

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2012-0047124 (43) 공개일자 2012년05월11일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) G06T 17/00 (2006.01) (21) 출원번호 10-2010-0108834 (22) 출원일자 2010년11월03일 심사청구일자 2010년11월03일	(71) 출원인 고려대학교 산학협력단 서울 성북구 안암동5가 1 (72) 발명자 김창현 서울특별시 동대문구 약령사로 25, 105동 703호 (제기동, 안암골벽산아파트) 신승호 서울특별시 동대문구 장안벚꽃로 107, 현대홈타운 아파트 111동 405호 (장안동) (74) 대리인 송경근	

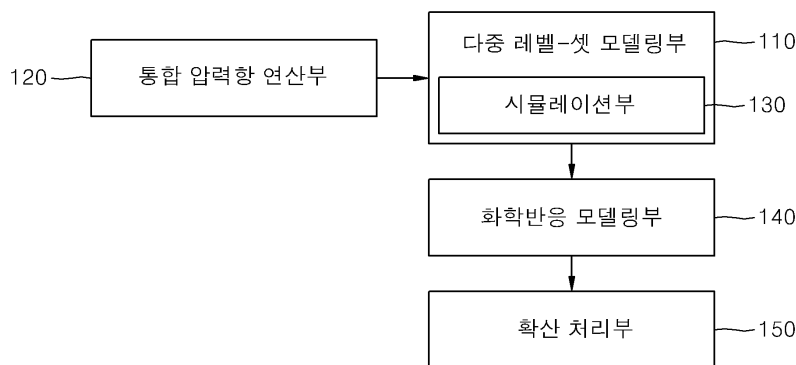
전체 청구항 수 : 총 17 항

(54) 발명의 명칭 물질간 혼합 현상의 모델링 장치 및 방법

(57) 요약

물질간 혼합 현상의 모델링 장치 및 방법이 개시된다. 다중 레벨-셋 모델링부는 상이한 성질을 가지는 물질들 각각을 개별 성분들의 다중 레벨-셋으로서 모델링하고, 다중 레벨-셋들 각각의 개별 압력항을 다르시 법칙 및 물질 전달을 고려하여 연산한다. 통합 압력항 연산부는 다중 레벨-셋들을 결합하여 물질들 각각에 대한 통합 레벨-셋을 생성하고, 생성된 통합 레벨-셋을 이용하여 물질들의 통합 압력항을 연산한다. 시뮬레이션부는 통합 레벨-셋을 이용하여 모델링된 물질들 간의 혼합면에서 발생하는 압력 점프에 기반하여 물질들 간의 비스커스 썬거링을 시뮬레이션한다. 화학 반응 모델링부는 혼합면에서 일어나는 물질들 간의 화학적 반응을 모델링한다. 본 발명에 따르면, 복잡한 유체 현상들을 몇 가지 물리 현상을 이용하여 양호하게 시뮬레이션하면서도, 이와 더불어 혼합 가능한 유체들 간의 상호 작용을 표현할 수 있다.

대 표 도 - 도1



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	2-09-1205-001-10985-05-003
부처명	문화체육관광부
연구사업명	콘텐츠산업기술지원사업 2010년도 문화콘텐츠산업기술지원사업
연구과제명	대규모 액체, 폭발, 입자형 자연현상 표현을 위한 시뮬레이션 기술 개발
주관기관	(주)에프엑스기어
연구기간	2010.03.01 ~ 2011.02.28이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호	10035619
부처명	지식경제부
연구사업명	지식경제 기술혁신사업 산업원천기술개발사업
연구과제명	디지털 텍스타일 기반의 Around Body Computer 기술 개발
주관기관	고려대학교 산학협력단
연구기간	2010.03.01 ~ 2011.02.28이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호	2010-0027656
부처명	교육과학기술부
연구사업명	기초연구사업 중견지원사업 핵심연구사업
연구과제명	고품질 다상 유체 복합 시뮬레이션 기술
주관기관	고려대학교 산학협력단
연구기간	2010.09.01 ~ 2011.08.31

특허청구의 범위

청구항 1

상기한 성질을 가지는 물질들 각각을 개별 성분들의 다중 레벨-셋으로서 모델링하고, 상기 다중 레벨-셋들 각각의 개별 압력항을 다르시 법칙 및 물질 전달을 고려하여 연산하는 다중 레벨-셋 모델링부;

상기 다중 레벨-셋들을 결합하여 상기 물질들 각각에 대한 통합 레벨-셋을 생성하고, 생성된 통합 레벨-셋을 이용하여 상기 물질들의 통합 압력항을 연산하는 통합 압력항 연산부;

상기 통합 레벨-셋을 이용하여 모델링된 상기 물질들 간의 혼합면에서 발생하는 압력 점프에 기반하여 상기 물질들 간의 비스커스 핑거링을 시뮬레이션하는 시뮬레이션부; 및

상기 혼합면에서 일어나는 상기 물질들 간의 화학적 반응을 모델링하는 화학 반응 모델링부;를 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 2

제 1항에 있어서,

상기 다중 레벨-셋 모델링부는 상기 물질들 각각을 두 개 이상의 개별 성분들의 레벨을 포함하는 집합으로서 모델링하는 동작 및 모델링된 상기 다중 레벨-셋 각각의 성분들의 속도를 표현하는 속도장을 연산하는 동작을 수행하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 3

제 2항에 있어서,

상기 통합 압력항 연산부는 각 레벨에 해당하는 개별 성분들의 속도장을 결합하여 상기 물질의 통합 속도장을 생성하는 동작, 상기 통합 속도장에 대한 상기 통합 압력항을 연산하는 동작 및 상기 물질이 무발산 조건을 만족하도록 상기 통합 속도장을 조정하는 동작을 수행하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 4

제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 시뮬레이션부는 다르시 법칙을 이용하여 상기 물질들 간의 상기 혼합면에서 발생하는 압력 구배 벡터를 연산하는 동작, 상기 압력 구배 벡터를 이용하여 상기 혼합면에서의 압력 점프를 연산하는 동작 및 상기 압력 점프에 기반하여 상기 물질들 간에 발생하는 비스커스 핑거링 현상을 모델링하는 동작을 수행하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 5

