(19)대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(51) 。Int. Cl.
G06F 17/10 (2006.01)

(11) 공개번호 10-2006-0091633
(43) 공개일자 2006년08월21일

(21) 출원번호 10-2005-0012890
(22) 출원일자 2005년02월16일

(71) 출원인 고려대학교 산학협력단
서울 성북구 안암동5가1 고려대학교 내

(72) 발명자 현재천
서울 강남구 압구정동 한양아파트 43동 105호
정현욱
서울 광진구 구의1동 240-30
송현섭
대전 유성구 도룡동 LG화학 사원아파트 9동 403호
김현철
경기 고양시 덕양구 화정2동 별빛마을 713동 1003호
이주성
경기 성남시 수정구 태평2동 건우아파트 6동 308호
신동명
경기 고양시 덕양구 화정2동 별빛마을 702동 1501호

(74) 대리인 이덕록

심사청구 : 있음

(54) 휠름 블로잉 공정의 동적 모사와 과도해 계산 도출 방법

요약

본 발명은 휠름 블로잉 공정(film blowing process)의 동적 모사와 과도해 계산 도출 방법에 관한 것으로 휠름의 점탄성 특성과 냉각 특성을 고려한 지배방정식을 유도하고, 좌표변환을 통해 free-end-point 문제를 fixed-end-pont 문제로 바꾸어 준 다음, 뉴튼 방법(Newton's method)과 OCFE(Orthogonal Collocation on Finite Elements) 방법 등을 도입하여 과도해를 계산 도출하여 공정의 모사와 연신공명(draw resonance)을 포함한 불안정성(instabilities)들의 분석을 통해서 공정의 최적화(optimization)와 안정화(stabilization)에 필요한 장치개발, 공정의 최적 조건과 운전방법 개발, 고분자 원료의 개발 등에 뛰어난 효과가 있다.

대표도

도 3

색인어

휠름 블로잉 공정, 과도해, 지배방정식, 뉴튼 방법, OCFE, 안정화, 불안정성, 최적화, 장치개발, 좌표변환, 공정모사, 연신공명, 최적조건, 운전방법개발, 고분자 원료개발

명세서

도면의 간단한 설명

도 1은 휠름 블로잉 공정의 도식도를 나타낸 것이다.

도 2는 과도 반응 예시(De_0=0.07, ε=0.015, ξ=0.1, U=0.034, D_R=35, Θo=200℃)를 이용하여 각 요소들의 최적 갯수(NEopt=5)와 내부 배치 지점(collocation point)의 최적 갯수(NPopt=5)를 나타낸 그래프이다. 부정확한 결과: NE=4, NP=5(-·-); NE=5, NP=4(-···); 정확한 결과: NE=5, NP=5(-); NE=5, NP=6(--); NE=6, NP=5(…). (a)는 small time 동안, (b)는 large time동안, (c)는 NE=5 및 NP=5의 경우를 나타낸 것이다.

도 3은 시스템이 연신공명 현상을 보일 때, 한 주기 동안 시간에 따른 버블의 변화 모사 및 실험 결과를 나타낸 것이다.

도 4는 도 3과 같은 조건 하에서, 한 주기 동안 버블 반경의 시간에 따른 변화를 (a) 다이 출구에서 냉각선까지의 거리 좌표(*z*)와, (b) 변환된 온도 좌표(zeta)에 대해서 그린 그래프이다.

도 5는 버블 내에 일정한 연신비(D_R=35) 직선과 일정한 압력차(B=0.37) 곡선의 교차점에 따라 측정된 비등온 공정의 다중해를 나타낸 것이다. (a)는 이론적 결과, (b)는 H 지점에서의 안정성, (c)는 M 지점에서의 수치모사 결과와 실험상 나타나는 연신공명, (d)는 L 지점에서의 안정성을 나타낸 것이다.

발명의 상세한 설명

발명의 목적

발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술

본 발명은 휠름 블로잉 공정(film blowing process)의 동적 모사와 과도해 계산 도출 방법에 관한 것이다. 보다 상세하게는, 본 발명은 휠름의 점탄성 특성과 냉각 특성을 고려한 지배방정식을 유도하고, 좌표변환을 통해 free-end-point 문제를 fixed-end-pont 문제로 바꾸어 준 다음, 뉴튼 방법과 OCFE(Orthogonal Collocation on Finite Elements) 방법 등을 도입하여 과도해를 계산 도출할 수 있는 신규한 방법에 관한 것이다.

전형적인 2축 신장 변형 공정(biaxial extensional deformation process)인 휠름 블로잉 공정은 도 1에 나타난 바와 같이, 환형 다이로부터 연속적으로 배출되는 고분자 용융체를 축 방향과 원주 방향으로 이축 신장시킴과 동시에 냉각시켜 휠름을 생산한다. 닙 롤(nip roll)의 당기는 힘에 의해 휠름이 축 방향으로 신장되고, 버블 내부와 외부의 압력차에 의해 원주 방향으로 신장된다. 이러한 휠름 블로잉은 고분자의 신장 변형을 야기시킨다는 점에서 섬유 방사 공정 및 휠름 캐스팅 공정과 유사하나, 이축 신장을 유발한다는 점에서는 상이하다. 상기 시스템에서 중요한 변수 즉, 다이 출구와 닙 롤에서의 휠름 속도비인 연신비(drawdown ratio, DR)와 다이 출구와 냉각선에서의 버블 반경 비인 팽창비(blowup ratio, BUR)를 조정함으로써 휠름 블로잉 공정과 제품 물성을 설계대로 제어할 수 있다.

지난 40여년 동안, 이러한 중요한 공정에 대해 많은 이론적·실험적 연구들이 수행되어 왔다. 주요 연구 결과들 중 Cain과 Denn (*Polym. Eng. Sci.* 28: 1527, 1988) 및 Yoon과 Park (*Int. Polym. Proc.* 14: 342, 1999)에 의해 수행된 등온 휠름 블로잉 공정에서의 선형 안정성 분석이 주목할만하다. 이러한 안정성 조사뿐만 아니라 연신공명(draw resonance) 불안정성, self-sustained limit cycle, Hopf bifurcation 등이 여러 연구에서 설명되고 있다.

