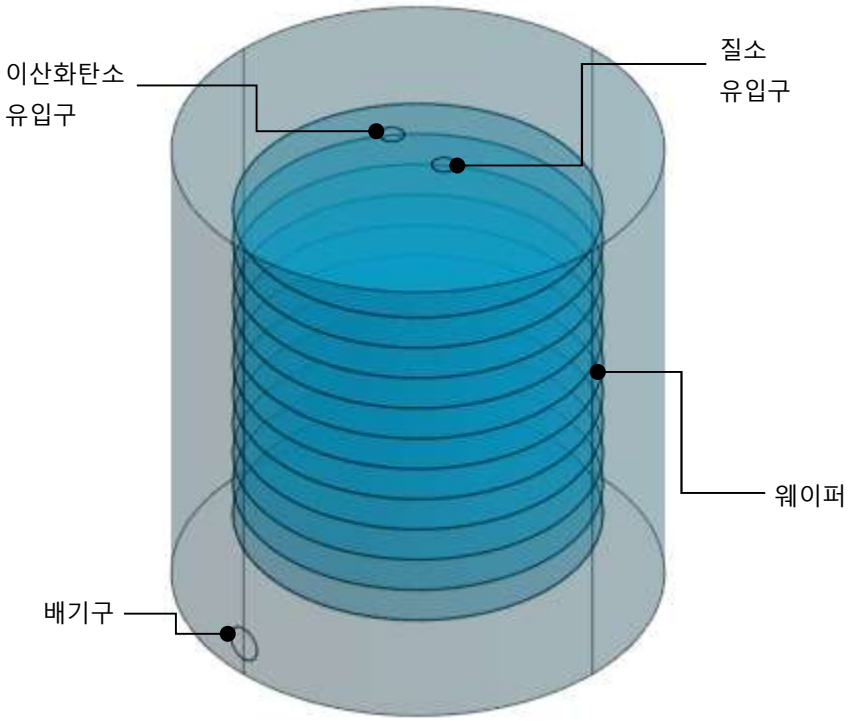
$$C_p = \sum_i m_i C_{p_i} \tag{3.3.8}$$

midas NFX CFD 에서 확산계수는 희박가스근사(dilute gas approximation)에 의해 각각의 물질에 대하여 정의하거나 전체를 동일하게 하나의 상수로 사용할 수 있습니다.

4. Technology 사용법

4-1. 예제 설명

예제는 웨이퍼 후처리용 챔버의 간략모델이며 형상은 다음과 같습니다.
사용된 가스는 임의의 가스가 사용되었습니다.



해석목적은 다음과 같습니다.

- 가스 혼합 특성 파악
- 가스종류별 농도분포 파악
- 가스 충진 속도 파악

해석조건은 다음과 같습니다.

- 초기조건 : 공기 100%(챔버내)
- 이산화탄소 유입량 : 5slm
- 질소 유입량 : 10slm
- 출구부 압력 : 대기압

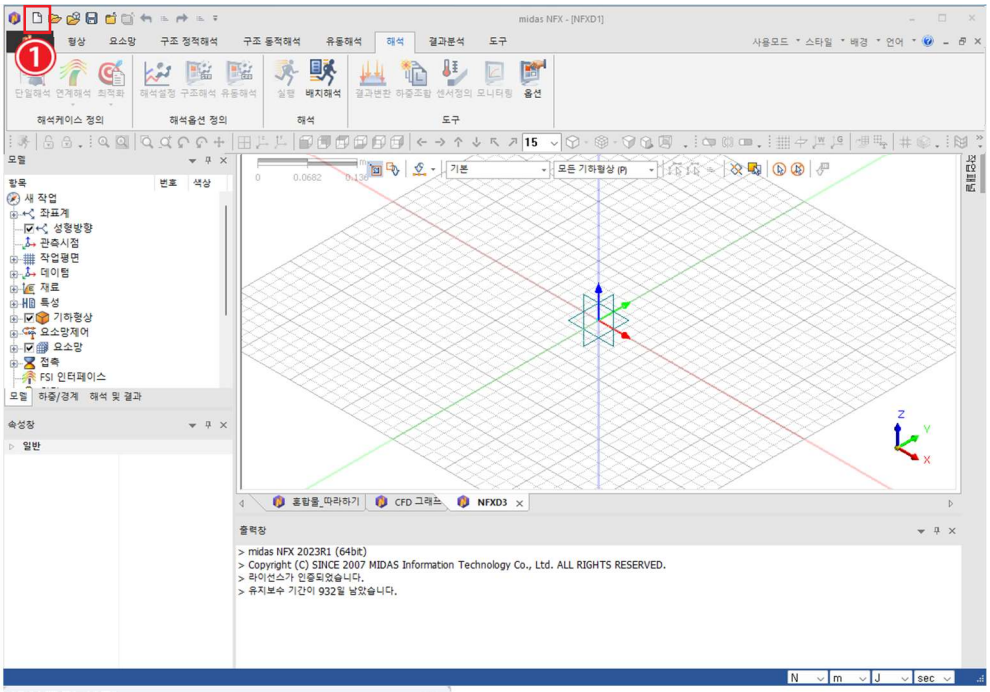
본 예제는 정기교육을 이수하신 분을 기준으로 작성되었습니다.

4-2. 예제 따라하기

4-2-1. 해석조건 설정

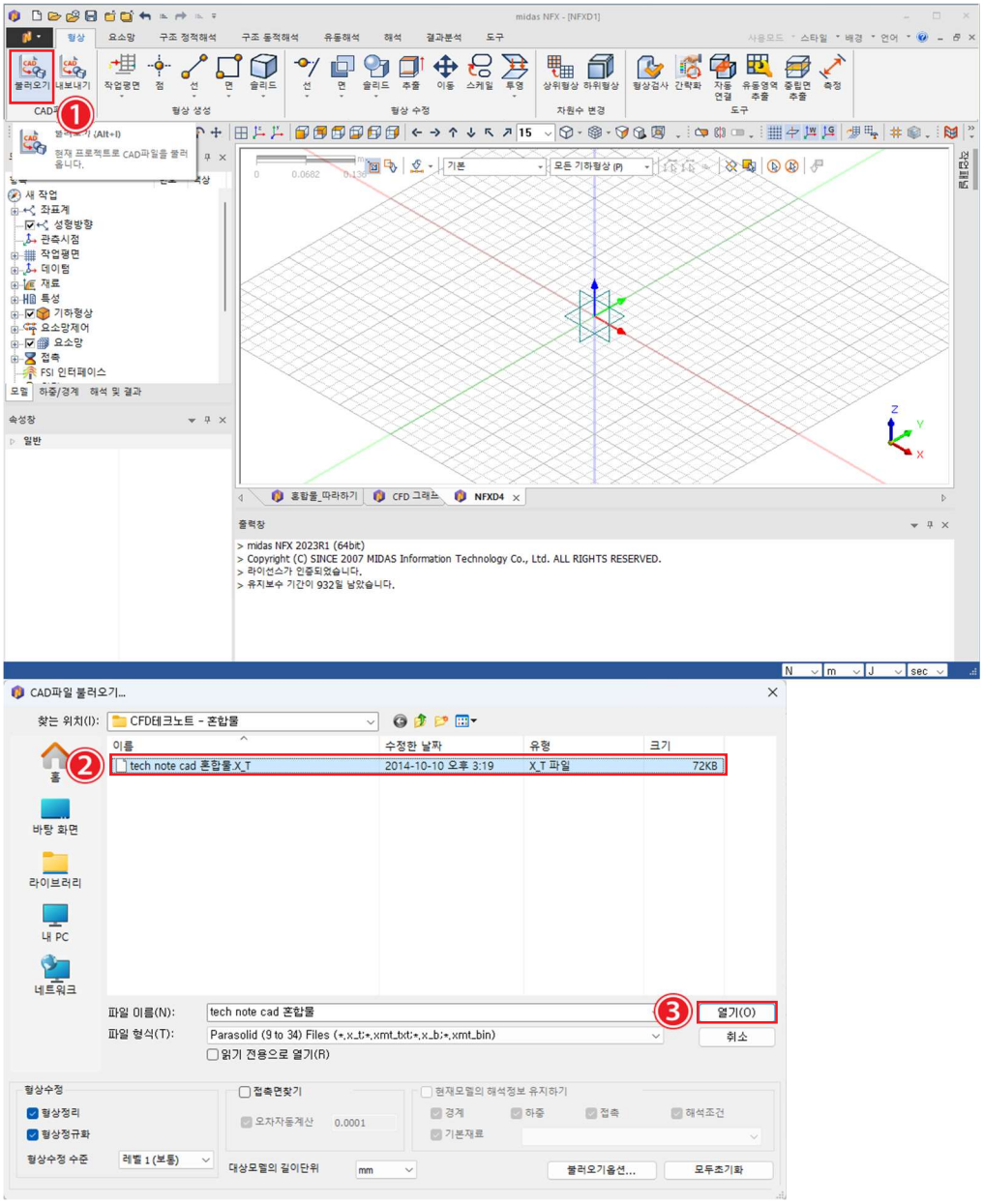
① "새로 만들기" 버튼을 클릭합니다.
② "3 차원/일반모델" 라디오버튼을 클릭합니다.
③ "단위계"를 N-m-J-sec 로 설정합니다. [1]
④ "확인"버튼을 클릭합니다.

