

<연구논문>

## 카오스 단축 압출기의 3차원 카오스 혼합해석

황옥렬 · 권태현<sup>†</sup>

포항공과대학교 기계공학과  
(1998년 4월 6일)

### Three-Dimensional Analysis of Chaotic Mixing in Chaos Single-Screw Extruder

Wook Ryol Hwang and Tai Hun Kwon<sup>†</sup>

Department of Mechanical Engineering, Pohang University of Science and Technology,  
San 31, Hyojadong, Pohang, Kyungbuk, 790-784, Korea  
(Received April 6, 1998)

#### 요 약

본 연구에서는 카오스 스크류에 대해 비선형 동력학적 모델을 도입하여 카오스가 일어나는 경로를 밝히고 이를 수치적으로 증명하였다. 배리어가 계속 존재하는 경우를 적분가능계로 정의하고 공간주기적 상공간에서 두개의 호모클리닉 궤도를 포함하는 원환체를 적분가능계의 모델로 도입하였다. 주기적으로 삽입된 배리어 없는 영역을 교란으로 취급하여 해 사상을 도입하여 면적 보존의 포인카레 단면을 정의하였다. 호모클리닉 궤도가 깨어져 칸토르 집합을 이룸을 설명했고 내부의 원환체는 공진띠와 KAM 띠를 이루며 혼합을 방해함을 설명했다. 다변유한요소를 이용한 완전 3차원 수치해석을 통해 회전수  $x/3$ 에 해당하는 공진띠의 존재를 보이고 교란이 큰 경우에는 거의 모든 영역이 무작위적인 혼합을 보여주는 카오스 영역으로 바뀔 것을 보였다.

**Abstract**— In this study, we introduced the dynamical modeling of the chaos single-screw (CS) extruder and presented the route to chaos in CS verifying this model by the full three-dimensional numerical simulations. A system with infinite barrier zones is described as the integrable system which consists of the seperatrix with two homoclinic orbits and contains tori in the periodic state space. Periodically inserted non-barrier zone is regarded as a perturbation and we constructed an one-parameter solution map. Using this map, we defined the area-preserving Poincaré map for the perturbed system. As the perturbation increases, homoclinic tangle leads to the Cantor set near homoclinic fixed point and elliptic rotations change to the resonance bands or KAM tori, depending on whether the corresponding winding number is rational or irrational. The finite element method of the multivariate  $Q1^*P0$  elements is applied to solve the velocity fields and the 4th order Runge-Kutta method is used for the particle tracing. The resulting Poincaré section verifies the proposed dynamical model, showing the resonance band of rotation number  $x/3$ . The system with a large perturbation shows the wide stochastic regions where the random particle motions take place.

**Keywords:** Chaos Screw, Convective Mixing, Integrable System, Resonance Band, KAM, Torus, Seperatrix

#### 1. 서 론

혼합증진은 고분자 제품의 화학적, 기계적 성질과 제품으로써의 완전성에 많은 영향을 미친다. 따라서 대부분의 고분자 재료는 강성이나 인성을 강하게 하거나 반응을 제어하기 위해 다른 고분자와 섞어준다. 또한 고분자의 물성이 온도에 영향을 많이 받으므로 열손상을 막기 위해 온도장을 고르게 하는 것도 혼합증진의 한 가지 이유가 된다.

연속적인 혼합을 위해 주로 쓰이는 공정이 압출공정이다. 압출공정은 단축압출공정과 쌍축압출공정으로 나뉘는데 이중 단축압출공정은 가격이 저렴하여 많이 쓰이고 있으나 혼합성능이 떨어지는 단점이 있다. 따라서, 단축압출공정에서 혼합을

증진시키려는 노력은 일찍부터 많은 연구의 대상이 되어 왔고, Cavity Transfer Mixer(CTM), Twente Mixing Ring(TMR), pin-barrel extruder 등을 비롯한 다양한 형태의 단축압출기가 개발되었다[1].

1980년대 중반에 들어 혼합의 역학에 대해 비선형동역학이라는 새로운 과학이 적용되기 시작하였다. 고분자 유동은 층류유동만이 유일한 유동의 양태인데 이는 무작위적인 혼합을 보여줄 수 있는 난류유동과는 구별된다. 이러한 층류유동에서 무작위적인 혼합을 발생시키기 위해서는 카오스를 일으키는 것이 유일한 방법이다. 이러한 카오스 물질 이동에 대한 연구는 H. Aref[2]를 시작으로 S. Wiggins[3], J.M. Ottino[4] 등의 그룹에서 광범위하게 이루어졌다. 편심원통유동, 시간주기의 이차원 직각통유동, 굴곡관에서의 박동성 층류유동 등 많은 시스템들이 비선형동역학과 카오스의 이론을 이용하여 해석

<sup>†</sup>Corresponding author

되었다[4].

카오스 유동에 의해 단축압출기의 혼합성능을 증진시킬 수 있도록 S.J. Kim과 T.H. Kwon은 보통의 단축압출기 스크류내에 주기적인 배리어(barrier)를 삽입한 모양의 스크류를 새로이 제안하였고 이 스크류 내의 유동이 카오스의 대표적인 특성을 보임을 실험적, 수치해석적으로 확인하였으며, 이러한 스크류를 카오스 스크류(chaos screw: CS)라 이름지었다[5, 6]. 기존에 제안된 다른 혼합증진용 스크류에 비해 CS는 설계 및 제조가 간단하여 가공, 설치, 운영등에서 장점이 있다.

S.J. Kim과 T.H. Kwon은 CS에 대한 준 3차원 유동해석에 근거하여 카오스가 발생하여 혼합성능이 증진됨을 밝혔으나, 카오스가 일어나는 구체적인 경로를 밝히지 못하였다. 본 연구에서는 CS를 비선형 동력학을 통해 모델링하고 이 계에서 카오스가 일어나는 경로를 밝히며, 완전 3차원 수치해석을 통해 이러한 모델을 증명하였다.

## 2. 이 론

### 2.1. 카오스 스크류

채널 진행 방향(z 방향)으로 펼쳐진 주기적으로 배리어가 있는 카오스 스크류의 개념도는 Fig. 1에 보여진다. 배리어가 있는 영역을 A 영역, 배리어가 없는 영역을 B 영역이라고 하자. 만약 스크류가 B 영역으로만 이루어져 있으면 기존의 스크류와 같게 되고 이 경우 Fig. 2(a)에서 보듯이 단면유동(xy plane)은 단혀진 유선을 만들게 된다. 또한 스크류가 A 영역만으로 이루어져 있을 경우 Fig. 2(b)에서처럼 단면 유동을 만들게 된다. 단혀진 유선은 그 유선으로 나뉘어진 영역간의 물질이동을 방해하므로, 두 경우 모두 혼합에는 바람직하지 않다. 그러나, 만약 두 영역이 교대로 존재한다면 물질입자는 매우 복잡한 궤도를 따르게 되어 혼합이 증진되리라고 예상할 수 있다. 이것이 카오스 스크류를 이해하는 기본적인 아이디어이다[5, 6].

