

<응용논문>

DOI <https://doi.org/10.3795/KSME-B.2017.41.2.145>ISSN 1226-4881(Print)
2288-5324(Online)**DEM을 이용한 입자 혼합 시뮬레이션과 혼합지수들의 성능 비교**조 미 경^{*†}

* 동명대학교 게임공학과

Particle-Mixing Simulations Using DEM and Comparison of the Performance of Mixing IndicesMigyung Cho^{*†}

* Dept. of Game Engineering, Tongmyong Univ.

(Received September 23, 2016; Revised November 8, 2016; Accepted December 22, 2016)

Key Words: Discrete Element Method(이산요소방법), Particle Mixing(입자혼합), Mixing Index(혼합 지수), Simulation(시뮬레이션)

초록: 식품, 약학 분야 등 많은 산업 분야에서 다른 특징을 가지는 분자 알갱이들을 잘 혼합하는 것은 중요한 작업이다. 컴퓨터 시뮬레이션의 발달로 적정 수준의 혼합 상태를 얻기 위해 먼저 시뮬레이션을 통한 최적의 혼합 조건들을 찾는 작업이 보편화되고 있다. 이에 따라 시뮬레이션 과정에서 혼합 상태를 측정할 수 있는 혼합 지수에 대한 필요성이 증가하고 있다. 현재까지 많이 사용되는 혼합 지수는 두 가지 종류로 분류되는데 첫째는 샘플링을 통한 통계적 기반의 방법이고 두 번째는 전체 입자들을 모두 사용하여 혼합 지수를 계산하는 방법이다. 본 논문에서는 DEM 시뮬레이션으로 입자들을 혼합하는 과정에서 획득한 데이터에 대해 다양한 혼합 지수들을 계산하여 각 혼합 지수들의 성능과 장단점을 비교 분석하였다. 이로써 적절한 혼합지수를 선택하여 사용할 수 있는 실험적 정보를 제시하고자 한다.

Abstract: Mixing of molecular grains having different characteristics is very important in many industries such as the food and pharmaceutical industries. With the development of computer simulations, it is common practice to find the optimal mixing conditions through a simulation before the actual mixing task to estimate the proper level of mixing. Accordingly, there has been an increasing need for a mixing index to measure the mix of particles in the simulation process. Mixing indices, which have been widely used so far, can largely be classified into two types: first is the statistical-based mixing index, which is prepared using the sampling method, and the second is the mixing index that is prepared using all the particles. In this paper, we calculated mixing indices in different ways for the data in the course of mixing the particles using the DEM simulation. Additionally, we compared the performance, advantages, and disadvantages of each mixing index. Therefore, I propose a standard that can be used to select an appropriate mixing index.

- 기호설명 -

S_o^2 : 완전 분리된 상태에서의 혼합물 분산
 S_R^2 : 충분히 혼합된 상태에서의 혼합물 분산
 S^2 : 완전 분리된 상태와 충분히 혼합된 상태 사이에 있는 혼합물 분산
 N : 하나의 샘플링 박스에 있는 입자의 개수

\bar{X} : 이진 혼합물에서 한 입자의 평균 비율
 \vec{u}_i : DEM 시뮬레이션에서 입자i의 병진 속도
 $\vec{\omega}_i$: DEM 시뮬레이션에서 입자 i의 각속도

1. 서론

서로 다른 특징과 크기를 가진 입자들을 잘 혼합하는 것은 다양한 산업 분야에서 필수적인 과정이며 식품으로부터 화학, 시멘트, 약학분야 등에

† Corresponding Author, mgcho@tu.ac.kr

© 2017 The Korean Society of Mechanical Engineers

이루기까지 매우 광범위하다.^(1~13) 혼합은 고체 정량 형태 제조를 위한 주요한 기본 작동이다. 제약 산업분야에서는 정량의 복용량을 가진 최종 혼합물을 얻기 위해 매우 많은 첨가물을 가진 활성 제약 성분들을 잘 섞는 것은 결국 안전과 효험이 있는 약을 생산하는 것과 직접적으로 연관이 된다.⁽³⁾ 근래 들어 컴퓨터 시뮬레이션이 산업 전반에 사용되면서 mixer 장치의 설계와 효율적인 혼합 과정의 조건들을 찾아 내기 위해 입자들에 대한 혼합 시뮬레이션을 수행하는 것이 보편적인 추세이다. 입자 시뮬레이션을 위해 사용되는 기술들은 입자 동역학(molecular dynamics), DEM(Discrete Element Modeling) 등이 있다.

DEM은 입자 혼합 시뮬레이션은 시뮬레이션 단계마다 각 입자들의 위치와 방향을 평가하기 위한 궤적과 회전을 추적할 수 있고 입자들끼리의 상호작용뿐만 아니라 입자들과 주위 환경 사이의 상호작용을 계산할 수 있다. 상호 작용은 이어서 일어나는 입자의 위치에 영향을 주어 입자의 다음 위치를 계산하게 한다. 이러한 DEM의 특징으로 인해 입자 크기, 밀도, 공기, 입자들의 비율, 진동 상태, mixer의 회전 각과 속도 등이 입자들의 혼합과 분리에 어떤 영향을 미치는지 조사하기 위해 DEM 시뮬레이션이 매우 유용하게 사용되고 있다.^(1,2,5-8)

