

<연구논문>

단축압출기의 카오스 스크류에서의 공간 주기 유동에 대한 수치 해석

김시조* · 권태현**

*안동대학교 기계공학과, **포항공과대학교 기계공학과
(1996년 2월 16일 접수)

Numerical Analysis of the Spatially-Periodic Flow in Single-Screw Extruders via the Chaos Screw

S. J. Kim* and T. H. Kwon**

*Department of Mechanical Engineering, Andong National University, Andong 760-749, Korea

**Department of Mechanical Engineering, Pohang University of Science and Technology

P.O.Box 125, Pohang 790-600, Korea

(Received February 16, 1996)

요 약

최근에 본 연구자에 의하여 기존 스크류의 간단한 수정을 통해 단축 압출 공정에서의 혼합 성능을 증진시키는 카오스 스크류를 개발하였고 단축 압출기에서의 기존 스크류와 비교하여 카오스 스크류를 사용하였을 경우 혼합성능이 월등하게 증진됨을 실험적으로 얻은 혼합 형태로부터 알수 있었다. 본논문에서는 카오스 스크류에서 일어나는 카오스 유동을 집중적으로 수치모사 하였으며 그 결과를 중요한 무차원 변수에 대하여 입자 궤적, 포인카레 단면, 본 논문에서 제안한 쉘사상법을 통하여 나타내었다. 쉘사상법은 혼합형태와 불변체군을 얻기에 매우 효과적인 방법이며 수치해석으로 얻은 불변체군은 실험 결과와 잘 일치하였다.

Abstract: In the accompanying paper, we have developed a new screw (termed "Chaos Screw") as the mixing-enhancing device for the single-screw extrusion process. Experimental mixing patterns due to the chaotic flow clearly indicate that the chaos screw drastically enhances the mixing performance compared with the conventional screw in a single-screw extruder. In the present paper, numerical simulations were extensively carried out on the chaotic flows via the chaos screw and their results are presented in terms of particle trajectories, Poincare sections, and shell mapping method suggested by the present paper for important dimensionless parameters. The shell mapping method turns out to be very effective to determine the mixing patterns and invariant manifolds. The numerically obtained invariant manifolds are found to be in good agreement with those experimentally obtained.

Keywords: Single-Screw Extruder, Chaos Screw, Mixing, Numerical Simulation, Chaotic Flow, Poincare Section, Particle Trajectory, Invariant Manifold, Spatially-Periodic Flow.

1. 서 론

카오스 혼합에 관한 삼차원 유동의 경우, 카오스 혼합은 두가지 형태의 카오스 유동에 의하여 발생된다. 즉, 1) 시간주기 유동(time periodic flow)으로부터의 것과 2) 공간주기 유동(spatially periodic flow)이 있을 수 있다.

최근 Ottino 등은 카오스 혼합을 여러 형태의 이차원, 삼차원 유동에 성공적으로 적용하여 카오스 분야에 크게 이바지하였는데(1,2) 이중에서 카오스 혼합이 발생하는 대표적인 장치로서 EHAM(1)은 시간주기 유동, PPM(2)은 공간주기 유동에 의하여 카오스 혼합이 이루어진다.

그러나 PPM과 EHAM의 구조는 스크류 압출기에

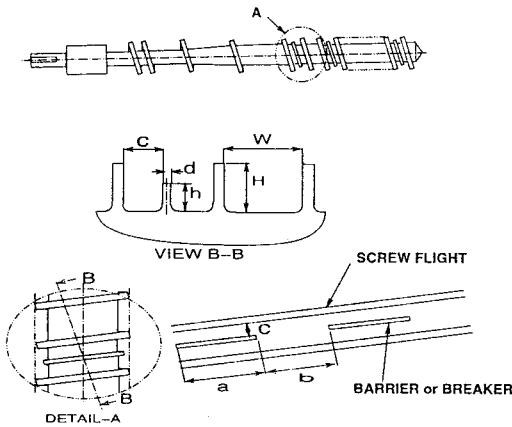


Fig. 1. Conceptual diagram of a chaos screw design for a spatially chaotic mixing.

적용하기에는 적합하지 않기 때문에 최근에 본 연구자에 의하여 스크류 압출기에 적합한 새로운 스크류를 개발하였으며 이 스크류를 카오스 스크류라 명명하였다(3). 즉, 연구 논문(3)에서는 기존 스크류의 간단한 수정을 통해 단축 압출 공정에서의 혼합 성능을 증진시키는 카오스 스크류를 개발하였고 이러한 카오스 스크류 설계개념에 따라 시제품을 제작하여 혼합성능 향상에 관한 실험을 수행하였다. 본 연구에서는 연구 논문(3)에서 개발한 카오스 스크류 상에서 일어날 수 있는 공간 주기 카오스 유동에 대한 수치해석적 연구에 관한 것이다.

카오스 스크류는 Fig. 1에 나타낸 것처럼 스크류의 유동로 방향을 따라가면서 기존 스크류 공간상에 배리어(barrier)를 공간 주기적으로 삽입하는 것을 특징으로 하며 설계 개념에 대한 자세한 내용은 관련 논문(3)을 참조하면 좋을 것이다. 본 연구에서는 이러한 카오스 스크류 상에 일어나는 카오스 유동에 의한 혼합 현상을 이해하기 위하여 수치해석적 방법으로 입자 궤적(particle trajectories), 포인카레 단면(Poincare sections), 셸사상법(shell mapping method)을 통하여 해석하였다. 이 경우 카오스 혼합 현상에 영향을 주는 인자로는 가공재료의 유변학적 거동, 압출기의 기하학적 조건 및 공정 조건에 따른 변수 등 무수히 많으므로 본 연구에서는 각 인자들을 무차원화 하여 중요 무차원 변수에 대하여 해석하였다.

