The Korean Journal of Rheology,
Vol. 8, No. 1, March 1996 pp. 11-29

〈연구논문〉

단축 압출기에서의 카오스 혼합의 메카니즘과 혼합 성능 정량화

이태희 · 권태헌*

포항공과대학교 기계공학과
(1996년 2월 14일 접수)

Mechanism and Measure of Chaotic Mixing in a Single-screw Extruder

T. H. Lee and T. H. Kwon*

Department of Mechanical Engineering, Pohang University of Science and Technology,
San 31 hyojadong, Pohang, Kyungbuk 790-784, Korea
(Received February 14, 1996)

요 약

스크류 채널 내에 주기적으로 배리어를 설치함으로써 단축 스크류 압출 공정에서의 혼합 성능이 높여질 수 있음이 S. J. Kim과 T. H. Kwon에 의해 밝혀진 바 있다. 그들은 이 새로운 스크류를 통한 혼합이 카오틱하는 점으로부터 이 새로운 스크류를 카오스 스크류라고 명명했다. 우리는 카오스 스크류가 장착된 단축 압출 공정에서 역학계 이론과 혼합 운동학을 연계하여 연구를 수행하였다. 포인카레 단면을 통한 연구로부터 우리는 배리어의 배열이 island의 크기에 대단히 밀접하게 관련되어 있음을 발견하였다. 연속적인 쉘 변형은 카오틱 유동에서 유체 요소를 지수 함수 형태로 늘이는 늘임과 접힘으로 이루어진 카오틱 혼합 메카니즘을 보여 준다. 유체 요소의 국부 늘임은 원리상으로는 계산되어질 수 있으나 수치 해석상의 어려운 점이 있다. 정규 유동에서와 달리 카오틱 유동에서는 입자 추적이 Runge-Kutta 적분 중의 시간 간격에 대단히 민감하다. 그래서 실제 사용될 수 있는 시간 간격에 의해 계산된 국부 늘임율 및 혼합 효율의 정확도가 보장되어 지지 않는다. 이러한 점들을 고려하여 우리는 새로운 혼합 척도로 σ_z를 제안하는데, 이 값은 비교적 긴 유체 선분이 채널 방향을 따라 늘어나는 비에 관련된 값이다. 배리어 영역의 길이가 짧을수록 σ_z는 큰 값으로 나타나지만 포인카레 단면에 의한 연구에 따르면 배리어의 주기가 너무 짧다면 두개의 거대한 island가 존재하는 것으로 밝혀졌다. 그리고 이러한 사실은 유체 요소의 늘임비가 크다는 것이 항상 좋은 혼합 성능을 뜻하는 것은 아니라는 점을 보여준다. 이러한 관점에서 볼 때 혼합 스크류를 설계하는데 있어서는 포인카레 단면을 병행하여 σ_z의 값을 사용하는 것이 바람직할 것이다.

Abstract—S. J. Kim and T. H. Kwon[1,2] have found that mixing in a single screw extrusion process can be enhanced by inserting spatially periodic barriers in the screw channel. They termed this new screw Chaos Screw, since the mixing due to this new screw is chaotic in nature. We exploited the connection between the kinematics of mixing and the theory of dynamical systems in a single-screw extrusion process with the Chaos Screw. From the study via Poincare section we found that the periodic array of barrier is strongly related to the size of the islands. Continuous deformation of a shell clearly shows the mechanism of chaotic mixing, namely repetition of stretching and folding, which induces the exponential growth of stretching in the chaotic flow. The local specific rate of stretching of a material line and the mixing efficiency can be evaluated in principle, but with some numerical difficulty. In contrast to a regular flow, the particle tracking is quite sensitive to the time step during the Runge-Kutta integration in the chaotic flow. Therefore the accuracy in determining the local rate of stretching and the mixing efficiency is not guaranteed with a realistic time step. In this regard, as a new measure of mixing, we propose σ_z which is related to the stretch

* To whom all corespondence should be addressed.

rate of a relatively long line along the channel direction. The shorter the period of barrier-region is, the larger σ_z becomes. But according to the study via Poincare section, when the period is too short, two large islands are found to exist. This fact shows that the large stretch rate of material does not always mean good mixing performance. In this respect, it is desirable to use the σ_z together with Poincare section in designing the mixing screw.

Keywords: Single-Screw Extruder, Chaos Screw, Chaotic Mixing Mechanism, Mixing Measure, Modified Liaponov Exponent.

1. 서 론

압출 공정은 두가지 이상의 재료를 균일하게 혼합하기 위하여 많이 쓰이는 공정이다. 압출 혼합은 그 자체가 목적이 되기도 하지만 blowing 및 사출 공정 등에서 보조 공정으로도 상당히 중요한 위치를 차지한다. 최근 쌍축 압출 공정에 대한 연구가 집중적으로 이루어져 기존의 쌍축 압출기에 대한 문제점들이 개선되고 실용화도 상당수 이루어지기는 하였지만 실제 산업체들은 경제적 측면때문에 가격이 저렴한 단축 압출기를 쌍축 압출기보다 많이 사용하고 있는 실정이다. 따라서 단축 압출기의 단점인 혼합 성능을 개선하기 위한 연구가 최근에까지 수행되고 있다[1-4]. 특히 Kim & Kwon은 단축 압출 스크류의 성능을 증진하는 방법으로써 주기적으로 배리어를 설치하는 것을 제안하였고, 이때 스크류 내부의 유동이 카오틱함을 설명하였다[1,2,4].

카오스 압출 스크류는 Fig. 1에서 보는 바와 같이 기존의 보통 압출 스크류에 주기적으로 배리어가 삽입된 모양을 하고 있는데 공정의 특성 및 재료에 따라 배리어가 있는 영역의 길이(a), 배리어가 없는 영역의 길이(b) 및 높이(h)를 정하는 것이 설계의 주가 된다. 그리고 단위의 간편화를 위하여 모든 단위는 무차원화하며 특성길이는 H로 한다. 보통 스크류에서는 Fig. 2(a)에서 보는 바와 같이 채널의 직각 단면(xy 단면)에 대해 쉘(shell)이 형성된다. 한 쉘 내부의 유체 입자는 계속해서 쉘을 따라서만 움직이게 되어 그 쉘은 invariant set이 된다. 보통 스크류의 혼합 영역 전체에 걸쳐 배리어가 존재하는 경우에도 Fig. 2(b)에서 보는 바와 같이 모양이 다르기는 하지만 역시 쉘 모양의 invariant set이 형성된다. 그런데 만약 유체 입자가 보통 스크류의 쉘과 배리어가 계속해서 존재하는 스크류의 쉘 사이를 교대로 움직인다고 하면 유체 입자의 운동은 대단히 복잡해 지게 되어 그 경로를 예측할 수가 없게 되고 그 경로가 초기 조건에 대단히 민감하게 되는데, 이는 카오스(Chaos)의 대표적인 특성이다[5,11].

혼합에 대한 역학적인 관점에서의 이해는 최근 십여년 동안 급속히 발전하여 왔으나[5-13] 실제 공정에의 적용이 시급한 실정이다. Aref(1984)[5]는 수치 해석 실험을 통해 간단한 결정적 유동(deterministic flow)에서 유체 입자가 카오틱하게 운동할 수 있음을 보였다.

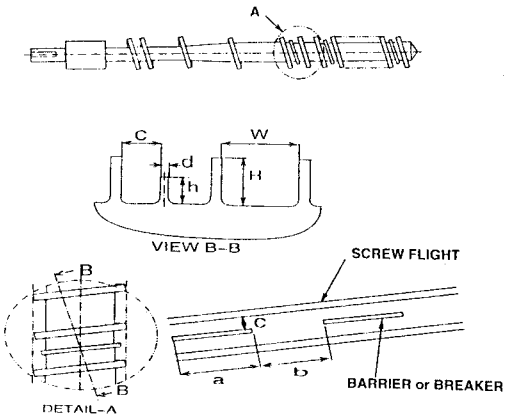


Fig. 1. The geometry of Chaos Screw.

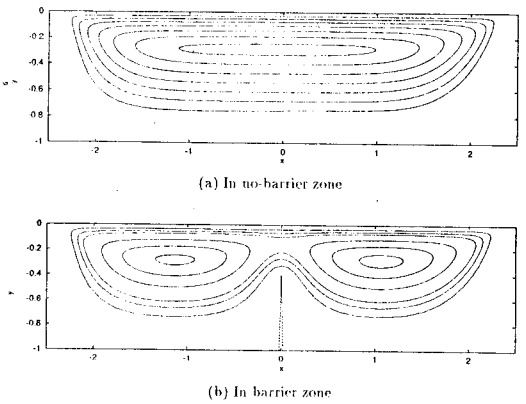


Fig. 2. Particle-trajectory of several points: Real geometry, $\theta=12$, Cross model, $h/H=0.6$.

혼합을 위한 공정에의 적용은 D.V.Khakhar. *et al*[6]이 PPM(Partitioned Pipe Mixer)의 유동을 예로 들어 카오틱 유동(chaotic flow)의 특성 및 혼합에서의 장점을 기술하면서 이루어 졌다. 카오틱 유동에서의 혼합에 관한 유동 가시화 실험이 Ottino 연구 그룹의 H. A. Kusch. *et al*[8] 및 Sadhn C. Jana. *et al*[9]에 의해 수행되었으며, T. C. Niederkorn & J.M. Ottino[10]는 시간 주기 유동에서 이루어지는 카오틱 혼합을 실험과 수치 해석을 통해 관찰하고 이를 비교하였다.

이 논문에서는 포인카레 단면(Poincare section)을 통해 Kim & Kwon[1,2,4]이 제시한 주기적으로 배리어가 삽입된 카오스 스크류 내부 유동에서 KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser)이 존재하는 모습을 제시하고, KAM의 형상과 배리어 길이의 관계를 기술하였다. 그리고 Kim & Kwon[2,4]이 제안한 쉘 변형을 채널 방향에 대해 연속적으로 수행하여 초기 쉘이 변형해 나가는 연속적인 모습을 얻어 냄으로써 카오스 스크류 내부 유동에서의 혼합에 대한 이해를 높였다.

복잡한 유동에서 혼합의 성능을 정량화하기 위해 Ottino *et al*[11,14]은 국부 늘임(local stretching)을 이용한 리아푸노프 지수(Liapunov exponents)를 제안하였으나 이 값은 유동 전체에 대한 대표값으로는 부적합할 뿐만 아니라 비교적 형상이 복잡한 카오스 스크류 내부 유동장에 대해서는 모든 위치에 대해 그 정확성을 보장할 수 없었다. 따라서 전체 유동장의 혼합 성능을 대표하면서도 비교적 일관된 정확성을 유지하는 원래의 리아푸노프 지수와 비슷한 개념을 가진 수정된 리아푸노프 지수(Modified Liapunov exponent)를 제안하였다.