혼합 시뮬레이션 결과를 판단하기 위해서는 입자들의 혼합 정도를 측정할 수 있는 방법이 필요하며 혼합 정도를 측정하는 기준이 되는 값을 혼합 지수(mixing index)라고 한다. 만약 제대로 혼합이 되지 않은 혼합물에 대해 높은 혼합 지수의 값을 준다면 그 이후의 과정에서도 오류가 발생할 수 있다. 따라서 혼합 정도를 정확하게 판단하도록 해 주는 혼합 지수는 매우 중요하다. 현재까지 수십 가지의 혼합 지수가 개발되어 사용되고 있지만 많은 연구에도 불구하고 일반적으로 통용되는 혼합 지수는 없다.^(4,10)

현재 사용되고 있는 혼합 지수들을 분류하면 크게 샘플링 방법을 사용한 통계적 기반의 혼합 지수와 전체 데이터를 대상으로 계산하는 혼합 지수로 분류할 수 있다.^(1~10) 통계적 기반의 혼합 지수들은 혼합물로부터 추출한 샘플들의 표준편차, 분산과 같은 통계적인 분석에 의존한다. 이 방법은 샘플링 방법, 샘플링 횟수, 샘플링 크기, sample geometry, 샘플링 위치 등에 큰 영향을 받는데 이것은 통계적 기반 혼합 지수의 한계이다.^(3~9) 또한 대부분의 통계 기반 혼합 지수는 두 종류의 입자

를 혼합하는 이진 혼합물(Binary mixture)에 대해서만 혼합 지수를 계산해 준다는 단점이 있다.

근래 들어 컴퓨팅의 성능이 발달하면서 데이터의 일부를 샘플링하여 혼합 지수를 측정하는 대신 모든 입자 데이터의 위치를 이용하여 혼합 지수를 측정하는 방법이 제안되어 사용되고 있다. 대표적인 것이 GMMI와 MGMMI로 두 방법은 모든 입자 데이터의 위치를 이용하여 혼합 지수를 측정함으로써 적은 입자 수에 대해서도 의미 있는 혼합 지수를 계산할 수 있다는 장점이 있다.^(1,2) 또한 GMMI와 MGMMI는 세 종류 이상의 입자들로 구성된 다 입자 혼합물(multi-particles mixture)에 대한 혼합 지수도 바로 계산할 수 있고 혼합하는 입자의 모양과 크기에 대한 제한이 없다.

본 논문에서는 샘플링 기반의 혼합 지수와 전체 데이터를 대상으로 계산되는 혼합 지수들의 성능을 비교 분석하고자 한다. 이러한 연구를 수행한 동기는 샘플링 혼합지수들을 비교 분석한 연구 결과^(4,9,10)는 있지만 샘플링 혼합지수와 전체 데이터를 이용하는 혼합지수의 성능을 비교 분석한 연구는 국·내외적으로 찾아 볼 수 없기 때문이다. 두 방법에 대한 장단점이 명확하게 정립되어 있지 않고 많은 연구자들이 어떤 경우에 어떤 혼합 지수를 사용해야 되는지에 대한 실험적 정보가 없다. 그래서 본 연구에서는 DEM 입자 혼합 시뮬레이션 데이터에 대하여 두 방법으로 계산한 혼합 지수들의 장단점을 비교 분석하여 연구자들에게 혼합 지수에 대한 실험적 정보를 제공해 주고자 한다.

2. 입자 혼합과 혼합 지수의 분류

Fig. 1은 이진 혼합물(흰색: A, 검은색: B)의 혼합 과정에서 발생할 수 있는 상태를 보여준다. Fig. 1(a)는 두 종류의 입자가 완전 분리된 상태로 일반적으로 혼합은 (a)와 같은 상태에서 출발한다. Fig. 1(b)는 두 입자가 서로 섞이는 과정에서 발생하며 (c)는 두 입자가 완벽하게 혼합이 된 상태를 보여주는데 이러한 이상적인 혼합은 실제 혼합에서는

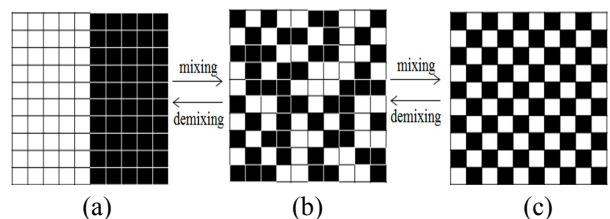


Fig. 1 Mixing status of binary mixture: (a) Unmixed mixing; (b) Random mixing; (c) Perfect mixing

거의 발생하지 않는다. 혼합 지수의 값은 (a)의 경우 0을 (c)의 경우 1을 (b)의 경우 0과 1 사이의 값을 가지는 것으로 정의된다.

2.1 샘플링을 이용한 통계 기반 혼합 지수와 샘플링 방법

이제까지 개발된 수십 가지의 혼합 지수들 중 대부분의 통계기반 혼합 지수들은 이진 혼합물에 대해 적용되도록 개발되었고 주로 혼합물로부터 샘플링 된 구성요소들의 표준편차, 분산, 변동계수에 기반한다.^(4,10) 본 논문의 실험을 위해 사용될 혼합 지수는 가장 많이 사용되고 있는 Lacey 지수와 표준편차에 기반한 Kramer와 Ashton and Valentin이 제안한 혼합 지수이다.