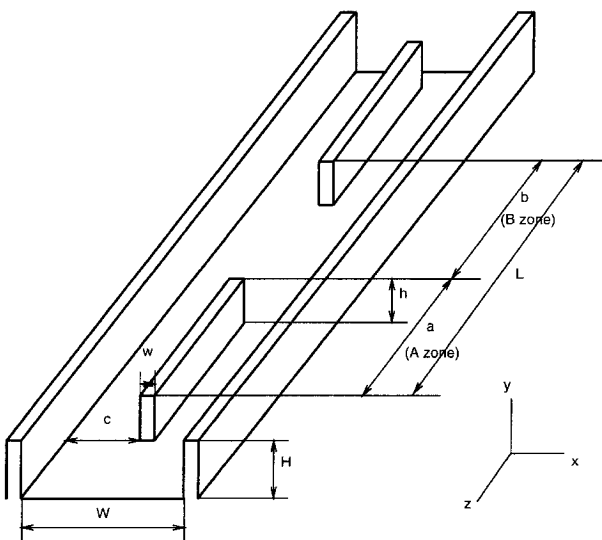


Fig. 1. Schematic diagram of unwound chaos screw.

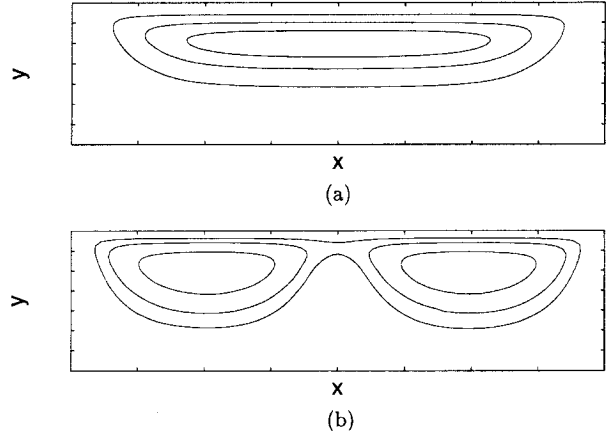


Fig. 2. The streamlines in xy plane. (a) when the CS consists of successive non-barrier modules (B zones); (b) when the CS consists of successive barrier modules (A zones).

기하학적 변수는 A 영역의 길이 a, B 영역의 길이 b, 두 영역의 길이  $L(=a+b)$ , 배리어의 높이 h, 플라이트(flight)의 높이 H, 헬릭스 각(helical angle)  $\alpha$ 가 있고, 유동조건에 관계된 변수로는 스크류 회전속도를 나타내는 당김속도  $V_s$ , 일반적으로 양수인 압력 구배  $\partial p/\partial z$  등이 있다.

### 2.2. 물리적 모델링(Physical modeling)

유동이 일어나는 영역과 그에 대한 경계조건은 Fig. 3에 보여진다. 고분자 유동은 관성력과 중력을 무시할 수 있어, 압출기의 미터링(metering) 영역에서의 비압축성, 등온 유동은 다음과 같이 연속 방정식과 운동 방정식으로 표현된다.

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \tag{2}$$

구성 방정식은 일반화한 뉴턴 유체 모델을 쓴다.

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} - p\mathbf{I} \tag{3}$$

식 (3)을 식 (2)에 대입하면 지배 방정식은 다음과 같이 표현된다.

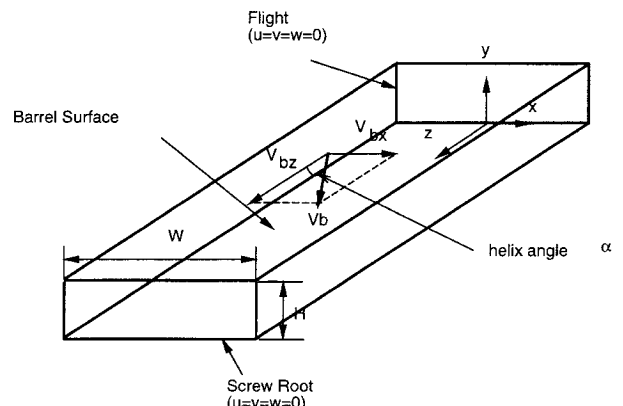


Fig. 3. The flow domain and the boundary conditions.

$$\nabla \cdot (2\mu\boldsymbol{\varepsilon}) - \nabla p = 0 \tag{4}$$

여기서 속도  $\mathbf{v}(u, v, w) \in \mathbb{R}^3$ , 전단 변형률  $\boldsymbol{\varepsilon} = 1/2(\nabla\mathbf{v} + \mathbf{v}\nabla)$ , 유체의 점도  $\mu = \mu(\boldsymbol{\varepsilon})$ 이고, 유효 전단 변형률  $\boldsymbol{\varepsilon}_e = \sqrt{2\boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon}}$ 이다.

여기에  $xy$  단면이 채널 진행 방향( $z$  방향)에 대해 변화가 없으면 주어진 식은, 점도의 효과만 제외한다면,  $xy$  단면에서의 유동과  $z$  방향의 유동은 완전히 나누어진다. 이는 다음 절에서 다루는 비선형 동역학적 모델링에서 매우 중요한 역할을 하게 된다. 이 경우  $xy$  단면에서의 운동은 다음의 연속 방정식과 지배 방정식을 따르게 된다.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{5}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 2 \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \tag{6}$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + 2 \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \tag{7}$$

또한  $z$  방향으로의 유동은 다음의 연속 방정식과 지배 방정식을 따르게 된다.

$$\frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{8}$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] \tag{9}$$

위의 분리된 유동에 관한 식은 채널 진행 방향으로 단면의 변화가 없는 경우에 적용이 가능하므로  $A$  영역으로만 이루어진 경우나  $B$  영역으로만 이루어진 경우를 표현한다. 특히, 배리어가 계속 있는 경우인  $A$  영역으로만 이루어진 스크류의 경우가 비선형 동역학적 모델링에서 교란이 없는 구조 즉, 적분가능 구조(integrable structure)를 이루어 중요하게 다루어지게 된다.

### 2.3. 비선형 동역학적 모델링(Dynamical modeling)

본 연구에서는 배리어가 없는 영역을 교란으로 보고, 배리어 영역 즉,  $A$  영역만으로 이루어진 경우를 교란되지 않은 구조로 본다. 이 절에서는 교란되지 않은 구조에 대한 비선형 동역학적 모델링을 도입한다.

고분자 유동은 확산을 무시할 수 있으므로 두 물질간에 작용하는 표면장력이 유동내의 전단응력에 비해 충분히 작은, 온도나 염료 또는 잘 섞이는 두 물질의 운동은 유동에 의한 물질 이동(convective transport)에 의해서만 결정된다. 이러한 분배 혼합(distributive mixing)에 있어서 스크류가 무한히 연속적인  $A$  영역으로 이루어져 있다면, 물질의 운동은 다음 식을 적분해 얻을 수 있다.

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}(x, y; \alpha) \tag{10}$$

여기서  $\mathbf{x}(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ 이고, 인수  $\alpha$ 는 헬릭스 각이다. 속도  $\mathbf{v}$ 는 식 (5)-(9)의 해이며 따라서  $x, y$ 만의 함수이다. 위 식으로 표현

되는 계를 교란되지 않은 구조(unperturbed system)라고 하고, 해의  $xy$  단면 모양은 Fig. 2(b)에 나타내어져 있다.

식 (10)으로 표현된 계는 에너지가 보존되는 해밀토니안 계(Hamiltonian system)와 같은 성질을 가지고 있다. 위의 계는 시간에 대해 함수가 아니므로(autonomous), 다음의 등식을 만족하는 유선함수(stream function)  $\Psi(x, y)$ 가 존재한다.

$$u(x, y) = \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial y} \tag{11}$$

$$v(x, y) = - \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial x} \tag{12}$$

윗 식은 해밀토니안 계를 정의하는 식과 일치한다. 따라서 유선함수  $\Psi(x, y)$ 는 해밀토니안(Hamiltonian)  $H$ 와 같은 수학적인 구조를 갖게 되고,  $\Psi(x, y)$ 는 계의 운동에 있어서 주어진 초기 조건에 대해 상수가 된다[3].

