

고분자 복합재료의 유동성형시 발생하는 단섬유의 배열

고 진 · 윤재륜

한국과학기술원, 생산공학과
(1991년 8월 29일 접수)

Short Fiber Orientation during Flow Molding of Polymer Composites

Jin Ko and Jae R. Youn

*Department of Production Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology
P.O. Box 150, Cheongryang, Seoul 130-650, Korea
(Received August 29, 1991)*

1. 서 론

최근 기계구조물의 제작에서 보강재(reinforcement)가 첨가된 고분자 복합재료, 특히 섬유보강 고분자 복합재료(FRP)의 이용이 증가되고 있는데 이것은 고 비강도, 고 비강성, 고 인성과 우수한 내부식성 등의 특성에 기인한다. 그러나 장섬유 복합재료는 노동집약적 작업의 필요성과 복잡한 기하학적 구조의 제작시 어려움으로 인해 제약을 받게 됨에 따라 장섬유 복합재료의 장점을 일부 유지하며 대량생산과 복잡한 구조의 제작이 가능한 단섬유 강화 고분자재료(short fiber reinforced plastics: SFRP)의 성형이 관심의 대상이 되어왔다. 이러한 고분자 복합재료에 대한 유동성형(flow molding)의 대표적 예로는 사출성형(injection molding), 압축성형(compression molding), 전달성형(transfer molding) 등을 들 수 있다.

SFRP는 장섬유 복합재료(continuous fiber composite)에 비해 강하거나 경하지 않고, 가공공정 중 성형품 내부에는 유동에 의해 단섬유들이 복잡한 배열을 이루어 이방성(anisotropy)이 피할 수 없이 발생하게 됨에 따라 제품의 미시적 구조(micro-structure), 기하학적 모양(geometry, distortion), 그리고 기계적 성질(toughness, strength, elastic mo-

dulus, hardness, etc.) 등에 악 영향을 미칠 수도 있다. 그러나 금형 내의 유동장과 단섬유의 배열을 예측하고 배열을 원하는 방향으로 제어할 수 있다면 재래식 고분자재료 가공공정을 이용할 수 있을 뿐만 아니라 이 때의 이방성을 장점으로 이용할 수 있어 SFRP는 좀 더 강하고 가볍고 신뢰성있는 제품이 될 수 있다.

성형시 유동장 내의 단섬유배열에 대한 이론적 연구는 1920년대에 Jeffery[1]가 뉴우튼유체(Newtonian fluid)와 희박현탁액(dilute suspension)을 가정하고 타원체의 회전운동에 대한 이론적 연구를 수행한 것을 시발점으로 하여 희박현탁액에 대해서는 1960년대부터 실험과 수치적해법을 통하여 활발한 연구가 진행되어 왔고[2-9], 1980년대부터는 Jeffrey의 식을 이용한 Gillver[2] 등의 활발한 수치해석 연구(Table 1)와 함께 Folgar[10]의 실험매개변수를 도입한 농축현탁액(concentrated suspension) 내에서의 단섬유 배열에 대한 해석도[11-15] 행하여져 왔다. 수치해석은 그 기법의 제한과 컴퓨터 용량의 제한으로 간단한 형상과 얇은 형상에 국한되어 있었지만 섬유배열의 표현방식에 텐서를 도입하면서 큰 진전을 보이고 있다[16-17]. 한편, 각각의 금형 형상과 조건에 대한 실험과 해석 및 검증도 많은 연구가 진행되어 왔는데 이들을 정리하면

Table 1. Summary of numerical orientation simulation

RESERCHER	IND	SCHEME	MOLD GEO.	DIM	CON	ASSUMPTION	Yr	COMMENT
R.C. Gilver, <i>et al.</i>	phi	FEM, R-K, P-C	plane	2D	dil	Newt, no slip, steady, creeping	83	Jeffery eq., complex flow, spheroid
F. Folgar, C.L. Tucker III	ODF			2D	s-con	random distrib., no Brounian m. incomp., creep.	84	experimetal parameter C, ODF analysis
J.W. Gillespie, <i>et al.</i>	phi OP	PNR (FEM)	end gated bar	2D	dil	Newt, spheroid, no slip	85	int. along stream line, Gilver eq, pin
M. Vincent, J.F. Agassant	phi OP	FDM, R-K	center gated disc	3D	dil	n-Newt, n-isot, power law, spheroidal, unstea.	86	two-step appr. flow field: ori
S. Kenig	phi		rec	2D	dil	Newt, n-isot	86	9-layered str. 4-region, lambda
W.C. Jackson, <i>et al.</i>	ODF	FEM FDM	rec	2D	con	non-uniform flow, GHS	86	F. Folgar, $L/t \gg 1$, exp, C/M
G.G. Lipscomb II, <i>et al.</i>	OT	FEM	capillary tube	3D	dil	n-Newt	88	Streak photo, complex geo.
M.C. Altan, <i>et al.</i>	ODF OT	IMSL, DBLIN		2D 3D	s-con	homogeneous flow field	89	Dinh-Armstrong model
J. Rogenberg, M. Denn	ODF	PNR	die swell	2D	dil	non-recirculating flow	90	
L.G. Reifschneider, <i>et al.</i>	OT	FEM(PLAS TEC),N-R	thin walled	3D	s-con		90	C/M, frontal solver
M.C. Altan <i>et al.</i>	OT	FDM	converging channel	3D	dil	Newt, Hele-Shaw, quasi-steady	90	0 vol% limit, conformed grid
R.F. Eduljee, J.W. Gillespie	phi		axi-sym.	2D	dil	n-Newt, n-isot	90	Jeffery, analytic solution
S.G. Advani, C.L. Tucker III	OT	FEM control vol.	thin plat	2D	con	Newt, homogeneous flow, GHS	90	SMC C/M, transient
T. Matsuoka	ODF OP	FDM	thin wall ed	2D	con	n-Newt, HS	90	Folgar eq., FAN methods

Table 2와 Table 3에 주어진 바와 같다[18-33].

유동성형에서 SFRP의 성능(performance)은 조성 (composition), 외형비(aspect ratio), 고분자 수지 (polymer resin)의 종류, 섬유(fiber)와 충전제(filler)의 종류 등과 같은 성형혼합물의 특성과 가공 공정 중에 발생하는 섬유배열에 의해 영향을 받고 [16], 섬유배열의 분포는 금형형상(mold geometry), 성형조건(processing condition), 유변학적 성

질(rheological property)[26, 27, 29] 등에 영향을 받는것으로 알려져 있다.[18-33](Fig. 1).

단섬유 배열에 영향을 주는 금형내의 유동장은 크게 전단유동(shear flow)과 인장유동(elongational flow)으로 나누어지며 인장유동에는 converging flow, diverging flow, radial flow, fountain flow 등이 있다. 유동장이 섬유배열에 미치는 영향은 인장유동의 영향이 전단유동 보다 크고, 단섬유의 주 배

Table 2. Summary of fiber orientation experiments

RESEARCHER	MOLD	SETUP	FLOW	VOL%	L/D	MAT	VARI	Yr	COMMENT
J.P. Bell		rheo	C	50	30	ep, gl	po, ang, sr	69	tracer, pre-ori.
L. Kacir, <i>et al.</i>	filter bed	hopper	CDS	1 (wt)	310	glycerin, gl	t, L/D, vel, ang, T, fr.	75	statistical, gl. bundles
M.W. Darlinton, P.L. McGinley	tensile bar	I/M	CDS		0.3~20	nylon 66, DMC		75	CMR
R.J. Crowson, <i>et al.</i>	rec, chan.	I/M	CDS	20 (wt)	50	PP, gl, nylon 66	L/D, sr, L, T, vis, fr, po	80	Bagley plot, die swell
F. Folgar, C.L. Tucker III		con. cyl	SE	5	8	glycerin, gl	L/D, sr	81	fiber bundles
W.W. Chan, <i>et al.</i>		rec, cir, rheo	C	30	20 (wt)	PP, gl	L, D, T, ang, sr, l	83	burn-off wt. frac., Bagley plot
L.A. Goettler	rec, cir chan	I/M	CDS	40		ep, e-gl (e-black add.)	po, vis, l, t, w	84	channel system, lambda, hoop ori
B. Chung, C. Cohen		rheo	C	30 (wt)	25	PP, PS, gl	d, sr, T, fr	85	wall eff.
M. A. Bibbo		rheo	S		20	nylon, copper	vis, L/D, sr	85	tran. vis, Dinh-Armstrong, nL ³
M. Sanou, <i>et al.</i>	step, plate	I/M	CS	30 (wt)	25	PP, PS, gl	T, fr, ang, t, P, Q	85	flow front, short-shot
L.A. Utracki		rheo	C			PP, mica, LDPE	L/D, fr, dyna. freq.	86	yield phenomenon
M. Vincent, J.F. Agassant	disc	I/M	S	30 (wt)	30	PA 66, gl	T, t, Q, r	86	CDF, frozen, n-isot, unsteady
A. Vaxman, <i>et al.</i>		extru.	C	20 (wt)	20~80	noryl, gl	sr, L/D, strain	88	ori det. methods
S. Kenig	thin rec	I/M	ER	30 (wt)		graphite, LCP	Q	88	pregate, melt front shape, skin
R.K. Bayer H.G. Zachmann	bar	I/M	E	0		PE	geo. proc. parameter	89	pure polym. ori
S. Ranganathan, S.G. Advani	rec, disc	I/M		18	40			90	ori clustering & OT, plexi gl

