

입자 패킹 공정에 대한 접촉모델별 이산요소법 해석

유재희*, 박준영*[#]

*금오공과대학교 기계설계공학과

Analysis of Particle Packing Process by Contact Model in Discrete Element Method

Jaehye Lyu*, Junyoung Park*[#]

*Department of Mechanical Design Engineering, Kumoh National Institute of Technology

(Received 18 January 2019; received in revised form 26 January 2019; accepted 28 January 2019)

ABSTRACT

In many industries, particle packing is adopted quite frequently. In the particle packing process, the Discrete Element Method (DEM) can analyze the multi-collision of particles efficiently. Two types of contact models are frequently used for the DEM. One is the linear spring model, which has the fastest calculation time, and the other is the Hertz–Mindlin model, which is the most frequently used contact model employing the DEM. Meanwhile, very tiny particles in the micrometer order are used in modern industries. In the micro length order, surface force is important to decreased particle size. To consider the effect of surface force in this study, we performed a simulation with the Hertz–Mindlin model and added the Johnson–Kendall–Roberts (JKR) theory depicting surface force with surface energy. In addition, three contact models were compared with several parameters. As a result, it was found that the JKR model has larger residual stress than the general contact models because of the pull-off force. We also validated that surface force can influence particle behavior if the particles are small.

Key Words : Discrete Element Method(이산요소법), Powder Packing(분체패킹), Contact Model(접촉모델)

1. 서 론

입자의 패킹은 다양한 분야에서 널리 사용되고 있다. 토목이나 건축 분야의 시멘트 공정 과정이나 농업 분야의 곡물 공정 과정에서는 산업화 전부터 입자의 패킹을 사용해왔고, 최근에는 화장품 산업에서 분말을 압축하거나 금속 분말의 소결과정 (Fig.1), 제약분야에서 정제를 제조하는 과정에서도

입자의 패킹이 사용되고 있다. 이전에는 패킹에 사용하는 입자의 크기가 작지 않았고, 패킹 공정의 활용 범위가 넓지 않았으나 산업 분야가 발달하면서 필요해지는 입자의 크기는 주로 1 μm ~1000 μm 정도로 점점 더 작아지고, 패킹 공정의 활용 범위가 넓어지고 있다. 공정의 발달에 따라서 시뮬레이션을 통한 해석에 대한 요구가 증가하였다. 하지만, 다량의 입자에서 일반적인 수치해석 기법에서는 다루기 어려운 다중 접촉이 일어나게 된다. 이러한 입자의 거동을 효과적으로 해석할 수 있는 기법이 이산요소법이다. 이산요소법은 입자의 거동을 해석

Corresponding Author : pcello@kumoh.ac.kr

Tel: +82-54-478-7377, Fax: +82-54-478-7377



Fig. 1 Application of powder packing^[1]

하는 가장 전형적인 수치해석법으로 입자의 접촉을 각각 개별적으로 계산하여 다량의 입자 거동을 해석하게 된다. 입자의 충돌을 계산할 때에는 스프링-질량-감쇠 시스템을 이용한다. 개개의 입자에 작용하는 힘은 크게 체적력과 표면력으로 나눌 수 있는데, 입자의 크기가 클 때는 중력에 의한 체적력이 입자의 움직임을 결정하지만, 입자의 크기가 작아질수록 체적력보다는 표면력이 입자의 움직임에 영향을 미치게 된다. 여기서 표면력에 영향을 요소는 Van der Waals 힘이나 정전기력, 전기이중층력, 입자의 고유 표면에너지 등이 있다. 밀리미터 이상의 크기를 가지는 보편적인 이산요소법의 해석에서는 주로 체적력만을 고려하여 거동을 예측한다. 하지만 입자의 크기가 작아질수록 체적대비 표면이 커지기 때문에 표면력을 고려하는 것이 중요해진다. 이외에도 유체에 의한 유체력, 전기력, 자기력 등이 있으나 일반적인 입자 패킹 공정에서는 접촉력과 중력에 비하면 무시할 만한 수준의 작은 힘이기에 때문에 무시할 수 있다. 따라서, 본 연구에서는 입자의 거동에 영향을 주는 표면력을 고려하여 입자의 패킹에서 접촉력이 미치는 영향을 알아보려고 한다.