[1] 유동해석의 재료 중 함수로 설정되는 데이터베이스가 N-m-J-sec로 저장되어 있으므로 단위계를 확인해야 합니다.



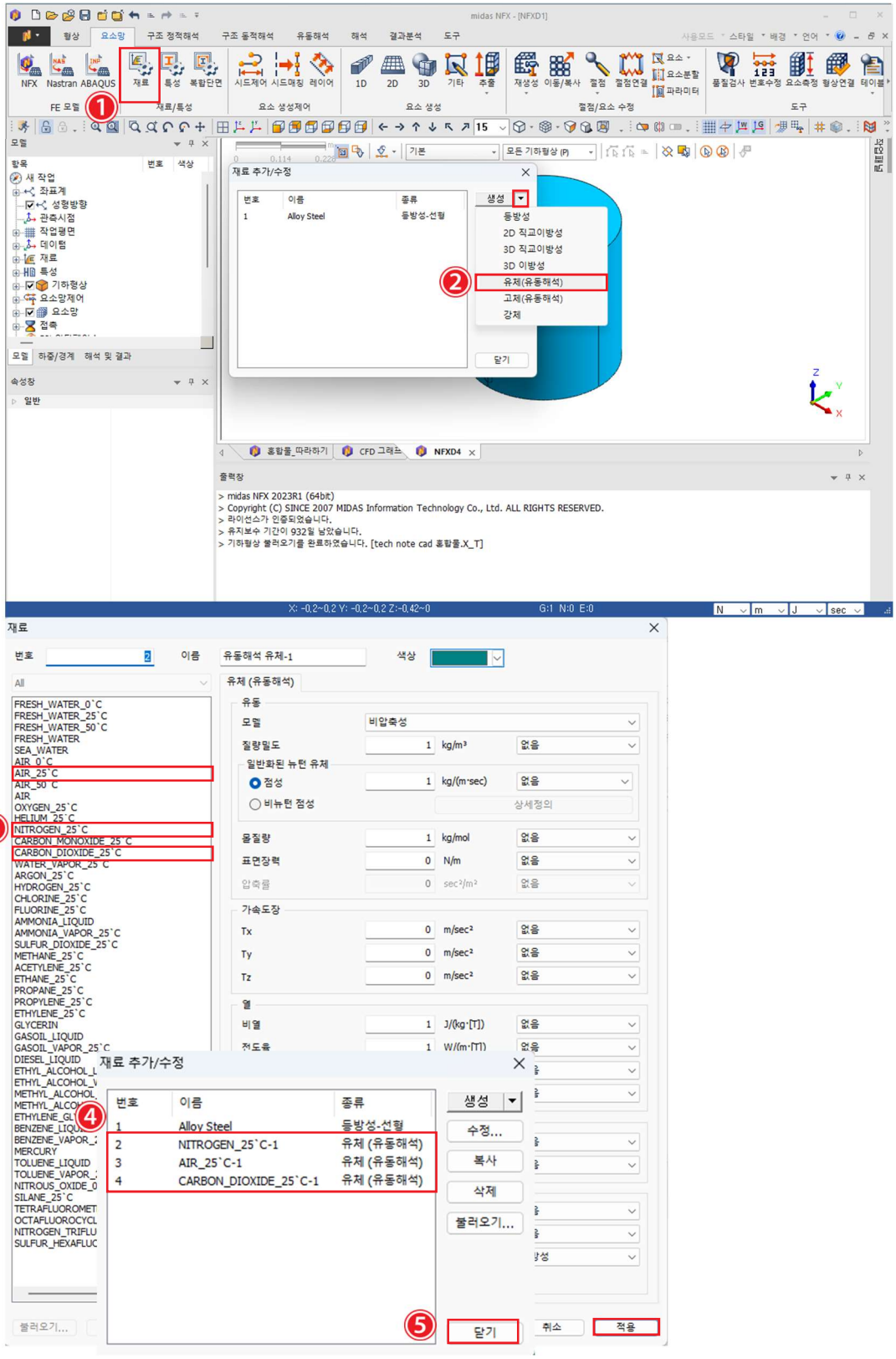
4-2-2. 기하형상 제작

❶ "형상" 리본메뉴 > "불러오기"를 클릭합니다.
❷ 배포된 "Tech Note CAD 혼합물.X_T" 파일을 선택합니다.
❸ "열기"를 클릭합니다.

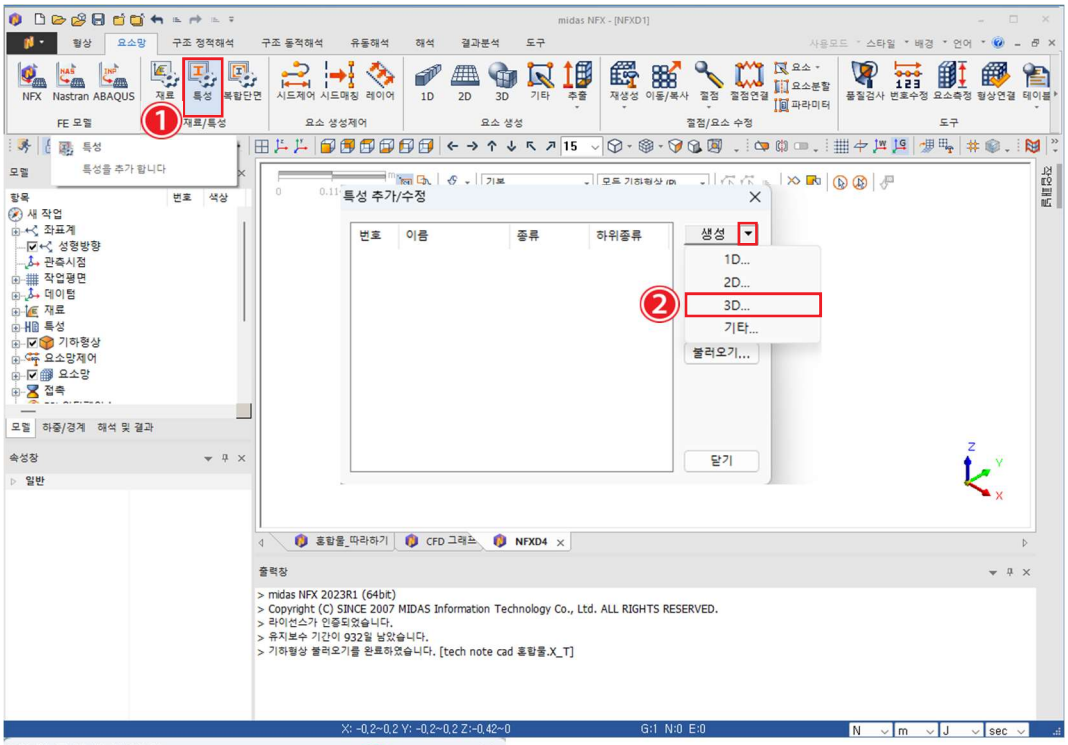


4-2-3. 재료·특성 정의

❶ "요소망" 탭 클릭 > "재료"버튼을 클릭합니다.
❷ "재료 추가/수정"창 > "생성"옆 화살표 클릭 > "유체(유동해석)"을 선택합니다.
❸ "NITROGEN_25'C"를 선택하고 적용을 클릭합니다.
❹ "AIR_25'C"와 "CARBON_DIOXIDE_25'C"를 같은 방법으로 추가합니다.
❺ "닫기"를 클릭합니다.