주기적으로 배리어를 없애면, 즉  $B$  영역을  $z$  방향으로 주기적으로 삽입하면 이 계는 교란을 받게 되어 교란된 구조(perturbed structure)를 이룬다. 교란된 구조는 다음과 같은 같은 식을 적분해서 얻을 수 있다.

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}(\mathbf{x}; \alpha, \beta) \tag{13}$$

여기서 속도장  $\mathbf{v}$ 는 크리핑(creeping) 유동이므로  $z$ 에 대해 주기적이고, 또한  $(x, y)$ 뿐 아니라  $z$ 의 함수이다.  $\beta$ 는 또 하나의 인수인데, 이는 교란의 크기를 나타내며 비적분도(non-integrability)라고 할 수 있다.  $B$  영역을 교란으로 취급하므로  $\beta$ 는 다음과 같이 무차원  $B$  영역의 길이로 정의할 수 있다.

$$\beta = \frac{b}{L} = \frac{b}{a+b} \tag{14}$$

위의 상황을 좀 더 깊이 고찰해 보자. 식 (13)의 해를 인수  $z$ 를 갖는 사상  $\boldsymbol{\varphi}^t: D \rightarrow D$ 로 정의하자. 여기서  $D \subset \mathbb{R}^2$ 는 유동장의  $xy$  단면이다. 초기조건  $\boldsymbol{\varphi}^0(x_0, y_0)$ 를 갖는 사상  $\boldsymbol{\varphi}^t(x, y)$ 은 일반적으로 다음과 같이 분배 및 교환의 성질을 갖지 못한다.

$$\boldsymbol{\varphi}^{t_1+t_2}(x, y) \neq \boldsymbol{\varphi}^{t_1} \cdot \boldsymbol{\varphi}^{t_2}(x, y) \neq \boldsymbol{\varphi}^{t_2} \cdot \boldsymbol{\varphi}^{t_1}(x, y) \tag{15}$$

그러나, 속도장  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ 의 공간적인 주기  $L$ 을 도입하면 아래와 같은 성질은 만족하여, 그룹(group)을 이룬다.

$$\boldsymbol{\varphi}^{L+tz} = \boldsymbol{\varphi}^L \cdot \boldsymbol{\varphi}^z, \quad \boldsymbol{\varphi}^{nL} = (\boldsymbol{\varphi}^L)^n \tag{16}$$

그리고,  $z$  방향으로 주기적이므로  $z$  방향의 주기 변수  $\phi$ 를 다음과 같이 정의한다.

$$\phi = \frac{z}{L}, \quad \text{mod}(1) \tag{17}$$

여기서  $\text{mod}(1)$ 은 정수부분을 무시하고 소수부분만 취한다는 의미이다. 예를 들어, 1.3은 0.3으로, 20.8은 0.8과 같게된다.

이제 교란된 구조를 표현하는 사상의 선택은 명확하다. 사상  $\boldsymbol{\varphi}^L: D \rightarrow D$ 은 주기적인 사상이며 주기변수  $\phi$ 에 대한 다음과 같은 사상  $P$ 를 정의하면 사상  $P$ 는 포인카레(Poincaré) 사상

이 된다.

$$P^{\phi_0}: \Sigma^{\phi_0} \rightarrow \Sigma^{\phi_0}, \quad \text{where } \Sigma^{\phi_0} = \{(x, y, \phi) | \phi = \phi_0 \in (0, 1]\} \quad (18)$$

포인카레 사상 P는 주기적인 단면에서의 사상이므로, 면적 보존 사상(area-preserving map)이다. 이와 같이 정의된 포인카레 사상 P는 두 가지 중요한 성질을 갖는다. 사상 P의 고정점(fixed point)  $x_0$ 은 식 (13)의 해가 초기조건  $x(0)=x_0$ 에서 주기적일 때에만 나타난다. 또 하나의 중요한 성질은 안정도(stability)가 보존된다는 것이다. 주기해  $x(t)$ 가 리아푸노프의 관점에서 안정적(Lyapunov stable)일 때만 사상 P의 고정점 또한 리아푸노프의 관점에서 안정적이 된다. 점근 안정적(asymptotically stable)인 경우도 보존된다[7].

**2.4. 적분가능계(Integrable system): 교란되지 않은 구조**

적분가능계는 식 (10)의 해로 이루어지는 교란되지 않은 계이다. xyz 상공간(state space)에서는 Fig. 4에서와 같이 나타낼 수 있으며, xyφ로 이루어진 상공간에서는 Fig. 5에서처럼 무수한 점으로 쌓인 원환체(nested tori)가 두개 연결된 구조(seperatrix)가 된다.

두 개의 호모클리닉 연결(homoclinic connection)이 만나 하이퍼볼릭 궤도(hyperbolic cycle)를 만들고, 이러한 하이퍼볼릭 궤도가 포인카레 사상에서는 하이퍼볼릭 고정점(hyperbolic fixed point)  $p_0$ 을 만들게 된다. 호모클리닉 궤도(homoclinic orbit)  $\Gamma_{p_0}$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$\Gamma_{p_0} = W^s(p_0) \cap W^u(p_0) \quad (19)$$

여기서  $W^s(p_0)$ 와  $W^u(p_0)$ 는 각각 안정 다양체(stable manifold)와 불안정 다양체(unstable manifold)이다.

더욱 중요한 구조는 이러한 호모클리닉 궤도내에 존재하는 두 개의 원환체(torus)이다. 중심의 엘립틱 고정점(elliptic point)을 중심으로한 원주를 회전하는 구조가 생기고, 이를 엘립틱 회전(elliptic rotation)이라 한다. 각각의  $\Psi$ 를 만족하는 다양체에는 두 개의 주파수가 존재한다. 물질 입자가 원환체의 큰 원주 위를 회전하는 주파수를  $f_1$ , xy 단면의 원환체의 원을 회전하는 주파수를  $f_2$ 라고 하면, 주파수 비(frequency ratio)  $\Omega$ 는 다음과 같이 정의된다.

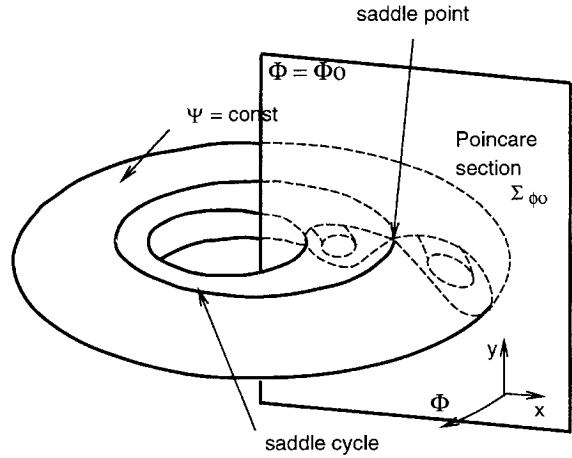


Fig. 5.  $\Psi$  surfaces of the integrable system in the xyφ state space.

$$\Omega = \frac{f_2}{f_1}, \quad \text{mod}(1) \quad (20)$$

주파수 비  $\Omega$ 는 (x, y)의 함수이고, 이러한 관계가 계를 비선형 계로 만든다. 앞서  $\phi$ 를 정의할 때처럼 mod(1)은 정수부분에 관계없이 소수부분만 값으로 취하는 것이다. 이는 주파수 비는 소수부분에 의해서만 현상적으로 구별되기 때문이다.