2. 카오틱 역학계(Chaotic dynamic system)에서의 기본적인 개념들

2.1 카오스의 의미

이 절에서는 이어지는 절들에서 다룰 주제와 관련된 몇몇 용어 및 정의를 소개하고자 한다. 여기에서 소개되는 용어 및 정의들의 수학적인 basis에 대한 개괄은 Guckenheimer and Holmes[12]에 잘 정리되어 있으며 화공 공정에서의 혼합에 이 개념을 도입하는 것에 관해서는 Ottino[11]에 대단히 잘 소개되어 있다. 카오틱 역학계는 비록 그 시스템이 결정적(deterministic)(주기적 혹은 정상상태(periodic or steady) 포함)이라고

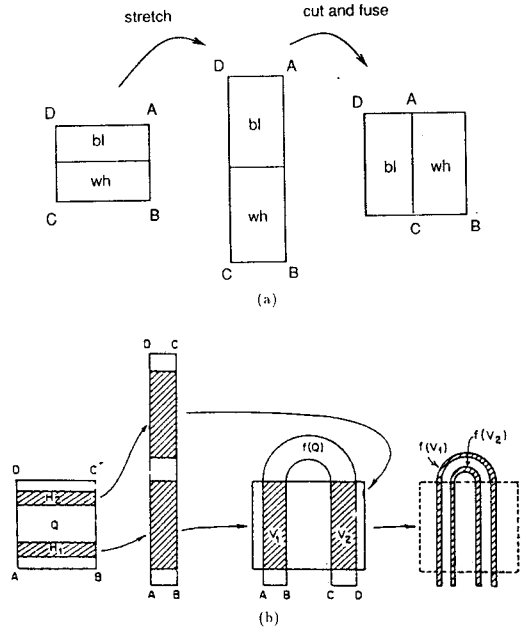


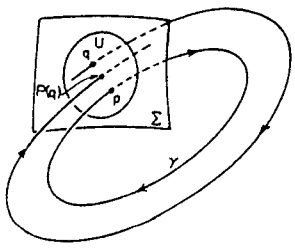
Fig. 3. (a) Baker's transform, (b) Smale's Horseshoe map.

하더라도 그 해가 초기 조건에 대해 대단히 민감하게 변하는 계를 말한다. 이것은 물론 카오틱 계의 유일한 정의는 아니며 동일한 개념이면서 수학적으로 보다 명확한 몇몇 정의가 Ottino[11]에 나타나 있다.

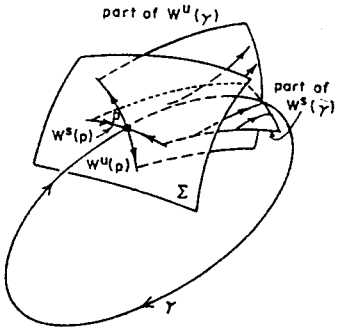
카오틱 혼합은 유동의 혼합메카니즘이 Baker's transform 또는 Smale의 편자 사상(horseshoe map)과 유사하다는 점에 근거를 둔다[11,12]. Fig. 3의 Baker's transform과 Smale의 편자 사상(horseshoe map)[13]은 대단히 유사한데 편자 사상(horseshoe map)의 존재는 카오스의 증거이기도 하다[11]. Baker's transform과 편자 사상(horseshoe map)의 주요차이는 Baker's transform이 유체 요소의 절단에 관련이 된 반면 편자 사상(horseshoe map)은 늘임(stretching)과 늘어난 유체 요소를 초기 위치로 복원시켜주는 접힘(folding)으로만 이루어 진 점이다. 편자 사상(horseshoe map)은 카오틱 유동의 전형적인 특징인 늘임과 접힘을 잘 나타내 주며 유동 가시화 연구에 대단히 유용할 수 있다[13].

2.2 방향 재배치

혼합에 관련해서 유체 선분을 늘이는 늘임 성능은 대단히 중요하다. 단순 전단 유동(simple shear flow) 및



(a) The cross section and the map



(b) a closed orbit

Fig. 4. Poincare section: reduction of a flow to a mapping.

Couette 유동과 Poiseuille 유동이 합쳐진 유동과 같은 정상 상태 곡선 유동(steady curvilinial flow)에 대해서는 길이 늘임(length stretch)이 평균적으로 시간에 대해 선형 증가한다고 알려져 있는데 이경우 혼합이 빈약하다[14].

혼합이 빈약한 것은 유체 요소가 유선(stream line)을 따라 방향 배치가 일어나기 때문인데, 이것은 유선 방향에 대한 유체 선분의 주기적인 방향 재배치(reorientation)로써 개선되어 질 수 있다. 초기에 근접한 유체 입자간의 거리가 지수 함수 형태로 증가하는 것은 카오틱 역학계의 주요 특성 중 하나인데 이러한 특성은 유선 방향에 대해 연속적인 방향 재배치가 일어나는 복잡한 유동에서 나타난다. 유체 선분이 빠르게 늘어날때 혼합이 잘 일어난다고 한다면 카오틱 유동이 혼합 성능면에서 대단히 뛰어나다는 것은 중요한 사실이다.

2.3 포인카레 단면

체적이 보존되는 카오스계는 포인카레 단면(Poincare section)에 의해 가시화될 수 있는 복잡한 유동장 구조에 의해 특징지어진다. 포인카레 단면은 유동의 차원을 줄여줄 수 있다는 장점으로 인해 많이 사용되는 기법인데 상공간(phase space)에서 적절한 단면을 선택하여 그 단면과 추적하는 입자의 교점을 기록함으로써 얻어질 수 있음이 Fig. 4에 나타나 있다.

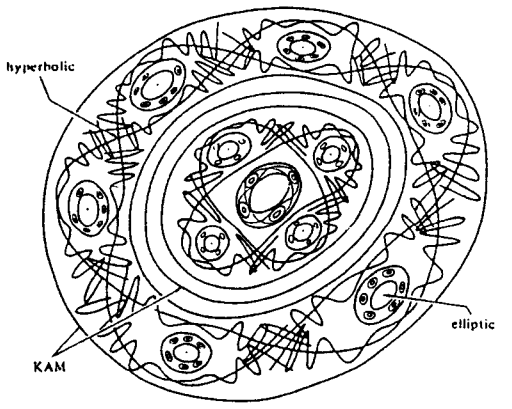


Fig. 5. Typical Poincare Section of a near integrable system showing elliptic points and their islands, hyperbolic points and their heteroclinic manifolds[11].

유동이 카오틱하다면 Fig. 5에서 보는 바와 같이 일반적으로 포인카레 단면은 대단히 복잡하다. 체적이 보존되는 계를 Hamiltonian계라고 하는데 이 계에서 주기점은 elliptic(stable) 또는 hyperbolic(unstable) 일 수 있다[11,15]. Elliptic 포인트는 invariant 준주기적궤도(quasi-periodic orbits)에 의해 둘러 싸이게 되는데, 이 폐쇄 곡선(closed curve)을 KAM 곡선이라고 한다[11, 15]. 이때 elliptic 포인트 주위에는 보다 높은 차원의 주기점이 존재하게 되는데 이들 중 절반은 elliptic이며 절반은 hyperbolic이다[6,15]. 그리고 다시 이 elliptic 포인트 주위에는 invariant 폐쇄 곡선과 더 높은 주기점이 존재하고 다시 이러한 과정이 계속해서 반복된다.

혼합이 일어나는 유동에서 포인카레 단면이 제공하는 가장 중요한 정보는 균일한 혼합을 막는 KAM 곡선의 존재 여부 및 KAM 곡선의 크기에 관한 것이다. KAM 곡선은 유체입자가 관통할 수 없어 외부와 혼합되지 않는 island의 존재를 의미한다[7,16-18]. 폐쇄된 KAM 곡선이 존재하는한 분명 이상적인 혼합은 이루어지지 않는다. 그러므로 혼합이 잘 되기 위한조건은 island를 충분히 작은 크기로까지 줄이는 것이다.

2.4 유체 요소의 늘임(stretching)

스트레인(strain)을 나타내는 값으로는 아래와 같이 정의되는 길이늘임(length stretch) λ를 사용할 수 있고

$$\lambda \equiv \lim_{|dx|\to 0} \frac{|dx|}{|dX|} \tag{1}$$

이는 다음과 같은 식으로 부터 구해 질 수 있다[11,14].

$$\lambda = (\mathbf{C}:\mathbf{MM})^{1/2} \tag{2}$$

여기에서 $\mathbf{C}(\equiv \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F})$는 Cauchy-Green strain텐서이고 벡터 $\mathbf{M}$은 $d\mathbf{X}/|d\mathbf{X}|$로 나타나는 초기 방향 단위 벡터이다. 미소 유체 요소벡터 dx의 늘임율(specific rate of stretching)은 아래와 같이 정의된다.

$$\dot{\lambda}/\lambda = D(\ln\lambda)/Dt = \mathbf{D}:\mathbf{mm} \tag{3}$$

여기에서 $\mathbf{D}$는 $(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)/2$로 정의되는 스트레칭 텐서(stretching tensor or rate of deformation tensor)이며 $\mathbf{m}$은 변형된 유체 선분의 방향 단위 벡터로 아래 식으로부터 구해질 수 있다.

$$\mathbf{m} \equiv \mathbf{F} \cdot \mathbf{M}/\lambda \tag{4}$$

그리고 늘임율의 긴 시간에 대한 평균(long time average)을 아래와 같이 이끌어 낼 수 있는데

$$\sigma(\mathbf{X},\mathbf{M}) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \frac{D\ln\lambda}{Dt}dt = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\ln\lambda \tag{5}$$

이것은 리아푸노프 지수로 알려져 있다. 카오틱 유동에서는 리아푸노프 지수가 양의 값을 나타내는데, 이것은 유체 선분이 평균적으로 지수 함수 형태를 취하면서 늘어남을 의미한다. 반면에 정규 유동에서의 리아푸노프 지수는 0이다.

늘임율은 Cauchy-Schwarz부등식으로부터 그 값이 제한되어 있음을 알 수 있는데 이로부터 늘임 효율(stretch efficiency) e_λ을 아래와 같이 정의할 수 있게 된다[11].

$$D(\ln\lambda)/Dt = \mathbf{D}:\mathbf{mm} \le |\mathbf{D}|\,|\mathbf{mm}| = (\mathbf{D}:\mathbf{D})^{1/2} \tag{6}$$

$$e_\lambda(\mathbf{X},\mathbf{M},t) \equiv (D(\ln\lambda)/Dt)/(\mathbf{D}:\mathbf{D})^{1/2} \le 1. \tag{7}$$

늘임 효율이 물리적인 의미는 소산된 에너지 중 어느 정도의 에너지가 유체 요소를 늘이는 데 활용되었는가를 나타내는 비라고 생각할 수 있다[11].

3. 압출 스크류 채널 유동에서의 유변학적 거동 특성

3.1 지배 방정식

단축 압출기의 모델링을 위한 좌표계(Coordinate System)와 경계 조건은 Fig. 6에 나타난 바와 같다. 스크류 채널의 유동 방향(즉, Fig. 6에 표시된 z방향)을 따라 속도 분포의 변화가 크지않으므로 z방향의 속도 구배를 무시한 준 삼차원 모델[19,20]로부터 유한 요소법을 사용하여 xy 단면에서의 속도 분포를 구하였다. 점성에 관해서는 아래에 나타낸 수정된 크로스 모델(Modified-Cross model)을 사용하였다.

$$\mu(\dot{\gamma},\Theta) = \frac{\eta_0}{1 + C(\eta_0\dot{\gamma})^{1-n}} \tag{8}$$

여기에서 $\mu_0 = Be^{\Theta_b/\Theta}$이고 $\dot{\gamma}$은 일반화된 전단율(generalized shear rate)로서 다음과 같이 정의 된다[21].

