

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2025년 4월 3일 (03.04.2025)



(10) 국제공개번호
WO 2025/070887 A1

- (51) 국제특허분류:
G16C 10/00 (2019.01) *G16C 20/80* (2019.01)
G16C 20/30 (2019.01) *G06F 17/11* (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2023/019065
- (22) 국제출원일: 2023년 11월 24일 (24.11.2023)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2023-0129457 2023년 9월 26일 (26.09.2023) KR
- (71) 출원인: 울산과학기술원 (UNIST(ULSAN NATIONAL INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY))
[KR/KR]: 44919 울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50 (KR).
- (72) 발명자: 백충기 (BAIG, Chung Gi); 44919 울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50 (KR). 정소담 (JEONG, Soh Dam); 47340 부산광역시 부산진구 엄광로 176, 323호 (가야동) (KR). 정승흠 (JEONG, Seung Heum); 44014 울산광역시 동구 동해안로 98, 309호 (동부동) (KR). 하태용 (HA, Tae Yong); 44919 울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50 (KR). 강옥중 (KANG, Uk Jung);

44919 울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50 (KR). 최동훈 (CHOE, Dong Hun); 44919 울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50 (KR).

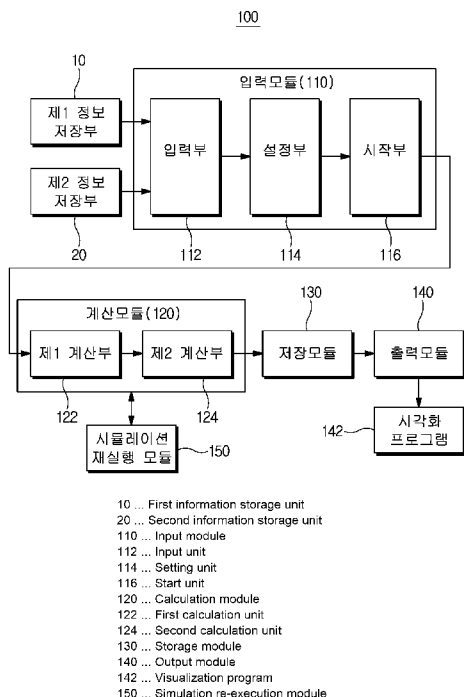
(74) 대리인: 김종선 (KIM, Jong Sun); 06242 서울특별시 강남구 역삼로3길 11, 12층 (역삼동, 광성빌딩) (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC,

(54) Title: METHOD AND APPARATUS FOR NON-EQUILIBRIUM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION UNDER PLANAR COUETTE FLOW FIELD OF CONFINED LINEAR/NON-LINEAR POLYETHYLENE MELT WITHIN INTERFACE

(54) 발명의 명칭: 계면 내 제한된 선형/비선형 폴리에틸렌 용융체의 평면 COUETTE 유동장 하의 비평형 분자동역학 시뮬레이션 방법 및 장치



(57) Abstract: The present invention presents a method for a non-equilibrium molecular dynamics simulation under a planar Couette flow field of a confined linear/nonlinear polyethylene melt within an interface. A simulation apparatus of the present invention comprises: an input module for receiving an input of information required in a molecular dynamics simulation of a polymer; a calculation module for calculating, on the basis of the information that was input, the properties of the polymer by performing the molecular dynamics simulation while applying a reversible reference system propagation algorithm (r-RESPA) to a p-SLLOD equation; a storage module for storing, by designated time unit, the calculated properties; and an output module for outputting information about the stored properties.

(57) 요약서: 본 발명은 계면 내 제한된 선형/비선형 폴리에틸렌 용융체의 평면 COUETTE 유동장 하의 비평형 분자동역학 시뮬레이션 방안을 제안한다. 본 발명의 시뮬레이션 장치는, 고분자에 대한 분자동역학 시뮬레이션에 필요한 정보를 입력 받는 입력 모듈과, 상기 입력된 정보를 기반으로 하여 p-SLLOD 방정식에 r-RESPA(reversible Reference System Propagation Algorithm)를 적용하면서 분자동역학 시뮬레이션을 수행하여 고분자에 대한 속성을 계산하는 계산 모듈과, 상기 계산된 속성을 지정된 시간 단위로 저장하는 저장 모듈, 및 상기 저장된 속성정보들을 출력하는 출력 모듈을 포함하여 구성된다.

ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM,
TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW,
KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

발명의 설명

발명의 명칭: 계면 내 제한된 선형/비선형 폴리 에틸렌 용융체의 평면 COUETTE 유동장 하의 비평형 분자동역학 시뮬레이션 방법 및 장치

기술분야

- [1] 본 발명은 실제 실험단계에서 확인하기 어려운 고분자의 성질이나 특성, 고분자 각각의 미세 분자 레벨에서의 움직임 등을 파악할 수 있는 분자동역학 (Molecular Dynamics, MD) 시뮬레이션 방법 및 장치에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 고분자(polymer)는 산업 전반에 널리 쓰이는 중합체이다. 이러한 고분자의 다양한 물성을 향상시켜 특정 가공물을 제조하기 위해서는, 가공 단계에서부터 고분자의 성질이나 특징, 특성 등에 대한 이해가 필요하다.
- [3] 그러나 시뮬레이션 없이 이론이나 실험을 통해서는 시간이 많이 소비되며, 고분자의 성질, 특징, 특성 등을 빠르고 정확하게 확인하기 어렵다. 예컨대, 고분자의 다양한 물성을 향상시키기 위해 많은 이론들이 제안되지만 이러한 이론들 각각은 다양한 가정(assumption) 및 가설 등이 필요하고, 또한 이를 검증 및 비교하는 것도 쉽지 않다. 또 실제 실험을 하더라도 실험을 위해서는 제약조건이 존재한다. 예를 들면 극저온, 고온, 극한 등의 입력 조건에서는 실험이 불가능하다. 또한 실험에서는 분자 및 원자들의 움직임을 관찰할 수도 없다.
- [4] 특히 고분자의 성형 및 가공 단계에서 고분자는 계면 상태에 놓일 때가 많이 존재하는데, 계면 상태에서의 고분자의 형태와 움직임은 고분자의 물성이나 특정 현상을 이해하는데 매우 중요하다. 하지만 이론 및 실험을 통해서는 이러한 계면 상태에서의 고분자의 상태를 확인하는 것이 어렵다.

발명의 내용

기술적 과제

- [5] 본 발명은 상기와 같은 문제점을 해결하기 위하여 안출된 것으로서, 이론이나 실험에서 획득하기 어려운 고분자의 성질이나 특성, 고분자 각각의 미세 분자 레벨에서의 움직임 등을 직접 구현할 수 있는 시뮬레이션 방법 및 장치를 제공하는 것이다.
- [6] 본 발명은 시뮬레이션을 통해 얻어진 분자레벨 정보들의 분석을 통해 점도, 압력, 전단 및 수직 응력 등의 다양한 고분자 물성 등을 계산할 수 있도록 하는 것이다.
- [7] 본 발명은 고분자 유변 물성들을 예측하고 개선할 수 있도록 시뮬레이션 결과를 제공하는 것이다.

- [8] 본 발명의 기술적 과제들은 이상에서 언급한 기술적 과제로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 기술적 과제들은 아래의 기재로부터 당업자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제 해결 수단

- [9] 이와 같은 목적을 달성하기 위한 본 발명의 실시 예에 따른 시뮬레이션 장치는, 고분자에 대한 분자동역학 시뮬레이션에 필요한 정보를 입력 받는 입력 모듈; 상기 입력된 정보를 기반으로 하여 p-SLLOD 방정식에 r-RESPA(reversible Reference System Propagation Algorithm)를 적용하면서 분자동역학 시뮬레이션을 수행하여 고분자에 대한 속성을 계산하는 계산 모듈; 상기 계산된 속성을 지정된 시간 단위로 저장하는 저장 모듈; 및 상기 저장된 속성정보들을 출력하는 출력 모듈을 포함하여 구성된다.
- [10] 상기 p-SLLOD 방정식은 다음 식과 같고, 상기 식에는 시뮬레이션 온도를 일정하게 유지하도록 Nosé-Hoover thermostat가 함께 적용된다.
- [11]
- $$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) - \mathbf{p}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{p_s}{Q} \mathbf{p}_i - \frac{p_s}{Q} (m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{U}(\mathbf{r}_i)) \\ \dot{s} &= \frac{p_s}{Q} \\ \dot{p}_s &= F_s(\mathbf{p}_i)\end{aligned}$$
- [12] 여기서, 상기 $\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$ 는 계면 시스템에서 다항식 피팅(fitting) 알고리즘으로 계산된 고분자들의 실제적인 비선형 속도 분포를 의미한다.
- [13] 상기 계산 모듈은, 고분자 사슬의 위치와 속도 정보를 계산하는 제1 계산 부; 및 상기 위치와 속도정보를 이용하여 상기 고분자의 구조적, 동역학적 물성을 계산하는 제2 계산부를 포함한다.
- [14] 상기 계산 모듈은, 원자들 사이 거리에 따라 attractive와 repulsive 항목을 가지는 Lennard-Jones 포텐셜 함수와, 원자 사이 거리에 따라 neighbor 원자들만 고려하는 Linked cell과 Neighbor list 방법을 함께 사용하여 계산한다.
- [15] 상기 출력 모듈은, 시각화 프로그램을 통해 고분자 사슬의 움직임을 관찰할 수 있다.
- [16] 상기 시뮬레이션의 재 실행 여부를 수행하는 재 실행 모듈을 더 포함하고, 상기 재 실행 모듈은, 시뮬레이션이 중지된 경우 시뮬레이션이 중지된 지점부터 시뮬레이션이 다시 시작될 수 있도록 마지막 계산된 시간에 대한 시스템 정보를 저장한다.
- [17] 상기 시뮬레이션에 필요한 정보는 시간, 온도, 밀도, 전단유동세기, 시뮬레이션 시간 간격을 포함하는 초기 시스템 환경 정보; 및 분자 사슬의 개수(nmol), 총 입자의 개수(npartcl), 각 사슬에 존재하는 가지의 개수 및 길이, 계면을 이루는 입자의 개수(npartcl_uw, bw), 시뮬레이션 시스템 박스의 크기(boxleng), 각각의 입자에 대한 초기 위치 정보를 포함하는 초기 시스템 구조 정보를 포함할 수 있다.

