

고분자 유동의 3차원 해석

이석원, 윤재륜
서울대학교 재료공학부

Three Dimensional Analysis of Polymer Flow

Seok Won Lee and Jae Ryoun Youn

School of Materials Science and Engineering, Seoul National University, Seoul, Korea

1. 서론

복잡한 형상을 지나는 고분자 유체의 유동 해석은 학문적인 관심 뿐만 아니라 고분자 가공 공정을 이해하는데 많은 도움을 주기 때문에 산업적으로도 그 중요성이 높다. 그러나, 기하학적 복잡성이나 재료 자체의 비선형성으로 인하여 해석적인 접근에 한계가 있기 때문에 다양한 수치 해석법을 이용한 유동 해석이 주를 이루고 있다. 특히 고분자 가공 공정의 수치 모사에 있어서는 수치 해석법을 적용하는데 있어서도 완전한 3차원 해석보다는 여러 가지 가정을 적용한 2차원 내지는 2.5차원 해석이 주를 이루고 있는 실정이다. 한편, 고분자 유체를 일반화된 뉴턴 유체로 가정하는 것은 인장 유동을 잘 표현하지 못하고 normal stress difference와 같은 현상을 나타낼 수 없지만, shear thinning 현상을 잘 묘사하고 전단 변형이 지배적인 유동에 있어서는 압력과 속도를 잘 나타낼 수 있기 때문에 고분자 가공 공정의 수치 모사에 많이 적용되고 있다. 고분자 유체의 유동은 일반적으로 큰 점도로 인한 작은 레이놀즈 수로 인하여 관성력을 무시할 수 있는 특징이 있다. 수치 해석 방법으로는 여러 가지 방법이 있지만 유한 요소법 계열의 방법이 복잡한 기하학적 형상을 잘 고려할 수 있기 때문에 많이 이용되고 있다[1]. 비압축성 뉴턴 유체의 점성 유동을 유한 요소법을 이용하여 해석할 때 가장 어려운 점을 절점에서의 압력이 매우 큰 변화로 컷다가 작았다가 교대로 나타나는 checkerboard 압력장이라 할 수 있다[1,2]. 압력과 속도를 같은 절점에서 구할 때 흔히 나타나기 때문에 일반적으로는 속도를 압력보다 높은 차수의 함수로 보간하여 이 현상을 피하고자 하는 방법이 많이 제시되었다[1,3]. 그러나 이는 압력을 계산하지 않는 절점이 발생하기 때문에 상대적으로 압력의 정확도가 떨어지게 되므로 절점을 낭비한다고 볼 수 있다. Prakash[2]는 checkerboard 압력장을 피하면서 속도와 압력을 같은 절점에서 계산하는 검사 체적 유한 요소법(control volume finite element method)을 제안하여 레이놀즈 수가 큰 뉴턴 유체의 2차원 관성력 지배 유동에 적용하여 성공적인 결과를 얻었다. 그러나 Prakash가 제안한 보간 함수는 레이놀즈 수가 매우 작은 한계에서는 모든 방향으로 2차함수의 형태로 귀결되므로 고분자 유동 해석에 적용 시 옳지 않은 결과를 낼 것으로 예상된다. 이에 본 연구에서는 검사 체적 유한 요소법을 이용한 일반화된 뉴턴 유체의 유동 해석 시 좀더 바람직한 속도 보간 함수의 형태를 제안하였다. 이를 LeDain Muir와 Baliga[4]가 제안한 3차원 tetrahedral element와 검사 체적에 적용하여 3차원 유동 해석을 실시하였다. 제안된 속도 보간 함수는 압력 구배가 벡터 양인 점을 고려하여 속도 방향에 수직인 방향으로는 2차 함수의 형태를 가지고 속도 방향으로는 1차 함수의 형태를 지니도록 하였다.