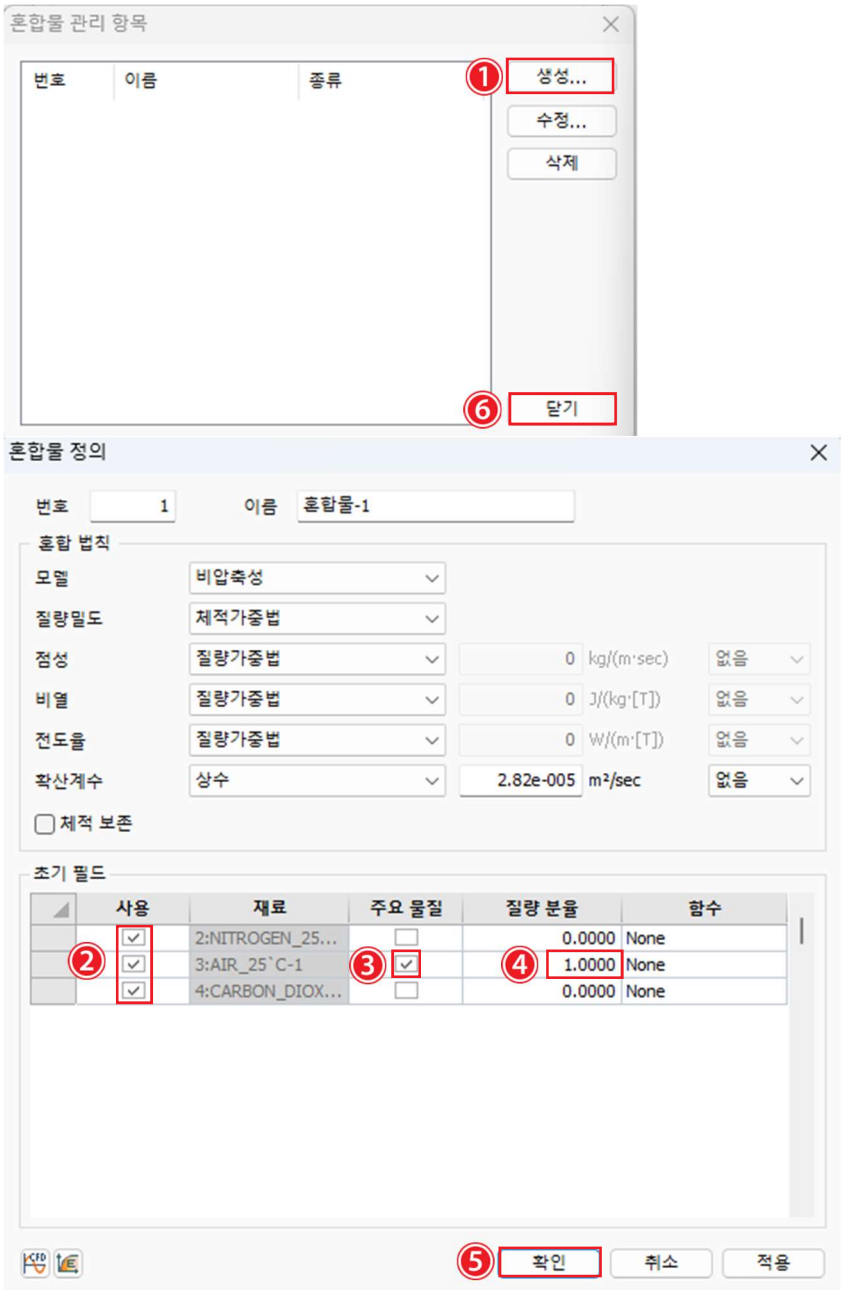
❶ "특성"버튼을 클릭합니다.
❷ "특성 추가/수정"창 > "생성"옆 화살표 클릭 > "3D..."을 선택합니다.
❸ "3D 혼합물 유동해석"탭을 선택합니다.
❹ 이름에 "혼합가스"를 입력합니다.
❺ "혼합물 관리항목"을 클릭합니다.



TIP
농도비율상 가장 많이 차지하는 유체를 주요물질로 선택하는 것이 좋습니다.

[2]
질량분율의 초기값을 입력합니다. 이렇게 설정하면 챔버 내부에 공기가 가득찬 상태에서 해석이 시작됩니다.

❶ "생성"을 클릭합니다.
❷ 모두 "사용"하도록 체크합니다.
❸ "주요물질"을 "AIR_25'C-1"으로 선택합니다.
❹ AIR_25'C-1 의 "질량분율"을 "1"로 입력합니다. [2]
❺ 확인을 클릭합니다.
❻ "닫기"를 클릭합니다.
❼ "혼합물"에 "혼합물-1"로 선택되었는지 확인합니다.
❽ "확인"을 클릭하여 특성창을 닫습니다.



4-2-4. 인접 조건 설정

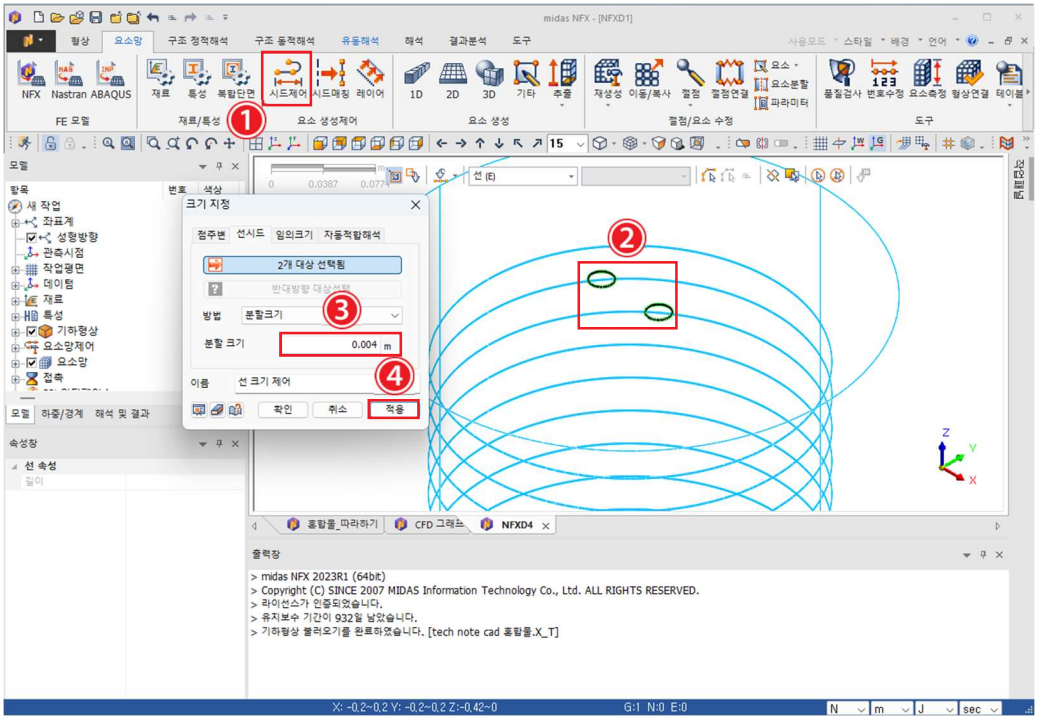
솔리드가 1 개인 경우는 인접조건을 확인할 필요가 없습니다.

TIP

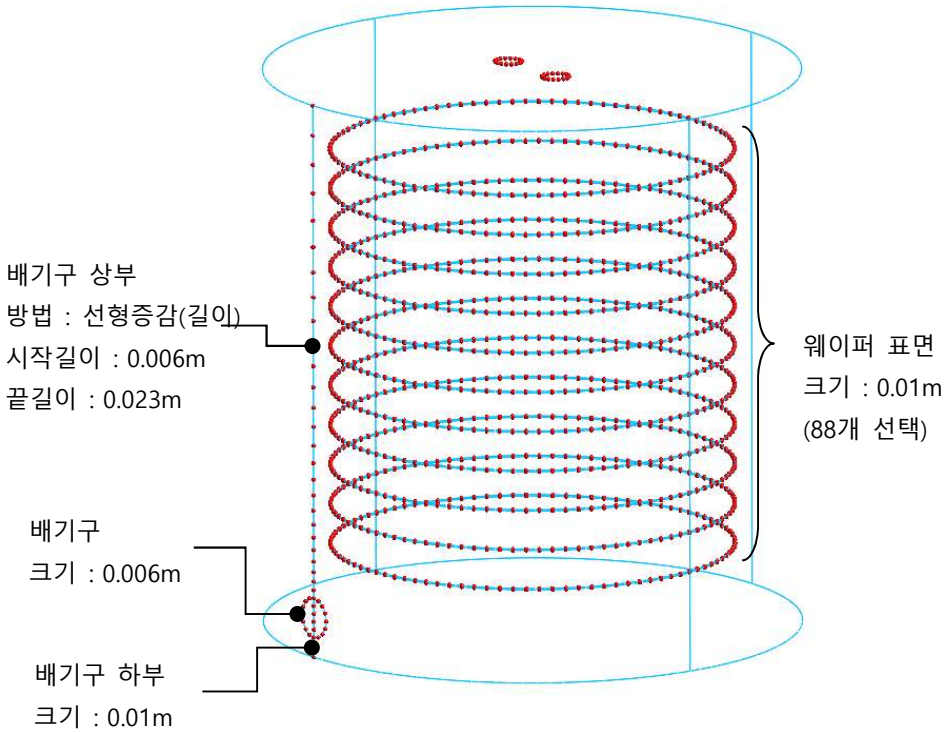
가스 유입구나 배기구에는 5개 이상의 요소가 배치되도록 크기를 지정합니다.