열방향은 인장유동에서는 인장방향에 평행하고 전단유동에서는 전단방향에 평행하다고 알려져 있다. 특히 배열에 미치는 영향은 converging flow가 가장 크다고 알려져 있는데, converging channel의 중심부에서 가장 크게 일어난다[9-21, 25]. 그리고 전단유동에서의 배열은 금형의 표면에서 주요하고, 유

동방향의 섬유배열은 일어나지만 converging flow만큼은 효과가 크지않다고 알려져 있다. 하지만 실제 성형공정에서는 여러 유동이 복합적으로 일어나므로 총체적인 유동해석을 통한 단섬유 배열의 예측이 요구되고 있다.

따라서, 본 고에서는 SFRP의 기계적, 물리적 성

Table 3. Summary of mathematical analysis & inducements

RESERCHER	CON	ASSUMPTION	RESULTS	Yr	COMMENT
G.B. Jeffery	dil	incomp., Newt, steady, laminar, slow motion	motion of particle, dissipation	23	single ellipsoidal particle
S.M. Dinh, R.C. Armstrong	s-con	Newt, homogeneous, single test fiber, effective medium	constitutive eq., evolution of fiber orientation	84	cell model, distribution fn., position vector, total strain
K.E. Evans, A.G. Gibson	dil, s-con	random ori	maximum packing fraction = kD/L , $k=5.3$	86	free vol. concepts
S.G. Advani, C.L. Tucker III	dil, s-con		Ori Tensor (OT), basic properties, definition	87, 90	hybrid closure appr., summary of closure appr.

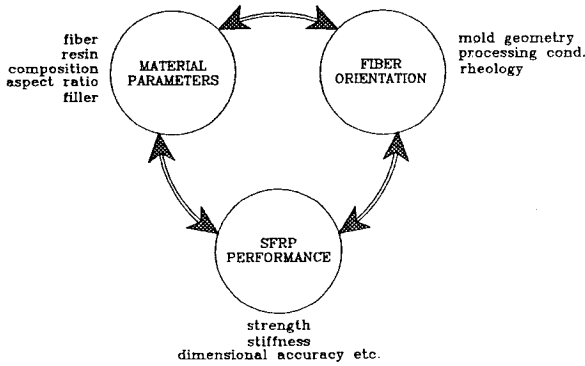


Fig. 1. Schematic diagram of three important elements for short fiber reinforced composites.

질의 예측 및 향상과 이와 관련된 금형의 최적설계, 최적 가공조건(processing condition)의 설정을 가능하게 하는데 필수적인 단섬유 배열상태의 예측을 위하여, 유동성형 과정에서 일어나는 단섬유의 배열기구(orientation mechanism)에 대한 이해와 모델링을 통한 수치해석에 관하여 살펴보고, 그 검증 실험에 대하여 설명하고자 한다.

2. 섬유 배열 상태의 표현(representation of fiber orientation state)

성형물 내의 단섬유 배열상태를 정량적으로 나타내고 비교하기 위해서는 물리적 의미가 있는 변수 혹은 함수의 도입에 의한 배열의 표현방법이 필요

한데, 현재까지 많이 사용된 것은 다음과 같은 3가지 표현방법이 있다.

2.1. 배열분포함수(orientation distribution function)

일반적으로, 현탁액 내의 단섬유의 배열방향은 주어진 속도장의 유일한 함수가 아니기 때문에 확률적 개념을 도입한 배열분포함수(orientation distribution function : ODF)를, 다른 이름으로는 확률 분포함수(probability distribution function)를 도입하였다[5, 10-12].

ODF는 각 θ 와 각 $(\theta + d\theta)$ 그리고 각 ϕ 와 각 $(\phi + d\phi)$ 사이에 단섬유가 존재할 확률분포를 나타내는 함수로, 이 때의 확률 Pr 은

$$Pr(\theta \leq \theta \leq \theta + d\theta, \phi \leq \phi \leq \phi + d\phi) = \psi(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi \quad (1)$$

와 같이 나타낼 수 있으며, $\psi(\theta, \phi)$ 를 ODF로 정의하였다. Fig. 2와 같이 단위 벡터를 가지는 좌표계를 고려하면 ODF는 θ 와 ϕ 의 함수이고 이 때의 벡터 P 의 성분은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} P_1 &= \sin\theta \cos\phi \\ P_2 &= \sin\theta \sin\phi \\ P_3 &= \cos\theta \end{aligned} \quad (2)$$

여기서 가능한 모든 방향은 단위원에 해당하고 $P_i P_i = 1$ 이다. 그리고 ODF는 다음과 같은 조건을 만족해야 한다. 첫째, ψ 는 주기적이다.

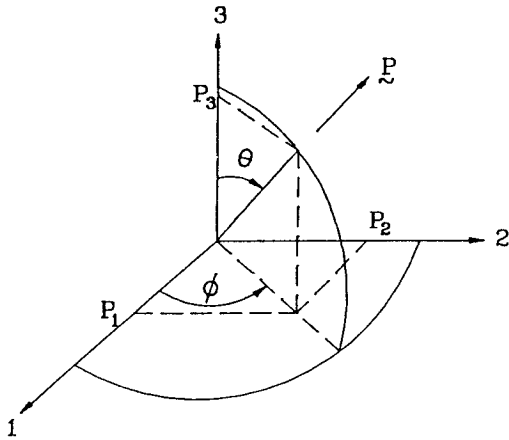


Fig. 2. Coordinate system employed for definition of orientation distribution function.

$$\psi(\theta, \phi) = \psi(\pi - \theta, \pi + \phi) \quad (3a)$$

$$\psi(\underline{P}) = \psi(-\underline{P}) \quad (3b)$$

둘째, ψ 는 정규화 되어야 한다.

$$\int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \int_{\phi=0}^{\phi=2\pi} \psi(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi = \int \psi(\underline{P}) d\underline{P} = 1 \quad (4)$$

셋째, 연속방정식을 만족하여야 한다. 즉, 배열이 변할 때 ψ 는 다음과 같은 조건을 가져야 한다.

$$\frac{D\psi}{Dt} = -\frac{\alpha}{\alpha\theta} (\dot{\theta}\psi) - \frac{1}{\sin\theta} \frac{\alpha}{\alpha\phi} (\dot{\phi}\psi) \quad (5a)$$

혹은,

$$\frac{D\psi}{Dt} = -\frac{\alpha}{\alpha\underline{P}} \cdot (\psi \dot{\underline{P}}) \quad (5b)$$

여기서, $\alpha/\alpha\underline{P}$ 는 단위원 표면에서의 구배벡터이다. 이와같은 조건을 가지는 배열분포함수 ψ 의 일 예를 들면 Fig. 3과 같다.

ODF는 비록 단점유 배열을 나타내기 위한 명백한 표현이고, 성형조건에 의한 유동장으로부터 계산될 수 있지만 θ, ϕ , 그리고 위치의 함수로 수치 해석에서 많은 계산을 필요로 하는 결점을 가지고 있다.