- [18] 본 발명의 다른 실시 예에 따른 시뮬레이션 방법은, 고분자에 대한 분자동역학 시뮬레이션에 필요한 정보를 획득하는 획득 단계; 상기 획득된 정보를 기반으로 분자동역학 시뮬레이션을 수행하여 고분자에 대한 속성을 계산하는 계산 단계; 및 상기 계산된 속성을 지정된 시간 단위로 저장하는 저장 단계를 포함하여 수행된다.
- [19] 상기 계산 단계는 현재 시뮬레이션에 대해 p-SLLOD 방정식에 r-RESPA(reversible Reference System Propagation Algorithm)를 이용하여 매 MD step을 계산(integration) 한다.
- [20] 상기 계산 단계는 하기 식을 이용하여 속성을 계산하고, 상기 속성 계산 시에는 시뮬레이션 온도를 일정하게 유지하도록 Nosé-Hoover thermostat가 적용된다.
- [21]
- $$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) - \mathbf{p}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{p_s}{Q} \mathbf{p}_i - \frac{p_s}{Q} (m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{U}(\mathbf{r}_i)) \\ \dot{s} &= \frac{p_s}{Q} \\ \dot{p}_s &= F_s(\mathbf{p}_i)\end{aligned}$$
- [22] 여기서, 상기 $\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$ 는 계면 시스템에서 다항식 피팅(fitting) 알고리즘으로 계산된 고분자들의 실제적인 비선형 속도 분포를 의미한다.
- [23] 상기 계산 단계는, 고분자 사슬의 위치와 속도 정보를 계산하는 제1 계산 단계; 및 상기 위치와 속도정보를 이용하여 상기 고분자의 구조적, 동역학적 물성을 계산하는 제2 계산 단계를 포함할 수 있다.
- [24] 상기 계산 단계는, 원자들 사이 거리에 따라 attractive와 repulsive 항목을 가지는 Lennard-Jones 포텐셜 함수를 사용할 수 있다.
- [25] 상기 획득 단계 이전에, 시뮬레이션 수행에 필요한 초기 시스템 환경 및 초기 시스템 구조의 정보들을 입력 받는 입력 단계를 더 포함할 수 있다.
- [26] 상기 초기 시스템 환경 정보는, 시간, 온도, 밀도, 전단유동세기, 시뮬레이션 시간 간격을 포함하고, 상기 초기 시스템 구조 정보는, 분자 사슬의 개수(nmol), 총 입자의 개수(npartcl), 각 사슬에 존재하는 가지의 개수 및 길이, 계면을 이루는 입자의 개수 (npartcl_uw, bw), 시뮬레이션 시스템 박스의 크기(boxleng), 각각의 입자에 대한 초기 위치 정보를 포함한다.

발명의 효과

- [27] 이와 같은 본 발명에 따르면, 시뮬레이션을 통해 고분자 물성에 영향을 주는 요인을 정확하게 파악하고 체계적으로 모사할 수 있다.
- [28] 본 발명에 따르면, 시뮬레이션 결과를 기초로 하여 실제 공정에서 고분자 유변 물성들을 예측하고 개선할 수 있다.
- [29] 본 발명에 따르면, 실제 실험에서는 어려운 계면 상태에서의 고분자의 형태와 움직임을 구현할 수 있고, 분자 레벨 정보들은 분석을 통해 점도, 압력, 전단 및 수직 응력 등의 다양한 고분자 물성들을 계산하는데 사용할 수 있다.

- [30] 본 발명에 따르면 고분자의 정상 상태(Steady state) 뿐만 아니라 고분자의 과도 기적 거동(Transient behavior)에 대한 연구가 가능하다.

도면의 간단한 설명

- [31] 도 1a 및 도 1b는 고분자의 계면 시스템 환경을 도시한 도면이다.
 [32] 도 2는 계면 환경에서 고분자의 Die swell 현상을 나타낸 도면이다.
 [33] 도 3은 선형 및 비선형 고분자 구조를 보인 도면이다.
 [34] 도 4는 비선형 고분자의 가지 정도에 따라 유리 전이온도(Glass transition temperature)의 변경 상태를 보인 그래프이다.
 [35] 도 5 내지 도 7은 평면 couette 유동장에서의 속도 분포 계산, 2D PBC, 과도기 상태 연구에 대해 본 발명의 시뮬레이션 조건들을 설명하기 위한 도면들이다.
 [36] 도 8은 본 발명의 실시 예에 따른 시뮬레이션 장치의 구성도이다.
 [37] 도 9는 본 발명의 실시 예에 따른 시뮬레이션 방법을 설명하는 흐름도이다.
 [38] 도 10 및 도 11은 본 발명의 실시 예에 따라 비평형 분자동역학을 설명하는 예시 도면이다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [39] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시 예를 가질 수 있는 바, 특정 실시 예들을 도면에 예시하고 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명의 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변환, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.
- [40] 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다.
- [41] 본 발명에서 사용한 용어는 단지 특정한 실시 예를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [42] 본 발명에서 사용되는 “부” 또는 “부분” 등의 일부분을 나타내는 표현은 해당 구성요소가 특정 기능을 포함할 수 있는 장치, 특정 기능을 포함할 수 있는 소프트웨어, 또는 특정 기능을 포함할 수 있는 장치 및 소프트웨어의 결합을 나타낼 수 있음을 의미하나, 꼭 표현된 기능에 한정된다고 할 수는 없으며, 이는 본 발명의 보다 전반적인 이해를 돕기 위해서 제공된 것일 뿐, 본 발명이 속하는 분야에

서 통상적인 지식을 가진 자라면 이러한 기재로부터 다양한 수정 및 변형이 가능하다.

[43] 따라서, 본 발명의 사상은 설명된 실시 예에 국한되어 정해져서는 아니되며, 후술하는 특허청구범위뿐 아니라 이 특허청구범위와 균등하거나 등가적 변형이 있는 모든 것들은 본 발명 사상의 범주에 속한다고 할 것이다.

[44]

[45]

[46] 이하에서는 도면에 도시한 실시 예에 기초하면서 본 발명에 대하여 더욱 상세하게 설명하기로 한다.

[47]

[48] 본 발명을 이해하기 위해 다양한 종류의 시뮬레이션들에 대해 살펴본다.

[49] 시뮬레이션은 시간과 길이의 스케일에 따라 구분이 가능하다. 예를 들어, 전자의 움직임과 관련된 전기적 특성이 중요한 촉매 관련 분야에서는 양자(quantum) 시뮬레이션, 단백질-단백질 간의 상호작용과 같이 실제 원자나 분자들의 움직임이 중요할 때 분자동역학(molecular dynamics, MD) 시뮬레이션, 그리고 분자 레벨을 벗어나 전체적인 유체의 흐름이나 성질을 알고자 할 때는 연속체(continuum) 시뮬레이션이 활용된다.

[50] 그 중 분자동역학 시뮬레이션은 시간 스케일이 보통 수백 ns이고, 길이 스케일은 수백 nm까지 해당하는 물리적 현상을 관찰하는데 이용된다. 즉 분자들의 직접적인 움직임을 시뮬레이션 할 수 있다. 분자동역학에 사용되는 시뮬레이션 프로그램들은 LAMMPS, CHARMM, GROMACS, AMBER, NAMD 등이 있다.

[51] 본 발명의 계면 시스템에서는 벽의 존재로 인해 미끄러짐(slip) 현상이 발생한다. 이러한 슬립의 정도(degree of slip)은 계면 시스템의 여러 가지 특성들, 예를 들면 wall atom의 종류, 고분자 사슬의 길이, 유동장의 세기, 온도, 밀도 등에 영향을 받고, 본 발명에서는 상기 슬립 정도를 정량적으로 계산할 수 있다. 또한 슬립(slip)이 일어남에 따라 당연히 계면 시스템 내 속도 분포는 비선형을 가지게 되는데, 이는 본 발명의 피팅(fitting) 알고리즘을 통해 정확히 구할 수 있다.

[52] 고분자는 계면의 존재유무 및 미세 구조에 따라 특이 현상이 나타나기 때문에 계면상의 시스템에 대한 연구가 필요하다. 앞에서 언급한 바와 같이 계면 상태에서 고분자의 형태와 움직임은 고분자의 물성이나 특정 현상을 이해하는데 중요하기 때문이다.

[53] 따라서 본 발명은 고분자에 대한 시뮬레이션 방안을 제안하며, 이러한 시뮬레이션은 고분자의 계면상태, 선형/비선형 구조, 평면 전단유동(Planar Couette Flow), 비평형 분자동역학 등의 4가지 특징적인 항목들을 통해 설명할 수 있다.

[54] 그리고 아래에서 살펴보게 될 본 발명의 실시 예는 폴리에틸렌 고분자를 대상으로 한 시뮬레이션 방안을 개시한다. 그러나 본 발명은 적절한 force-field(potential) 분자 모델을 적용하면 다른 고분자 물질들에 대해서도 시뮬레이션이 가능함은 당연하다 할 것이다. 또 본 발명의 시뮬레이션은 외부 유동장 하, 매 순간 시스

템 내 위치에 따른 평균속도를 직접 계산하고 적용함으로써 정상상태(steady-state)뿐만 아니라 시뮬레이션 초기, 시간에 따라 변화하는 고분자 시스템의 과도기적 거동(transient behavior)에 대한 정밀한 연구도 수행할 수 있으며, 효율적인 병렬컴퓨팅(parallel computing)을 위한 MPI (Message Passing Interface) standard도 적용하였다.