이와 같이 공정의 정상상태에 대한 기본적인 이해와 선형 안정성 분석은 진보되어 왔으나, 비선형 동특성과 안정성을 나타내기 위한 공정의 과도해 도출에 대한 필요성은 여전히 남아있다. 공정의 안정화(stabilization)와 최적화(optimization)를 위한 일종의 체계적인 전략들을 고안하는데 있어, 과도해 도출이 필수불가결 하지만, 과도해는 비교적 쉽게 얻을 수 있는 정상상태의 해와는 달리, 비선형성을 가진 편미분 방정식 형태의 지배방정식과 경계 조건 때문에 오랫동안 이론적인 연구에서 벗어나 있었다.

유변지배공정은 복잡한 물질구조와 해석이 난해한 비뉴튼성 유체를 대상으로 하기 때문에 이로 인한 많은 종류의 비선형 유동 특성과 불안정성이 존재한다. 유변지배공정 중 특히 신장 변형 공정에서 나타나는 대표적인 불안정성인 연신공명

(draw resonance) 현상은 공정의 생산성 돌파를 저해하는 가장 큰 요인이므로, 이러한 불안정성을 극복하고 유변 공정의 생산성 돌파를 위하여 비선형 동력학적인 측면에서 공정을 해석하고, 비선형 이론에 근거한 제어 및 공정 설계 기술 개발이 무엇보다도 필요하다. 신장 변형 공정 중 특히 휠름 블로잉 공정은 속도차와 압력차에 의한 2축 신장(biaxial extension)을 통하여 광폭의 휠름을 생산하는 공정으로 산업적으로 매우 중요하나 다른 신장 변형 공정에 비해 지배방정식의 매우 복잡한 비선형성 때문에 과도해 결과는 지금까지 보고된 바 없다. 특히 휠름 블로잉 공정의 냉각과정을 설명하는 비등온 지배방정식에 대한 과도해나 비선형 안정성 분석은 전세계적으로 보고된 바 없다.

따라서, 본 발명자들은 비등온 휠름 블로잉 공정을 대상으로 과도해를 도출하고 비선형 시스템의 안정성 분석을 가능케 하고자, 점탄성을 가지는 고분자 용융체의 신장 변형을 정확하게 표현할 수 있는 것으로 알려진 Phan Thien-Tanner(PTT) 구성 방정식 및 휠름의 냉각 특성을 고려한 에너지 식을 이 시스템의 지배방정식에 포함시켰다.

본 발명의 목적은 휠름 블로잉 공정을 대상으로 휠름의 점탄성 특성 및 냉각 특성을 고려한 편미분 방정식 형태의 지배방정식을 유도하고, 이를 좌표변환을 통해 free-end-point 문제를 fixed-end-pont 문제로 바꾸어 준 다음, 뉴튼 방법(Newton's method)과 OCFE(Orthogonal Collocation on Finite Elements)와 같은 수치기법을 이용해 과도해를 계산 도출할 수 있는 신규한 방법을 제공하고자 한다.

발명이 이루고자 하는 기술적 과제

본 발명의 상기 목적은 휠름 블로잉 공정을 대상으로 휠름의 점탄성 특성 및 냉각 특성을 고려한 지배방정식을 유도하고, 좌표변환을 통해 free-end-point 문제를 fixed-end-pont 문제로 바꾸어 준 다음, 뉴튼 방법과 OCFE 방법 등을 도입하여 과도해를 계산 도출하여 실제 공정을 효과적으로 모사하는데 있고, 이와 같은 계산 도출과 모사를 통하여 휠름 블로잉 공정의 최적화(optimization)와 안정화(stabilization)에 필요한 장치개발, 공정의 최적 조건과 운전방법 개발, 고분자 원료의 개발 등에 뛰어난 결과를 기대할 수 있다.

발명의 구성 및 작용

본 발명은 휠름 블로잉 공정을 대상으로 휠름의 점탄성 특성과 냉각 특성을 고려한 지배방정식 유도단계, 좌표변환법을 비롯하여 뉴튼 방법과 OCFE와 같은 수치기법을 이용한 과도해 계산 도출단계 및 계산된 수치 모사 결과와 실제 공정의 실험결과와의 비교단계 및 공정의 최적화와 안정화 전략단계로 구성된다.

본 발명은 비등온 휠름 블로잉 공정 모델을 이용하여 휠름 블로잉 공정의 과도해를 도출하기 위해 다음에 도시된 바와 같이 공정의 점탄성 특성과 냉각 특성이 고려된 엄밀한 지배방정식을 유도하고, 온도-시간으로 좌표변환을 하고, 뉴튼 방법(Newton's method)과 OCFE(Orthogonal Collocation on Finite Element) 방법을 도입하여, 비등온 휠름 블로잉 공정의 과도해 계산 도출 방법을 제공한다:

연속식: $$\frac{\partial}{\partial t}\left(rw\sqrt{1+\left(\frac{\partial r}{\partial z}\right)^2}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(rwv)=0 \quad \ldots(1)$$

여기서, $$t=\frac{\bar{t}\,\bar{v}_0}{\bar{r}_0},\ z=\frac{\bar{z}}{\bar{r}_0},\ r=\frac{\bar{r}}{\bar{r}_0},\ v=\frac{\bar{v}}{\bar{v}_0},\ w=\frac{\bar{w}}{\bar{w}_0}$$

축방향 운동식: $$\frac{2rw[(\tau_{11}-\tau_{22})]+2r\sigma_{surf}}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}+B(r_F^2-r^2)-2C_{gr}\int_0^{z_L}rw\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}\,dz-2\int_0^{z_L}rT_{drag}dz=T_z \quad \ldots(2)$$

여기서, $$T_z=\frac{\bar{T}_z}{2\pi\bar{\eta}_0\bar{w}_0\bar{v}_0},\ B=\frac{\bar{r}_0^2\Delta P}{2\bar{\eta}_0\bar{w}_0\bar{v}_0},\ \Delta P=\frac{A}{\int_0^{\bar{z}_L}\pi\bar{r}^2d\bar{z}}-P_a,\ \tau_{ij}=\frac{\bar{\tau}_{ij}\bar{r}_0}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0}$$

$$C_{gr}=\frac{\rho g\bar{r}_0^2}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0},\ T_{drag}=\frac{\bar{T}_{drag}\bar{r}_0^2}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0\bar{w}_0},\ \sigma_{surf}=\frac{\bar{\sigma}_{surf}\bar{r}_0}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0\bar{w}_0}$$

