



전단유동에서 자성사슬의 거동에 대한 직접수치해석

강 태 곤^{*1}

DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF MAGNETIC CHAINS IN SIMPLE SHEAR FLOW

T.G. Kang^{*1}

When exposed to uniform magnetic fields externally applied, paramagnetic particles acquire dipole moments and the induced moments interacting with each other lead to the formation of chainlike structures or clusters of particles aligned with the field direction. A direct simulation method, based on the Maxwell stress tensor and a fictitious domain method, is applied to solve flows with magnetic chains in simple shear flow. We assumed that the particles constituting the chains are paramagnetic, and inertia of both flow and magnetic particles is negligible. The numerical scheme enables us to take into account both hydrodynamic and magnetic interactions between particles in a fully coupled manner, enabling us to numerically visualize breakup and reformation of the chains by the combined effect of the external field and the shear flow. Simple shear flow with suspended magnetic chains is solved in a periodic domain for a given magnetic field. Dynamics of interacting magnetic chains is found to be significantly affected by a dimensionless parameter called the Mason number, the ratio of the viscous force to the magnetic force in the shear flow. The effect of particle area fraction on the chain dynamics is investigated as well.

Key Words : 직접수치해석(Direct Numerical Simulation), 자성사슬(Magnetic Chain), 유한요소법(Finite Element Method), 맥스웰 응력(Maxwell stress), 메이슨 수(Mason Number), 전단유동(Shear Flow)

1. 서 론

유체 중 포함된 0.1~10 μm 크기의 미세한 자기입자를 능동적으로 제어하면 순수한 유체가 가지지 못하는 유변학적(rheological) 특성을 구현할 수 있다고 알려져 있다[1]. 이러한 자기유변(Magneto-rheological, MR) 유체에 외부자기장을 가하면 자기를 띤 입자들이 사슬(chain)이나 클러스터(cluster)를 형성하게 된다. 이러한 자기유변 구조(Magneto-rheological structure)로 인해서 자기유변 유체(MR fluids)는 항복응력과 같은 뉴턴 유체와 다른 특이한 거동을 보인다 이와 같은 자기유변 유체(Magneto-rheological fluids)의 특성을 응용한 브레이크, 완충장치, 엔진 마운트와 같은 자동차 부품 등이 이러한 유체가 사용되는 대표적인 예라고 할 수 있다

최근 미세유체소자(microfluidic devices)[2] 응용 분야에서는 기능성 자기입자를 사용한 바이오센서(magnetic bead-based

biosensor)가 최근 화학, 생물, 및 의료 분야에서 각광을 받고 있으며 관련된 연구가 활발히 진행되고 있다[3-8]. 기능성 자기입자는 그 표면에 다양한 화학 분자를 부착할 수 있으며 외부 자기장을 이용하면 입자들이 원하는 위치까지 이동될 수 있고, 특정 물질과 선택적으로 화학반응을 일으키므로 센서로 이용이 가능하다 향후 이러한 시스템이 다양한 응용분야에서 상용화되기 위해서는 내부에 포함되는 각종 미세유체소자를 최적화할 필요가 있다 이를 위해서는 적절한 물리적 모델과 이를 반영한 과학적 해석 도구의 개발과 소형화에 따른 유동 및 입자 운동에 관한 연구는 필수적이다

지금까지 대부분의 자기입자에 대한 이론 및 수치해석 연구에서는 유체와 입자 사이 또는 입자 상호간의 수력학적 상호작용(hydrodynamic interactions)은 고려하지 않은 스톱스 항력 법칙(Stokes drag law)에 기초한 간단한 모델을 사용하여 입자의 운동을 해석하고 있는 실정이다[7,9,10]. 또한 입자들 사이의 자기 상호작용(magnetic interactions)은 대부분의 경우, 쌍극가정(dipole approximation)에 기초한 간단한 모델을 사용하여 입자에 작용하는 자기력(magnetic force)을 표현하고 있다