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2D_{ij}D_{ij}} \tag{9}$$

그리고 단위의 간편화를 위하여 모든 값을 무차원화 하여 특성 길이, 특성 속도, 특성 시간은 각각 H, V_{bz}, H/V_{bz}로 하였고, 입자 추적 및 F텐서를 구하기 위해서는 4차 Runge-Kutta Method가 사용되었다[21].

3.2 준삼차원 모델의 확장

Kim & Kwon[1,2,4]에 의해 제안된 카오스 스크류는 z방향에 대해 기하학적 변형이 존재하기는 하지만 그

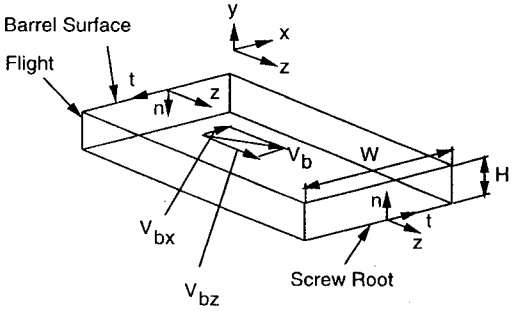


Fig. 6. Coordinate system and boundary conditions with a no-slip model for quasi-three dimensional flow.

형상이 대단히 간단하여 준삼차원 모델을 다음과 같이 확장 적용할 수 있다. Kim & Kwon에 의해 제안된 카오스 스크류 내부에서 유체는 배리어가 없는 일정한 단면의 영역과 배리어가 있는 일정한 단면의 영역을 교대로 지나게 된다. 따라서 배리어가 없는 일정 단면과 배리어가 있는 일정 단면에 대해 각각 준삼차원 해석을 하여 배리어가 없는 단면의 유동과 배리어가 있는 단면의 유동이 z축을 따라 반복되는 것으로하여 전체 3차원 유동장을 구할 수 있다. 본 논문에서는 작동 유체를 LDPE로 선택하였으며 식 (8)에 소개된 수정된 크로스 모델의 계수는 각각 실험으로부터 얻은 $B = 5.76651\times10^{-2}$[kg/($m \cdot sec$)], $\Theta_b = 5817.74$[°K], $C = 1.44540\times10^{-3}$[(kg/$m^2 \cdot sec$)$^{n-1}$], $n = 0.346298$로 하였다. 그리고 스크류의 속도는 30 rpm으로 하였으며 압력 구배는 유량이 동일하도록 하기 위하여($Q = 6.937\times10^{-7}$[m^3/sec]) 배리어가 있는 영역에서는 1.086×10^{7}[N/m^3]로, 배리어가 없는 영역에서는 1.296×10^{7}[N/m^3]로 하였다. 각각의 압력구배를 결정하기 위하여 스크류 특성(무차원 유량과 무차원 입력구배의 관계)을 각각의 영역에서 유한요소해석을 통해 구하였다[2,4]. 실제로는 배리어가 존재하지 않는 영역과 배리어가 존재하는 영역 사이에 완충 영역이 존재하겠지만 수치해석으로 구한 유동장에서는 각영역의 유동장 사이에 점프(jump)가 있게 되어 각영역 사이의 경계 부근에서는 실제와 다른 유동장이 구해진다. 그러나 이렇게 해서 구한 3차원 유동장은 카오스 혼합이 일어나는 메카니즘 및 방향 재배치의 효과를 이해하기에 충분히 적합하다고 판단되며 실제로도 Kim & Kwon[1,2,4]은 준삼차원 수치해석 유동장에서 구한 쉘 변형이 실험과 아주 잘 일치함을 보여 주었다.

3.3 유동 특성

Ottino 및 여러 문헌에서 이미 elliptic point 근처보다 hyperbolic point 근처의 유동에서 혼합 성능이 더 뛰어남을 강조하였다. Fig. 2(b)와 같이 보통 스크류 채널 가운데 배리어가 계속해서 존재하는 경우 하나의 hyperbolic point가 존재하지만, 좌우에 각각 elliptic point가 존재하여 전 영역에서 혼합이 잘 일어나지는 않는다. 이것은 hyperbolic point에서 출발한 unstable manifold가 hyperbolic point로 향하는 stable manifold와 부드럽게 연결되어 지면서 elliptic point 주위의 정규 유동(regular flow)이 다시 쉘(shell)을 형성하는것으로 설명되어질수 있다. 그러므로 이 유동장에 교란을 주어 unstable manifold와 stable manifold가 복잡하게 교차하게 함으로써 homo-clinic point를 생성하여 elliptic point 주위의 정규 유동을 카오틱 유동(chaotic flow)으로 바꿀수 있다. 이러한 homo-clinic point의 존재는 이때의 유동이 곧 편자 사상(horse-shoe mapping) 유동임을 의미하고 이것은 카오틱 유동의 또 다른 표현이기도 하다[11]. 배리어가 존재하는 스크류 유동에 교란을 주는 방법으로는 주기적으로 배리어가 존재하지 않는 구간을 두어 Kim & Kwon이 제안한 카오스 스크류와 같은 모양을 형성하는 것을 생각할 수 있다. Fig. 7(a) (b)는 배리어 구간이 길고 배리어가 없는 구간이 짧은 주기적인 유동장에서 포인카레 단면(Poincare section)을 구한것인데 교란이 작은 즉 배리어가 없는 구간이 짧은 경우에 manifold의 굽이침이 덜함을 보여준다.

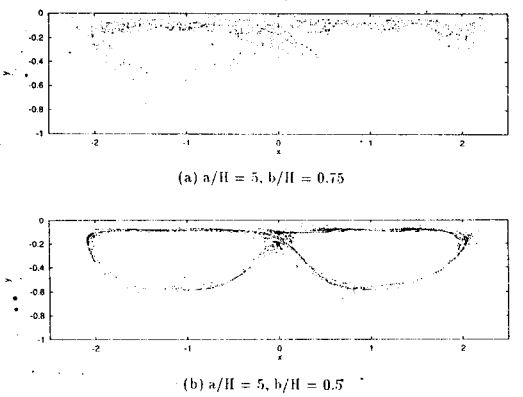
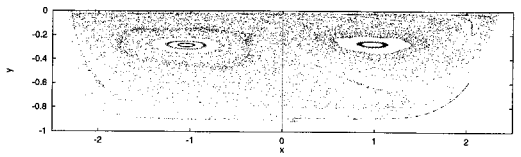


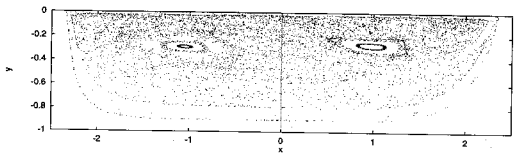
Fig. 7. Poincare section when initial points are close to one hyperbolic point.

4. 포인카레 단면

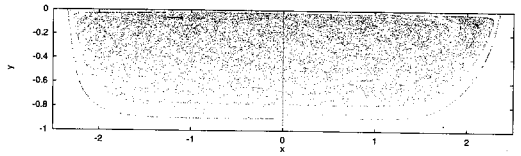
복잡한 유동장의 해석을 위하여 포인카레 단면이 대단히 유용할 수 있다. 포인카레 단면으로부터 얻을 수 있는 정보는 주로 입자의 퍼짐성(distributivity)에 관련되는데 일반적으로 Fig. 5에서와 같은 정확한 manifold의 형상을 보여주지는 못하고 단지 island의 위치 및 크기에 대한 이해에 도움을 줄 수 있는 정도이다. Fig. 8은 배리어가 없는 영역의 마지막 단면에서 얻은 포인카레 단면이다. 배리어가 있는 영역(a/H)과 없는 영역(b/H)이 같은



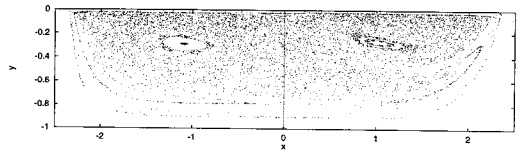
(a) a/H = b/H = 3



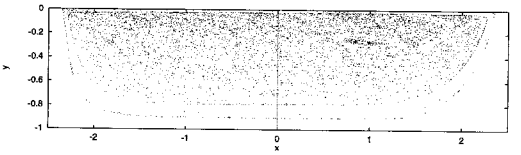
(b) a/H = b/H = 5



(c) a/H = b/H = 10



(d) a/H = 10, b/H = 5

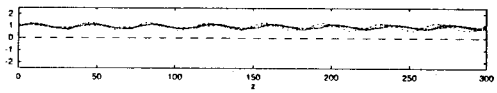


(e) a/H = 5, b/H = 10

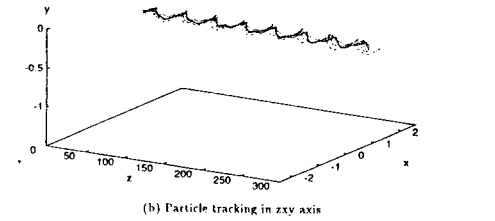
Fig. 8. Poincare section when initial positions are distributed over all region.

크기로 반복할때 배리어 간격이 커짐에 따라 최대 island의 크기가 작아지는 것이 관찰된다. 그리고 배리어가 없는 영역이 5H이고 배리어가 있는 영역이 10H인 경우보다 배리어가 있는 영역이 5H이고 배리어가 없는 영역이 10H인 경우 island의 크기가 작은것으로 관찰되는데, 이로부터 배리어가 없는 영역이 island의 크기를 줄이는 데 있어 중요한 역할을 함을 예측할 수 있다.

카오스 스크류 유동장에서 카오틱 혼합의 메카니즘을 이해하기 위한 보다 선명한 포인카레 단면은 배리어가 존재하는 구간에 비하여 배리어가 존재하지 않는 구간이 대단히 짧은 카오스 스크류 유동장에서 얻어졌다. Fig. 7의



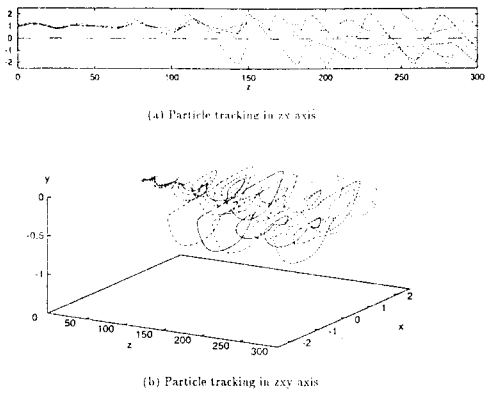
(a) Particle tracking in zx axis



(b) Particle tracking in zxy axis

Fig. 9. Particle tracking of five initial points (1., -0.3, 0.), (1.1, -0.3, 0.), (0.9, -0.3, 0.), (1., -0.28, 0.), (1., -0.32, 0.) inside KAM region, a/H=b/H=5.