제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화학 반응 모델링부는 화학적 반응에 기인한 상기 물질들 간의 물질 변화를 열에 의한 상전이(phase transition) 현상을 이용하여 모델링하는 동작, 상기 모델링 결과 얻어진 물질 전달률에 따라서 상기 물질의 레벨-셋을 갱신하는 동작 및 상기 물질 전달률을 이용하여 상기 압력항의 발산값을 재조정함으로써 물질의 부피를 제어하는 동작을 수행하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 6

제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 물질의 분자간 상호 작용을 격자 기반 준-라그랑즈 이류 및 입자-기반 이류를 고려하여 모델링되는 농도 입자에 의해 시뮬레이션하는 확산 처리부를 더 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 7

제 6항에 있어서,

상기 확산 처리부는 상기 혼합면에 상응하는 격자 셀에서 속도, 반경, 위치, 및 농도에 의하여 정의되는 상기 농도 입자를 생성하는 동작, 상기 격자 셀 내에서 발생하는 농도 입자들의 흡수 현상을 고려하여 상기 농도 입자들의 농도를 연산하는 동작 및 상기 농도 입자들의 농도에 기반하여 상기 입자들 간의 상호 작용을 시뮬레이션하는 상호 작용 시뮬레이션 동작을 수행하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 8

제 7항에 있어서,

상기 확산 처리부는 상기 상호 작용 시뮬레이션 동작을 수행하기 위하여 상기 농도 입자들의 농도 구배의 방향에 따라 작용되는 확산력을 연산하는 동작, 상기 농도 입자들의 농도 구배의 곡률을 이용하여 모세관력을 연산하는 동작, 평탄화 입자 유체역학(SPH) 기법을 이용하여 상기 농도 입자들 상호간의 분자간력을 연산하는 동작, 격자 속도 및 입자 속도 간의 커플링을 야기하여 상기 농도 입자의 이동에 저항하는 커플링력을 연산하는 동작 및 상기 확산력, 모세관력, 분자간력, 및 커플링력을 합산하여 상기 농도 입자들의 이류 현상을 시뮬레이션하는 동작을 수행하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 장치.

청구항 9

(a) 상이한 성질을 가지는 물질들 각각을 개별 성분들의 다중 레벨-셋으로서 모델링하고, 상기 다중 레벨-셋들 각각의 개별 압력항을 다르시 법칙 및 물질 전달을 고려하여 연산하는 단계;

(b) 상기 다중 레벨-셋들을 결합하여 상기 물질들 각각에 대한 통합 레벨-셋을 생성하고, 생성된 통합 레벨-셋을 이용하여 상기 물질들의 통합 압력항을 연산하는 단계;

(c) 상기 통합 레벨-셋을 이용하여 모델링된 상기 물질들 간의 혼합면에서 발생하는 압력 점프에 기반하여 상기 물질들 간의 비스커스 팽거름을 시뮬레이션하는 단계; 및

(d) 상기 혼합면에서 일어나는 상기 물질들 간의 화학적 반응을 모델링하는 단계;를 포함하며,

상기 다중 레벨-셋들에 대하여 상기 (a) 단계 내지 상기 (d) 단계가 반복 수행되는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 10

제 9항에 있어서,

상기 (a) 단계는,

(a1) 상기 물질들 각각을 두 개 이상의 개별 성분들의 레벨을 포함하는 집합으로서 모델링하는 단계; 및

(a2) 모델링된 상기 다중 레벨-셋 각각의 성분들의 속도를 표현하는 속도장을 연산하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 11

제 10항에 있어서,

상기 (b) 단계는,

(b1) 각 레벨에 해당하는 개별 성분들의 속도장을 결합하여 상기 물질의 통합 속도장을 생성하는 단계;

(b2) 상기 통합 속도장에 대한 상기 통합 압력항을 연산하는 단계; 및

(b3) 상기 물질이 무발산 조건을 만족하도록 상기 통합 속도장을 조정하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 12

제 9항 내지 제 11항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 (c) 단계는,

- (c1) 다르시 법칙을 이용하여 상기 물질들 간의 상기 혼합면에서 발생하는 압력 구배 벡터를 연산하는 단계;
- (c2) 상기 압력 구배 벡터를 이용하여 상기 혼합면에서의 압력 점프를 연산하는 단계; 및
- (c3) 상기 압력 점프에 기반하여 상기 물질들 간에 발생하는 비스커스 핑거링 현상을 모델링하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 13

제 9항 내지 제 11항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 (d) 단계는,

- (d1) 화학적 반응에 기인한 상기 물질들 간의 물질 변화를 열에 의한 상전이 현상을 이용하여 모델링하는 단계;
- (d2) 상기 모델링 결과 얻어진 물질 전달률에 따라서 상기 물질의 레벨-셋을 갱신하는 단계; 및
- (d3) 상기 물질 전달률을 이용하여 상기 압력항의 발산값을 재조정함으로써 물질의 부피를 제어하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 14

제 9항 내지 제 11항 중 어느 한 항에 있어서,

- (e) 상기 물질의 분자간 상호 작용을, 격자 기반 준-라그랑즈 이류 및 입자-기반 이류를 고려하여 모델링되는 농도 입자를 이용하여 시뮬레이션하는 단계를 더 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 15

제 14항에 있어서,

상기 (e) 단계는,

- (e1) 상기 혼합면에 상응하는 격자 셀에서, 속도, 반경, 위치, 및 농도에 의하여 정의되는 상기 농도 입자를 생성하는 단계;
- (e2) 상기 격자 셀 내에서 발생하는 농도 입자들의 흡수 현상을 고려하여 상기 농도 입자들의 농도를 연산하는 단계; 및
- (e3) 상기 농도 입자들의 농도에 기반하여 상기 입자들 간의 상호 작용을 시뮬레이션하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 16

제 15항에 있어서,

상기 (e3) 단계는,

- (e31) 상기 농도 입자들의 농도 구배의 방향에 따라 작용되는 확산력을 연산하는 단계;
- (e32) 상기 농도 입자들의 농도 구배의 곡률을 이용하여 모세관력을 연산하는 단계;
- (e33) 평탄화 입자 유체역학 기법을 이용하여 상기 농도 입자들 상호간의 분자간력을 연산하는 단계;
- (e34) 격자 속도 및 입자 속도 간의 커플링을 야기하여 상기 농도 입자의 이동에 저항하는 커플링력을 연산하는 단계; 및
- (e35) 상기 확산력, 모세관력, 분자간력, 및 커플링력을 합산하여 상기 농도 입자들의 이류 현상을 시뮬레이션하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 물질간 혼합 현상 모델링 방법.

