

# DEM(Discrete Element Method)를 사용한 분체 유동해석

최정욱<sup>1</sup>, 사종엽<sup>2</sup>

## Calculation of granular flow with DEM(Discrete Element Method)

J. W. Choi and J. Y. Sah

The discrete element method is a numerical model capable of describing the mechanical behaviour of assemblies of discs and spheres. The method is based on the use of an explicit numerical scheme in which the interaction of the particles is monitored contact by contact and the motion of the particles modelled particle by particle. In this paper, A two-dimensional model for computing contacts and motions of granular particles of uniform, inelasticity is presented. And, code is developed. The primary aim of this paper is to approv computational result of continuum alaysis which is on processing. The end of this paper, that code is tested with several examples.

**Key Words:** 분체유동(Granular Flow), 분자동역학(Molecular Dynamic), DEM(Discrete Element Method)

### 1. 서론

분체(Granular materials or bulk solids)란 개개의 고체 알갱이들이 접촉하고있거나 주위의 다른 고체 알갱이들과 근접해 있으므로서 구성된다. 이러한 분체의 유동은 우리 주위에서 쉽게 관찰할 수 있는데, 손가락사이를 타고 흐르는 모래에서부터 눈사태등의 일반적인 자연현상과 화학, 페인트, 유리, 건축분야, 광물체집중의 공정에서도 나타난다.

위에서 나열한 많은 공학적 처리과정에 대한 분체 유동 해석의 요구로 인해서 일찍부터 많은 연구가 수행되어져왔다. 분체유동해석은 크게 두가지 모델에 기초해서 발전해 왔는데, continuum 모델과 discrete 모델이다. Continuum 모델은 일반적인 유체의 유동에 기초하여 분체유동을 해석하고자 하는 방법으로

서, Haff[1]의 연구처럼 유동을 비압축성이라고 가정 하므로써 유체유동방정식의 해석에 사용되는 N-S방정식과 유사한 방정식을 사용하여 해석하는방법과 Savage and Jeffrey[2], Lun et al[3], Jenkins and Savege[4]등과 같이 밀집한 가스의 분자운동과 충돌 과정에서 발생하는 에너지의 소산을 가진 입자의 불규칙한 운동의 상사성에 기초하여 고전적인 운동법칙을 적용, 방정식을 유도함으로써 압축성 유동의 성질도 해석할수 있게 한 방법등이 있다. 그러나 이러한 방법들은 복잡한 수식들과 다루기 어려운 경계조건 그리고 실험치와의 불일치와 같은 문제점을 가지고 있으며, 현재까지는 구형입자의 모델링의 해석에 한정되어 있다.

이와 반대로 discrete 모델은 이론적으로는 매우 간단하지만 해석입자의 양에 따른 엄청난 계산속도와 저장공간을 요구하는 단점이 있다.

분체유동을 해석하기 위한 Discrete element simulations은 1956년 Alder와 Wainwright[5]에 의해 molecular dynamics란 이름으로 처음 발표되었으며,

1. 학생회원, 영남대학교 대학원 기계공학부
2. 정회원, 영남대학교 기계공학부

1970년대초 Cundall[6][7]에 의해 발전되었고, 그 후 Ashurst와 Hoover[8]에 의해 밀집한 분체수송의 비평형 문제를 계산하기 위해 확장되었다.

molecular system의 에너지 보존과 상대적으로 분체 시스템의 에너지 소산은 중요한 변수로 작용하므로 bulk solid의 운동을 해석하기 위해서는 충돌손실을 실제적인 가정에 포함해야만 한다. 이러한 이유로 인하여 discrete 모델은 두가지 방법으로 구분할수 있다. 첫 번째 방법은 입자들을 매우 단단하다-hard particle-고 가정하는 것이다. 이러한 hard particle 모델은 마찰과 수직 수평의 손실계수 그리고 충돌이 진과 이후의 속도 및 회전속도에 의해 결정된다. 이러한 방법이 연속적이고 다중 충돌상태를 해석하지 못하는 반면에 두 번째 방법인 soft particle 모델은 충돌하고 있는 입자들의 간섭(overlap)을 허용하며, 시간이 진전되면서 운동방정식을 가산함으로써 새로운 상태에서의 위치와 속도를 계산한다. 일반적인 물리현상에서 볼 수 있듯이 입자의 충돌시에 발생할 수 있는 변형과 다중충돌을 고려하여, 본 연구에서는 soft particle모델을 사용하여 방정식을 구성하였다.

