비뉴톤 유체 유동의 수치모사

Numerical Simulation of Non-Newtonian Fluid Flows

이 승 종[1)]

Seung Jong Lee

The numerical simulation techniques developed for the flows of non-Newtonian fluids including the viscoelastic fluids and the short fiber suspensions are introduced. And the causes of the numerical breakdown and the recent efforts to resolve them are presented in particular.

1. 서 론

일반적으로, 어떤 유체의 점도(viscosity)가 전단속도(shear rate)에 따라 변하지 않고 일정할 때 이를 뉴톤 유체라고 부르며, 그렇지 않은 유체, 즉, 점도가 전단속도에 따라 변하는 유체를 비뉴톤 유체(non-Newtonian fluids)라고 부른다.

전단속도의 증가에 따라 점도가 감소하는 경우를 전단박화(shear thinning) 유체라 하며, 반대로 점도가 증가하는 경우를 전단후화(shear thickening) 유체라고 한다. 대부분의 고분자 유체(고분자 용융체, 고분자 용액)가 전자에 속하며, 이러한 점성 특성 이외에 탄성(elasticity)을 같이 나타내는 경우가 보통이어서 점탄성 유체(viscoelastic fluids)라고도 자주 불리운다.

이들 유체는 전단유동(shear flow)에서 전단응력(shear stress) 외에 수직응력(normal stress)를 나타내며, 신장유동(elongational flow)에서는 아주 큰 신장응력(elongational stress)을 나타내는 것이 보통이다. 또, 비정상상태 유동에서는 stress relaxation(또는 buildup), stress overshoot 등과 같은 현상들을 보이는 것이 일반적이다.

이러한 비뉴톤 유체의 유동현상에 관한 연구는, 특히, 고분자 물질을 생산, 처리, 가공하는 고분자 공정 전반에 걸쳐서 필수적으로 대두된다. 본 논문에서는, 점탄성 유체 및 단섬유 현탁액 유동의 수치모사 기법의 소개와 문제점 그리고 그 개선을 위한 노력들에 대하여 살펴보고자 한다.

2. 지배방정식과 유변구성방정식

대부분의 고분자 유체나 단섬유 현탁액과 같은 비압축성 유체의 등온 유동은 다음 연속방정식과 운동방정식에 의하여 표시할 수 있다.

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{1}$$

$$\rho\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u}\right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{f} \tag{2}$$

위 방정식계의 해를 구하기 위해서는 대상 물질에 대하여 stress tensor $\boldsymbol{\tau}$ 와 유동장 $\boldsymbol{u}$ 사이의 관계를 나타내기 위한 유변구성방정식(rheological constitutive equation)이 필요하게 되는데, 비뉴톤 유체들의 경우에 자주 사용되는 구성방정식들을 살펴보면 다음과 같다.

전단속도에 따른 점도의 변화를 표시하기 위한 구성방정식은 다음과 같이 변형속도 텐서(deformation rate tensor, $\boldsymbol{d}$)의 2차 invariant (II_d)를 이용하여 제시되어 왔다.

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta(\mathrm{II}_d)\,\boldsymbol{d} \tag{3}$$

---

1) 서울대학교 화학공학과 (151-742, 서울시 관악구 신림동 산 56-1, Tel: 02-880-7410)

여기서,

$$d=\frac{1}{2}(\nabla u+\nabla u^T) \quad \text{: deformation rate tensor} \tag{4}$$

$$\mathrm{II}_d=\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\mathrm{d}^2) \quad \text{: second invariant of } d \tag{5}$$

이고, 점도함수, $\eta(\mathrm{II}_d)$, 로는 power-law model, Carreau model, Ellis model 등이 사용되어 왔다.

점탄성 비뉴톤 유체를 위한 구성방정식으로는 비선형 convected time derivative를 포함하는 미분형 구성방정식들이 많이 사용되어지고 있는데, 그 대표적인 경우가 다음의 upper convected Maxwell model(보통 UCM model이라 칭함)이다.

$$\tau+\lambda_1 \tau=2\eta d \tag{6}$$

여기서, λ_1과 η 는 각각 relaxation time과 viscosity이며, τ 는 다음과 같이 정의되는 upper convected time derivative 이다.

$$\tau=\frac{\partial \tau}{\partial t}+u\cdot\nabla\tau-\nabla u\cdot\tau-\tau\cdot\nabla u^T \tag{7}$$

이 외에도 White-Metzner model, Johnson-Segalman model, Phan Thien-Tanner model, Gisekus model, Leonov model 등 더 복잡한 형태의 미분형 구성방정식들이 제안되어 사용되어지고 있으며, Lodge's rubberlike liquid model, K-BKZ model, Wagner model, Doi-Edwards model 등과 같은 적분형 구성방정식들도 사용되고 있다. 그러나, 모든 경우에 식(6)의 UCM model이 가지고 있는 것과 같은 비선형 time derivative 또는 그와 유사한 항을 포함하고 있기 때문에 수치모사 알고리듬을 개발하는 측면에서는 비슷한 문제점들을 공유하고 있는 셈이다.