2. 접촉모델

이산요소법에서 사용하는 접촉모델은 크게 선형 스프링모델과 비선형스프링모델로 나눌 수 있다. 선형스프링모델은 입자의 접촉 과정에서 발생하는 법선력과 접선력을 입자가 가지는 고유의 감쇠와 스프링을 이용하여 정의한다.

$$F_{Linear,n} = (-k_n \delta_n + \nu_n \Delta v_{contact} \cdot \hat{n}) \cdot \hat{n} \quad (1)$$

$$F_{Linear,s} = \min(k_s \delta_s \cdot \hat{s}, \mu_s |F_n|) \cdot \hat{s} \quad (2)$$

여기서, δ_n 은 중첩 거리를 나타내고, $\Delta v_{contact}$ 은 접촉점에서의 상대운동이다. 기타 변수들에 대한 정의는 여러 문헌에서 찾을 수 있다. 입자의 중첩이 선형으로 변하기 때문에 식이 직관적이고 계산은 빠르지만, 충돌과정에서 두 입자에 작용하는 힘이 접촉이 끝날 때 비연속적이라는 한계가 존재한다. 그에 반해 비선형스프링 모델은 접촉이 끝날 때까지 힘이 연속적이라는 특징을 가지고 있다. 대표적인 비선형스프링 모델에는 Hertz-Mindlin 모델이 있다. 이 모델은 순수한 Hertz이론에 감쇠력을 고려하여 만들어졌는데, 순수한 Hertz이론의 충돌은 완전탄성 충돌이기 때문에 반발력이 보존된다^[2]. 하지만 실제로 두 입자의 충돌에는 힘이 소산되기 때문에 Mindlin의 정의에 의해 감쇠력을 고려하여 실제 충돌을 표현하고자 하였다.

$$F_{HM} = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R \delta^3} - 2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_n m^*} \quad (3)$$

$$S_n = 2E^* \sqrt{R^* \delta}, \quad \beta = \frac{\ln e}{\sqrt{\ln e^2 + \pi^2}} \quad (4)$$

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j} \quad (5)$$

여기서, E^* 는 물성이 다른 두 입자의 영률을 푸아송비를 고려한 등가영률이고, e 는 반발계수이다.

1971년 Johnson, Kendall, Roberts(JKR)는 입자의 표면에 존재하는 표면에너지를 이용하여 두 입자 사이의 표면력을 정의하였다^[3]. 이 접촉 모델은 Hertz의 완전탄성 모델에 표면력을 더하여 충돌을 정의하였으며, 충돌 후 두 입자 사이의 표면에너지에 의해 서로 끌어당기는 힘이 작용한다. 하지만 감쇠력을 정의한 부분이 없기 때문에 Hertz이론과 같이 완전한 탄성 충돌이 되며, 표면력에 의해 충돌 시 기존의 Hertz모델보다 큰 반경을 가지게 되

어 더 큰 접촉 면적을 갖는다.

$$F_{JKR} = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R\delta^3} - \sqrt{16\gamma E^* \pi a^3} \quad (6)$$

여기서, γ 는 표면에너지, a 는 접촉 면적이다.

따라서, 본 연구에서는 이산요소법에서 보편적으로 사용하는 Hertz-Mindlin 모델에 JKR표면력을 고려하여 Hertz-Mindlin with JKR 모델을 사용하여 표면력을 고려한 접촉모델을 표현하였다⁴⁾.

$$F_{HMKR} = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R\delta^3} - 2\sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_n m^*} - \sqrt{16\gamma E^* \pi a^3} \quad (7)$$

3. 단일 충돌 시뮬레이션

패킹 시뮬레이션을 수행하기에 앞서 세 가지 접촉모델을 검증하기 위하여 입자간의 충돌시험 시뮬레이션을 진행하였다⁵⁾. 두 입자를 동일선상에 발생시켜서 위치시키고, 같은 크기의 속도를 서로 반대방향으로 주어 두 입자가 정면으로 충돌하도록 하였다. 두 입자 사이에 작용하는 순수한 접촉력만을 확인하기 위하여 중력을 고려하지 않았고, Hertz-Mindlin with JKR 모델은 표면에너지의 크기에 따라 두 가지 케이스를 사용하여, 선형 스프링 모델과 Hertz-Mindlin 모델, Hertz-Mindlin with JKR 모델 2개, 총 4가지 케이스를 시뮬레이션하였다.

