

미세입자분산 고분자 현탁액의 3차원 직접수치해석

황 옥 렬,^{*1} M.A. Hulsen,² H.E.H. Meijer²

DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF PARTICLE SUSPENSIONS IN A POLYMERIC LIQUID

W.R. Hwang,^{*1} M.A. Hulsen² and H.E.H. Meijer²

We present a new finite-element scheme for direct numerical simulation of particle suspensions in simple shear flow of a viscoelastic fluid in 3D. The sliding tri-periodic representative cell concept has been combined with DEVSS/DG finite element scheme by introducing constraint equations along the domain boundary. Rigid body motion of the freely suspended particle is described by the rigid-shell description and implemented by Lagrangian multipliers on particle boundaries. We present the bulk rheology of suspensions through the numerical examples of single-, two- and many-particle problems, which represent a large number of such systems in simple shear flow. We report the steady bulk viscosity and the first normal stress coefficient, which show shear-thickening behavior for both properties.

Key Words : 현탁액(Suspension), 직접수치해석(DNS), 분산된 라그랑주 승수법(Distributed Lagrangian Multiplier:DLM), 유변학(Rheology), 점탄성(Viscoelasticity)

1. 서 론

본 연구는 미세입자가 분산된 현탁액(suspension)의 유동을 해석하기 위한 직접수치해석기법의 개발을 목표로 하며, 이를 통한 현탁액의 물성예측 및 미세구조의 해석을 궁극적인 연구목표로 한다. 특히, 매질(medium) 유체가 뉴턴 유체 뿐 아니라 유변학적으로 복잡한 고분자 유체인 경우를 주 연구대상으로 한다. 고분자 현탁액은 점탄성으로 표현되는 고분자 자체의 복잡한 유변학적 물성과 입자와 유체, 입자와 입자 사이의 수력학적 상호작용(hydrodynamic interaction)으로 인하여 매우 복잡한 거동을 보이게 된다. 고분자 현탁액에 대한 연구는 고무가의 기능성 엔지니어링 플라스틱 재료의 개발이나 페인트, 화장품, 제약공정 등의 산업적 관점에서 많은 유용성을 가질 뿐 아니라, 학문적으로도 물리적으로 이해되지 않고

있는 복잡다상유동계 (complex multiphase flow)로써 매우 중요한 주제이다. 일례로 입자분산 고분자 유동과 결정화의 상호작용을 들 수 있다. 미세입자를 포함한 결정성 고분자는 사출 성형공정에서 금형내부의 저전단영역에서도 유동에 의한 결정화(flow-induced crystallization)가 일어나며, 이는 입자와 입자가 부딪혀서 멀어질 때 형성되는 강한 신장유동이 고분자의 배향을 증진시키기 때문이다[1]. 이러한 고분자의 비정방(anisotropic) 결정화는 최종제품의 인성을 획기적으로 향상시킬 수 있다[2].

본 연구의 목적은 미세입자가 포함된 고분자유체 기반의 현탁액 유동에서 일어나는 현상을 정확히 이해하기 위해서, 이전 연구[3,4]에서 개발된 2차원 유동에 대한 수치해석기법을 확장하여, 고분자의 비선형 점탄성과 입자와 유체의 상호작용을 고려한 3차원 직접수치해석기법(DNS)을 개발하고, 이를 이용하여 그러한 현탁액의 진단률에 대한 점성의 변화 및 수직항력의 변화 등 유변학적 물성을 예측하는 것이다.

본 논문은 다음과 같은 차례로 구성되어 있다. 2절에서는 미끄럼-삼방향 주기적 경계조건과 유체 및 입자영역을 수력학적 상호작용을 고려하여 모델링 하는 기법에 대해 서술하고, 3절에서는 이를 약형(Weak form)을 이용하여 유한요소 수식화를 유도하며, 미끄럼-삼방향 주기적 경계조건이 적용된 유

접수일: 2009년11월02일, 수정일: 2009년12월 21일,

게재확정일: 2009년 12월 24일

1 경상대학교 기계항공공학부, 항공기부품기술연구소

2 Materials Technology, Eindhoven University of Technology, The Netherlands

* Corresponding author, E-mail: wrhwang@gnu.ac.kr

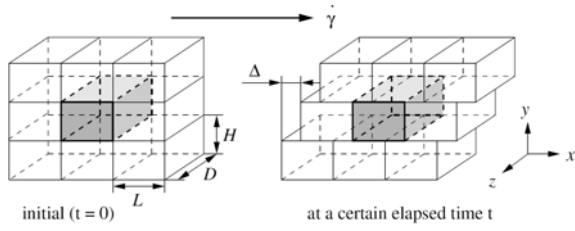


Fig. 1 A sliding tri-periodic cell in simple shear flow

닛셀 문제에서 일반적으로 평균응력텐서(bulk stress tensor)의 효과적인 계산기법에 대해 서술한다. 4절에서는 수치적 구현(implementation) 기법에 대해 서술하며, 5절에서는 뉴턴유체와 고분자 유체에 분산된 미세입자를 포함한 현탁액에 대한 계산 결과를 제시하며, 마지막으로 6절에서 결론과 향후 연구방향에 대해 간략히 기술한다.

2. 모델링

2.1 문제의 정의

본 연구에서는 점탄성 고분자 유체의 구성방정식을 이용하여 단순전단유동(simple shear flow) 하에서 구형입자가 자유로이 떠있는(freely suspended) 현탁액을 연구의 대상으로 한다. 입자는 수 마이크로(μm)의 크기를 다루기 때문에 유체분자의 확률적 운동에 의해 입자에 가해지는 힘은 무시한다. 즉 입자의 브라운 운동은 무시되며(non-Brownian), 입자와 유체사이의 힘은 수력학적 상호작용(hydrodynamic interaction)만을 고려한다. 작은 크기의 입자가 점도가 큰 고분자 유동에 분산된 현탁액의 경우 입자와 유체의 관성 또한 무시될 수 있다.