## 2. DEM(Discrete Element Method)

DEM은 충돌하고 있는 입자들이 포함된 시스템에 Newton의 제 2법칙을 적용함으로써 구성되며, 매 time step마다 각 입자에 작용하는 모든 힘과 moment를 구하고 각 입자의 이동방정식을 계산함으로써 각각의 입자들의 새로운 위치를 얻게된다. 본 연구에 사용된 방법은 Cundall(1979)이 제안한 방법에 기초하고 있으며, 다음과 같은 가정을 함으로써 구성된다.

(1) 시스템에 포함된 각 입자들은 inelastic하다고 가정한다.

(2) 충돌하고있는 입자들의 충돌점의 수직방향과 수평방향으로 스프링과 댐핑의 작용으로 인한 충격력이 발생한다.

(3) 각 time step은 time step동안의 속도가 일정하다고 가정할수 있도록 충분히 작아야 한다.

(4) 실제계산시에 overlap된 영역을 공유하는 입자들을 충돌하고 있다고 가정하며, 이영역을 이용하여 충격력을 계산한다

### 2.1 Contact detection

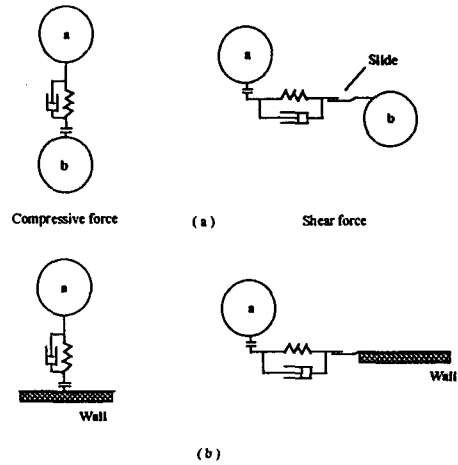


Fig.1 Assumption for DEM

DEM을 수치해석적인 관점에서 볼 때 중요한 요소중의 하나가 contact detection이다. 충돌을 확인하기 위한 가장 간단한 방법은 식 (2)를 사용하여 모든 가능한 경우를 조사하는 것 이지만, 이 경우 수행되어야하는 루틴의 수는 시스템에 포함된 입자들의 개수를  $M$ 이라 할 때  $O(M^2)$ 의 차수가 된다. 이 경우 계산시간의 대부분이 충돌확인과정에 소비되어 시간적인 손실이 발생한다. 간섭 검정을 위해서는 일반적으로 두가지 단계를 거쳐야 하는데, 첫 번째 단계는 spatial sorting으로써 검정대상 입자에 위치적으로 충돌할 가능성이 있는 입자들을 인식하는 과정이며, 두 번째 단계는 contact resolution으로써, 첫 번째 과정에서 찾아낸 충돌 가능 입자들과의 간섭을 정확하게 검정하는 것이다

본 연구에서는 spatial sorting과정으로 알고리즘의 단순화를 위해 Linked List Algorithm을 간략하게 구성하여 사용하였으며, contact resolution단계에서는 대상 입자의 모양이 원형이며 같은 크기를 가지고 있다고 가정하므로 일반적인 원의 간섭검사를 시행하였다.

#### 2.1.1. Spatial Sorting

Linked list algorithm은 시스템을 정사각형셀로 분할하여 그 주변 8개의 셀만을 검색하는 방법으로써, 이때 한번의 길이( $C$ )는 다음과 같다.

$$C_i > 2R_{\max} \quad (1)$$

여기서  $R_{\max}$ 는 가장 큰 입자의 반지름이다. 그러므로 한 개의 셀에는 1개 이상의 입자가 위치할 수 있으며, 각 셀들은 셀안에 포함된 입자의 linked list된 head pointer를 가지게 된다.

본 연구에서는 한번의 길이를  $2R$ 로 고정하며, 각 입자의 간섭검사시 주변 8개의 셀안에 포함된 입자만을 검사한다.

### 2.1.2 Contact Resolution

일정한 원형의 모양을 가진 입자들 간의 정확한 간섭은 다음과 같은 조건을 만족해야만 한다.

$$\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \leq R_1 + R_2 \quad (2)$$

여기서  $x_1, x_2, y_1$  그리고  $y_2$ 는 입자 1과 2의 좌표이며,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 각 입자들의 반지름이다.