(a)와 (b)는 배리어가 존재하는 구간이 5H이고 배리어가 존재하지 않는 구간이 각각 0.75H와 0.5H인 스크류 유동장에 대한 포인카레 단면인데, 제 1차 hyperbolic 포인트에서 출발하고 들어오는 unstable manifold와 stable manifold 주위에서의 교란 효과를 관찰하기 위하여 각각 (0, -0.2)와 (0, -0.175)를 중심으로 하고 반지름의 크기가 0.02인 원을 따라 등간격인 360개의 점들을 초기점으로 했다. Fig. 7(a)는 제 1차 hyperbolic 포인트 좌우에 KAM으로 인한 커다란 island가 존재하여 주위 카오틱 영역의 유체 입자가 island 내부로 침입하지 못하는것을 보여준다. 그리고 커다란 KAM영역 주위에 소형 KAM을 둘러싸고 있음을 관찰할 수 있는데 이는 Fig. 5에서 제시한 카오틱 유동장에서의 전형적인 manifold의 형태와 대단히 유사하다. 포인카레 단면으로부터는 분명한 manifold의 형상을 얻기 힘들지만 앞에서 설명한 바와 같이 소형 KAM 사이에는 제 2차 hyperbolic 포인트가 존재할 것이며 소형 KAM 주위에는 보다 더 작은 KAM 및 더 높은 차원의 hyperbolic 포인트들이 존재할 것이다. 그리고 이러한 hyperbolic 포인트들의 존재가 늘임이 지수 함수 형태로 이루어지게 되는 주된 원인이 된다. Fig. 7(b)에는 제 1차 hyperbolic 포인트 주위에서 unstable manifold가 교란하는 모습이 나타나는데, 비록 stable manifold와 교차하는 모습이 뚜렷하지는 않지만 일반적으로 hyperbolic 포인트 주위에서 정확한 manifold의 형상을 얻기가 대단히 힘든 점을 감안할때 비교적 선명한 manifold의 형상을 보여주고 있다. Fig. 9와 Fig. 10은 KAM의 존재를 확인하기 위하여 반주기가



(a) Particle tracking in zx axis

(b) Particle tracking in zxy axis

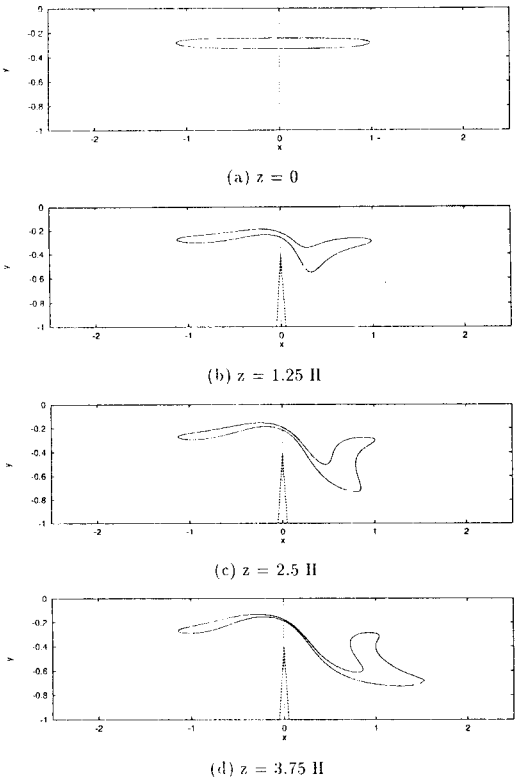
Fig. 10. Particle tracking of five initial points (1., -0.3, 0.), (1.1, -0.3, 0.), (0.9, -0.3, 0.), (1., -0.28, 0.), (1., -0.32, 0.) without KAM region, a/H=b/H=10.

각각 5H와 10H인 카오스 스크류 유동장에서 다섯점 (1, -0.3, 0), (1.1, -0.3, 0), (0.9, -0.3, 0), (1, -0.28, 0), (1, -0.32, 0)을 초기 위치로 하는 입자의 궤적을 zx좌표계와 zxy좌표계에 대해 나타내었다. 포인카레 단면으로부터 초기의 다섯점이 모두 KAM 내부에 존재한다고 생각되는 반주기가 5H인 경우 5개의 입자 궤적이 다발을 형성하며 존재하는 반면(Fig. 9) 포인카레 단면으로부터 KAM의 존재가 확인되지 않은 반주기가 10H인 경우 초기의 근접한 5점의 입자 궤적은 유동장 전영역에 걸쳐 복잡하게 얽혀있는 것이 관찰된다(Fig. 10).

5. 쉘의 z축 변형 단면

압출기 내부의 혼합이 얼마나 잘 되었는지를 판단할때 선분의 길이 증가가 유용할 수 있다. 앞에서 설명한 바와 같이 늘임(stretching)과 접힘(folding)은 선분의 길이 증가가 지수 함수 형태가 되도록 하여 혼합의 효율을 높이는 카오스 혼합의 주요 메카니즘이다. 카오스 스크류에서 유체 요소의 늘임과 접힘이 일어나는 모습을 관찰하기에 z방향을 따라 연속적으로 얻은 쉘 변형 단면이 유용할 수 있었다.

카오스 압출 스크류는 혼합영역(metering zone)에서만 배리어가 존재하며 그 이전 단계인 천이 영역(melting zone)에서는 배리어가 존재하지 않아 쉘이 형성된다. 그리고 Kim과 Kwon은 혼합 영역에서 수치해석을 통해 구한 초기 쉘의 변화된 모습이 실험과 잘 일치함을 보였다[1,2]. 여기에 착안하여 (0, -0.33)을



(a) z = 0

(b) z = 1.25 H

(c) z = 2.5 H

(d) z = 3.75 H

Fig. 11. Deformation of a shell containg the point (0., -0.33) in the first barrier zone, a/H=b/H=20.

포함하는 쉘이 반주기가 20H인 카오스 스크류 유동장에서 z값에 따라 변형하는 모습을 Fig. 11, 12에 나타내었다. Fig. 11에는 초기 쉘이 배리어가 있는 영역에서 변형하는 모습이 나타나는데, 배리어가 있는 영역에서 Hyperbolic point 근처에서 늘임이 강하게 일어나면서 한편으로는 접힘도 함께 일어나고 있음을 관찰할 수 있다. Fig. 12는 배리어가 있는 영역을 지난 쉘 변형 단면이 배리어가 없는 영역에서 변형하는 모습을 나타내는데 전 영역에 걸친 접힘의 효과로 인해 배리어가 없는 영역이 유체 입자가 골고루 퍼질 수 있도록 하는데 있어 중요한 역할을 하고 있음을 확인할 수 있다. 이때 z값만큼 이동하였을때 변형된 쉘의 모습은 초기에 쉘 내부에 존재하던 유체 입자가 z만큼 이동하였을때 존재할 수 있는 영역을 의미한다. 따라서 변형된 쉘의 길이가 z값에 따라 증가하게 된다면 유체 입자가 존재할 수 있는 영역이 커짐을 의미하여 변형된 쉘의 길이가 혼합이 잘 이루어졌는가에 대한 정보를 줄 수도 있

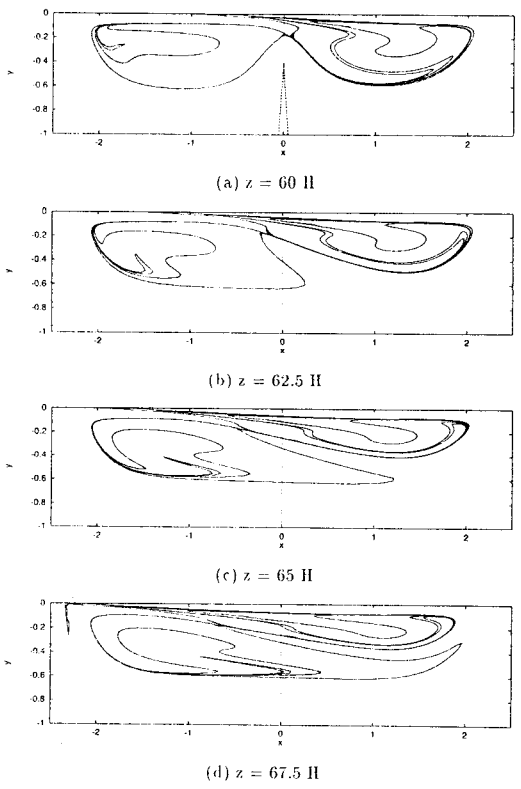


Fig. 12. Deformation of a shell containg the point (0., -0.33) in the second no-barrier, a/H=b/H=20.

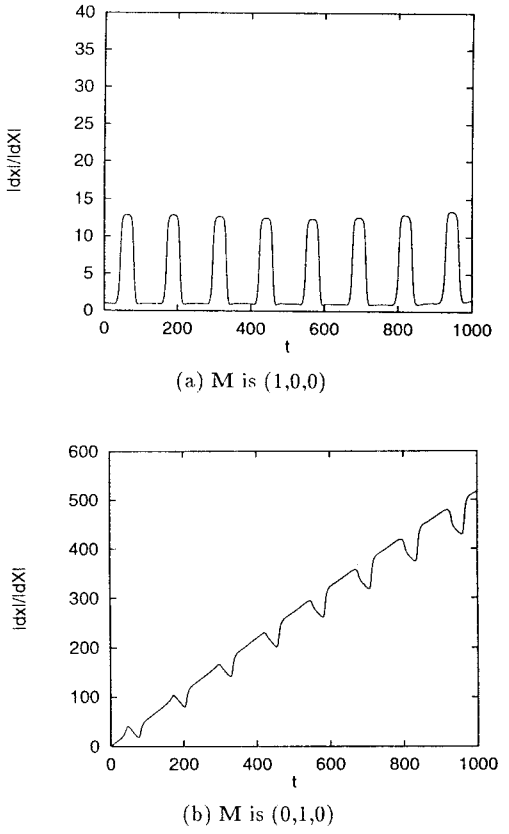


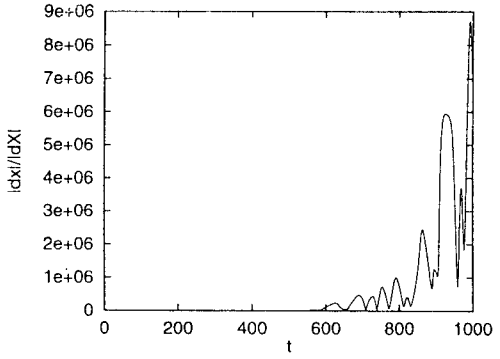
Fig. 13. λ versus t in the flow of regular screw: Initial position is (0., -0.6, 0.).

음을 예측할 수 있다.

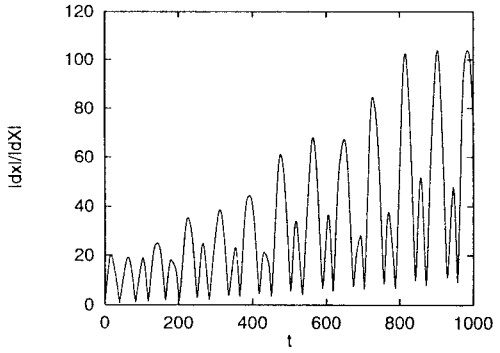
6. 국부 늘임(local stretch)

준삼차원(quasi-3D)해석을 이용하여 구한 유동장으로부터 2.2.3절에 소개된 $\lambda(|d\mathbf{x}|/|d\mathbf{X}|)$ 및 늘임율(specific rate of stretching)과 늘임 효율(stretch efficiency)의 시간에 대한 변화 모습을 Fig. 13~16에 제시하였다. 정상 유동에서는 시간에 대한 λ의 변화가 초기 방향 벡터 **M**에 따라 다른데, 초기에 유체 선분 $d\mathbf{X}$가 유선에 직각 방향으로 놓여 있을때 λ의 증가율이 가장 크다. Fig. 13(a) (b)는 보통 스크류 유동에서 초기 위치가 (0, -0.6, 0)이고 초기 방향 **M**이 각각 (1, 0, 0), (0, 1, 0)인 경우 λ의 시간에 대한 변화를 나타내고 있다. **M**이 (1, 0, 0)인 경우 λ는 $\sqrt{c}$와 같으며, 시간에 대해 주기적인 변화를 하는데 이는 Kwon. *et al*[23]이 설명한 바와 같이 초기에 쉘에 접하는 방향으로 놓인 미소 유체 선분이 쉘을 한바퀴 돌아 제자리에 돌아왔을때 미소 유체 선분의 크기와 방향이 다시 초기 상태와 동일하게 됨을 나타낸다. **M**이 (0, 1, 0)인 경우에는 쉘에 수직한 방향을 초기 방향으로 하는 미소 유체 선분에 대한 λ의 크기가 계속해서 증가하기는 하지만 λ의 증가율이 선형증가를 넘어서지 못하는데 이는 미소 유체 선분이 점차 유선 방향을 따라 배치되기 때문이다.