원주방향 운동식:

$$B=\left(\frac{\left[-w(\tau_{11}-\tau_{22})+2\sigma_{surf}\right](\partial^2 r/\partial z^2)}{\left[1+(\partial r/\partial z)^2\right]^{3/2}}+\frac{w(\tau_{33}-\tau_{22})+2\sigma_{surf}}{r\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}-C_{gr}\frac{\partial r/\partial z}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}\right) \quad ...(3)$$

구성방정식:
$$K\tau+De\left[\frac{\partial\tau}{\partial t}+v\cdot\nabla\tau-L\cdot\tau-\tau\cdot L^T\right]=2\frac{De}{De_0}D \quad ...(4)$$

여기서,
$$K=\exp[eD\mathrm{tr}\tau],\ L=\nabla v-\xi D,\ 2D=(\nabla v+\nabla v^T),\ De_0=\frac{\lambda\overline{v_0}}{\overline{r_0}},\ De=De_0\exp\left[k\left(\frac{1}{\theta}-1\right)\right]$$

에너지식:
$$\frac{\partial\theta}{\partial t}+\frac{1}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}\frac{\partial\theta}{\partial z}+\frac{U}{w}(\theta-\theta_c)+\frac{E}{w}(\theta^4-\theta_\infty^4)=0 \quad ...(5)$$

여기서,
$$\theta=\frac{\bar{\theta}}{\overline{\theta_0}},\ \theta_c=\frac{\overline{\theta_c}}{\overline{\theta_0}},\ \theta_\infty=\frac{\overline{\theta_\infty}}{\overline{\theta_0}},\ U=\frac{\overline{Ur_0}}{\rho C_p\overline{w_0}\,\overline{v_0}},\ \overline{U}=\alpha\left(\frac{k_{air}}{\bar{z}}\right)\left(\frac{\rho_{air}\overline{v_c}\bar{z}}{\eta_{air}}\right)^\beta,\ E=\frac{\epsilon_m\sigma_{SB}\overline{\theta_0^4}\,\overline{r_0}}{\rho C_p\overline{w_0}\,\overline{v_0}\theta_0}$$

경계조건:
$$v=w=r=\theta=1,\ \tau=\tau_0 \quad \text{at } z=0 \ ...(6a)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t}+\frac{\partial r}{\partial z}\frac{v}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}=0,\ \frac{v}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}=D_R,\ \theta=\theta_F \quad \text{at } z=z_F \ ...(6b)$$

여기서, r은 무차원 버블의 반경, w는 무차원 휠름 두께, v는 무차원 유체 속도, t는 무차원 시간, z는 무차원 거리, △P는 버블 안팎의 압력차, B는 무차원 압력차, A는 버블 내부의 공기의 양, P_a는 대기압, T_z는 축 방향 힘, C_{gr}은 중력 계수, T_{drag}는 공기 항력, σ_{surf}는 표면장력, Θ는 무차원 휠름 온도, τ는 무차원 응력 텐서, D는 무차원 변형율 속도 텐서,ε과 ξ는 PTT 모델의 매개 변수, De는 Deborah 수, Θ_0는 전단 점도, k는 무차원 활성화 에너지, U는 무차원 열 전달 계수, E는 무차원 복사 열 전달 계수, k_{air}는 냉각공기의 열전도도, ρ_{air}는 냉각 공기의 밀도, η_{air}는 냉각 공기의 점도, v_c는 무차원 냉각 공기 속도, α와 β는 열 전달 계수 관계식의 매개변수, Θ_c는 무차원 냉각공기 온도, Θ_∞는 무차원 대기 온도, ε_m은 복사율, σ_{SB}는 Stefan-Boltzmann 상수, ρ는 유체 밀도, C_p는 열용량, D_R은 연신비를 뜻하고,

단, 경계조건에서 냉각선을 지난 이후에 휠름의 추가적인 변형이 일어나지 않는 것으로 가정하였으며, 각 변수의 overbar가 있는 경우는 실제 차원 변수를, 하첨자 0, F, L은 각각 다이 출구와 냉각선 위치, 닙 롤의 위치를, 하첨자 1, 2, 3은 각각 휠름의 흐름 방향, 두께 방향, 원주 방향을 의미함.

본 발명에서는 비등온 휠름 블로잉 공정의 수치해를 도출하는 과정에서, 시간에 따라 움직이는 휠름의 냉각선을 효과적으로 모사하고자, 거리-시간 좌표 대신 경계가 명확히 정해지는 온도-시간으로 좌표변환 하였다. 또한, 시스템의 과도해를 계산 도출하기 위한 수치해석방법으로 뉴튼 방법과 과도해 계산시간을 단축하기 위한 OCFE를 사용함을 특징으로 한다.

본 발명에서 사용한 비등온 공정 모델에서는 최대 3개의 다중해(multiplicity)가 발견되었으며 이는 실험결과와 일치한다. 또한, 다중해가 나타나는 세 점의 안정성을 과도해를 통해 분석한 결과, 버블 반경이 가장 큰 지점과 가장 작은 지점에서는 시스템에 도입된 외란의 영향이 시간에 따라 소멸되지만, 중간 지점에서는 외란이 증폭되어 연신공명 현상을 나타낸다. 이 역시, 실험 결과와 일치하였으며, 특히 연신공명이 일어날 경우 버블 반경의 진폭과 주기까지도 과도해가 정확히 예측한다.

이하, 본 발명의 구체적인 방법을 실시예를 들어 상세히 설명하고자 하지만 본 발명의 권리범위는 이들 실시예에만 한정되는 것은 아니다.

[실시예]

실시예 1: 휠름 블로잉 공정의 지배방정식 유도 및 수치기법을 이용한 과도해 계산 도출

2축 신장이 일어나는 휠름 블로잉 공정에 관한 이론적인 안정성 연구에 있어서 중요한 것은, 공정의 비등온 특성을 고려하여 새로운 지배방정식을 유도하고, 여러 수치해석 방법들을 동원하여 이들을 풀어서 과도해를 계산 도출하는 것이다.