한편으로, 실험적인 연구 결과(3)에서 두개의 서로 다른 불변체군(invariant manifolds)이 관찰되었는데 이들 내부에서 유체 입자의 늘림(stretch)과 접힘(folding)이 연속적으로 반복하여 일어나서 혼합 성능이

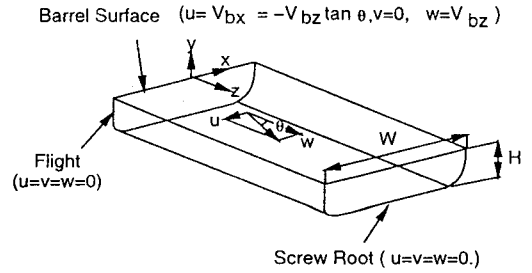


Fig. 2. Geometric model of the single-screw extruder, ignoring the curvature effect.

급격하게 증진됨을 확인할 수 있었는데, 본 연구에서도 수치해석적으로 셸사상법을 통하여 서로 다른 불변체군을 얻고 늘림과 접힘 현상을 실험의 결과와 비교하였다. 이때 실험과 수치해석의 두 결과를 직접 비교하기 위하여 실험에서 사용한 모든 조건을 동일하게 하고 그 조건들을 무차원화 시켜서 수치해석 하였다.

2. 수치 해석

2.1 준-3차원 모델

벽면에서 경계조건이 비-미끄럼(non-slip) 모델인 경우, 압출기의 단면모양과 좌표계 그리고 경계조건을 Fig. 2에 간략하게 나타내었다. 스크류 채널의 유동방향(즉, Fig. 2에 표시된 z 방향)을 따라 속도분포의 변화가 별로 없다. 따라서 z-방향의 속도구배는 다른 방향들, 즉 x-방향과 y-방향에 대한 속도구배보다 훨씬 적다고 가정하면(이것을 준-3차원 모델(4-6)이라 함), 일반화된 뉴턴유체(generalized Newtonian fluids)의 정상상태, 크리핑 유동(Creeping Flow)에 대한 연속방정식, 운동 방정식은 다음과 같이 표시될 수 있다.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \tag{2}$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \tag{3}$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] \tag{4}$$

점성도모델로서 수정 크로스 모델(modified Cross model)을 사용하면 μ 는 다음과 같이 표현된다(7).

$$\mu(\dot{\gamma}, \Theta) = \frac{\eta_0}{1 + C(\eta_0 \dot{\gamma})^{1-n}} \quad (5)$$

여기서 $\eta_0 = Be^{\Theta/\theta}$ 이고, $\dot{\gamma}$ 은 일반화된 전단율(generalized shear rate)로서 다음과 같이 정의된다[7].

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

2.2 무차원 변수

기존 스크류를 사용하였을 때의 유동현상은 지금까지 많은 연구가 이루어 왔으며 최근 특성길이 H , 특성 시간 V_{bz}/H 로 무차원화 하여 기하학적, 물성적, 공정조건에 따른 인자가 스크류 특성 미치는 영향을 해석하였다[8]. 기존 스크류의 경우에는 기하학적 설계 변수를 스크류의 폭(W), 높이(H)만을 있으나 카오스 스크류의 경우에는 Fig. 1에 나타낸것 처럼 배리어의 두께(d), 높이(h), 배리어가 존재하는 영역(a), 배리어가 존재하지 않는 영역(b), 채널 단면상에서의 배리어 위치(c) 등을 들 수 있다. 이것들은 압출기 채널의 높이(H)를 특성길이로 하여 무차원화 하여 가공재료의 유변학적 거동, 압출기의 기하학적 조건 및 공정 조건에 따라서 수치해석적 방법을 통하여 유동을 구체적으로 연구하고자 한다면, 새로운 카오스 스크류 설계의 최종 목적이라 할 수 있는 최적의 W/H , h/H , c/H , $(a/H, b/H)$ 등을 결정할 수 있다.

이러한 무차원화 해석은 유동특성에 미치는 영향을 체계적으로 연구하고 그결과를 압출기해석과 설계에 이용하는 데 매우 중요하며 카오스 스크류에 대한 경우에도 같은 방법으로 적용할 수 있다. 여기서 공정조건에 따른 중요한 무차원 변수로서 압력구배를 들 수 있으며 z -방향의 무차원화 된 압력구배는 파우워지수 모델에서는 다음과 같이 표현될 수 있다[8].

$$\frac{\partial p^*}{\partial z^*} = \frac{\partial p}{\partial z} \frac{\dot{\gamma}_0^{n-1} H^{n+1}}{\mu_0 V_{bz}^n} \quad (6)$$

그러나 본 논문에서 사용되는 크로스 모델의 경우 파우워지수에 한정되지 않는 무차원 변수로서 다음과 같은 식을 사용하였다.

$$\frac{\partial p^*}{\partial z^*} = \frac{\partial p}{\partial z} \frac{H^2}{\eta_0 V_{bz}} \quad (7)$$

유동특성을 규명하기 위하여 또다른 중요한 인자로서 유량변화율을 들 수 있으며 무차원화 된 유량변화율, q_{3D} 는 다음과 같이 표현 될 수 있다.

$$q_{3D} = \iint w^* dy^* dx^* = \frac{Q_{3D}}{V_{bz} H^2} \quad (8)$$

윗 식에서 단면중형비(W/H)를 사용하여 또 다른 무차원화 된 유량변화율을 다음과 같이 정의 할 수 있다[8].

$$\tilde{q}_{3D} = \frac{q_{3D}}{W/H} = \frac{Q_{3D}}{V_{bz} WH} \quad (9)$$

스크류 플라이트가 곡면으로 이루어진 경우 단면의 폭 W 는 단면적을 H 로 나누어서 구하고 이로부터 무차원화 된 유량변화율 \tilde{q}_{3D} 를 구할 수 있다. 윗 식은 단면중형비(W/H)의 영향을 함께 고려할때 유용한 식이다.

2.3 유한 요소 해석

유동 해석 모델에서 도입된 가정을 이용하면 유체의 거동은 운동 방정식 및 연속 방정식을 통하여 불패 유동로에 수직인 단면상의 유동(cross channel flow)은 점성 계수 관계에서 전단율을 결정하는 요소들 중에 나타나는 w -방향 성분을 알고있는 경우에 순수한 2차원 유동의 지배 방정식과 같음을 알 수 있다. 한편 유동로 방향의 유동(down channel flow)의 지배 방정식은 u, v 성분을 알고 있을때 z 축 방향으로 유동의 변화가 거의 없으므로 이 방향의 압력 구배가 일정하다고 할 수 있으므로 포아송 식(poisson equation)이 됨을 알 수 있다. 따라서 이런 비선형 지배 방정식들을 유동로에 수직인 단면상의 유동과 유동로 방향의 유동으로 분리하여 반복 계산 함으로써 해석할 수 있다[4-6].