이에 반해 카오스 스크류 유동에서는 미소 유체 선분이 island에 묶여 있지 않다면 Fig. 14(a)에 나타난 바와 같이 λ가 선형증가를 넘어서 지수 함수 형태로 증가하게 되는데 이것은 연속적인 강한 방향 재배치(reorientation)로 인해 유체 선분이 유선 방향으로 배치되는 것을 막아 주기 때문이다. 그리고 카오틱 유동에서는 보통 정상 곡선 유동에서와는 달리 초기 방향 벡터 **M**이 λ의 변화에 미치는 영향이 초기에만 인식되고 시간

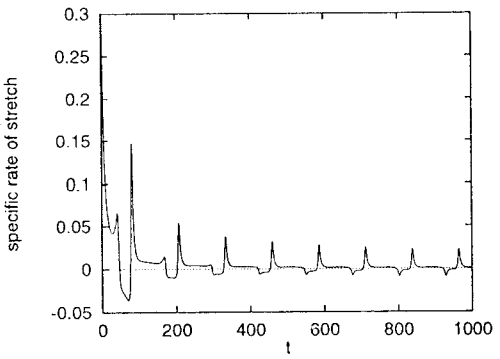


(a) Initial position is (0.,-0.5,0.): Chaos region

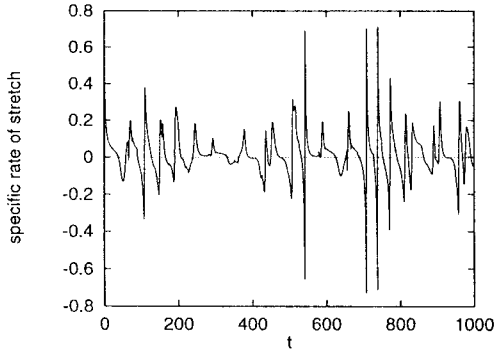


(b) Initial position is (1.,-2.5,0.): KAM region

Fig. 14. λ versus t in the flow of Chaos screw with a/H= b/H=5, **M** is (0, 1, 0).



(a) In regular screw



(b) a/H = b/H = 5

Fig. 15. $D \ln \lambda / Dt$ versus of t for **M** of (0, 1, 0): Initial position is (a) (0., -0.6, 0.), (b) (0., -0.5, 0.).

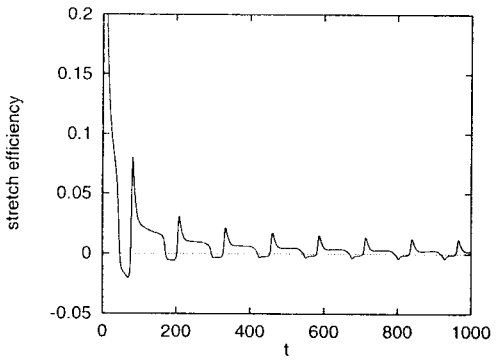
이 지남에 따라 초기 방향 벡터 **M**의 영향이 중요하지 않게 된다[11]. 그러나 Fig. 14(b)에서 처럼 카오스 스크류 유동에서도 미소 유체 선분이 KAM곡선 영역에서 벗어나지 못하는 경우 보통 스크류의 정규 유동에서와 마찬가지로 λ의 변화가 선형 증가를 넘지 못함이 관찰되는데 이는 3차원 유동에서 나타날 수 있는 z방향에 대한 방향 재배치가 강하지 않음을 뜻한다[6,11].

Fig. 15과 Fig. 16는 보통 스크류 유동과 반주기가 10H(즉, a/H = b/H = 10)인 카오스 스크류 유동에서 초기 방향 M이 (0, 1, 0)일때 늘임율(specific rate of stretching)과 늘임 효율(stretch efficiency)이 시간에 따라 변화하는 모습을 각각 나타내는데, 보통 스크류 유동에서는 시간이 지남에 따라 늘임율과 늘임 효율이 모두 0에 수렴하는 반면 카오스 스크류 유동에서는 불안정한 상태를 계속해서 유지함을 관찰할 수 있다. 그러나 일반적으로는 보통 스크류 유동에서도 유체 입자의 운동 방향이 급격히 바뀌는 영역에서는 λ의 변화가 크기때문에 늘임율과 늘임 효율이 아주 작은값으로까지 수렴하는 것을 관찰하기 힘들었다.

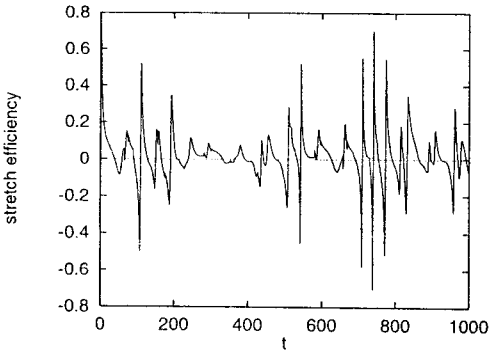
카오스계의 중요한 성질인 초기 조건의 확산은 일반적으로 리아푸노프 지수에의해 정량화되는데 리아푸노프 지수의 정의 및 늘임율과의 관계는 아래와 같다[11].

$$\sigma(\mathbf{X},\mathbf{M}) \equiv \lim_{t\to\infty}\left[\frac{1}{t}\ln\left(\frac{|d\mathbf{x}|}{|d\mathbf{X}|}\right)\right] \equiv \lim_{t\to\infty}\left[\frac{1}{t}\ln\lambda\right] \equiv \lim_{t\to\infty}\left[\frac{1}{t}\int_0^t\left(\frac{D\ln\lambda}{Dt}\right)dt\right] \tag{10}$$

위식에서 $D\ln\lambda/Dt$는 늘임율임을 상기할때 리아푸노프 지수가 늘임율의 긴 시간에 대한 평균을 의미함을



(a) In regular screw



(b) a/H = b/H = 5

Fig. 16. Stretch efficiency versus t for **M** of (0, 1, 0): Initial position is (a) (0., -0.6, 0.), (b) (0., -0.5, 0.).

알 수 있다. 만약 리아푸노프 지수가 0이 아니라면 길이 선분 $|dx|$와 $|dX|$ 사이에 다음과 같은 관계가 성립한다.

$$|dx| \approx A\,|dX| \exp(\sigma t) \text{ at } large\ t \tag{11}$$

위 식에서 A는 상수이고 리아푸노프 지수가 길이 늘임의 비율을 대표할 수 있다는 사실을 내포한다.

카오스 스크류 내부 유동장에서 유체 입자의 궤적은 유체 입자의 초기 위치에 따라 크게 차이가 난다. 그로 인해 길이 늘임 λ의 시간에 따른 변화도 역시 유체 요소의 초기 위치에 대단히 민감할 것이다. 이로 인해 카오틱 유동에서 수치 해석을 통한 입자의 궤적 및 길이 늘임 λ의 계산은 무시할 수 없을 정도의 오차를 포함할 수 있다. 이러한 점은 어느 한 위치에서 출발한 미소 유체 요소의 길이 늘임 λ가 카오틱 유동에서 그 유동의 혼합 성능 척도로서 합당하지 않은 주요 이유이다. 그럼에도 불구하고 이 미소 유체 요소의 길이 늘임은 카오틱 유동의 혼합 성능을 정성적인 면에서 판단하는데는 도움을 줄 수 있었다. 다음 절에서는 유체 입자의 궤적에 민감하지 않고 카오틱 유동의 혼합 성능을 판단하기에 적합한 새로운 척도를 제안한다.

7. 카오스 유동에서의 혼합 성능 정량화

7.1 이전의 혼합 성능 정량화

혼합의 정도를 판단하기 위해 몇 가지 혼합 척도(mixing measure)가 제시되어 왔다. 특히 Kim & Kwon은 DC(Deformation Characteristics)[23] 및 이 값에 두번의 평균 개념을 도입한 수정된 DC를 제안하였는데[24], DC는 Green변형 텐서 중 가장 큰 고유치(eigenvalue)에 해당하는 고유벡터(eigenvector)방향에서의 일반화된 늘임율(generalized strain or stretch rate)과 같은 물리적인 의미를 지닌다[23,24]. 그러나 이것은 카오틱 유동이 일어나지 않고 입자의 궤적이 쉘을 형성하는 경우에 대해서만 적용이 가능하고 일정한 쉘을 형성하지 않는 경우에 대해서는 적용이 곤란하다. Ottino도 혼합의 정도를 판단하기 위한 값으로 2.2.3에 나타난 늘임율(specific rate of stretching) 및 늘임효율(stretch efficiency)[6,11]을 제시하였으며 2차원 직사각 통 유동(two-dimensional rectangular cavity flow)에 대해 다음 값을 계산하였다.

$$L(t) = \int_{L_0} (\mathbf{C}:\mathbf{MM})^{1/2} |d\mathbf{X}| \tag{12}$$

그러나 Ottino가 제시하고 계산한 값들 역시 속도장이 해석적으로 구해지거나 카오스가 일어나지 않는 유동에 대해서만 적용되었을 뿐이다. 일반적으로 카오틱 유동에서는 초기의 작은 오차가 지수 함수 형태로 커지기 때문에 수치 해석적으로 입자의 궤적을 정확하게 계산한다는 것은 거의 불가능하다. 이로 인해 입자의 궤적이 쉘을 형성하는 경우와 같이 경로가 제한되어 있지 않는 카오틱 유동에서 입자의 궤적을 따라가면서 계산이 이루어지는 값들을 직접 혼합의 정량화에 도입하는 것은 바람직하지 않을것 같다. 따라서 수치 해석적으로 카오틱 유동의 혼합 성능을 정량화하기 위해서는 유체 입자의 궤적에 너무 민감하지 않으면서 전체 유동장의 특성을 일관되게 표현할 수 있는 새로운 정의가 필요하

였다.