4-2-5. 요소망 생성

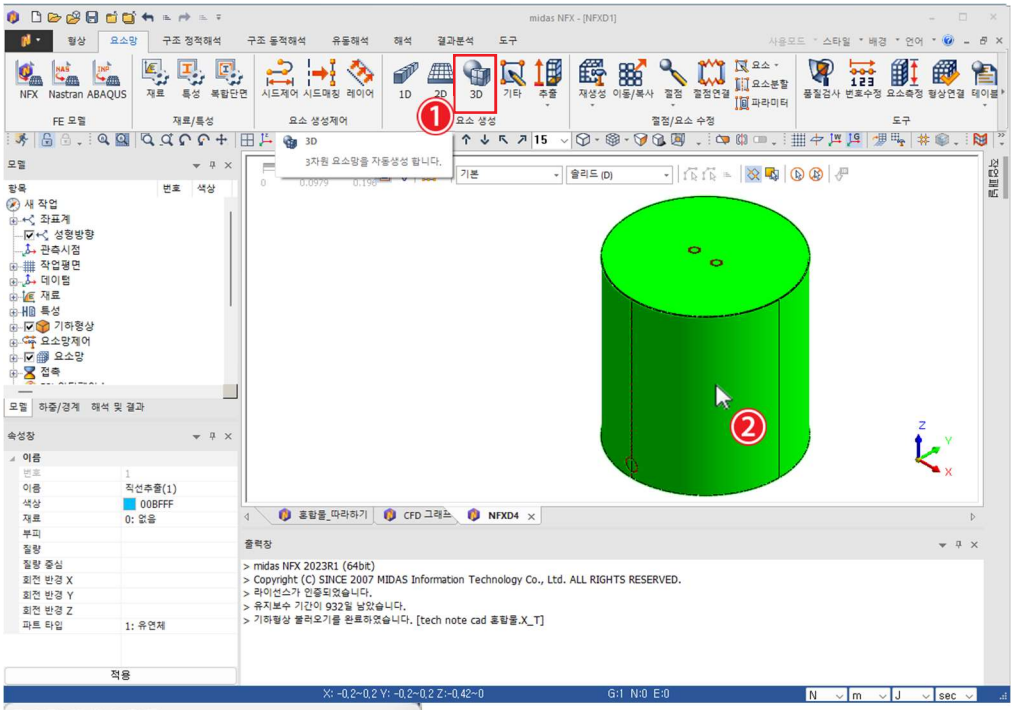
① "시드제어"을 클릭합니다.
② 유입구 두 곳을 드래그하여 선택합니다.
③ "분할크기"를 0.004 로 입력합니다.
④ "적용"을 클릭합니다.

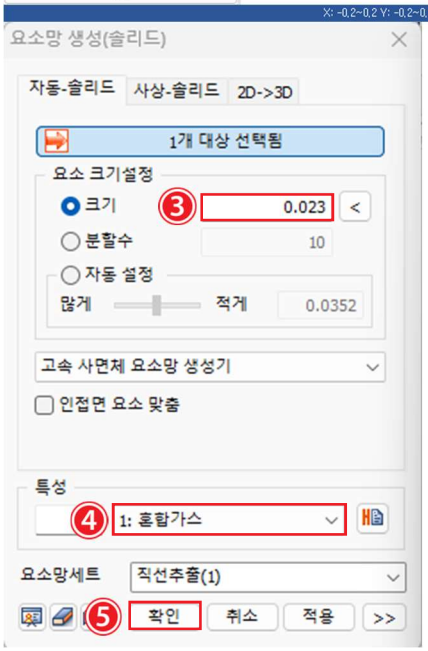


같은 방식으로 다음과 같이 크기지정을 수행합니다.



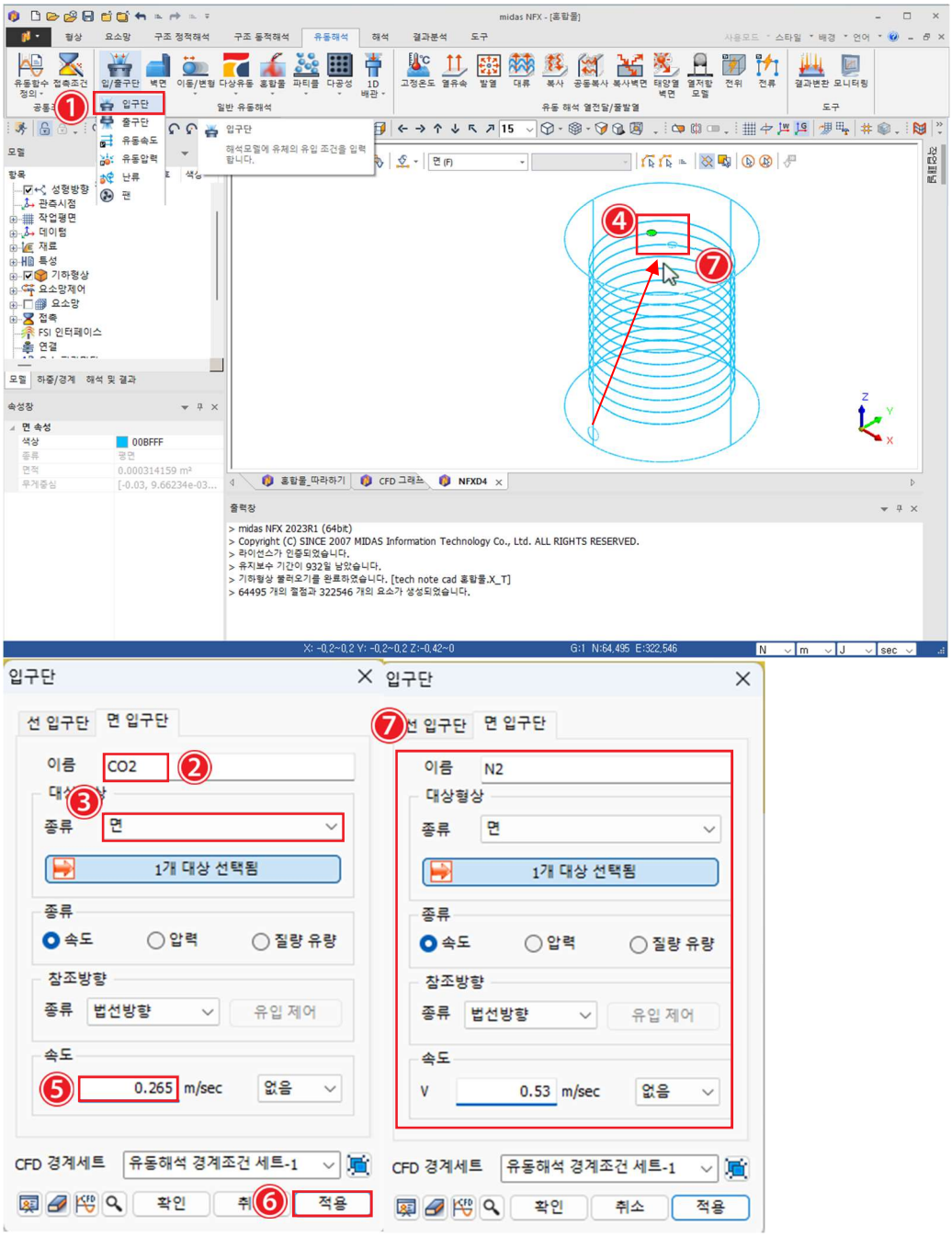
❶ "3D 요소망생성"을 클릭합니다.
❷ 챔버 솔리드를 선택합니다.
❸ "크기"를 0.023 으로 입력합니다.
❹ "특성"이 "혼합가스"로 선택되었는지 확인합니다.
❺ "확인"을 클릭합니다.