등온 1차원 휠름 블로잉 모델을 최초로 유도한 Pearson과 Petrie의 연구(*J. Fluid Mech.* 40(1970) 1 및 42(1970) 609)에 기초하여 PTT 유체의 비등온 휠름 블로잉의 지배방정식을 다음과 같이 유도하였다:

연속식: $$\frac{\partial}{\partial t}\left(rw\sqrt{1+\left(\frac{\partial r}{\partial z}\right)^2}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(rwv)=0 \quad \text{...(1)}$$

여기서, $$t=\frac{\bar{t}\,\bar{v}_0}{\bar{r}_0},\ z=\frac{\bar{z}}{\bar{r}_0},\ r=\frac{\bar{r}}{\bar{r}_0},\ v=\frac{\bar{v}}{\bar{v}_0},\ w=\frac{\bar{w}}{\bar{w}_0}$$

축방향 운동식: $$\frac{2rw[(\tau_{11}-\tau_{22})]+2r\sigma_{surf}}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}+B(r_F^2-r^2)-2C_{gr}\int_0^{z_L}rw\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}\,dz-2\int_0^{z_L}rT_{drag}dz=T_z \quad \text{...(2)}$$

여기서, $$T_z=\frac{\bar{T}_z}{2\pi\eta_0 w_0 v_0},\ B=\frac{\bar{r}_0^2\Delta P}{2\eta_0 w_0 \bar{v}_0},\ \Delta P=\frac{A}{\int_0^{\bar{z}_L}\pi\bar{r}^2 d\bar{z}}-P_a,\ \tau_{ij}=\frac{\bar{\tau}_{ij}\bar{r}_0}{2\eta_0 v_0}$$

여기서, $$C_{gr}=\frac{\rho g\bar{r}_0^2}{2\eta_0 v_0},\ T_{drag}=\frac{\overline{T_{drag}}\,\bar{r}_0^2}{2\eta_0 v_0 w_0},\ \sigma_{surf}=\frac{\overline{\sigma_{surf}}\,\bar{r}_0}{2\eta_0 v_0 \bar{w}_0}$$

원주방향 운동식:

$$B=\left(\frac{\left[-w(\tau_{11}-\tau_{22})+2\sigma_{surf}\right](\partial^2 r/\partial z^2)}{\left[1+(\partial r/\partial z)^2\right]^{3/2}}+\frac{w(\tau_{33}-\tau_{22})+2\sigma_{surf}}{r\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}-C_{gr}\frac{\partial r/\partial z}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}\right) \quad \text{...(3)}$$

구성방정식: $$K\tau+De\left[\frac{\partial\tau}{\partial t}+v\cdot\nabla\tau-L\cdot\tau-\tau\cdot L^T\right]=2\frac{De}{De_0}D \quad \text{...(4)}$$

여기서, $$K=\exp[\varepsilon De\,\mathrm{tr}\tau],\ L=\nabla v-\xi D,\ 2D=(\nabla v+\nabla v^T),\ De_0=\frac{\lambda\bar{v}_0}{\bar{r}_0},\ De=De_0\exp\left[k\left(\frac{1}{\theta}-1\right)\right]$$

에너지식: $$\frac{\partial\theta}{\partial t}+\frac{1}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}\frac{\partial\theta}{\partial z}+\frac{U}{w}(\theta-\theta_c)+\frac{E}{w}(\theta^4-\theta_\infty^4)=0 \quad \text{...(5)}$$

여기서, $$\theta=\frac{\bar{\theta}}{\bar{\theta}_0},\ \theta_c=\frac{\bar{\theta}_c}{\bar{\theta}_0},\ \theta_\infty=\frac{\bar{\theta}_\infty}{\bar{\theta}_0},\ U=\frac{\bar{U}\bar{r}_0}{\rho C_p\bar{w}_0 v_0},\ \bar{U}=\alpha\left(\frac{k_{air}}{\bar{z}}\right)\left(\frac{\rho_{air}\bar{v}_c\bar{z}}{\eta_{air}}\right)^\beta,\ E=\frac{\epsilon_m\sigma_{SB}\bar{\theta}_0^4\bar{r}_0}{\rho C_p\bar{w}_0 v_0\theta_0}$$

경계조건: $v=w=r=\theta=1,\ \tau=\tau_0$ at z=0 ...(6a)

$$\frac{\partial r}{\partial t}+\frac{\partial r}{\partial z}\frac{v}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}=0,\ \frac{v}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}=D_R,\ \theta=\theta_F$$ at $z=z_F$ ...(6b)

여기서, r은 무차원 버블의 반경, w는 무차원 휠름 두께, v는 무차원 유체 속도, t는 무차원 시간, z는 무차원 거리, △P는 버블 안팎의 압력차, B는 무차원 압력차, A는 버블 내부의 공기의 양, P_a는 대기압, T_z는 축 방향 힘, C_{gr}은 중력 계수, T_{drag}는 공기 항력, σ_{surf}는 표면장력, Θ는 무차원 휠름 온도, τ는 무차원 응력 텐서, D는 무차원 변형율 속도 텐서,ε과 ξ는 PTT 모델의 매개 변수, De는 Deborah 수, Θ_0는 전단 점도, k는 무차원 활성화 에너지, U는 무차원 열 전달 계수, E는 무

차원 복사 열 전달 계수, k_{air}는 냉각공기의 열전도도, ρ_{air}는 냉각 공기의 밀도, η_{air}는 냉각 공기의 점도, v_c는 무차원 냉각 공기 속도, α와 β는 열 전달 계수 관계식의 매개변수, Θ_c는 무차원 냉각공기 온도, Θ_∞는 무차원 대기 온도, ε_m은 복사율, σ_{SB}는 Stefan-Boltzmann 상수, ρ는 유체 밀도, C_p는 열용량, D_R은 연신비를 뜻하고,

단, 경계조건에서 냉각선을 지난 이후에 휠름의 추가적인 변형이 일어나지 않는 것으로 가정하였으며, 각 변수의 overbar가 있는 경우는 실제 차원 변수를, 하첨자 0, F, L은 각각 다이 출구와 냉각선 위치, 닙 롤의 위치를, 하첨자 1, 2, 3은 각각 휠름의 흐름 방향, 두께 방향, 원주 방향을 의미함.