2.2. 배열매개변수(orientation parameter)

ODF의 많은 계산량을 줄이기 위하여 좀 더 간

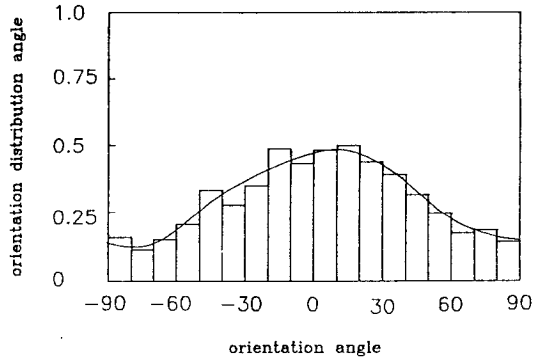


Fig. 3. Orientation distribution function vs. orientation angle Φ .

결한 여러가지 배열매개변수(orientation parameter : OP)가 배열을 묘사하기 위하여 제시되었다[3, 15, 29]. 예를들면 Vincent 등은[4] 배열매개함수 f_p 를 다음과 같이 정의 하였다.

$$f_p = \frac{2\langle \cos^2\theta \rangle - 1}{2} \quad (6)$$

여기서, $\langle \cos^2\theta \rangle = \frac{\sum n_i \cos^2\theta_i}{\sum n_i}$,

n_i 는 각 θ_i 를 가지고 있는 단점유의 숫자이다.

만약, 유동방향으로부터의 각을 θ 라고 했다면, 배열매개함수 f_p 가 -0.5일 때는 단점유의 배열이 유동방향에 수직이고, 0.5일 때는 유동방향에 평행일 때이며, 0일 때는 배열이 전혀 일어나지 않은 때이다 (Fig. 4).

이러한 매개변수들은 배열상태를 나타내기 위하여 간결한 방법을 제시하지만 주배열방향(principal direction)에 의존하는 단점이 있다. 따라서 위에서 열거한 변수나 함수를 보완한 보다 나은 배열의 척도가 요구된다.

2.3. 배열텐서(orientation tensor)

배열텐서(orientation tensor : OT)는 현재까지 알려진 변수중 가장 명백하고 간결한 텐서의 성질을 같은 변수로 tensorial order parameter, orientation-moment tensor, 혹은 conformation tensor라고 하기도 한다.

OT는 위치벡터 \underline{P} 와 배열분포함수 $\psi(\underline{P})$ 의 diadic

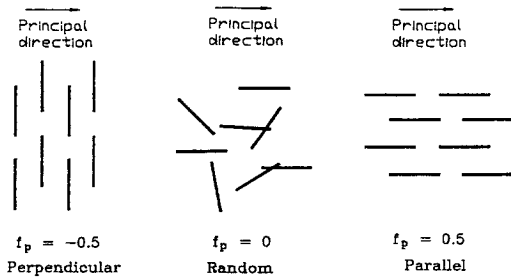


Fig. 4. Example of fiber orientations described by orientation parameter.

product에 대한 모든 방향에 대한 적분으로 정의되는데 적분의 특성상 짝수차수의 텐서만으로 나타난다. 2차와 4차의 OT를 나타내면

$$a_{ij} = \oint P_i P_j \psi(\underline{P}) d\underline{P} \quad (7a)$$

$$a_{ijkl} = \oint P_i P_j P_k P_l \psi(\underline{P}) d\underline{P} \quad (7b)$$

이다. 또는 $\langle \rangle$ 을 이용하여

$$a_{ij} = a_2 \equiv \langle \underline{P}\underline{P} \rangle, \quad (8a)$$

$$a_{ijkl} = a_4 \equiv \langle \underline{P}\underline{P}\underline{P}\underline{P} \rangle, \quad (8b)$$

와 같이 나타내기도 한다. 여기서 angle bracket은 configuration average 즉, ODF에 가중된 \underline{P} 의 전 범위에 걸친 평균이다. 그리고 이 OT는 정의에 의한 대칭성으로 인해

$$a_{ij} = a_{ji}, \\ a_{ijkl} = a_{jikl} = a_{klij} = a_{lki j}, \text{ etc.} \quad (9)$$

을 만족하여야 하고, 정규성에 의해

$$a_{ii} = 1 \quad (10)$$

을 만족하여야 한다. 이와같은 특성으로 인하여 텐서의 성분은 간소화되고, 많은 계산점이 있는 수치 해석에서는 배열분포함수에 비해 계산량이 수십분의 일로 감소한다. 또 다른 OT의 특성은 ODF로 역산이 가능한 것인데 다음과 같은 형태의 deviatoric 텐서를 이용한다.

deviatoric tensor를

$$b_{ij} = a_{ij} - 1/3 \cdot \delta_{ij} \quad (11a)$$

$$b_{ijkl} = a_{ijkl} - 1/7 \cdot (\delta_{ij} a_{kl} + \delta_{ik} a_{jl} + \delta_{il} a_{jk} + \delta_{jk} a_{il} + \delta_{jl} a_{ik} + \delta_{kl} a_{ij}) + 1/35 \cdot (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (11b)$$

와 같이 나타낼 때, Onat과 Leckie[34]는 tensor 함수 $f_{ij}(\underline{P})$ 를 구상 함수(spherical function)에 대한 선형조합으로

$$f_{ij}(\underline{P}) = P_i P_j - 1/3 \cdot \delta_{ij} \quad (12a)$$

$$f_{ijkl}(\underline{P}) = P_i P_j P_k P_l \\ - 1/7 \cdot (\delta_{ij} P_k P_l + \delta_{ik} P_j P_l + \delta_{il} P_j P_k + \delta_{jk} P_i P_l + \delta_{jl} P_i P_k + \delta_{kl} P_i P_j) \\ + 1/35 \cdot (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (12b)$$

와 같이 정의하고 이때의 ODF는 다음과 같음을 보였다.

$$\psi(\underline{P}) = 1/(4\pi) + 15/(8\pi) \cdot b_{ij} f_{ij}(\underline{P}) \\ + 315/(32\pi) \cdot b_{ijkl} f_{ijkl}(\underline{P}) + \dots \quad (13)$$

OT에 의해 단섬유의 배열을 나타내는 방법은 다음과 같다. 구하여진 OT의 성분들 즉, a_{ij} , a_{ijkl} 에서 배열텐서의 특성벡터(characteristic vector)와 특성치(characteristic value)를 구할 수 있는데, 이 때의 특성벡터는 단섬유 배열의 주 방향이고 특성치는 특성벡터 방향에서의 배열정도, 즉, 배열타원체(orientation ellipsoid)[8]의 반지름들이다(Fig. 5). 성형품의 단면에서는 3차원에서 구한 배열타원체에서 그 단면의 타원을 구하여도 되며, 주어진 유동장에서 직접적으로 2차 텐서를 구하여도 된다. 2차 텐서를 이용한 2차원 평면의 경우 배열텐서의 성분과 배열은 Fig. 6과 같은데, 두 개의 독립된 성분 중 a_{11} 은 축 방향에서의 배열의 크기를 나타내고 a_{12} 는 좌표계 축으로부터 단섬유 배열의 주 방향(principal direction)이 벗어나는 정도를 나타낼 수 있다[8, 14]. 또, 이 때의 배열타원(orientation ellipsis)은 Fig. 7과 같이 나타낼 수 있다. 배열타원 외에도 한 쌍의 crossbar를 이용하여[13] 나타낼 수도 있다.

따라서, 짝수차의 OT 중 2차 텐서는 가장 간결하고 non-trivial한 배열의 묘사를 가능하게 하며, 가장 효율적인 계산을 가능하게 한다.

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 & \epsilon_3 \end{bmatrix}$$

second order orientation tensor eigenvalues eigenvectors

Fig. 5. Three dimensional orientation ellipsoid defined by orientation tensor.

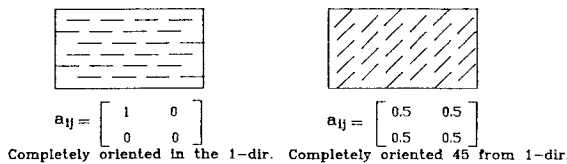
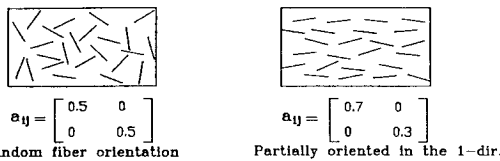


Fig. 6. Examples of planar orientation states with corresponding second order orientation tensor.