청구항 17

제 9항 내지 제 11항 중 어느 한 항에 기재된 물질간 혼합 현상 모델링 방법을 컴퓨터에서 실행시키기 위한 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체.

명세서

기술 분야

[0001] 본 발명은 물질간 혼합 현상의 모델링 장치 및 방법에 관한 것으로서, 보다 상세하게는, 컴퓨터 그래픽을 사용하여 특히 적은 연산량에 의해 상이한 속성을 가진 유체들 간에 일어나는 비스커스 핑거링 현상을 근사하게 시뮬레이션하기 위한 컴퓨터 영상 처리 기술 분야에 관련된 것이다.

배경 기술

[0002] 컴퓨터 그래픽 분야에서 다양한 유체 시뮬레이션 기법들이 개발되어 실제감있는 애니메이션을 구현하는데 이용되어 왔다. 그러나, 이러한 기법들 거의 모두는 물, 공기, 및 공기 방울과 같은 혼합되지 않는 유체들에 대해서 다루고 있다. 그러나 이러한 기법들은 상호 혼합되고 상호 작용하는 유체들의 물리적 화학적 현상에 대해서는 다루지 않고 있다.

[0003] 최근에는 하부격자에서 이루어지는 유체의 움직임에 대한 상세 사항을 모델링함으로써 유체 시뮬레이션의 효율성을 향상시키기 위한 많은 연구가 행해져 왔다. 이러한 연구는 라그랑즈 입자(Lagrangian particle)와 오일러 격자(Eulerian grid)를 결합시킴으로써 가능해진다. 예를 들면, 입자 레벨-셋에서 탈출한 입자들을 SPH 기법과 결합시킴으로써 물이 튀기는 현상을 모델링하는 기법이 제안된 바 있으며, 입자 레벨-셋 및 SPH 간의 2-방향 커플링을 개발함으로써 확산 영역을 시뮬레이션하는 기법이 있다. 또한, 유체 흐름의 소규모 특성을 유지하면서 생긴 격자 상에서 활성이 높은 공기 방울들을 모델링하는 기법 및 입자와 레벨-셋 표현식을 서로 교환 가능하도록 하는 기법이 제안되었다.

[0004] 두 개의 상이한 유체들이 서로 만날 경우, 이들은 물리적 압력차 및 확산 법칙에 따라서 프랙탈(fractal) 형상으로 확산된다. 잉크가 물에 떨어지는 경우에 발생하는 현상이 그 일 예에 해당한다. 또한 물질들은 화학 반응에 의한 물질 전달 현상에 의하여 용해될 수 있으며, 다른 상을 가지는 물질로 변화될 수 있다. 유체의 분자들은 흘러가는 유체에서 떠다니며, 매우 복잡한 방식으로 확산된다.

[0005] 그러나 이와 같은 종래 기술들을 이용하여 복잡한 유체 현상을 모델링하더라도 유체 간 상호작용을 완벽히 표현하기는 곤란하다.

[0006] 따라서, 종래 기술에 의한 유체 모델링 기법과 달리 복잡한 유체 현상들을 시뮬레이션하면서 잉크, 물, 기포 및 용해되는 고체와 같은 혼합 가능한 유체들 간의 상호 작용을 나타내는 애니메이션을 제공하기 위한 기술이 요구된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는, 복잡한 유체 현상들을 시뮬레이션하면서 혼합 가능한 유체들 간의 상호 작용을 양호하게 표현할 수 있는 시뮬레이션 기술에 의해 결과물의 품질을 현저하게 향상시킬 수 있으며, 연산 가능한 규모에서 격자들 간의 분자간 확산 및 인력을 시뮬레이션할 수 있는 물질간 혼합 현상의 모델링 장치 및 방법을 제공하는 데 있다.

[0008] 본 발명이 이루고자 하는 다른 기술적 과제는, 복잡한 유체 현상들을 시뮬레이션하면서 혼합 가능한 유체들 간의 상호 작용을 양호하게 표현할 수 있는 시뮬레이션 기술에 의해 결과물의 품질을 현저하게 향상시킬 수 있으며, 연산 가능한 규모에서 격자들 간의 분자간 확산 및 인력을 시뮬레이션할 수 있는 물질간 혼합 현상의 모델링 방법을 컴퓨터에서 실행시키기 위한 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체를 제공하는 데 있다.

과제의 해결 수단

[0009] 상기의 기술적 과제를 달성하기 위한, 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 장치는, 상이한 성질을 가지는 물질들 각각을 개별 성분들의 다중 레벨-셋으로서 모델링하고, 상기 다중 레벨-셋들 각각의 개별 압력항을 다르시 법칙 및 물질 전달을 고려하여 연산하는 다중 레벨-셋 모델링부; 상기 다중 레벨-셋들을 결합하여 상기 물질들 각각에 대한 통합 레벨-셋을 생성하고, 생성된 통합 레벨-셋을 이용하여 상기 물질들의 통합 압력항을 연산하는 통합 압력항 연산부; 상기 통합 레벨-셋을 이용하여 모델링된 상기 물질들 간의 혼합면에서 발생하는

압력 점프에 기반하여 상기 물질들 간의 비스커스 핑거링을 시뮬레이션하는 시뮬레이션부; 및 상기 혼합면에서 일어나는 상기 물질들 간의 화학적 반응을 모델링하는 화학 반응 모델링부;를 구비한다.

