

다상 유체 시스템의 다중 스케일 시뮬레이션 기법에 관한 연구

한 민 섭^{*†}

* 인천대학교 기계시스템공학부

Development of Multiscale Simulation Technique for Multiphase Fluid System

Minsub Han^{*†}

* School of Mechanical System Engineering, Univ. of Incheon

(Received August 17, 2009 ; Revised April 25, 2010 ; Accepted May 11, 2010)

Key Words : Domain Decomposition(영역분해법), Molecular Dynamics Simulation(분자동역학 전산모사), Contact Line(접촉선)

초록 : 다상 유체 시스템에 적용할 수 있는 다중스케일 입자 시뮬레이션 기법을 개발하였다. 거시 모델과 미시모델이 만나는 경계영역에서 세가지로 구별되는 기능을 수행하도록 하였다. 먼저, 기상과 액상을 분리하여 연결하기 위해 벽을 설정하였다. 또 경계영역을 근처에서 경계의 위치를 측정하고 이것에 벽의 각도와 위치가 연동하여 접촉각 값을 미시모델에서 거시모델로 전달하게 하였다. 마지막으로, 입자의 삽입과 제거를 통해 경계영역의 질량과 온도를 거시적 조건에 맞추도록 하였다. 이 알고리즘들을 적용한 완전습윤과 부분습윤 시스템들은 좋은 결합 결과를 보였다.

Abstract : A multiscale particle simulation technique that can be applied to a multiphase fluid system has been developed. In the boundary region where the macroscopic- and microscopic-scale models overlap each other, three distinctive features are introduced in the simulation. First, a wall is set up between the gas and liquid phases to separate them and match the phases respectively to the macroscopic conditions stably. Secondly, the interfacial profile is obtained near the matching region and the wall translates and rotates to accommodate the change in the liquid-vapor interfacial position in the molecular model. The contact angle thus obtained can be sent to the macroscopic model. Finally, a state of mass and temperature in the region is maintained by inserting and deleting the particles. Good matching results are observed in the cases of the complete and partial wetting fluid systems.

- 기호설명 -

U : 포텐셜에너지
 a : 가속도
 r : 상대거리, 거리
 t : 시간
 v : 속도

그리스문자

δ : 유한차분

하첨자

LJ : Lennard-Jones
 c : cut-off

1. 서론

최근 나노 기술의 발전과 더불어 정밀하고 소형이며 다양한 기능을 수행할 수 있는 기계 시스템에 대하여 많은 관심이 집중되고 있다. 이것은 마이크로나노 스케일 수준에서의 기계장치를 고안하려는 노력으로 이어지고 있으며 이에 대한 연구 개발이 가속화되는 추세이다. 이런 노력들을 뒷받침하기 위해서는 미소스케일에서 발생하는 다양하고 복잡한 현상들에 대한 이해를 높이고 설계, 시험, 제작 등에 유용한 정보를 제공하기 위한 신뢰성 있고 우수한 모델링 기술의 확보가 필수적이다. 그 동안 기계시스템에 적용되어 오던 연속체에 근거한 대부분의 모델링 방법들은 마이크로나노 스케일에서의 적용에 많은 문제점을 내포하고 있으

† Corresponding Author, mhan@incheon.ac.kr

며 수정이나 보완이 이루어지고 있다.

특히, 다상(multi-phase) 유체 시스템에서 마이크로나노 스케일의 전달현상(transport phenomena)이 발생할 때 연속체 모델링을 통한 특성 규명에 많은 어려움이 발생한다. 이런 전달현상들은 중요한 응용에서 흔히 발견할 수 있다. 한 예로 최근에 광학기구나 마이크로프로세서 등을 구성하는 회로들이 점점 더 고집적화, 고성능화됨에 따라 국소적인 영역에서 전력 소모가 집중되는 경우가 발생되면서 국소적인 과열이 전체 성능을 크게 저하시키는 문제가 발생되고 있다. 이런 소위 "Hot Spot"에서의 최고 온도를 안정적으로 유지시키기 위해 마이크로 시스템 내에서 액막 증발 및 비등을 이용한 기술이 주목을 받고 있다.⁽¹⁾ 그러나 여기에 지배적인 영향을 미치는 요소인 접촉선(Contact line)이나 미세층(microlayer) 등은 미소스케일 영역에서의 다상유동으로 대표된다. 또 다른 예로, 나노 기술에 있어 장치들을 만들고 조립하는 방법은 정립해야 할 중요한 요소기술 중에 하나이다. 표면장력(surface tension), 브라운 운동(Brown Motion)과 계면 특성 등이 지배적으로 작용하는 미소시스템에서는 거시적인 제조 및 조립 방식들을 그대로 통용하기 힘들며 자기조립(self-assembly) 방식이 유력하게 대두된다. 이것의 하나로 액적의 증발 과정에서 접촉선에 용매가 정렬하는 현상이 주목을 받고 있다.⁽²⁾ 이 현상의 주된 특성을 지배하는 접촉선의 동적거동과 증발 계수, 계면의 물리 화학적 특성 등이 규명되어야 하나 거시적인 방법으로는 정확한 특성 파악이나 모델링이 난해하다.

이 다상열유체 문제들이 보여주는 공통적인 특징은 미소스케일에서의 특성이 전체 (거시적) 시스템에 지배적으로 작용하며 한 가지 스케일의 모델링만으로는 전체 현상을 규명하기 어렵다는 점이다. 입자를 기반으로 하는 시뮬레이션 기술은 이런 어려움들을 극복하는데 유용한 모델링 방법이다. 바탕이 되는 물리 현상을 개체적으로 대표하므로 미소스케일에서 입자의 특성을 직접적으로 구현하기 용이하다. 또 분자 수준에서 연속체에 이르기 까지 각각 적용할 수 있는 입자기반의 방법론들이 이미 정립되어 왔으므로 각 스케일에서의 모델들 간에 연속성을 유지하기 용이하여 다중스케일 모델을 세우는데 유리하다.⁽³⁾