식 (1)은 Lacey가 제안한 혼합 지수,⁽¹¹⁾ 식 (2)는 Kramer가 제안한 혼합 지수⁽¹²⁾이고 그리고 식 (3)은 Ashton 와 Valentin이 제안한 혼합 지수⁽¹³⁾를 계산한다.

$$M_L = \frac{S_0^2 - S^2}{S_0^2 - S_R^2} \quad (1)$$

$$M_K = \frac{S_0 - S}{S_0 - S_R} \quad (2)$$

$$M_A = \frac{\log S_0 - \log S}{\log S_0 - \log S_R} \quad (3)$$

식 (1)~(3)에서 S_0^2 는 이진 혼합물의 구성요소 A, B가 완전히 분리되었을 때의 분산을 의미하고 S_R^2 는 완벽하게 혼합되었을 때의 분산을 의미한다. 그리고 S^2 는 샘플링한 이진 혼합물의 분산을 나타낸다. S_0^2 , S_R^2 , S^2 는 식 (4)~(6)과 같이 계산한다.

$$S_0^2 = \bar{X}(1 - \bar{X}) \quad (4)$$

$$S_R^2 = \frac{\bar{X}(1 - \bar{X})}{N} \quad (5)$$

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 \quad (6)$$

위의 식에서 \bar{X} 는 모든 샘플링 박스에 들어 있는 이진 혼합물 중 한 입자 종류의 평균 비율 (fraction)을 나타내고 N은 하나의 샘플링 박스에 들어 있는 입자의 개수를 의미한다. 샘플링 박스에 포함된 입자의 개수가 다른 경우 평균 개수를 사용한다. 식 (6)에서 n은 샘플링한 박스의 개수를 나타낸다. \bar{X} 는 식 (7)과 같이 계산되며 X_i 는 샘플링 박스 i에서 입자 A의 비율을 의미한다.

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (7)$$

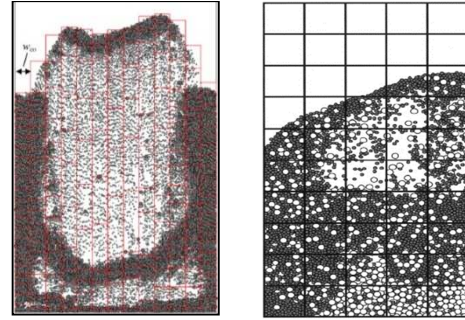


Fig. 2 Sampling methods: (a) Method 1. Each box has the same number of particles; (b) Method 2. The size of each box is same

Lacey 지수 등 위에서 언급한 혼합 지수들은 혼합물을 구성하는 입자 A, B의 크기가 동일하다고 가정하고 있으며 입자의 크기가 다른 경우 정확하지 않은 혼합 지수 결과를 줄 수 있다.^(11~13) 따라서 샘플링을 할 때 입자의 크기가 서로 다른 경우와 혼합 과정 중에 거품 등이 발생하여 입자들의 분포가 균일하지 않는 경우 등을 고려해야 한다. 이러한 것들을 고려하여 정확한 혼합지수를 계산하기 위한 시도들이 이루어졌으며 다양한 샘플링 방법에 대한 논문들이 발표되었다.^(5~7)

샘플링은 두 종류 방법으로 분류할 수 있으며 Fig. 2와 같다. 그림은 2차원에 대한 입자 혼합을 보여주지만 3차원으로 확장할 수 있다. Fig. 2의 (a)는 샘플링 상자들이 동일한 개수의 입자들을 가지도록 하기 위해 샘플링 상자의 크기를 조정하는 샘플링 방법이다.^(5,6) 샘플링 상자의 가로 크기는 고정된 상태에서 상자마다 지정된 개수의 입자를 포함하도록 상자의 세로 크기를 아래 위로 조정한다. 가장 윗부분에 위치한 상자들에 포함된 입자의 개수는 다를 수 있기 때문에 샘플링에서 제외시켰으며 이것이 전체 혼합 지수에 고려할 만한 영향을 주지 않는 것으로 알려져 있다.^(5,6)

다른 샘플링 방법은 Fig. 2(b)와 같이 샘플링 상자 크기를 균일하게 생성하는 방법이다.⁽⁷⁾ 이 방법의 경우 상자마다 포함하고 있는 입자의 개수가 서로 다를 수 있다. 혼합 지수를 계산할 때 많은 입자를 포함하고 있는 상자의 분산과 극히 일부의 입자를 포함하고 있는 상자의 분산을 동일하게 취급하면 오차가 발생할 수 있다. 따라서 이런 경우를 보정해 주기 위한 가중치가 필요하며 가중치를 고려한 혼합물의 분산은 식 (8)~(10)과 같이 계산된다.

$$S^2 = \frac{1}{k_t} \sum_{i=1}^n k_{wf,i} (X_i - \bar{X})^2 \quad (8)$$

$$k_t = \sum_{i=1}^n k_{wf,i} \quad (9)$$

$$k_{wf,i} = \frac{N_i}{N_{max}} \quad (10)$$

식에서 $k_{wf,i}$ 는 각 샘플링 박스의 가중치이며 가중치는 샘플링된 전체 입자 수 N_{max} 를 각 샘플링 박스에 포함된 입자 수 N_i 로 나눈 값이다.