카오스 스크류상에서 일어나는 유동해석은 Fig. 1에서 알 수 있듯이 배리어가 위치하는 공간(a)과 배리어가 위치하지 않는 공간(b)이 주기적으로 반복되므로 원칙적으로는 3 차원 유한 요소 해석을 하여야 엄밀한 수치해가 얻어 질 수 있다. 그러나 스크류의 길이가 긴 경우 공간 주기의 반복 횟수가 일반적으로 많아지므로 3 차원 해석으로는 수치해석적으로 많은 시간이 걸린다. 만약 공간 주기 (a, b)가 W 보다 매우 크다면 준-3 차원 모델로 해석할 경우에도 완전 3 차원 해석의 경우와 유사한 수치해가 얻어 질 것이다. 또한 유동로를 따라 가면서 사상(mapping)이 가능하고 계산 시간이 단축

될 뿐 만 아니라 카오스 유동의 기본 원리를 이해하고 혼합성능을 예측하는데 매우 편리하다. 한편 이와 유사한 접근 방법으로 PPM 혼합장치에서 일어나는 카오스 혼합에 대한 연구가 Khakhar 등에 의하여 이루어진 바 있다[2].

본 논문에서는 카오스 스크류에 대한 카오스 혼합을 배리어가 위치하지 않는 공간과 배리어가 위치하는 공간을 따로 따로 준-3 차원 유한 요소 방법을 통하여 해석한다. 유한 요소 해석을 수행하기 위하여 우선 각 단면에 걸리는 z 방향의 압력구배를 알아야하며 이들의 압력구배 값들은 연속 방정식, 즉 동일 유량 조건을 만족하여야 한다. 따라서 배리어가 위치하지 않는 공간과 배리어가 위치하는 공간에 대하여 스크류특성, 즉 압력구배와 유량과의 관계를 준-3 차원 유한 요소 해석을 통하여 얻은후 유량 조건을 만족하는 압력구배값을 결정한다. 이와 같은 방법으로 얻어진 속도장을 4계 Runge-Kutta방법[9]으로 적분하면 입자궤적(particle trajectories), 포인카레 단면(Poincare section), 불변체군(invariant manifolds) 등을 얻을 수 있다. 입자궤적의 경우를 예를 들면 배리어가 위치하지 않는 공간상에서 출발한 유체 입자는 유동로 방향을 따라 흐르는 도중에 배리어가 위치하는 공간을 만난다. 이 순간에 유체입자는 새로운 속도장, 즉 배리어가 위치하는 공간에 존재하는 속도장을 따라 전진하게 된다.

3. 수치해석 결과

최근 카오스 스크류의 혼합성능을 확인하기 위하여 새로운 설계개념이 도입된 실제 스크류를 제작하여 실험하였다[3]. 본 논문에서는 혼합 성능 향상을 수치해석을 통하여 규명하고 실험의 결과[3]와도 비교하기 위하여 기하학적 조건, 공정조건, 사용재료의 유변학적 조건등을 실험과 동일조건으로 하였다. 실험에 사용된 가공 재료는 LDPE이며 식(5)에 의해 결정된 상수값들은 $B=5.76651E-02[(\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{sec}))]$, $\Theta_b=5817.74(^{\circ}\text{K})$, $C=1.44540E-03[(\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{sec}))^{-1}]$, $n=0.35$ 이다[3]. 다만 본 논문에서는 실제 변수들을 무차원화 하여 해석하였다.

3.1 공간 주기 유동장

유한 요소 해석을 수행하여 속도장을 구하기 위하여 우선 유한 요소 메쉬가 필요하다. Fig. 3(a)와 (b)는 각각

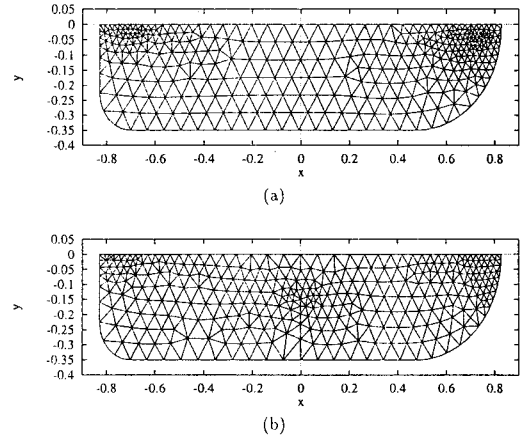


Fig. 3. Finite element mesh for the Chaos-Screw extruder (a) in the nobarrier region and (b) in the barrier region.

배리어가 위치하지 않는 공간과 배리어가 위치하는 공간에 대한 유한 요소 메쉬를 나타낸다. 이 그림에서 알 수 있듯이 배리어는 채널의 중앙에 위치하며 스크류 채널의 높이(H)는 0.35 cm, 단면 총횡비(W/H)는 4.5에 해당되고 (단면적을 H 로 나누어 얻어진 값) 배리어의 높이는 0.2 cm이다. 배리어의 두께는 실제로 0.2 cm이나 배리어가 없는 단면과 같은 계산 영역(computational domain)을 가지어 사상(mapping)이 가능하도록 하기 위해 배리어의 두께를 영으로 근사화 하였다. 모든 변수들은 무차원화 되어야 함으로 실제 수치 계산에서는 Fig. 3(a)와 (b)의 기하학적 치수들을 특성 길이 H 로 무차원화 하면 스크류 채널의 폭, 높이는 각각 4.5와 1이 되고, 배리어의 높이는 각각 0.57이 된다.