상기 모델에는 몇몇 가정들이 포함되어 있다:

첫째로, 모든 상태 변수들은 시간과 축방향 거리 좌표의 함수로 표현되며, 시스템을 일차원 모델로 단순화시키는 박막 근사법(thin film approximation)의 가정,

둘째로, 버블은 나선형의 불안정성(helical instability)을 배재하는 축대칭이며,

셋째로, 고분자 용융체의 결정화(crystallization)는 고려하지 않았으며,

넷째로, 고분자 용융체의 결정화(crystallization)는 고려하지 않았으며,

다섯째로, z-좌표의 원점은 압출물의 최대 팽윤 점에서 선택된다.

상기 비등온 휠름 블로잉 공정의 지배방정식을 종래의 수치계산 방법을 이용하면, 과도해 도출이 불가능 하였다. 특히, 공정에 연신공명 불안정성이 있을 때, 과도해를 도출할 수 있는 효과적인 수치 방법을 모색해야 했다.

우선, 반복 계산을 통해 수치해를 얻는 유한 차분법(Finite Difference Method, FDM)은 다른 변수들의 값은 알려져 있다고 가정하고, 한 개의 변수에 대해서만 각 방정식을 반복적으로 풀어나가는 방법이다. 이 방법은 섬유방사(fiber spinning) 공정과 휠름 캐스팅(film casting) 공정에서는 성공적이었지만, 지배방정식에 비선형성을 가지는 항들이 포함된 (즉 $\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}$) 본 발명에서는 실패했다. 이러한 비선형성은 유체 속도가 축 방향이 아니라 휠름 방향으로 정의된다는 사실에 기인한다.

다음으로, 각 종속변수들에 대한 방정식을 해결하기 위해 FDM과 뉴튼 방법(Newton's method)을 동시에 적용하였다. 그러나, 이 방법은 과도해 계산은 가능하지만 거대한 행렬 전체를 대상으로 역행렬 계산을 수행하므로, 하나의 계산을 위해 몇 주라는 극히 오랜 계산 시간을 필요로 한다. 따라서, 실제로 사용할 수는 없다.

마지막으로, 뉴튼 방법의 계산속도 향상을 위해, 축 방향으로 OCFE(Orthogonal Collocation on Finite Element) 방법을 도입하였다. 도 2에 나타난 바와 같이, OCFE를 이용하여 빠른 계산뿐만 아니라 정확한 수치해를 얻기 위해, 거리 방향 요소(element)의 갯수(NE)와 각 요소내의 격자(collocation point)의 갯수(NP)의 최적 값을 조사한 결과, 정확도를 보장하는 범위 내에서 가장 빠른 계산이 가능한 NE와 NP 값은 모두 5로 판명되었으며(도 2a 및 2b), 이 발명의 모든 과도해는 이 값들을 사용하여 수치모사한 결과이다. 또한, 수치모사에 필요한 Jacobian 행렬은 수치적 계산 대신 대수식 함수로써 그 값들을 계산하여 수치해의 수렴성을 높였다. 또한 시간에 대한 차분화 방법으로, 수치해의 수렴성을 최대한 보장하며 수치적으로 나타나는 불안정성을 배재하기 위해, 2차 내재적 역방향 차분화 방법(second-order implicit backward scheme)을 사용하였다. 도 2c는 연신공명에서 과도해의 시간별 수렴의 전형적인 예를 나타내고 있다.

또한, OCFE와 더불어 공정의 보다 정확한 모사를 위해 몇 가지 중요한 수학적 방법이 사용되었다. 우선, 비등온 공정에서 휠름의 냉각선의 높이가 시간에 따라 변하게 되므로, free-end-point 문제가 되어 거리의 격자점이 시간에 따라 움직이는 문제가 발생한다. 따라서 독립변수를 거리 대신 온도로 해 줌으로써 fixed-end-point 문제로 바꾸어주면 보다 효과적으로 냉각선의 높이의 움직임을 모사할 수 있다. 따라서, 시간-거리 대신 새로운 독립변수로써 시간-온도를 사용하기 위해 다음의 좌표 변환을 적용하였다:

$$\zeta = \frac{\theta_0 - \theta}{\theta_0 - \theta_F} \quad \ldots(7)$$

여기서 새로운 독립변수 ζ는 다이 출구에서 0이 되며, 냉각선 높이에서는 1이 된다. 지배방정식에서 모든 유도치는 다음과 같은 변환식을 통하여 (t,z)좌표 대신 새 좌표 (t,ζ)로 다시 표시된다:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_t = \left(\frac{\partial f}{\partial \zeta}\right)_t \left(\frac{\partial z}{\partial \zeta}\right)_t^{-1} \quad \ldots(8)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_z = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_\zeta - \left(\frac{\partial f}{\partial \zeta}\right)_t \left(\frac{\partial z}{\partial \zeta}\right)_t^{-1} \left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)_\zeta \quad \ldots(9)$$

여기서, *f*는 모든 상태 변수를 나타낸다.

두번째로, 본 발명에서는 버블의 부피를 계산함에 있어, 버블을 하나의 원통으로 가정하는 소위 실린더형 근사법(cylindrical approximation) 대신, 각 지점의 버블 반경을 적분하여 실제 버블의 부피를 계산하는 방식을 취하였다. 이는 연신공명 불안정성을 보이는 경우 시간에 따라 변하는 버블 모양에 맞추어 버블 내부의 부피를 엄밀히 계산해 줌으로써 정밀한 수치모사를 가능케 한다.