본 연구에서는 입자를 기반으로 다상 유체시스템에 적용할 수 있는 다중스케일(multi-scale) 시뮬레이션 기법을 개발하였다. 이것을 위해 거시모델

의 경계조건과 입자(미시)모델의 조건을 맞추어 수 있는 경계전달 알고리즘을 고안하였다. 이 알고리즘의 핵심적인 요소는 계면의 안정적인 처리에 있으며 본 연구에서는 계면에 대한 안정적 맞춤을 가능하게 하는 알고리즘의 개발에 초점을 맞추었다. 다음 장에서는 다중스케일 시뮬레이션 기술에 대한 일반적인 배경 및 본 연구의 세부 내용에 대해 기술하였다. 3 장에서는 본 연구에서 수행한 시뮬레이션 방법과 다상 유동에 대한 경계전달 알고리즘에 대한 기법을 기술하였다. 4 장에서는 전장의 방법을 토대로 수행한 시뮬레이션 결과를 기술하였다. 마지막 장에서는 본 연구의 결과를 정리하였다.

2. 배경

2.1 다중스케일 시뮬레이션의 일반적 방법론

다중스케일 알고리즘의 가장 핵심적인 과제는 길이 스케일과 시간 스케일의 차이가 존재하는 해석 모델간의 상이점을 어떻게 극복하느냐는 점이다. 예를 들어, 연속적인 거시적 유체와 입자적이고 무작위적인 미소 입자의 집합간의 특성의 차이를 융화시킬 수 있어야 안정적이고 효과적인 알고리즘이 될 수 있다. 또 고체와는 달리 유체가 모델링 대상이 될 때는 복잡성이 추가된다. 유체입자들은 운동이 상대적으로 자유로우므로 일반적으로는 입자, 운동량, 에너지 전달을 가능하게 하기 위한 열린 시스템을 구현할 수 있어야 한다. 또 상대적으로 높은 수준의 변동(fluctuation)을 포함하고 있어 견고한 맞춤(matching) 방법이 요구된다. 마지막으로 입자 상호간의 상호작용의 거리가 일반적으로 크므로 이에 대한 고려가 있어야 한다.

다중스케일 알고리즘은 크게 직렬적인 방법과 병렬적인 방법으로 구분할 수 있다.⁽⁴⁾ 직렬적인 다중스케일 알고리즘은 각 모델에 대해 순차적인 해석을 수행한다. 모델의 해석 순서는 미시적 모델에서 시작하여 거시적인 모델로 옮겨간다. 이때 미시적인 모델에서 해석된 결과에서 얻어진 정보를 바탕으로 거시모델 해석이 수행된다. 예를 들어 양자역학 모델에서 화학결합에 대한 정보를 얻어서 분자 역학(Molecular Mechanics) 모델을 해석하고 여기서 나온 결과를 바탕으로 물성치를 구해내어 연속체 역학의 문제를 해결하는 방식이다.

병렬적인 다중스케일 알고리즘은 대상 문제에서 각 스케일의 모델들이 독립적으로 계산될 수 없는 경우에 적용된다. 즉, 각 스케일 모델들이 상대스

케일의 결과를 적용하여야 해석이 가능하다. 복잡 흐름체(complex fluid)나 크랙(crack) 등이 대표적인 문제들이다. 이런 문제들을 해결하기 위한 방법론들은 영역분해법(domain decomposition), 분해능연결법(coupled-resolution method) 등으로 크게 구분할 수 있다. 이 중에서 영역분해법은 문제를 각 특성별 영역으로 구분하여 각각 해석하는 것이다. 각 영역에서 해석이 동시에 또는 번갈아 이루어지며 정해진 시간스텝의 해석이 끝나면 한 영역에서 다른 영역으로 조건을 전달하고 다음 시간스텝으로의 해석이 계속해서 이루어진다. 이 방법에서는 필연적으로 두 스케일의 모델을 연결하는 맞춤 영역(matching region)이 존재한다. 여기서의 강건한 알고리즘 구축이 필수적이다.

본 연구에서는 영역분해법을 대상으로 하여 경계 영역에서의 모델 간 연결 알고리즘 개발에 집중하고자 한다. 특히, 다상유동 문제에 있어 계면의 안정적인 구현을 가능하게 하는 입자 시뮬레이션 기술의 개발을 목표로 한다.

2.2 경계 전달 알고리즘 구현

유체 시스템에 대해 영역분해법이 적용되기 위해서는 일반적으로 열린 시스템을 위한 알고리즘이 요구된다. 각 해석 영역의 경계에서 물질과 운동량, 에너지를 자유롭게 교환할 수 있어야 한다. 여기서는 두 가지 종류의 해석값의 흐름이 존재한다. 즉, 입자(particle: P) 해석모델에서 연속체(continuum: C) 해석모델로의 흐름(P→C)과 그 반대의 흐름(C→P)이 그것들이다. 전자에 대한 알고리즘에서 주된 문제는 제한 시간에서 얻어지는 입자 시뮬레이션 결과의 요동을 연속체 모델에 어떻게 안정적으로 적용하는가에 집중한다. 반면 연속체 해석모델에서 입자 해석모델로의 흐름은 여러 기술적인 어려움을 동반하고 있다. 근본적으로는 연속체 해석모델의 결과가 입자의 상태를 유일하게 결정할 수 없다는 사실이 바탕에 깔려 있다. 효과적인 알고리즘은 입자의 동적상태에 대한 요동을 최소화하는 동시에 정해진 전달량을 엄밀하게 구현할 수 있어야 하며 이것들이 입자 시뮬레이션의 문제 크기를 심각하게 증가시키지 말아야 한다. 이 연구에서는 두 가지의 기존 방법론에 주목하여 이것들을 이상유체에 적용하기를 검토하였다. 하나는 GCMD(grand canonical molecular dynamics)이고 다른 하나는 Flekkoy 등이 제안한 유속경계조건(flux boundary condition)이다.