¹ 한국항공대학교, 항공우주 및 기계공학부

* E-mail: tgkang@kau.ac.kr



하지만 미세유체 소자에서는 앞에서 언급한 두 가지 모델이 실제 현상을 잘 반영하지 못하는 문제가 발생할 수 있다. 첫째, 미세유체소자의 소형화에 따라서 자기 고체입자와 유체 소자의 벽면 사이의 거리가 가까워져 스톱스 항력 법칙에 의한 해석 결과의 오류가 증가하기 때문에 벽면의 구속효과 (confinement effect)와 입자 상호간의 수력학적 효과를 좀 더 정확하게 고려해야 할 필요성이 제기된다. 둘째, 쌍극자정이 성립하려면 자기장의 변화가 생기는 특성길이(characteristic length)가 입자의 크기보다 훨씬 커야한다. 하지만 미세유체소자에서와 같이 초소형 전자석을 사용하거나 사슬이나 클러스터와 같이 입자들이 밀집된 구조를 형성하는 경우에는 이러한 가정이 성립하지 않게 된다. 이럴 경우에는 쌍극자정에 기초한 모델보다 좀 더 복잡한 고차상호작용 (higher-order interaction)이 고려된 모델을 사용하여야 입자의 거동을 제대로 예측할 수 있다고 알려져 있다[11-13]. 따라서 미세 유체소자에서와 같이 수력학적 상호작용과 자기 상호작용의 효과가 커지는 상황에서 대해서 유동현상과 입자의 거동을 실제와 가깝게 예측할 수 있는 해석 기법의 개발이 절실히 요구되고 있다.

본 연구에서는 유한요소법(finite element method)에 기초한 가상영역법(fictitious domain method)[14-16]과 맥스웰 응력텐서(Maxwell stress tensor)[11,15]를 도입한 수치해석 모델을 소개한다. 가상영역법을 사용하여 유체입자 및 입자입자의 수력학적 상호작용을 직접 고려하였으며 맥스웰 응력텐서를 사용하여 외부에서 인가된 자기장에 의해 입자에 작용하는 힘과 고체입자들 사이의 자기 상호작용을 고려할 수 있다. 따라서 원칙적으로 가정이 없이 유체의 유동과 자기입자의 운동을 동시에 풀 수 있는 일종의 직접수치해석기법(direct numerical simulation method)이라고 할 수 있다. 개발된 해석기법을 사용하여 균일한 외부자기장이 존재하는 전단유동에서 자기사슬(magnetic chain)의 거동을 수치적으로 분석한다. 이때 자기력에 대한 점성력의 비를 나타내는 무차원 수인 메이슨 수(Mason number)의 변화에 따른 유동 특성과 사슬의 거동을 살펴볼 것이다.

2. 모델링

2.1 지배방정식

자기입자를 포함하는 유체유동을 풀기 위해서는 자기장과 속도장을 동시에 풀어야 한다. 이 때 자기입자에 작용하는 힘을 정확하게 표현할 수 있는 모델과 입자유체의 상호작용은 반드시 고려하여야 한다. 자기장 문제에 관한 지배방정식은 식 (1,2)와 같이 기술되는 맥스웰 방정식이다

$$\nabla \times H = 0 \tag{1}$$

$$\nabla \cdot B = 0 \tag{2}$$

위의 식 (1,2)에서 H는 자기장의 세기(magnetic field intensity), J는 전류밀도(current density), B는 자속밀도(magnetic flux density)를 나타낸다. 자속밀도와 자기장 사이의 관계를 나타내는 구성방정식(constitutive equation)은 $B = \mu H$ 로 표현된다. 자기 도자율(magnetic permeability, μ)은 외부 자기장 크기의 함수로 표현된다. 자화율(susceptibility)과 도자율은 $\mu = \mu_0(1 + X_p)$ 와 같은 관계가 있다. 자화율 곡선은 자기장의 크기가 작은 영역에서는 선형거동을 보이지만 자기장의 크기가 증가할수록 비선형 거동을 보이게 된다. 자기장 문제를 수치적으로 풀 때 위의 두 식을 직접 풀지 않고 자기 포텐셜(magnetic potential)을 도입하여 두 편미분 방정식을 하나의 편미분 방정식으로 변환하여 푼다. 외부에서 인가된 전류 밀도가 0인 경우 ($J=0$), 스칼라 포텐셜(ϕ)을 도입하면 지배방정식은 식 (3)과 같이 표현된다.

$$\nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = 0 \tag{3}$$

이 때 자기장(H)과 자기 포텐셜(ϕ)은

$$H = -\nabla \phi \tag{4}$$

와 같은 관계를 만족한다. 유체와 고체 자기입자의 계면에서는 포텐셜의 값과 자속밀도 벡터의 수직성분이 연속이다. 도자율이 상수일 경우는 라플라스 방정식을 풀면 된다. 하지만 자기포화 현상을 고려할 경우 도자율이 자기장의 함수이므로 지배방정식이 비선형 방정식이 되어서 반복계산(iteration)이 요구된다.