본 연구에서는 상대적으로 적은 수의 입자를 포함한 유동을 계산하고도 무수한 입자를 포함한 현탁액의 단순전단유동을 대표할 수 있도록 미끄럼-삼방향 주기적 계산영역(sliding tri-periodic cell)을 사용한다. 이는 본 연구자가 분자동력학 계산에서 흔히 사용되는 Lees-Edward 경계조건을 연속체 문제로 확장시켜 적용한 2차원에서 미끄럼-양방향 주기적 경계조건(sliding bi-periodic frame)의 3차원 확장이다[1,3,4].

Fig. 1과 같이 초기에 무한한 공간 상에 규칙적인 격자를 배열한 후 전단유동을 가하면, 격자들이 이루는 행이 다른 행과 미끄러지기 시작한다. 미끄럼량(amount of slide: Δ)는 현재의 시간(elapsed time) t , 전단변형률 $\dot{\gamma}$, 격자의 높이 H 에 의해 결정된다[4].

$$\Delta = \dot{\gamma} H t \tag{1}$$

이러한 규칙적 격자 중의 하나(Fig. 1에서 짙게 표시된 격

자)를 미끄럼-삼방향 주기적 계산영역이라고 설정하며, 해석상의 단위셀로 정의한다. 본 연구에서는 x 방향을 전단유동방향, y 방향을 구배(gradient) 방향, z 방향을 중립(neutral) 방향으로 정의하며, 단위셀에 대하여 $+x$ 방향의 경계면을 Γ_1 , $-x$ 방향의 경계면을 Γ_2 , $+y$ 방향의 경계면을 Γ_3 , $-y$ 방향의 경계면을 Γ_4 , $+z$ 방향의 경계면을 Γ_6 , $-z$ 방향의 경계면을 Γ_5 로 각각 정의한다. 유동장의 속도를 \mathbf{u} , 경계면에서의 응력벡터(traction force)를 \mathbf{t} 로 표현하면 각 경계에서는 유동의 연속성과 응력벡터의 평형을 의미하는 주기적 경계조건을 만족하게 된다. 유동방향과 중립방향으로는 일반적인 주기적 경계조건을 적용할 수 있다.

$$\mathbf{u}(0, y, z) = \mathbf{u}(L, y, z), \mathbf{t}(0, y, z) = -\mathbf{t}(L, y, z) \tag{2a,b}$$

$$\mathbf{u}(x, y, D) = \mathbf{u}(x, y, 0), \mathbf{t}(x, y, D) = -\mathbf{t}(x, y, 0) \tag{3a,b}$$

그러나, 유동에 수직인 방향인 Γ_3 와 Γ_4 의 경우 주기적 경계조건은 단순전단유동에 의한 시간에 따른 미끄럼을 반영하여 다음과 표현될 수 있다.

$$\mathbf{u}(x, H, z; t) = \mathbf{u}(\{x - \dot{\gamma} H t\}^*, 0, z; t) + \mathbf{f} \tag{4a}$$

$$\mathbf{t}(x, H, z; t) = -\mathbf{t}(\{x - \dot{\gamma} H t\}^*, 0, z; t) \tag{4b}$$

여기서 $\mathbf{f} = (\dot{\gamma} H, 0, 0)$ 이며 윗 면과 아래면 사이의 속도차($\dot{\gamma} H$)를 보정하는 항이며, $\{\cdot\}^*$ 로 표시된 연산자는 유동에 수직인 방향의 경계의 길이 L 로 나누어 남은 나머지를 표현하며, $\{1.7L\}^* = 0.7L$, $\{-1.7L\}^* = 0.3L$ 의 값을 갖는다[3]. 이렇게 정의된 계산영역인 단위셀은 무수히 많은 입자가 분산된 현탁액 유동의 관찰지점에서 평균속도로 움직이는 관찰영역(observation cell or window)의 역할을 한다.

2.2 유체와 입자영역의 모델링

Fig. 2는 미끄럼-삼방향 주기적 단위셀 내에 다수의 입자를 포함한 경우의 예를 보여준다. 입자 내부를 포함한 단위셀 전체의 계산영역을 Ω 라 하고, 그 경계를 $\Gamma = \cup_{j=1}^6 \Gamma_j$ 로 표현하며, i 번째 입자 P_i 에 대해 반지름 R_i , 입자중심 \mathbf{X}_i , 입자의 병진속도 \mathbf{U}_i , 입자의 회전속도 $\boldsymbol{\omega}_i$ 를 정의하며, 편의상 입자영역은 $P = \cup_{i=1}^N P_i$ 로 표기한다 ($i = 1, \dots, N$).

Fig. 2 다수의 입자를 포함한 미끄럼-삼방향 주기적 단위셀

유체영역은 전체 계산영역에서 입자가 차지하고 있는 영역

을 제외한 부분으로 정의되며($\Omega \setminus P$) 다음과 같이 차례로 비압축성 조건, 운동량 보존, 구성방정식 및 고분자 응력의 진화방정식으로 표현된다.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{5}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\eta_s \mathbf{D} + \boldsymbol{\tau}_p \tag{7}$$

$$\lambda \dot{\boldsymbol{\tau}}_p - \nabla \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}_p - \boldsymbol{\tau}_p \cdot (\nabla \mathbf{u})^T + \boldsymbol{\tau}_p = 2\eta_p \mathbf{D} \tag{8}$$

여기서 각각 \mathbf{u} , $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{D} , p , $\boldsymbol{\tau}_p$, \mathbf{I} , η_s , η_p , λ 는 각각 속도벡터, 응력텐서, 변형률텐서(rate-of-deformation tensor), 압력, 고분자 응력(polymer stress), 항등텐서(identity tensor), 뉴턴유체점도(solvent viscosity), 고분자의 점도(polymer viscosity), 완화시간(relaxation time)이다. 식 (8)은 점탄성 고분자응력의 진화방정식 중 가장 간단한 형태의 Oldroyd-B 모델이다[5]. 유체영역의 경계조건은 단위셀의 경계인 Γ 에 가해지는 경계조건과 입자의 표면에서 가해지는 경계조건으로 나뉘며 단위셀에 가해지는 조건은 식 (2-4)이며, 입자의 표면에서는 유체는 입자와 같은 속도로 움직이므로 다음의 조건을 만족한다.