3. 수치적 모사

성형품 물성의 극대화와 금형 및 성형품의 최적 설계를 위해서는 단섬유배열의 예측이 절대적으로 필요한데, 이 단섬유 배열의 예측은 수치해석을 통한 유동해석과 불가분의 관계에 있으며 여기에 배열에 영향을 주는 배열인자와 배열기구(orientation mechanism)를 고려하면 최종적인 단섬유 배열의 예측이 가능해진다.

현재까지의 단섬유 현탁액의 유동장해석 및 섬유 배열 예측은 FDM, FEM, FDM-FEM 혼용 기법이 이용되고 있는데, 해석상의 어려움으로 인해 단순화와 가정을 통해 진행되고 있다. 현탁액의 유동장 해석은 현탁액의 정확한 유동학적 특성(rheological characteristics)과 3개의 기본 미분방정식 즉, 구성 방정식과 연속방정식, 운동량방정식, 그리고 에너지

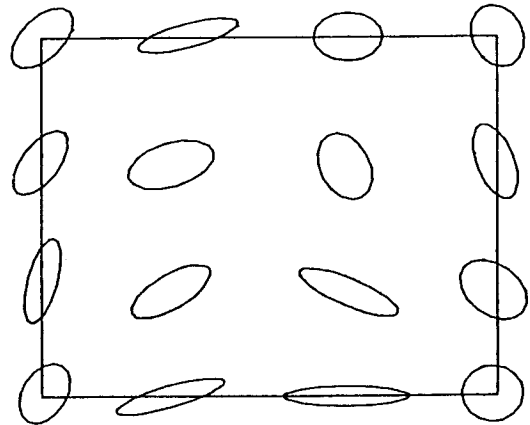


Fig. 7. Schematic diagram of two dimensional orientation described by ellipsis of orientation tensor.

방정식을 함께 풀어야 한다. 한편, 구성방정식에는 단섬유의 배열에 의해 비등방성이 포함되어 등방성 유체보다 좀 더 복잡한 인자들이 결합 되어져야 한다. 또 농축현탁액의 경우는 단섬유의 부피비, 외형비, 그리고 전단변형을 속도 등이 커짐에 따라 섬유들의 상호작용이 크게 일어남으로 인해 실험적 매개변수의 도입이 없는 순수한 수치해석의 기법만으로는 해석상의 어려움에 직면해 있다.

따라서, 여기서는 단섬유 배열의 척도로 OT를 사용하고 FEM과 검사체적(control volume)을 이용한 경우에 대하여 타당한 가정 하에서 과도기적(transient) 유동해석과 섬유배열에 대한 수치해석 과정을 알아 보도록 한다.

3.1. 배열의 공식화(formulation)

수치해석을 통해 배열을 예측하려면 가공조건과 금형의 기하학적 형상으로부터 영향을 받으며 유동장 내에서 움직이고 있는 단섬유의 배열상태를 예측할 수 있는 방정식이 필요하다. 즉, 구해진 변형 유동장(deformation fields)과 배열변수나 배열함수와의 정확한 관계를 나타내는 배열변화방정식(equations for orientation change)을 구할 수 있어야 하므로 그 방정식의 유도과정을 먼저 살펴보기로 한다.

3.1.1. 배경

배열변화방정식을 유도하기 위하여 몇가지 사항을 알아 보기로 한다.

1) 희박현탁액(dilute suspension)과 농축현탁액(concentrated suspension)

단섬유 복합재료의 기계적 물성은 주로 3가지 제한요소 즉, 섬유의 외형비, 배열, 농도(concentration)들에 크게 영향을 받는데 수치해석에서는 희박현탁액, 농축현탁액에 따라 수식화에 차이를 가지고 오히려 현탁액에 대한 영역(regime)의 구분이 필요하다.

일반적으로 농도는 3가지로 분류하는데(Fig. 8) 만약 C가 단위체적당 단섬유의 숫자이고 D와 L이 각각 지름과 길이라면 부피비(volume fraction) Φ 와 3가지 영역은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\Phi = \frac{\pi D^2 L C}{4} \quad (14)$$

- i) $C \leq 1/L^3, \Phi \leq D^2/L^2$
- ii) $1/L^3 D \leq C \leq 1/D^2 L, D^2/L^2 \leq \Phi \leq D/L$
- iii) $1/L^2 D \leq C \leq 1/D^2 L, D/L \leq \Phi \leq \pi/4$

첫번째 영역은 희박 영역(dilute regime)으로 지름 L인 구의 체적당 평균 1개 이하의 단섬유가 포함된 경우로서 단섬유 간의 간섭이 없는 영역이고, 둘째 영역은 반 농축 영역(semi-concentrated regime)으로 단섬유의 간접접촉에 의한 다소의 간섭으로 자유도가 3차원에서 2차원으로 줄어 거의 평면운동만이 가능한 경우이며, 세째 영역은 농축 영역

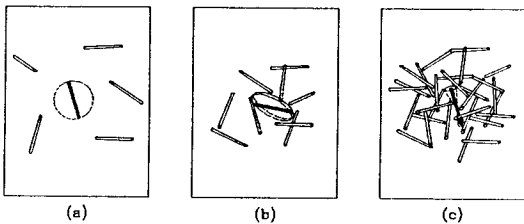


Fig. 8. Three concentration regimes for randomly oriented short fiber suspension.
 (a) dilute; $\Phi \leq D^2/L^2$ (b) semi-concentrated; $D^2/L^2 \leq \Phi \leq D/L$ (c) concentrated; $D/L \leq \Phi \leq \pi/4$.

(concentrated regime)으로 단섬유의 움직임이 크게 제약을 받아 움직임이 가능한 공간이 거의 섬유 자체 부피에 국한된 경우이다. 하지만 고 기능성의 복합재료로서 상업적 가치가 있는 경우는 ii)와 iii)의 경우로서 한층 더 심도있는 연구가 필요한 영역이다.

2) 희박현탁액에 대한 연구

Jeffery[1]의 현탁액 내부의 입자운동에 대한 연구는 Gilver[2] 등이 단섬유 배열의 수치해석에서 Jeffery의 연구결과를 인용하면서 희박현탁액에서의 단섬유 배열 예측의 기본식으로 인정되어 왔으며 농축현탁액에서의 연구에도 그 기본이 되고 있다.

Jeffery는 다음과 같은 가정으로 이론적 해석을 하였다. i) 입자는 타원회전체(ellipsoid)이다. ii) 입자의 속도는 인접한 유체의 속도와 같다. iii) 입자에서 떨어진 유체는 정상상태 움직임을 갖는다. iv) 입자간의 간섭이 없다. v) 뉴우톤 유체이다. 타원체 주위의 속도장은 다음과 같이 나타내었는데

$$\begin{aligned} v_{xe} &= dx + hy + gz + \mu z - \lambda y \\ v_{ye} &= hx + ey + fz + \lambda x - \nu z \\ v_{ze} &= gx + fy + kz + \nu y - \mu x \end{aligned} \quad (15)$$

여기서 v_{xe}, v_{ye}, v_{ze} 는 타원체의 축에 대한 속도이고 d, e, f, g, h, k, μ, λ, ν 들은 변형과 회전성분에 대한 계수이다.

위의 가정하에서 운동방정식을 단순화하고 저속유동에서 최종적인 우력(resultant couple)이 영(zero)이라는 조건에서 운동, 혹은 입자의 배열에 대한 식은 다음과 같이 구하여 진다.

$$\begin{aligned} (b^2 + c^2)\omega_{xe} &= b^2(\nu + f) + c^2(\nu - f) \\ (c^2 + a^2)\omega_{ye} &= c^2(\mu + g) + a^2(\mu - g) \\ (a^2 + b^2)\omega_{ze} &= a^2(\lambda + h) + b^2(\lambda - h) \end{aligned} \quad (16)$$

여기서 a, b, c는 타원체의 축들이고, $\omega_{xe}, \omega_{ye}, \omega_{ze}$ 는 이 축들에 대한 회전벡터의 성분들이다. 그리고 변형텐서(deformation tensor)와 회전텐서(rotation tensor) 그리고 변환텐서(transformation tensor)를 각각 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$[\hat{\epsilon}] = \begin{bmatrix} d & h & g \\ h & e & f \\ g & f & k \end{bmatrix}, [\Omega] = \begin{bmatrix} 0 & -\lambda & \mu \\ \lambda & 0 & \nu \\ -\mu & \nu & 0 \end{bmatrix}, [T] = \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{bmatrix} \quad (17)$$

따라서 회박현탁액에서의 단섬유의 운동은 기준좌표계(reference coordinate system)에서 주어진 속도장에 대한 변형텐서 및 회전텐서를 단섬유 방향으로 변환한 뒤 각속도를 구함으로써 식 (16)으로부터 얻어질 수 있다.