도 3은 주기성을 가지는 연신공명 불안정성이 발생하였을 때, 한 주기 동안 휠름의 반경 변화와 냉각선의 높이 변화를 수치모사한 결과를 나타내었으며, 이를 실제 실험 결과와 비교한 것이다. 본 발명은 과도해의 효용성을 입증하는 것이 일차 목표이므로, 공정의 비선형 동특성이 고려된 모델에서 계산되어진 수치모사 결과가 실제 실험 결과를 얼마나 근사하게 모사하는가가 중요하다. 연신공명이 발생하는 공정조건에서 한 주기 동안 휠름 반경의 변화와 냉각선 높이의 변화를 관찰하였을 때, 과도해로 얻은 연신 공명 현상의 주기는 물론, 여타 공정 변수들의 시간에 따른 변화까지도 모두 실험 결과와 근사함을 발견하였다. 이러한 연신공명에서 상태 변수들의 과도해를 명확하게 표현하기 위해, 도 4a에서는 진폭 한 주기 동안 버블 반경을 다이 출구에서 냉각선 높이까지 거리, 즉 본래의 독립변수인 축 방향 거리(*z*)에 대해 표시하였고, 또한 도 4b에서는 변환된 온도 좌표(ζ) 즉, 새로운 독립변수로 표시하였다.

도 5는 수치 계산에서 예측한 3개의 다중해(multiplicity)가 실험적으로도 근사하게 관찰됨으로써, 본 발명에서 제시한 1차원 비등온 모델과 이에 따른 수치 해법이 매우 유용함을 증명하고 있다. 여기서 일정한 연신비 조건을 나타내는 직선(연신비가 고정되었기 때문에(D_R=35), 직선 그래프의 기울기는 1/35로 결정된다.)과 일정 압력차 곡선의 교차점으로 결정되는 3개의 정상상태는, 공정조건이 동일함에도 불구하고 서로 다른 두께 감소율(TR)과 버블의 팽창비(BUR)를 보인다. 이러한 휠름 블로잉 공정의 다중해 특성은 단순히 정상상태의 해 뿐 아니라, 공정의 안정성에도 큰 역할을 한다. 즉, 선형 안정성 분석 방법을 통해 얻은 도 5a의 안정성 도표에 표시된 이들 3개의 정상 상태 중, 중간 지점만이 불안정한 연신공명을 보이며(도 5c), 다른 2개의 정상 상태는 안정함을 알 수 있다(도 5b 및 5d). 특히, 냉각선에서 버블 반경의 진동 결과를 나타내는 도 5c는 오프라인으로 수행한 실험결과와 과도해간의 뛰어난 일치를 보인다.

휠름 블로잉 공정의 이들 과도해를 도출함으로써, 첫째로, 이전에 개발된 섬유 방사 공정과 휠름 캐스팅의 연신공명 기준식을 휠름 블로잉 공정에서도 확인할 수 있고, 둘째로, 냉각, 점탄성(viscoelasticity), 버블 내 공기압 및 공기양, 냉각선의 높이와 같은 공정 조건이 시스템에 미치는 효과를 입증하기 위한 민감도 분석(sensitivity analysis)을 다른 신장 변형 공정에서와 같이 과도해를 사용함으로써 쉽게 수행할 수 있다. 셋째로, 상기 2개의 유용성의 장점뿐만 아니라, 냉각, 고분자의 점탄성, 공기압 및 공기양 및 냉각선 높이 등의 공정 조건들을 바꿈으로써 공정의 생산성과 휠름의 품질을 향상시키기 위한 최적 공정 조건 및 운전 방법을 찾기 위한 전략을 개발할 수 있다는 것이다. 넷째로 공정의 최적화(optimizataion)와 안정화(stabilization)에 필요한 장치 개발 및 고분자 원료 개발 등에도 본 발명의 과도해 계산 도출 방법을 응용할 수 있다.

발명의 효과

상기 실시예를 통해 살펴본 바와 같이, 본 발명은 휠름 블로잉 공정의 동적 모사와 과도해 계산 도출 방법에 관한 것으로, 비등온 휠름 블로잉 공정을 대상으로 뉴튼 방법(Newton's method)과 OCFE(Orthogonal Collocation on Finite Element) 방법을 도입하여 계산 도출한 과도해는 공정의 비선형 안정성과 동특성을 분석하는 데 뛰어난 효과가 있다. 또한, 실험적인 검증을 통해 이론적으로 계산 도출된 수치해의 유용성을 증명하였으며, 이러한 비선형 거동을 보이는 유변 공정의 동특성을 고려함으로써, 최적 공정설계와 비선형 제어에 응용할 수 있으며, 공정의 최적화와 안정화에 필요한 장치 개발, 공정의 최적 조건과 운전 방법 개발, 고분자 원료의 개발 등에 뛰어난 효과가 있다. 따라서 본 발명은 휠름의 신장 변형이 중요한 각종 첨단 휠름 공정, 코팅 공정, 평판 디스플레이 공정 등에 매우 유용한 발명이다.

(57) 청구의 범위

청구항 1.

휠름 블로잉 공정 모델을 이용하여 공정의 과도해를 계산 도출하기 위해 휠름의 점탄성 특성과 냉각 특성이 고려된 다음의 지배방정식을 유도하고, 좌표변환을 통해 거리-시간의 free-end-point 문제를 온도-거리의 fixed-end-pont 문제로 바꾸어 준 다음, 뉴튼 방법(Newton's method)과 OCFE(Orthogonal Collocation on Finite Elements) 방법을 도입함을 특징으로 하는 휠름 블로잉 공정의 과도해 계산 도출 방법:

연속식: $$\frac{\partial}{\partial t}\left(rw\sqrt{1+\left(\frac{\partial r}{\partial z}\right)^2}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(rwv)=0 \quad \text{...(1)}$$

여기서, $$t=\frac{\bar{t}\,\bar{v}_0}{\bar{r}_0},\ z=\frac{\bar{z}}{\bar{r}_0},\ r=\frac{\bar{r}}{\bar{r}_0},\ v=\frac{\bar{v}}{\bar{v}_0},\ w=\frac{\bar{w}}{\bar{w}_0}$$

축방향 운동식: $$\frac{2rw[(\tau_{11}-\tau_{22})]+2r\sigma_{surf}}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}+B(r_F^2-r^2)-2C_{gr}\int_0^{z_L}rw\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}\,dz-2\int_0^{z_L}rT_{drag}dz=T_z \quad \text{...(2)}$$