[55]

[56] 고분자 계면상태

[57] 도 1a 및 도 1b는 고분자의 계면 시스템 환경을 도시한 도면이다.

[58] 계면 환경에서 유동장의 세기에 따라 고분자의 움직임은 확인할 수 있는 것은 고분자의 가공 전반에 중요한 요소일 수 있다. 도 1에서 계면 영역(interfacial region)은 계면(벽)과 가까운 부분이다. 그리고 계면 영역(interfacial region) 사이는 상대적으로 벌크 영역(bulk region)이라 할 수 있다. 벌크 영역(bulk region)의 위치는 관의 중앙부일 수 있다.

[59] 다만, 원론적으로는 벽과 가까운 부분에 닿은 계면 영역의 고분자와 벽과 조금 떨어진 벌크 영역에 위치한 고분자는 같은 시스템 내에서도 벽으로부터 받는 영향력이 다르다고 할 수 있지만, 이 차이는 미세하다. 결국 계면 시스템 내부 전체는 벽의 의한 영향이 존재하므로 시스템 내부 전체를 계면 영역(interfacial region)으로 취급할 수 있다.

[60]

[61] 도 2는 계면 환경에서 고분자의 Die swell 현상을 나타낸 도면이다.

[62] 도 2에서 보듯이, 금형(Die)을 이용하여 고분자를 성형할 때 발생하는 Die swell은 고분자가 사출 후 부피가 팽창하는 현상을 말한다.

[63] 고분자는 고유의 상태로 돌아가려는 탄성력을 가진다. 분자 레벨에서 간단히 설명하면, 고분자 사슬들은 사출 전(유동장의 세기가 작을 때)에는 주로 구의 형태를 가지고 있지만(엔트로피가 최대화가 되는 형태), 좁은 관인 금형에 들어가면(유동장의 세기가 증가) 유동장 방향으로 상대적으로 더 늘어난(stretched) 형태를 가지게 되면서 더 큰 스트레스(stress)를 받게 된다.

[64] 이후 관을 통과하면, 유동장의 세기가 감소하여 상기 스트레스는 해소되면서 원래의 구 형태로 돌아가게 되고 부피가 늘어나게 된다.

[65] 이때 고분자 자체의 점도 및 탄성 회복력, 금형(die) 길이, 금형(die) 벽에 작용하는 수직응력, 온도 등 여러 가지 요소가 Die swell에 영향을 주기에 고분자 성형 시에는 이에 대한 조건을 적절히 조절해야 한다.

[66]

[67] 선형/비선형 구조

[68] 도 3은 선형 및 비선형 고분자 구조를 보인 도면이다.

[69] 도 3을 보면 고분자는 선형(linear) 고분자(a)와 가지가 달린(branched, 곁가지) 비선형 고분자(b)로 구분이 가능하다. 선형 고분자(a)와 비선형 고분자(b)는 동역학적 성질 및 메커니즘이 서로 상이함을 알 수 있다.

[70] 더 나아가서, 비선형 고분자(b)도 가지가 달리는 위치, 빈도 등에 따라 다른 구조를 가질 수 있으며 이는 다른 물성을 나타내는 원인이 된다. 결국 동일한 비선형 고분자에서도 가지를 다르게 변형하면 원하는 특정 물성을 가지는 고분자를 만들 수 있다.

[71]

[72] 도 4는 비선형 고분자의 가지가 달린 정도에 따라 유리 전이온도(Glass transition temperature)의 변경 상태를 보인 그래프이다. 도 5를 보면, 고분자의 가지가 달린 정도(DB: degree of branching)가 더 많아질수록 유리 전이 온도 T_g는 점진적으로 감소하고 있음을 확인할 수 있다.

[73]

[74] 평면 전단유동(Planar Couette Flow)

[75] 본 발명에서 고분자의 가공 공정에는 다양한 유동장이 적용될 수 있다. 그 중 평면 couette 유동은 가장 이상적이고 단순한 유동으로서, 평면 couette 유동이 적용되면 외곽에 있는 계면의 움직임으로 인해 아래에 있는 고분자가 y축에 따라 선형의 속도 분포를 형성한다.

[76] 본 발명은 이러한 평면 couette 유동이 적용되었으며, 따라서 도 3과 같이 고분자들이 벽의 움직임을 따라 움직이게 된다. 그리고 평면 couette 유동장에서 정확한 속도 분포 계산, 2D PBC, 과도기 상태에 대한 시뮬레이션이 가능하다.

[77]

[78] 도 5 내지 도 7은 평면 couette 유동장에서의 속도 분포 계산, 2D PBC, 과도기 상태 연구에 대해 본 발명의 시뮬레이션 조건들을 설명하기 위한 도면들이다.

[79] 속도 분포 계산을 설명하는 도 6을 보면, 상부 계면을 이루는 상부 입자가 정해진 속도로 움직이면 계면에서 고분자로 모멘텀이 전달되고, 아래에 있는 고분자들은 y축 위치에 따라 각각의 속도를 지니게 된다. 이때 다른 분자동역학 프로그램은 이론적으로(ideal) 선형이 나올 것을 가정하고 그 값을 그대로 쓰지만, 본 발명은 5차 다항식 fitting을 이용해 실제(real) 속도 분포를 계산하고 적용한다.

[80] 2D PBC(Periodic boundary condition)를 설명하는 도 7을 보면, 본 발명 시뮬레이션은 위/아래 벽이 존재하는 방향인 y축으로의 PBC는 적용하지 않고 x/z 축인 2D 방향으로만 PBC를 적용하여 시뮬레이션을 수행한다

[81] 과도기 상태 연구를 설명하는 도 8을 보면, 시뮬레이션의 초기 상태를 과도기적 상태(transient state)이라 하며, 이 때 특정 값을 구하면 값이 일정하지 않고 불안정할 수 있다. 반면 시뮬레이션 시간이 충분히 지나면 정상 상태(steady state)에 도달하게 되면서 일정한 값을 가지게 된다.

[82] 고분자는 외부 유동장의 세기가 일정하게 주어지면, 보통 스트레스 값이 초기에 올라갔다가 이후 내려가면서 안정화된 값을 가지게 된다. 따라서 일반적으로 시뮬레이션을 통해 고분자의 구조적/동역학적 성질을 계산할 때는 시뮬레이션이 충분히 진행되고 난 후인 정상 상태에 대한 많은 표본을 바탕으로 평균을 낸 값을 이용한다.

- [83] 하지만 스트레스가 초기에 치솟는 현상을 알기 위해서는 시뮬레이션 초기 단계인 과도기적 상태(transient state)에 대한 정보가 필요하다. 즉 스트레스가 어떻게 발생하는지 알기 위해서는 정상 상태가 아니라, 통계적으로 표본이 절대적으로 부족한 과도기적 상태에 대한 정확한 묘사가 필요하다. 본 발명은 시뮬레이션을 통해 이러한 과도기 상태에 대한 연구가 가능하다.
- [84]
- [85] 비평형 분자동역학
- [86] 비평형 상태에서 외부 유동장을 가해야 하고 온도 역시 일정하게 맞춰야 하기 때문에, 본 발명의 시뮬레이션에는 그에 따른 알고리즘을 적용할 필요가 있다.
- [87] 본 발명이 제안하는 실제 속도 분포인 $\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$ 항목이 추가된 p-SLLOD 식은 뉴턴의 운동방정식 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ 식을 통해 유도할 수 있다.
- [88] 상기 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ 라는 식을 시뮬레이션 구성 원자들에 일일이 적용하면, $\mathbf{F}_i = m_i \mathbf{a}_i$ 라는 형태로 나타낼 수 있다(각 atom^i 에 해당하는 힘, 질량, 가속도는 각각 $\mathbf{F}_i, m_i, \mathbf{a}_i$ 로 표현됨).
- [89] 이때 초기 시간 $t=0$ 의 각 입자들의 위치 $\mathbf{r}$ 와 속도 $\mathbf{v}$ 가 주어지면, 시뮬레이션의 포텐셜 모델에 따라 각 입자들에 작용하는 힘 $\mathbf{F}_i$ 를 계산할 수 있다. 예를 들어 시뮬레이션 박스에 원자가 총 3개가 있다면, 도 10과 같이 $\mathbf{F}_i$ (atom1에 작용하는 힘)은 $\mathbf{F}_{12}$ (atom2가 atom1에 주는 힘) + $\mathbf{F}_{13}$ (atom3이 atom1에 주는 힘)로 표현된다.
- [90] 이를 통해 도 11과 같이 특정 시간 t 에서 입자들의 위치와 속도 정보를 알 수 있고, 이 정보를 이용하여 시뮬레이션에서 필요한 모든 property를 계산할 수 있다. 여기서 Property 계산에 활용되는 시뮬레이션 시간 $t_a \sim t_b$, 즉 data point가 많을수록 통계적 신뢰성은 증가한다.
- [91]
- [92] 한편 통계역학에서는 뉴턴의 운동방정식(Equation of motion), $\mathbf{F}_i = m_i \mathbf{a}_i$ 를 입자의 위치 $\mathbf{r}$ 와 운동량 $\mathbf{p}$ 을 이용하여 다음과 같이 나타낸다($\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i$).
- [93] 그리고 상기 식 $\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i$ 은 thermostat가 적용되면 수학적식 1이 된다. 상기 thermostat는 온도를 일정하게 유지시켜주는 장치이며 이는 입자들의 속도를 인위적으로 조절함으로써 가능하다. 예를 들면 시뮬레이션 시스템이 순간적으로 온도가 높을 때는 입자들의 속도를 늦춰서 온도를 감소시키고, 반대로 시스템의 온도가 낮을 때는 입자들의 속도를 증가시켜서 온도를 높여서, 시뮬레이션 상에서 일정한 온도를 유지하게 한다.