7.2 새로운 개념의 혼합 성능 정량화: 수정된 리아푸노프 지수

압출 공정에서 혼합 성능은 중요한 요인으로 작용하며 혼합 성능이 보다 뛰어난 스크류를 개발하거나 공정을 찾아내기 위해서는 혼합 성능을 정량화 시킬 수 있는 척도(measure)가 절실히 요구된다. 그러나 기존의 혼합 척도로는 개발된 카오스 스크류의 혼합 성능을 정량화 할 수 없어 단축 카오스 스크류의 혼합 성능을 정량화 하기에 대단히 실용적이면서도 비교적 계산이 간단한 새로운 혼합 척도를 아래와 같이 제안한다.

$$\sigma_z = \lim_{z\to\infty} \frac{\ln \frac{\int_z |d\mathbf{x}|}{\int_0 |d\mathbf{X}|}}{z} \tag{13}$$

여기에서 z는 압출 스크류 down channel 방향의 좌표 값이고 $\int_0|d\mathbf{X}|$는 $z=0$ 단면에 존재하는 초기 곡선의 길이이며 $\int_z|d\mathbf{x}|$는 $\int_0|d\mathbf{X}|$가 z값만큼 이동한 후 변형된 곡선의 길이이다. 새로이 제안된 혼합 척도 σ_z를 수정된 리아푸노프 지수(Modified Liapunov exponent)로 명칭하였는데, 이를 식 (7)에 나타난 기존의 리아푸노프 지수와 비교해 보면 t대신 z가 매개 변수로 사용되었으며 미소 선분 $|d\mathbf{X}|$와 $|d\mathbf{x}|$가 일정한 크기를 가진 $\int_0|d\mathbf{X}|$과 $\int_z|d\mathbf{x}|$로 대치되었을 뿐임을 알 수 있다. 리아푸노프 지수는 미소값을 사용하여 정의한 값이기 때문에 입자 궤적을 따라 계산해야 한다는 어려움이 있을 뿐만 아니라 초기 위치에 따라 그 값이 다를 수 있어 이 값을 직접 전체 유동장의 혼합 성능을 판단하기 위하여 사용하기에는 적합하지 않다. 그런데 초기 조건으로 일정 길이를 가진 곡선의 z값에 따른 변형된 곡선의 길이 변화는 위에 새로이 정의된 σ_z와 관련하여 대단히 흥미로운 결과를 제시한다. Fig. 18은 Fig. 17의 세 선분을 초기 조건으로 할때 z값에 따라 세 곡선의 길이가 변화하는 모습을 초기 선분의 길이에 대한 비로 나타내었다. Fig. 18(a)는 보통 스크류 유동에서 초기 세 선분의 길이 변화를 나타내는데 변형된 곡선의 길이가 선형적으로 증가하게 됨을 보여준다. 이때 각 곡선마다 그래프의 기울기는 일반적으로 다르

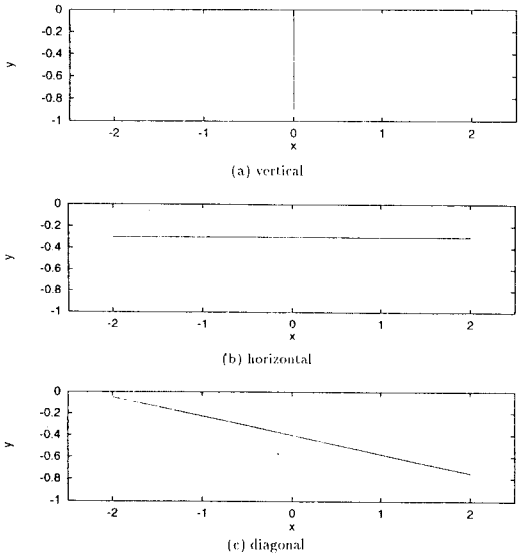


Fig. 17. Three initial lines for computation of σ_z.

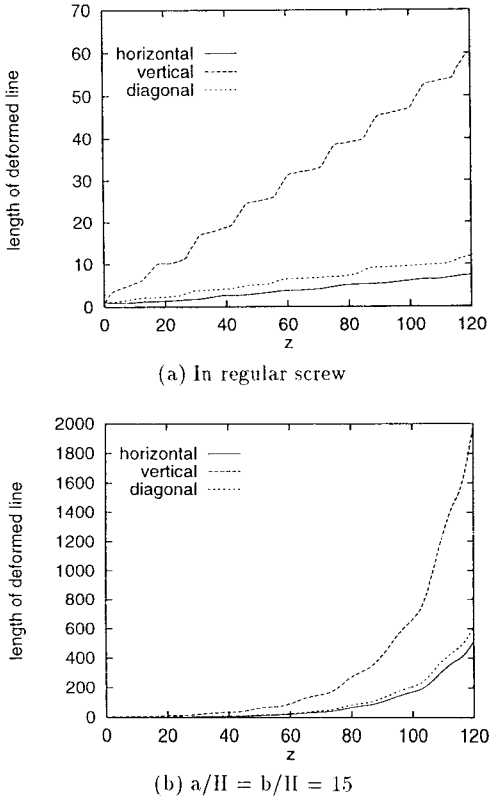


Fig. 18. $\int_z|d\mathbf{x}|/\int_0|d\mathbf{X}|$ versus of z for three initial lines.

나 제안된 혼합 척도에 의하면 세 경우 모두 σ_z가 0이 됨을 알 수 있다. Fig. 18(b)는 배리어가 없는 구간이 15H이고 배리어가 있는 구간이 15H인 스크류 유동에서 세 초기 선분의 길이가 z값에 따라 변화하는 모습을 나타내는데 변형된 곡선의 길이가 지수 함수 형태로 증가함으로부터 σ_z가 양의 값이 될 수 있음을 예측할 수 있다.

일반적으로 카오틱 유동에서는 길이 늘임이 지수 함수 형태로 증가한다는 사실로부터 아래와 같은 식을 추정할 수 있다.

$$\int_z |d\mathbf{x}| = Ae^{az}\int_0 |d\mathbf{X}| \tag{14}$$

양변에 로그 함수를 취하면

$$\ln\int_z |d\mathbf{x}| = \ln A + az + \ln\int_0 |d\mathbf{X}| \tag{15}$$

$$\ln\frac{\int_z |d\mathbf{x}|}{\int_0 |d\mathbf{X}|} = az + b \tag{16}$$

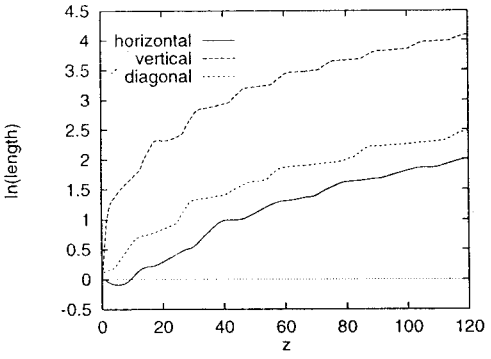
여기에서 b는 $\ln A$를 나타낸다. Fig. 19는 $\ln[\int_z |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|]$의 z값에 대한 변화를 나타내는 그래프인데 보통 스크류의 경우 (a)에서 보는 바와 같이 z에 따라 a가 0에 수렴하는 반면 카오스 스크류 유동에서는 세가지의 초기 조건에 대해 거의 비슷한 양의 기울기 a를 가지는 것을 알 수 있다. 이러한 사실은 카오스 혼합에 있어서 혼합 성능 정량화에 중요한 의미를 갖고 있다. 이러한 의미는 후에 더 자세히 설명하겠다.

식 (16)의 양변을 다시 z로 나누어 주면 다음과 같이 표현된다.

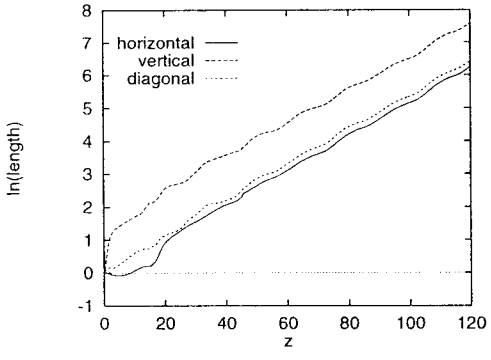
$$\frac{\ln\frac{\int_z |d\mathbf{x}|}{\int_0 |d\mathbf{X}|}}{z} = a + \frac{b}{z} \tag{17}$$

$$\sigma_z \equiv \lim_{t\to\infty} \frac{\ln\frac{\int_z |d\mathbf{x}|}{\int_0 |d\mathbf{X}|}}{z} = a \tag{18}$$

식 (17)에서 z값이 커짐에 따라 b의 값은 점차 무시할 수 있게되므로 우변의 z에대한 양의 극한값이 새로이 정의한 혼합 척도 σ_z임을 상기할때 식 (18)과 같이 혼합 척도 σ_z가 a와 같은 값이 됨을 알 수 있다. Fig. 20에 z값에 따른 식 (17)의 변화가 나타나는데 식 (17)의 z에 대한 정확한 양의 극한값을 찾기위해서는 대단히 큰 z값에 대해서까지의 계산이 필요하다는 것을 알 수 있다. 따라서 σ를 구하기 위하여 z값을 무한정 크게 하는 것보다 Fig. 19와 같은 그래프로부터 커브 피팅(curve fitting)하여 a를 대신 구하는 것이 실제 계산에서 더 편리하다. 그리고 카오틱 유동장에서도 작은 z값에 대해서는 초기 곡선의 모양에 영향을 받을 수 있으므로 커브 피팅(curve fitting)할때 충분히 큰 z값에 대한 데이타만을 사용하는 것이 바람직할 것이다. Figs. 18~20로부터 정규 스크류 유동에서는 선분의 길이가 선형 증가하는 반면 카오스 스크류 유동에서는 선분의 길이가 지수 함수 형태로 증가하는 것을 확인할 수 있는데 이는 정규 스크류 유동에서는 각 쉘마다의 속도 차이가 길이 증가의 주된 원인이 되지만 카오스 스크류 유동에서는 연속적인 쉘 변형에서 확인 된 바와 같이 반복적인 늘임과 접힘이 발생하기 때문이다. Fig.

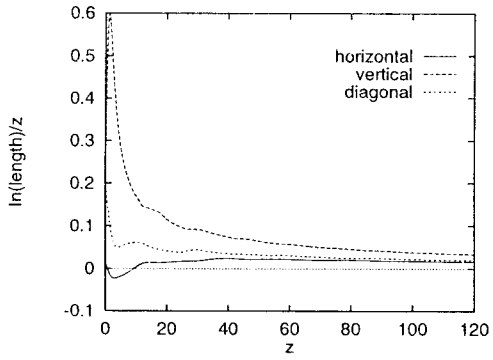


(a) In regular screw

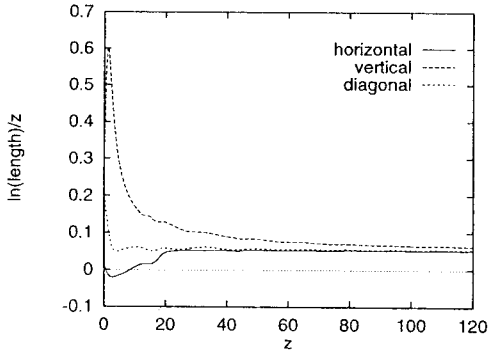


(b) a/H = b/H = 15

Fig. 19. $\ln(\int_z |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|)$ versus of z for three initial lines.