입자와 벽과의 간섭은 벽의 모양을 직선으로 한정시켰을때, 입자의 중심에서 벽에 내린 수선의 길이가 입자의 반지름보다 작으면 충돌조건을 만족시킨다.

### 2.2 Contact Force 계산

Fig. 2에서 알수 있듯이 법선방향의 힘은 입자의 중심을 향하는 방향이 양의 방향이며, 반시계방향이 접선력의 양의방향으로 설정한다.  $e_i$ 와  $t_i$ 는 법선방향과 접선방향의 단위 vector를 나타낸다.

Fig.3 에서와 같이 입자 a와 b가 충돌하고 있을 때, 법선 방향의 단위vector와 접선방향의 단위 vector는 다음과 같이 계산된다.

$$e_i = \frac{b_i - a_i}{D} = (\cos \alpha, \sin \alpha) \quad (3)$$

$$t_i = (e_y, -e_x) \quad (4)$$

Fig. 3에서의 점  $P_a$ 에서의 상대 속도는 식 (5)와 같이 계산할 수 있다.

$$(v_{p_a})_i = ((v_a)_i - (v_b)_i) - (\dot{\theta}_a R_a + \dot{\theta}_b R_b) t_i \quad (5)$$

식 (5)의 속도를 이용하여, 법선방향의 속도와 접선 방향의 속도를 구하면 다음과 같은식을 얻는다.

$$\begin{aligned} (v_{p_a})_n &= (v_{p_a})_i e_i \\ &= ((v_a)_i - (v_b)_i) e_i - (\dot{\theta}_a R_a + \dot{\theta}_b R_b) t_i e_i \\ &= ((v_a)_i - (v_b)_i) e_i \end{aligned} \quad (6)$$

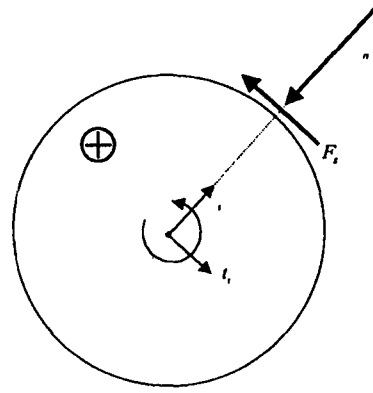


Fig.2 Sign convention for  $F_n$  and  $F_s$

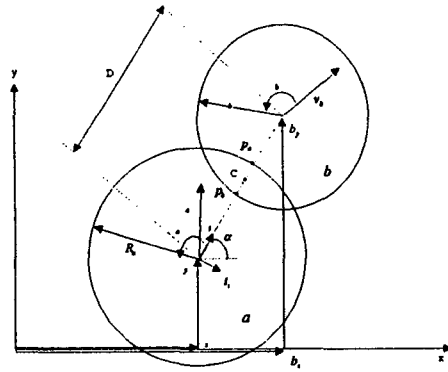


Fig.3 The force-displacement law

$$\begin{aligned} (v_{p_a})_s &= (v_{p_a})_i t_i \\ &= ((v_a)_i - (v_b)_i) t_i - (\dot{\theta}_a R_a + \dot{\theta}_b R_b) t_i t_i \quad (7) \\ &= ((v_a)_i - (v_b)_i) t_i - (\dot{\theta}_a R_a + \dot{\theta}_b R_b) \end{aligned}$$

이렇게 구한 속도를 이용하여, 이번 time step에서 법선과 접선방향으로의 움직인거리를 계산할 수 있다

$$\Delta n = (v_{p_a})_n \Delta t = [((v_a)_i - (v_b)_i) e_i] \Delta t \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Delta s &= (v_{p_a})_s \Delta t \\ &= [((v_a)_i - (v_b)_i) t_i - (\dot{\theta}_a R_a + \dot{\theta}_b R_b)] \Delta t \end{aligned} \quad (9)$$

이 거리를, force-displacement law에 적용하여, 입자 a에 작용하는 법선방향과 접선방향의 힘의 증분을 계산할 수 있다.