Fig. 4의 두곡선은 각각 배리어가 위치하지 않는 공간과 배리어가 위치하는 공간에 대하여 유한 요소 해석으로 얻어진 무차원화된 스크류 특성곡선이다. 앞 절에서 설명한 바와 같이 공간 주기 단면 (a,b)에서 카오스 스크류에 발생하는 유동장을 얻기 위하여는 각 단면에서의 압력계수가 필요하며 이를 결정하기 위하여 Fig. 4는 매우 유용하다. Fig. 4에서 알 수 있듯이 배리어가 있는 경우와 없는 경우 스크류 특성이 약간 달라진다. 이것은 배리어의 존재가 유량의 감소와 밀접한 관계가 있기 때문이다. 카오스 스크류의 스크류 특성을 정확하게 얻기 위해선 이 그림에 나타난 두 곡선을 다음과 같이 사용할 수 있다. 논문 [3]에 주어진 스크류 회전속도가 5.6 rpm일

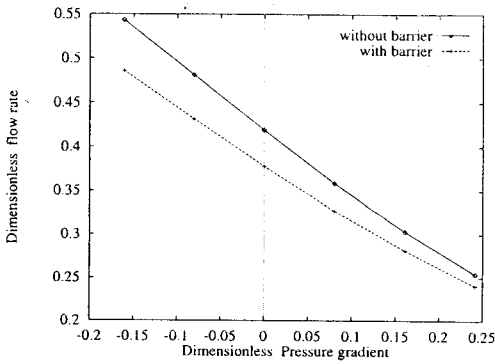


Fig. 4. Screw characteristics : dimensionless flow rate ($\frac{Q_{3D}}{V_w W/H}$) vs. the dimensionless the pressure gradient ($\frac{\partial p}{\partial z} \frac{H^2}{\eta_w V_w}$).

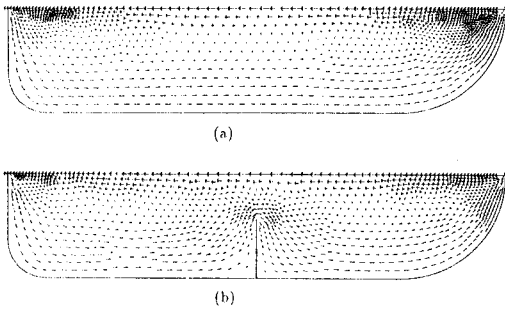


Fig. 5. Velocity vector plots of cross-channel flow obtained by finite element method (a) in the no-barrier region and (b) in the barrier region.

때 유량, Q_{3D} 는 0.13(g/sec)이고 스크류 지름, 나선각은 각각 3 cm, 12° 이므로 $V_{bz}=0.86$ cm/s가 된다. 또한 스크류 단면의 폭, H 가 3 mm이므로 $W/H=4.5$ 에 해당되고 따라서 식 (9)을 이용하면 $\tilde{q}_{3D}=0.274$ 되므로 Fig. 5로부터 주어진 무차원 유량 $\tilde{q}_{3D}=0.274$ 에 대해 배리어가 있는 영역과 배리어가 없는 영역이 가질 수 있는 무차원 압력 구배 $\frac{\partial p^*}{\partial z^*}$ 는 같은 무차원 유량 $\tilde{q}_{3D}=0.274$ 을 만족하여 함으로 각각 0.175, 0.209가 된다. 따라서 이 두값을 유한 요소 해석에 사용하면 카오스 스크류 채널 내부에 일어나는 유동장을 수치해석적으로 얻을 수 있다.

위에서 설명한 조건들을 사용하여 얻어진 채널 단면상의 속도 분포를 Fig. 5에 나타내었다. Fig. 5(a)는 배리어가 없는 영역, Fig. 5(b)는 배리어가 있는 영역에서의 순환 유동을 표시하고 있다. 카오스 스크류에서는 Fig. 1에서 알수 있듯이 공간 주기적으로 배리어를 설치하였

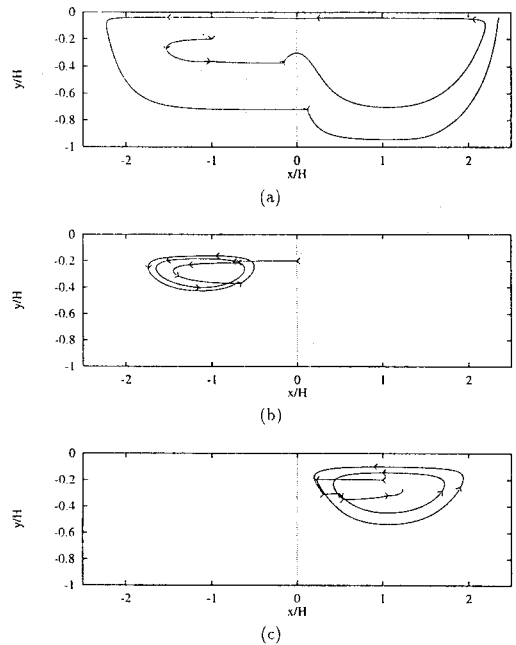


Fig. 6. Typical particle trajectories with $a/H=b/H=10$ for several initial positions, (a) $(x/H, y/H)=(-1, -0.2)$ (b) $(x/H, y/H)=(0, -0.2)$ and (c) $(x/H, y/H)=(1, -0.2)$: $\theta=12^\circ$, $Q_{3D}/(V_{bz} W H)=0.274$.

으므로 유동장은 Fig. 5(a)와 Fig. 5(b)를 합친 복잡한 카오스 유동이 형성된다.

다음절부터는 유한 요소 해석으로부터 얻은 속도장 Fig. 5(a)와 Fig. 5(b)를 기본으로 하여 카오스 혼합 특성 연구에 필수적인 입자 궤적, 포인카레 단면, 불변체군에 대하여 수치해석 결과를 논의 하고자 한다.

3.2 입자 궤적

Fig. 6(a), (b), (c)에는 $a/H=b/H=10$ 으로 공간 주기를 고정하였을때 카오스 스크류 단면의 서로 다른 위치에서 출발한 입자 궤적이 x-y 평면에 투상된 모습이 나타나 있다. 여기서 유체입자는 유동로를 따라서 공간 주기 ($a/H, b/H$)를 다섯번 지나며 공간주기를 확실하게 나타내기 위하여 배리어가 나타나는 영역 또는 배리어가 끝나는 영역을 화살표로 표시하였다.