[0010] 상기의 기술적 과제를 달성하기 위한, 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 방법은, (a) 상이한 성질을 가지는 물질들 각각을 개별 성분(substances)들의 다중 레벨-셋(multiple level-set)으로서 모델링하고, 상기 다중 레벨-셋들 각각의 개별 압력항(individual pressure term)을 다르시 법칙(Darcy's Law) 및 물질 전달을 고려하여 연산하는 단계; (b) 상기 다중 레벨-셋들을 결합하여 상기 물질들 각각에 대한 통합 레벨-셋(combined level-set)을 생성하고, 생성된 통합 레벨-셋을 이용하여 상기 물질들의 통합 압력항을 연산하는 단계; (c) 상기 통합 레벨-셋을 이용하여 모델링된 상기 물질들 간의 혼합면(mixing surface)에서 발생하는 압력 점프에 기반하여 상기 물질들 간의 비스커스 핑거링(viscous fingering)을 시뮬레이션하는 단계; 및 (d) 상기 혼합면에서 일어나는 상기 물질들 간의 화학적 반응을 모델링하는 단계;를 포함하며, 상기 다중 레벨-셋들에 대하여 상기 (a) 단계 내지 상기 (d) 단계가 반복 수행된다.

발명의 효과

[0011] 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 장치 및 방법에 의하면, 복잡한 유체 현상들을 몇 가지 물리 현상을 이용하여 양호하게 시뮬레이션하면서도, 이와 더불어 혼합 가능한 유체들 간의 상호 작용을 표현할 수 있다. 또한 연산 가능한 규모에서 격자들 간의 분자간 확산 및 인력을 양호하게 시뮬레이션하는 것이 가능하다.

도면의 간단한 설명

[0012] 도 1은 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 장치에 대한 바람직한 실시예의 구성을 도시한 블록도,
 도 2는 본 발명에서 통합 레벨-셋을 이용하는 효과를 설명하기 위한 도면,
 도 3은 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 방법에 대한 바람직한 실시예의 수행과정을 도시한 흐름도,
 도 4는 곡률과 침투율 간의 관계를 설명하기 위한 도면.
 도 5는 실제 비스커스 핑거링 현상을 촬영한 영상과 본 발명에 의한 시뮬레이션 결과를 비교한 도면,
 도 6은 투명 유체를 부음에 따라서 고체 주전자가 녹아내리는 현상을 나타낸 도면,
 도 7은 복합 기법을 이용하여 두 개의 물질들의 혼합 현상을 2차원적으로 시뮬레이션한 결과를 나타낸 도면,
 도 8은 본 발명에 의해 유체가 혼합되는 현상을 시뮬레이션한 결과를 나타낸 도면,
 도 9는 본 발명에 의해 주전자 형태의 고체가 액체에 용해되는 현상을 시뮬레이션한 결과를 나타낸 도면, 그리고,
 도 10은 액체 주전자가 물에 용해되는 과정을 모델링한 결과를 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0013] 이하에서 첨부된 도면들을 참조하여 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 장치 및 방법의 바람직한 실시예에 대해 상세하게 설명한다.

[0014] 도 1은 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 장치에 대한 바람직한 실시예의 구성을 도시한 블록도이다.

[0015] 도 1을 참조하면, 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 장치는, 다중 레벨-셋 모델링부(110), 통합 압력 항 연산부(120), 시뮬레이션부(130) 및 화학 반응 모델링부(140)를 구비한다. 여기서 시뮬레이션부(130)는 다중 레벨-셋 모델링부(110)의 일부 구성요소로서 동작할 수 있다. 또한 이하에서는 본 발명에 따른 모델링 장치가 물질간 혼합 현상 중에서 특히 서로 상이한 성질을 가지는 유체 간의 혼합 현상을 모델링하는 경우를 대표적인 실시예로 하여 설명한다.

[0016] 다중 레벨-셋 모델링부(110)는 상이한 성질을 가지는 유체들 각각을 다중 레벨-셋 기법(multiple level-set technique)을 이용하여 모델링한다. 다중 레벨-셋 기법이란 유체를 다른 속성을 가진 복수의 성분(substance)들로 이루어진 여러 개의 레벨로 분할하여 이해하는 기법이다.

[0017] 유체 혼합을 시뮬레이션하기 위해서는 두 개 이상의 유체를 시뮬레이션하고 이들 간의 인터페이스, 즉 계면을 추적하는 것이 필요하다. 본 발명에 따른 모델링 장치는 혼합 가능한 유체들을 다중 레벨-셋으로 이해하여 혼합

면을 추적하는데, 이때 다르시 법칙(Darcy's Law)에 따른 압력 점프(pressure jump)를 구한 다음 압력항을 시뮬레이션한다. 이후 시뮬레이션부(130)는 비스커스 핑거링 현상에 의하여 생성되는 새로운 혼합면을 추적한다. 이러한 혼합면에서는 화학적 물질 전달(chemical mass transfer) 현상도 발생할 수 있는데, 이러한 화학적 물질 전달 현상은 화학 반응 모델링부(140)에 의해 모델링된다. 최종적으로 확산 처리부(150)는 연산된 각 성분 및 유체 전체의 성질을 이용하여 물리적 확산을 모델링한다. 이하에서는 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 장치의 각 구성 요소의 동작에 대해서 상세히 설명한다.