Flekkoy 등이 제안한 유속 경계 조건은 입자 시뮬레이션 경계에서 전달량의 엄밀한 적용을 가능

하게 하는 알고리즘이다.⁽⁵⁾ 여기서 주어진 운동량과 에너지 조건들의 적용을 주된 목표로 하고 물질 교환은 그 조건에 의해 발생하는 동적 환경에 의해 자동적으로 맞추어진다. 거시모델에서 주어진 조건은 입자 모델에 외력의 형태로만 적용된다. 적용되는 힘은 평균힘과 변동힘으로 나뉜다.

GCMD는 분자동역학 시뮬레이션에서 큰바른틀모듬(grand canonical ensemble)을 구현하는 것이다.⁽⁶⁾ 시뮬레이션의 한 영역이 저장소(reservoir)에 해당하는 특성을 구현한다. 이것은 보통 그 부분 영역의 화학포텐셜을 일정하게 만듦으로써 가능하게 된다.

GCMD 알고리즘은 전체적으로 안정적이고 엄밀하게 큰 시스템과 연결을 가능하게 하고 무엇보다도 입자의 교환을 가능하게 하여 열린 시스템의 시뮬레이션이 가능하다. 반면에 안정적인 정상 상태를 유지하기 위해서는 입자의 생성 및 제거 횟수가 충분히 설정되어야 하며 이는 곧 계산 비용의 증가로 이어진다.

다중스케일 입자 시뮬레이션을 위한 경계전달 알고리즘을 적용한 연구들은 최근까지 많이 발표되어 왔지만 대부분 단상 유동을 대상으로 개발된 것들이다. 경계전달 알고리즘의 적용대상을 단상(single phase)에서 다상(multi-phase)으로 발전시키기 위해서는 계면에 대한 처리가 핵심적인 문제로 대두된다. 즉, 입자 모델과 거시(연속체) 모델에서 발생하는 고체/액체, 액체/기체, 고체/기체 등의 계면들을 안정적으로 맞출 수 있어야 한다. 본 연구는 계면에 대한 안정적인 맞춤을 가능하게 하는 알고리즘 개발을 목표로 하였다.

3. 방법

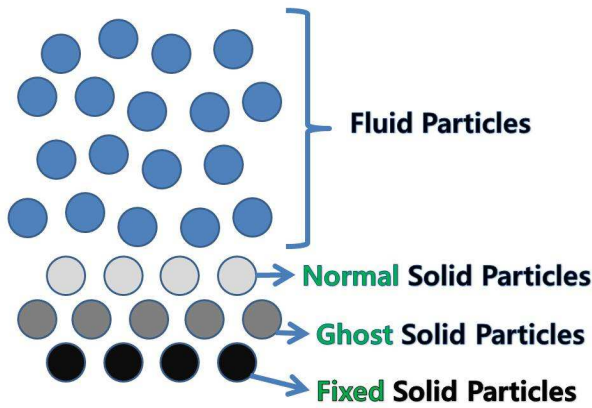
3.1 시뮬레이션 방법 일반

본 연구의 시뮬레이션 결과는 모두 분자동역학 시뮬레이션 기법을 이용하여 얻은 결과들이다.^(6,7) 이용한 시뮬레이션 기법들 중 일반적인 사항들을 다음에 정리하였다. 다중스케일 시뮬레이션 기법과 관련한 사항들은 다음 단락에 따로 정리하여 기술한다. 본 연구에서 행한 모든 시뮬레이션의 결과들은 모두 축소된 단위를 사용하여 정리되었다. 이것은 이용한 해석코드가 축소단위에 근거하여 개발되었을 뿐 아니라 기법 개발이라는 본 연구주제의 특성상 일반적인 시스템을 대상으로 하려는 의도가 있다. 바탕이 된 축소단위들은 Table 1에 정리하였다.

분자동역학적으로 모사한 대상은 고체, 액체, 기체가 모두 포함된 다상 유체시스템이다. 액체와

Table 1 Reduced units used in simulation

Physical properties	Values
Length	σ
Temperature	ϵ/k_B
Time	$\sigma\sqrt{m/\epsilon}$

**Fig. 1** Schematic of the model of atomic solid

기체는 단원자 분자로 구성되어 있으며 다음과 같은 분자 간 작용에너지에 바탕을 두고 모델링되었다. 즉, 분자간 힘은 절단하고 이동한 레너드존스 (truncated and shifted Lennard-Jones: LJ) 포텐셜에 근거하여 계산하였다.

$$U = \begin{cases} U_{LJ}(r) - U_{LJ}(r_c) & \text{if } r < r_c \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (1)$$

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

이와 같은 정의에 따라 분자간에 서로 일정 범위를 벗어나면 계산에 포함되지 않는다. 여기서 $r_c = 6.5$ 를 사용하였다.

이와 달리 고체는 FCC 격자를 이루는 원자들이 하모니(harmonic) 포텐셜로 상호작용을 하도록 모델링하였다. 고체 원자는 이웃하는 6 개의 원자들과 하모니 스프링으로 상호작용을 한다. 여기서 스프링 상수는 150.15, 가장 가까운 이웃과의 거리는 1.18495 를 사용하였다. 이 값들은 기본적으로 백금의 물성을 모사하도록 선택한 것이나 여기서 개발된 다중스케일 모델은 이 특정 물질에만 적용될 수 있는 것은 아니다. 또 고체모델은 등온 상태를 유지시킬 수 있는 기법이 다음과 같이 적용되어 있다. Figure 1 에서와 같이 고체는 “고정된

입자”, “유령 입자”, 일반 “고체 입자” 등으로 구분된다. “고정된 입자”는 전체 고체의 위치를 공간상에 고정하는 역할을 하며 인접한 고체입자와 만포텐셜에 의해 상호작용한다. 유령 입자와 고체 입자는 같은 LJ 포텐셜을 통해 유체 입자와 상호작용한다. 유령 입자는 여기에 추가로 고체의 온도를 일정하게 유지하는 역할을 한다.⁽⁶⁾ 즉, 이 입자에는 주변의 입자들에 의한 힘에 추가로 랑거방 (Langevin) 방정식에 바탕을 둔 소산힘과 무작위 힘을 적용한다. 마지막으로, 고체 원자와 유체 원자간의 LJ 포텐셜에 이용한 매개변수들 중에서 분자 직경은 유체분자간의 것과 같은 값을 이용하였다. 반면 고체/유체간 에너지는 고체 표면의 친수성을 조절하기 위하여 여러 값을 사용하였다.