예를들면 2차원 평면유동에서 단섬유가 x-y축의 평면상에 x축과 각 ϕ 를 가지고 놓여있는 단순화된 경우를 살펴보면 Jeffery의 수식은 다음과 같이 나타난다.

$$\dot{\phi} = \left[\frac{r_e^2}{r_e^2 + 1} \right] \{ -SC v_{xx} - SS v_{xy} + CC v_{yx} + SC v_{yy} \} - \left[\frac{1}{r_e^2 + 1} \right] \{ -SC v_{xx} + CC v_{xy} - SS v_{yx} + SC v_{yy} \} \quad (18)$$

여기서, S는 $\sin \phi$, C는 $\cos \phi$, r_e 는 상당 외형비(effective aspect ratio)이다.

3) 농축현탁액에 대한 연구

Folgar 등은[10] 농축현탁액의 경우에 대한 해석을 시도하였는데 외형비가 클 경우($L/D > 10$) 다음과 같이 단섬유의 운동을 기술하였다.

$$\dot{\phi} = \{ -SC v_{xx} - SS v_{xy} + CC v_{yx} + SC v_{yy} \} - \frac{C_i \dot{\gamma}}{\psi_{phi}} \frac{\partial \psi_{phi}}{\partial \phi} \quad (19)$$

회박현탁액의 경우에 상호작용계수(interaction coefficient)라고 불리어지는 C_i 를 이용하여 마지막 항을 추가함으로써 단섬유들 간의 상호작용에 의한 효과를 고려하였는데 C_i 는 실험적으로 결정되는 상수이다. 그리고 $\dot{\gamma}$ 는 변형율 텐서의 크기이다.

따라서, 식 (19)를 ODF의 연속방정식 식 (5a)에 대입함으로써 ODF를 사용하여 표현된 배열변화방정식은 다음과 같이 얻어질 수 있다.

$$\frac{\partial \psi_{phi}}{\partial t} = -C_i \dot{\gamma} \frac{\partial^2 \psi_{phi}}{\partial \phi^2} - \frac{\partial}{\partial \phi} \left[\psi_{phi} (-SC v_{xx} - SS v_{xy} + CC v_{yx} + SC v_{yy}) \right] \quad (20)$$

그리고, 이 식에서 정상상태의 단섬유 배열이 존재함과 단섬유 배열은 총변형율에 의존함을 알 수 있다.

3.1.2. 유동에 의한 섬유배열

1) OT를 사용하여 표현된 배열변화방정식

OT를 사용하여 단섬유의 배열을 정확히 묘사할 수 있는 변화방정식을 구하는 데는, Hand[35] 등이 구한 일반적인 연속방정식을 이용한 방법과 Jeffery가 구한 1개의 단섬유 운동에 ODF에 대한 연속방정식과 OT의 개념을 결합한 방법이 있다. 후자가 계산의 편이로 말미암아 주로 사용되므로 이 방법을 설명해 보기로 한다.

단섬유의 운동은 다음과

$$\dot{P}_i = -\frac{1}{2}(\omega_{ij}P_j) + \frac{1}{2}\lambda(\dot{\gamma}_{ij}P_j - \dot{\gamma}_{kl}P_kP_lP_i) - D_r \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial P_i} \quad (21)$$

으로 묘사되는데, D_r 은 회전확산성(rotary diffusivity)을, ω_{ij} 와 $\dot{\gamma}_{ij}$ 는 각각 $(v_{ji} - v_{ij})$, $(v_{ji} + v_{ij})$ 로서 와도텐서(vorticity tensor)와 변형율 텐서(strain tensor)를 나타내고 λ 는 입자의 형태에 관련된 매개변수이다. 그리고, D_r 이 영(zero), λ 가 $(r_e - 1)/(r_e + 1)$ 이면 윗 식은 Jeffery의 $C_i \dot{\gamma}$ 으로 대체하고, 농축현탁액에 대한 모델로서 제안하였다. 식 (21)과 ODF의 연속방정식인 식 (5b)를 결합하면

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{1}{\sin\theta} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \theta} D_r \sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \psi \sin\theta (\nabla \mathbf{v}^T : \underline{\delta}_r \underline{\delta}_{\theta e}) \right] + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \left[\frac{D_r}{\sin\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} - \psi (\nabla \mathbf{v}^T : \underline{\delta}_r \underline{\delta}_{\theta e}) \right] \quad (22)$$

이 된다. 여기서, $\underline{\delta}_r$, $\underline{\delta}_{\theta e}$ 는 각각 타원좌표계의 r과 θ 방향의 단위벡터이다.

또, OT인 a_2 와 a_4 에 대한 변화방정식을 구하기 위해 식 (7a, 7b)를 미분하고 식 (5b)와 식 (21)을 결합하면 다음과 같이 OT를 사용하여 표현된 배열 변화방정식이 구하여 진다.

$$\frac{Da_2}{Dt} = \frac{Da_{ij}}{Dt} = -\frac{1}{2}(\omega_{ik}a_{kj} - a_{ik}\omega_{kj}) + \frac{1}{2}\lambda(\dot{\gamma}_{ij}a_{kj} + a_{ik}\dot{\gamma}_{kj} - 2\dot{\gamma}_{kl}a_{ijkl}) + 2D_r(\delta_{ij} - \alpha \cdot a_{ij}) \quad (23)$$

$$\frac{Da_4}{Dt} = \frac{Da_{ijkl}}{Dt} = -(\omega_{im}a_{mjkl} - a_{ijkm}\omega_{ml}) + \lambda(\dot{\gamma}_{im}a_{mjkl} + a_{ijkm}\dot{\gamma}_{ml} - 2\dot{\gamma}_{mna_{ijklmn}}) + D_r[-\beta \cdot a_{ijkl} + 2\{a_{ij}\delta_{kl}$$

$$+ a_{ik}\delta_{jl} + a_{il}\delta_{jk} + a_{jk}\delta_{il} + a_{jl}\delta_{ik} + a_{kl}\delta_{ij}] \quad (24)$$

여기서 α 는 2차원, 3차원의 경우 각각 2, 3이고, β 는 각각 16, 20이다.

윗 식의 D,에 경험식을 대입하면 다음식이 얻어진다.

$$\frac{Da_2}{Dt} = \frac{Da_{ij}}{Dt} = -\frac{1}{2}(\omega_{ik}a_{kj} - a_{ik}\omega_{kj}) + \frac{1}{2}\lambda(\dot{\gamma}_{ik}a_{kj} + a_{ik}\dot{\gamma}_{kj} - 2\dot{\gamma}_{kl}a_{ijkl}) + 2C_f\dot{\gamma}(\delta_{ij} - \alpha \cdot a_{ij}) \quad (25)$$

2) 배열텐서의 근사

식 (25)에서 나타난 바와 같이 OT에 대한 변화 방정식은 바로 다음 짝수차의 배열텐서를 포함하고 있어 계산량이 커지는데, 효율적인 계산을 위해서는 다음 차수의 OT에 대해 최종적 근사(closure approximation)가 반드시 필요하게 되며 선택한 근사방법에 따라 해의 정확도도 크게 좌우된다. 현재까지의 연구결과를 선형(linear)과 이차근사(quadratic approximation)의 형태를 합친 복합적 근사(hybrid closure approximation)가 가장 우수하다고 알려져 있는데 자세한 내용은 부록에 수록하였다.

linear와 quadratic을 합친 hybrid approximation은 다음과 같다.

$$\bar{a}_4 = \bar{a}_{ijkl} = (1-F) \cdot \hat{a}_{ijkl} + F \cdot \tilde{a}_{ijkl} \quad (26)$$

여기서 linear closure는

$$\hat{a}_4 = \hat{a}_{ijkl} = -1/35 \cdot (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + 1/7 \cdot (a_{ij}\delta_{kl} + a_{ik}\delta_{jl} + a_{il}\delta_{jk} + a_{kl}\delta_{ij} + a_{jl}\delta_{ik} + a_{jk}\delta_{il}) \quad (27)$$