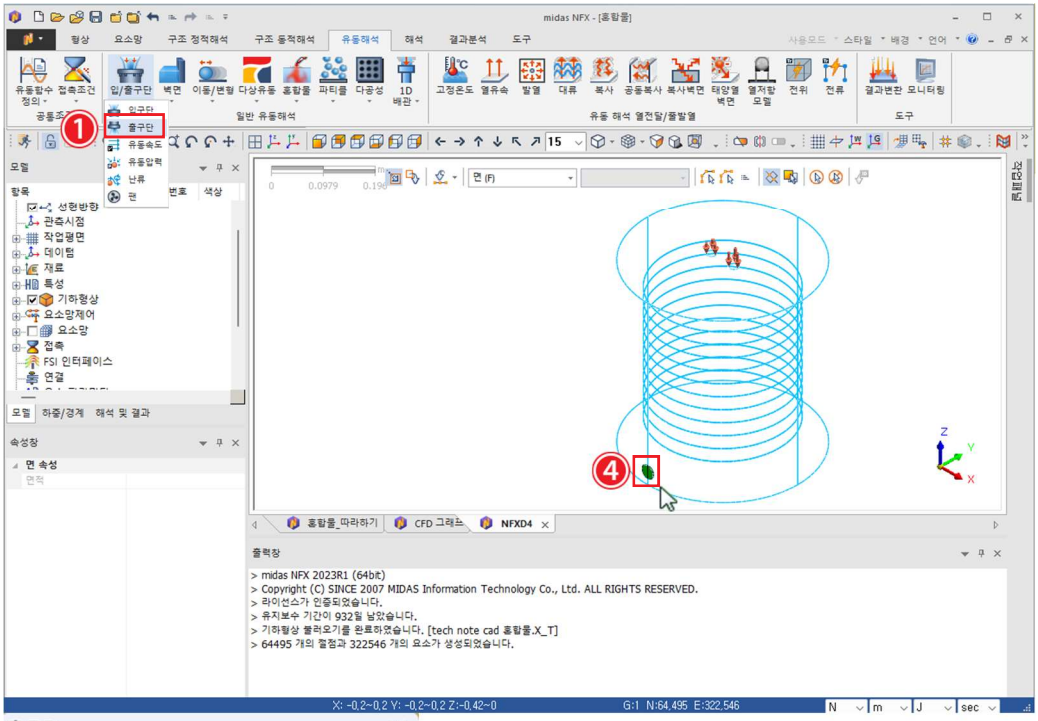


4-2-6. 경계 조건 입력

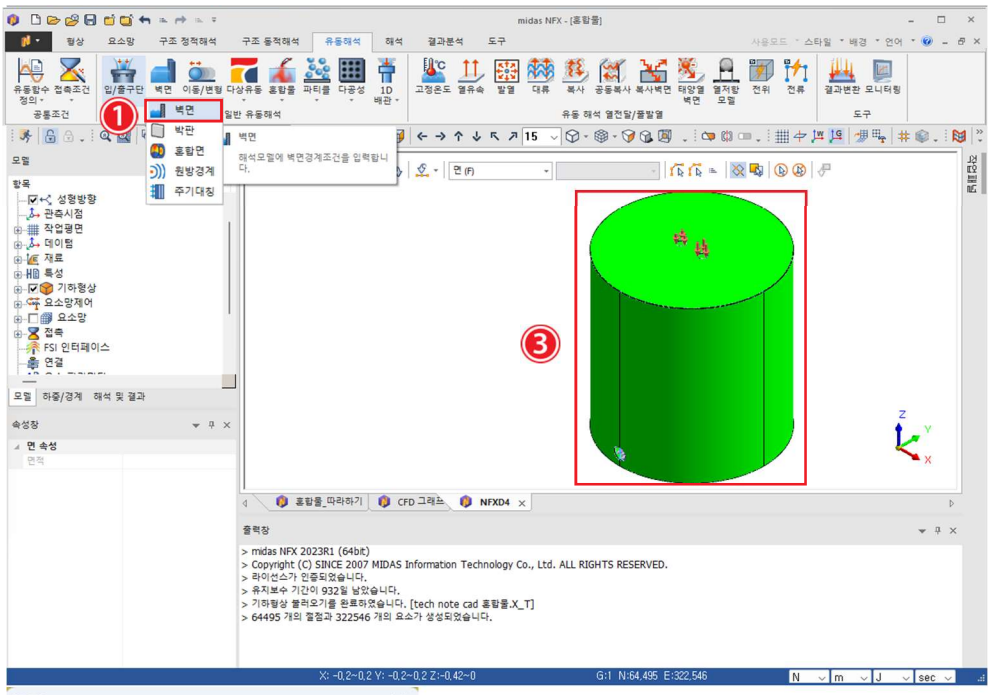
❶ "유동해석" 탭을 선택하고 "입구단"을 클릭합니다.
❷ "이름"을 "CO2"로 입력합니다.
❸ "종류"를 "면"으로 선택합니다.
❹ 좌측 유입구를 선택합니다(배기구 기준).
❺ "속도"를 "0.265"m/s 로 입력합니다.
❻ "적용"을 클릭합니다.
❼ 같은 방법으로 우측 유입구는 이름 N2, 속도 0.53m/s 로 정의합니다.

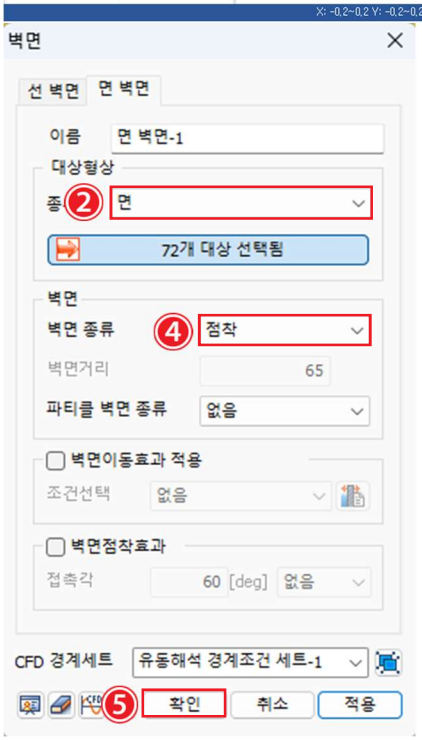


❶ "출구단"을 클릭합니다.
❷ 이름을 "배기구"로 입력합니다.
❸ "종류"를 "면"으로 선택합니다.
❹ 드래그하여 배기구를 선택합니다.
❺ "압력"을 "0"N/m^{2}으로 입력합니다.
❻ "확인"을 클릭합니다.

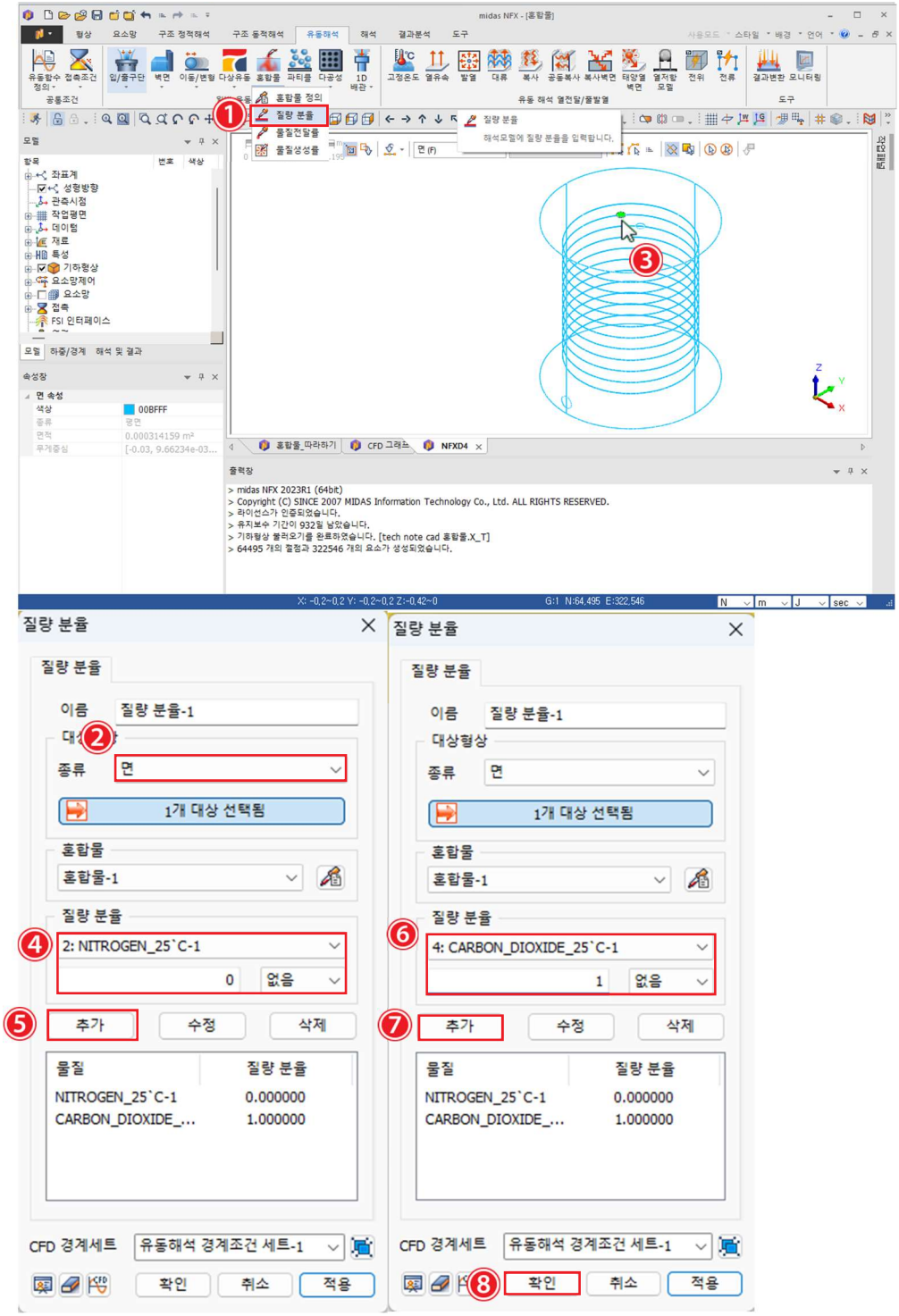


❶ "벽면"을 클릭합니다.
❷ "종류"를 "면"으로 선택합니다(72 개 선택).
❸ 유입구와 배기구를 제외한 모든 면을 선택합니다.
❹ "벽면종류"를 "점착"으로 선택합니다.
❺ "확인"을 클릭합니다.