분자들을 동역학적으로 기술하는 뉴턴 운동방정식을 적분하기 위해 velocity-Verlet 알고리즘을 사용하였다.^(6,8) 그 기본적인 차분방정식의 형태는 다음과 같다.

$$r(t + \delta t) = r(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{2}a(t)\delta t^2 \quad (3)$$

$$v(t + \delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \delta t)]\delta t \quad (4)$$

시간 스텝은 모든 시뮬레이션 경우에 있어 $\delta t = 0.0025$ 를 사용하였다.

3.2 다중스케일 입자 시뮬레이션 방법

본 연구에서 고안한 다상유동에 적용할 수 있는 연결 알고리즘은 세 가지의 주된 기능을 수행한다. 그 기능들은 각각 1) 맞춤 영역에서 기상과 액상을 분리, 2) 미시 모델의 정보인 접촉각을 거시 모델에 전달하기 위한 분리면의 제어, 3) 액상에서 거시모델에 따라 주어진 온도와 입자 수를 유지 등이다. 기능 1)은 맞춤영역이 존재하는 경우에 있어 다상 유체시스템을 유지하기 위함이다. 기능 2)는 미시모델에서 거시모델로의 정보전달 (P→C)과 관련된 사항이다. 마지막으로 기능 3)은 거시모델의 조건을 미시모델에 적용하기 위한 사항이다(C→P). 더 일반적인 알고리즘에서는 이외에도 기체상과 고체상의 연결 알고리즘이 추가로 필요하다. 이 상들에서의 연결은 액체 상에 비해 비교적 단순하게 구현할 수 있고, 삼상 유체시스템에서 기체상과 고체상은 많은 경우에 있어 대부분 수동적인 역할만을 하므로 이 연구에서는 깊이 다루지 않았다.

맞춤 영역에서의 기상과 액상을 분리하고 인공적인 벽을 설정하는 것은 두 가지 주된 이유 때문

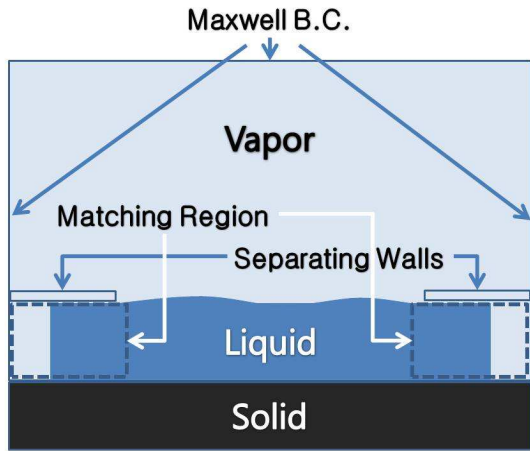


Fig. 2 Schematic of the simulation domain for a complete wetting fluid system

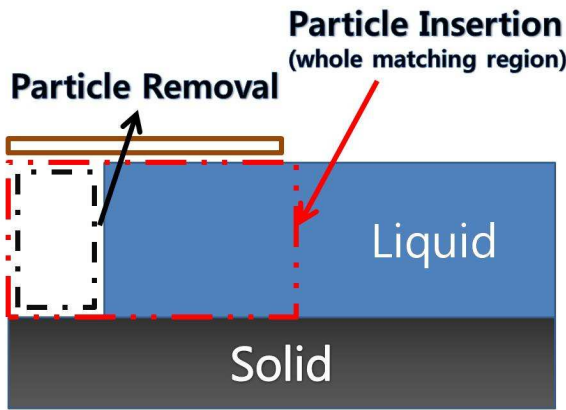


Fig. 3 Schematic of the operations of particle insertion and removal

에 필요하다. 먼저 거시 모델에서 계면은 부피를 가지지 않고 기상과 액상은 모두 균일하다. 이 거시 모델에 분자모델을 맞추기 위해서는 균일한 내부 상태와 영역이 없는 계면을 구현하는 것이 효과적이다. 또 맞춤 영역에서 계면의 위치를 강건하게 제어하지 않으면 시뮬레이션이 불안정해지기 쉽다. 기상과 액상의 분리는 서로 입자의 교환이 이루어지지 않는 두 영역으로 나누고 두 영역 사이에 벽을 설정하여 가능하게 하였다(Fig. 2). 이 벽은 각 시간스텝에서 공간 상에 고정되어 있으며 입자들과 포텐셜에 의해 상호작용한다. 또, 기상과 액상의 입자들간 상호작용을 최소화하기 위해 z 축방향으로 일정한 두께(2)를 가지고 맞춤영역 내에서만 존재한다. 이 벽의 위치와 각도는 거시 모델에 접촉각 조건을 제공하게 되며 한 시간스텝이 끝나면 분자모델의 계면 위치에 따라 이동한다.

이 벽이 기상과 접한 면에서는 단순 탄성 반사조건(specular condition)이 적용된 벽이다. 즉, 벽에 입사된 입자는 운동에너지를 잃지 않고 입사된 각도로 반사된다. 반면 액상과 접한 면은 식 (1, 2)의 포텐셜을 그대로 적용하였다. 이 경우에 있어 식 (1,2)의 r 은 벽면과 유체 a 입자 사이의 수직 거리이다. 기상과 액상에 대한 벽의 상호작용을 각각 다르게 적용하는 것은 불안정성을 감소시키기 위함이다. Figures 2, 3 에서 보는 바와 같이 액체를 거시모델과 연결하는 영역은 아래서 설명할 알고리즘 특성상 기상을 포함하여야 한다. 벽과 액체 사이에 충분한 인력이 존재하지 않으면 액막이 표면장력에 의해 벽에 고착되지 않고 떨어져 원구 형태의 액적으로 유지된다. 벽에 의한 힘은 위치에 상관없이 벽면의 수직 방향으로만 작용하게 된다.