주파수 비가 유리수이면 가장 작은 정수비  $\Omega=f_2/f_1=m/n$ 를 만족하는 m, n를 찾을 수 있다. 이 경우 포인카레 단면은 n개의 점들로 구성되고, m-1개의 점을 건너 다음 점으로 사상된다. 이러한 현상을 주파수 잠김(frequency-locking)이라고 한다. Fig. 6(a)에는 n이 3인 경우의 포인카레 단면이다. 무리수의 주파수 비는 유사 주기성(quasi-periodicity)을 보여준다. 포인카레 단면에서는 Fig. 6(b)에서 보듯이 무한히 많은 점들이 무수히 들어있는 궤도(dense orbit)를 만들고, 초기점은 결코 처음의 위치로 돌아가지 않는다[8].

**2.5. 교란된 구조(Perturbed system)와 카오스**

배리어 없는 영역(B 영역)이 주기적으로 삽입되면 교란으로 작용하여, 앞 절에서 설명된 적분가능계가 깨어지게 된다. 이에 관한 개념적인 그림은 Fig. 7에 보여진다.

교란 β가 0부터 조금씩 증가함에 따라 먼저 호모클리닉 연결이 깨어져 호모클리닉 탱글(homoclinic tangle)로 변하게 된다. 이러한 현상은 Smale-Birkhoff 정리에 의해 그 존재가 증명된다[9]. 호모클리닉 탱글은 하이퍼볼릭 고정점 부근에서 면적 보존에 의한 수많은 늘임(stretching)과 접힘(folding)을 통해 가장 이상적인 혼합방법인 Smale's horseshoe 사상의 존재를 증명하는데, 이러한 늘임과 접힘에 의해 하이퍼볼릭 고정점 주변의 사상은 무한히 많은 주기점(periodic point)과 더 많은 비주기점(aperiodic point)을 가진 칸토르 집합(Cantor set)으로 된다[8]. 또한 이러한 호모클리닉 탱글은 분리되어 있던 seperatrix의 안쪽과 바깥쪽의 물질 이동을 가능하게 한다[3].

호모클리닉 연결이 교란에 대해 매우 민감하게 깨어지는 반

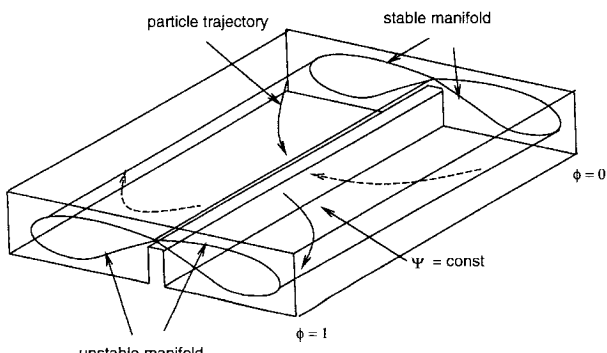


Fig. 4.  $\Psi$  surfaces of the integrable system in the xyz state space.

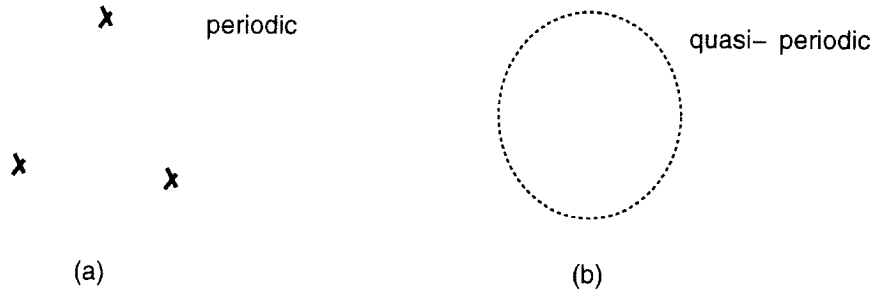


Fig. 6. The Poincaré section of rational and irrational frequency ratio. (a) rational frequency ratio,  $\Omega=p/q$  with  $q=3$ ; (b) irrational frequency ratio forms a dense orbit (a drift ring).

면, 호모클리닉 연결내에 존재하던 타원형 고정점을 중심으로 한 타원형 회전은 쉽게 깨어지지 않는다. 타원형 회전이 교란을 받으면, 적분가능계의 주파수비  $\Omega$ 가 조금 바뀌게 되고, 회전비(rotation number)  $\omega$ 라 불린다[3]. KAM 정리에 의하면, 작은 교란에서는 무리수의 회전비를 갖는 회전( $xy\phi$  상공간에서는 원환체)이 살아 남고, 교란이 증가함에 따라 이러한 원환체가 없어져 간다[9]. 이를 유리수의 회전비를 갖는 회전의 관점에서 살펴보면,  $\omega(x, y)=m/n$ 의 회전은 매우 작은 교란에 의해서도 깨어져 공진 띠(resonance band)라 불리는  $n$ 개의 타원형 고정점과  $n$ 개의 하이퍼볼릭 고정점으로 이루어진 헤테로클리닉 연결(heteroclinic connection)로 바뀌게 된다. 물론 이러한 헤테로클리닉 연결도 곧 깨어져 헤테로클리닉 탱글(heteroclinic tangle)을 이룬다. 이를 포인카레 단면에서 본다면, 적분가능계에서  $n$ 개의 점으로 이루어져 있던 포인카레 사상이  $n$ 개의 타원형, 하이퍼볼릭 고정점을 이은 헤테로클리닉 탱글로 바뀌는 것이다. 이러한 공진 밴드는 하이퍼볼릭 고정점 주위의 깨어진 영역에서만 물질 이동이 가능하므로 물질 이동의 관점에서는 부분적인 장애(partial barrier for transport)가 된다. 회전비가  $(x, y)$ 의 함수로 공간상에서 분포를 가지므로 회전비는 무한한 갯수(countable infinity)의 유리수비와 더 많은 수(uncountable infinity)의 무리수비를 갖게 된다. 그러나, 이처럼 무한히 많은 유리수 비에서 공진 띠가 나타나는 것은 아니다. 주위의 강한 공진에 의해 작은 공진들은 흡수 되는데 강한 공진이란 크기가 큰 공진을 의미한다. 공진 띠의 크기는 대응하는 회전비를 정수비로 나타내었을 때 분모  $n$ 가 작을수록 크게

나타나고, Moser Twist 정리에 의해 확인된다[10].

$$\left| \omega - \frac{m}{n} \right| < \frac{g(\beta)}{n^\tau} \tag{21}$$

식 (21)은 유리수 회전비  $m/n$ 에 의해 교란되어 영향을 받는 회전비  $\omega$  영역을 나타내고,  $\tau$ 는 양수이며,  $g(\beta)$ 는 비적분도의 크기이며, CS계에서는 교란  $\beta$ 의 크기에 따라 커지는 값이다. 유리수 비의 회전수를 갖는 공진에 의해 흡수되는 영역의 크기는 교란  $\beta$ 가 크면 클수록, 분모  $n$ 의 크기가 작을수록 커진다. 따라서, 주어진 교란의 크기에 대해 회전비  $1/1, 1/2, 1/3, 2/3, \dots$  이 강한 공진을 이루게 된다. 강한 공진은 주위의 유리수 및 무리수 비의 회전수에 해당하는 원환체를 흡수하여 공진 띠를 이루게 된다. 또한 흡수되지 않고 남아있는 무리수 비의 회전수에 해당하는 원환체는 비주기적인 궤도로 물질 이동이 일어나지 못해 KAM 띠를 이루게 된다.

모든 유동 영역에서 일어나는 카오스는 교란의 크기가 증가하여 공진 띠가 서로 겹치거나, 최후의 KAM 띠가 사라질 때 일어난다고 할 수 있다.