$$\mathbf{u} = \mathbf{U}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times (\mathbf{x} - \mathbf{X}_i), \text{ on } \partial P_i \tag{9}$$

입자가 차지하고 있는 영역은 입자와 유체사이의 상호작용에 의해 결정되는 강체운동을 하여야 한다. 본 연구에서는 강체껍질조건(rigid-shell description)이라 할 수 있는 입자를 얇은 강체로 둘러싸인 유체로 정의한다. 유체와 입자의 관성이 없기 때문에 강체로 둘러싸인 입자는 실제 강체와 동일한 운동을 한다. 특히, 강체내의 유체를 유체영역과 같은 유체를 사용할 경우 입자와 유체의 경계를 제외한 모든 영역에서 유체로 볼 수 있어 재격자 과정(remeshing)을 피할 수 있는 수치해석상의 강점이 있다. 따라서, 입자영역의 모델링은 유체영역의 지배방정식인 식 (5-8)과 입자경계에서 적용되는 속도의 연속조건(식 9)을 그대로 적용함으로써 이루어 질 수 있다.

관성이 없고 다른 외력이 없다면, 유체내에 자유로이 떠서(freely-suspended) 흐르는 입자에 작용하는 항력(drag force)과 토크(torque)는 모두 상쇄되어야 한다. 즉, 유체가 입자에 작용하는 응력은 다음과 같은 힘의 평형을 만족해야 한다.

$$\mathbf{F} = \int_{\partial P_i} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS = \mathbf{0}, \quad \mathbf{T} = \int_{\partial P_i} (\mathbf{x} - \mathbf{X}_i) \times \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS = \mathbf{0} \tag{10}$$

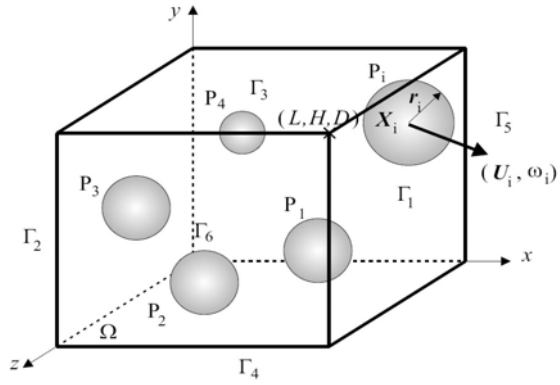


Fig. 2 A number of particles in a sliding tri-periodic cell

식 (10)을 유체의 지배방정식, 입자의 지배방정식과 함께 음적으로(implicitly) 풀게 되면, 자유로이 떠서 흐르는 입자의 속도를 얻을 수 있다. 입자의 강체운동을 구하면, 입자의 궤적은 입자의 속도를 시간에 대해 적분하여 얻을 수 있다. 입자와 유체의 상호작용을 음적으로 푸는 기법을 결합된 약형(combined weak formulation)이라고 하며, Hu [6]에 의해 처음 비정렬 적합격자계를 이용한 ALE(Arbitrary Lagrangian Eulerian) 기법의 입자계 해석에 사용되었고, Glowinski 등[7]에 의해 비정렬 격자계의 복잡성을 피하기 위해 정렬격자계 상에서 분산된 라그랑주 승수기법(DLM)으로 확장되었다.

3. 수식화

3.1 약형

속도와 압력을 기본변수로 하는 Galerkin 기법에 바탕한 유한요소 수식화(velocity-pressure formulation)를 기본으로 (i) 미끄럼-삼방향 경계조건을 매끄럽게 처리하기 위해 모르타르 요소법(mortar element method)을 이용하며[4,8], (ii) 입자와 유체간의 상호작용의 음적(implicit) 처리를 위해 사영역법을 사용한다[7,9]. 또한, (iii) 쌍곡선형(hyperbolic) 행렬식을 구성하는 점탄성 유동의 해를 안정화하기 위해 DEVSS법을 도입하고 [10,11], (iv) 유동에 의한 물질전달항이 중요한 (convection-dominant) 점탄성 고분자 응력의 진화방정식을 안정적으로 풀기 위해 DG(discontinuous Galerkin)법을 도입한다[11,12].

먼저, 미끄럼-삼방향 경계조건을 모르타르요소법을 이용해 처리하기 위해 다음과 같이 라그랑주 승수(Lagrangian multiplier) $\lambda^h, \lambda^v, \lambda^d$ 를 다음과 같은 함수공간(function space)에서 정의한다.

$$\lambda^h \in L^2(\Gamma_2), \quad \lambda^v \in L^2(\Gamma_3), \quad \lambda^d \in L^2(\Gamma_6) \tag{11}$$

이 때 라그랑쥐 승수는 물리적으로 주기적 경계면에 작용하는 응력벡터(traction force)를 의미한다. 둘째, 입자와 유체간의 수력학적 상호작용의 음적처리(implicit treatment)를 위하여, Hu[6]에 의해 개발된 결합된 약형(combined weak formulation)을 도입하고, 정규격자에서 입자와 유체의 상호작용을 적용하기 위해 Glowinski[7] 등에 의해 개발된 유사영역법의 일종인 분산된 라그랑쥐 승수법(distributed Lagrangian multipliers: DLM)을 적용한다. i 번째 입자 P_i 의 표면에 정의되는 라그랑쥐 승수는 $\lambda_i^p \in L^2(\partial P_i)$ 로 표현한다. 셋째, 쌍곡선형의 점탄성 유동의 해의 안정성(ellipticity)을 확보하기 위해 DEVSS(discrete elastic viscous stress splitting)기법을 적용하며, 이를 위해 추가적인 텐서변수인 점성고분자응력(viscous polymer stress) \mathbf{e} 를 아래와 같이 정의한다.