다음으로 분리면의 제어와 관련한 사항들을 기술한다. 삼상 유체시스템에서 접촉각은 물질 및 고체 표면의 특성에 따라 결정된다. 그러므로 다중스케일 모델에서는 분자 모델에서 결정되어 거시 모델에 적용하여야 한다. 이에 따라 벽이 고체면과 이루는 각도와 위치는 분자모델 영역에서의 결과에 따르도록 알고리즘을 꾸몄다. 초기 평형화 기간에는 고체면에서 벽까지의 거리는 고정된다. 이후에 벽은 측정된 계면의 위치를 바탕으로 이동한다. 부분습윤(partial wetting)의 경우에는 각도도 변동한다. 계면 위치의 측정은 맞춤영역과 액체막의 경계 면에서 액체 막 방향으로 떨어진 위치가 10 과 20 사이에 형성된 액체/기체 계면을 대상으로 추정하였다. 다섯 점에서 밀도를 측정하여 액상과 기상의 밀도의 평균 값에 도달하는 위치를 결정하고 이를 최소제곱 회귀분석을 통해 계면의 위치를 계산하였다. 벽의 이동은 스텝당 최대 0.0005 로 제한하였다.

다음으로는 거시모델의 조건을 미시모델에 적용하기 위한 사항을 기술한다. 일반적인 다중 스케일 모델에서는 질량, 운동량, 에너지의 전달을 모두 고려하여야 한다. 본 연구는 평형 상태의 시스템만을 고려하여 질량 및 온도를 일정하게 유지하는 알고리즘을 대상으로 하였다. 먼저 기체 상의 경우는 거시모델의 온도와 밀도에 근거한 맥스웰(Maxwell) 조건을 경계 면에 적용한다. 고체의 경우는 공간 상에 고정되어 있으므로 에너지의 전달만을 고려한다. 이것은 전 단락에 기술한 대로 “유령입자” 모델을 적용하여 온도 조건을 적용한다.

평형 상태의 액상에서는 맞춤 영역에 입자의 유입 및 제거 기법만을 도입하는 것으로 원활한 맞춤이 가능하다. 입자의 삽입과 제거는 초기 평형 과정이 끝난 후에 매 시간 스텝 초기에 수행하여 맞춤 영역에서의 입자 숫자를 고정시키는 것을 목표로 수행된다. 즉, 맞춤 영역의 입자수가 목표값보다 크면 입자가 제거되고 적으면 삽입된다. 여기서 상분리 벽의 위치가 변화하는 경우에는 목표 입자 숫자도 상응하여 변경한다. 삽입과 제거가 이루어지는 영역에는 차이를 두었는데, 삽입영역은 맞춤영역 전체인 반면에 제거 영역은 맞춤영역 내에서 경계 면으로부터 시작하여 맞춤영역 부피의 $\frac{1}{3}$ 에 해당하는 부분이다(Fig. 3). 이런 제거 영역의 설정은 맞춤영역 내의 액체 막의 안정성을 위한 것이다. 입자의 제거는 간단하게 이루어진다. 그러나 입자의 삽입은 시뮬레이션의 안정성과 에너지 평형을 위한 고려가 필요하다. 이를 위해 본 연구에서는 소위 공동큰바른틀모듬 분자동역학 시뮬레이션 기법(cavity-based GCMD)을 적용하였다.⁽⁶⁾ 먼저 맞춤 영역을 정해진 크기의 공동(cavity) 또는 격자들로 나눈다. 이 공동들의 중심이 새로운 입자를 유입하는 후보 위치 군이 된다. 각 시간스텝에서 각 공동이 입자로 채워져 있는지 여부를 확인하여 후보 위치 군에서 제외할지를 정한다. 다음으로 후보 군에서 무작위로 선택하여 입자 유입 시에 발생하는 위치에너지를 계산한다. 이 에너지가 정해진 값 이하일 때는 입자를 삽입하고 그렇지 않을 때는 다른 후보를 선택하여 같은 과정을 다시 수행한다. 공동에 바탕을 둔 후보 군을 설정하는 것은 계산량을 줄이기 위한 목적으로 특히 액체와 같이 입자가 밀집된 영역에 삽입 성공 빈도를 높이는데 효과적이다. 삽입 입자의 속도는 정해진 온도에 상응하는 분포도를 갖는 가우스 분포에서 추출한다. 반면 입자의 제거는 제거 영역 내에서 무작위적으로 선택하여 이루어진다.

4. 결과 및 고찰

4.1 도입

다음 두 단락에서는 완전 습윤(complete wetting) 시스템과 부분 습윤(partial wetting) 시스템에 대한 결과들을 각각 다룬다. 거시모델과 분자모델과의 연결은 서로 경계조건을 상대방에게 부여함으로써 이루어진다. 본 연구에서는 평형 상태의 연결만을 다루므로, 두 시스템 모두에 있어 거시모델이 분자모델에 부여하는 경계조건은 온도 및 거시모델과의 연결 위치이다. 이것은 곧 분자모델과 맞춤

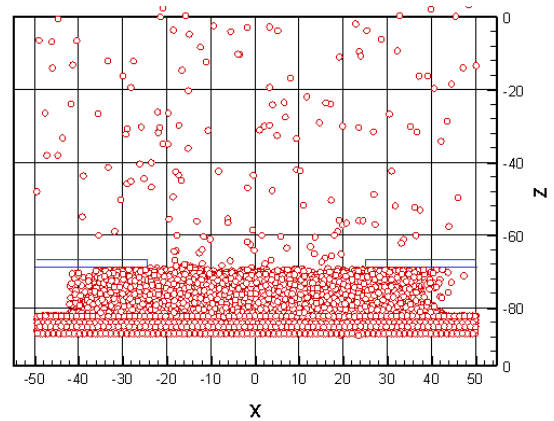


Fig. 4 A snapshot of the simulation for the complete wetting fluid system

영역에서 온도와 입자 수를 일정하게 제한함을 의미한다. 반대로 분자모델에서는 이 조건에 따라 형성된 액체와 기체간의 경계 면의 위치 및 각도를 경계조건으로 거시모델에 부여하게 된다. 원칙적으로는, 이렇게 분자모델에서 주어진 접촉각의 값에 따라 고체표면 위에 형성된 거시적 액체방울의 평형 상태를 구현할 수 있다. 이 거시모델을 얻는 방법은 이미 잘 정립되어 있다.⁽⁹⁾ 거시모델의 계산 결과가 분자모델로의 경계조건인 온도나 연결 위치에 미치는 영향이 미미하여 연결알고리즘 개발이 주 목적인 본 연구에서는 거시모델을 직접적으로 계산하지는 않았다.