- [0018] 다중 레벨-셋 모델링부(110)는 각 다중 레벨-셋에 대한 각 성분의 속도를 포함하는 장(field)을 이용한다. 단일 속도장(velocity field)을 이용할 경우에는 앞에서 설명한 혼합면에서의 특성을 표현하는 것이 곤란한데, 이는 각 유체의 속도장이 확산항 및 압력항에 의하여 분산되기 때문이다. 따라서 본 발명에서는 유체의 상변화를 고려하면서도 무발산 조건(divergence-free condition)을 만족시키는 시나리오를 시뮬레이션할 필요성이 있다.
- [0019] 도 1에서 다중 레벨-셋 모델링부(110)는 우선 다르시 법칙 및 물질 전달의 효과를 포함하는 각 유체의 압력항(pressure term)을 연산한다. 각각의 속도장은 외삽(extrapolate)되고, 그 이후에 준-라그랑즈 이류(semi-Lagrangian advection) 기법에 의하여 이류된다. 이에 관하여는 뒤에서 다시 설명하기로 한다.
- [0020] 통합 압력항 연산부(120)는 다중 레벨-셋 모델링부(110)에 의해 연산된 속도장들을 결합함으로써 유체에 대한 통합 속도장을 연산한다. 또한 추가적으로 전체 유체의 속도장에 대한 압력항을 연산한다. 이러한 속도장은 유체가 무발산 조건을 만족하도록 조정되어야 한다. 확산 처리부(150)는 최종적으로 확산항을 연산한다.
- [0021] 도 2는 본 발명에서 통합 레벨-셋을 이용하는 효과를 설명하기 위한 도면이다. 도 2의 (a)는 통합 레벨-셋을 이용하는 경우에 관하여 도시한 도면이고, (b)는 개별 레벨-셋을 이용하는 경우에 관하여 도시한 도면이다. 본 발명에서는 통합 레벨-셋을 이용함으로써 어떤 데이터를 전체 유체의 통합 레벨-셋에 할당하고, 어떤 데이터를 각 유체의 레벨-셋에 할당할지 선택할 수 있다. 여러 개의 다중 레벨-셋을 이용하는 경우에는 도 2의 (b)에 도시된 것과 같이 레벨-셋 간의 교차 지점에서 표면 장력이 잘못 계산되는 경우가 발생할 수 있다. 따라서 본 발명에서는 모든 레벨-셋들이 단일 유체를 나타내는 것으로 간주하고, 이와 같은 통합 레벨-셋 데이터를 이용하여 표면 장력을 계산한다. 그에 따라 도 2의 (a)에 도시된 것과 같이 혼합된 전체 유체에 대한 표면 장력의 정확한 방향을 결정할 수 있다.
- [0022] 도 3은 본 발명에 따른 물질간 혼합 현상의 모델링 방법에 대한 바람직한 실시예의 수행과정을 도시한 흐름도이다.
- [0023] 도 3을 참조하면, 다중 레벨-셋 모델링부(110)는 상이한 성질을 가지는 유체들 각각을 개별 성분들의 다중 레벨-셋으로서 모델링한다(S1010). 이때 다중 레벨-셋 각각의 개별 압력항(individual pressure term)은 다르시 법칙 및 물질 전달을 고려하여 연산한다. 구체적으로, 다중 레벨-셋으로 유체들 각각을 모델링하기 위하여 우선 두 개 이상의 개별 성분들의 레벨을 포함하는 집합으로서 유체를 모델링한 후, 모델링된 다중 레벨-셋 각각의 성분들의 속도를 표현하는 속도장(velocity field)을 연산한다. 유체를 다중 레벨-셋으로 모델링하기 위한 방법에 대해서는 해당 부분에서 상세히 후술된다.
- [0024] 다중 레벨-셋 모델링부(110)는 다중 레벨-셋들을 결합하여 유체들 각각에 대한 통합 레벨-셋(combined level-set)을 생성한다(S1020). 생성된 통합 레벨-셋은 통합 압력항 연산부(120)에 의해 유체들의 통합 압력항을 연산하는데 이용된다. 통합 압력항은 유체의 인터페이스에서의 정확한 표면 장력의 방향을 구하는데 이용된다.
- [0025] 개별 성분들의 통합 레벨-셋이 연산되면, 시뮬레이션부(130)는 연산된 통합 레벨-셋을 이용하여 모델링된 물질들 간의 혼합면에서 발생하는 압력 점프에 기반하여 물질들 간의 비스커스 핑거링(viscous fingering)을 시뮬레이션한다(S1030). 앞에서 설명한 바와 같이 시뮬레이션부(130)는 다중 레벨-셋 모델링부(110)의 일부 구성요소로서 동작하므로, 다중 레벨-셋 모델링부(110)의 동작과 시뮬레이션부(130)의 동작은 동시에 수행된다.
- [0026] 비스커스 핑거링을 시뮬레이션함으로써 인접하는 두 유체들 간의 혼합 현상을 효과적이며 가시적으로 모델링할 수 있다. 비스커스 핑거링을 시뮬레이션하기 위하여 우선 다르시 법칙을 이용하여 유체들 간의 혼합면에서 발생하는 압력 구배 벡터를 연산하고, 연산된 압력 구배 벡터를 이용하여 혼합면에서의 압력 점프를 연산한다. 그러면 압력 점프에 기반하여 유체들 간에 발생하는 비스커스 핑거링 현상을 모델링할 수 있다.
- [0027] 또한, 화학 반응 모델링부(140)는 혼합면에서 일어나는 물질들 간의 화학적 반응도 모델링한다(S1040). 이 경우에 화학적 반응에 기인한 물질들 간의 물질 변화를 열에 의한 상전이(phase transition) 현상을 이용하여 모델링할 수 있다. 화학적 반응을 모델링하기 위한 다양한 방법에 대해서는 명세서의 해당 부분에서 상세히 후술된다.

다.