2. 지배방정식

고분자 유체는 비압축성이고 일반화된 뉴턴 유체의 거동을 따르며 큰 점도로 인하여 레이놀즈 수가 아주 작아서 관성력은 무시할 수 있다고 가정하고, 중력의 영향도 무시한다. 유동은 3차원적으로

발생하는 것으로 생각한다. 이때 연속방정식, 운동량방정식과 구성방정식을 함께 나타내면 다음 식과 같다.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} - \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} - \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} - \frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \eta \left((\nabla \mathbf{v}) + (\nabla \mathbf{v})^T \right) \quad (5)$$

여기서 u, v, w 는 벡터 \mathbf{v} 의 x, y, z 성분으로써 각 방향의 속도를 나타내고, $\boldsymbol{\tau}$ 는 stress 텐서를 나타낸다. η 는 일반화된 뉴턴 유체의 점도로써 전단 변형을 속도의 함수이다. 식 (5)는 stress 텐서의 대칭성을 생각하면 6개의 식으로 나타내어 질 수 있다. 경계조건은 벽면에서는 비미끌어짐 조건을 사용한다. 입구 부분에서는 속도 profile이 주어져야 하고, 출구 부분에서는 fully developed condition이 주어지거나 입구와 마찬가지로 주어진 속도 profile을 적용할 수 있다.

3. 수치 해석

본 연구에서는 검사 체적 유한 요소법을 이용하여 위의 지배방정식에 대한 해를 찾으려 하였다. 우선 해석 영역이 Fig. 1과 같은 tetrahedral element로 나누어져 있다고 가정하였다. 각 요소의 중심점과 각 면들의 중심점을 연결하여 Fig. 1에 나타나 있는 것처럼(1atcdsor) 절점 1에 대한 부검사 체적(sub-control volume)을 정의하였다. 절점 1에 대한 검사 체적은 절점 1을 둘러싸고 있는 모든 요소들의 부검사 체적을 더하여 정의 되었다. 이를 모든 절점에 대하여 고려하면 해석 영역내의 모든 절점에 대한 검사 체적을 정의할 수 있다. 각 요소에서 점도는 일정하다고 가정하였고, 요소의 절점에서 압력과 속도를 계산하였다. 일반적인 갤러킨 유한요소법을 사용하는 경우, 압력과 속도를 같은 절점에서 계산하면 checkerboard 압력장이 나타날 수도 있는 것으로 알려져 있지만[1,2], 본 연구에서는 아래에 설명되는 새로운 보간함수를 이용하여 이 현상을 피하였다. 우선 압력은 선형함수로 가정되었다.

$$p = a^p x + b^p y + c^p z + d^p \quad (6)$$

속도의 보간에 있어서는 압력장의 영향을 source 효과로 고려하고 운동량 방정식과 구성방정식을 동시에 만족시킬 수 있는 형태로 다음과 같이 가정하였다.

$$u = a^u x + b^u y + c^u z + d^u + \frac{1}{\eta} \frac{\partial p}{\partial x} \left(x + \frac{1}{4}(y^2 + z^2) \right) \quad (7)$$

$$v = a^v x + b^v y + c^v z + d^v + \frac{1}{\eta} \frac{\partial p}{\partial y} \left(y + \frac{1}{4}(x^2 + z^2) \right) \quad (8)$$

$$w = a^w x + b^w y + c^w z + d^w + \frac{1}{\eta} \frac{\partial p}{\partial z} \left(z + \frac{1}{4}(x^2 + y^2) \right) \quad (9)$$

식 (7)-(9)에서 마지막 항이 압력장의 영향을 고려한 것으로 속도가 압력 구배를 이용하여 직접적으로 묘사되고 있기 때문에 checkerboard 압력장이 나타나는 것을 방지할 수 있다. 또한, 압력 구배는 벡터 양이고 속도에 미치는 영향이 모든 방향으로 일정하게 나타나지 않기 때문에 이를 뉴턴 유체의 1차원적 파이프 유동의 해를 고려하여 속도 성분과 수직인 방향으로만 2차함수의 형태를 띠도록 보간함수를 설정하였다.