충돌에 의한 힘의 발생을 Fig. 2에 나타내었다.

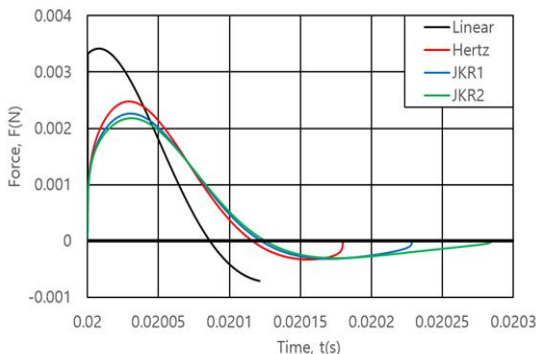


Fig. 2 Results of particle collision test

힘-시간 그래프에 의해서 각 접촉 모델의 특징을 확인할 수 있다. 선형 스프링모델은 기존의 이론식에서 예상되던 것과 같이 충돌이 시작되는 초반에 입자에 큰 힘이 발생하여, 최대 중첩에 빠른 시간에 다다르고 최대 중첩지점을 지나면서 힘이 급격하게 줄어들어 입자의 접촉이 끝난 시점에서는 힘이 0이 아닌 채 접촉이 종료된다. 접촉이 종료될 때 힘이 0이 되지 않는 것은 선형 스프링 모델의 단점이지만, 계산시간이 빨라서 현재도 많은 연구에 이용되고 있다. 일반적으로 가장 많이 쓰이는 Hertz-Mindlin 모델은 충돌하면서 접촉력이 서서히 증가하고, 접촉이 끝날 때에 접촉력은 0이 된다. 표면력을 고려한 Hertz-Mindlin with JKR 모델의 결과는 기존의 Hertz-Mindlin 모델과 그래프가 유사하지만 접촉이 끝나는 시점까지 Hertz-Mindlin 모델보다 긴 접촉시간을 가지며, 이는 두 입자 사이에 서로 끌어당기는 인력의 작용에 기인한다. 즉, 표면에너지가 더 큰 경우에 인력이 더 크게 작용하여, 물성치에 해당하는 표면에너지를 일정 이상으로 크게 설정하면 두 입자가 달라붙어 서로 떨어지지 않는 것도 묘사가 가능하다. 기초적인 충돌시험을 진행하며 세 가지 접촉 모델이 이론에서 제시된 특성을 따르는 것을 확인하였고, 단일 접촉뿐 아니라 다중 접촉에서도 사용이 가능한 모델임을 검증되었다.

4. 시뮬레이션 결과

최근에 입자의 패킹이 많이 사용되는 분야의 예로 배터리산업을 들 수 있다. 배터리의 양극재나 음극재를 제조할 때, 다량의 입자를 압축하는 공정은 필수적이다. 배터리 산업뿐 아니라 최근에 친환경 연료로 떠오르고 있는 목재 펠릿 제조공정에서