[94] [수식1]

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) \\ \dot{s} &= \frac{p_s}{Q} \\ \dot{p}_s &= F_s(\mathbf{p}_i)\end{aligned}$$

[95] 마지막으로 수학적 1을 이용하여 본 발명이 시뮬레이션 하기 위한 수학적 2를 구할 수 있다.

[96] 수학적 2는 본 발명이 유동장이 있는 비평형 상태에서, 외부 유동장 term인

$$\nabla \mathbf{u}$$

만 적용한 상황에서 더 나아가, 다항식 피팅 알고리즘을 이용하여 실제 속도 분포인

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$$

항목을 추가함으로써 더욱 정확하게 구현한 p-SLLOD 식이다. 다시 말해 본 실시 예는 하기 수학적 2와 같이 p-SLLOD 방정식에 r-RESPA(reversible Reference System Propagation Algorithm)를 이용하여 계산하는 것이며, 이때 시스템의 온도를 일정하게 유지시켜주는

$$\text{Nosé}$$

-Hoover thermostat가 적용된다.

[97] [수식2]

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) - \mathbf{p}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{p_s}{Q} \mathbf{p}_i - \frac{p_s}{Q} (m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{U}(\mathbf{r}_i)) \\ \dot{s} &= \frac{p_s}{Q} \\ \dot{p}_s &= F_s(\mathbf{p}_i)\end{aligned}$$

[98] 수학적 2에서

$$\nabla \mathbf{u}$$

는 shear velocity gradient tensor로서 시뮬레이션에서 입력으로 주는 외부 유동장 값이며, 이에 따른 속도 분포는 이론적으로 선형으로 나와야 한다. 그리고 이에 대응하는

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$$

는 시뮬레이션상에서 실제 속도 분포를 계산한 것으로 이론적인 값과는 차이가 있다. 즉

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$$

가 바로 계면 시스템에서 직접 위치에 따른 실제 속도 분포를 5차 다항식 피팅 알고리즘을 통해 구한 것이다.

[99] 한편 위치 $\mathbf{r}$ 와 운동량 $\mathbf{p}$ 은 다음 수학적식 3 및 수학적식 4와 같이 각각 표기할 수 있다.

[100] [수식3]

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u}$$

[101] [수식4]

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) - \mathbf{p}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{p_s}{Q} \mathbf{p}_i - \frac{p_s}{Q} (m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{U}(\mathbf{r}_i))$$

[102] 상기 수학적식 4에서 s , P_s 는

Nose

-Hoover thermostat와 관련된 항목으로 다음 수학적식 5 및 수학적식 6으로 표기할 수 있다.

[103] [수식5]

$$\dot{s} = \frac{p_s}{Q}$$

[104] [수식6]

$$\dot{p}_s = F_s(\mathbf{p}_i)$$

[105] 이처럼 계면 시스템에서는 고분자들의 속도 분포를 직접적으로 피팅(fitting)해서 구하는 항목인

$\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$

가 추가되기 때문에, 수정된 p-SLLOD 식을 사용한다. 따라서 고분자들의 정확한 실제 속도 분포를 얻을 수 있으며 과도기적 상태를 정확하게 묘사할 수 있다.

[106] 본 발명은 상기한 개선된 운동 방정식을 기반으로 하여 수정된 p-SLLOD 식에 대해 r-RESPA를 이용하여 매 MD step 마다 계산(integration)한다.

발명의 실시를 위한 형태

[107] 도 8은 본 발명의 실시 예에 따른 시뮬레이션 장치의 구성도이다.

[108] 도 8을 참조하면, 시뮬레이션 장치(100)는, 입력 모듈(110), 계산 모듈(120), 저장 모듈(130), 출력 모듈(140) 및 시뮬레이션 재 실행 모듈(150) 등을 포함할 수 있다.

[109] 입력 모듈(110)은, 입력부(input unit)(112), 설정부(setup unit)(114) 및 시작부(startup unit)(116)을 포함할 수 있다.

[110] 입력부(112)는 시뮬레이션 진행에 필요한 초기 시스템 환경과 시스템 구조를 제1 정보 저장부(10) 및 제2 정보 저장부(20)를 리드하여 입력 받는다. 시스템 환경은 시간, 온도, 밀도, 전단유동세기, 시뮬레이션 시간 간격 등을 말할 수 있고, 초기 시스템 구조는 시스템 상에 존재하는 고분자 사슬의 개수(nmol), 총 입자의

개수(npartcl), 각 사슬에 존재하는 가지의 개수 및 길이, 계면을 이루는 입자의 개수(npartcl_uw, bw) 등의 정보와 시뮬레이션 시스템 박스의 크기(boxleng), 각각의 입자에 대한 초기 위치 정보 등을 말할 수 있다.

[111] 설정부(114)는, 입력부가 리드한 정보들을 기초로 하여 시뮬레이션 박스를 생성하고 시뮬레이션에 필요한 변수들의 값(box volume, reduced mass, sigma, epsilon, shear rate 등)을 획득한다.

[112] 시작부(116)는, input 파일로부터 읽어낸 초기 구성(initial configuration)에 대한 포스(force) 및 에너지 등의 초기 값을 계산한다.

[113] 계산 모듈(120)은 제1 계산부(122) 및 제2 계산부(124)를 포함할 수 있다.

[114] 본 실시 예에서 상기 계산 모듈(120)은, $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\frac{dV(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}}$ 식을 이용하여 각 원자들

에 작용하는 힘을 계산하는데, 이 때 $V(\mathbf{r})$ 은 원자들 사이의 거리, r 에 따라 정의된 포텐셜(potential) 함수를 의미한다. 폴리에틸렌 고분자의 경우, 포텐셜 함수의 종류는 연결된(bonded) 원자들 간의 포텐셜, V_b 과 연결되지 않은(nonbonded) 원자들 간의 포텐셜, V_{nb} 두 가지로 나뉠 수 있다. 여기서 V_b 는 고분자 사슬 내(intra-atomic) 서로 연결된 원자들 사이 stretching, bending, torsion에 따른 에너지를 의미하며, V_{nb} 는 고분자 사슬 간(inter-atomic) 직접적으로 연결되지 않은 원자들 사이 거리에 따라 attractive 와 repulsive 항목을 가지는 Lennard-Jones 포텐셜 함수에 해당한다.

[115] 특정 원자에 가해지는 힘을 구하기 위해서는 그 원자의 포텐셜 함수를 먼저 계산해야 한다($V = V_b + V_{nb}$). 원론적으로 특정 원자에게 영향을 주는 원자들은 시뮬레이션 박스 내부의 모든 다른 원자들이다. 하지만 이를 모두 고려하기는 너무 비효율적이므로, 대부분의 경우 특정 원자를 중심으로 일정 범위 이내의 가까이 위치한 원자들만 고려하는데, 대표적인 방법으로 Verlet neighbor list, Linked cell method 등이 있다. 본 발명에서는 기존의 둘의 방법을 기초로 적절히 조합한 후 새로운 방법을 고안하여 시뮬레이션 계산 시간을 더욱 감축하였다.

[116] 이에 본 실시 예의 제1 계산부(122) 및 제2 계산부(124)는 다음과 같이 동작할 수 있다.

[117] 제1 계산부(122)는, 충분히 작은 시간 단위(dt)에 대하여 뉴턴의 운동방정식($F=ma$)을 수치적으로 계산하면서, 힘을 바탕으로 가속도, 속도, 위치를 얻는 계산 과정을 시간에 따라 진행하는 역할을 수행하며, 특히 원자들 사이의 힘을 정확하게 모델링 하여 계산하는 것이 중요하다.

[118] 구체적으로 폴리에틸렌 고분자 사슬의 경우 C, H의 두 가지 원소로 이루어져 있고, H 원소는 C 원소에 비해 크기가 매우 작기 때문에 고분자 사슬의 양쪽 끝과 중간에 위치한 CH_3 , CH_2 각각 유닛을 하나의 interaction site로 간주하는 TraPPE (Transferable Potentials for Phase Equilibria) united atom 포텐셜 모델이 적용된

다. 이에 따라 결합된 원자들(united atom, CH_3 혹은 CH_2) 사이의 힘, $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\frac{dV(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}}$

을 구하기 위해서는 포텐셜, $V(\mathbf{r})$ 을 먼저 계산해야 한다. 일반적으로 널리 쓰이는 Lennard-Jones 포텐셜의 경우, 원자 사이 거리가 일정 거리(cut-off distance; r_{cut})를 넘어가면 포텐셜 값이 매우 작게 되므로 이를 무시할 수 있다. 즉 특정 원자에 대한 포텐셜은 그 원자의 반경 r_{cut} 이내의 원자들만 고려해서 계산되는 것이다. 하지만 실제 시뮬레이션 진행에 따라 원자들의 위치는 계속 변화하므로, 특정 원자로부터 r_{cut} 보다 조금 더 큰 범위내(neighbor) 원자들까지 고려하는데, 이를 위해 Verlet neighbor list, Linked cell method 등이 대표적으로 사용된다. 본 발명에서는 기존 둘의 방법을 기초로 고안된 새로운 방법을 사용하여, 시뮬레이션 계산 시간을 획기적으로 감소시켰다. 또한 본 실시 예에 적용된 평면 전단유동과 같이 외부 유동장이 주어진 비평형(nonequilibrium) 상태에 대하여 가장 정확하게 뉴턴의 운동방정식을 푸는 알고리즘인 p-LLOD가 적용되었고, 또 효율적인 시뮬레이션을 위해 r-RESPA (reversible REference System Propagation Algorithm) multiple time scale 방법이 적용되었다.