[0028] 이후 모델링 효과를 극대화하기 위하여 유체의 분자간 상호 작용이 격자 기반 준-라그랑즈 이류(semi-Lagrangian advection) 및 입자-기반 이류(particle-based advection)를 고려하여 모델링되는 농도 입자(concentration particle)를 이용하여 시뮬레이션된다(S1050). 분자간 상호 작용을 모델링하기 위하여 혼합면에 상응하는 격자 셀에서 속도, 반경, 위치, 및 농도에 의하여 정의되는 농도 입자를 생성하고, 격자 셀 내에서 발생하는 농도 입자들의 흡수 현상을 고려하여 농도 입자들의 농도를 연산한다. 그에 의해 농도 입자들의 농도에 기반하여 입자들 간의 상호 작용을 시뮬레이션할 수 있다. 또한 농도 입자들의 이류 현상은 분자들 간에 작용하는 확산력, 모세관력, 분자간력, 및 커플링력을 합산하여 시뮬레이션된다. 분자간 상호 작용 모델링 기법에 대해서는 명세서의 해당 부분에서 상세히 후술된다. 최종적으로 시뮬레이션 효과를 극대화하기 위하여 다중 레벨-셋들에 대하여 이상에서 설명한 과정이 반복된다(S1060).

[0029] 이하에서는 본 발명에 유체간 혼합 현상을 시뮬레이션하기 위해 이용되는 다양한 시뮬레이션 기법에 대해서 설명한다.

[0030] 우선 기본적인 유체 시뮬레이션 기법에 대해서 설명하면 다음과 같다.

[0031] 본 발명에서 이용되는 시뮬레이션 기법의 기본이 되는 나비에-스토크스(Navier-Stokes) 방정식은 다음 수학식 1 및 2와 같이 질량 및 모멘텀을 보존한다.

수학식 1

$$\mathbf{u}_t = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}{\rho} - \frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{f}$$

[0032]

수학식 2

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

[0033]

[0034] 여기서, $\mathbf{u}$ 는 속도, $\boldsymbol{\tau}$ 은 비스커스 스트레스 텐서(viscous stress tensor), 그리고 ρ 는 밀도를 나타낸다. $\mathbf{f}$ 는 중력 및 부력과 같은 외력을 추가하기 위하여 이용될 수 있다. 수학식 1 및 2를 수치적으로 시뮬레이션하려면, n 번째 단계에서 $\mathbf{u}$ 의 값이 $\mathbf{u}^n$ 으로부터 $\mathbf{u}^{n+1}$ 로 갱신될 필요가 있다. 수학식 1에 중간 속도 $\mathbf{u}^*$ 를 도입하여 두 개의 항으로 전개하면 다음 수학식 3 및 4와 같다.

수학식 3

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n + \frac{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}{\rho} + \mathbf{f}$$

[0035]

수학식 4

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{\nabla p}{\rho}$$

[0036]

[0037] 변수 $\mathbf{u}^*$ 는 Stam에 의해 제안된 준-라그랑즈 기법(semi-Lagrangian method)을 이용하여 이류항(advection term)을 연산하는데 이용될 수 있다. 수학식 4의 발산을 다음과 수학식 5와 같은 포아송 방정식(Poisson's equation)의 형태로 표현할 수 있다.

수학식 5

$$\nabla^2 p = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*$$

[0038]

[0039] 수학식 5의 해를 구함으로써 압력 프로파일(pressure profile)이 결정되면, 최종적으로 속도 프로파일을 다음 수학식 6과 같이 얻을 수 있다.

수학식 6

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla p$$

[0040]

[0041] 상이한 유체 간의 인터페이스 Γ 에는 불연속적인 압력 프로파일이 존재한다. 기존에 제안된 바 있는 고스트 유체 기법(ghost fluid method, GFM)을 이용하면 이와 같이 인터페이스에 존재하는 불연속 압력을 설명할 수 있다. 노드 i 에서의 압력인 p_i 및 노드 $i+1$ 에서의 압력인 p_{i+1} 은 Γ 를 통하여 외삽되어 다음 수학식 7 및 8과 같이 고스트값인 p_{i+1}^G 및 p_i^G 를 결정한다.

수학식 7

$$p_i^G = p_i + J$$

[0042]

수학식 8

$$p_{i+1}^G = p_{i+1} - J$$

[0043]

[0044] 수학식 7 및 8을 이용하면, 수학식 5는 다음 수학식 9 및 10과 같이 전개될 수 있다.

수학식 9

$$\frac{p_{i+1} + p_{i-1} - 2p_i}{\Delta x^2} = D(x_i) + \frac{J}{\Delta x^2}$$

[0045]

수학식 10

$$\frac{p_{i+2} + p_i - 2p_{i+1}}{\Delta x^2} = D(x_{i+1}) - \frac{J}{\Delta x^2}$$

[0046]

[0047] 여기서, D 는 한 차원에서의 수학식 5의 우변을 나타낸다. 수학식 9 및 10은 포아송 방정식의 해를 구하는데 이용되었던 선형 시스템을 이용하여 풀 수 있다.

[0048] 일반적으로 압력 점프는 표면 장력을 이용하여 모델링되지만, 본 발명에서는 혼합되는 유체들의 인터페이스에서 생성되는 압력 점프 J 를 ∇P^{Darcy} 로서 모델링한다. J 는 비스커스 핑거링을 야기하며, 이에 대해서는 뒤에서 상세히 설명하기로 한다.

[0049] 본 발명에서는 유체 인터페이스에 관심을 두기 위하여 옥트리(octree)를 이용하며, 기존에 제안된 바 있는 입자 레벨-셋 기법을 이용함으로써 더 복잡한 유체 인터페이스로부터 평탄면을 생성할 수 있다.

[0050] 이하에서는 시뮬레이션부(130)에 의해 수행되는 비스커스 핑거링의 모델링에 관하여 설명한다.

[0051] 유체가 혼합되면 그 혼합면이 유사-프랙탈 형상을 이루면서 불규칙적으로 확산된다. 비스커스 핑거링이란 유체가 혼합되었을 때 발생하는 이러한 불안정성을 나타낸다. Hele-Shaw 셀이라고도 불리는 다공성 매체에서, 유체의 불안정한 흐름에 대해서는 지난 50년 동안 연구되어 왔다.