$$\Delta F_n = k_n \Delta n = k_n [((v_a)_i - (v_b)_i) e_i] \Delta t \quad (10)$$

$$\begin{aligned}\Delta F_s &= k_s \Delta s \\ &= k_s [(v_a)_i - (v_b)_i] t_i - (\dot{\theta}_a R_a + \dot{\theta}_b R_b) \Delta t\end{aligned}\quad (12)$$

여기서  $k_n$ ,  $k_s$ 는 법선방향과 접선방향으로의 stiffness를 나타낸다. 마지막으로 이 증분을, 이전 time step의 작용력과 합하여 다음 time step에서의 법선과 접선 방향의 힘을 계산한다.

$$F_n^N = F_n^{N-1} + \Delta F_n \quad ; \quad F_s^N = F_s^{N-1} + \Delta F_s \quad (13)$$

이 경우 접선방향의 힘이 최대마찰력 이상이 되어 비리면 입자는 sliding하게 된다. 이때 입자에 작용하는 접선력은 최대 마찰력이 된다. 최대마찰력은 다음과 같이 계산된다.

$$(F_s)_{\max} = F_n \tan \phi_\mu + c \quad (14)$$

여기서  $\phi_\mu$ 와  $c$ 는 입자들의 충돌시 각 입자들간의 마찰각들과 점착력들중 작은 것들을 선택한다. 또한, 각 입자에 작용하는 Momentum은 아래와 같이 계산된다.

$$\sum M_a = \sum F_s R_a \quad (15)$$

### 2.3 Motion

각각의 입자에 작용하는 contact force가 계산되면, Newton의 제 2법칙을 이용하여 다음 time step 동안 particle이 움직여야 할 거리와 각도를 계산할 수 있다.

$$m_a a_i = \sum (F_a)_i \quad (16)$$

$$I_a \dot{\theta}_a = \sum M_a \quad (17)$$

여기서  $I_a$ 는 moment of inertia이다.

가속도와 각가속도가 한 time step동안 일정하다고 가정하면 위 식은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$(v_a)_i^{N+1/2} = (v_a)_i^{N-1/2} + [\sum (F_a)_i / m_a] \Delta t \quad (18)$$

$$(\dot{\theta}_a)^{N+1/2} = (\dot{\theta}_a)^{N-1/2} + [\sum M_a / I_a] \Delta t \quad (19)$$

새로운 입자의 위치와 각도는 다음과 같다.

$$\begin{aligned}a_i^{N+1} &= (a_i)^N + (v_a)_i^{N+1/2} \Delta t \\ (\theta_a)^{N+1} &= (\theta_a)^N + (\dot{\theta})^{N+1/2} \Delta t\end{aligned}\quad (20)$$

### 2.4 Damping Force의 고려

입자가 충돌하는 동안에 발생하는 damping으로, 접선방향으로 Friction damping과 viscous damping이 있고 법선 방향으로는 viscous damping만이 존재한다. 이 중 Friction damping은 입자가 sliding하는 동안에  $(F_s)_{\max}$ 의 접선력에 대응하여 발생한다. viscous damping은 다시 contact damping과 global damping으로 나눌수 있는데, 그 중 contact damping은 contact하는 지점의 상대속도로 인하여 발생한다. 그런데 sliding이 발생하면 접선방향의 contact damping은 발생하지 않으므로 이러한 경우는 friction damping 하나만 적용된다. contact damping을 계산에 고려하기 위하여 damping force를 식 (18)-(19)에서의 force-sums에 포함시킨다.

$$\begin{aligned}(v_a)_i^{N+1/2} &= \\ & \{ (v_a)_i^{N-1/2} + \sum [(F_a)_i + (D_a)_i] / m_a \} \Delta t\end{aligned}\quad (21)$$

$$(\dot{\theta}_a)^{N+1/2} = (\dot{\theta}_a)^{N-1/2} + \{ \sum M_a / I_a \} \Delta t \quad (22)$$

Damping force의 계산은 아래와 같다.

$$D_n^N = c_n (v_b)_n = c_n [(v_a)_i - (v_b)_i]^{N-1/2} e_i \quad (23)$$

$$\begin{aligned}D_s^N &= c_s (v_a)_s \\ &= c_s [ ((v_a)_i - (v_b)_i)^{N-1/2} t_i - \\ & \quad (\dot{\theta}_a R_a + \dot{\theta}_b R_b)^{N-1/2} ]\end{aligned}\quad (24)$$

여기서  $c_n$ ,  $c_s$ 는 법선과 접선방향의 viscous contact damping계수이며 다음과 같이 계산된다.

$$c_n = \beta k_n, \quad c_s = \beta k_s \quad (25)$$

여기서  $\beta$ 는 proportionality constant이다.