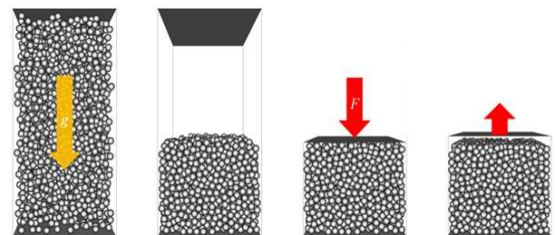


Fig. 3 Scheme of particle packing simulation

도 톱밥의 압축을 위해 패킹 분석이 필요하다. 이러한 산업분야에서는 마이크로 단위의 아주 작은 입자가 사용됨에 따라 일반적인 분체 패킹에 사용되는 접촉모델과 달리 표면력을 고려한 접촉모델이 사용되어야 한다. 따라서, 본 연구에서는 패킹과정에서 작은 입자에 작용하는 응력-변형률 관계를 4가지 접촉모델을 이용해 비교하면서 진행하였다⁶⁾. 패킹 시물레이션은 Fig. 3과 같이 초기에 다량의 입자를 일정 크기의 용기 안에서 무작위로 발생시킨 후 입자가 중력에 의해 적층시킨다.

입자의 적층이 안정화되면 위에서부터 입자를 압축하게 되는데, 이때 모든 입자가 균형적으로 힘을 받을 수 있도록 판을 이용하여 압축을 진행한다. 압축은 입자의 충전 높이가 일정 깊이에 도달하면 압축에 사용하였던 판을 서서히 제거하며 종료된다⁷⁾. 압축과 팽창시에 판에 걸리는 총 힘을 측정하여 이를 판의 면적으로 나눈 값을 응력으로 사용하였고, 변형률은 입자가 판과 접촉하기 시작한 지점으로부터의 거리를 0으로 놓고 측정하였다. 시물레이션에 사용된 다른 조건은 Table 1에 나타났다. 입자의 크기는 표면력이 입자의 거동에 영향을 미칠 수 있도록 충분히 작게 설정했으며, 표면에너지가 높은 값과 낮은 값을 설정하여 표면에너지가 패킹에 미치는 영향을 확인하였다.

Table 1 Material properties and simulation parameter

Properties	Unit	Value	
Particle size	D	m	0.001
Number of particles	N_p	-	3000
Density	ρ	kg/m^3	2500
Young's modulus	E	Pa	1.0E+7
Poison ratio	ν	-	0.29
Coefficient of restitution	e	-	0.215
Surface energy	γ	N/m	0.0, 0.1, 0.2
Down Vel. of Plate	V	m/s	-0.05
Up Vel. of Plate	V	m/s	0.02
Time steps	t	S	1.0E-6

판에 작용하는 응력과 압축이 진행되면서 변하는 입자의 충전 높이 변화율에 의한 변형률과 다량의 입자가 접촉하면서 발생하는 접촉력에 의한 응력을 Fig.4에 나타내었다. Fig. 4(a)의 선형 스프링모델은 모델의 검증 과정에서 보였던 큰 힘이 단속적으로 발생하는 특징처럼 다량의 입자가 접촉하면서 판에 가장 큰 응력이 작용하는 것을 보이고 있다. 반면에 순수 Hertz-Mindlin 모델은 표면력, 즉, 인력의 부재에 따라서 최대응력이 선형모델에 비해서 훨씬 작고, 전체적으로 변형에 대한 저항이 훨씬 적은 것을 확인할 수 있다. Hertz-Mindlin with JKR모델의 결과는 Hertz-Mindlin모델과 비교하여 인력이 작용함에 따라 판에 작용하는 응력이 더 증가한 것으로 나타났다. Fig.4 (d)는 표면에너지가 Fig.4 (c)에 비해 더 크기때문에, 이에 따라 판에 작용하는 최대 응력 또한 1.5배정도 증가하는 것을 보인다. 하지만, Fig.4 (c)와 (d)는 모두 표면력에 의해 응력이 커지기는 하였으나 기본적인 Hertz-Mindlin모델과 비슷한 그래프 형태를 보이는 것을 확인할 수 있다.