샘플링에 기반한 혼합 지수는 적은 수의 입자를 가지는 시스템에 대해서는 적용할 수 없고 충분히 큰 샘플링 데이터를 취하여 측정될 때 통계적 정확도를 가지며 의미가 있다. 또한 이진 혼합물이 아닌 세 개 이상의 입자 종류로 구성된 혼합물에 대한 혼합 지수를 계산하기 위해서는 가상 이진 혼합물 개념을 이용하여 샘플들의 공분산 행렬식 등으로 확장하여 혼합 지수를 계산해야 한다.⁽¹⁰⁾

2.2 비 샘플링 혼합 지수

전체 데이터를 이용하여 혼합 지수를 계산하는 방법으로 GMMI(Generalized Mean Mixing Index)와 MGMMI(Modified Generalized Mean Mixing Index)가 있다.^(1,2) Asmar에 의해 제안된 GMMI는 DEM 시뮬레이션에서 각 입자들의 좌표 값을 이용하여 혼합 지수를 단순하고 빠르게 계산하는 방법으로, 샘플링에 의한 혼합 지수는 이진 혼합물에 대해서만 혼합 지수를 계산할 수 있다면 GMMI는 입자 종류의 개수에 무관하게 혼합 지수를 계산할 수 있다.⁽¹⁾ 또한 샘플링을 하지 않고 전체 입자들에 대해 적용되므로 입자의 개수가 적더라도 의미 있는 혼합 지수를 계산할 수 있다는 장점이 있다.

혼합물이 Q개의 입자 종류로 구성되어 있고 전체 N_{total} 개의 입자 개수가 있다고 가정하자. 이때 입자 종류 $i(1 \leq i \leq Q)$ 의 GMMI는 다음과 같이 정의된다.

$$GMMI_i = \frac{GMMI_{xi} + GMMI_{yi} + GMMI_{zi}}{3} \quad (11)$$

여기서 $GMMI_{xi}$, $GMMI_{yi}$, $GMMI_{zi}$ 는 입자 종류 i 의 x, y, z축에 대한 GMMI로 $GMMI_{xi}$ 의 경우 입자 종류 i 의 x좌표 값들의 평균을 혼합물의 전체 입자의 x좌표 값의 평균으로 나눈 값으로 다음과 같이 계산한다.

$$GMMI_{xi} = \frac{[\sum_{j=1}^n (x_j - x_{ref}) / n_i]}{[\sum_{k=1}^n (x_k - x_{ref}) / N_{total}]} \quad (12)$$

식 (12)에서 입자 종류 i 의 입자 개수는 n_i 개이고 x_{ref} 는 reference 입자의 x좌표 값을 의미한다. $GMMI_{yi}$, $GMMI_{zi}$ 는 식 (12)에서 x좌표값 대신 y좌

표값과 z좌표값을 대입하여 같은 방식으로 계산할 수 있다.

혼합 지수의 값이 1인 것은 완벽한 혼합을 의미하고 0은 서로 다른 종류의 입자들이 온전히 분리되어 있는 상태를 가리킨다. GMMI의 값은 1보다 클 수도 있는데 이는 입자들이 mixer의 윗부분 부근에 모여있을 때 나타난다.⁽¹⁾ GMMI의 문제점은 만약 x방향의 GMMI가 1보다 크고 다른 방향인 y와 z의 GMMI는 1보다 작을 때, 식 (11)에 의해 전체 GMMI의 값이 1이 될 수 있다는 것이다. 이러한 문제를 해결하기 위해 Siraj 등은 GMMI를 개선한 혼합 지수 MGMMI를 제안하였다.⁽²⁾ MGMMI는 식 (13)과 같이 정의된다.

$$MGMMI_i = \frac{1}{1 - \frac{abs(1-GMMI_{xi}) + abs(1-GMMI_{yi}) + abs(1-GMMI_{zi})}{3}} \quad (13)$$

MGMMI는 GMMI의 문제점을 해결하면서 더 이상 완벽한 혼합을 의미하는 1보다 더 큰 값을 가지지 않는다. 즉, 0에서 1 사이의 값을 가진다. 두 혼합 지수는 기준으로 삼은 reference 좌표에 따라 값이 달라지는 지므로 기준점을 매번 구해야 한다. 샘플링 방법과 비교하여 MGMMI와 GMMI의 장점은 입자의 개수가 적을 때에도 적용할 수 있으며 이진 혼합물이 아닌 다 입자 혼합물에 대해서도 적용할 수 있다는 것이다.

3. DEM 입자 혼합 시뮬레이션 환경

혼합 지수들의 성능을 측정하기 위해 DEM 혼합 시뮬레이션 데이터를 사용하였다. Lacey 지수를 비롯하여 대부분의 통계적 기반의 혼합 지수들이 이진 혼합물에 대한 혼합 지수만을 제공하기 때문에 실험은 이진 혼합물에 대해 수행하였다. DEM 시뮬레이션에서 입자의 움직임을 분석하기 위한 방법을 간단하게 살펴보자. 입자 i 의 병진 속도(\vec{u}_i)와 회전 각속도($\vec{\omega}_i$)는 다음과 같이 묘사할 수 있다.

$$m_i \frac{d\vec{u}_i}{dt} = \sum_j \vec{f}_{c,ij} + m_i \vec{g} \quad (14)$$

$$I_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \sum_j (\vec{r}_{c,i} \times \vec{f}_{c,ij} + \vec{t}_{c,ij}) \quad (15)$$

식에서 m_i 와 I_i 는 입자 i 의 질량(mass)과 관성 모멘트(moment)를 나타낸다. 그리고 \vec{g} 는 중력 가

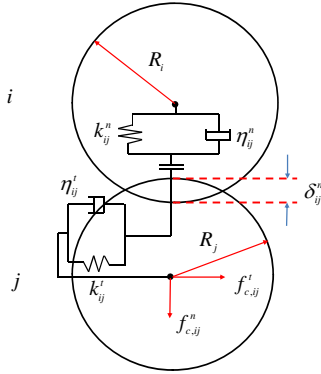


Fig. 3 Spring-dashpot model for DEM

속도(gravitational acceleration)를 $\sum_j \vec{f}_{c,ij}$ 는 벽이나 다른 입자들과의 접촉으로 인해 입자 i 와 연동하는 모든 힘을 나타낸다. 또한 $\vec{r}_{c,i}$ 는 입자 i 의 중심과 접촉된 다른 입자들 사이의 거리를 의미한다. 식 (15)의 오른쪽 항목은 입자에 영향을 주는 외부 회전력(external torques)이다.