기존의 일반 스크류 상에서의 유동은 유체입자가 임의의 셀에서 출발하면 시간이 경과하여도 다른 셀로 이동하지 못하는 사실 때문에 혼합성능이 카오스 유동에 비하여 매우 뒤 떨어진다. 그러나 Fig. 6(a)에서 알수 있

듯이 유체입자가 $(x/H, y/H) = (-1, -0.2)$ 에서 출발하여 공간주기($a/H, b/H$)를 다스르면 지나는 동안 스크류 단면 전체로 움직일 수 있는데 이것은 혼합성능이 일반 스크류에 비하여 현저히 증진되는 가능성을 나타낸다. Fig. 6(b), (c)의 경우는 유체입자가 각각 $(x/H, y/H) = (0, -0.2)$, $(x/H, y/H) = (1, -0.2)$ 에서 출발한 경우인데 비록 셀 간의 이동은 있으나 Fig. 6(a) 경우처럼 스크류 단면 전 영역으로 움직이지 않고 있다. 이것은 공간주기 상에서 일어나는 카오스 혼합의 경우라도 유체 입자의 출발점에 따라서 혼합 특성치는 매우 달라짐을

의미한다.

위와같은 입자궤적 방법으로 스크류 채널의 전단면에 걸쳐 모든 입자의 궤적을 가시화 한다는 것은 유체의 혼합 거동을 이해하는데 대단히 비효율적이다. 이러한 점을 고려하여 볼때, 전체적인 카오스 혼합 형태를 효율적으로 이해할 수 있는 기법중 하나가 다음에 설명할 포인카레 단면이다.

3.3 포인카레 단면

카오스 스크류 압출기의 카오스 유동을 이해하는데 있

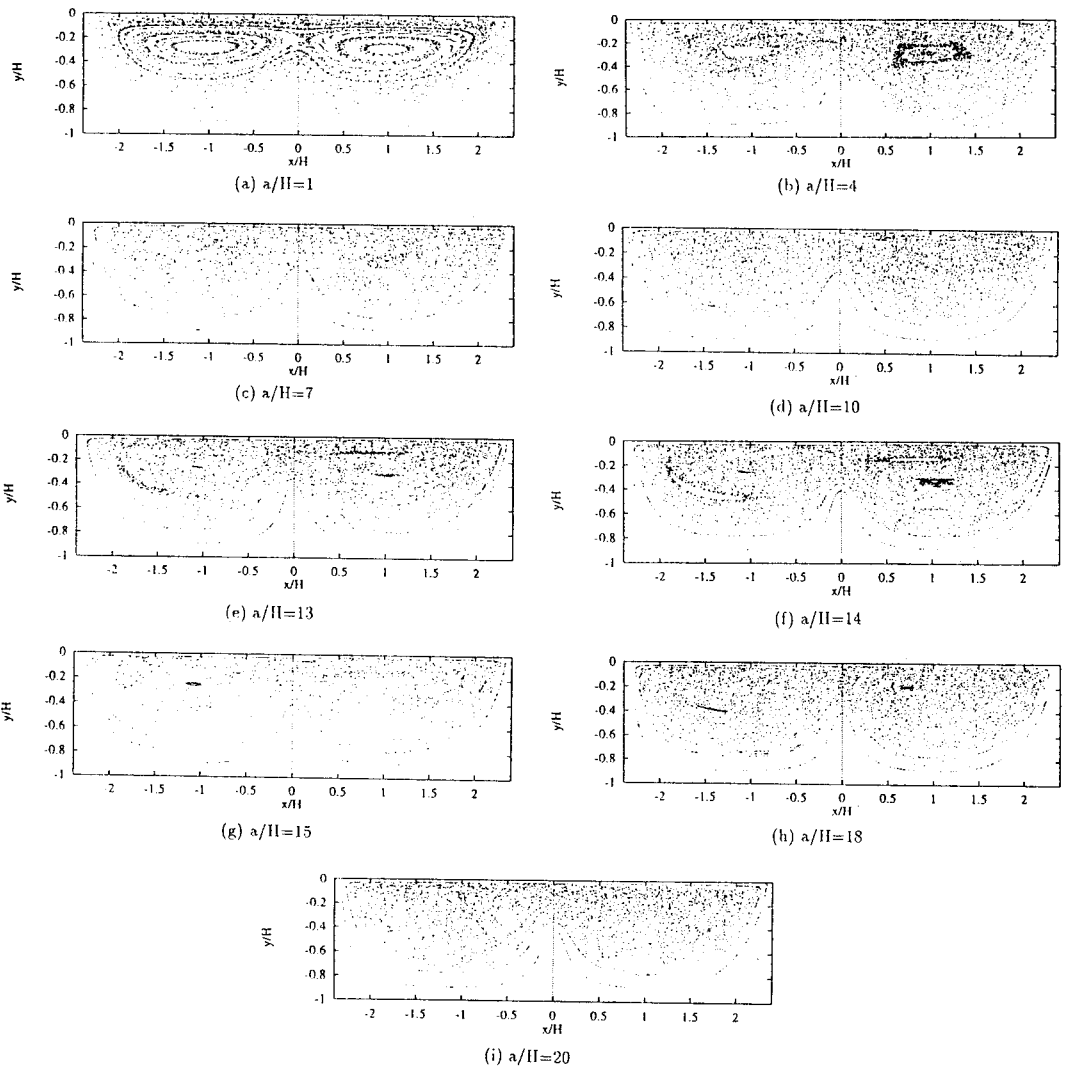


Fig. 7. Poincaré sections for several different periodic units : $\theta = 12^\circ$, $Q_{3D}/(V_d W H) = 0.274$

어서 포인카레 단면으로 압출기의 스크류 단면 내부에서의 혼합 거동을 관찰하는 것은 대단히 유용하다. 압출기 채널의 전체 단면에 걸친 모든 입자궤적을 찾는 대신 전체적인 혼합의 양호를 판단하기 위해 포인카레 단면이 사용될 수도 있다. 이것은 입자 궤적 방법보다 수치적인 관점에서 매우 효과적이다.