압력장을 계산하기 위해서는 식 (1)을 검사 체적에 대하여 적분한 후 divergence theorem을 이용

하여 검사 체적의 면에 대한 적분으로 바꾼 후 식 (7)-(9)를 대입하고, 식 (6)을 이용하여 압력 구배를 구하면 다음과 같은 형태로 나타낼 수 있다.

$$\left(\sum_{nb} g_{nb}^p\right) p_1 = \sum_{nb} g_{nb}^p p_{nb} + h^p \quad (10)$$

여기서 아래첨자 nb 는 절점 1을 둘러싸고 있는 모든 요소와 절점을 나타낸다. x 방향의 속도, u 는 식 (2)를 검사 체적에 대하여 적분한 후 divergence theorem을 이용하여 면 적분으로 바꾼 후, 식 (6)-(9)에 대입하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\left(\sum_{nb} q_{nb}^u\right) u_1 = \sum_{nb} q_{nb}^u u_{nb} + r^u \quad (11)$$

v 와 w 에 대해서도 마찬가지로 적용하여 위와 같은 식을 만들 수 있다. 식 (10)과 (11)의 계수들은 참고문헌 [5]에 유도되어 있다. 위의 식들에서 볼 수 있듯이 한 절점에서의 압력이나 속도는 그 주위 절점들의 값을 이용하여 바로 계산될 수 있기 때문에 node-by-node iteration을 통하여 해석 영역내의 모든 절점에서 압력과 속도를 간편하게 계산할 수 있다. 비선형성이 큰 경우에는 under-relaxation을 이용하여 수렴성을 향상시킬 수 있다.

4. 결과 및 토의

위에 제시한 검사 체적 유한 요소법을 검증하기 위하여 간단한 power-law 유체의 1차원 파이프 유동을 3차원적으로 해석해 보았다. 파이프 내의 3차원 메쉬(mesh)를 Fig. 2 (a)와 같이 생성하였다. 벽면에서는 비미끌어짐 조건을 부여하였고, 입구에서는 알려져 있는 파이프 유동의 1차원 해가 주어졌으며, 출구에서는 fully developed condition을 적용하여 수치해석을 수행하였다. 출부 부분의 압력은 0으로 주어졌다. Fig. 2 (b)와 (c)에 power-law index, n 이 0.6인 경우 수치해석의 결과로 얻은 해와 해석적으로 알려져 있는 해를 도시하였다. 그림에서 확인할 수 있듯이 수치해석의 결과와 해석적 결과에 거의 차이가 없음을 확인할 수 있었다. Fig. 3 (a)에는 일반적인 유한 요소법을 적용하는 경우 checkerboard 압력장이 나타나는 것으로 보고된[3] driven cavity 문제에 대한 메쉬와 경계조건을 나타내었다. Fig. 3 (b)와 (c)에서 확인할 수 있듯이 checkerboard 압력장이 나타나지 않는 것을 확인할 수 있다. Fig. 4 (a)와 (b)에는 본 연구에서 개발된 검사 체적 유한 요소법을 유동 선단이 시간에 따라 진행되는 이동 경계 문제에 적용한 결과이다. 복잡한 3차원적 형상의 캐비티를 채워가는 고분자의 유동을 잘 예측하고 있음을 확인할 수 있다.

후기

This study was supported by the Korea Science and Engineering Foundation (KOSEF) through the Applied Rheology Center (ARC), an official KOSEF-created engineering research center (ERC) at Korea University, Seoul, Korea.

참고문헌

1. C. L. Tucker III, "Fundamentals of computer modeling for polymer processing," Carl Hanser Verlag, New York, 1989.
2. C. Prakash, *Numer. Heat Transfer*, **9**, 253 (1986).
3. M. Gupta, T. H. Kwon, and Y. Jaluria, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **14**, 557 (1992).
4. B. LeDain Muir and B. R. Baliga, *Numer. Heat Transfer*, **9**, 143 (1986).
5. S. W. Lee, *PhD Thesis*, Seoul National University, Seoul, 2003.