$$\mathbf{e} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (12)$$

DEVSS기법은 추가적인 점성고분자 응력항을 운동량보존식에 대입함으로써 기존의 뉴턴유체의 점성 η_s 에 η_p 가 더해져 행렬의 대각선항의 값이 커져 해의 안정성이 증가하게 된다. 마지막으로 식 (8)의 고분자의 진화방정식에 포함된 대류항(convection term)을 안정적으로 풀기위해 DG법을 적용한다. DG법은 불연속 보간(discontinuous interpolation)을 사용하고 행렬을 요소단위로 풀기 때문에 행렬의 크기가 작아져 빠르게 해를 구할 수 있는 장점이 있으며, 특히 본 연구와 같이 정규격자 내에 불규칙적으로 입자가 분산된 경우는 입자경계를 따라 모든 해가 불연속적으로 변화하기 때문에 불연속보간법을 쓰는 DG법이 안정적으로 적용될 수 있다. 결과적으로 다음과 같은 약형(Weak form)을 얻을 수 있다.

시간 $t \geq 0$ 에 대해, 모든 가능한 시험함수 $(\mathbf{v}, q, \mathbf{S}_p, \mathbf{e}_s, \mu^h, \mu^v, \mu^d, \mu^{p,i}, \mathbf{V}_i, \chi_i)$ 에 대해 아래의 조건을 만족하는 속도장, 압력장, 고분자 응력장, 점성고분자 응력장, 각 라그랑쥐 승수 및 입자의 병진 및 회전속도의 해 $(\mathbf{u}, p, \boldsymbol{\tau}_p, \mathbf{e}, \lambda^h, \lambda^v, \lambda^d, \lambda^{p,i}, \mathbf{U}_i, \boldsymbol{\omega}_i)$ 를 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} & - (p, \nabla \cdot \mathbf{v})_{\Omega} + (2\eta_0 \mathbf{D}[\mathbf{u}], \mathbf{D}[\mathbf{v}])_{\Omega} - (\mathbf{e}, \mathbf{D}[\mathbf{v}])_{\Omega} \\ & + (\lambda^{p,i}, \mathbf{v} - \{\mathbf{V}_i + \boldsymbol{\chi} \times (\mathbf{x} - \mathbf{X}_i)\})_{\partial P_i} \\ & + (\lambda^h, \mathbf{v}(0, y, z) - \mathbf{v}(L, y, z))_{\Gamma_2} + (\lambda^d, \mathbf{v}(x, y, 0) - \mathbf{v}(x, y, D))_{\Gamma_5} \\ & + (\lambda^v, \mathbf{v}(x, H, z; t) - \mathbf{v}(\{x - \dot{\gamma} H t\}^*, 0, z))_{\Gamma_3} = -(\boldsymbol{\tau}_p, \mathbf{D})_{\Omega}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$(\mathbf{q}, \nabla \cdot \mathbf{u})_{\Omega} = 0 \quad (14)$$

$$-(\mathbf{e}, \mathbf{D}[\mathbf{u}])_{\Omega} + (\mathbf{e}_s, \mathbf{e})_{\Omega} / 2\eta_p = 0 \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{S}, \lambda \dot{\boldsymbol{\tau}}_p - \nabla \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}_p - \boldsymbol{\tau}_p \cdot (\nabla \mathbf{u})^T + \boldsymbol{\tau}_p - 2\eta_p \mathbf{D}) \\ & - \lambda \sum_e \int_{\Gamma_e^{\text{in}}} \mathbf{S} : (\boldsymbol{\tau}_p - \boldsymbol{\tau}_p^{\text{ext}})(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma = 0, \end{aligned} \quad (16)$$

$$(\mu^h, \mathbf{u}(0, y, z) - \mathbf{u}(L, y, z))_{\Gamma_2} = 0 \quad (17)$$

$$(\mu^v, \mathbf{u}(x, H, z; t) - \mathbf{u}(\{x - \dot{\gamma} H t\}^*, 0, z))_{\Gamma_3} = (\mu^v, \mathbf{f})_{\Gamma_3} \quad (18)$$

$$(\lambda^d, \mathbf{v}(x, y, 0) - \mathbf{v}(x, y, D))_{\Gamma_5} = 0 \quad (19)$$

$$(\lambda^{p,i}, \mathbf{u} - \{\mathbf{U}_i + \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{X}_i)\})_{\partial P_i} = 0, \quad \forall i = 1, \dots, N. \quad (20)$$

식 (13)에서 $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ 로써 영점점도(zero-shear viscosity)이며, 식 (16)에서 \mathbf{n} 은 요소 e 의 경계 중 유체가 들어오는(inflow) 경계인 Γ_e^{in} 에서의 바깥 방향의 수직벡터이다 (즉, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0$). $\boldsymbol{\tau}_p^{\text{ext}}$ 은 유체가 들어오는 경계의 바로 바깥에서 정의되는 고분자 응력텐서이다. 식 (18)에서 우변의 \mathbf{f} 는 $(\dot{\gamma} H, 0, 0)$ 이다. 식 (13-20)에서 사용된 함수공간에서의 내적 $(\cdot, \cdot)_{\Xi}$ 은 다음과 같은 $L^2(\Xi)$ 공간에서의 표준내적이다.

$$(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{v})_{\Xi} = \int_{\Xi} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x}$$

식 (13-20)은 각각 운동량보존에 대한 약형, 유체의 비압축성에 대한 약형, 점성고분자응력의 정의에 대한 약형, 고분자 응력의 진화방정식에 대한 약형, 수평방향(x축)의 주기적 경계조건에 대한 약형, 수직방향(y축)의 미끄럼 주기적 경계조건에 대한 약형, 깊이방향(z축)으로의 주기적 경계조건에 대한 약형, 입자경계의 유체에 입자와 같은 속도로 움직이도록 하는 조건에 대한 약형이다. 식 (13)과 (20)에서 보듯이 입자 경계에서의 강제운동은 제한조건(constraint)로 약형에 추가되었으며, 각 방향으로의 주기적 경계조건도 같은 방식으로(식 13,17,18,19) 제한조건으로 약형에 포함되었다. 식 (17-19)의 주기적 경계조건은 계산영역의 경계에서 상대적인 속도의 크기만을 정해주기 때문에, 왼쪽경계(Γ_2)의 중심에 속도 0을 강제적으로 가하여 단순전단유동을 구현하였다. 또한, 주기적 경계조건으로 인해 계산영역 내의 압력분포 또한 상대적인 크기만 결정되기 때문에, 본 연구에서는 경계면에서 정의되는 라그랑쥐 승수의 경계면에 수직한 성분의 하나의 값을 강제적으로 정하여 압력분포의 기준값이 되도록 설정하였다.