- [119] 이러한 제1 계산부(122)는 고분자 사슬의 위치와 속도정보를 계산할 수 있다.
- [120] 제2 계산부(124)는, 제1 계산부(122)가 계산한 위치와 속도정보를 이용하여 물리적 특징을 계산한다. 예를 들며, 고분자의 크기(radius of gyration), 미끄러짐 정보(degree of slip), 속도 분포(velocity profile), 구조 텐서(conformation tensor), 정렬 각도(alignment angle) 등 다양한 구조적/동역학적 물성들을 계산할 수 있다.
- [121] 저장 모듈(130)은 제2 계산부(122)가 계산한 물리적 특징 정보들을 계산한다.
- [122] 출력 모듈(140)은 물리적 특징 정보들을 출력하는 기능을 수행한다. 특히 출력 모듈은 시각화 프로그램(예를 들면 VMD, PyMOL 등)(142)을 통해 고분자 사슬의 움직임을 직접 관찰할 수 있도록 구성할 수 있다.
- [123] 시뮬레이션 재 실행 모듈(150)은, 시뮬레이션 과정이 중지될 경우 입력부(112)에서 설정한 규칙(interval)에 따라 저장된 필요한 정보에 기초하여 시뮬레이션을 다시 실행한다. 즉 시뮬레이션 동안 갑작스러운 전력 공급 차단, 또는 계산 자원의 부족으로 인해 시뮬레이션이 중지될 경우, 시뮬레이션을 다시 시작할 수 있도록 한다. 이때 시뮬레이션 재 실행은 시뮬레이션의 처음 또는 시뮬레이션이 중지된 시점부터 다시 시작할 수 있다.
- [124]
- [125] 도 9는 본 발명의 실시 예에 따른 시뮬레이션 방법을 설명하는 흐름도이다.
- [126] 입력부(112)는 제1 정보 저장부(10)에 저장된 초기 시스템 환경 정보들과, 제2 정보 저장부(20)에 저장된 초기 시스템 구조 정보들을 리드하여 입력 받게 된다 (S100). 상기 초기 시스템 환경 정보들은 시간, 온도, 밀도, 전단유동세기, 시뮬레이션 시간 간격 등일 수 있다. 그리고 상기 초기 시스템 구조 정보는, 분자 사슬의 개수(nmol), 총 입자의 개수(npartcl), 각 사슬에 존재하는 가지의 개수 및 길이,

계면을 이루는 입자의 개수 (npartcl_uw, bw), 시뮬레이션 시스템 박스의 크기(box leng), 각각의 입자에 대한 초기 위치 정보 등일 수 있다.

- [127] 그런 다음 입력된 정보들을 기초로 하여 폴리에틸렌 용융체에 대한 분자동역학 시뮬레이션에 필요한 정보를 획득한다(S110). 여기서 정보 획득은, 시뮬레이션에 필요한 정보들, 즉 box volume, reduced mass, sigma, epsilon, Force, shear rate 등을 계산하여 획득할 수 있다. 그리고 추가로 컴파일 된 파일과 상기 제1 정보 저장부(10) 및 제2 정보 저장부(20)의 파일들을 하나의 디렉토리에 모아 실행파일을 생성할 수 있다.
- [128] 이후 시뮬레이션이 수행된다(S120). 시뮬레이션은 제1 계산부(122)가 p-SLLOD 식에 r-RESPA (reversible-REference System Propagation Algorithm)를 적용하여 폴리에틸렌 용융체 사슬의 위치와 속도정보를 계산한다(S122). 이후, 제2 계산부(124)가 상기 위치와 속도정보를 이용하여 물리적 특징들, 예를 들면 고분자의 크기(radius of gyration), 미끄러짐 정보(degree of slip), 속도 분포(velocity profile), 구조 텐서(conformation tensor), 정렬 각도(alignment angle) 등 다양한 구조적/동역학적 물성들을 계산한다(S124).
- [129] 한편 시뮬레이션이 수행되는 동안, 시뮬레이션이 중지되는 오류가 발생할 수도 있다. 이 경우 추후 오류가 복구되더라도 시뮬레이션을 다시 처음부터 시작해야 한다. 그러나 본 발명은 시뮬레이션 재 실행 모듈이 시뮬레이션의 중단 여부를 모니터링 하면서, 만약 시뮬레이션이 중지되면 시뮬레이션이 중지된 지점부터 시뮬레이션이 다시 시작될 수 있도록 마지막 계산된 시간에 대한 시스템 정보를 저장하고 있다. 시뮬레이션 오류로 인해 다시 처음부터 시뮬레이션을 수행할 필요가 없는 것이다.
- [130] 한편 시뮬레이션 된 결과는 지정된 시간 단위(예컨대, 10^{-12} 초)로 저장 모듈(130)에 저장될 수 있다(S130). 그리고 저장 모듈(130)에 저장된 정보들은 사용자가 확인할 수 있도록 제공될 수 있다(S140). 이때 시각화 프로그램(예를 들면 VMD, PyMOL 등)(142)을 통해 고분자 사슬의 움직임을 직접 관찰하는 것도 가능하다.
- [131]
- [132] 이상에서 설명한 바와 같이 본 발명은 계면 시스템에서 실제 속도 분포를 5차 다항식 피팅을 통해 직접 구한 항목을 적용하여 개선된 p-SLLOD 방정식에 r-RESPA를 이용하여 매 MD step 마다 계산(integration)함으로써 고분자 물성에 영향을 미치는 각종 원인들에 대하여 엄밀하고 정확한 시뮬레이션을 할 수 있다.
- [133] 이상과 같이 본 발명의 도시된 실시 예를 참고하여 설명하고 있으나, 이는 예시적인 것들에 불과하며, 본 발명이 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 본 발명의 요지 및 범위에 벗어나지 않으면서도 다양한 변형, 변경 및 균등한 타 실시 예들이 가능하다는 것을 명백하게 알 수 있을 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 청구범위의 기술적인 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

산업상 이용가능성

- [134] 고분자 유변학 등의 분야에서 분자동역학의 시뮬레이션을 위한 소프트웨어 발명에 이용할 수 있다.

청구범위

- [청구항 1] 고분자에 대한 분자동역학 시뮬레이션에 필요한 정보를 입력 받는 입력 모듈;
 상기 입력된 정보를 기반으로 하여 p-SLLOD 방정식에 r-RESPA(reversible Reference System Propagation Algorithm)를 적용하면서 분자동역학 시뮬레이션을 수행하여 고분자에 대한 속성을 계산하는 계산 모듈;
 상기 계산된 속성을 지정된 시간 단위로 저장하는 저장 모듈; 및
 상기 저장된 속성정보들을 출력하는 출력 모듈을 포함하여 구성되는 것을 특징으로 하는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 장치.
- [청구항 2] 제1항에 있어서,
 상기 p-SLLOD 방정식은 다음 식과 같고, 상기 식에는 시뮬레이션 온도를 일정하게 유지하도록 Nosé-Hoover thermostat가 함께 적용되는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 장치.
- $$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u}$$
- $$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) - \mathbf{p}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{p_s}{Q} \mathbf{p}_i - \frac{p_s}{Q} (m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{U}(\mathbf{r}_i))$$
- $$\dot{s} = \frac{p_s}{Q}$$
- $$\dot{p}_s = F_s(\mathbf{p}_i)$$
- 여기서, 상기 $\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$ 는 계면 시스템에서 다항식 피팅(fitting)으로 직접 계산된 고분자들의 실제적인 비선형 속도 분포를 의미함
- [청구항 3] 제1항에 있어서,
 상기 계산 모듈은,
 고분자 사슬의 위치와 속도 정보를 계산하는 제1 계산부; 및
 상기 위치와 속도 정보를 이용하여 상기 고분자의 구조적, 동역학적 물성을 계산하는 제2 계산부를 포함하는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 장치.
- [청구항 4] 제1항에 있어서,
 상기 계산 모듈은,
 원자들 사이 거리에 따라 attractive와 repulsive 항목을 가지는 Lennard-Jones 포텐셜 함수와, 원자 사이 거리에 따라 neighbor 원자들만 고려하는 Linked cell과 Neighbor list 방법을 함께 사용하여 계산하는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 장치.
- [청구항 5] 제1항에 있어서,
 상기 출력 모듈은,
 시각화 프로그램을 통해 고분자 사슬의 움직임을 관찰할 수 있는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 장치.
- [청구항 6] 제1항에 있어서,

상기 시뮬레이션의 재 실행 여부를 수행하는 시뮬레이션 재 실행 모듈을 더 포함하고,

상기 시뮬레이션 재 실행 모듈은,

시뮬레이션이 중지된 경우 시뮬레이션이 중지된 지점부터 시뮬레이션이 다시 시작될 수 있도록 마지막 계산된 시간에 대한 시스템 정보를 저장하는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 장치.

[청구항 7]

제1항에 있어서,

상기 시뮬레이션에 필요한 정보는,

시간, 온도, 밀도, 전단유동세기, 시뮬레이션 시간 간격을 포함하는 초기 시스템 환경 정보; 및

분자 사슬의 개수(nmol), 총 입자의 개수(npartcl), 각 사슬에 존재하는 가지의 개수 및 길이, 계면을 이루는 입자의 개수 (npartcl_uw, bw), 시뮬레이션 시스템 박스의 크기(boxleng), 각각의 입자에 대한 초기 위치 정보를 포함하는 초기 시스템 구조 정보를 포함하는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 장치.

[청구항 8]

고분자에 대한 분자동역학 시뮬레이션에 필요한 정보를 획득하는 획득 단계;

상기 획득된 정보를 기반으로 분자동역학 시뮬레이션을 수행하여 고분자에 대한 속성을 하는 계산하는 계산 단계; 및

상기 계산된 속성을 지정된 시간 단위로 저장하는 저장 단계를 포함하여 수행하는 것을 특징으로 하는 고분자 용융체의 시뮬레이션 방법.

[청구항 9]

제8항에 있어서,

상기 계산 단계는,

현재 시뮬레이션에 대해 p-SLLOD 방정식에 r-RESPA(reversible Reference System Propagation Algorithm)를 이용하여 매 MD step을 계산(integration) 하는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 방법.