4.2 완전 습윤 시스템

이 단락에서는 완전습윤 되어 있는 고체 표면 위의 액체 박막에 대해 다중스케일 연결 알고리즘을 적용한 결과를 기술한다. Figure 4는 평형화가 완료된 상태의 시뮬레이션 스냅샷을 보여준다. 액막의 양쪽 경계에 거시 모델과의 맞춤 영역이 위치하고 있고 두 영역 각각에 상분리 벽이 설정되어 있다. 완전습윤 상태이므로 상분리 벽은 고체 면과 평행하게 유지된 상태로 상하 이동만 이루어진다. 대상 시스템은 정적인 평형 상태의 액막이나 평형으로 도달하는 과정에서 액막의 두께가 변화할 수 있으며 그에 따른 맞춤 영역의 조절이 요구된다. 이것은 상분리 벽의 높이 조절 및 입자 삽입 및 제거를 통한 맞춤영역 내 입자수의 고정으로 이루어진다. Figure 4에서 보여지는 것과 같이 이런 기법들이 성공적으로 작동하여 세 개의 상, 즉, 기체, 액체, 고체들은 안정적으로 형성되어 있다. 특히 액체 막은 양 끝은 기상으로 바뀐다. 앞서 기술한 상분리 벽이 제 역할을 못하거나 없는 경우라면 표면 장력에 의해 기상이 액상으로 바뀌거나 또는 액체 방울 형태로 존재할

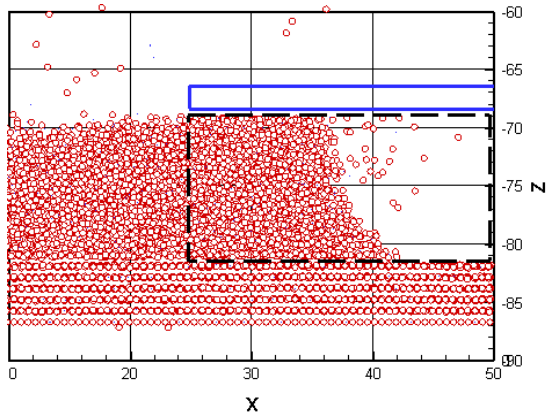


Fig. 5 A close view of the matching region in the simulation for the complete wetting fluid system

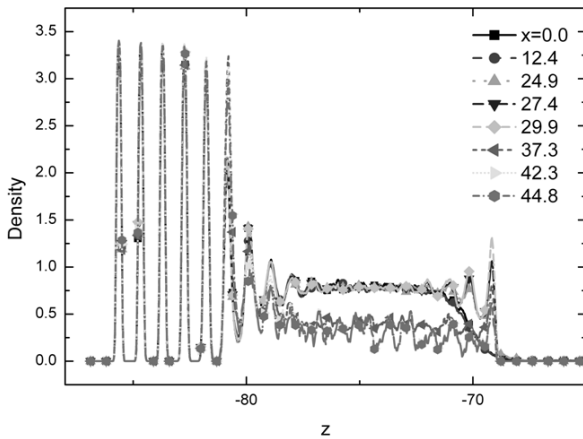


Fig. 6 Cross-sectional density profiles of the complete wetting fluid system

것이다. Figure 5 는 같은 결과에 대해 맞춤 영역을 더 자세히 보여준다. 상분리 벽의 포텐셜은 전 장에 기술한 대로 벽 면에 평행한 방향으로 힘을 발생시키지 않는다. 그러므로 액막의 계면에서 발생하는 표면장력을 직접적으로 지탱하지 않는다. 이것은 분리 벽에 의한 밀도분포의 인공적인 왜곡을 최소화하기 위한 것이다. 반면에 맞춤영역 내부에서 액상과 기상의 계면이 경사를 갖는 사실이 보여주듯이 분리 벽은 영향은 아래에 원자로 이루어진 고체 벽에 비하여 미약하다. 맞춤 영역 내에 기상이 존재하는 기술적인 이유는 두 가지이다. 먼저 액체 영역에서 많은 입자의 제거가 수행되면 액체 상 자체가 불안정해질 가능성이 많다. 또 입자 삽입의 수행 시에 대상 영역이 액체 상인 경우는 계산 양이 급증한다. 밀도 분포를 일정한 x 값에 따른 단면들에 대해 측정하였다. Figure 6 에서 x=0 에서의 밀도 분포를 보면 세 개의 상이 안정적으로 형성된 결과를 보

여준다. 이 상태는 x=12.4 의 위치까지 동일하게 이어진다. 분자 시뮬레이션 영역(예로, x=0 경우)과 맞춤영역 내부(예로, x=29.9 경우)와 비교해 보면 맞춤영역에서는 상분리 벽으로 인해 벽 근처의 액체 분포가 두드러지게 구조화되어 있는 것을 볼 수 있다. 즉, 밀도 분포의 주기적인 피크(peak)가 형성된다. 이런 경향은 실제 고체와 접해있는 액체 막의 아래쪽 계면의 것과 비교하면 약한 수준이다. 이런 특징은 맞춤 영역과 분자시뮬레이션 영역의 경계(x=24.9)에서도 약해졌으나 여전히 존재함을 확인할 수 있다. 반면 앞서 언급했듯이 x=0 에서 x=12.4 에 이르는 영역에서 분포의 특성은 분자시뮬레이션 영역의 내부 분포에 안정적으로 수렴되어 있음을 보여주고 있다. 그러므로, 거시적 모델의 조건과 분자시뮬레이션 모델의 조건을 안정적으로 맞출 수 있음을 의미한다. 하지만 맞춤 영역 밖에서도 특정 범위에서는 맞춤영역 특성이 완전히 사라지지 않고 있는 것은 유의할 부분으로 보인다.