Global damping은 입자가 운동할 때, 그 절대 속도의 영향으로 인하여 속도방향과 반대방향으로 발생하며, 이 영향을 고려할 때, 식은 다음과 같다.

$$m_a a_i = \sum [(F_a)_i + (D_a)_i] - C (v_a)_i \quad (26)$$

$$I_a \dot{\theta}_a = \sum M_a - C^* \dot{\theta}_a \quad (27)$$

여기서  $C$ ,  $C^*$ 는 global damping계수이다.

위식을 시간에 대해 중앙차분하면 다음과 같이 표현된다.

$$(v_a)_i^N = \frac{1}{2} [(v_a)_i^{N-1/2} + (v_a)_i^{N+1/2}] \quad (28)$$

$$(\dot{\theta}_a)^N = \frac{1}{2} [(\dot{\theta}_a)^{N-1/2} + (\dot{\theta}_a)^{N+1/2}] \quad (29)$$

식 (28)-(29)를 이용하여, 식 (26)-(27)은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$(v_a)_i^{N+1/2} = \left\{ (v_a)_i^{N-1/2} \left[ 1 - \frac{C}{m_a} \Delta \frac{t}{2} \right] + \sum \left\{ (F_a)_i + (D_a)_i^N \frac{\Delta t}{m_a} \right\} / \left( 1 + \frac{C}{m_a} \frac{\Delta t}{2} \right) \right\} \quad (30)$$

$$(\dot{\theta}_a)^{N+1/2} = \left\{ (\dot{\theta}_a)^{N-1/2} \left[ 1 - \frac{C^*}{I_a} \Delta \frac{t}{2} \right] + \left( \sum M_a \right)^N \frac{\Delta t}{I_a} / \left( 1 + \frac{C^*}{I_a} \frac{\Delta t}{2} \right) \right\} \quad (31)$$

Damping coefficient  $C$ ,  $C^*$ 는 질량과 moment of inertia에 비례하며, 다음과 같이 표현한다.

$$C = \alpha m_a, \quad C^* = \alpha I_a \quad (32)$$

여기서  $\alpha$ 는 global damping coefficient이다. Global damping coefficient식을 뒷식에 대입하면 다음과 같은 최종식이 얻어진다.

$$(v_a)_i^{N+1/2} = \left\{ (v_a)_i^{N-1/2} \left[ 1 - \alpha \Delta \frac{t}{2} \right] + \sum \left\{ (F_a)_i + (D_a)_i^N \frac{\Delta t}{m_a} \right\} / \left( 1 + \alpha \frac{\Delta t}{2} \right) \right\} \quad (33)$$

$$(\dot{\theta}_a)^{N+1/2} = \left\{ (\dot{\theta}_a)^{N-1/2} \left[ 1 - \alpha \Delta \frac{t}{2} \right] + \left( \sum M_a \right)^N \frac{\Delta t}{I_a} / \left( 1 + \alpha \frac{\Delta t}{2} \right) \right\} \quad (34)$$

### 2.5 Time Step의 계산

계산에 이용되는 time step은 critical time step 보다 작아야만 수치해석적 방법에서 안정성을 보장할 수 있다.

본 연구에 이용되는 critical time step 계산법은 Cundall(1978)에 의해 제안되었으며, 그 식은 다음과 같다.

$$\Delta t_{critical} = 2\sqrt{m/k} \quad (35)$$

위 식은 ground에 연결된 질량  $m$ 과 stiffness  $k$ 인

스프링의 single D.O.F. system 모델을 기초로 유도되었다.

현재의 코드에서 사용되는 time step은 식 (35)를 이용하여 계산한 time step에 적당한 safe factor를 곱하여 사용한다.

## 3. 계산결과

DEM을 사용한 분체 유동 해석 코드를 검사하기 위해 다음과 같은 예제문제를 살펴보았다.