자기장에 의한 입자의 운동과 유동을 표현하기 위해서 자기장과 입자에 작용하는 힘에 대한 관계식이 필요하다. 지금까지 대부분의 연구에서는 쌍극자정에 기초한 모델을 사용하였다. 하지만 본 연구에서는 보다 더 일반적인 경우까지 확장이 가능한 맥스웰 응력 텐서(Maxwell stress tensor)에 기초한 모델을 도입한다. 식 (3)과 주어진 경계조건을 만족하는 자기 포텐셜이 계산되면 식 (4)에 의해서 자기장(H)을 계산할 수 있다. 이 때 계산된 자기장에 의한 맥스웰 응력(T_m)은 식 (5)에 의해서 계산이 된다.

$$T_m = \mu(HH - \frac{1}{2}H^2) \tag{5}$$

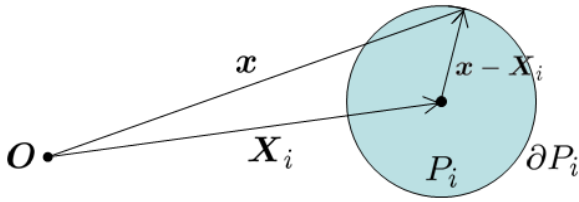


Fig. 1 Definition of coordinates for a rigid magnetic particle.

전자기 이론에서 알려진 바와 같이 자기장에 의한 체적력은 식 (6)와 같이 계산된 응력 텐서의 발산(divergence)에 의해 구해진다[11].

$$f = \nabla \cdot T_m \quad (6)$$

이 경우 자기력을 아무런 가정 없이 고려할 수 있어서 쌍극 가정 (dipole approximation)이 만족하지 않는 자기사슬 문제나 미세유체소자에서 같이 입자 주변에 국부적으로 큰 자기장의 변화가 생기는 문제에 특히 효과적이다[3,14]. 계산된 자기력(f)은 유동해석을 위한 스톡스 식(Stokes equations)에 체적력으로 기여하게 된다 따라서 유동해석을 위해 풀어야 할 지배방정식은 다음과 같다

$$\nabla p - \mu \nabla^2 u = \nabla \cdot T_m \quad (7)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (8)$$

$$u = U_i + \omega_i \times (x - X_i) \quad (9)$$

식 (7)과 (8)은 각각 크리핑유동(creeping flow)에서 운동량 보존식(momentum balance equation)과 비압축성 유체에 대한 질량보존식(mass conservation equation)이며, 식 (9)는 Fig. 1에 도시한 것과 같은 i 번째 입자의 표면에서 만족해야 할 강체운동(rigid body motion)을 위한 구속 조건이다

식 (7-9)에서 u와 p는 각각 속도 벡터와 압력을 나타내며 X_i 는 입자의 질량중심에 대한 위치 벡터, U_i 는 입자의 속도 벡터, ω_i 는 입자의 회전속도이다 위의 세 가지 식 외에 시간에 따른 입자의 운동을 기술하기 위해 필요한 식은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{dX_i}{dt} = U_i \quad (10)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i \quad (11)$$

식 (10)에서 t는 시간 θ_i 는 입자의 회전각을 나타낸다 입자의 크기가 작을 경우 (예를 들면 직경이 10mm 이하인 polystyrene 입자) 자기 입자의 관성을 무시할 수 있다 이 경우 입자표면에서의 힘의 균형은 식 (11)과 같이 표현된다

$$F_i = \int_{\partial P_i} (\sigma + T_m) \cdot n dS = 0 \quad (12)$$

$$T_i = \int_{\partial P_i} r_i \times [(\sigma + T_m) \cdot n] dS = 0 \quad (13)$$