시간 주기 유동의 경우, 입자의 위치를 시간 주기의 끝에서 연속적으로 표시함으로써 얻어질 수 있고 반면 카오스 스크류 압출기에서와 같은 공간주기 유동의 경우, 유동로 방향으로 두개의 다른 속도장이 반복할때 각각의 공간주기 끝에서 입자의 위치를 연속적으로 표시함으로써 포인카레 단면을 얻을 수 있다.

이러한 포인카레 단면으로부터 잘 섞인 영역과 잘 섞이지 않은 영역을 구분하여 전체적인 혼합을 효과적으로 예측 할 수 있다. 많은 계산 결과 중에 단지 몇몇 대표적인 포인카레 단면을 Fig. 7에 나타내었다. 이 그림에서는 공간 주기 단위(a/H, b/H)에서 a/H와 b/H값은 동일하며 a/H를 증가시켰을때 포인카레 단면의 변화를 표시한다. 일반적으로 포인카레 단면에 찍힌 무수한 점들의 분포 형태로부터 전체적인 혼합 성능을 판단할 수 있다. Fig. 7(a)와 (b)에서 보는 바와 같이, 배리어 왼쪽과 오른쪽 위 중간 부분에서 소위 섬(island)이라는 것을 관찰할 수 있으며 이것은 마치 셸[3]의 형상과 유사하며 이러한 셸이나 섬(island)과 같은 닫힌 궤도가 유동로를 따라 가면서 계속해서 유지되므로 캄토러스(KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser)torus)[1]라고 알려진 불변 튜브(invariant tube)가 나타남을 의미한다. 카오스 혼합에서는 이러한 섬의 갯수가 많고 크기가 클수록 그부분에서 정규 유동에서와 같이 혼합 성능이 좋지 않게 된다.

그러나 주기 단위(a/H)의 길이가 증가함에 따라 Fig. 7(a)에서 (d)까지의 결과로부터 정규 영역의 크기가 줄어드는 것을 알수 있는데 이것은 공간 주기 단위의 길이가 커질수록 혼합성능은 점점 좋아짐을 의미한다. 그러나 a/H가 증가하여 어떤 특정한 값(a/H=13 또는 14)에 이르렀을 때 혼합거동이 특정한 영역에서 다시 나빠지게 되는데, 이 곳에서는 Fig. 7(e)와 (f)에서 보는 바와 같이 대단히 이상한 형식으로 섬들이 나타나기 시작한다. 그러나 a/H 가 더욱 증가하게 되었을 때는 정규 영역이 다시 작아지게 된다. 이러한 현상은 카오스 유동의 비선형성에 기인하며 수치해석으로 관찰할 수 밖에

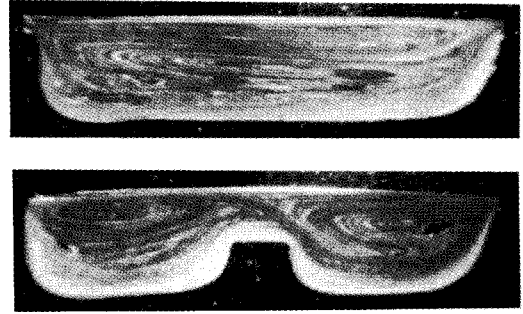


Fig. 8. Two invariant manifolds for the Chaos-Screw obtained by experiment(3).

없다. 따라서 우수한 혼합을 얻기위해서 섬이 발생하는 전형적인 a/H 주위의 값은 피하여 카오스 스크류의 공간 주기 단위를 설계하여야 한다.

한편 위와 같은 수치해석적으로 얻어진 포인카레 단면과 비교하여 볼수 있는 실험적인 방법은 존재하지 않는다. 그러나 실험적으로는 유체 입자의 변형 형태를 가시화 할수 있으며 실제로 관련 논문[3]에서 유체 입자가 늘림(stretch)과 접힘(folding)이 연속적으로 반복하여 일어나는 두개의 불변체군(invariant manifolds)을 얻을수 있었으며 그것들을 Fig. 8에 나타내었다.

다음 절에서는 Fig. 8에 나타난 두개의 불변체군(invariant manifolds)을 셸 사상법(shell mapping method)을 도입하여 수치해석적으로 얻는 방법을 설명하고 수치결과를 Fig. 8과 비교하고자 한다.

3.4 셸 사상법

실험에서 얻은 Fig. 8에 나타난 두개의 불변체군을 수치해석적인 방법으로 찾아내기 위해서 직사각형의 작은 블랍(blob)을 Fig. 9에서 보는 바와 같이 압출기 채널의 중앙선 위 한 지점에 위치시켰다. 이 블랍은 2000 개의 점으로 이루어져 있다. 주기단위 a/H=5, 10, 15에 대해 블랍이 하나의 a/H를 지났을때 변형된 모습이 Fig. 9의 (a), (b), (c)에 각각 나타나 있다. 그러나 이그림에서도 알수 있듯이 유동로 방향으로 보다 많은 수치계산을 해본 결과 블랍을 이용하는 이 방법은 혼합거동을 분석하는데 부적합 할 뿐만 아니라 불변체군을 찾아내기에 매우 어려웠으며 또한 수치 계산시간이 방대하였다.

실제 압출 공정에서는 유체 입자가 천이 영역을 지나 혼합 영역으로 들어갈때는 한 특정한 셸 내부에 존재한다고 볼 수 있다[3]. 따라서 초기 시작 조건으로 블랍을

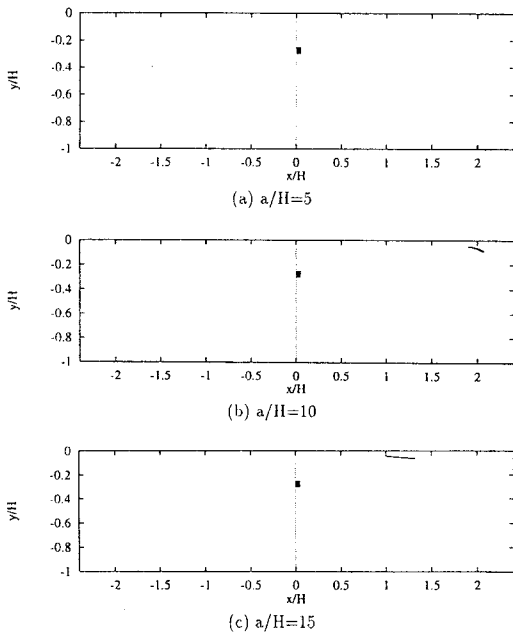


Fig. 9. Deformation of a blob for several periodic units : $\theta=12^\circ$, $Q_{3D}(V_{bz}WH)=0.274$.