[청구항 10]

제8항에 있어서,

상기 계산 단계는 하기 식을 이용하여 속성을 계산하고, 상기 속성 계산 시에는 시뮬레이션 온도를 일정하게 유지하도록 Nosé-Hoover thermostat가 적용되는, 고분자 용융체의 시뮬레이션 방법.

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u}$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) - \mathbf{p}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{p_s}{Q} \mathbf{p}_i - \frac{p_s}{Q} (m_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u} - m_i \mathbf{U}(\mathbf{r}_i))$$

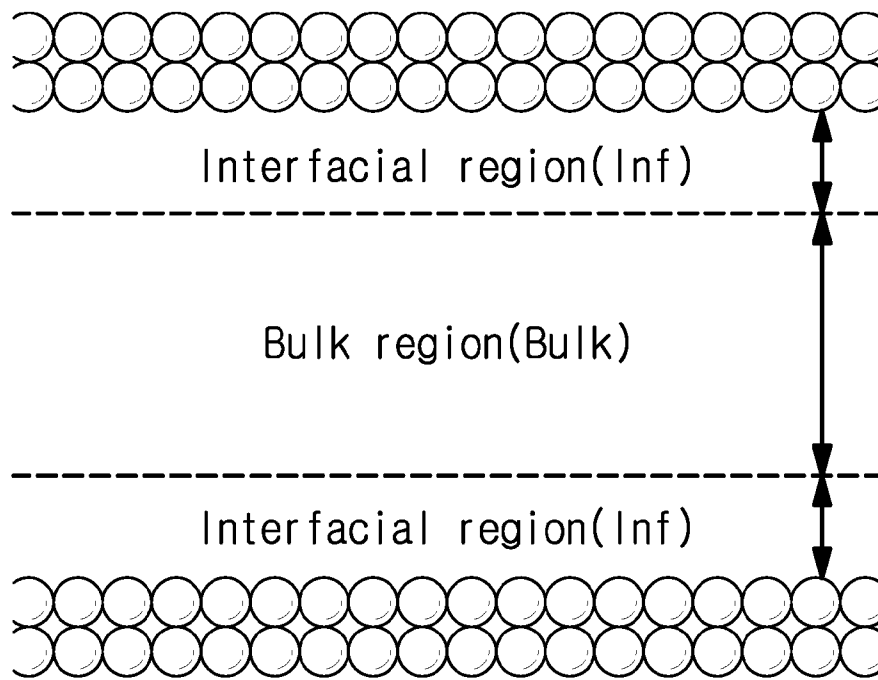
$$\dot{s} = \frac{p_s}{Q}$$

$$\dot{p}_s = F_s(p_s)$$

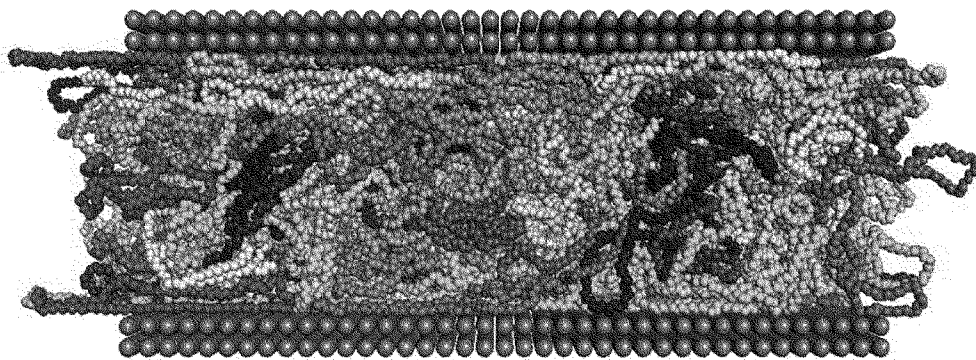
여기서, 상기 $\mathbf{U}(\mathbf{r}_i)$ 는 계면 시스템에서 다항식 피팅(fitting)으로 직접 계산된 고분자들의 실제적인 비선형 속도 분포를 의미함

- [청구항 11] 제8항에 있어서,
상기 계산 단계는,
고분자 사슬의 위치와 속도 정보를 계산하는 제1 계산 단계; 및
상기 위치와 속도 정보를 이용하여 상기 고분자의 구조적, 동역학적 물성
을 계산하는 제2 계산 단계를 포함하여 수행하는, 고분자 용융체의 시물
레이션 방법.
- [청구항 12] 제8항에 있어서,
상기 계산 단계는,
원자들 사이 거리에 따라 attractive와 repulsive 항목을 가지는 Lennard-Jone
s 포텐셜 함수를 사용하는, 고분자 용융체의 시물레이션 방법.
- [청구항 13] 제8항에 있어서,
상기 획득 단계 이전에,
시물레이션 수행에 필요한 초기 시스템 환경 및 초기 시스템 구조의 정보
들을 입력 받는 입력 단계를 더 포함하는, 고분자 용융체의 시물레이션 방
법.
- [청구항 14] 제13항에 있어서,
상기 초기 시스템 환경 정보는,
시간, 온도, 밀도, 전단유동세기, 시물레이션 시간 간격을 포함하고,
상기 초기 시스템 구조 정보는,
분자 사슬의 개수(nmol), 총 입자의 개수(npartcl), 각 사슬에 존재하는 가
지의 개수 및 길이, 계면을 이루는 입자의 개수 (npartcl_uw, bw), 시물레이
션 시스템 박스의 크기(boxleng), 각각의 입자에 대한 초기 위치 정보를 포
함하는, 고분자 용융체의 시물레이션 방법.

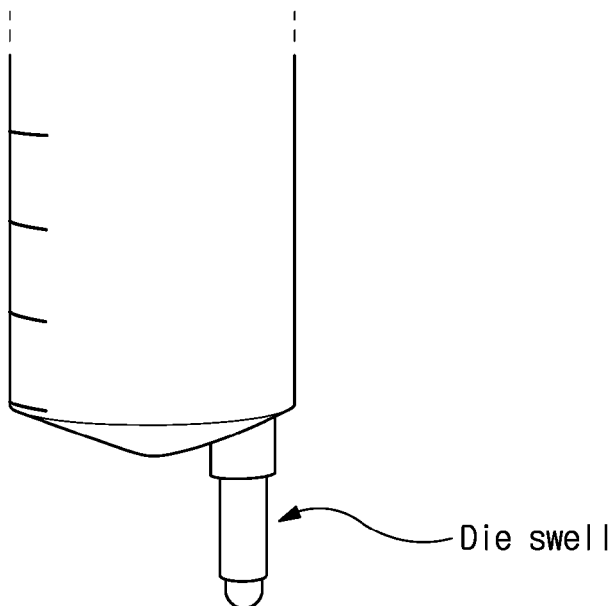
[도1a]



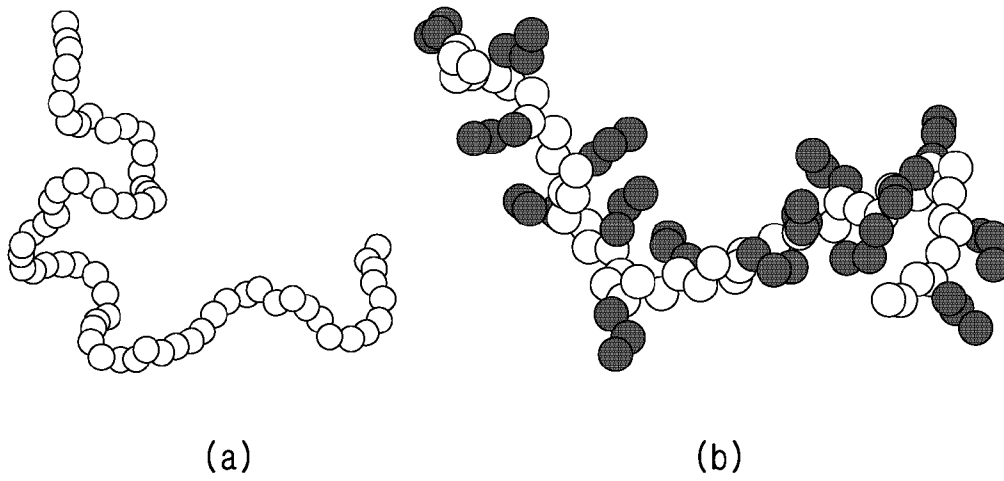
[도1b]



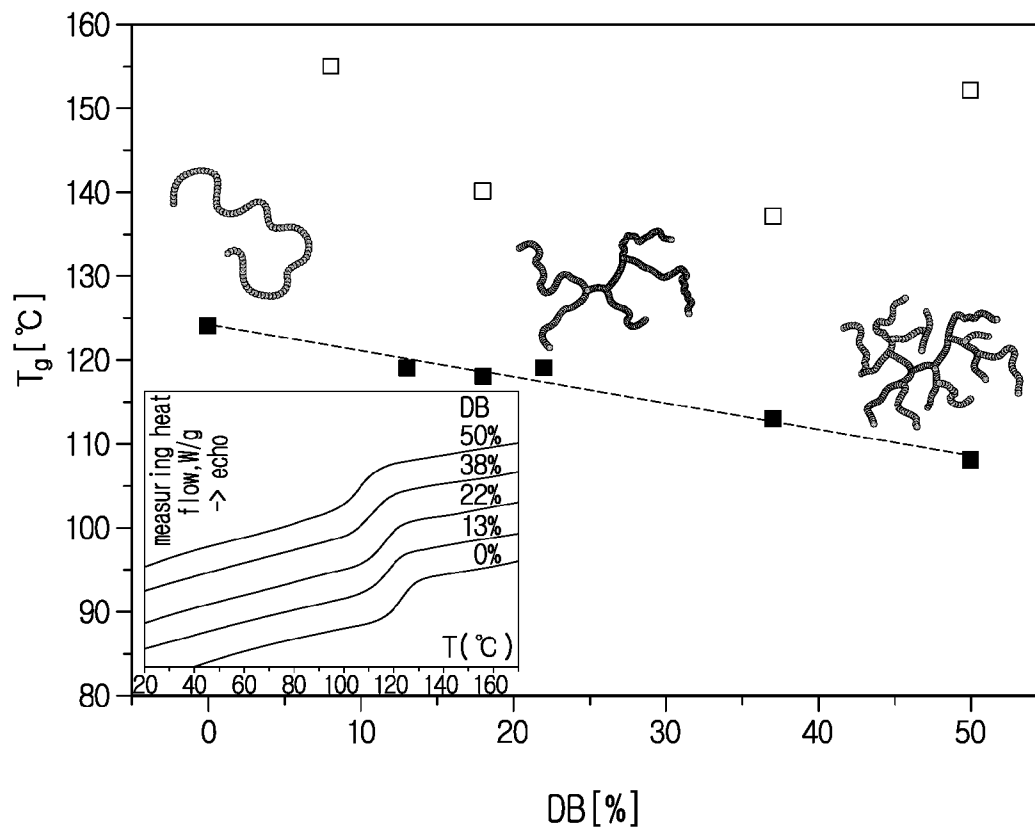
[도2]