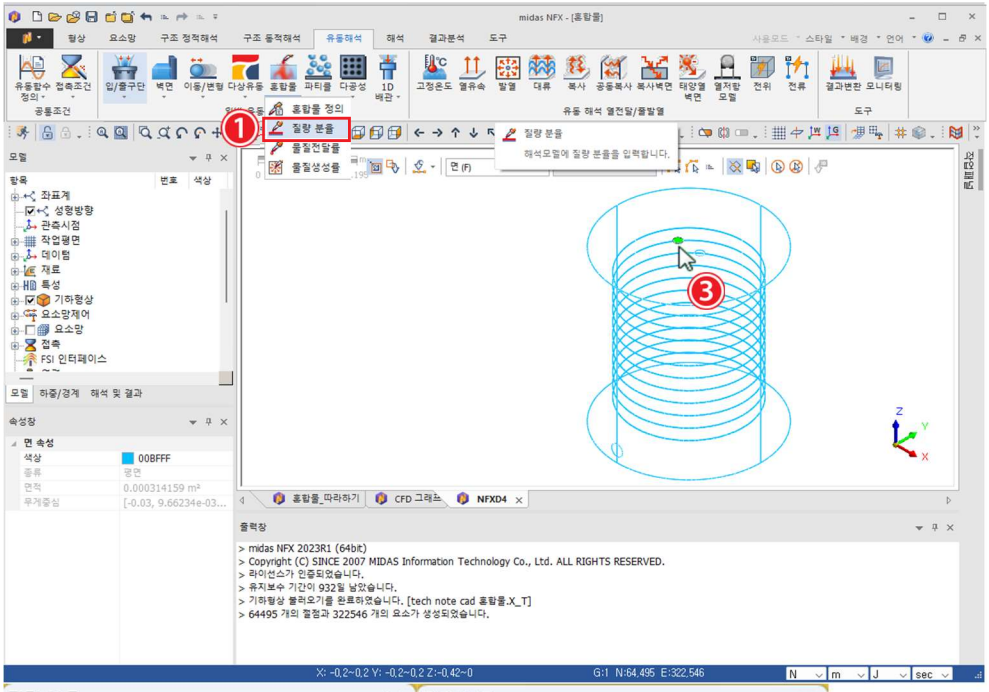




❶ "질량분율"을 클릭합니다.
❷ "종류"를 "면"으로 선택합니다.
❸ 좌측 유입구를 선택합니다(배기구 기준).
❹ 질량분율 종류를 "NITROGEN_25'C-1"으로 선택하고 값에 "0"을 입력합니다.
❺ "추가"을 클릭합니다.
❻ 질량분율 종류를 "CARBON_DIOXID_25'C-1"으로 선택하고 값에 "1"을 입력합니다.
❼ "추가"을 클릭합니다.
❽ "확인"을 클릭합니다.

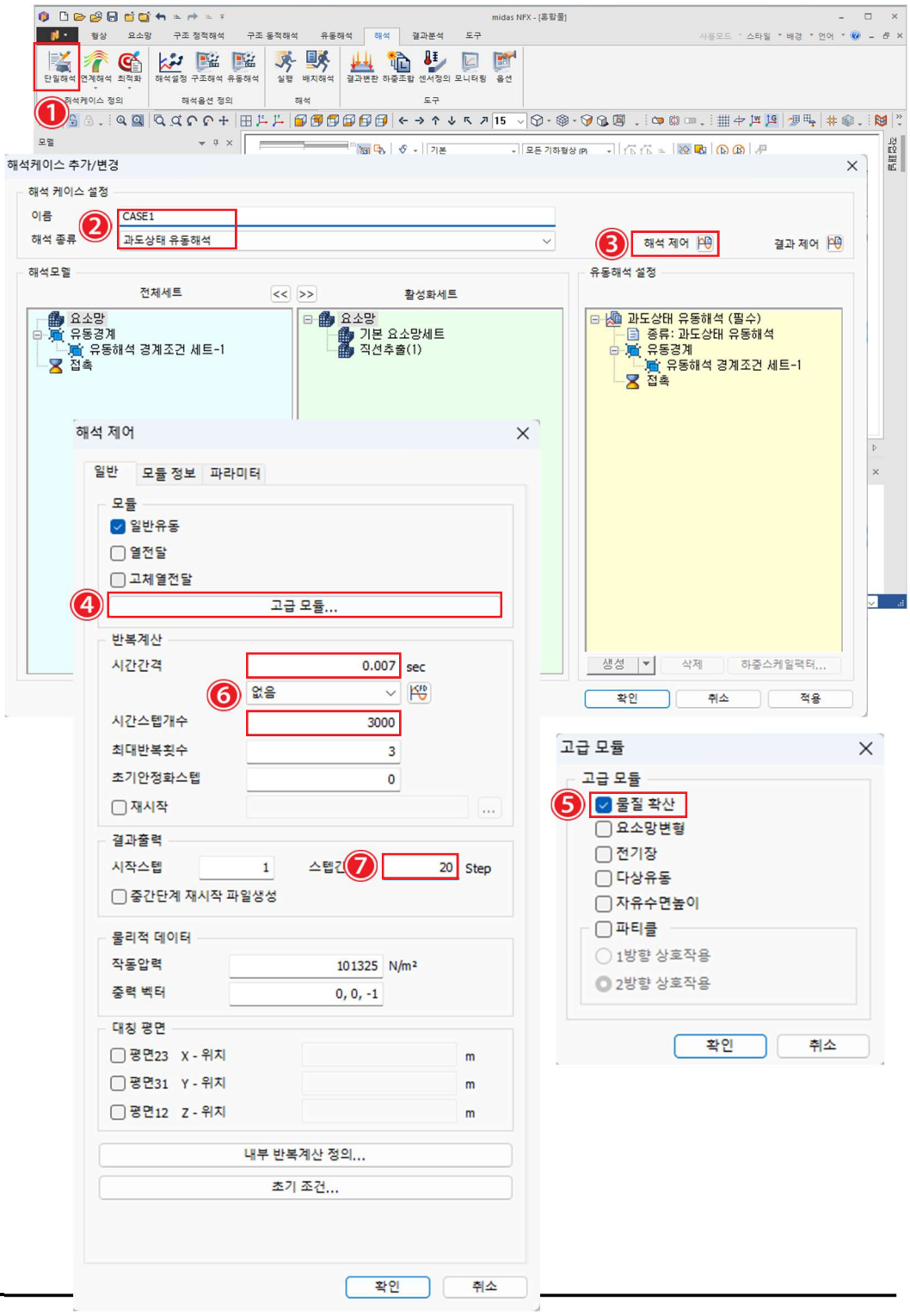


❶ "질량분율"을 클릭합니다.
❷ "종류"를 "면"으로 선택합니다.
❸ 우측 유입구를 선택합니다(배기구 기준).
❹ 질량분율 종류를 "NITROGEN_25'C-1"으로 선택하고 값에 "1"을 입력합니다.
❺ "추가"을 클릭합니다.
❻ 질량분율 종류를 "CARBON_DIOXID_25'C-1"으로 선택하고 값에 "0"을 입력합니다.
❼ "추가"을 클릭합니다.
❽ "확인"을 클릭합니다.



4-2-7. 해석 케이스 정의

❶ "단일해석"을 클릭합니다.
❷ "이름"에 "CASE1"을 입력, "해석종류"에 "과도상태 유동해석"을 선택합니다.
❸ "해석제어"를 클릭합니다.
❹ "고급모듈"을 클릭합니다.
❺ "물질확산"을 체크합니다.
❻ "시간간격"에 0.007 을 입력하고, "시간스텝개수"에 "3000"을 입력합니다.
❼ "결과출력"의 "스텝간격"에 20 을 입력합니다.



① "모듈 정보"를 클릭합니다.
② "층류"를 선택합니다.
③ "부유도 적용"을 클릭합니다.
④ "확인"를 클릭합니다.