(a) In regular screw

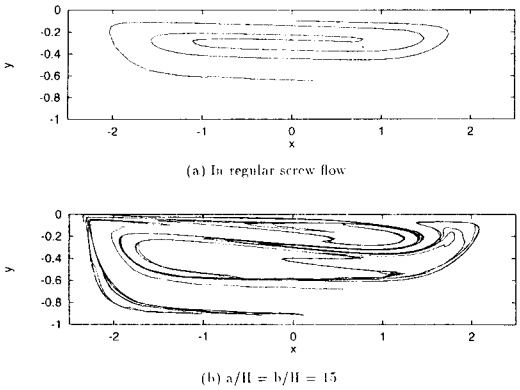


(b) a/H = b/H = 15

Fig. 20. $\ln(\int_z |d\mathbf{x}|/\int_0 |d\mathbf{X}|)/z$ versus of z for three initial lines.

21(a) (b)는 Fig. 17(a)를 초기 선분으로 했을 때 각각 보통 스크류 유동과 배리어가 없는 영역과 배리어가 있는 영역이 각각 15H인 카오스 스크류 유동에서 z방향으로 75H만큼 진행한 후 초기 선분이 변형된 모습을 나타낸다.

Table 1은 Fig. 17의 세개의 선분을 초기 조건으로 하여 Fig. 19(b) 그래프의 기울기로 부터 구한 σ_z를 나타내고, Table 2는 초기 선분으로 한 수직 선분(vertical line)의 x축 위치가 다른경우에 대해 σ_z를 나타냈다. 이로부터 초기 선분이 충분히 전체 유동장에 걸쳐 있다면 초기 곡선의 모양에 의한 σ_z의 차이와 Table 3의 배리어 배열에 의한 σ_z의 차이를 비교해 볼 때 초기 선분의 모양이 σ_z에 미치는 영향이 그다지 크지 않음을 알 수 있다. 그러나 초기 선분이 전체 유동장에 충분히 걸쳐 있지 않다면 σ_z는 전체 유동장의 혼합 성능을 나타내었다고 보기가 힘들다. 예를 들면 초기 곡선이 KAM



(a) In regular screw flow

(b) a/H = b/H = 15

Fig. 21. Deformed shape of an initial horizontal line at z =75H.

Table 1. σ_z for three initial lines, a/H=15, b/H=15

initial line	σ_z
horizontal	0.0518
vertical	0.0501
diagonal	0.0513

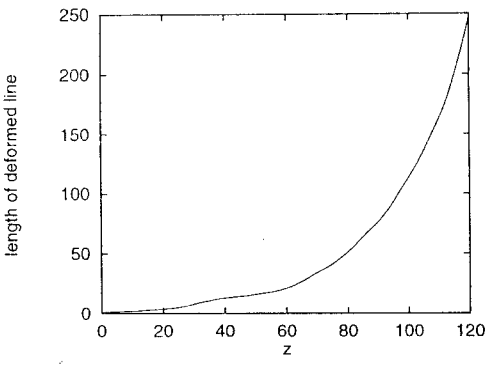
Table 2. σ_z for several initial vertical lines, a/H=15, b/H =15

x position of vertical line	σ_z
-1.5	0.0490
-0.5	0.0508
0.5	0.0506
1.5	0.0505

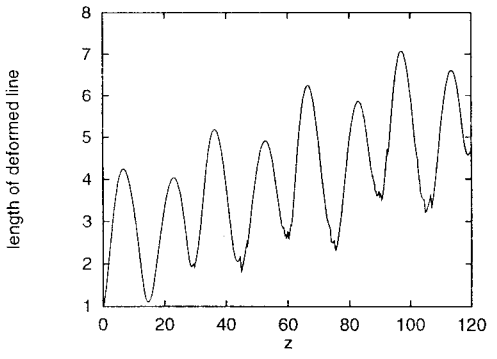
Table 3. σ_z for various barrier periods

barrier zone	no-barrier zone	σ_z
5H	5H	0.0673
10H	5H	0.0651
5H	10H	0.0607
10H	10H	0.0577
15H	5H	0.0566
5H	15H	0.0542
15H	15H	0.0513
30H	30H	0.0431

곡선내부에 존재하는 경우 그 초기 곡선은 계속해서 KAM 곡선 내부에만 존재할 것이기 때문에 구해진 σ_z가 KAM 곡선 외부의 유동과는 전혀 상관이 없는 값이 되어버리는 것이다.



(a)initial line is diagonal



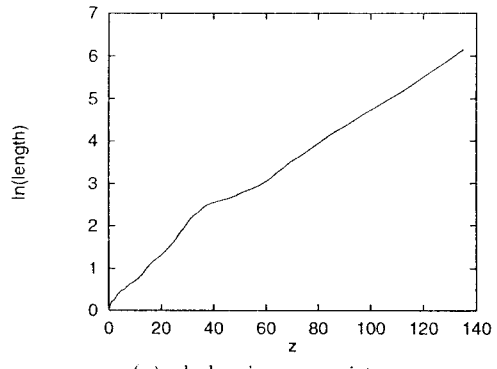
(b)initial line exists on the right side

Fig. 22. $\int_z |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|$ versus z in the screw with only barrier zone.

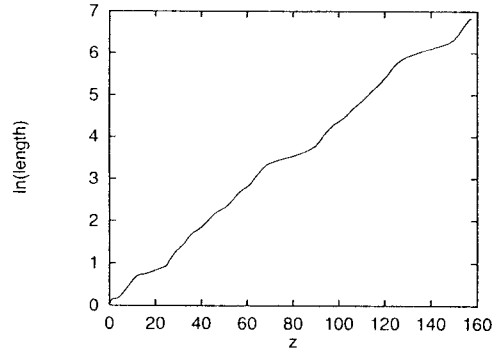
Fig. 22은 배리어 구간만이 존재하는 스크류 유동에서 초기 선분을 각각 Fig. 17(c)인 경우와 점(1, -0.3, 0)과 점(1, -0.4, 0)를 잇는 선분으로 한 경우에 대해 $\int_z |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|$를 z에 대해 구한 것인데 (a)에서는 초기 선분이 hyperbolic point에 의해 양분된 두영역에 걸쳐 존재하기 때문에 hyperbolic point의 영향으로 선분의 길이 증가가 지수 함수 형태인 반면 (b)에서는 초기 선분이 한쪽 영역에만 머무르기 때문에 hyperbolic point의 영향을 받지 않고 elliptic point 주위의 정규 유동에만 영향을 받기때문에 선분의 길이가 지수 함수 형태로 증가하지 못하는 것을 보여준다.

Table 3은 Fig. 17(c)의 선분을 초기 조건으로 했을 때 몇 가지의 배리어 배열에 대한 σ_z를 표시하였다. 이로부터 전체 주기($a/H + b/H$)가 짧을수록 σ_z가 커지는 것이 관찰되는데, 이것은 배리어의 주기가 짧을수록 늘임과 접힘이 일어나는 주기가 짧을 수 있음을 상기할 때 충분히 납득할만한 결과이다. 그리고 같은 전체 주기($a/H + b/H$)에 대해서는 배리어가 존재하는 구간(a/H)이 σ_z가 큰 값을 갖기에 더 유리하게 나타났다. 그러나 이러한 사실이 혼합 성능이 뛰어난 스크류의 설계를 위한 유일한 기준이 될 수는 없다. 왜냐하면 유동장 내에서 재료가 얼마나 많이 늘어났는가에 대한 판단이 재료가 얼마나 골고루 퍼졌는가에 대한 판단을 대신할 수는 없기 때문이다. Table 3에서는 배리어가 존재하는 영역과 배리어가 존재하지 않는 영역이 각각 5H인 카오스 스크류 유동에서 σ_z가 배리어의 주기가 보다 큰 카오스 스크류 유동에서 보다 크게 나타났지만, 포인카레 단면으로부터는 배리어의 주기가 짧을수록 큰 island가 존재하였다. 그리고 배리어가 존재하는 영역과 배리어가 존재하지 않는 영역이 각각 5H인 카오스 스크류 유동에서도 유동장 양쪽에 여전히 큰 island가 존재하는 것이 Fig. 8과 같이 관찰된다. 뿐만 아니라 배리어가 없는 영역이 σ_z가 큰 값을 갖기에 불리하게 나타나기는 하지만 Fig. 9의 포인카레 단면에 의하면 island가 없어지도록 하는데 있어 중요한 역할을 한다. 따라서 혼합 성능이 뛰어난 카오스 스크류를 설계하기 위해서는 σ_z를 포인카레 단면과 병행하여 활용하는 것이 바람직할 것이다.

Fig. 23(a) (b)는 각각 배리어 영역만이 존재하는 스크류 유동과 배리어가 없는 영역과 배리어가 있는 영역이 각각 30H인 카오스 스크류 유동에서 $\ln(\int_z |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|$을 z에 대해 나타내었다. Fig. 23(a)는 배리어 영역만이 존재하는 경우에 배리어가 없는 영역만이 존재하는 보통 스크류 유동에서와는 달리 선분의 길이가 지수 함수 형태로 증가하게 됨을 보여주는데 이는 (0., -0.25) 근처에 존재하는 hyperbolic point의 존재에 의한 효과이다. 그러나 Table 3에서 알수있는 것처럼 배리어 영역만이 존재하는 스크류 유동에서는 일반적으로 카오스 스크류 유동에서보다 σ_z가 작다. 이러한 사실은 길이 증가를 위해서는 늘임만이 존재하는 경우보다 늘임과 접힘이 교대로 반복되는 것이 효율적이라는 것을 확인시켜 준다. 배리어가 존재하지 않는 영역의 유동에서는 배리어가 존재하는 영역의 유동에서와는 달리 그 자체의 유동만으로는 선분의 길이를 지수 함수 형태로 증가시킬 수 없다. 따라서 카오스 스크류

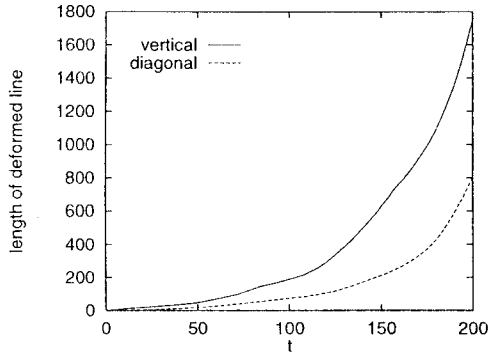


(a)only barrier zone exists

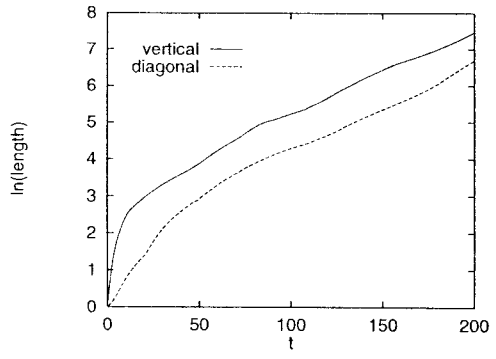


(b)a/H = b/H = 30

Fig. 23. $\ln(\int_z |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|)/z$ versus z for an initially diagonal line.



(a) $\int_t |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|$



(b) $\ln(\int_t |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|)/z$

Fig. 24. $\int_t |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|$ and $\ln(\int_t |d\mathbf{x}| / \int_0 |d\mathbf{X}|)/z$ versus z for two initial lines in the Chaos screw with a/H=b/H=15.