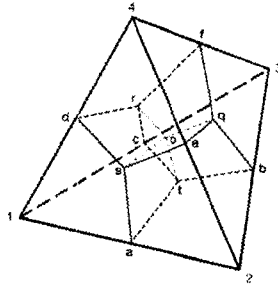


Fig. 1. Tetrahedral finite element and definition of the sub-control volume.

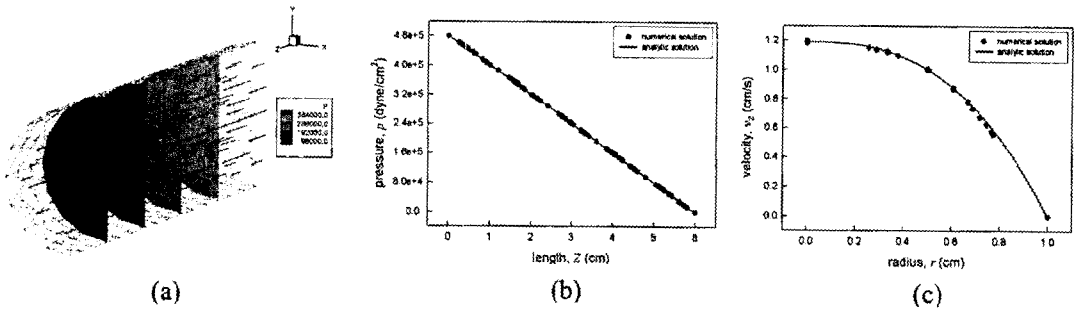


Fig. 2. Calculated (a) pressure distribution and velocity vectors, and comparison between analytic solution and numerical solution of (b) pressure with respect to the axial distance and (c) axial velocity with respect to the radial distance for power-law fluid of $n=0.6$.

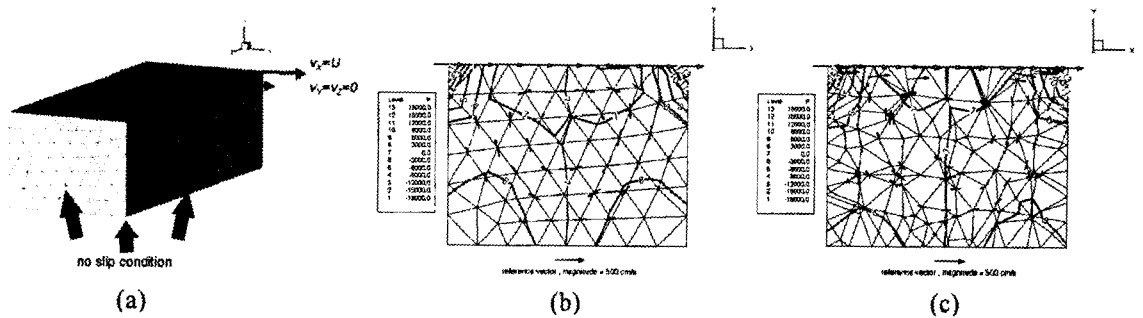


Fig. 3. (a) Finite element meshes and boundary conditions for driven-cavity problem, and calculated pressure distribution and velocity vectors in the cross-section (b) at $Z=50$ cm and (c) at $Z=25$ cm of the cavity for power-law fluid of $n=0.6$.

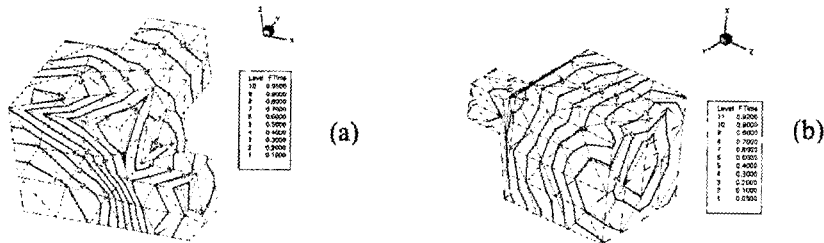


Fig. 4. Predicted filling pattern with respect to time (a) for the complex shaped cavity and (b) for the cavity contracting with an angle.