여기서, $$T_z=\frac{\bar{T}_z}{2\pi\bar{\eta}_0\bar{w}_0\bar{v}_0},\ B=\frac{\bar{r}_0^2\Delta P}{2\bar{\eta}_0\bar{w}_0\bar{v}_0},\ \Delta P=\frac{A}{\int_0^{\bar{z}_L}\pi\bar{r}^2d\bar{z}}-P_a,\ \tau_{ij}=\frac{\bar{\tau}_{ij}\bar{r}_0}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0}$$

$$C_{gr}=\frac{\rho g\bar{r}_0^2}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0},\ T_{drag}=\frac{\bar{T}_{drag}\bar{r}_0^2}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0\bar{w}_0},\ \sigma_{surf}=\frac{\bar{\sigma}_{surf}\bar{r}_0}{2\bar{\eta}_0\bar{v}_0\bar{w}_0}$$

원주방향 운동식:

$$B=\left(\frac{\left[-w(\tau_{11}-\tau_{22})+2\sigma_{surf}\right](\partial^2r/\partial z^2)}{\left[1+(\partial r/\partial z)^2\right]^{3/2}}+\frac{w(\tau_{33}-\tau_{22})+2\sigma_{surf}}{r\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}-C_{gr}\frac{\partial r/\partial z}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}\right) \quad \text{...(3)}$$

구성방정식: $$K\tau+De\left[\frac{\partial\tau}{\partial t}+v\cdot\nabla\tau-L\cdot\tau-\tau\cdot L^T\right]=2\frac{De}{De_0}D \quad \text{...(4)}$$

여기서, $$K=\exp[\epsilon De\,\mathrm{tr}\tau],\ L=\nabla v-\xi D,\ 2D=(\nabla v+\nabla v^T),\ De_0=\frac{\lambda\bar{v}_0}{\bar{r}_0},\ De=De_0\exp\left[k\left(\frac{1}{\theta}-1\right)\right]$$

에너지식: $$\frac{\partial\theta}{\partial t}+\frac{1}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}\frac{\partial\theta}{\partial z}+\frac{U}{w}(\theta-\theta_c)+\frac{E}{w}(\theta^4-\theta_\infty^4)=0$$

여기서, $$\theta=\frac{\bar{\theta}}{\bar{\theta}_0},\ \theta_c=\frac{\bar{\theta}_c}{\bar{\theta}_0},\ \theta_\infty=\frac{\bar{\theta}_\infty}{\bar{\theta}_0},\ U=\frac{\bar{U}\bar{r}_0}{\rho\bar{C}_p\bar{w}_0\bar{v}_0},\ \bar{U}=\alpha\left(\frac{k_{air}}{\bar{z}}\right)\left(\frac{\rho_{air}\bar{v}_c\bar{z}}{\eta_{air}}\right)^{\beta},\ E=\frac{\epsilon_m\sigma_{SB}\bar{\theta}_0^4\bar{r}_0}{\rho\bar{C}_p\bar{w}_0\bar{v}_0\bar{\theta}_0}$$

경계조건: $v=w=r=\theta=1,\ \tau=\tau_0$ at z=0 ...(6a)

$$\frac{\partial r}{\partial t}+\frac{\partial r}{\partial z}\frac{v}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}=0,\ \frac{v}{\sqrt{1+(\partial r/\partial z)^2}}=D_R,\ \theta=\theta_F$$ at $z=z_F$ ...(6b)

여기서, r은 무차원 버블의 반경, w는 무차원 휠름 두께, v는 무차원 유체 속도, t는 무차원 시간, z는 무차원 거리, △P는 버블 안팎의 압력차, B는 무차원 압력차, A는 버블 내부의 공기의 양, P_a는 대기압, T_z는 축 방향 힘, C_{gr}은 중력 계수, T_{drag}는 공기 항력, σ_{surf}는 표면장력, Θ는 무차원 휠름 온도, τ는 무차원 응력 텐서, D는 무차원 변형율 속도 텐서,ε과 ξ는 PTT 모델의 매개 변수, De는 Deborah 수, Θ_0는 전단 점도, k는 무차원 활성화 에너지, U는 무차원 열 전달 계수, E는 무차원 복사 열 전달 계수, k_{air}는 냉각공기의 열전도도, ρ_{air}는 냉각 공기의 밀도, η_{air}는 냉각 공기의 점도, v_c는 무차원 냉각 공기 속도, α와 β는 열 전달 계수 관계식의 매개변수, Θ_c는 무차원 냉각공기 온도, Θ_∞는 무차원 대기 온도, ε_m은 복사율, σ_{SB}는 Stefan-Boltzmann 상수, ρ는 유체 밀도, C_p는 열용량, D_R은 연신비를 뜻하고,

단, 경계조건에서 냉각선을 지난 이후에 휠름의 추가적인 변형이 일어나지 않는 것으로 가정하였으며, 각 변수의 overbar가 있는 경우는 실제 차원 변수를, 하첨자 0, F, L은 각각 다이 출구와 냉각선 위치, 닙 롤의 위치를, 하첨자 1, 2, 3은 각각 휠름의 흐름 방향, 두께 방향, 원주 방향을 의미함.

청구항 2.

제 1항에 있어서, 상기 비등온 공정 모델은 3개의 다중해를 가짐을 특징으로 하는 휠름 블로잉 공정의 과도해 계산 도출 방법.

청구항 3.

공정의 비선형 안정성 분석방법에 있어서,

제 1항 기재의 휠름 블로잉 공정의 과도해 계산 도출 방법을 통해 계산 도출된 과도해의 외란전파과정의 모사를 이용함을 특징으로 하는 공정의 비선형 안정성 분석 방법.

청구항 4.

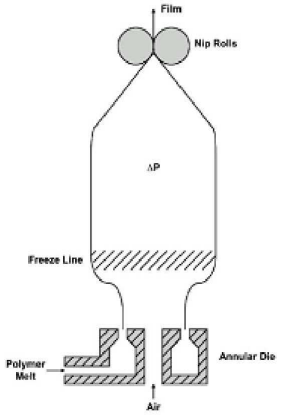
제 1항 기재의 휠름 블로잉 공정의 과도해 계산 도출 방법을 통해 계산 도출된 과도해를 통하여 각 공정 변수들의 공정의 안정성에 미치는 상대적인 영향을 민감도 분석(sensitivity analysis)으로부터 얻음을 특징으로 하는 공정의 최적화 및 최적 운전 조건과 방법.