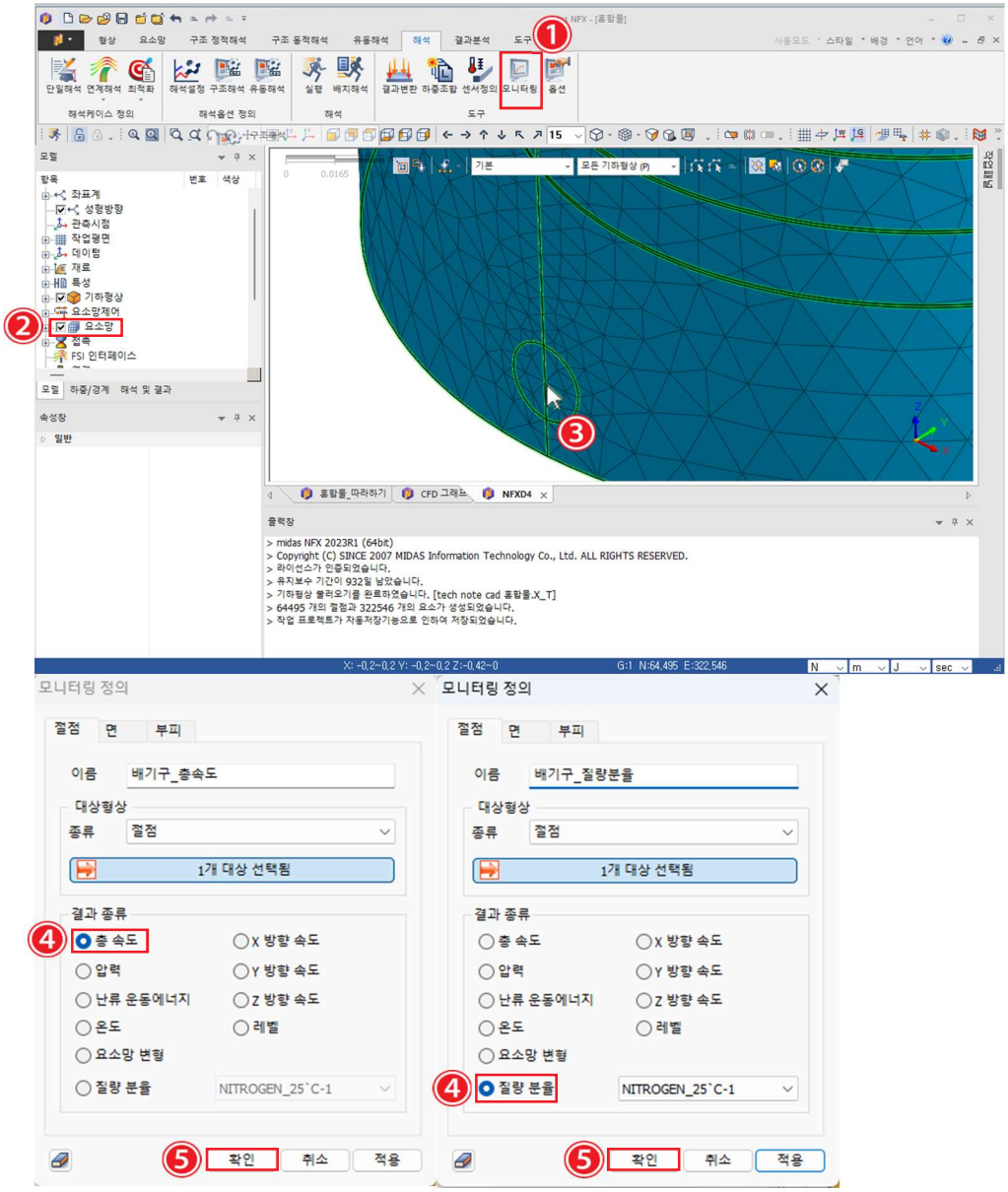
TIP

"부유도 적용" 기능을 통해 분율-밀도 변화에 따른 부유도(부력)을 고려합니다. 작용방향은 증력 벡터 방향에 따라 결정됩니다.

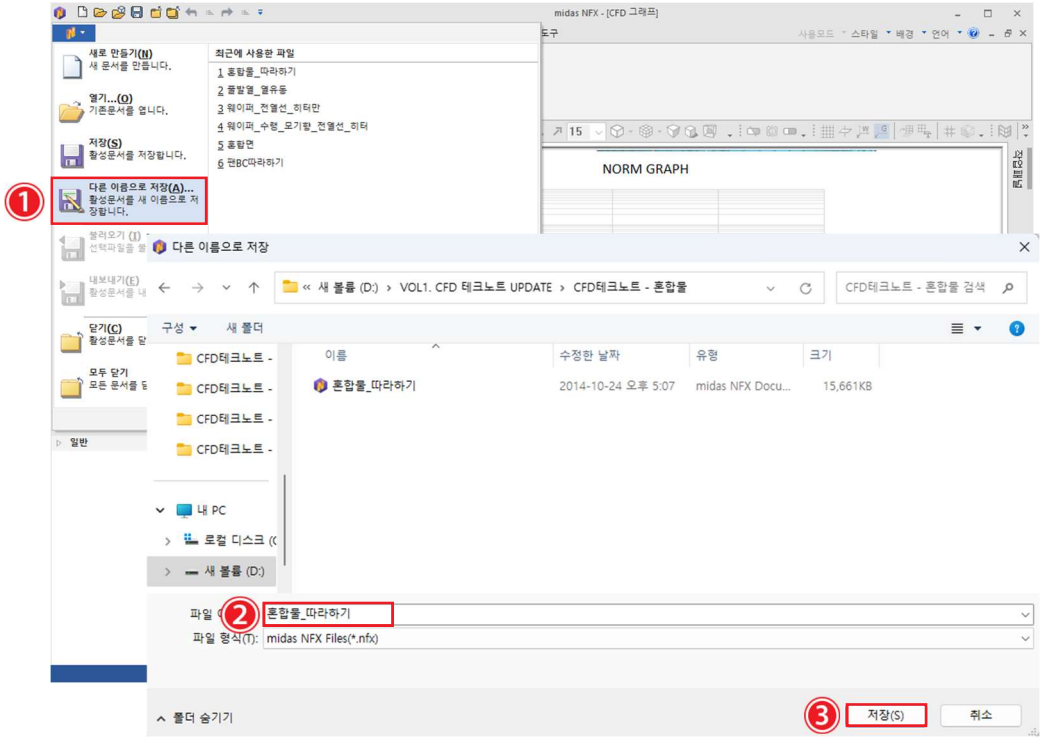
4-2-8. 계산 실행

① "모니터링"을 클릭합니다.
② "모델 트리"에서 요소망을 체크합니다.
③ 배기구의 적당한 위치를 클릭합니다.
④ "총속도"와 "질량분율"을 체크합니다.
⑤ "확인"을 클릭합니다.

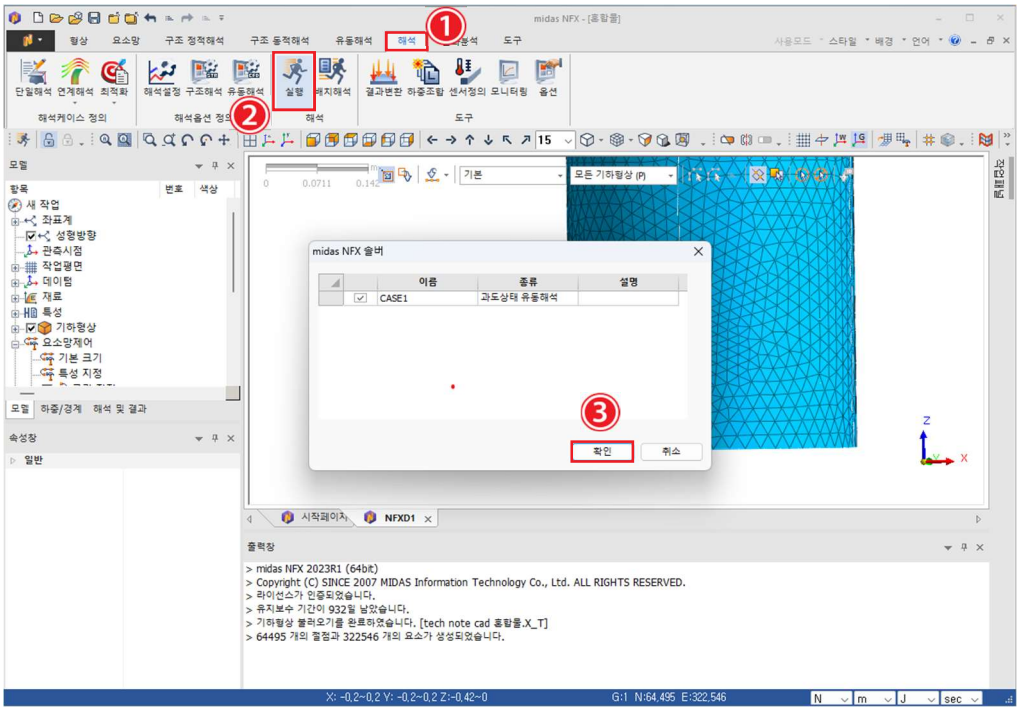
TIP
모니터링 위치는 값의 확인이 필요한 중요한 부분으로 선택합니다. 모니터링을 지정하면 *.grf 파일에 매 step마다 저장됩니다.