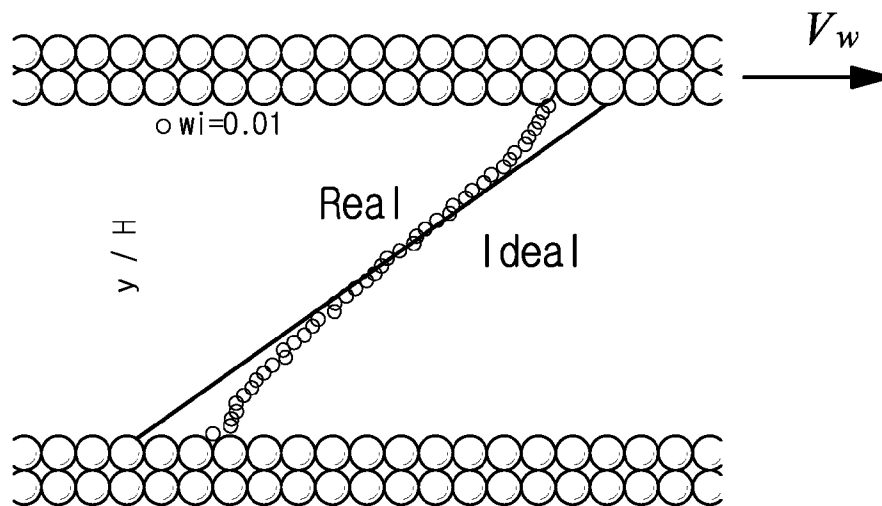
[도3]



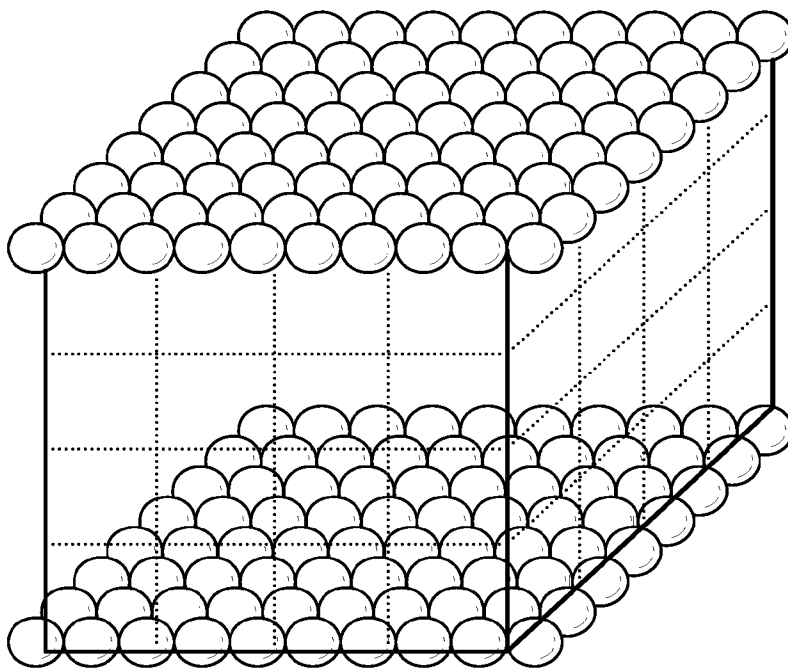
[도4]



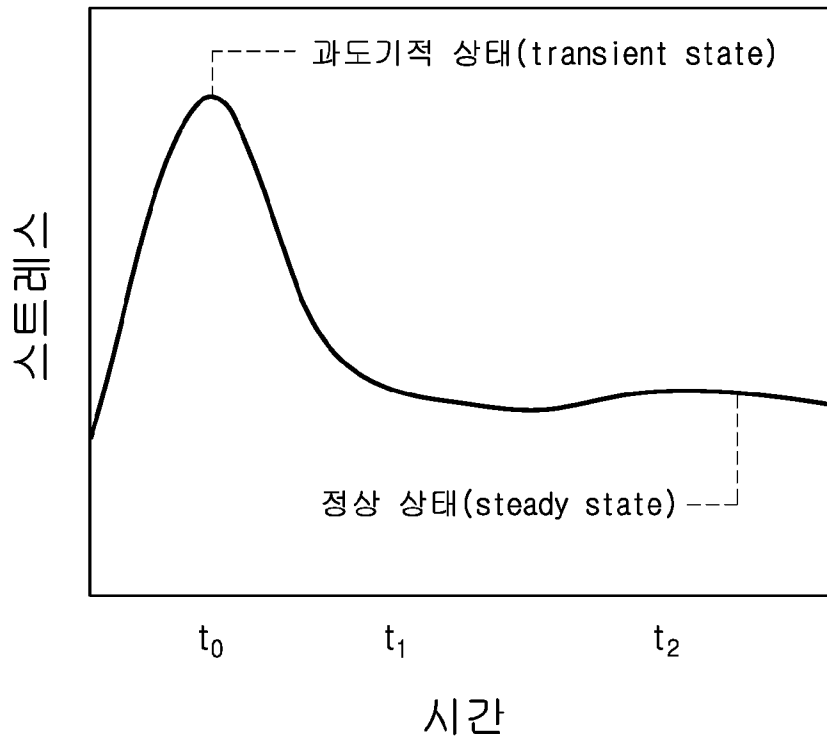
[도5]



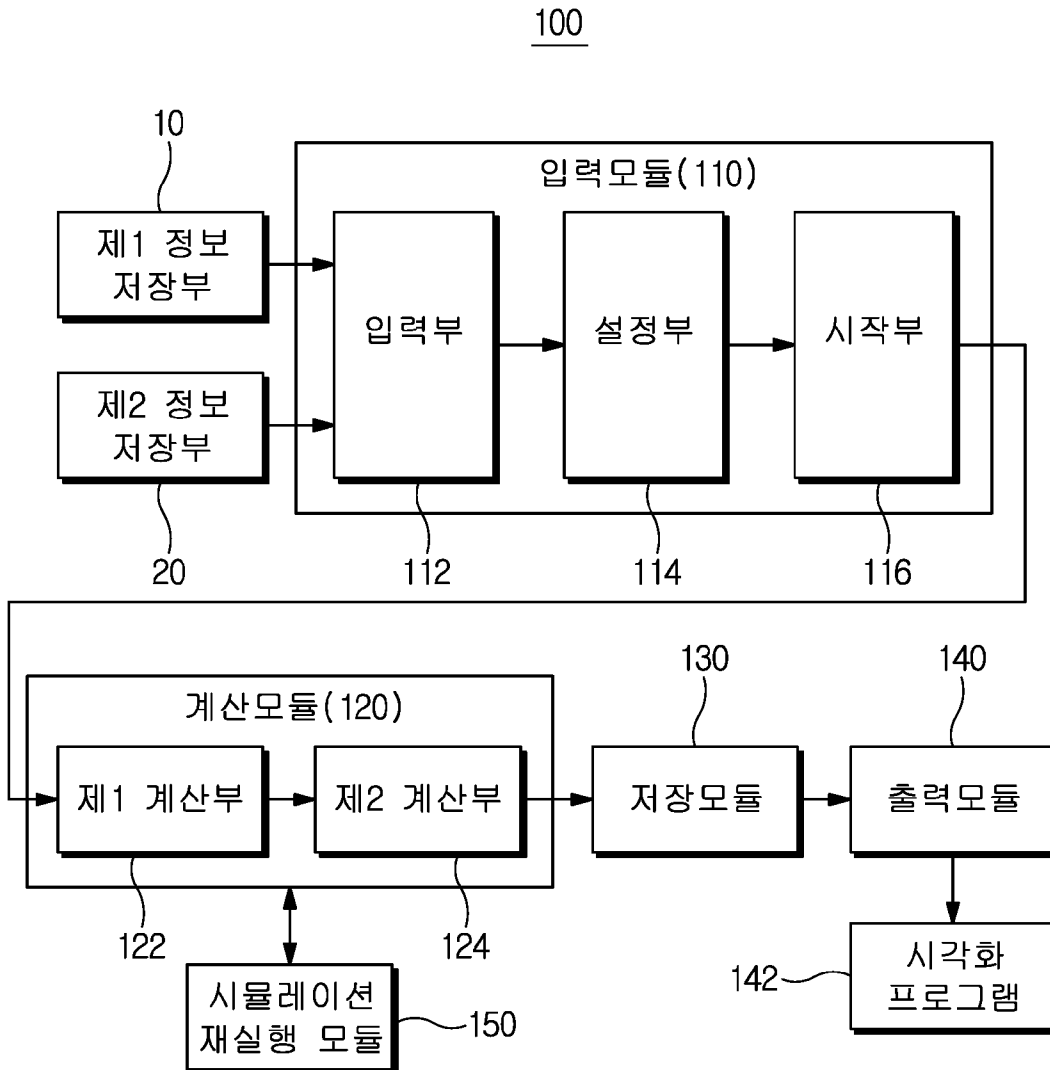
[도6]