### 3.1 Collapse 문제

시스템은 4개의 벽으로 둘러싸여 있으며, 초기에 1691개의 입자로 구성된 분체 구조물을 만들어놓고 위쪽 중앙에서 입자의 지름길이의 간격을 두고 하나의 입자를 낙하시킬 때 발생하는 구조물의 파괴 현상을 살펴보기 위한 문제이다. time step은 0.000016초이며 입자들간의 stiffness와 벽과 입자간의 stiffness는 같은 재질로 가정하여 같게 주었다. 계산을 중지할때의 입자의 개수는 약900개 정도가 되며 그 때의 시간은 30초이다. 입자의 물성치와 충돌 및 damping계수는 표 (1)에 나타나 있다.

Stiffness of norma	1e5
Stiffness of shear	1.5e5
$\tan \phi_\mu$ -wall	0.17
$\tan \phi_\mu$ -particle	0.45
Proportionality const	10.
Global damping coeff	0.1
Acceleration of gravity	9.8

Table.1 Property

### 3.2 Cascade 문제

시스템을 둘러싸는 4개의 벽과 분체의 유동을 유도하는 5개의 벽으로 구성되어 있다. 입자의 초기속도를 x방향으로 1m/s로 설정하기 위해 입자가 분출되는 입구쪽에 가상의 움직이는 벽을 만들었다. time step과 입자의 물성치 그리고 계산에 필요한 계수들은 예제 1과 같이 설정하였다.

## 4. 결 론

본 연구는 현재 진행중인 연속체적인 관점에서 바라본 분체유동 해석결과를 검증하기 위한 과정으로써 수행되었으며, DEM(Discrete Element Method)을 이용하여 균일하고 비탄성인 disc의 2차원 분체유동 해석코드를 개발하였다. Force-displacement law와 Newton의 제 2법칙을 사용하여 충돌시에 발생하는 Force와 다음 time step에서의 새로운 위치를 계산

하였고, 충돌검사시 속도의 향상을 위해 Linked-list 알고리즘을 간략화하여 사용하였다. 그리고 두가지 간단한 예제를 풀어봄으로써 개발된 코드를 검사하였다.

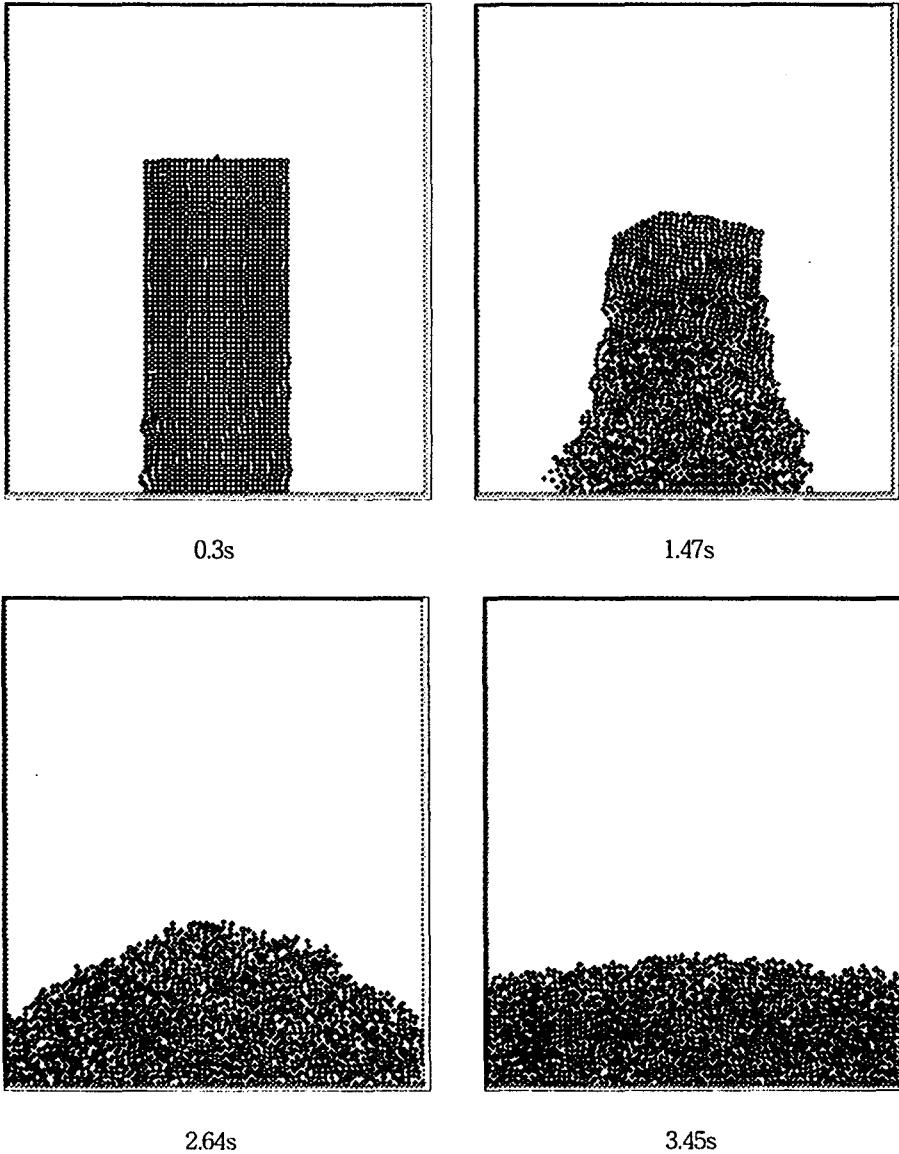
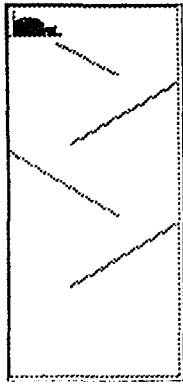
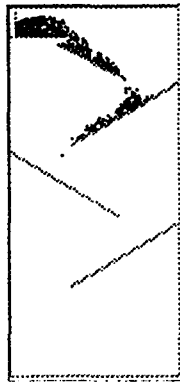