미끄럼 삼방향 주기적 경계조건을 도입한 계산영역이 대표영역(representative cell)이 되기 위해서는 입자가 경계를 통과

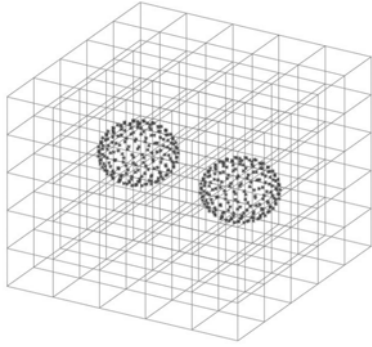


Fig. 3 Discretizations of fluid domain and particle boundaries

하며 여러 작은 조각으로 나뉘어지는 것이 정확하게 표현되어야 한다. 이 경우 식 (13)의 운동량보존식과 식 (20)의 강제 조건이 수정되어야 한다. 이에 대한 자세한 처리기법은 본 논문에서는 다루지 않으나 이전 논문[3,4]의 기법과 유사함을 밝힌다.

3.2 평균응력텐서

일반적으로 유체의 부피를 V_f , 입자가 차지하는 부피를 V_p , 전체의 부피를 $V (= V_f + V_p)$ 로 놓으면, 평균응력(bulk stress) $\langle \sigma \rangle$ 는 다음과 같이 표현된다[4,13,14].

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \sigma dV = \frac{1}{V} \int_{V_f} \sigma dV + \frac{1}{V} \int_{V_p} \sigma dV \\ &= -PF + 2\eta \langle D \rangle + \tau_p + \frac{1}{V} \int_{\partial P} \mathbf{x} t d\Gamma \end{aligned} \quad (21)$$

식 (21)의 전통적인 평균응력에 대한 계산은 응력에 대한 입자의 영향에 관한 항을 계산할 때 입자경계에서의 정확한 적분이 필요하다. 본 연구와 같은 정규격자를 사용하는 유동장에서는 입자경계에서의 정확한 적분은 쉽지 않기에, 본 연구에서는 주기적 경계조건에 사용된 라그랑쥐 승수가 응력벡터(traction force)와 물리적으로 같다는 점을 이용하여 입자가 포함된 계산영역에서의 평균응력을 다음과 같은 계산영역 경계에서의 경계적분으로 나타내었다[3,4].

$$\langle \sigma \rangle \cong \frac{1}{V} \int_{\Gamma} \mathbf{x} t d\Gamma \quad (22)$$

입자가 계산영역에 걸쳐있는 경우에는 평균응력의 계산에 추가적인 수정이 필요하며 이는 이전 논문의 처리방식과 유사함을 밝힌다[3,4].

4. 이산화와 수치적 구현

4.1 공간변수의 이산화

Stokes 유동의 유한요소해석에서 일반적으로 요구되는 Inf-sup 조건을 만족하는 삼차원 요소 중 $Q_2 - P_1^d$ 요소라고 불리는 속도에 대해 삼방향 2차(continuous tri-quadratic) 보간을 사용하고, 압력에 대해서는 선형 1차 불연속(linear discontinuous) 보간을 사용하는 요소를 사용하였다. 식 (16)의 고분자응력의 진화방정식에 사용된 DG는 요소단위로 문제를 풀기 때문에 고분자 응력 τ_p 의 보간에는 불연속 삼방향 1차 보간(discontinuous tri-linear) 보간을 사용하였다[9]. 또한 DEVSS기법에 사용된 추가적인 점성고분자응력(viscous polymer stress tensor) \mathbf{e} 의 보간은 일반적인 DEVSS/DG기법에서 활용되는 연속 삼방향-선형 보간(continuous tri-linear interpolation)을 사용하였다[11].

약형 식 (13)과 (20)에서 보듯이, 본 연구에서는 강체껍질 조건(rigid shell description)을 적용하기에 입자의 이산화는 입자의 경계에서만 필요하다. 입자경계에서의 적분을 계산하기 위해 가장 간단한 방법인 point collocation 기법을 사용하기로 하였다. Point collocation 기법은 N_p 개의 점을 ‘고르게’ 입자표면에 분산시켜야 하는데, 이를 위해 Spiral point set 기법이라고 불리는 explicit 한 기법을 활용하였다[15]. Fig. 3에는 본 연구에 사용된 정규격자와 입자의 이산화의 예를 보였다.

식 (2a,b-4a,b)에 나타낸 바와 같이 주기적 경계에서는 속도의 연속성과 응력벡터(traction force)의 평형조건을 만족해야 한다. 이 중 식 (2a,b)와 식 (3a,b)은 각각 수평방향(x방향)과 깊이방향(z방향)으로의 주기적 경계에서 만족해야 하는 식이며, 본 연구의 정규격자와 같이 기하학적으로 일치하는 요소(conforming element)에 대해서는 각 절점에서의 collocation 기법(nodal collocation)으로 가장 정확하게 계산할 수 있다. 식 (4a,b)에서 정의된 미끄러짐 주기성(sliding periodicity)은 시간에 따라 기하학적으로 서로 미끄러지며 일치하지 않는 요소(time-dependent/non-conforming element)에서 수행되는 적분이기 위해 훨씬 복잡한 과정을 통해 수행된다. 본 논문에서는 이전 논문[3]에서 제시한 바와 같이 적분하였음을 밝힌다.