식 (12,13)에서 F_i 와 T_i 는 각각 i번째 입자에 작용하는 유동과 자기력에 의한 힘과 토크의 합을 나타낸다

2.2 유한요소 수식

자기장에 관한 문제는 자기장에 관한 맥스웰 방정식 구성 방정식, 경계조건들을 유한요소법(finite element method)을 사용하여 자기 포텐셜에 대한 수치해를 구하게 된다. 식 (3)은 확산방정식(diffusion equation)과 동일한 형태를 띠고 있으므로 비교적 쉽게 해를 구할 수 있다 유한요소 수식화 과정에서 계산 영역은 이차요소(quadratic element)를 사용하여 차분화 한다. 본 연구에서는 자기장고 속도장에 관한 최종 행렬식을 풀기 위해 바젤대학(University of Basel)에서 개발된 PARDISO[17] 직접 희박행렬 해석기를 사용한다 PARDISO는 사용이 용이하고 스레드 안전성을 제공하며 메모리 효율적인 고성능 소프트웨어 라이브러리로서 공유 메모리 멀티 프로세서에서 대규모 선형 시스템 방정식을 풀 수 있는 도구이다

유동문제는 운동량 보존식, 질량보존식, 입자의 강체 운동에 관한 구속식, 경계조건들을 유한요소법을 사용하여 풀게 된다. 이때 강체운동에 관한 구속 방정식은 라그랑지 곱수법(Lagrange multiplier method)을 사용하여 처리하는 가상영역법(fictitious domain method)[16]을 이용한다. 가상영역법을 사용할 경우 고체 입자와 유체, 고체 벽면, 또 다른 고체 입자들 사이의 수력학적 상호작용이 유한요소수식화 과정에서 자동적으로 고려되는 장점이 있다 Glowinski 등[16]이 제안한 유한요소 차분화 과정에 의해 자기입자를 포함한 유동문제에 관한 최종 유한요소식이 얻어진다 유한요소 격자계는 유체와 고체를 포함하는 전체 계산 영역에 대한 격자와 고체 입자의 표면에 격자로 이루어진다 이 수치해석 기법을 사용할 경우 전체 영역에 대한 하나의 격자를 사용하여 입자를 포함한 유동 문제를 풀고 입자에 대한 격자는 구속조건을 처리하는 용

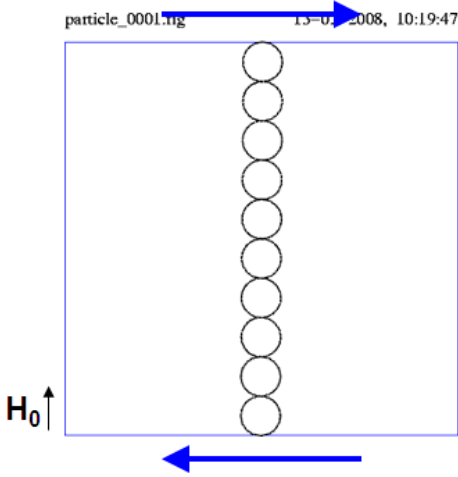


Fig. 2 Schematic representation of a magnetic chain in simple shear flow in the presence of a uniform magnetic field.

도로만 사용된다[14-16]. 입자를 포함한 유동 문제는 비정상 상태에 관한 문제이므로 유한요소수식화 과정을 통해 얻어진 대형 희박행렬식(large sparse matrix)을 효과적으로 푸는 것이 무엇보다도 중요하다. 이를 위해 자기장 문제와 동일한 PARDISO[17] 직접 희박행렬 해석기 (direct sparse matrix solver)를 사용한다. 수치해석의 결과로서 유체의 속도와 압력 외에 자기입자의 선속도와 각속도와 같은 강제운동에 관한 정보도 해의 일부로서 구해진다. 이렇게 구해진 입자의 속도는 입자의 운동을 기술하기 위해 필요한 식(10,11)을 Adams-Bashforth 방법을 이용하여 풀기위해 사용되어 새로운 시간에서 입자의 위치와 회전각을 얻게 된다. 이렇게 구해진 새로운 입자의 위치에서 자기장 문제와 유동 문제를 푸는 과정을 설정된 시간 동안 반복하게 된다.