[0052] 본 발명에 따른 모델링 장치의 시뮬레이션부(130)는 다르시 법칙(Darcy's law)을 이용하여 비스커스 핑거링을 모델링하는데, 다르시 법칙은 다공성 매체를 통과하여 흐르는 유체의 상태를 표현하는 것이다. 여기서, 혼합 프로세스는 분자들로 구성된 유체를 유체 침투(fluid infiltrating)하는 것이라고 가정한다. 두 가지 유체들 간의 혼합면에는 유체의 속성으로부터 야기되는 압력 점프가 존재한다. 다르시 법칙에 따르면, 압력 구배 벡터 (pressure gradient vector)는 다음 수학식 11과 같이 표시된다.

수학식 11

[0053]
$$\nabla p^{Darcy} = \frac{\hat{\mu} \mathbf{U}}{k} + \hat{\rho} \mathbf{g}$$

[0054] 여기서, $\hat{\mu}$ 은 점성(viscosity)이고, $\mathbf{U}$ 는 속도를, k 는 투과성(permeability)을 나타내며, $\hat{\rho}$ 은 밀도를, $\mathbf{g}$ 는 중력을 나타낸다.

[0055] 유체 인터페이스에서의 밀도를 정확하게 연산하기 위하여 본 발명에서는 다음의 수학식 12를 이용한다.

수학식 12

[0056]
$$\hat{\beta} = (\beta^- \beta^+) / \{ \theta \beta^+ + (1 - \theta) \beta^- \}$$

[0057] 여기서, $\theta = |\phi(x_i)| / (|\phi(x_i)| + |\phi(x_{i+1})|)$ 이고, - 및 +는 인터페이스의 상이한 면에서부터 얻어지는 가치를 의미한다. 인터페이스에서의 점성도 유사한 방식으로 연산될 수 있다. 앞에서 설명한 바와 같이 각 성분은 고유의 속도장을 가지고 있으며, $\mathbf{U}$ 는 용질의 속도를 나타낸다.

[0058] 다공성 방정식(porosity equation)은 유체 내로 침투하는 용질의 인터페이스의 곡률을 이용하여 작성된다.

[0059] 도 4는 곡률과 침투율 간의 관계를 설명하기 위한 도면이다.

[0060] 도 4를 참조하면, 곡률이 크면 유체 표면은 블록이 되며 침투 확률이 커진다. 그러나 그 모양이 평평하거나 오목이라면 침투 확률은 낮다. 따라서 다공성은 $k = \alpha \kappa_{levelset}$ 으로 표시될 수 있는데, 여기서 α 는 상수이고,

$\kappa_{levelset}$ 는 해당 레벨-셋의 곡률을 나타내며
$$\kappa_{levelset} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \right)$$
 로서 표시될 수 있다.

[0061] u, v, 및 w 방향 속도들 및 압력 점프 J는 한 셀의 각 면의 중심에서 정의되며 국부적으로 참조된다. 따라서 압력 점프는 인접 셀이 반대 방향의 부호를 가지는 인터페이스라고 정의되는 셀의 면에서 연산된다. 그러므로, $\mathbf{U}$ 는 셀 면(cell surface)의 속도를 나타내기 위하여 이용되는데, 이것은 스칼라량이다. 예를 들면, 세 개의 셀 면 상에 인터페이스들이 존재한다면 각 셀 면에 대하여 개별적으로 연산된 J값이 저장된다. J는 다음 수학식 13에서와 같이 각 차원 (x, y, z)에서의 스칼라 값을 포함한다.

수학식 13

$$J_{(x,y,z)} = \frac{\hat{\mu}U_{(x,y,z)}}{k} + \hat{\rho}g(z)$$

[0062]

[0063] 위 수학식 13을 이용하면 도 5에 2차원으로 표시된 바와 같이 혼합면에서의 비스커스 핑거링을 시뮬레이션할 수 있다.

[0064] 도 5는 실제 비스커스 핑거링 현상을 촬영한 영상과 본 발명에 의한 시뮬레이션 결과를 비교하는 도면이다.

[0065] 도 5의 (a)는 실제 사진을 나타내며, (b)는 본 발명에 의한 시뮬레이션 결과를 나타낸 것이다. 도 5를 참조하면, 본 발명의 시뮬레이션 결과는 실제 사진과 유사한 구성을 가지고 있다는 것을 확인할 수 있다.

[0066] 다음으로는 화학 반응 모델링부(140)에 의해 화학적 물질 전달 과정을 시뮬레이션하는 방법에 대하여 상세히 설명한다.

[0067] 유체가 혼합되면 화학적 반응이 일어날 수 있다. 그에 따라 유체의 부피가 증가/감소할 수 있으며, 유체 중 일부는 다른 타입의 유체로 변화될 수 있다. 본 발명에서는 이러한 종류의 물질 전달 과정을 모델링 및 시뮬레이션할 수 있다. 기존에 물이 끓을 경우에 발생하는 물질 전달 과정을 시뮬레이션하는 기법이 제시된 바 있으며, 화학적 반응에 기인한 물질 전달은 열에 의하여 야기되는 상 천이와 유사하다. 화학적 반응에 기인한 물질 전달률은 다음의 수학식 14와 같이 표현될 수 있다.

수학식 14

$$\dot{m}_c = -\frac{\mathbf{cf}_{solute} \cdot \mathbf{N} - \mathbf{cf}_{solvent} \cdot \mathbf{N}}{H}$$

[0068]

[0069] 여기서, $\mathbf{cf}$ 는 $\mathbf{cf} = -D\nabla C_{cell}$ 으로 정의되는 화학적 플럭스이고, N 은 $\mathbf{cf}_{solute}$ 로부터 $\mathbf{cf}_{solvent}$ 까지의 외향 법선이며, H 는 반응의 열이고, C_{cell} 은 각 셀의 농도, 그리고 D 는 해당 농도에서의 확산도 계수(coefficient of diffusivity)를 나타낸다.

[0070] 화학 반응에 의한 물질 전달률은 성분의 농도에 따라 달라진다. 물질 전달률에 기반하여 유체의 레벨-셋은 다음 수학식 15와 같이 갱신된다.