4.2 시간변수의 이산화

식 (13-20)에서 제시된 약형을 풀기위해 본 연구에서는 고분자 응력의 진화방정식(식 16)을 다른 식과 분리하는 시간적분을 사용하였다. 시간 적분법은 다음과 같이 표현된다. Step 0: (준비단계) 초기에 고분자 응력텐서를 모든 계산영역에 대해 0으로 정하고, 식 (13-15)와 식 (17-20)을 함께 풀어, 이번 시간(n번째)에서의 입자의 속도와 유동의 속도를 계산

한다.

Step 1: (입자위치예측) 이번 단계의 입자의 속도 \mathbf{U}^n 을 이용하여 다음 단계의 입자의 위치 \mathbf{X}^{n+1} 를 2차 정확성을 갖는 Adams-Bashforth 기법을 적용하여 계산한다.

Step 2: (고분자응력예측) 다음 단계에서의 고분자 응력 τ_p^{n+1} 을 식 (16)으로부터 현 단계의 유동의 속도 \mathbf{u}^n 로부터 구한다. 이 단계에서는 2차 정확성을 갖는 Adams-Bashforth 기법(AB2)을 적용하였다.

Step 3: (유동장풀이) 다음 단계의 주어진 입자의 위치 \mathbf{X}^{n+1} 와 고분자 응력텐서의 분포 τ_p^{n+1} 를 식 (13-15)와 식 (17-20)에 대입하여, 다음 단계의 유동의 속도장, 압력장, 입자의 속도, 경계에서의 라그랑쥐 승수 등 나머지 모든 해를 구한다.

Step 4: 다시 Step 1으로 돌아가 입자의 위치 예측, 고분자 응력예측, 유동장 풀이 등을 수행한다.

세 번째 단계는 상당히 많은 양의 계산을 수반하게 된다. 4.1절에서 다룬 이산화 기법을 적용하면, 산재된(sparse) 대칭행렬이 나타나며, 유체의 비압축성, 주기적 경계조건, 입자운동의 강제운동 조건이 모두 제한조건(constraint)으로 처리되어 행렬의 대각선에 0으로 이루어진 블록이 형성된다. 본 연구에서는 MPI환경에서 구동하는 병렬솔버인 MUMPS를 이용하여 행렬식 계산을 수행하였다[20]. 계산은 Intel사의 Xeon CPU (dual-core) 4개가 장착된 컴퓨터에서 수행되었으며 5.2절의 점탄성 해석의 경우 매 시간 스텝에 대해 약 1시간의 계산시간이 소요되었다.

5. 계산결과

5.1 뉴턴유체에 분산된 입자의 현탁액

Fig. 4(a-c)는 각각 입자 1개, 2개, 10개를 포함하는 미끄럼 삼방향 주기적 경계조건에서의 속도장과 압력장을 예로 제시하였다. 미끄럼 삼방향 주기적 경계조건에 의해 하나의 입자가 있어도 규칙적으로 배열된 무한히 많은 입자의 현탁액을 대표하게 된다. 유체영역은 $(L, H, D) = (1, 1, 1)$ 으로 정의되며, 격자는 $20 \times 20 \times 20$ 을 사용하였다.

Fig. 4의 결과로부터 입자의 존재에 의해 주변유동의 변화를 볼 수 있고, 입자와 입자의 상호작용이 있음을 유추할 수 있다. 이러한 유동장의 변화가 수력학적 상호작용이며 입자를 포함한 유동장의 평균응력에 영향을 주게 된다. 뉴턴유체에서는 입자분율 ϕ 에 대해 평균전단응력이 증가하며, 특히 입자분율이 작고 입자간의 상호작용을 무시할 수 있는 경우 평균응력은 $(1 + 2.5\phi)$ 에 비례한다. 평균응력에 대해서는 5.2절에서 결과를 제시하도록 하겠다. 특히 Fig. 4(b)의 두 개의 입자의 경우 전단유동에서 두 입자가 다가가며 서로 부딪히고

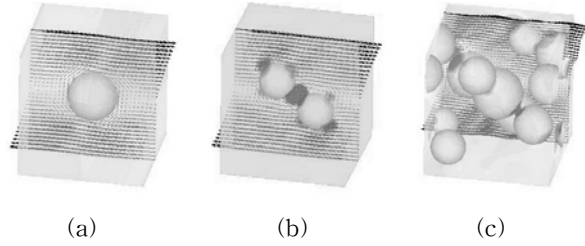


Fig. 4 Velocity and pressure distributions in a sliding periodic cell with (a) single, (b) two and (c) ten particles suspended in a Newtonian fluid

(kissing), 회전하고(tumbling), 이후에 떨어지는(separation)현상이 일어남이 잘 알려져 있고, 본 연구에서 제시하지는 않았지만, 두 입자의 궤적이 두 입자 사이의 중심점에 대해 점대칭의 해를 갖는다. Fig. 4(c)는 여러 입자가 계산영역에 포함된 경우로 본 논문에서 자세히 다루지 않았으나 입자의 일부가 계산영역의 경계면을 통과할 때 여러 부분으로 나뉘어 짐을 알 수 있으며, 이는 대표적 계산영역(representative cell)을 사용하여 유동장의 미세구조를 연구하는데 꼭 필요하다. Fig. 4(c)의 입자의 운동은 국부적으로 두 입자의 운동인 부딪히고, 회전하고, 떨어지는 상호작용으로 이루어져 있다. 본 논문에 결과를 제시하지는 않았지만, Fig. 4(c)에서 입자의 회전각속도는 $-(0.5 \pm 0.15)\dot{\gamma}$ 를 만족하며 평균값 $-0.5\dot{\gamma}$ 를 만족한다. 고립된 하나의 입자가 전단율 $\dot{\gamma}$ 하에서 $-0.5\dot{\gamma}$ 의 회전각속도를 갖는 점을 상기하면 많은 입자의 상호작용이 있더라도 평균적으로는 고립된 입자와 같은 회전속도를 갖는 점을 알 수 있다[17,18].