3. 결과 및 토의

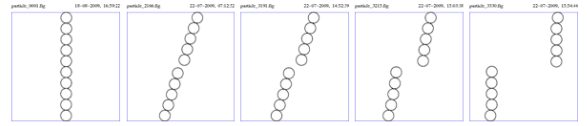
3.1 무차원 지배방정식

식 (7)을 무차원화 과정을 거치면 다음과 같은 식을 얻을 수 있다.

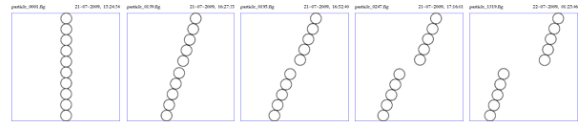
$$\nabla^* p^* - \nabla^{*2} u^* = \frac{1}{Ma} \nabla^* \cdot T^* \quad (14)$$

이 때 Ma는 메이슨 수 (Mason number)로서 자기력에 대한 점성력의 상대적인 크기를 나타내는 무차원 수이다. Fig. 2에 도시한 것과 같은 균일한 자기장의 영향을 받는 자기입자를 포함하는 전단유동에서 아래 식과 같이 정의된다

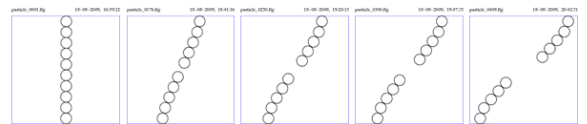
Ma=0.0001



Ma=0.001



Ma=0.01



Ma=0.1

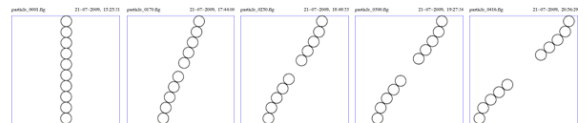


Fig. 3 Breakup of a magnetic chain in shear flow influenced by the Mason number ranging from 0.0001 to 0.1.

$$Ma = \frac{\eta \dot{\gamma}}{\mu_0 \chi_p H_0^2} \quad (15)$$

식 (15)에서 H_0 는 자기장의 세기, χ_p 는 입자의 자화율, $\dot{\gamma}$ 는 전단변형률을 나타낸다. 따라서 메이슨 수가 작을수록 자기력의 크기가 점성력에 비해 더 커지는 경우에 해당한다.

3.2 해석 결과

수치해석을 통하여 무차원식을 이용하여 메이슨 수를 변화시키면서 사슬의 거동을 살펴보았다. 정사각형 계산영역은 가로와 세로로 각각 200개의 사각형 형상의 요소로 분할하였다. 속도에 대해서는 2차, 압력에 대해서는 1차로 보간을 하는 Q2/Q1 요소가 해석에 사용되었다. 원형 입자는 유동장 해석에 사용되는 요소와 같은 크기의 1차원 유한요소를 사용하여 분할하였다. 이 때 구속조건인 식 (9)를 차별화할 때 나타나는 라그랑지 곱수 (Lagrange multiplier)는 속도보다 1차원 낮은 보간함수를 사용한다. 계산영역의 좌우면에 대해서는 주기조건(periodic condition)을 부여하고 라그랑지 곱수를 사용하여 유한요소수식화 과정에서 이 조건을 처리하였다. 사슬은 10개의 상자성 입자(paramagnetic particle)로 구성되어 있으며 사슬의 양끝은 채널의 상하면과 접하고 있다. 사슬은 초기에 수직으로 정렬되어 있다고 가정하고 문제를 풀게 된다. 해석에 사



용된 메이슨 수는 0.0001, 0.001, 0.01, 0.1 이며, 이 때 자화율 값은 1을 사용하였다 이 때 자화율 값은 바이오센서에 응용되는 상자기 입자의 대표적인 자화율 값을 사용하였다

전단유동에서 네 개의 메이슨 수에 대해서 사슬이 끊어지는 순간의 변형 형상을 Fig. 3에 도시하였다. 먼저 메이슨 수가 가장 작은 경우 ($Ma=0.0001$)에서는 수직인 사슬이 전단유동에 의해 기울어지고 곧 이어 두 개의 사슬로 분리된다 그리고 분리된 사슬은 다시 자기장 방향으로 정렬하여 강체처럼 움직이는 특성을 보여주고 있다 하지만 메이슨 수가 증가할수록 점성력이 증가하여 분리된 사슬의 기울어진 각도도 증가하는 것을 볼 수 있다 이 때 $Ma=0.001$ 보다 작은 경우 분리된 사슬이 강체와 같은 거동을 보이며 이 값보다 클 경우에는 유동방향으로 사슬이 기울어지고 메이슨 수가 더 클 경우 ($Ma=0.1$) 사슬이 분리되는 순간 S자 형태의 변형 형상을 보이며 분리된 사슬이 더 작은 사슬로 재 분리되어 운동하는 것을 수치해석을 통해 확인할 수 있었다.