Fig. 5는 위쪽 판을 제거한 후에 입자에 잔류하는 잔류응력을 높이에 따라 나타낸 그래프이다. 일반적으로 아래에 위치한 입자가 아래 판에 의한 운동의 구속이 있어서 위에 위치한 입자보다 더 큰 잔류응력을 갖게 된다. 또한 선형스프링 모델과 Hertz-Mindlin 모델은 같은 충돌과정에서 입자의 충돌에 의한 변형을 선형과 비선형으로 정의해 발생하는 힘을 표현한 것이므로 동일 현상에 대하여 비슷한 양상을 보여준다. Fig. 5(a)와 (b)에서 앞에서 설명한 것과 같이 아래에 있는 입자가 더 큰 잔류응력을 가지며, 동일한 패킹현상에 대해 비슷한 경향의 결과를 갖는 것을 확인할 수 있다. Fig. 5(c)와 (d)도 아래에 위치한 입자일수록 더 큰 잔류응력을 갖게 되며, 앞의 응력-변형률 결과와 마찬가지로 표면에너지가 클수록 잔류응력이 커지는 것을 갖는 걸 볼 수 있다. 반면에 Fig. 5의 모든 그림에서 가장 아래에 위치한 입자의 잔류응력이 감소하는 이유는 용기의 벽과 닿아 있어 공극에 의해서 입자들 간의 접촉이 줄어들기 때문으로 판단된다.

Fig. 5에서 입자의 위치와 잔류응력의 관계 그래프를 통해서 잔류응력의 전체적인 경향을 확인할 수

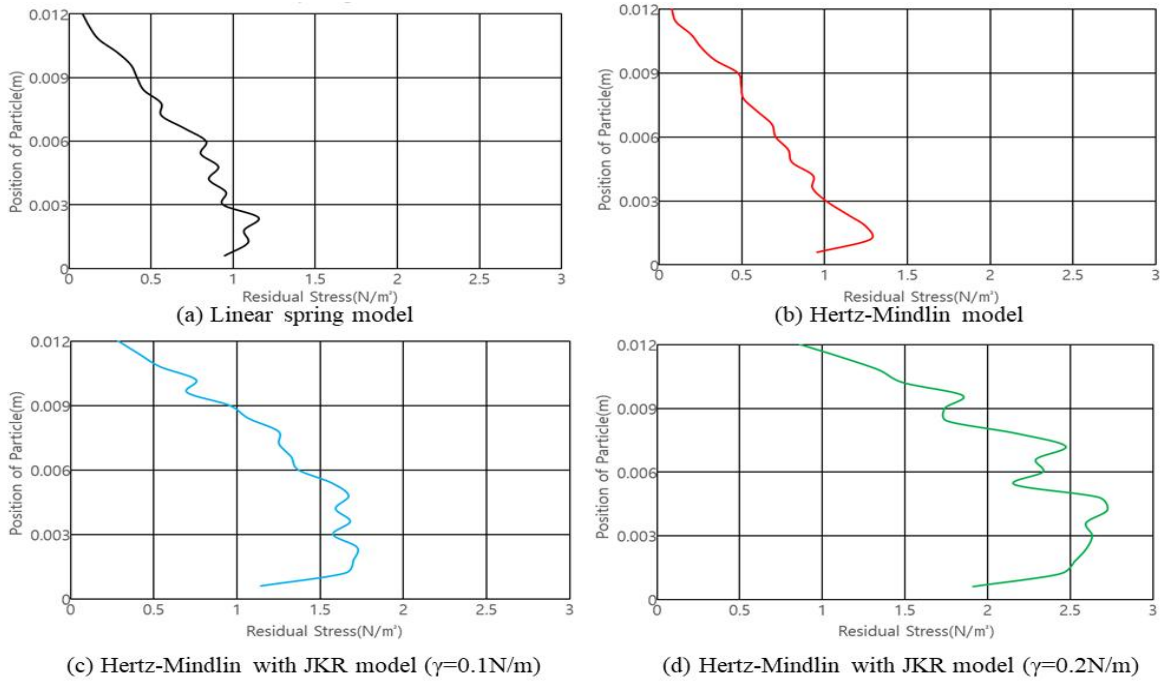
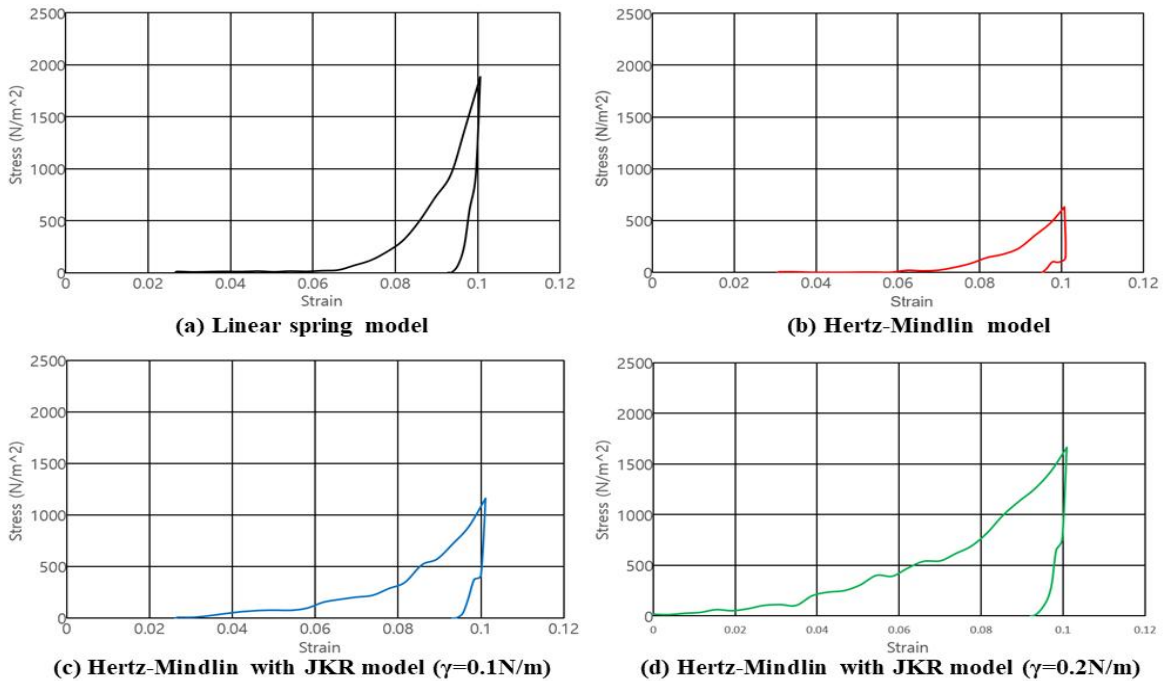