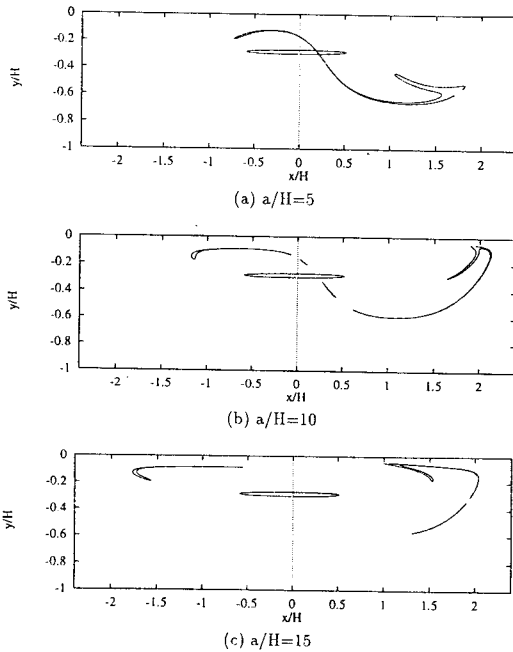


Fig. 10. Deformation of a shell initially located with the solid line for several periodic units : $\theta=12^\circ$, $Q_{3D}/(V_{bz}WH)=0.274$.

이용하는 대신에 셸을 이용하여 불변체군을 찾으려고 시도해 보았다. 본 연구에서는 블랍을 표현하기 위해서 사용한 수보다도 적은 500개의 점을 사용하여 Fig. 10에 나타난 것처럼 초기 셸의 형태를 만들었고 그 형태는 점 $(x/H, y/H)=(0, -0.33)$ 을 포함하는 닫혀진 곡선의 모양이다. 셸의 변형된 모습이 주기가 다른 $a/H=5, 10, 15$ 에 대해 Fig. 10에 나타나 있는데 블랍을 사용한 경우에 비해 성공적으로 셸의 변형을 얻어낼 수 있었다. 이것을 “셸 사상 법(shell mapping method)”라고 하였다. 실제 유체 입자가 혼합 영역으로 들어갈때의 변형 시작 형태는 셸과 동일하므로 이를 초기 조건으로 선택한 것이 셸 사상 법의 기본 개념이다. 지금부터 본 논문에서 제안한 셸 사상 법으로 수치해석한 결과를 논의하고자 한다.

본 연구에서는 여러 종류의 공간 주기 단위가 $(a/H, b/H)$ 에 대하여 수치해석 하였으며 이중에서 공간 주기 단위가 $(a/H, b/H)=(15, 15)$ 일때의 결과에 대하여 설명한다. 이 경우 Fig. 11은 점 $(x/H, y/H)=(0, -0.33)$ 을 포함하는 셸이 유동로 방향을 따라가면서 변형된 모습을 보여주고 있다. Fig. 11(a)는 배리어 영역을 지났을때, Fig. 11(b)는 그 다음의 영역, 즉 배리어가 없는 영역을 지났을때의 변형 모습이며 이후 유동로 방향을 따라 계속 변형되는 모습이 Fig. 11(c), (d), (e)에 나타나 있다. 이후 계속되는 변형 형태는 Fig. 11(d)와 (e)의 경우와 동일하였으며 다만 Fig. 11(d)와 (e)의 변형 형태를 유지하면서 유체 입자가 늘림(stretch)과 접힘(folding)이 반복되어 변형 정도는 급격하게 증가하였다. 초기 조건으로 여러가지 다른 셸을 사용하였을 경우에도 동일하게 이와같은 결과를 얻을 수 있었다. 이상과 같은 결과로부터 Fig. 11(d)와 (e)의 변형 형태는 초기 셸과 카오스 스크류의 유동로 길이에 무관한 고유 변형 형태이라 할수 있으며 따라서 Fig. 11(d)와 (e)이 수치해석으로 얻은 두개의 불변체군이 된다.

Fig. 8의 불변체군은 공간 주기 단위가 $(a/H, b/H)=(27.4, 27.4)$ 이다. 그러나 Fig. 9에 보이는 사진들은 길이 방향으로 배리어가 있는 영역의 중간 지점과 배리어가 없는 영역의 중간 지점에서 떼어낸 시편으로부터 얻어낸 혼합 패턴이므로 본 연구에서는 공간 주기 단위를 27.4와 유사한 30.0을 사용하여 각 영역의 중간 지점에서 수치해석 하여 두개의 불변체군을 조사하여 본 결과 Fig. 11(d)와 (e)의 형태와 거의 동일하였다. 이것은