접촉력 $\vec{f}_{c,ij} = (f_{c,ij}^n, f_{c,ij}^t)$ 은 Fig. 3의 Spring-dashpot 모델을 통한 변형과정(deformation)으로부터 계산할 수 있다. 두 입자 i 와 j 에 대해 법선(normal)과 접선 방향(tangential direction)에서의 힘은 다음과 같이 표현할 수 있다.^(14,15)

$$f_{c,ij}^n = k_{ij}^n \delta_{ij}^n - \eta_{ij}^n m_{eff} u_{ij}^n \quad (16)$$

$$f_{c,ij}^t = k_{ij}^t \delta_{ij}^t - \eta_{ij}^t m_{eff} u_{ij}^t \quad (17)$$

위 식에서 $m_{eff} = (m_i \times m_j) / (m_i + m_j)$ 이며 k_{ij}^n 와 k_{ij}^t 는 입자들 사이의 법선 방향과 접선 방향의 스프링 계수들이고, η_{ij}^n 와 η_{ij}^t 는 단위 체적당 댐핑 계수들, δ_{ij}^n 와 δ_{ij}^t 은 탄성 변위(elastic displacement)를, u_{ij}^n 와 u_{ij}^t 는 접촉에서의 수직 및 전단 속도를 의미한다. 수직 압축 및 전단 압축은 다음과 같이 표현된다.^(6,15)

$$\delta_{ij}^n = (R_i + R_j) - (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{n}_{ij} \quad (18)$$

위 식에서 R_i 와 R_j 는 입자 i 와 j 의 반지름을, 그리고 $\vec{n}_{ij} = (\vec{r}_i - \vec{r}_j) / |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ 이며 \vec{n}_{ij} 는 법선 방향을 의미한다. 그리고 \vec{r}_i 와 \vec{r}_j 는 입자 i 와 j 의 위치 벡터를 나타낸다. 만약 \vec{u}_{ij}^t 이 두 개의 충돌하는 입자 사이에 존재하는 상대 선형 속도 및 각속도

Table 1 Two type particles for DEM simulation

색상	재료	밀도 [kg/m ³]	입자 수	입자의 직경[mm]
초록(A)	Silicon	2330	7516	15
빨강(B)	Aluminum	2702	4484	15

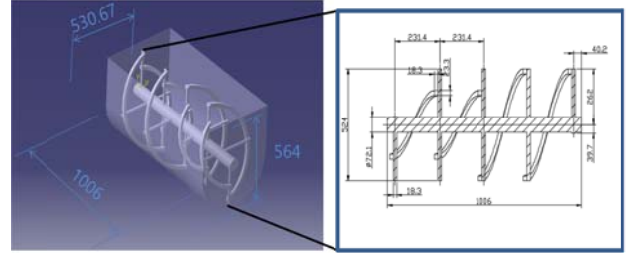


Fig. 4 Shape of the container for DEM simulation (Units: mm)

의 조합에 의한 상대 속도라고 하면,

$$\vec{u}_{ij}^r = \vec{u}_i - \vec{u}_j + (\vec{\omega}_i L_i + \vec{\omega}_j L_j) \times \vec{n}_{ij} \quad (19)$$

여기서 L 은 입자의 중심에서 접촉 포인트까지의 거리이다. 만약 \vec{t}_{ij} 를 접선 방향의 단위 벡터라고 하면 다음과 같이 정의한다.

$$\vec{t}_{ij} = \frac{\vec{u}_{ij}^t}{|\vec{u}_{ij}^t|} \quad (20)$$

여기서, \vec{u}_{ij}^t 은 상대 속도의 접선방향의 속도 벡터이며, 다음의 식에 의해서 구할 수 있다.

$$\vec{u}_{ij}^t = \vec{u}_{ij}^r - (\vec{u}_{ij}^r \times \vec{n}_{ij}) \vec{n}_{ij} \quad (21)$$

여기서 접선방향의 δ_{ij}^t 는 다음의 식에 의해서 구할 수 있다.

$$\delta_{ij}^t = |\vec{u}_{ij}^t| \min\left(\frac{\delta_{ij}^n}{\vec{u}_{ij}^r \cdot \vec{n}_{ij}}, \Delta t\right) \quad (22)$$

두 종류의 입자에 대해 Fig. 4와 같은 모양의 screw blender에서 혼합 시뮬레이션을 수행하였다. 시뮬레이션에 사용한 입자들의 물리적인 특징과 입자 개수는 Table 1과 같다. 초기에 두 종류의 입자들은 층(layer)으로 나누어 놓았다. 입자들의 위치와 속도를 찾는 운동 방정식을 풀기 위해 상용 소프트웨어 패키지인 Particleworks(Prometech Software, Inc., Tokyo, Japan)을 사용하였다.