청구항 5.

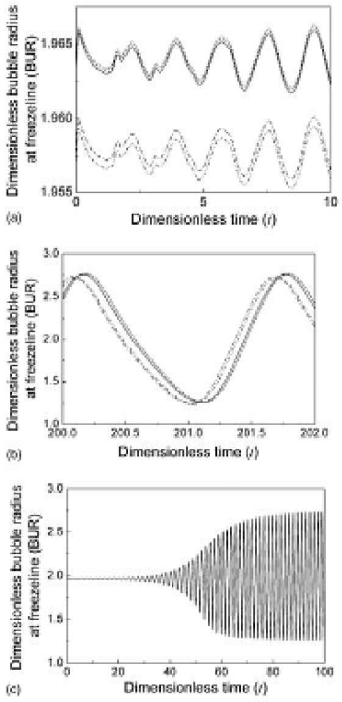
제 1항 기재의 휠름 블로잉 공정의 과도해 계산 도출 방법에 따른 과도해 분석을 이용함을 특징으로 하는 공정의 최적화(optimization)와 안정화(stabilization)에 필요한 장치.

도면

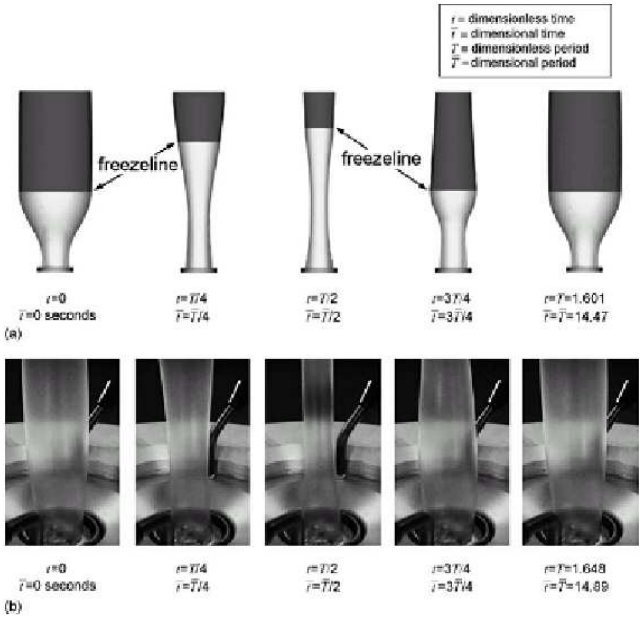
도면1


Film
Nip Rolls
ΔP
Freeze Line
Polymer Melt
Annular Die
Air

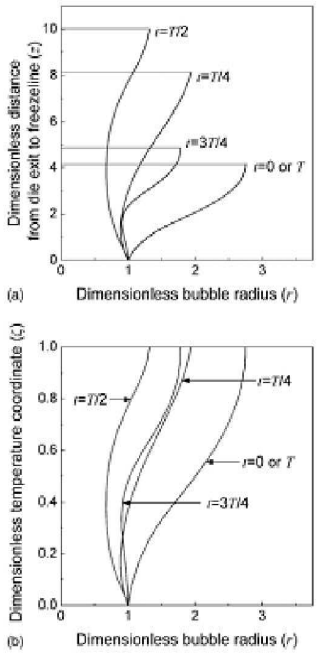
도면2


Dimensionless bubble radius at freezeline (BUR)
1.965
1.960
1.955
0
5
10
(a)
Dimensionless time (t)
Dimensionless bubble radius at freezeline (BUR)
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
200.0
200.5
201.0
201.5
202.0
(b)
Dimensionless time (t)
Dimensionless bubble radius at freezeline (BUR)
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0
20
40
60
80
100
(c)
Dimensionless time (t)

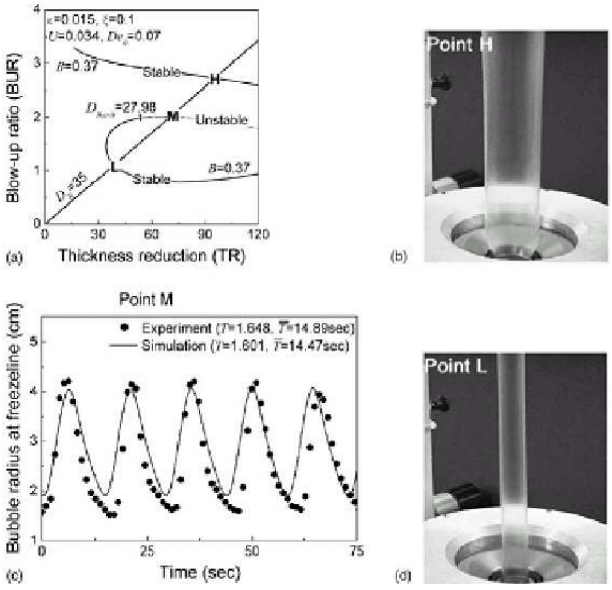
도면3


t = dimensionless time
t̄ = dimensional time
T = dimensionless period
T̄ = dimensional period
freezeline
freezeline
t=0
t̄=0 seconds
t=T/4
t̄=T̄/4
t=T/2
t̄=T̄/2
t=3T/4
t̄=3T̄/4
t=T=1.601
t̄=T̄=14.47
(a)
t=0
t̄=0 seconds
t=T/4
t̄=T̄/4
t=T/2
t̄=T̄/2
t=3T/4
t̄=3T̄/4
t=T=1.648
t̄=T̄=14.89
(b)

도면4


Dimensionless distance from die exit to freezeline (z)
t=T/2
t=T/4
t=3T/4
t=0 or T
Dimensionless bubble radius (r)
(a)
Dimensionless temperature coordinate (ζ)
t=T/2
t=T/4
t=0 or T
t=3T/4
Dimensionless bubble radius (r)
(b)

도면5


Blow-up ratio (BUR)
Thickness reduction (TR)
Stable
Unstable
Stable
H
M
L
(a)
(b)
Point H
Point M
Experiment
Simulation
Bubble radius at freezeline (cm)
Time (sec)
(c)
Point L
(d)