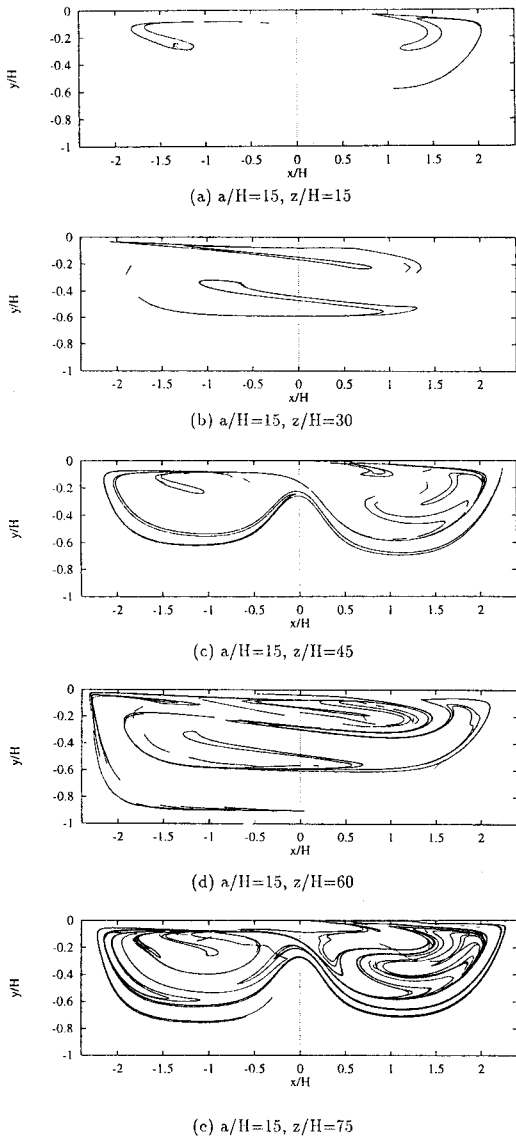


Fig. 11. Deformation of a shell having a initial position of $(x/H, y/H)=(0, -0.33)$ along the down channel direction with the same conditions as the experiment one as shown in the paper[3], that is, $\theta = 12^\circ, Q_{3D}/(V_{bc}WH) = 0.274$.

공간 주기의 중간 지점이 15.0이므로 공간 주기 단위가 15.0인 경우의 공간 주기 단위 끝부분과 일련의 대칭성 (symmetry)을 가지고 있음을 의미한다. 이러한 대칭성에 관한 계속적인 연구가 필요하다. 결론적으로 Fig. 11(d)와 (e)를 Fig. 8과 직접 비교가 될수 있으며 이들

그림에서부터 수치해석 결과는 매우 성공적임을 알수 있다.

4. 결 론

보통 스크류를 사용하는 일반적인 압출 공정에서는 유체 입자의 변형 정도는 시간 또는 스크류 길이에 대하여 선형적으로 증가한다. 그러나 최근에 본 연구자에 의하여 기존 스크류의 간단한 수정을 통해 단축 압출 공정에서의 혼합 성능을 증진시키는 카오스 스크류를 개발하였고[3] 시제품을 제작하여 혼합성능 향상에 관한 실험을 수행하였다. 본 연구에서는 카오스 스크류 상에서 일어날 수 있는 공간 주기 카오스 유동에 대하여 수치해석을 수행하였으며 실험 결과와도 비교하였다.

이러한 카오스 스크류상에 일어나는 카오스 유동에 의한 혼합 현상을 이해하기 위하여 수치해석적 방법으로 입자 궤적 (particle trajectories), 포인카레 단면 (Poincare sections), 셸사상법 (shell mapping method)을 통하여 해석하였다. 입자 궤적을 통하여 혼합성능이 일반 스크류에 비하여 현저히 증진되는 가능성을 보였으며 혼합 특성치는 유체입자의 출발점에 크게 의존함을 확인하였다. 포인카레 단면을 통하여 공간 주기 단위가 증가함에 따라 셸이나 섬 (island)과 같은 정규 영역의 크기가 줄어들어 혼합성능은 점점 좋아지나 어떤 특정한 값 ($a/H=13$ 또는 14)에서는 혼합거동이 다시 나빠짐을 확인하였다. 따라서 우수한 혼합을 얻기 위해서 섬이 발생하는 전형적인 a/H 주위의 값은 피하여 카오스 스크류의 공간 주기 단위를 설계하여야 한다.

셸사상법을 통하여는 두개의 서로 다른 불변체군 (invariant manifolds)이 관찰되었는데 이들 내부에서 유체 입자의 늘림 (stretch)과 접힘 (folding)이 연속적으로 반복하여 일어나서 혼합 성능이 크게 향상됨을 확인하였다. 또한 무차원화 해석을 통하여 실험과 수치해석의 두 결과를 직접 비교하여 본 결과 셸사상법을 도입한 수치해석 결과는 매우 성공적임을 알수 있었다.

후 기

본 연구는 한국과학재단(921-0900-024-2)과 산업과 학기술훈원연구소의 지원으로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

기 호

- a : length of barrier region
 b : length of no-barrier region
 D : inside barrel diameter
 D_{ij} : components of rate of deformation tensor:
 $D_{ij} = 1/2(v_{i,j} + v_{j,i})$
 H : height of the screw channel: reference length
 h : height of barriers
 n : power-law index
 p : pressure
 \bar{p} : reference pressure
 p^* : dimensionless pressure
 Q_{3D} : net flow rate
 q_{3D} : dimensionless flow rate
 \tilde{q}_{3D} : another dimensionless flow rate incorporating aspect ratio W/H
 V_b : barrel velocity
 V_{bz} : z-component of barrel velocity (reference velocity)
 W : width of the screw channel
 u, v, w : velocity component in the x, y and z direction respectively
 x, y, z : local coordinate system

그리스 문자

- $\dot{\gamma}$: generalized shear rate

- θ : helix angle of screw flight
 Θ : temperature
 μ : viscosity

상첨자

- $*$: dimensionless quantity

참고문헌

1. J.M. Ottino, "The Kinematics of Mixing : Stretching, Chaos and Transport," Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1989.
2. D.V. Khakhar, J.G. Franjione and J.M. Ottino, *Chem. Eng. Sci.*, **42**, 2909 (1987).
3. 김시조, 권태현, "단축압출 공정에서의 혼합성능 증진을 위한 카오스 스크류 개발에 관한 연구", 유변학 제출증, (1996).
4. T. Sastrohartono and T.H. Kwon, *Int. J. Numerical Method in Eng.*, **30**, 1369 (1990)
5. T. Sastrohartono, M. Esseghir, T.H. Kwon and V. Sernas, *Polym. Eng. & Sci.*, **30**, 1382 (1990).
6. T.H. Kwon, J.W. Joo and S.J. Kim, *Polym. Eng. Sci.*, **34**, 174 (1993).
7. R.B. Bird, R.C. Armstrong and O. Hassager, "Dynamics of Polymeric Liquids," Vol.1, Fluids Mechanics, Wiley-Interscience, New York, 1987.
8. S.J. Kim and T.H. Kwon, *Polym. Eng. Sci.*, **35**, 274 (1995).
9. J.W. Joo and T.H. Kwon, *Polym. Eng. Sci.*, **33**, 959 (1993).