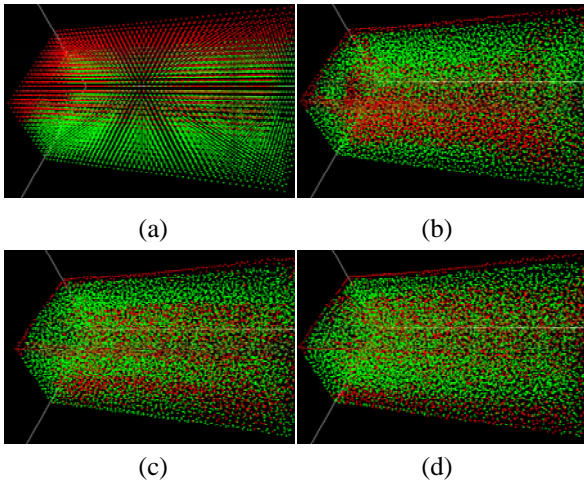


Fig. 5 Snapshots of DEM simulation: (a) Initial; (b) After 6 seconds; (c) After 10 seconds; (d) After 20 seconds

Fig. 5 (a)는 두 종류의 입자가 층으로 완전히 분리되어 있는 초기 상태를 보여주고 (b)는 혼합 시물레이션 시작 후 6초가 지났을 때의 혼합 상태를, (c)와 (d)는 각각 10초 후와 20초 후의 혼합 상태를 각각 보여 준다.

4. 혼합 지수들의 비교분석

DEM 혼합 시물레이션 결과에 대해 통계적 기반의 Lacey 지수, Kramer 지수, Ashton and Valentin 지수와 전체 입자들을 사용하는 GMMI와 MGMMI 지수를 계산하여 결과를 비교하였다. 통계적 기반의 혼합 지수 계산을 위해 사용한 샘플링 데이터 종류는 Table 2와 같다.

샘플링 방법1을 위해 하나의 샘플링 박스에 120개, 60개, 10개의 입자를 가지도록 금속 용기를 논리적으로 나누었다. 이렇게 나누어진 박스들 중에서 30%에 해당하는 샘플링 박스를 임의로 선택하였다. 샘플링 방법2를 위해 Fig. 4의 금속 용기를 가로 100.6mm, 세로 53.1mm, 높이 56.4mm의 크기로 논리적으로 나누어 10*10*10개의 샘플링 박스들을 생성하였다. 그 외 5*5*5와 6*6*6개의 샘플링 박스들도 생성하였다. 10*10*10개의 샘플링 박스들은 한 박스 당 평균적으로 약 11개의 입자를 가진다.

전체 샘플링 박스 개수의 30%에 해당되는 300개, 64개, 37개의 샘플링 박스를 임의로 선택하였다. 임의의 선택을 위한 랜덤 수 생성기는 가장 성능이 좋은 것으로 알려진 C++ Booster 라이브러리의 메르센 트위스터(Mersenne Twister)를 사용하였다.

Fig. 6은 Table 2의 샘플링 데이터 종류 (a)~(f)로

Table 2 Kinds of sampling data

구분 \ 종류	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
샘플링 방법	샘플링 1	샘플링 1	샘플링 1	샘플링 2	샘플링 2	샘플링 2
박스 개수 (개)	100	200	1200	125	216	1000
입자 수 (개)	120	60	10	평균 95	평균 55	평균 12
샘플링 비율	30%	30%	30%	30%	30%	30%

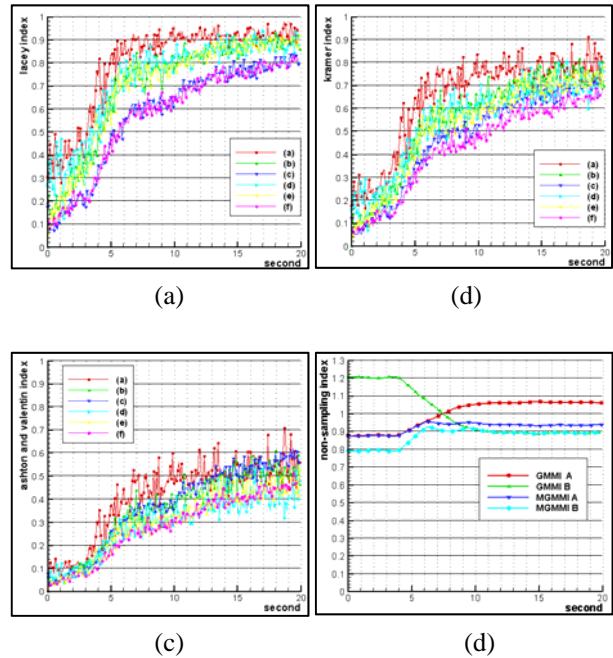


Fig. 6 The change of mixing index: (a) Lacey index (b) Kramer index (c) Ashton and Valentin index (d) GMMI and MGMMI index

혼합 지수를 계산한 결과를 보여준다. 그림에서 X축은 시물레이션이 진행된 시간을 나타내고 Y축은 혼합 지수를 나타낸다. 혼합 지수들의 결과를 전체적으로 살펴보면 시간이 흐를수록 혼합 지수가 증가하는 것을 볼 수 있다. 통계적 기반의 혼합 지수의 경우 샘플링을 위해 사용한 박스의 크기에 따라 혼합 지수의 값이 달라진다는 것을 알 수 있다. Lacey 지수, Kramer 지수, Ashton and Valentin 지수 모두에 대해 (a), (d) 데이터, (b), (e) 데이터와 (c), (f) 데이터 순으로 혼합 지수의 값이 과소 평가된 것을 알 수 있다. 이것은 샘플링 박스의 크기가 작을수록 혼합 지수가 더 보수적으로 측정된다는 것을 알 수 있다.