Fig. 4 Residual stress depending on position



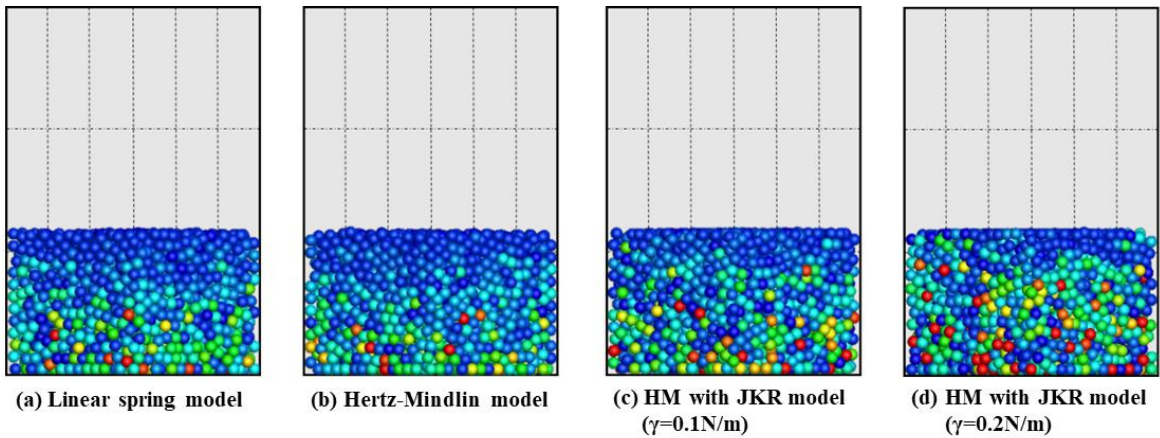


Fig. 6 Residual force acting on particles

있었다. 따라서 Fig.6에서는 각 입자에 남아있는 잔류응력을 각각 모두 가시화하여 나타내었다. Fig. 6는 압축된 입자들의 중앙 단면을 보이고 있다. 파란색에서 시작해 빨간색으로 갈수록 잔류응력의 큰 것을 의미한다. 위에 위치한 입자는 확인할 수 있는 것처럼 위쪽에서 더 이상 압축하고 있는 판이 존재하지 않아 그 응력이 제거되었고, 아래쪽으로 내려갈수록 입자에 작용하고 있는 잔류응력이 많이 남아있는 것을 확인할 수 있다. 또한, 접촉모델별로 보면, 선형 스프링 모델과 Hertz-Mindlin 모델은 큰 잔류응력을 가진 입자의 개수가 비슷하거나, 중간 정도의 잔류응력을 가지고 있는 입자의 분포가 비슷한 반면에, 표면에너지가 접촉력에 영향을 주는 Hertz-Mindlin with JKR 모델의 두 가지 경우(c, d)는 큰 잔류응력을 가지는 입자의 개수가 (a)와 (b)보다 더 많고, 그 분포 또한 아래쪽에 위치하는 것이 아닌 고루 분포하고 있음을 볼 수 있다. 이는 표면에너지가 입자들 사이에서 작용하여 입자들이 서로 끌어당기고 있기 때문이다.

5. 결론

전통적인 이산요소법은 일반적인 접촉모델을 사용하여 분체의 압축에 대한 시뮬레이션을 진행해왔다. 하지만, 최근에는 다양한 산업분야에서 마이크로 크기의 입자를 다루면서 그 입자의 거동에 대하

여 좀 더 정확히 분석할 필요가 생겼다. 따라서 본 연구에서는 작은 입자의 거동에서 영향을 미칠 수 있는 표면력을 고려하기 위하여 Hertz-Mindlin 모델에 기반을 둔 Hertz-Mindlin with JKR 모델을 사용하여 입자 팩킹 시뮬레이션을 진행하였다. 모델 간의 차이를 비교해 보면, 선형 스프링이 가장 강한 압축 저항을 보여주고 Hertz-Mindlin 모델이 가장 작은 저항을 보여주고 있다. 반면에, 표면에너지에 의한 영향으로 입자에 작용하는 힘이 달라져서 잔류응력의 분포에 크게 영향을 준다는 점을 확인하였다.

후 기

“이 논문은 금오공과대학교 학술연구비 지원에 의하여 연구되었음(2016-104-048)”

REFERENCES

1. Wikipedia, “Rhodium powder pressed melted,” (2018) https://en.wikipedia.org/wiki/File:Rhodium_powder_pressed_melted.jpg (accessed 04, Oct., 2018)
2. Johnson, K. L., Contact mechanics, Cambridge Publication, pp. 84-125, 1985.
3. Johnson, K. L., Kendall, K. and Robert, A. D., "Surface Energy and the Contact of Elastic

- Solids", Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 324, No. 1558, pp. 301-313, 1971.
4. Tsunazawa, Y., Fujihashi, D., Fukui, S., Sakai, M., and Tokoro, C., "Contact force model including the liquid-bridge force for wet-particle simulation using the discrete element method", Advanced Powder Technology, Vol. 27, pp. 652-660, 2016.
 5. Hu, G., Hu, Z., Jian, B., Liu, L., and Wan, H., "On the determination of the damping coefficient of non-linear spring-dashpot system to model hertz contact for simulation by discrete element method", Journal of computers, Vol. 6, No. 5, 2011.
 6. Gan, J. Q., Yu, A. B., and Zhou, Z. Y., "DEM simulation on the packing of fine ellipsoids", Chemical Engineering Science", Vol. 156, pp. 64-76, 2016.
 7. He, Y., Evans, T. J., Yu, A.B., and Yang, R.Y., "Numerical Modelling of Die and Unconfined Compactions of Wet Particles", Procedia Engineering, Vol. 102, pp. 1390-1398, 2015.