5.2 점탄성 유체에 분산된 입자의 현탁액

점탄성 유체의 거동은 전단율 $\dot{\gamma}$, 완화시간 λ 에 의해 좌우되기 때문에 본 연구에서 평균응력을 제시하기 위해 다음과 같이 전단응력(σ_{xy})에 대해서는 상대점도(relative viscosity) η_r , 1차수직응력차 N_1 ($=\sigma_{xx} - \sigma_{yy}$)에 대해서는 1차 수직응력차 계수(1st normal stress difference coefficient)를 다음과 같이 정의하여 사용한다[4].

$$\eta_r = \frac{\langle \sigma_{xy} \rangle}{\eta_0 \dot{\gamma}}, \quad \Psi_{1r} = \frac{\langle N_1 \rangle}{2\eta_p \lambda \dot{\gamma}^2} \quad (34)$$

먼저 Fig. 5에는 반지름이 0.3인 구형 입자가 $(L, H, D) = (1, 1, 1)$ 인 계산영역의 중심에 놓이고, 전단율 $\dot{\gamma} = 1$ 이고 고분자의 완화시간 $\lambda = 0.5$ 인 Oldroyd-B 점탄성 유체에 분산된 경우를 해석하여 $t = 5\lambda$ 에서 고분자의 늘임양

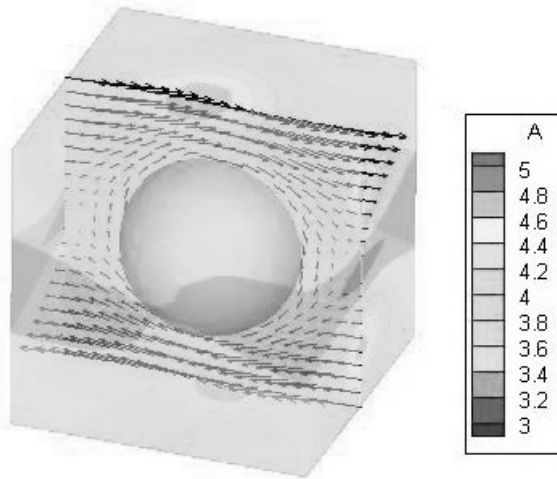


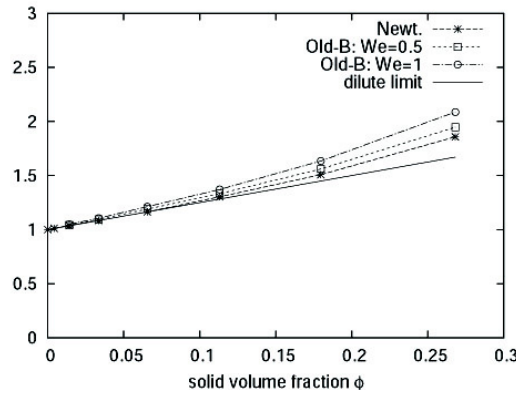
Fig. 5 Distribution of the trace of the conformation tensor of polymer of a single particle in a sliding periodic frame with the Oldroyd-B fluid

(stretching)을 관찰하기 위해 고분자의 형상텐서(conformation tensor) \mathbf{A} 의 대각선 값($tr(\mathbf{A})$)을 제시하였다.(유체의 탄성의 크기를 나타내는 Weissenberg 수(We)는 $\lambda\dot{\gamma}=0.5$ 이다.)분자의 형상텐서는 다음과 같이 정의된다.

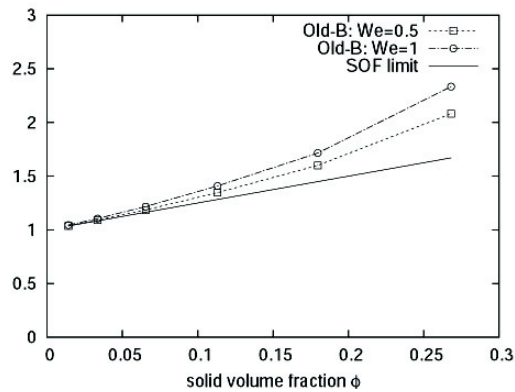
$$\mathbf{A} = \mathbf{I} + \frac{\lambda}{\eta_p} \boldsymbol{\tau}_p \tag{35}$$

$tr(\mathbf{A})$ 는 고분자가 배향되지 않고 무작위적인 형상일 경우 3의 값을 갖고, 그 이상의 값은 Oldroyd-B 모델에서 평균적인 늘임양을 나타내기 때문에 Fig. 5는 입자의 존재에 따른 고분자의 늘임양이 매우 고르지 않은 비정방 분포임을 알 수 있다. Fig. 6(a,b)는 입자분율(ϕ)과 유체의 탄성(We)에 따른 상대 점도와 1차 수직응력차계수의 변화를 계산한 결과를 제시하였다. 응력은 정상상태의 주기적 변화구간에서 시간에 대한 평균을 취하여 구하였다.

Fig. 6(a)에서 입자분율에 따라 상대점도와 수직항력의 차이를 뉴턴유체와 점탄성 유체의 탄성(Wi)이 0.5인 경우와 1인 경우를 함께 비교하면, 먼저 상대점도는 입자가 증가할수록, 유체의 탄성이 증가할수록 증가함을 확인할 수 있으며, 입자가 작아지거나 탄성이 작아지는 경우 이론값($1+2.5\phi$)에 접근함을 알 수 있다. 마찬가지로 1차 수직항력차계수 또한 입자가 증가할수록, 유체의 탄성이 증가할수록 증가함을 확인할 수 있으며, 입자가 작아지거나 탄성이 작아지는 경우 SOF이론값(Second-order fluid limit: SOF limit)인 $(1+2.5\phi)$ 에 접근함을 알 수 있다[19].