4.3 부분습윤 시스템

부분습윤 시스템에 대한 맞춤 기법을 개발하기 위해서는 상분리 벽의 각도 조절이 추가로 요구된다. 한가지 유의할 점은 통상적으로 완전습윤 시스템과는 달리 정확한 접촉각도(contact angle)를 미리 알 수 없다. 일반적으로 시뮬레이션 초기 상태에서부터 평형이 이루어질 때까지 수렴되면서 접촉각도의 변화가 발생한다. 그러므로 이에 따른 계면의 기울기를 연속적으로 측정하여 상분리 벽의 각도에 반영해야 한다. 그러나 계면의 이완시간 스케일(relaxation time scale) 보다 빠르게 계면의 위치를 측정하면 분자의 위치 변위(fluctuation)가 충분히 평균화되지 못하여 부드럽고 연속적인 계면의 윤곽을 얻지 못한다. 이것은 곧 맞춤영역의 불안정으로 이어진다. 이것을 막기 위해 부분습윤 시스템에 대해서는 1) 기본 평형 단계, 2)접촉각도 이완단계, 3)상분리 벽 이완단계 등의 단계들로 구분하여 시뮬레이션을 수행하였다. 먼저 기본 평형 단계는 초기 상태에서부터 세 개의 상을 안정적으로 평형화시키는 것을 목적으로 한다. 여기서는 분리 벽의 각도는 고체 면과 평행하게 고정시키고 고체 면과의 거리만 조절한다. 또 유체와 고체 분자간 위치에너지 값을 조절하여 ($\epsilon=0.4$) 강한 혐수성(hydrophobic) 상태로 유지한다. Figure 7 은 1 단계의 종료 후의 스냅샷을 보여준다. 초기조건으로부터 10 만 스텝이 지난 후로 접촉 각도는 약 90 도, 상분리 벽의 각도는 0 도로 유지된 상태

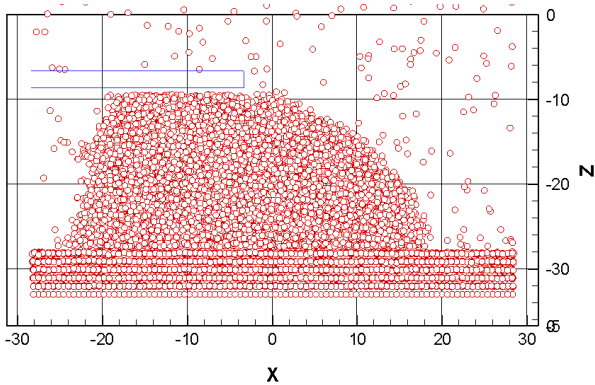


Fig. 7 A snapshot of the simulation of the partial wetting fluid system in the equilibration stage

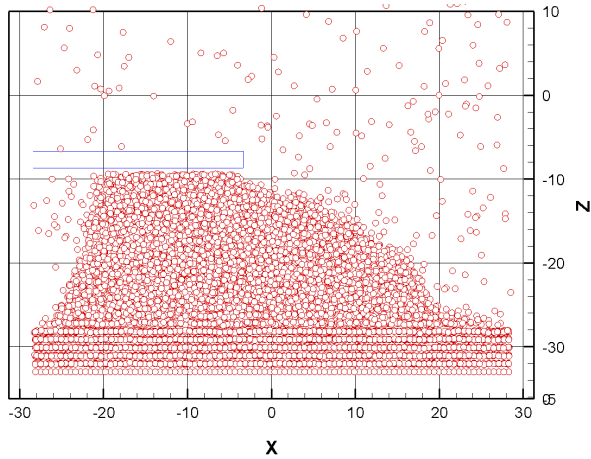


Fig. 8 A snapshot of the simulation of the partial wetting fluid system in the early stage of interfacial relaxation

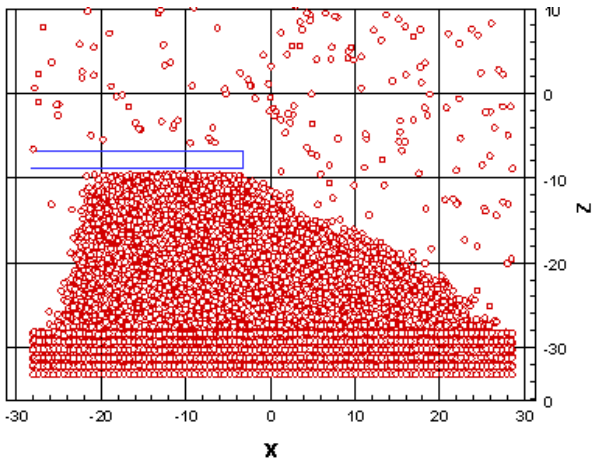


Fig. 9 A snapshot of the simulation of the partial wetting fluid system in the later stage of interfacial relaxation

에서 평형이 이루어졌다. 2 단계로는 상분리 벽의 각도를 유지한 상태에서 에너지 값(ϵ)을 목표로 하는 물질 시스템의 것으로 맞춘다. 이에 따라 계면은 이완 과정을 통해 변화하면 접촉 각도는 목

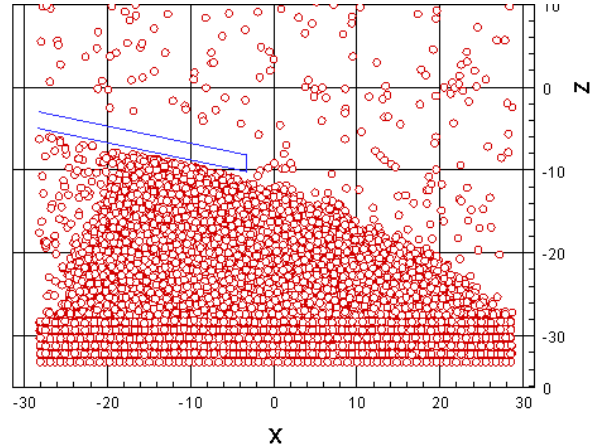


Fig. 10 A snapshot of the simulation of the partial wetting fluid system in the stage of separating-wall relaxation