통계적 기반의 혼합 지수의 경우 샘플링 방법에 따라 혼합 지수의 값이 많은 차이가 난다는 문제점을 드러내었다. 동일한 데이터에 대해 혼합 지수 값의 차이가 크게 나타나는 순서는 Lacey 지수, Kramer 지수, Ashton and Valentin 지수 순이었다. 동일한 데이터에 대해 샘플링 방법만 다르게 했는데 이러한 차이가 발생하는 것은 샘플링 혼합 지수의 매우 큰 단점이라고 할 수 있다. 이러한 문제점으로 인해 전체 데이터를 사용하는 GMMI와 MGMMI 방법이 제안되었다. 하지만 이 두 방법도 문제점을 가지고 있다. 실험결과를 바탕으로 각 혼합 지수들에 대한 장단점을 살펴보도록 하자.

Lacey 지수의 장점은 혼합이 진행되어 갈수록 1에 가까운 값으로 수렴해 가는 것을 통해 혼합이 어느 정도 진행되었을 때 혼합 정도에 대한 정확한 정보를 제공해 준다는 것을 알 수 있다. 단점은 입자들이 혼합되기 전인 분리상태에서는 0에 가까운 값을 주어야 함에도 불구하고 샘플링 방법에 따라서 0.3 전후의 값을 준다는 것과 샘플링 방법 (a)~(f)에 따라 혼합 지수의 값 차이가 다른 지수들에 비해 더 크게 나타난다는 것이다.

Kramer 지수의 경우 입자들의 분리 상태에서 0.1~0.2 전후의 값을 주는데 이는 Lacey의 지수보다 개선된 정보를 준다고 할 수 있다. 또한 샘플링 데이터 종류 (a)~(f)에 따른 혼합 지수 값의 차이가 Lacey 지수보다 줄어든 것을 볼 수 있다. 혼합이 거의 이루어진 20초 이후에도 혼합 지수의 값이 1이 아닌 0.8 근처로 수렴하는 문제점이 있었다. 이러한 것은 분산을 사용하는 Lacey 지수와 달리 Kramer 지수는 표준편차를 사용하기 때문이다. 완전 분리된 상태에서 0의 값을 주지 못하는 것은 층으로 분리된 부근의 샘플링 박스에는 두 종류의 입자를 동시에 포함하기 때문이다.

Ashton and Valentin 지수의 경우 시작 단계에서 대부분 0.1 이하의 값이므로 입자들이 분리된 상태에 대한 정보를 정확하게 준다는 장점이 있고 샘플링 데이터에 따른 혼합 지수의 값 차이도 Kramer 지수보다 줄어들었다. 이는 동일한 혼합 데이터에 대해서는 샘플링을 어떻게 하던지 상관 없이 혼합 지수 값이 비슷하게 나온다는 것을 의미하므로 바람직하다. 하지만 20초 이후의 혼합 지수의 값들이 0.6에 가까워졌는데 이것은 혼합이 거의 완성되었을 때의 상태에 대한 정보를 충분히 주지 못한다는 것을 의미한다.

기존의 통계기반 혼합 지수를 사용한 실험 결과들에서도⁽³⁻⁸⁾ 통계기반 혼합 지수의 단점으로 샘플

링 방법에 따라 혼합 지수의 값이 차이가 있음을 언급하고 있다. 본 연구에서 수행한 혼합 시뮬레이션에서도 샘플링 방법에 따라 Lacey를 비롯한 혼합 지수의 값이 달라지는 것을 확인할 수 있었다. 따라서 통계기반 혼합 지수를 적용할 경우 제한된 샘플링을 하는 것보다, 다양한 샘플링 방법으로 혼합 지수를 계산하는 필요하다. 또한 샘플링보다 전체 데이터 기반의 혼합 지수의 계산이 더 일관성 있는 혼합지수를 준다고 할 수 있다.

혼합 지수 GMMI와 MGMMI의 경우 전체 데이터를 가지고 혼합 지수를 계산하며 Fig. 6(d)와 같이 나타난다. 그림에서 보듯이 안정적인 혼합 상태에 도달할 때 GMMI와 MGMMI가 1에 가까운 값으로 수렴해 가고 샘플링을 하지 않음으로 입자의 개수가 많지 않더라도 적용할 수 있고 샘플링에 따른 불안정성이 없다는 장점이 있다. 하지만 그림 (d)에서 볼 수 있듯이 두 종류의 입자가 거의 혼합되지 않은 시작 단계에서도 0.8 이상의 높은 값을 주는 문제점이 있다. 즉, 입자들이 층으로 완전히 분리되어 있음에도 불구하고 마치 혼합되어 있는 것과 같은 잘못된 정보는 준다는 것이다.

이는 혼합지수를 계산하는 방법에서 원인을 찾을 수 있다. 식 (11)~(13)에서 기술한 것처럼 GMMI와 MGMMI를 구하기 위해서는 먼저 참조 점을 선택한다. 그리고 특정 종류(예를 들면, B타입) 입자들과 참조 점의 평균 거리를 구하여 전체 입자들(A, B 타입)과 참조 점의 평균 거리로 나누어 주는데 층으로 완전히 분리되어 있는 혼합물의 경우 믹서의 위쪽에 위치하고 있는 입자 종류의 평균 거리가 매우 커지면서 전체 입자들의 평균 거리와 비슷하거나 심지어 더 큰 값도 가질 수가 있게 된다. 이러한 경우 GMMI와 MGMMI는 두 입자 종류가 분리되어 있더라도 1에 가까운 값 혹은 1 이상의 값을 가지는 문제점을 가지게 된다. 이것은 사용자에게 혼합 정도에 대한 잘못된 정보를 줄 수 있으므로 바람직하지 못한 단점이라고 할 수 있다.