(a)



(b)

Fig. 6 (a) Relative viscosity (η_r) and (b) the first normal stress coefficient (Ψ_{1r}) with the volume fraction in a sliding periodic frame with a viscoelastic fluid

6. 결론 및 향후 연구방향

본 연구는 구형입자가 포함된 점탄성 유체의 현탁액을 직접 수치해석을 이용하여 풀 수 있도록, 문제를 정의하고, 수식화를 진행하고, 수치해석법을 개발하며 간단한 예제 문제에 대해 해석결과를 제시한 연구이다. 단순전단유동에 적절한 미끄럼 삼방향 주기적 경계조건을 도입하고, 입자와 유체의 수력학적 상호작용 및 유체의 비선형 점탄성을 모두 고려하였다. 개발된 해석코드를 이용하여, 입자와 유체의 탄성이 고분자 현탁액의 물성(점도, 수직항력)에 미치는 영향을 연구하였으며, 입자분율과 유체의 탄성이 커질수록 점성과 수직항력이 모두 증가되는 것을 확인하였다. 또한, 입자분율과 유체의 탄성이 작아질수록 점성은 뉴턴유체 매질의 묽은 현탁액의 물성에 접근하였고, 1차 수직항력은 SOF유체 매질의 현탁액의 이론적 예측에 접근하였다.

본 논문에서 연구된 복잡한 주기적 경계조건을 가진 3차원 입자분산 점탄성 유동문제는 제한조건이 많은 쌍곡선형의 행렬(saddle point problem)을 갖기 때문에 대용량 행렬식 풀이에 가우스소거법에 기반한 직접법을 사용하는 MPI기반의 MUMPS 라이브러리를 활용하였다. 그러나 5.2절의 점탄성 유동의 경우 $15 \times 15 \times 15$ 의 격자만 사용하여도 20GB에 달하는 메모리가 필요하여 물리적으로 중요한 많은 수의 입자가 존재하는 유동해석에는 적용이 어려운 현실이다. 이런 관점에서 적절한 반복법에 기반한 행렬식 풀이기법(iterative solver)의 개발이 절실하다. 최근 Stokes 유동에서 $O(N)$ 의 성능을 확인한 블록 전처리기법(block preconditioning), Multigrid 기법, 그리고 Krylov subspace 기법을 조합은 이러한 관점에서 매우 희망적인 연구방향이라 할 수 있다[21,22].

후 기

이 논문은 2007년 정부(교육인적자원부)의 재원으로 한국 학술진흥재단의 지원을 받아 수행된 연구이며, 재단의 지원에 감사드립니다 (KRF-2007-331-D00134).

참고문헌

- [1] 2006, Hwang, W.R., Peters, G.W.M., Hulsen, M.A. and Meijer, H.E.H., "Modeling of flow-induced crystallization of particle-filled polymer," *Macromolecules*, Vol.39, pp.8389-8398.
- [2] 2002, Schrauwen, B.A.G., Govaert, L.E., Peters, G.W.M. and Meijer, H.E.H., "The influence of flow-induced crystallization on the impact toughness of high-density polyethylene," *Macromolecular Symposium*, Vol.185, pp.89-102.
- [3] 2004, Hwang, W.R., Hulsen, M.A. and Meijer, H.E.H., "Direct simulations of particle suspensions in sliding bi-periodic frames," *J. Comput. Phys.*, Vol. 194, pp.742-772.
- [4] 2004, Hwang, W.R., Hulsen, M.A. and Meijer, H.E.H., "Direct simulations of particle suspensions in a viscoelastic fluid in sliding bi-periodic frames," *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol.121, pp.15-33.
- [5] 1988, Larson, R.G., *Constitutive equations for polymeric melts and solutions*, Butterworths.
- [6] 1996, Hu, H.H., "Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures," *Int. J. Multiphase Flow*, Vol.22, pp.335-352.
- [7] 1999, Glowinski, R., Pan, T.W., Hesla, T.I. and Joseph, D.D., "A distributed Lagrangian multipliers/fictitious domain method for particulate flows," *Int. J. Multiphase Flow*, Vol.25, pp.755-794.
- [8] 2002, Lauren, T.A., *Computational contact and impact mechanics*, Springer-Verlag, Heidelberg.
- [9] 2001, Baaijens, F.P.T., "A fictitious domain/mortar element method for fluid-structure interaction," *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.35, p.743.
- [10] 1995, Guenette, R. and Fortin, M., "A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows," *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol.60, pp.27-52.
- [11] 1998, Baaijens, F.P.T., "Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review," *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol.79, pp.361-385.
- [12] 1989, Fortin, M. and Fortin, A., "A new approach for the FEM simulation of viscoelastic flows," *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol.32, pp.295-310.
- [13] 1970, Batchelor, G.K., "The stress system in a suspension of force-free particles," *J. Fluid Mech.*, Vol.41, p.545.
- [14] 2002, N, P-T., *Understanding Viscoelasticity*, Springer, Berlin.
- [15] 1997, Kuijlaars, S., *The Mathematical Intelligence*, Vol.19, pp.5-11.
- [16] 1984, Brady, J.F., "The Einstein viscosity correction in n dimensions," *Int. J. Multiphase Flow*, Vol.10, pp.113-114.
- [17] 2002, Sierou, A. and Brady, J.F., "Rheology and microstructure in concentrated non-colloidal suspensions," *J. Rheology*, Vol.46, pp.1031-1056.
- [18] 2005, Hwang, W.R., Anderson, P.D. and Hulsen, M.A., "Chaotic advection in a cavity flow with rigid particles," *Phys. Fluids*, Vol.17, 043602.
- [19] 2001, Patankar, N.A. and Hu, H.H., "Rheology of a suspension of particles in viscoelastic fluids," *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol.96, pp.423-443.
- [20] MUMPS: Multifrontal Massively Parallel Sparse Direct Solver, <http://mumps.enseeiht.fr/>
- [21] 2005, Elman, H.C., Silvester, D.J. and Wathen, A.J., *Finite Elements and Fast Iterative Solvers*, Oxford.
- [22] 2009, Hwang, W.R., Walkley, M.A. and Harlen, O.G., "An $O(N)$ iterative solver for viscoelastic flow simulations with DEVSS," *IMA Workshop on Flowing Complex Fluids*, Oct. 12-16, Minneapolis, USA.