### 3. 수치해석

앞 절에서 설명한 바와 같이 CS계의 동역학적 구조를 보는 방법은 식 (18)에서 정의된 포인카레 단면  $P$ 를 그려 보는 것이다. 포인카레 단면은 식 (13)의 속도장을 초기조건에 대해 적분,  $\phi^*(x, y)$ 를 구하고 식 (18)을 이용하여 구할 수 있다. 식 (13)에서 정의된 속도장은  $z$ 축을 따라 주기적으로 경계조건이 변화하므로 완전 삼차원 해석이 필요함은 분명하다.

#### 3.1. 다변 유한요소를 이용한 유한요소 수식화

유동장  $D$ 에서 정의된 비압축성 유동 식 (4)와 (2)의 weak form은 다음과 같다[12].

Find  $(u, p) \in V_0 \times Q$  such that

$$\int_D 2\mu \epsilon(u) : \epsilon(v) \, dD - \int_D p \operatorname{div} v \, dD = \int_{\partial D} \bar{T} \cdot v \, d(\partial D), \quad \forall v \in V_0 \tag{22}$$

$$\int_D (\operatorname{div} u) q \, dD = 0, \quad \forall q \in Q \tag{23}$$

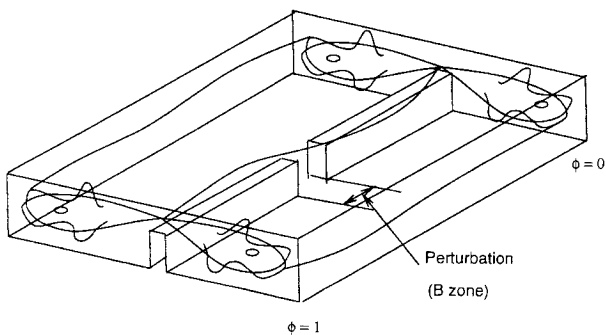


Fig. 7. A schematic view of the perturbed system with homoclinic tangles and resonances in the  $xyz$  state space.

여기서  $V$ 는 1차 미분식까지 제곱적분 가능한 (square-integrable upto 1st order derivative) Sobolev 공간으로 속도의 해가 존재하는 공간, trial 함수 공간  $V_0 = \{v | v \in V, v_i = \bar{u}_i \text{ on } \partial D_{i_0}\}$ , test 함수 공간  $V_0 = \{v | v \in V, v_i = 0 \text{ on } \partial D_{i_0}\}$ 이고,  $\partial D_{i_0}$ 는  $i$ -방향의 속도  $\bar{u}_i$ 가 적용되는 경계면이며,  $Q$ 는 제곱적분 가능한 공간으로 압력의 해가 존재하는 공간,  $T$ 는 경계면에 작용하는 표면력(traction force)이다.

여기서 속도  $u$ 와 압력  $p$ 에 대한 적절한 보간함수(interpolation function)  $N_u, N_p$ 를 다음과 같이 설정하고,

$$\{u\} = [N_u] \{u_j\}, \quad \{p\} = [N_p] \{p_j\} \quad (24)$$

윗 식을 식 (22)와 (23)에 대입하면, 절점 또는 요소  $j$ 의 속도  $u_j$ 와 압력  $p_j$ 를 변수로 갖는 행렬식을 얻게 되고, 이 식은 비뉴턴성 유체일 경우 비선형이다.

비압축성 유동을 이와 같은 속도-압력의 수식화(velocity-pressure fomulation)를 이용한 유한요소법으로 풀 경우 속도와 압력에 대해 적당한 보간이 적용되지 않으면 압력해가 매우 불안정해지는 경향이 있다. 이는 비압축성을 제한(constraint)으로 취급하여, 강성 행렬(stiffness matrix)이 positive definite 하지 않고, 부적절한 형상함수의 도입은 행렬의 고유치를 0이 되게 할 수 있기 때문이다[11]. 이에 대한 수학적 기준은 Babuška-Brezzi 조건으로 나타내어진다. 일반적으로 3차원 유한요소 해석에 사용되는 8개의 절점(node)을 갖고, 절점에서의 각 방향 속도에 대해 선형적이고 요소(element) 내에 상수의 압력을 갖는 육면체 요소(Q1P0 요소)는 Babuška-Brezzi 조건을 만족하지 못한다.

Gupta & Kwon은 변수를 많이 증가시키지 않고, Babuška-Brezzi 조건을 만족하는 Q1\*P0 요소를 개발하였다[12, 13]. Q1\*P0 요소에서 속도는 면에 접선 방향으로 선형적(bilinear)으로 변하고, 면에 수직 방향으로 이차다항함수(biquadratic)로 변화하게 되며(다변 유한 요소), 압력은 요소내에서 일정하다. Q1\*P0 요소는 면에 수직 방향의 속도 성분의 존재로 와류(vorticity)를 비롯한 비압축성 유동의 특징적인 유동을 좀 더 유연하게 표현할 수 있다.

### 3.2. 속도장의 해석

유한요소 해석을위한 경계조건은 다음과 같다. 배럴과 닿은 부분은 당김속도  $V_d$ 를 경계조건으로 삼고, 스크류 벽면(flight)과 바닥(root), 배리어와 닿는 면은 no-slip의 경계 조건을 준다. 주기성이 보장된 정상 상태의 3차원 속도장을 구하기 위해 채널 입구와 출구에서의 경계조건을 위해서는 다음과 같은 방법을 사용했다. 식 (5)에서 (9)로 표현될 수 있는 A 영역으로만 이루어진 경우는 준 3차원 모델(Quasi-3D model)을 사용해서 정확히 계산할 수 있다[6]. 구해진 속도장을 3차원 해석의 입구와 출구의 경계조건으로 주고 같은 형상에 대해 완전 3차원 해석을 한다. 이렇게 구해진 완전 3차원 해석의  $z$ 축 단면에서의 속도장을 다시 입구와 출구조건으로 주어 같은 형상에 대해 채널 진행 방향으로 변화없는 ( $\partial/\partial z=0$ ) 속도장이 나올 때까지 완전 3차원 해석을 계속 반복 한다. 이것은 준 3차원 유한요소의 보간 방식과 완전 3차원 유한 요소의 보간 방식이 달라서, 경계조건에 존재하는 특이점(singular point)에 의해 형상이 같더라도 약간 다른 속도장을 구하기 때문이다. 이제 배리어가 계속 존재하는 형상의 속도장이 계산되었으면, 이 속도장을 배리어가 없는 영역이 존재하는 카오스 스크류의 입구와 출구의 경계 조건으로 주게 된다.