5. 결론과 향후 연구 방향

입자 혼합은 제약, 음식, 화장품 등 관련 산업계에서 매우 중요한 문제이므로 혼합 상태를 측정하기 위한 혼합 지수들에 대한 연구가 꾸준히 이루어져 왔다. 본 논문에서는 DEM 혼합 시뮬레이션 데이터로 샘플링 기반 혼합지수와 전체 데이터를 이용하는 혼합지수의 성능을 비교 분석하였다. 통계적 기반의 혼합 지수인 Lacey 지수, Kramer 지수,

Ashton and Valentin 지수는 샘플링 방법에 따라 혼합 지수의 값이 달라지는 문제점이 있었다. 반면 GMMI와 MGMMI 지수는 입자들이 층으로 완전히 분리되어 경우 1에 가까운 높은 혼합지수의 값을 주는 문제점이 있었다.

최근 들어 컴퓨터 성능의 괄목할 만한 발전으로 대용량의 데이터를 처리하는 것에 대한 비용이 크게 문제가 되지 않는다. 따라서 과거에 주로 사용하였던 통계적 기반의 혼합 지수가 아닌 전체 데이터를 가지고 혼합 지수를 구하는 방법이 더 많이 사용될 것으로 예상된다. 하지만 전체 데이터를 이용하는 혼합 지수는 GMMI와 MGMMI 지수 외에는 발견되지 않는다. GMMI와 MGMMI의 경우 입자들이 층으로 완전 분리되어 있는 상태에서는 혼합 정도를 과대평가하는 문제점이 있으므로 향후 GMMI와 MGMMI 지수의 단점을 보완하기 위한 새로운 혼합 지수의 개발이 필요해 보인다.

후 기

이 논문은 2015학년도 동명대학교 교내 학술연구비 지원에 의하여 연구되었음. (2015A007)

참고문헌

(References)

- (1) Asmar, B. N., Langston, P. A. and Matchett, A. J., 2002, "A Generalized Mixing Index in Distinct Element Method Simulation of Vibrated Particulate Beds," *Granular Matter*, Vol. 4, No. 3, pp. 129~138.
- (2) Chandratilleke, G. R., Yu, A. B., Bridgwater, J. and Shinohara, K., 2012, "A Particle-scale Index in the Quantification of Mixing of Particles," *AIChE Journal*, Vol. 58, No. 4, pp. 1099~1118.
- (3) Siraj, M. S., Radl, S., Glasser, B. J. and Khinast, J. G., 2011, "Effect of Blade Angle and Particle Size on Powder Mixing Performance in a Rectangular Box," *Powder Technology*, Vol. 211, pp. 100~113.
- (4) Meyer, 2008, Novel Determination of Powder Mixing Qualities and Study of Dry Coated Particles, PhD Thesis, University of Basel.
- (5) Rhodesa, M.J., Wanga, X.S., Nguyena, M., Stewartb, P. and Liffmanc, K., 2001, "Study of Mixing in Gas-fluidized Beds using a DEM Model," *Chemical Engineering Science*, Vol. 56, No. 8, pp. 2859~2866.
- (6) Peng, Z., Doroodchi, E., Alghamdi, Y. and Moghtaderi, B., 2013, "Mixing and Segregation of Solid Mixtures in Bubbling Fluidized Beds under Conditions Pertinent to the Fuel Reactor of a Chemical Looping System," *Powder Technology*, Vol. 235, pp. 823~837.
- (7) Feng, Y. Q., Xu, B. H., Zhang, S. J., Yu, A. B. and Zulli, P., 2004, "Discrete Particle Simulation of Gas Fluidization of Particle Mixtures," *AIChE Journal*, Vol. 50, No.8, pp. 1713~1728.
- (8) Gupta, A., Katterfeld, A., Soeteman, B. and Luding, S., 2010, "Discrete Element Study Mixing in an Industrial Sized Mixer," *World Congress Particle Technology 6*, Nuremberg, CD Proceedings.
- (9) Fan, L.T., Too, J.R., Rubison, R.M. and Lai, F. S., 1979, "Studies on Multicomponent Solids and Mixtures – Part III. Mixing Indices," *Powder Technology*, Vol. 24, p. 73.
- (10) Fan, L. T., Chen, S. J. and Watson, C. A., 1970, Solids Mixing, *Industrial Engineering Chemistry*, Vol. 62, No. 7, pp. 53~69.
- (11) Lacey, P. M. C., 1954, "Developments in the Theory of Particle Mixing," *J. Appl. Chem.*, Vol. 4, p. 257.
- (12) Kramer, H. A., 1968, "Effect of Grain Velocity and Flow Rate upon the Performance of a Diverter Type Sampler," U. S. Department of Agriculture, Agricultural Research Service, ARS No. 51~25.
- (13) Ashton, M. D. and Valentin, F.H.H., 1966, "The Mixing of Powders and Particles in Industrial Mixers," *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, Vol. 44, No. 5, pp. 166~188.
- (14) van Puyvelde, D. R., 2006, "Comparison of Discrete Elemental Modelling to Experimental Data Regarding Mixing of Solids in the Transverse Direction of a Rotating Kiln," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 61, No. 13, pp. 4462~4465.
- (15) Luding, S., 2008, "Introduction to Discrete Element Methods: Basic of Contact Force Models and How to Perform the Micro-macro Transition to Continuum Theory," *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, Vol. 12, pp. 785~826.