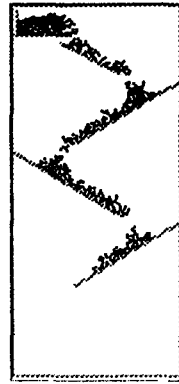
Fig5. Collapse of particle tower



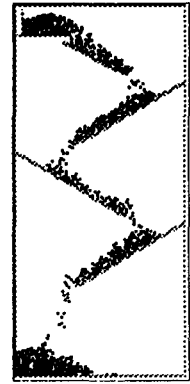
(a) 3.3s, N:125



(b) 10.6s, N:324



(c) 19.3s, N:582



(d) 30s, N:900

Fig.6 Particle cascade simulation.

### 참고문헌

[1] P. K. Haff, "Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon", *J. Fluid Mech.* vol. 134 pp.401-430 (1983)

[2] S. B. Savage, D. J. Jeffrey, "The Stress tensor in a granular flow at high shear rates", *J. Fluid Mech.* vol. 110, pp. 255-272 (1981)

[3] K. K. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey, N. Chepurmy, "Kinetic theories for granular flow : inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield", *J. fluid Mech.* vol. 140 pp. 223-256 (1984)

[4] J. T. Jenkins, S. B. Savage, "A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles", *J. Fluid Mech.*, vol. 130. pp.187-202 (1983)

[5] B. J. Alder, T. E. Wainwright, "Statistical mechanical theory of transport property" , *Proceedings of the International Union of Pure and Applied Physics, Brussels*, (1956)

[6] P. A. Cundall "A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems", *Proc. Symp. Int. Soc. Rock Mech.* Nancy 2, No. 8 (1971)

[7] P. A. Cundall, O. D. L. Strack, "A discrete numerical model for granular assemblies", *Geotechnique*, vol.29, No.1 pp.47-65 (1979)

[8] W. T. Ashurst, W. G. Hoover, "Argon shear viscosity via a Lennard-Jones potential with equilibrium and nonequilibrium molecular dynamic." *Phys. Rev. Lett.* vol. 31, pp. 206 (1973)

[9] Y. Lan, A. D. Rosato, "Macroscopic behavior of vibrating beds of smooth inelastic spheres", *Phys. Fluids*, vol. 7, pp. 1818-1831 (1995)

[10] M. Muller, S. Luding, H. J. Herrmann, "Simulations of vibrated granular media in two and three dimensional systems", in: *Friction, Arching and Contact dynamics*, World Scientific, Singapore, (1997)

[11] S. Luding, "Collisions & contacts between two particles" , in: *Physics of dry granular Media*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, (1998)

[12] H. J. Herrmann, S. Luding, "Review Article: Modeling granular media on the computer", *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol.10(4), p. 189-231, (1998)