수치해석은 배리어가 없는 영역이 짧은 형상과 배리어가 없는 영역이 긴 형상의 2가지 경우에 대해 수행했다. 배리어가 없는 영역이 짧으면 덜 교란된 호모클릭닉 탱글과 공진띠가 생길 것이고, 배리어 없는 영역이 길면 완전히 교란되어 유동장 전체가 카오스 영역으로 바뀌리라고 예상했기 때문이다. 유한요소 해석을 위한 격자는 Fig. 8에서와 같고 배럴의  $\pi$ 는 속도는  $V_{in} = -9.797 \times 10^{-3} \text{ m/sec}$ ,  $V_{out} = 46.09 \times 10^{-3} \text{ m/sec}$ 이며, 형상 변수는  $W = 15.75 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $H = 3.5 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $h = 2.0 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $w = 0.4 \times 10^{-3} \text{ m}$ 이고, 배리어가 없는 영역이 짧은 경우는  $L = 35 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $a = 31.5 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $b = 3.5 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $\beta = 0.1$ 이며, 배리어가 없는 영역이 긴 경우는  $L = 52.5 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $a = 31.5 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $b = 21 \times 10^{-3} \text{ m}$ ,  $\beta = 0.4$ 로 하였다. 점성모델로는 수정된 크로스 모델을 사용하여 계수는 작동 유체를 LDPE로 하여 실험으로부터 얻은  $B = 5.76651 \times 10^{-2} \text{ kg/(m}\cdot\text{sec)}$ ,  $\Theta_0 = 5817.74^\circ\text{K}$ ,  $\Theta =$

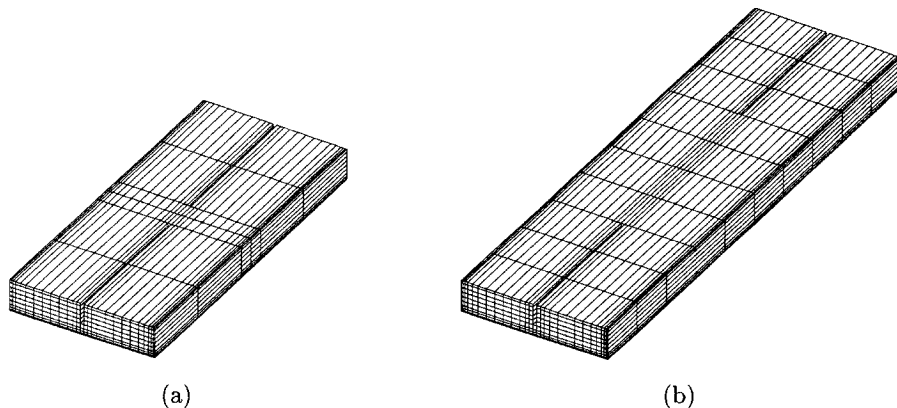
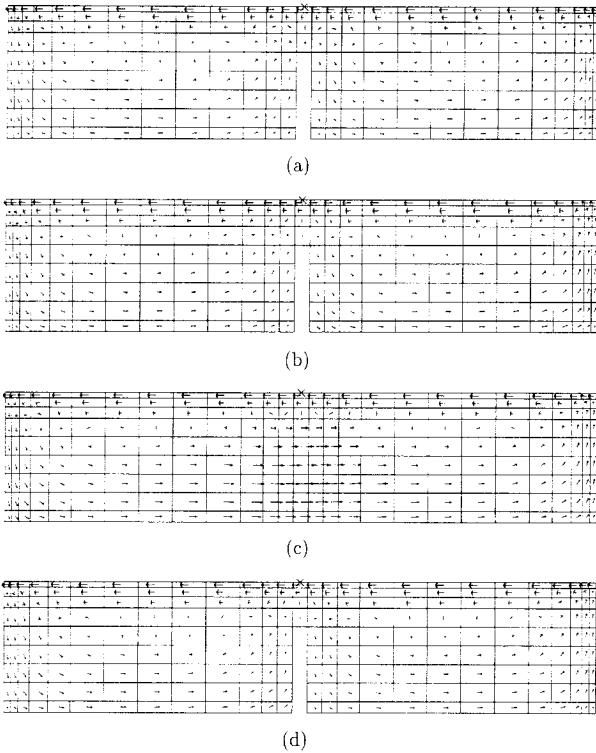


Fig. 8. Finite Q1\*P0 element mesh (upside down). (a) for short no barrier case; no. elements=1438, no. nodes=6753; (b) for long no barrier case; no. elements=2400, no. nodes=10913.



**Fig. 9.** Cross sectional velocity for short no-barrier case. (a)  $\phi=0$ , 1 (min.=0.0018, max.=44.74); (b)  $\phi=0.286$  (min.=0.0081, max.=45.00); (c)  $\phi=0.5$  (min.=0.0055, max.=44.85); (d)  $\phi=0.714$  (min.=0.0076, max.=45.00); [unit= $\times 10^{-3}$  m/sec].

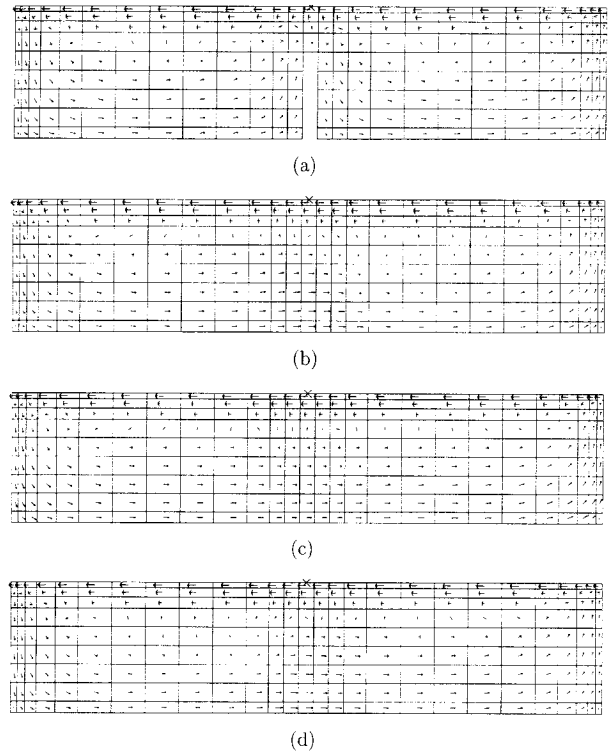
463°K,  $C=1.44540 \times 10^{-3}$  kg/(m<sup>2</sup>·sec)<sup>n-1</sup>, n=0.346298로 하였다 [5, 6].

Fig. 9에는 배리어가 없는 영역이 짧은 스크류의 각 단면에서의 속도 분포를 나타내었고, Fig. 10에는 배리어가 없는 영역이 긴 스크류에 대해서 각 단면에서의 속도 분포를 나타내었다. 배리어가 없는 영역이 짧은 경우의 속도 분포(Fig. 9)에 있어서, 특히 주의할 점은 배리어가 없는 부위에서의 속도분포(Fig. 9(c))가 준 3차원 유동해석의 경우와 많은 차이가 있다는 사실이다. S.J. Kim과 T.H. Kwon[5]은 배리어가 없는 영역이 짧은 경우에도 준 3차원 해석을 근거로 카오스 해석을 시도한 바 있으나, 이러한 경우에는 배리어가 있는 영역에서 없는 영역으로 바뀌는 부근에서 유동해석이 잘못되기 때문에 카오스가 발생하는 경로를 밝히는데 어려움이 있어, 본 연구에서는 완전 3차원 유동해석을 바탕으로 이를 시도하게 되었다.