표 물질 시스템의 값으로 도달한다. Figure 8 은 1 단계 직후에 고체와 유체 간의 위치에너지 값을 변화시키고($\epsilon \rightarrow 0.8$) 5 만 스텝이 지난 후의 스냅샷이다. 접촉각의 위치에서는 분자 두께의 막이 형성되고 있고 계면의 기울기가 뚜렷하게 완만해진 것이 보인다. 그러나 아직 계면의 이완이 완료되지 않은 시점으로 전체적으로 계면의 곡률이 안정적으로 분포되어 있지 못하다. Figure 9 는 1 단계 후에 5 만 스텝이 지난 후의 스냅샷이다. 전체적으로 평형에 도달한 상태의 모습으로 계면의 곡률이 연속적으로 분포되어 있음을 볼 수 있다. 마지막 3 단계로는 전단계에서 측정된 계면의 기울기를 바탕으로 상분리 벽의 각도가 변화한다. Figure 10 은 2 단계 완료 후에 40 만 스텝을 지난 후의 평형 상태를 보여준다. 완전습윤 시스템에서와는 달리 벽의 각도가 변화하는 경우는 맞춤영역의 안정성에 더 민감하게 영향을 미쳤다. 그래서 완전습윤 시스템 시뮬레이션 경우에서 보다 더 작은 수준의 한 스텝 최대 이동 값(0.0005×0.01)이 적용되었다. Figure 10 은 계면의 측정, 분리 벽의 회전, 입자의 삽입 및 제거 기법 등이 모두 성공적으로 작동하고 있음을 보여준다. 단, 벽의 회전을 포함하는 알고리즘 적용에 있어 맞춤영역의 안정화 시간이 상대적으로 크게 소모되는 것이 유의할 점으로 보인다.

5. 결론

본 연구에서는 입자를 기반으로 하고 다상 유동에 적용할 수 있는 다중스케일 시뮬레이션 기술을 개발하였다. 이를 위해 거시모델과 미시 입자 모

델의 경계조건을 맞출 수 있는 경계전달 알고리즘을 고안하였다. 계면이 포함된 경계의 전달 과정에 대해 안정적인 맞춤이 이루어질 수 있는 기법을 도입하였다. 개발된 기술을 이용하여 완전습윤 시스템과 부분습윤 시스템을 대상으로 맞춤 과정을 시뮬레이션하고 그 결과를 분석하였다. 이에 대한 결론을 아래와 같이 정리하였다.

(1) 본 연구에서 개발한 경계 전달 알고리즘을 정적인 평형 상태의 삼상(three-phase) 유체시스템에 적용한 결과 완전습윤 및 부분 습윤 시스템에서 모두 안정된 맞춤 결과를 얻을 수 있었다.

(2) 다른 종류의 스케일이 연결되는 맞춤영역이 안정적으로 유지되기 위해서 세가지 기법을 동시에 적용하였다. 먼저 입자 시뮬레이션에서 발생하는 연속적인 상변화 영역을 분리하고 거시 조건에 맞추기 위해 상분리 벽을 설정하였다. 맞춤영역 내의 상태를 일정하게 유지하기 위해 정해진 입자수에 따라 입자의 삽입 및 제거가 가능하게 하였다. 마지막으로 액체와 기체 사이의 계면의 위치를 맞추기 위해 계면의 위치를 측정하고 이에 따라 벽을 이동시키는 기법을 적용하였다. 이들을 통해 입자 시뮬레이션 영역의 상태에 주는 영향을 최소화하면서 거시 조건들을 맞추고 맞춤영역의 항상성이 유지되는 결과를 확인하였다.

(3) 부분습윤 시스템에 대해서는 추가적으로 접촉각도의 이완 과정과 상분리 벽의 각도 조절이 요구된다. 두 과정을 안정적으로 이루기 위해서 기본 평형도달 과정, 계면 이완 과정, 분리 벽 이완과정 등의 세 단계를 거쳐서 맞춤을 이루어 냈다.

후 기

이 논문(저서)은 2007 년도 정부재원(교육인적자원부 학술연구조성사업비)으로 한국학술진흥재단의 지원을 받아 연구되었음(KRF-2007-331-D00060).

참고문헌

- (1) Dhir, V.K., 1998, "Boiling Heat Transfer," Annual Review of Fluid Mechanics, Vol. 30, pp. 365~401.
- (2) Govor, L.V., Reiter, G., Parisi, J. and Bauer, G.H., 2004, "Self-Assembled Nanoparticle Deposits Formed at the Contact Line of Evaporating Micrometer-Size Droplets," Physical Review E, Vol. 69, p. 061609.
- (3) Koumoutsakos, P., 2005, "Multiscale Flow Simulations Using Particles," Annual Review of Fluid Mechanics, pp. 457~487.
- (4) Ayton, G.S., Noid, W.G and Voth, G.A., 2004, "Multiscale Modeling of Biomolecular Systems: in Serial and in Parallel," Curr. Op. Struc. Bio., Vol. 17, pp. 192~198.
- (5) Flekkoy, E.G., Delgado-Buscalioni, R. and Coveney, P.V., 2005, "Flux Boundary Conditions in Particle Simulations," Phys. Rev. E., Vol. 72, pp. 026703.
- (6) Allen, M.P. and Tildesley, D.J., 1987, Computer Simulation of Liquids, Oxford. 494.
- (7) Leach, A.R., 2001, Molecular Modelling: Principles and Applications, Pearson Education Limited, England.
- (8) Yi, P., Poulidakos, D., Walther, J. and Yadigaroglu, G., 2002, "Molecular Dynamics Simulation of Vaporization of an Ultra-Thin Liquid Argon Layer on a Surface," Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 45, pp. 2087~2100.
- (9) Pozrikidis, C., 1997, Introduction to Computational and Theoretical Fluid Dynamics, Oxford University Press.