유동에서도 배리어가 존재하지 않는 영역이 너무 크다면 배리어가 존재하지 않는 영역에서 계속해서 선분의 길이를 동일한 지수 함수 형태로 증가시키지는 않을것임을 예상할 수 있다. Fig. 23(b)에서 $\ln(\int_z |d\mathbf{x}| / |d\mathbf{X}|)$가 동일한 기울기로 증가하지 못하고 주기적으로 기울기가 작아지는 구간이 있는데 이 구간은 배리어가 없는 영역의 뒷부분에 해당한다. 그러나 배리어가 없는 영역에서도 앞부분에서는 배리어가 있는 영역에서의 기울기를 유지함이 관찰되는데 이는 배리어의 배열만 적절하다면 배리어가 없는 영역이 선분의 길이가 지수 함수 형태로 증가하는데 있어 방해가 되지않을 수 있음을 나타낸다.

σ_z가 down channel방향의 좌표값 z에 대한 선분의 길이 변화를 이용하여 정의한 값인 반면 유동의 길이 늘임을 정량화하기 위해 z대신 시간 t에 대한 선분의 길이 변화를 이용하여 아래와 같은 값을 정의할 수도 있다.

$$\sigma_t = \lim_{t\to\infty} \frac{\ln \dfrac{\int_t |d\mathbf{x}|}{\int_0 |d\mathbf{X}|}}{t} \tag{19}$$

그리고 식 (16)에서와 마찬가지로 아래식으로터 기울기 a'를 σ_t대신 구할 수 있다.

$$\ln \frac{\int_t |d\mathbf{x}|}{\int_0 |d\mathbf{X}|} = a't + b' \tag{20}$$

Fig. 24(a) (b)는 배리어가 없는 영역과 배리어가 있는 영역이 각각 15H인 카오스 스크류 유동에서 $\int_t |d\mathbf{x}| /$

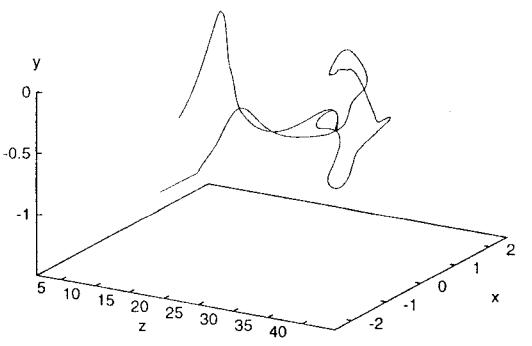


Fig. 25. Deformed shape of an initially vertical line in Chaos screw flow when t is 80 (H/V_{bz}), a/H=b/H=15.

$\int_0|d\mathbf{X}|$와 $ln[\int_t|d\mathbf{x}|/\int_0|d\mathbf{X}|]$를 시간 t에 대해 나타내는데, 이로부터 z를 매개 변수로 한 경우와 마찬가지로 $\int_t|d\mathbf{x}|$도 지수 함수 형태로 증가함을 알 수 있다. 이 때 σ_t는 일정 길이 선분이 3D유동장에서 시간 t에 대해 늘어나는 비율을 대표할 수 있는 값이 된다.

Fig. 25는 배리어가 없는 영역과 배리어가 있는 영역이 각각 15H인 카오스 스크류 유동에서 Fig. 17(b)의 초기 선분이 시간 80이 지난 후 변형된 모습을 나타낸다. 커브 피팅을 통해 식 (20)로부터 a'를 구하는 경우에 식 (16)으로부터 a를 구하는 경우보다 일반적으로 불안정한 구간이 더 길기때문에 보다 많은 계산이 필요하였다. 완전 3차원 유동장의 혼합 성능 측정을 위해서는 z를 매개 변수로 한 σ_z보다 시간 t를 매개 변수로 한 σ_t가 더 바람직할 수도 있다. 그러나 압출기와 같은 continuous mixer의 경우 유체 입자가 스크류 채널을 통과하는 시간 RTD(Residence Time Distribution)는 유체 입자마다 모두가 다른 반면 유체 입자가 스크류 채널을 통과할때까지의 z값은 모두 같다는 점을 고려해 볼 때 σ_t보다 σ_z가 카오스 스크류의 혼합 성능 정량화에 보다 합당하다고 판단되어 σ_z를 카오스 혼합의 정량화를 위한 값으로 추천한다.

8. 결 론

본 논문은 역학계(dynamic system)의 이론과 유체 운동학(kinematics of fluid)을 연결하여 보통 스크류에 주기적으로 배리어가 설치된 카오스 스크류 유동에서 혼합이 일어나는 메카니즘을 이해하기 위해 수치 해석적으로 연구를 수행하였으며, 카오틱 유동의 혼합 성능을 정량화하기 위한 척도로써 수정된 리아프노프 지수 σ_z를 제안하였다.

포인카레 단면은 카오스 스크류 유동에서 혼합이 이루어지는 기본적인 구조에 대한 이해에 도움을 주었을뿐만 아니라 외부 영역과 유체 입자의 교환이 이루어지지 않는 island의 존재 및 그 위치와 크기가 배리어의 배열과 어떻게 연관되는지를 보여 주었다. 포인카레 단면으로부터는 이해하기 힘들었던 카오스 스크류에서의 늘임과 접힘 효과는 연속적인 쉘 변형에 의해 확인될 수 있었으며 변형된 쉘이 전체 단면에 걸쳐 존재할 수 있도록 하는데 있어 배리어가 없는 영역이 중요한 역할을 하는 것이 관찰되었다.

국부 늘임(local stretch)의 정도를 나타내는 λ의 계산 결과는 보통 스크류 유동에서는 λ가 선형적으로 증가하는 반면 카오스 스크류 유동에서 λ가 지수 함수 형태로 증가하는 것으로 나타났다. 그러나 t에 대해 계산된 λ의 값은 큰 폭으로 진동하여 λ로부터 계산되는 늘임율 및 늘임 효율을 혼합 성능의 정량화를 위한 값으로 사용하기에는 합당하지 않았다.

따라서 카오스 스크류 유동의 혼합 성능을 정량화하기 위하여 일정 선분이 늘어나는 비율로부터 리아푸노프 지수와 유사한 δ_z를 제안하였다. σ_z는 배리어의 주기가 짧을수록 큰 값을 나타내었는데 이것이 꼭 배리어의 주기가 짧을수록 혼합에 유리한 스크류임을 뜻하지는 않는다. 왜냐하면 배리어의 주기가 너무 짧은 경우에는 외부의 영역과 전혀 섞이지 않는 거대한 island가 발생하기 때문이다. 따라서 혼합 성능이 뛰어난 카오스 스크류를 설계하기 위해서는 σ_z와 포인카레 단면을 병행하여 계산해서 판단하는 것이 바람직하다.

기 호

- $\mathbf{C}$: Green Deformation tensor: $\mathbf{F}^T\mathbf{F}$
- D_{ij} : components of rate of deformation tensor : $(\mathbf{v}_{i,j}+\mathbf{v}_{j,i})/2$
- DC : deformation characteristics
- H : height of the screw channel: reference length
- n : power-law index

p : pressure
V_b : barrel velocity
V_{bz} : z-component of barrel velocity: reference velocity
W : width of the screw channel
$WADC$: eighted average deformation characteristics
$\dot{\gamma}$: generalized shear rate
η_0 : reference viscosity
θ : helix angle
Θ : temperature
λ : local length stretch: $|d\mathbf{x}|/|d\mathbf{X}|$
μ : viscosity

참고문헌

1. S. J. Kim and T. H. Kwon, "Enhancement of Mixing Performance of Single-Screw Extrusion process via Chaotic Flows: part I. Basic concepts and Experimental study", *Advances in Polymer Technology*, **15**(1), 41 (1996).
2. S. J. Kim and T. H. Kwon, "Enhancement of Mixing Performance of Single-Screw Extrusion process via Chaotic Flows: part II. Numerical study", *Advances in Polymer Technology*, **15**(1) 55 (1996).
3. B. P. Smith and P. N. Colby, US Patent Number: 5,071,256 (1991).
4. 김시조, "단축 압출 공정에서의 3차원 혼합 특성 연구", 포항공과대학교 박사 학위 논문 (1994).
5. H. Aref, "Stirring by chaotic advection", *J. Fluid Mech.*, **143**, 1 (1984).
6. D. V. Khakhar, J. G. Franjione and J. M. Ottino, "A case study of chaotic mixing in deterministic flows: The partitioned-pipe mixer", *Chemical Engineering Science*, **42**(12), 2909 (1987).
7. J. G. Franjione, C-W. Leong, and J. M. Ottino, "Symmetries within chaos: A route to effective mixing", *Phys. Fluids A*, **1**(11), 1772 (1989).
8. H. A. Kusch and J. M. Ottino, "Experiments on mixing in continuous chaotic flows", *J. Fluid Mech.*, **236**, 319 (1992).
9. S. C. Jana, G. Metcalfe and J. M. Ottino, "Experimental and computational studies of mixing in complex stoks flow: The vortex mixing flow and multicellular cavity flows", *J. Fluid Mech.*, **269**, 199 (1994).
10. T. C. Niederkorn and J. M. Ottino, "Mixing of a viscoelastic fluid in a time-periodic flow", *J. Fluid Mech.*, **256**, 243 (1993).
11. J. M. Ottino, "The kinematics of mixing: stretching, chaos, and transport", Cambridge University Press, New York, 1989.
12. J. Guckenheimer and P. Holmes, "Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields", Springer-Verlag, Berlin, 1983.
13. J. M. Ottino, S. C. Jana, and V. S. Chakravarthy, "From Reynolds's stretching and folding to mixing studies using horseshoe maps", *Phys. Fluids*, **6**(2), February, 685 (1994).
14. J. M. Ottino, and R. Chella, "Laminar Mixing of Polymer Liquids: A brief Review and Recent Theoretical Developments", *Polymer Engineering and Science*, **23**(7), 357 (1983).
15. F. Verhulst "Nonlinear Differential Equations and Dynamical Systems", Springer-Verlag, Berlin, 1985.
16. F. H. Ling "Interpolational Poincare Map and Application to Mixing Problems", *Chaos, Solitons and Fractals*, **4**(5), 681 (1994).
17. S. Wiggins "Chaotic Transport in Dynamical Systems", Springer-Verlag, Berlin, 1992.
18. F. H. Ling and G. Schmidt "Mixing Windows in discontinuous cavity flows", *Physics Letters A*, **165**, 221 (1992).
19. T. Sastrohartono and T. H. Kwon, "Finite Element Analysis of Mixing phenomena in Tangential Twin-Screw Extruder for Non-Newtonian fluids", *Int. J. Numerical Method in Eng.*, **30**, 1369 (1990).
20. T. H. Kwon, Y. Jaluria, M. V. Karwe and T. Sastohartono, "Numerical Simulation of the Transport Processes in a Twin-Screw Polymer Extruder", (Ed. A. I. Isayev), Hanser Publ., 1991, Chapter 4.
21. 주진우, "압출기의 체류 시간 분포 및 혼합 특성에 관한 연구", 석사 학위 논문 (1991).
22. R. B. Bird, R. C. Armstrong and O. Hassager, "Dynamics of Polymeric Liquids", Vol. 1, Fluid Mechanics, Wiley-Interscience, New York, 1987.
23. T. H. Kwon, J. W. Joo and S. J. Kim,

"Kinematics and Deformation Characteristics as a Mixing Measure in the Screw Extrusion Process", *Polymer Engineering and Science*, **34**(3), 174 (1994).

24. S. J. Kim and T. H. Kwon, "Measure of Mixing for Extrusion by Averaging Concepts", *Polymer Engineering and Science*, **36**(11), 1466 (1995).