이고, quadratic closure는

$$\tilde{a}_4 = \tilde{a}_{ijkl} = a_2 a_2 = a_{ij} a_{kl} \quad (28)$$

과 같이 나타난다. 그리고 식 (26)에 나타난 바와 같이 복합적근사는 배열의 정도에 의해 결정되는 상수척도 F에 의해 근사방법에 가중치를 주고 있는데, 이 때의 F는 다음과 같은 관계를 가진다.

$$F = 2a_{ij}a_{ji} - 1 \quad (29)$$

3.2. 수치적 모사 방법

3.2.1. 금형 충전(mold filling)의 해석

최근 금형 충전에 대한 컴퓨터 해석은 고분자 재료의 충전과정에서의 비등온(non-isothermal), 비뉴우턴(non-Newtonian), 과도상태(transient state) 등의 어려움에도 불구하고 비점탄성(non-viscoelastic)의 가정하에서 상당한 진전을 보았다. 거의 모든 충전해석은 성형품이 한방향으로는 다른 방향에 비해 상당히 얇다는 사실에 근거하여 지배방정식을 단순화하고, 주로 GHS(generalized Hele-Shaw) 유동에 의해 해석을 하고 있다. 수치해석은 FEM, FDM, FEM-FDM hybrid method를 여러가지 수치 해석 기법과 함께 사용하고 있으며 최근에는 FE/CV (finite element/control volume) 방법이 많이 사용되고 있다.

본 고에서는 GHS 유동을 고려하고 FE/CV 기법을 이용한 경우에 대해 알아본다.

삼각형, 혹은 사각형 요소를 사용한 성형품의 체적은 현탁액으로 FE/CV 방법에 의해 채워지는데 각각의 검사체적은 상호 배타적이지만 전체적으로는 성형품의 체적을 나타내게 된다. 현탁액의 선단은 각 절점(nodal point)에 해당하는 검사체적의 충전 계수(fill factor) f에 의해 결정된다. 이 f는 검사체적의 체적에 대하여 현탁액에 의해 채워진 체적으로, f가 1인 경우는 검사체적이 완전히 채워진 경우를 나타내고 f가 0인 경우는 비어있는 경우를 나타낸다. 이 방법은 용융현탁액의 선단이 정확하지 않은 결점이 있으나 전체적인 질량보존이 정확하고 복잡한 형상의 제품도 해석이 가능한 잇점이 있다.

GHS의 유동에서 기본방정식은 압력이나 유선함수(stream function)로 나타낼 수 있으며, 그 중 압력에 대한 수식은 다음과 같이 나타난다.

$$\frac{\partial}{\partial x} (S \frac{\partial p}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (S \frac{\partial p}{\partial y}) = 0 \quad (30)$$

$$S = \int_0^h \frac{(z-\kappa)^2}{\eta} dz \quad (31)$$

여기서 p는 압력을, S는 국지적 유동의 난이도를, h는 성형품 두께를, η는 유체의 점도를, 그리고 κ는 전단응력이 0이 되는 z값을 나타낸다. 식 (30)에서 압력장이 구해지면 속도장은 다음식에 의하여 구할 수 있다.

$$v_x = -\frac{S}{h} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (32a)$$

$$v_y = -\frac{S}{h} \frac{\partial p}{\partial y} \quad (32b)$$

위 식들에서 각 시간 단계별로 구하여진 속도장은 섬유배열의 예측을 위하여 배열변화방정식의 입력으로 들어가게 된다.

한편, 현탁액의 유변학적 성질은 등방성 용액의 경우와는 달리 단섬유 배열의 함수이기 때문에, 금형내의 속도장은 단섬유의 배열과 서로 종속적인 관계를 가지게 되고 따라서 현탁액의 구성방정식을 배열의 영향을 고려한 모델링이 필요하다. 현재까지 Newtonian 현탁액에 대하여 다음과 같은 형태의 모델들이 제안되었다.

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} \dot{\gamma}_{kl} \quad (33)$$

$$C_{ijkl} = B_1 a_{ijkl} + B_2 (a_{ij} \delta_{kl} + a_{kl} \delta_{ij}) + B_3 (a_{ik} \delta_{jl} + a_{il} \delta_{jk} + a_{jl} \delta_{ik} + a_{jk} \delta_{il}) + B_4 \delta_{ij} \delta_{kl} + B_5 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (34)$$

여기서, C_{ijkl} 는 이방성 점성 텐서이고 B_r 는 재료상수(material constants)이다. 예를들어 Dinh과 Armstrong의 모델은[36] 재료상수가 다음과 같은 구성방정식을 제안하였다.

$$B_1 = \frac{\pi \eta_s (nL^3)}{12 \ln(2h/D)} \quad (35a)$$

$$B_5 = \eta_s/2, \quad B_2 = B_3 = B_4 = 0 \quad (35b)$$

여기서, η_s 는 용매의 점도, n 은 입자의 수밀도(number density), 그리고 h 는 섬유간의 평균거리이다.

따라서 더욱 정확한 해를 구하기 위해서는 운동방정식에 식 (33)을 적용시키는 것이 바람직하다.

3.2.2. 섬유 배열의 해석

이상의 과정에서, 금형의 충전과정 중에 단섬유의 배열을 예측하기 위해서는 2차원의 경우 a_{11} , a_{12} 만이 필요함을 알 수 있다. 공간 유동장 내에서 배열텐서의 성분을 구하기 위해, 배열텐서의 성분을 배열텐서의 계산점에서의 값과 형상함수, $N_j(x,y)$ 를 사용하여 근사시키고 속도장 역시 유사하게 근사시키면 다음과 같다.

유변학, 제 3 권 제 2 호, 1991

$$\hat{a}_{11}(x,y,t) = \sum_{j=1}^n a_{11j}(t) N_j(x,y) \quad (36a)$$

$$\hat{a}_{12}(x,y,t) = \sum_{j=1}^n a_{12j}(t) N_j(x,y) \quad (36b)$$

$$\hat{v}_1(x,y,t) = \sum_{j=1}^n v_{1j}(t) N_j(x,y) \quad (37a)$$

$$\hat{v}_2(x,y,t) = \sum_{j=1}^n v_{2j}(t) N_j(x,y) \quad (37b)$$

유동해석에서와 같은 메시(mesh)와 선형형상함수(linear shape function)를 섬유배열의 예측 시에 사용하고 고전적 갤러킨의 방법(Galerkin's method)을 사용하여 식 (25)를 행렬식으로 나타내면 다음과 같다.

$$\begin{bmatrix} C_{ij} & 0 \\ 0 & C_{ij} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \hat{a}_{11j} \\ \hat{a}_{12j} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{Iij} & K_{IIIj} \\ K_{IVij} & K_{Vij} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_{11j} \\ a_{12j} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} R_i \\ Q_j \end{Bmatrix} \quad (38)$$

여기서, 계수들은 다음과 같다.

$$C_{ij} = \langle N_i N_j \rangle \quad (39a)$$

$$K_{Iij} = \langle N_i N_k \frac{\partial N_j}{\partial x} v_{1k} \rangle + \langle N_i N_k \frac{\partial N_j}{\partial y} v_{2k} \rangle + \langle N_i N_j (4C_I \dot{\gamma} - 2 \frac{\partial N_k}{\partial x} v_{1k}) \rangle \quad (39b)$$

$$K_{IIIj} = -2 \langle N_i N_j \frac{\partial N_k}{\partial y} v_{1k} \rangle \quad (39c)$$

$$K_{IIij} = \langle N_i N_j \frac{\partial N_k}{\partial y} v_{1k} - \frac{\partial N_k}{\partial x} v_{2k} \rangle \quad (39d)$$

$$K_{IVij} = \langle N_i N_k \frac{\partial N_j}{\partial x} v_{1k} \rangle + \langle N_i N_k \frac{\partial N_j}{\partial y} v_{2k} \rangle + \langle N_i N_j (4C_I \dot{\gamma} - \frac{\partial N_k}{\partial x} v_{1k} - \frac{\partial N_k}{\partial y} v_{2k}) \rangle \quad (39e)$$

$$R_i = \langle N_i (2C_I \dot{\gamma} - \dot{\gamma}_{kl} a_{11kl}) \rangle \quad (39f)$$

$$Q_j = \langle N_j (\frac{\partial N_k}{\partial y} v_{1k} - \dot{\gamma}_{kl} a_{12kl}) \rangle \quad (39g)$$

< >는 영역(domain)에 대한 적분을 나타내고 이 비선형 미분방정식인 식 (38)은 fully implicit time stepping technique와 Newton-Raphson technique를 이용하여 푼다. 그리고 각 시간(time step)에서 충전계수를 계산하여 f 가 0.5를 넘을 때 새로운 배열점(new orientation point)을 정의하여 해석한다. 이 새로운 점(node)은 전 시간 스텝에서 배열이 정의되지 않음으로 인해서 즉, 방정식의 초기조건이 정의되지 않음으로 인해서 새로운 문제를 야기시키는데, 이 초기조건의 설정이 배열 예측의 정확도에 상당히 기여하게 되며, 주로 사용되는 방법은 전 스텝에서 계산된 이웃하는 점의 배열성분으로 대치되는 방법이다.