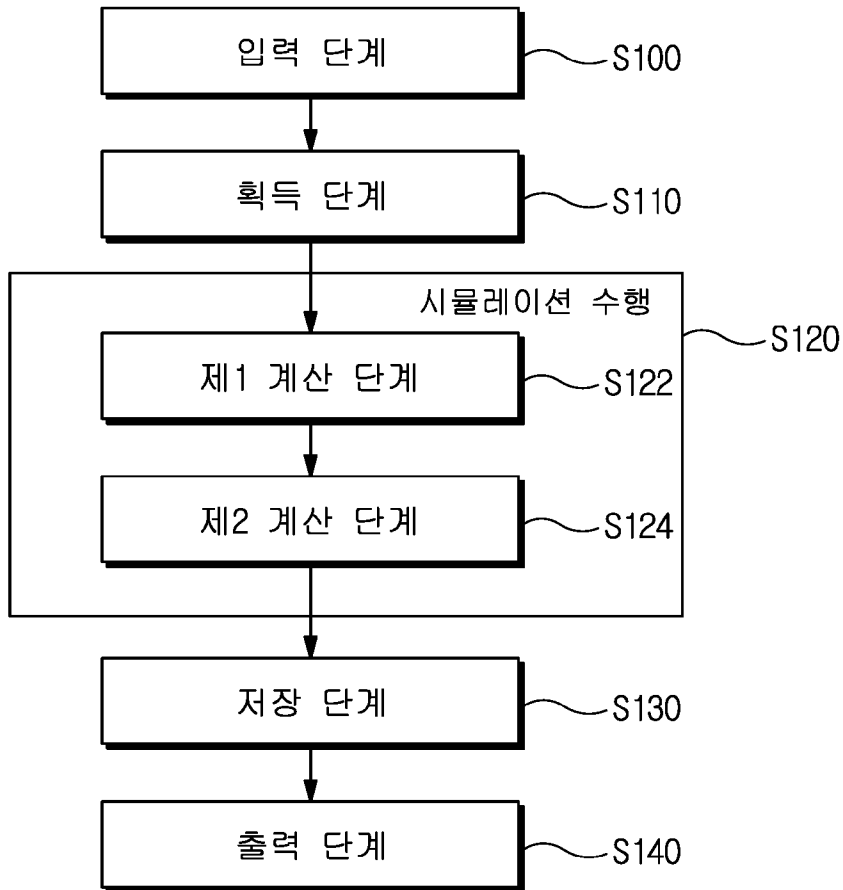
[도7]



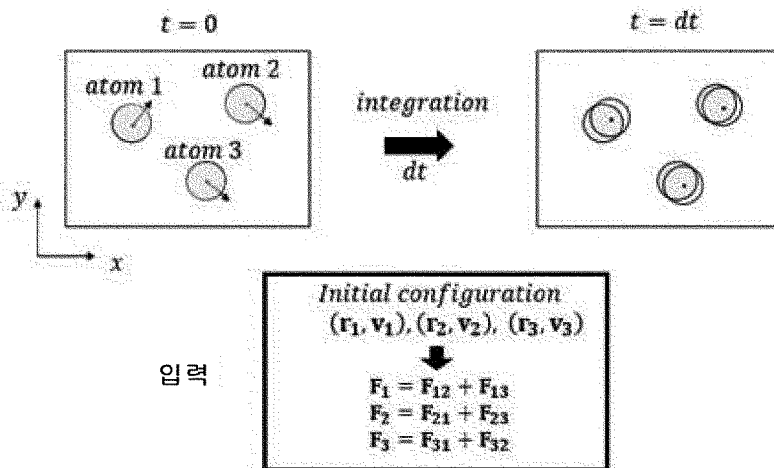
[도8]



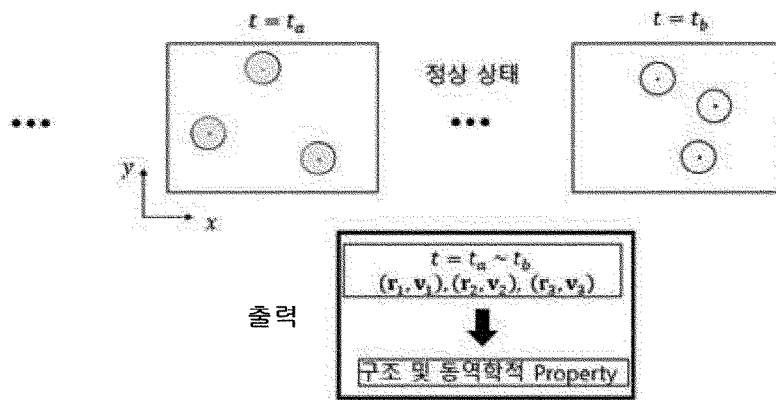
[도9]



[도10]



[도11]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2023/019065

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER G16C 10/00(2019.01)i; G16C 20/30(2019.01)i; G16C 20/80(2019.01)i; G06F 17/11(2006.01)i According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC				
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G16C 10/00(2019.01); G06F 17/17(2006.01) Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models: IPC as above Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS (KIPO internal) & keywords: 고분자 용융체(polymer melts), 분자동역학 시뮬레이션(molecular dynamic simulation), 계면 시스템(confined systems), p-SLLOD, r-RESPA, Lennard-jones potential, Linked cell, Neighbor list				
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT				
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.		
X Y	CHO, S. et al. Molecular dynamics for linear polymer melts in bulk and confined systems under shear flow. Scientific Reports. (electronic publication) 21 August 2017, vol. 7, thesis no. 9004, pp. 1-8, Supplementary Information (pp. 1-8). See abstract; page 2, first paragraph; and Supplementary Information, pages 2-3.	1-3,5-14 4		
Y	YAO, Z. et al. Improved neighbor list algorithm in molecular simulations using cell decomposition and data sorting method. Computer Physics Communications. (electronic publication) 05 June 2004, vol. 161, pp. 27-35. See abstract; page 28, left column; and figures 1-2.	4		
X Y	JEONG, S. et al. Molecular mechanisms of interfacial slip for polymer melts under shear flow. Journal of Rheology. 2017, vol. 61, pp. 253-264, Supporting Information (pp. 1-11). See abstract; page 254, right column; and Supporting Information, pages 2-3.	1-3,5-14 4		
☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.				
<table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 50%; vertical-align: top; border: none;"> * Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed </td> <td style="width: 50%; vertical-align: top; border: none;"> "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family </td> </tr> </table>			* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family			
Date of the actual completion of the international search 17 June 2024		Date of mailing of the international search report 19 June 2024		
Name and mailing address of the ISA/KR Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon Building 4, 189 Cheongsaro, Seo-gu, Daejeon 35208 Facsimile No. +82-42-481-8578		Authorized officer Telephone No.		

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	NAFAR SEFIDDASHTI, M. H. et al. High-fidelity scaling relationships for determining dissipative particle dynamics parameters from atomistic molecular dynamics simulations of polymeric liquids. Scientific Reports. 2020, vol. 10, thesis no. 4458, pp. 1-13. See entire document.	1-14
A	JP 2018-049583 A (SUMITOMO HEAVY INDUSTRIES LTD.) 29 March 2018 (2018-03-29) See entire document.	1-14

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2023/019065

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP	2018-049583	A	29 March 2018	None	

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) G16C 10/00(2019.01)i; G16C 20/30(2019.01)i; G16C 20/80(2019.01)i; G06F 17/11(2006.01)i		
B. 조사된 분야		
조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) G16C 10/00(2019.01); G06F 17/17(2006.01)		
조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC		
국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 고분자 용융체(polymer melts), 분자동역학 시뮬레이션(molecular dynamic simulation), 계면 시스템(confined systems), p-SLLOD, r-RESPA, Lennard-jones potential, Linked cell, Neighbor list		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X Y	CHO, S. 등, 'Molecular dynamics for linear polymer melts in bulk and confined systems under shear flow', Scientific Reports, (전자공개)2017.08.21, 7권, 논문번호 9004, 1-8 페이지, Supplementary Information(1-8 페이지) 초록; 페이지 2, 1번째 단락; Supplementary Information, 페이지 2-3	1-3,5-14 4
Y	YAO, Z. 등, 'Improved neighbor list algorithm in molecular simulations using cell decomposition and data sorting method', Computer Physics Communications, (전자공개)2004.06.05, 161권, 27-35 페이지 초록; 페이지 28, 좌컬럼; 도면 1-2	4
X Y	JEONG, S. 등, 'Molecular mechanisms of interfacial slip for polymer melts under shear flow', Journal of Rheology, 2017, 61권, 253-264 페이지, Supporting Information(1-11 페이지) 초록; 페이지 254, 우컬럼; Supporting Information, 페이지 2-3	1-3,5-14 4
A	NAFAR SEFIDDASHTI, M. H. 등, 'High-fidelity scaling relationships for determining dissipative particle dynamics parameters from atomistic molecular dynamics simulations of polymeric liquids', Scientific Reports, 2020, 10권, 논문번호 4458, 1-13 페이지 전체 문헌	1-14
☒ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. ☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2024년06월17일(17.06.2024)		국제조사보고서 발송일 2024년06월19일(19.06.2024)
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578		심사관 허주형 전화번호 +82-42-481-5373

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	JP 2018-049583 A (SUMITOMO HEAVY INDUSTRIES LTD.) 2018.03.29 전체 문헌	1-14

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 2018-049583 A	2018/03/29	없음	