**3.3. 포인카레 단면(Poincaré sections)**

앞 절에서 구해진 속도장을 식 (13)에 따라, 유동장내에 고르게 퍼진 초기조건에 대해 입자추적을 하면 포인카레 단면을 구할 수 있다. 본 연구에서는 4차 Runge-Kutta방법을 사용하여 상공간상에서 입자 추적을 하였다. 주어진 초기점  $\mathbf{x}_0$ 과 적분간격  $\delta t$ 의 경우 다음 시간에서의 점  $\mathbf{x}$ 는 아래와 같이 계산된다.

$$\mathbf{k}_1 = \delta t \mathbf{v}(\mathbf{x}_0) \tag{25}$$



**Fig. 10.** Cross sectional velocity for long no-barrier case. (a)  $\phi=0$ , 1 (min.=0.0064, max.=44.86); (b)  $\phi=1/3$  (min.=0.0034, max.=44.87); (c)  $\phi=1/2$  (min.=0.0011, max.=44.63); (d)  $\phi=2/3$  (min.=0.0037, max.=44.87); [unit= $\times 10^{-3}$  m/sec].

$$\mathbf{k}_2 = \delta t \mathbf{v} \left( \mathbf{x}_0 + \frac{\mathbf{k}_1}{2} \right) \tag{26}$$

$$\mathbf{k}_3 = \delta t \mathbf{v} \left( \mathbf{x}_0 + \frac{\mathbf{k}_2}{2} \right) \tag{27}$$

$$\mathbf{k}_4 = \delta t \mathbf{v}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{k}_3) \tag{28}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \frac{\mathbf{k}_1}{6} + \frac{\mathbf{k}_2}{3} + \frac{\mathbf{k}_3}{3} + \frac{\mathbf{k}_4}{6} + O(\delta t^5) \tag{29}$$

여기서  $\mathbf{k}_i=(k_i^x, k_i^y, k_i^z) \in R^3(i=1, 2, 3, 4)$ 이고 시간간격  $\delta t$ 는 그 전단계의 속도  $\mathbf{v}_{pre}$ 를 이용하여  $\delta t=S/|\mathbf{v}_{pre}|$ 이고 상수 S는 경우에 따라 결정한다.

배리어가 없는 영역이 짧은 경우와 긴경우에 대한 포인카레 단면은 각각 Fig. 11과 12와 같이 나타내어진다. Fig. 11(a)~(e)는 공간 주기 변수  $\phi$ 의 여러 값에서 구한 것이다. 우선 섞이지 않는 부분이 마치 섬처럼 3개가 떠 있는 것이 보인다. 분모 n가 3인 공진띠가 깨어져 헤테로클리닉 탱글을 이루고 있고, 3개의 엘립틱 회전만 그 형상을 이루고 있는 것이다. Fig. 13은 포인카레 단면 Fig. 11(a)~(e)를 한꺼번에 그린 것이다. 공진띠가 겹치는 부분이 없고, Fig. 11(a)~(e)와 비교해 보면 공진띠의 엘립틱 회전에 해당하는 부분이 유동의 주기와 같이 회전하는 것을 볼 수 있다. 즉, 공진띠의 회전수  $\omega$ 는 유리수이고 그 분모는 3이

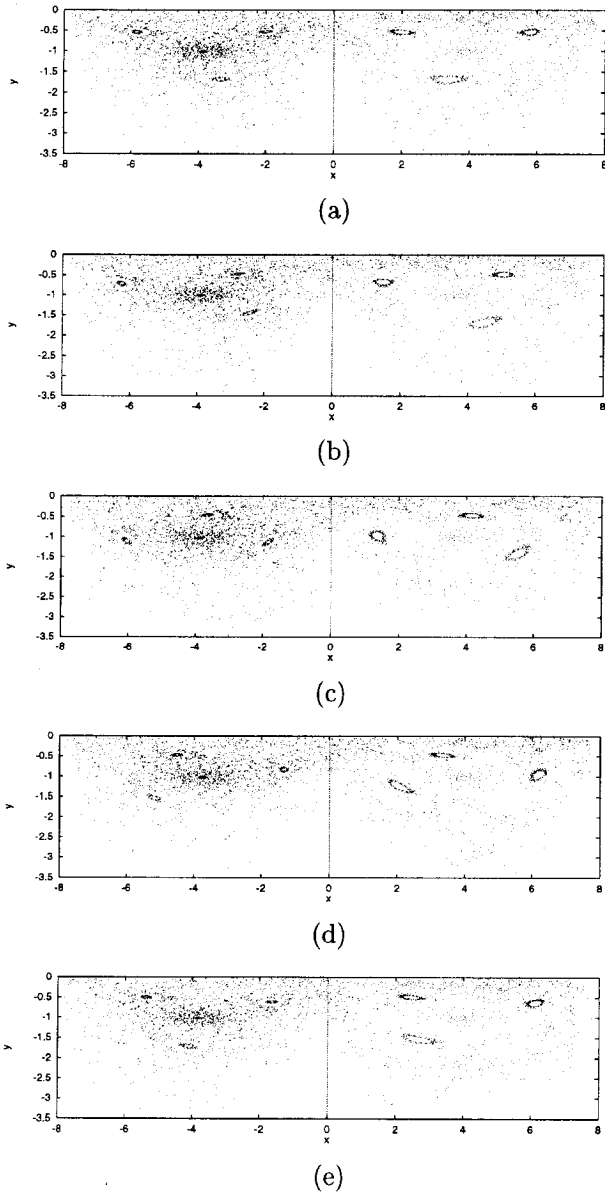


Fig. 11. Poincaré sections for short no-barrier. (a)  $\phi=1/14$ ; (b)  $\phi=4/14$ ; (c)  $\phi=7/14$ ; (d)  $\phi=10/14$ ; (e)  $\phi=13/14$ .

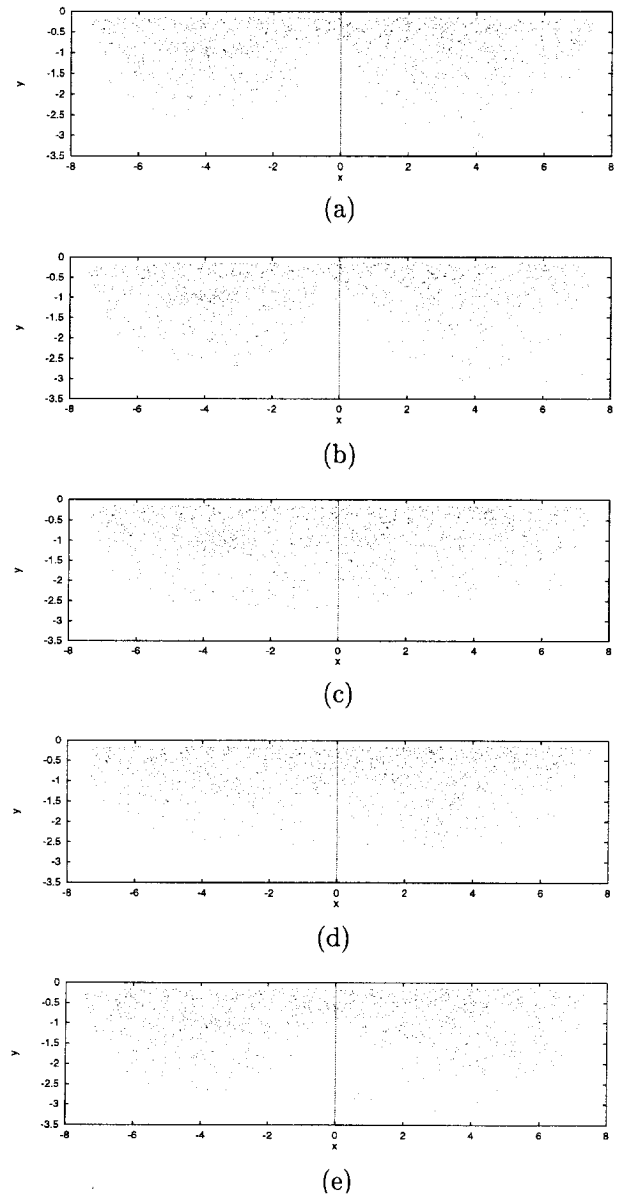


Fig. 12. Poincaré sections for long no-barrier case. (a)  $\phi=1/14$ ; (b)  $\phi=4/14$ ; (c)  $\phi=7/14$ ; (d)  $\phi=10/14$ ; (e)  $\phi=13/14$ .