최종적으로, 이와 같은 방법에 의해 구해진 OT에 대하여 배열의 주방향(principal direction)을 구하고 배열 표시방법인 등고선도, 타원 등을 이용하여 결과를 가시화한다.

4. 실험적 검증(experimental verification)

단섬유의 배열 예측에서 실험이 필요한 경우는 주어진 기하학적 구조에서 수치해석 결과를 비교, 검증하기 위하여, 또, 실험적 매개변수(C_f)를 구하기 위해서이다.

성형품 내의 단섬유의 배열을 관찰하는 방법으로는 X-ray diffraction technique, (macro) radiography, metalographic polishing technique, 그리고 contact micro-radiography (CMR) 등이 있으나 최근에는 CMR이 가장 많이 사용되고 있다[20] 또, 성형혼합물(molding compounds) 내에 tracer를 넣어 성형 중, 혹은 성형 후 computer digitizing tablet 혹은 수작업으로 성형품 내부의 단섬유 배열을 관찰할 수도 있다.

일 예를 들면, tracer fiber가 들어있는 성형혼합물을 각 단면에 대해 radiography를 촬영한 후 computer digitizing technique으로 각 단섬유의 각도를 계산하고 기록한다. 만약 n 개의 섬유에 대해 배열 각이 측정되었을때 P^k 가 k 번째 섬유배열을 묘사한다면 2차 배열텐서는 다음과 같이 나타내어 진다.

$$a_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n P_i^k P_j^k \tag{40}$$

그리고, 이 결과는 수치해석 결과와 비교될 수 있다.

5. 결 론

재래식 고분자 가공법을 이용한 고 기능의 단섬유 복합재료의 성형에서, 이방성의 예측 및 제어를 통한 물성향상 및 공정 최적화를 가능케 하는데 필수적인 단섬유 배열의 수치해석 과정을 검토해 보았다.

유동성형시 단섬유 배열의 예측은 Fig. 9의 흐름도에서 나타난 바와 같이 유동장에서의 속도분포의 해석과 그 속도장에 의한 배열의 해석으로 크게 나눌 수 있고, 여기에 배열기구와 배열인자의 결합이 배열해석의 요건이 됨을 알 수 있다. 그러나 각 분야에 많은 문제가 산재해 있다. 유동해석은 복잡한 실제 유동과 해석기법의 제한으로 3차원의 경우는 thin-shell parts에 국한되어 있고, 유동선단과 평평하지 않은 유동장에서의 오차가 크다. 배열의 해석에서는 섬유들 간의 간섭으로 인하여 모델링에 어려움을 가지고 있으며 현재까지는 실험적 변수의 도입이 불가능하다. 그리고, 금형충진시 새로이 도입된 유동장에서의 섬유배열의 초기화문제, 금형벽에서의 단섬유 회전의 간섭문제, 배열에 따른 현탁액의 유변학적 성질의 운동방정식에서의 적용문제 등 많은

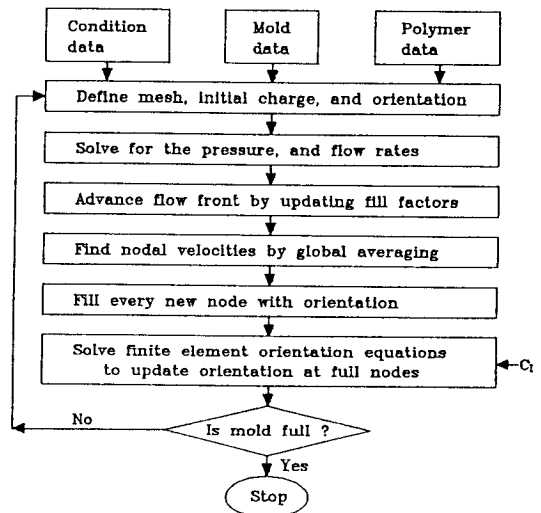


Fig. 9. Flow chart for simulation procedure.

문제들이 있다. 하지만 배열을 나타내기 위한 배열 텐서의 개발과 고전적 Galerkin method를 이용한 FEM/CV method 등과 같은 방법을 이용하여 어느 정도의 타당한 결과를 얻고 있고 최근의 연구에서 상당한 진전을 보고 있다.

끝으로, 단섬유 복합재료 성형품의 고 비강도, 고 비강성 등 우수한 물성과 성형품의 대량생산, 성형품 구조의 용이함 등의 잇점으로 인해 기존 구조물의 대체가 활발해질 것이 예상되므로, 실제적인 적용에서 단섬유의 장점을 극대화 할 수 있는 농축용액에 대한 지속적인 배열의 연구가 필요할 것이다.

부 록

A. 배열텐서의 최종적 근사(Closure Approximation of Orientation Tensor)

A-1. 개요

실제적인 배열 예측은 ODF에 대한 식 (22)보다 OT를 이용한 식 (25)를 이용하는 것이 계산량의 감소로 인하여 상당한 잇점이 있다. 하지만 식 (25)에는 4차 텐서 a_{ijkl} 이 있어 계산량의 감소를 가져오려면 closure approximation이 필요하게 되고, 계산의 정확도를 위해서는 적절한 근사방법의 선택이 필수적이다.

Closure approximation의 방법은 여러가지가 알려져 있는데[17], 평면상의 배열에 대한 근사는 hybrid 근사가 마구잡이 배열(random orientation)에서부터 완전히 배열된 영역까지 전범위에 걸쳐 다른 방법보다 우수하다고 알려져 있다[16, 17]. 식 (27)의 linear closure는 몇몇 유동장에서, 예를들면 정상상태 단순 전단유동에서, 섬유배열의 진동에 의해 불안정하고, 식 (28)의 quadratic closure는 동적으로는 안정하나 많은 배열이 이루어지지 않았을 때 즉, 큰 C_7 가 1에 가까운 값에서 부정확한 정상상태의 배열을 가지고 오는 결점이 있다.

A-2. 최소한의 조건(Minimum Requirements)

정확한 4차 텐서, 식 (7b)는 어떤 첨자의 짝(pair)에도 대칭이고, 2개의 첨자에 대한 contraction은 2차의 텐서를 만들지만, 경험적으로 더 적은 조건(weaker condition)에서 더 좋은 근사가 이루어진다고

알려져 있다. 따라서, 대칭성과 정규화에 대한 최소의 조건을 찾아 보기로 한다.

식 (25)와 식 (33), 식 (34)에서 텐서 a_{ij} , τ_{ij} 가 대칭이므로 배열텐서는 다음과 같은 조건을 갖는다.

$$a_{ijkl} = a_{jikl} \tag{a1}$$

또, 변형율속도 텐서가 대칭이므로

$$a_{ijkl} = a_{ijlk} \tag{a2}$$

이고, 정규화 성질에 의해

$$a_{iikl} = a_{kl} \tag{a3}$$

이다. 하지만 좀 더 약한 조건(weaker condition)으로 다음과 같은 조건을 만족할 수도 있다.

$$a_{iikl} = a_{kl} + s\delta_{kl} \tag{a4}$$

그리고 변형에너지의 대칭성에 의해

$$a_{ijkl} = a_{klij} \tag{a5}$$

와 같은 조건도 성립한다.

따라서, 식 (a1)에서 식 (a5)까지가 최소대칭조건(minimum symmetry requirements)이 된다.