한편, 단섬유 현탁액에 대한 유변구성방정식으로는 medium이 뉴톤 유체일 경우에 대하여 다음과 같은 식이 일반적으로 사용되고 있다.

$$\tau=2\eta d+\eta a d:\langle pppp\rangle \tag{8}$$

여기서, a는 다음과 같이 정의되는 현탁액의 현탁강도계수(suspension intensity coefficient)이며, ϕ 는 섬유의 부피분율이고, r은 섬유의 종횡비(aspect ratio)이다.

$$a=\phi\frac{r^2}{\ln(2r)-1.5} \tag{9}$$

3. 수치모사기법, Numerical Breakdown, 원인 및 개선방향

2장에서 설명한 지배방정식계를 수치적으로 풀기 위하여 1970년대 중반까지는 유한차분법이 보통 사용되어 왔었으나, 1980년대 들어오면서 mesh 구성의 용이함, 복잡한 경계조건의 비교적 용이한 처리 등의 이점 때문에 유한요소법의 사용이 급속히 확산되어 현재는, 특히 복잡한 domain 내의 유동인 경우, 거의 모든 경우에 유한요소법이 사용되고 있다. 따라서, 본 논문에서는 유한요소 수치모사 기법에 대하여 살펴보고자 한다.

1980년대 중반 경까지 대부분 standard Galerkin formulation이 사용되어 왔다. 그러나, 탄성/점성 비의 척도인 Weissenberg 수 ($=\lambda\dot{\gamma}_w$, 이하 We로 표시)가 증가함에 따라 수렴된 해를 얻지 못하는 numerical breakdown 현상이 여러 유동 문제에서 공통적으로 관찰되었다. 특히, flow through sudden contraction 이나 extrudate swell 등과 같이 singular point가 존재하는 문제에서 더욱 심각하게 발생하

였다. 이러한 numerical breakdown의 원인과 해결책을 찾기 위한 노력들이 1980년대 중반 이후 여러 각도에서 시도되어 왔다.

Crochet와 Keunings[1,2]는 유변구성방정식의 선택에 문제가 있을 것이라는 생각 위에서 Oldroyd B 식, Phan Thien-Tanner 식 등을 사용하면서 훨씬 개선된 결과들을 발표한 바 있으며, Yeh 등[3]은 UCM 유체 유동에서 bifurcation의 가능성에 대하여 보고를 한 바 있다.

한편, Yoo와 Joseph[4]은 We 수의 증가에 따라 지배방정식의 type이 elliptic에서 hyperbolic으로 바뀌게 된다는 점에 착안하여 각각 그 type에 맞는 수치해석 방법을 사용해야 한다고 하였으며, 이는 그후 upwinding 방법을 이 분야에서도 사용하기 시작하는 한 동기가 되었다.

Marchal과 Crochet[5]는 stress field를 더 정확히 계산해야 할 필요성이 있다는 생각에서 stress 계산을 위한 sub-element의 도입과 함께 stresmline upwind 방법을 제안하여 아주 좋은 결과를 발표하였다. 또, 최근에는 EVSS (elastic viscous split stress) 방법[6], EEME (explicitly elliptic momentum equation) 방법[7] 등을 사용하여 좋은 결과들을 얻고 있는 연구들도 많이 진행되고 있다.

그 외에도, singular point의 처리문제, nonlinear iteration 문제, mesh의 type 및 size에 대한 문제 등이 자주 지적되어 왔다.

결론적으로, 점탄성 비뉴톤 유체유동의 수치모사에 나타나는 numerical breakdown 문제는 위에서 열거한 여러 원인들이 복합적으로 나타나고 있어서 더욱 많은 연구가 체계적으로 필요한 분야라 하겠다.

참고문헌

[1] Crochet, M.J. and Keunings, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **10** (1982), p339.

[2] Keunings, J. and Crochet, M.J., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **14** (1984), p279.

[3] Yeh, P.W., Kim-E, M.E., Armstrong, R.C., and Brown, R.A., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **16** (1984), p173.

[4] Yoo, J.Y. and Joseph, D.D., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **19** (1985), p15.

[5] Marchal, J.M. and Crochet, M.J., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **26** (1987), p77.

[6] Rajagopalan, D., Armstrong, R.C., and Brown, R.A., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **36** (1990) p159.

[7] Coates, P.J., Armstrong, R.C., and Brown, R.A., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **42** (1992) p141.