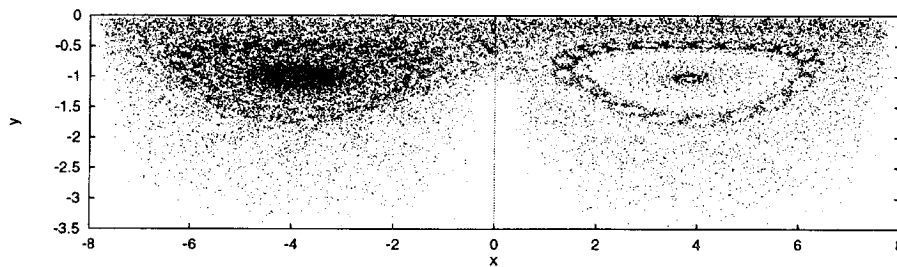


Fig. 13. Simultaneous plot of Poincaré sections for short no-barrier case showing the resonance band rotating periodically in accordance with the periodicity of the geometry.

다. 공진띠는 혼잡에 있어서는 앞서 설명한 바와 같이 부분적인 장애가 된다. 또한 공진띠 내부에 보이는 작은 엘립틱 회전은

공진띠를 둘러싸는 KAM 띠가 존재하여 외부와 혼잡이 전혀 일어나지 않는 영역이라고 할 수 있다. 수없이 많은 유리수비에



해당하는 공진띠가 있을 수 있으나, 수치적으로 찾을 수 있을 정도의 크기 보다 작아서 보이지 않는다고 생각할 수 있다.

배리어가 없는 영역이 긴 경우는 Fig. 12에서 보듯이 이러한 공진띠가 이미 겹치거나(resonance overlap), 마지막 KAM 띠가 사라진 후 유동장에서 no-slip 경계조건에 의해 속도 값이 0에 가까운 부분을 제외하고는 모두 카오틱 영역으로 바뀌어 무작위적인 혼합이 일어남을 볼 수 있다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 고분자 압출공정의 혼합 증진을 위하여 카오스 개념을 도입한 카오스 스크류에 대해 비선형 동역학적 모델을 도입하여 카오스가 일어나는 경로를 밝히고, 이를 수치적으로 증명하였다.

배리어가 계속적으로 존재하는 경우를 교란이 없는 적분가능 계로 정의하고, 새로운 공간 주기 변수  $\phi$ 를 정의,  $xy\phi$  상공간에서 두 개의 호모클리닉 궤도가 존재하는 원환체를 적분가능계의 모델로 도입하였다. 주파수비  $\Omega$ 를 정의하여 이 비가 유리수인지 무리수인지에 따라 상공간에서의 운동을 설명하였다.

이러한 적분가능계에 배리어 없는 영역이 주기적으로 삽입되어 주기적 해 사상  $\phi^i$ 이 그룹을 이룸을 보였고, 이를 바탕으로 포인카레 사상을 정의하였다. 교란이 커질 수록 호모클리닉 궤도가 먼저 깨어져 호모클리닉 고정점 주위에 Smale's horseshoe 사상을 만들어 그 주위의 운동을 이차원 칸토를 집합으로 만들음을 설명했고, 내부의 원환체는 주파수비와는 약간 다른 회전비를 갖고 이 회전비가 유리수이고 그 분모가 작으면 깨어져 강한 공진띠를 이룸을 설명했다. 회전비가 무리수이면 주위에 유리수 공진에 의해 흡수되지만, 계속 존재하는 것도 있어 KAM 띠를 이룸을 보였다. 이러한 공진띠의 겹침이 또는 KAM 띠의 사라짐이 계를 무작위적인 혼합인 카오스 영역으로 바뀌게 함을 설명했다.

다변 유한 요소를 이용한 3차원 유한요소 해석을 통해 주기적인 속도장을 구할 수 있었으며, 4차 Runge-Kutta 적분을 통해 포인카레 단면을 얻을 수 있었다. 배리어가 없는 영역이 짧은, 즉, 교란이 적은 경우에는 분모가 3인 회전비를 가진 공진띠를 이룸을 볼 수 있었고, 그 공진띠는 공간 주기와 일치해 회전하므로써 유리수 비를 이루던 회전비임을 밝힐 수 있었다. 배리어가 없는 영역이 긴 경우는 공진띠나 KAM 띠가 사라져 거의 모든 영역에서 유동이 카오틱해져 확률적 영역(stochastic region)을 이룸을 확인할 수 있었다.

#### 감사의 글

본 연구는 1996년도 교육부 학술연구조성비(기계공학 ME 96-E-34)에 의하여 연구되었으며 이에 감사를 표합니다.

#### 기 호

a : length of barrier zone

- b : length of non-barrier zone
- D : cross-sectional plane
- D** : flow domain for FEM
- $\partial D$  : domain boundary
- $f_1$  : frequency associated with the motion around the large circumference of the torus
- $f_2$  : frequency associated with the motion around the small cross section of the torus
- $g(\beta)$  : non-integrability
- h : height of barrier
- H : height of flight
- H : Hamiltonian
- L : total length of periodic module (a+b)
- $N_u, N_p$  : shape functions for velocity and pressure
- $V_d$  : drag velocity with its components ( $V_{dx}, V_{dz}$ )
- p : pressure
- P : Poincaré map
- S : weight determining time step in the 4th order Runge-Kutta methods
- v** : velocity with its components (u, v, w)
- V : Sobolev space
- $V_0$  : test function space
- $V_u$  : trial function space
- w : width of barrier
- $W^s, W^u$  : stable and unstable manifolds
- x** : position in state space with its components (x, y, z)

#### Greek Letters

- $\alpha$  : helix angle
- $\beta$  : dimensionless length of non-barrier zone
- $\epsilon$  : shear rate
- $\epsilon_e$  : effective shear rate
- $\Gamma$  : homoclinic orbit
- $\mu$  : kinematic viscosity
- $\omega$  : rotation number
- $\Omega$  : frequency ratio
- $\phi$  : solution map
- $\phi$  : periodic state variable
- $\Psi$  : streamfunction
- $\sigma$  : stress
- $\tau$  : positive integer in the Moser Twist Theorem

#### 참고문헌

1. Chris Rauwendaal, "Mixing in Polymer Processing", M. Dekker (1991), Chapter 4.
2. H. Aref, *J. Fluid Mech.*, **143**, 1 (1984).
3. S. Wiggins, "Chaotic Transport in Dynamical Systems", Springer-Verlag (1991), Chapter 3.

4. J.M. Ottino, "The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos, and Transport", Cambridge Univ. Press (1989).
5. S.J. Kim and T.H. Kwon, *Advances in Polymer Technology*, **15**, 41-54 (1996).
6. S.J. Kim and T.H. Kwon, *Advances in Polymer Technology*, **15**, 55-69 (1996).
7. V.I. Arnold, "Mathematical Methods of Classical Mechanics", Springer-Verlag, New York (1989), Chapter 5.
8. Robert C. Hilborn, "Chaos and Nonlinear Dynamics", Oxford Univ. Press (1994), Chapter 8.
9. J. Guckenheimer and P. Holmes, "Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields", Springer-Verlag (1983), Chapter 4.
10. S. Wiggins, "Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos", Springer-Verlag, New York (1990), Chapter 1.
11. Thomas J.R. Hughes, "The Finite Element Methods", Prentice-Hall, Inc, New Jersey (1987), Chapter 4.
12. M. Gupta and T.H. Kwon, *Polymer Eng. Sci.*, **20**, 1420-1430 (1990).
13. M. Gupta, T.H. Kwon and Y. Jaluria, *Intern. J. Numer. Methods. Fluids*, **14**, 557-585 (1992).