후 기

이 논문은 2008년도 한국항공대학교 교비지원 연구비에 의하여 지원된 연구의 결과입니다

참고문헌

- [1] 2006, Goncalves, F.D., Koo, J.-H. and Ahmadian, M., "A Review of the State of the Art in Magnetorheological Fluid Technologies-Part I: MR fluid and MR fluid models," *The Shock and Vibration Digest*, Vol.38, pp.203-219.
- [2] 1990, Manz, A., Graber, N. and Widmer, H.M., "Miniaturized total chemical analysis systems: a novel concept for chemical sensing," *Sens Actuat B Chem.*, Vol.1, pp.244-248.
- [3] 2004, Gijs, M.A.M., "Magnetic bead handling on-chip: New opportunities for analytical applications," *Microfluid Nanofluid*, Vol.1, pp.22-40.
- [4] 2006, Pamme, N., "Magnetism and microfluidics," *Lab. on a Chip.*, Vol.6, pp.24-38.
- [5] 2004, Rida, A. and Gijs, M.A.M., "Manipulation of self-assembled structures of magnetic beads for microfluidic mixing and assaying," *Anal. Chem.*, Vol.76, pp.6239-6246.
- [6] 2004, Pamme, N. and Manz, A., "On-chip free-flow magnetophoresis: Continuous flow separation of magnetic particles and agglomerates," *Anal. Chem.*, Vol.76, pp.7250-7256.
- [7] 2004, Suzuki, H., Ho, C.-M. and Kasagi, N., "A chaotic mixer for magnetic bead-based micro cell sorter," *J. Microelectromech. Syst.*, Vol.13, pp.779-790.
- [8] 2005, Megens, M. and Prins, M., "Magnetic biochips: a new option for sensitive diagnostics," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol.293, pp.702-708.
- [9] 2003, Melle, S. and Martin, J.E., "Chain model of a magnetorheological suspension in a rotating field," *J. Chem. phys.*, Vol.118, pp.9875-9881.
- [10] 2003, Melle, S., Calderon, O.G., Rubio, M.A. and Fuller, G.G., "Microstructure evolution in magnetorheological suspensions governed by Mason number," *Phys. Rev. E*, Vol.68, 041503.
- [11] 1941, Stratton, J.A., *Electromagnetic theory*, McGraw-Hill Book Company Inc., New York.
- [12] 1995, Jones, T.B., *Electromechanics of particles*, Cambridge University Press, New York.
- [13] 1997, Wang, X., Wang, X.-B. and Gascoyne, P.R.C., "General expressions for dielectrophoretic force and electrorotational torque derived using the Maxwell stress tensor method," *J. Electrostat.*, Vol.39, pp.277-295.
- [14] 2008, Kang, T.G., Hulsen, M.A., den Toonder, J.M.J., Anderson, P.D. and Meijer, H.E.H., "A direct simulation method for flows with suspended paramagnetic particles," *J. Comput. Phys.*, Vol.227, pp.4441-4458.
- [15] 2007, Kang, T.G., Hulsen, M.A., den Toonder, J.M.J., Anderson, P.D. and Meijer, H.E.H., "Chaotic mixing induced by a magnetic chain in a rotating magnetic field," *Phys. Rev. E*, Vol.76, 066303.
- [16] 1999, Glowinski, R., Pan, T.W., Hesla, T.I. and Joseph, D.D., "A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows," *Int. J. Multiphase Flow*, Vol.25, pp.755-794.
- [17] 2004, Schenk, O. and Gartner, K., "Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with pardiso," *Futur. Gener. Comp. Syst.*, Vol.20, pp.475-487.