A-3. 근사 방법(Approximation Method)

linear closure는 a_2 와 Kronecker delta δ 를 조합함으로써 이루어지는데 Hand[35]는 다음과 같이 제안 하였다.

$$\hat{a}_4 = \hat{a}_{ijkl} = -1/35 \cdot (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + 1/7 \cdot (a_{ij}\delta_{kl} + a_{ik}\delta_{jl} + a_{il}\delta_{jk} + a_{kl}\delta_{ij} + a_{jl}\delta_{ik} + a_{jk}\delta_{il}) \tag{a6}$$

그리고, quadratic closure는 2차 텐서의 dyadic product로 구성되며 다음과 같다.

$$\tilde{a}_4 = \tilde{a}_{ijkl} = a_2 a_2 = a_{ij} a_{kl} \tag{a7}$$

Hybrid closure는 linear와 quadratic closure를 혼합한 형태로 scalar orientation measure F를 사용하여 다음과 같이 나타낸다.

$$\bar{a}_4 = \bar{a}_{ijkl} = (1 - F) \cdot \hat{a}_{ijkl} + F \cdot \tilde{a}_{ijkl} \tag{a8}$$

여기서, 배열의 정도에 의해 결정되는 상수척도 F는

$$F = A \cdot a_{\theta} a_{\theta} - B \quad (a9)$$

이고, F가 0이면 마구잡이 배열(random orientation)에 해당하고, F가 1이면 완전히 배열된 경우에 해당한다. 여기서 A, B는 상수로서 3차원의 경우 각각 3/2, 1/2이고 2차원의 경우 각각 2, 1이다. 하지만, 식 (a9)는 3차원의 경우 성능이 좋지 않아 다음과 같은 다른 식이 보충되었다.

$$F = 1 - N \cdot (\text{deta}_2) \quad (a10)$$

여기서, N은 3차원의 경우 27이고 2차원의 경우 4로서 2차원의 경우는 식 (a9)와 같은 식이 된다.

Nomenclature

ang	: angle of orifice
C	: Converging flow
cir	: circular channel
C/M	: Compression Molding
CMR	: Contact Micro Radiography
CON	: CONcentration regime of suspension
D	: Diverging flow
dil	: dilute fiber suspension
DMC	: Dough Molding Compound
E	: Elongational flow
el	: elongation rate
ep	: epoxy resin
FAN	: Flow Analysis Network
fr	: fiber volume fraction
geo	: mold geometry
GHS	: General Hele-Shaw Fluid
gl	: glass fiber
IND	: orientation INDEX
I/M	: Injection Molding
l	: channel length
L	: fiber Length
L/D	: aspect ratio of fiber
MAT	: MATerial used
n-isot	: non-isothermal fluid
n-Newt	: non-Newtonian fluid
N-R	: Newton-Raphson scheme
ODF	: Orientation Distribution Function
OP	: Orientation Parameter
ori	: orientation
OT	: Orientation Tensor

P	: Pressure
P-C	: Predictor-Corector scheme
PE	: PolyEthylene
phi	: fiber orientation angle
PNR	: Psudo-Newton-Raphson scheme (FEM+ streamline integration)
po	: position at molded part
PP	: PolyPropylene
PS	: PolyStyrene
Q	: voumetric flow rate
rec	: rectangular channel
rheo	: rheometer
R-K	: Runge-Kutta scheme
S	: Shear flow
s-con	: semi-concentrated fiber suspension
sr	: sheare rate
t	: channel thickness
T	: mold Temperature
VARI	: processing VARiable
vel	: velocity of bed
vis	: viscosity
w	: channel width
Yr	: Year

참고문헌

1. G.B. Jeffery, *Proc. Roy. Soc., Ser. A*, **102**, 161 (1923).
2. R.C. Gilver, M.J. Crochet, and R.B. Pipes, *J. Compos. Mater.*, **17**, 330 (1983).
3. J.W. Gillespie, Jr., J.A. Vanderschuren, and R.B. Pipes, *Polym. Compos.*, **6**, 82 (1985).
4. M. Vincent and J.F. Agassant, *Polym. Compos.*, **7**, 76 (1986).
5. S. Kenig, *Polym. Compos.*, **7**, 50 (1986).
6. G.G. Lipscomb II and M.M. Denn, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **26**, 297 (1988).
7. J. Rosenberg, and M. Denn, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **37**, 317 (1990).
8. M.C. Altan, S. Subbiah, S.I. Güçeri, and R.B. Pipes, *Polym. Eng. Sci.*, **30**, 848 (1990).
9. R.F. Eduljee and J. W. Gillespie, Jr., *Polym. Compos.*, **11**, 56 (1990).
10. F. Folgar and C.L. Tucker III, *J. Reinf. Plast. Sci.*, **3**, 98 (1984).
11. W. C. Jackson, S.G. Advani and C.L. Tucker III, *J. Compos. Mater.*, **20**, 539 (1986).

12. M.C. Altan, S.G. Advani, S.I. Güçeri, and R.B. Pipes, *J. Rheol.*, **33**, 1129 (1989).
13. L.G. Reifschneider, H.U. Akay, and F. Ladeinde, *Proc. of the Winter Annu. Meeting the ASME*, 129 (1990).
14. S.G. Advani and C.L. Tucker III, *Polym. Compos.*, **11**, 164 (1990).
15. T. Matsuoka, J.-I. Takabatake, Y. Inoue, and H. Takahashi, *Polym. Eng. Sci.*, **30**, 957 (1990).
16. S.G. Advani and C.L. Tucker III, *J. Rheol.*, **31**, 751 (1987).
17. S.G. Advani and C.L. Tucker III, *J. Rheol.*, **34**, 367 (1990).
18. J.P. Bell, *J. Compos. Mater.*, **3**, 244 (1969).
19. L. Kacir, M. Narkis, and O. Ishai, *Polym. Eng. Sci.*, **15**, 525 (1975).
20. M.W. Darlington and P.L. McGinley, *J. Mater. Sci. Lett.*, **10**, 906 (1975).
21. R.J. Crowson, M.J. Folkers, and P.F. Bright, *Polym. Eng. Sci.*, **20**, 925 (1980).
22. R.J. Crowson and M.J. Folkers, *Polym. Eng. Sci.*, **20**, 934 (1980).
23. F. Folgar and C.L. Tucker III, *SPE ANTEC Technol. papers*, 35 (1981).
24. W.W. Chan, J. Charrier, and P. Vadnais, *Polym. Compos.*, **4**, 9 (1983).
25. L.A. Goettler, *Polym. Compos.*, **5**, 60 (1984).
26. B. Chung and C. Cohen, *Polym. Eng. Sci.*, **25**, 1001 (1985).
27. M.A. Bibbo, S.M. Dinh, and R.C. Armstrong, *J. Rheol.*, **29**, 905 (1985).
28. M. Sanou, B. Chung, and C. Cohen, *Polym. Eng. Sci.*, **25**, 1008 (1985).
29. L.A. Utracki, *Polym. Compos.*, **7**, 274 (1986).
30. A. Vaxman, M. Narkis, A. Siegmann, and S. Kenig, *J. Mater. Sci. Lett.*, **7**, 25 (1988).
31. S. Kenig, B. Trattner, and H. Anderman, *Polym. Compos.*, **9**, 20 (1988).
32. R.K. Bayer and H.G. Zachmann, *Polym. Eng. Sci.*, **2**, 186 (1989).
33. S. Ranganathan and S.G. Advani, *J. Polym. Sci.: Part B: Polym. Phys.*, **28**, 2651 (1990).
34. E.T. Onat and F.A. Leckie, *J. Appl. Mech.*, **55**, 1 (1988).
35. G.L. Hand, *J. Fluid Mech.*, **13**, 33 (1962).
36. S.M. Dinh and R.C. Armstrong, *J. Rheol.*, **28**, 207 (1984).

저자약력

윤재륜

1978 서울대학교 섬유공학과 학사
 1980 M.I.T. 기계공학과 석사
 1984 M.I.T. 기계공학과 박사
 1984~1987 University of South Carolina
 기계공학과 조교수
 현재 KAIST 생산공학과 부교수

고 진

1988 고려대학교 기계공학과 학사
 1990 KAIST 생산공학과 석사
 현재 KAIST 생산공학과 박사과정