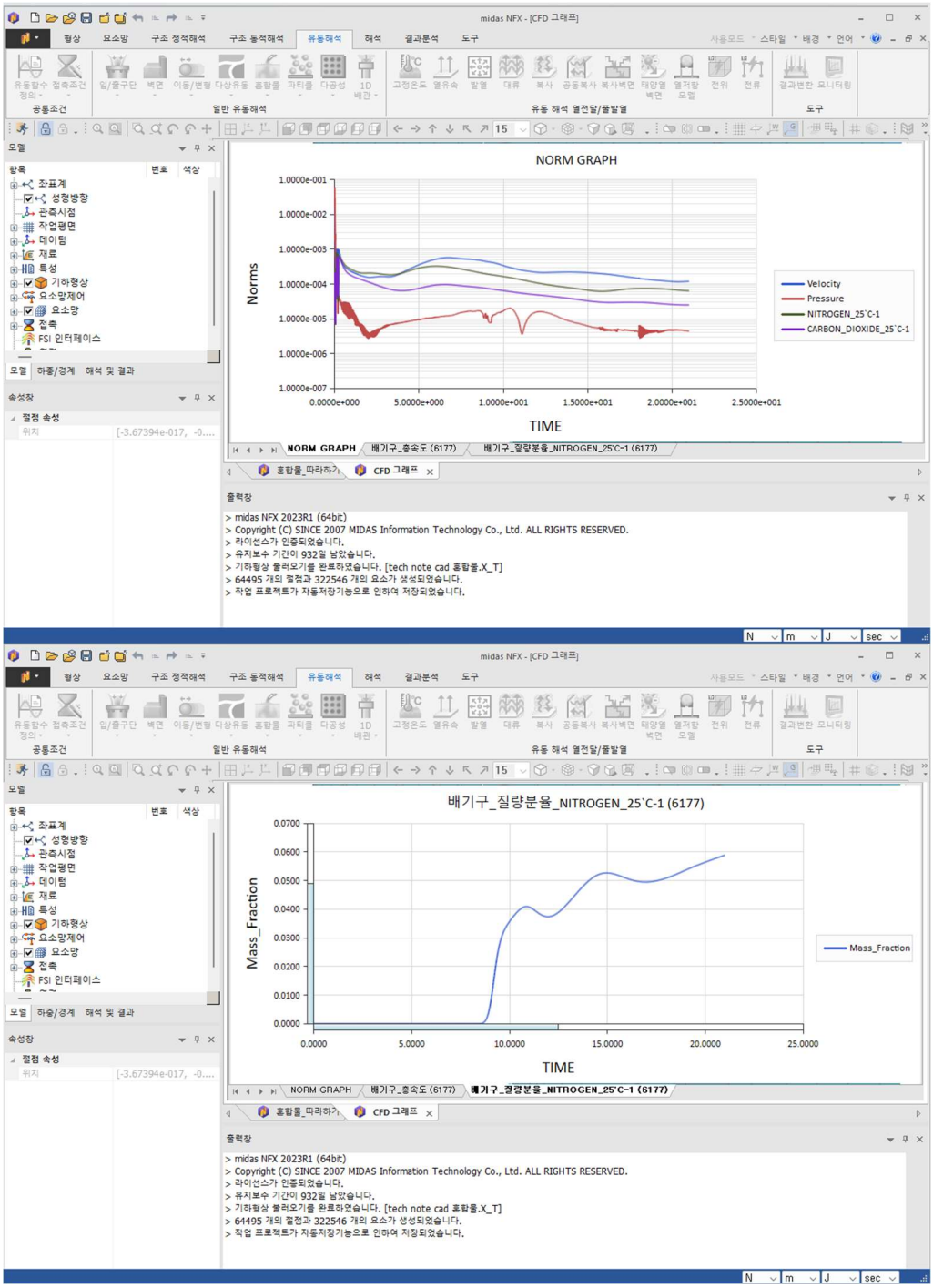
① "메인메뉴" > "저장"을 클릭합니다.
② "파일 이름"입력창에 "혼합물_따라하기"를 입력합니다.
③ "저장"을 클릭합니다.



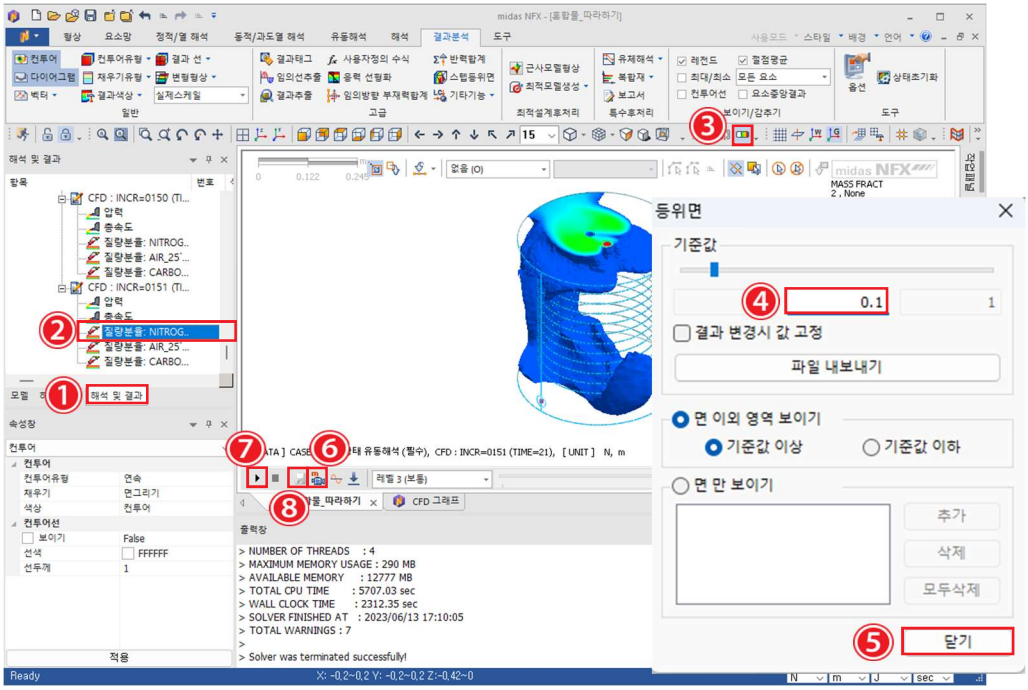
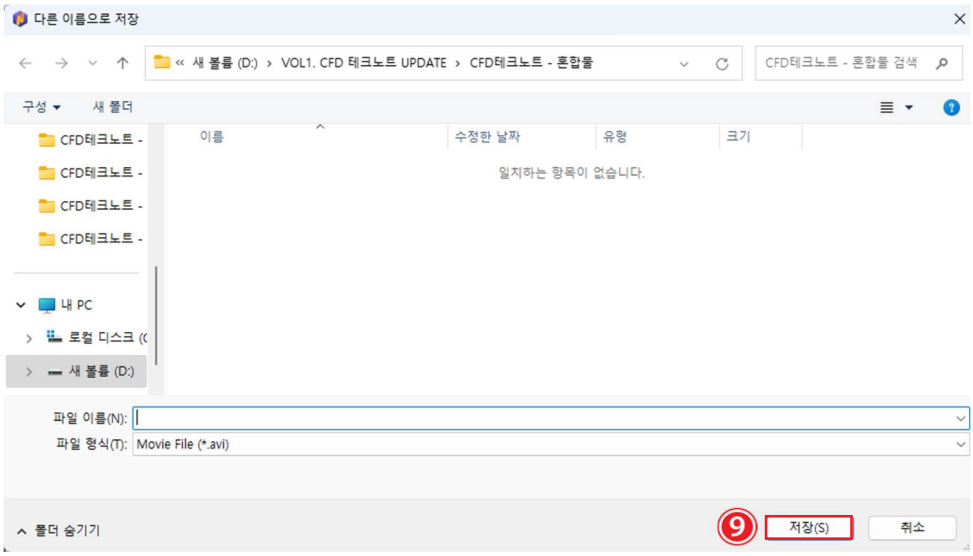
① "해석"탭을 클릭합니다.
② "실행"을 클릭합니다.
③ CASE1 이 체크 되어있는지 확인한 후 "확인"을 클릭합니다.



❶ "Norm graph"와 출력창으로 Norm 값이 0.001 이하로 떨어지는지 확인합니다.
❷ 모니터링 값의 변화를 확인합니다.



4-2-9. 결과 검토

❶ "해석 및 결과"탭을 클릭합니다.
❷ 최종스텝의 "질량분율: NITROGEN_25`C-1"을 더블클릭합니다.
❸ "특정결과면 보이기"를 클릭합니다.
❹ "기준"에 0.1 를 입력합니다.
❺ "닫기"를 클릭합니다.
❻ "멀티-스텝 애니메이션 녹화"를 활성화 시킵니다.
❼ "재생버튼"을 클릭합니다.
❽ "저장"을 클릭합니다.
❾ "파일 이름"을 입력하고 "저장"을 클릭합니다.

TIP
등위면 보이기 기능을 이용하여 동영상을 제작하면 가스가 퍼져 나가는 형상을 볼 수 있습니다.