수학식 15

$$\phi_* = \phi_n - \Delta t \frac{\dot{m}_c}{\hat{\rho}} |\nabla \phi|$$

[0071]

[0072] 여기서, ϕ_* 은 갱신된 이후에 레벨-셋 기법을 이용하여 ϕ_{n+1} 로 이루어진다. 유체의 부피가 변하기 때문에 물질 전달률을 이용하여 압력항의 발산값을 재조정함으로써 유체의 부피를 제어해야 하는데, 이는 다음 수학식 16 및 17과 같다.

수학식 16

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = \frac{\dot{m}_c}{\hat{\rho}} |\mathbf{N}|$$

[0073]

수학식 17

$$\nabla^2 p = \frac{\hat{\rho}}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* - \frac{m_c}{\Delta t} |\mathbf{N}|$$

[0074]

[0075]

[0076]

[0077]

[0078]

[0079]

[0080]

[0081]

[0082]

[0083]

[0084]

[0086]

이러한 기법을 이용함으로써, 물질의 부피가 변경되는 현상을 시뮬레이션할 수 있다.

도 6은 투명 유체를 부음에 따라서 고체 주전자가 녹아내리는 현상을 나타낸 도면이다. 도 6의 (a) 및 (b)를 참조하면, 고체의 주전자 형상에 투명 액체가 뿌려지면서 주전자가 녹아내리는 현상을 확인할 수 있다. 또한 도 6의 (c) 및 (d)를 참조하면, (a) 및 (b)에 비하여 주전자의 형상이 더욱 크게 변화하며, (a)와 (d)를 대비하여 보면 주전자의 부피가 현저하게 감소되었음을 알 수 있다.

이와 같이 물질 전달 현상으로 인하여 주전자의 부피가 감소하는데, 고체 주전자의 형상은 레벨-셋 데이터를 이용한 내재면(implicit surface)에 의하여 정의되며, 따라서 구현하기가 용이하다.

한편, 본 발명에서 분자간 상호 작용은 복합 기법(hybrid method)을 이용하여 시뮬레이션된다.

농도의 격자-기반 이류만을 이용해서는 분자간력을 모델링하는 것이 난해하다. 따라서 본 발명에서는 소위 농도 입자(concentration particles)를 이용하여 농도에 대한 분자적 확산 및 상호 작용의 효과에 대해서 시뮬레이션한다. 농도의 이류 현상은 준-라그랑주 이류(semi-Lagrangian advection)의 격자 기반 모델 및 입자-기반 이류(particle-based advection) 모두를 이용하여 시뮬레이션된다. 농도 입자들은 자신이 용해된 용매 내에 완전히 녹지 않고 파르기 분자들과 같이 떠다닌다고 가정한다.

도 7은 이러한 복합 기법을 이용하여 두 개의 물질들의 혼합 현상을 2차원적으로 시뮬레이션한 결과를 나타낸 도면으로, 입자 기반 모델과 격자 기반 모델을 복합하여 사용함에 따라 레벨-셋과 농도 입자들이 함께 시뮬레이션된다.

먼저 이하에서는 농도 입자 및 흡수(absorption) 현상에 대해서 설명한다.

농도 입자들은 혼합면에 상응하는 격자 셀 내에서 생성된다. 농도 입자는 위치, 속도, 반경, 그리고 농도에 의하여 정의된다. 재시딩(reseed)되는 입자들의 개수는 각 셀에 대하여 설정된 최대값에 의존한다. 즉, 본 발명에서는 재시딩을 이용하여 더 많은 입자를 시뮬레이션함으로써 입자 수가 max_p 보다 작을 경우에는 혼합면 셀 내에 max_p 개의 입자들을 생성할 수 있다. max_p 는 한 셀이 포함할 수 있는 입자들의 최대 개수이다. 실험 결과에 따라서 본 명세서에서는 max_p 를 4개 또는 8개로 설정하지만 이는 본 발명을 한정하는 것은 아니다. 입자가 시딩(seed)되면, 그 농도는 $C_{equilibrium}/max_p$ 로 초기화된다.

하나 이상의 입자가 셀에 존재한다면, 입자로부터 해당 격자로 흡수 현상이 발생한다. 반응 속도는 물질의 농도에 비례한다. 일반적으로 두 물질의 반응 속도는 $k_{reaction}[A][B]$ 인데, 여기서 [A]는 각 셀 내에 존재하는 입자 농도들의 합이고(즉, $\sum_i^{np} C_{particle_i}^n$), [B]는 해당 셀의 용매의 농도를 나타낸다.

본 발명에서는 설명의 편의를 위해 셀 농도의 최대 개수를 한정하며, 용매의 농도 [B]는 $C_{equilibrium}$ 으로 초기화된다고 가정한다. 다만, 이는 본 발명의 범위를 한정하는 것은 아니다. 물질 농도 [B]가 반응 생성물이 생성되는 동안에 비례적으로 감소되기 때문에, [B]를 $(C_{equilibrium} - C_{cell})$ 로 모델링할 수 있다. 따라서 다음 단계에서 입자로부터 흡수되는 반응 생성물의 셀 농도인 C_{cell}^{n+1} 은 다음의 수학식 18처럼 표시된다.

수학식 18

$$C_{cell}^{n+1} = C_{cell}^n + \sum_i^{np} k_{reaction} C_{particle_i}^n (C_{equilibrium} - C_{cell}^n)$$

[0085]

여기서, C_{cell} 은 해당 셀 내의 생성물의 농도이고, $C_{particle_i}$ 은 해당 셀 내의 i번째 유체의 농도이며, np 는 해당

셀 내의 유체의 수를 나타내고, $k_{reaction}$ 은 해당 화학 반응의 속도를 정의하는 계수이다.

[0087] 농도 입자가 셀 내로 흡수되면, 해당 용매의 입자 농도는 다음 수학적 식 19와 같이 감소된다.

수학적 식 19

[0088]
$$C_{particle}^{n+1} = C_{particle}^n - k_{reaction} C_{particle}^n (C_{equilibrium} - C_{cell}^n)$$

[0089] 수학적 식 19에 따르면, 입자의 농도가 고정된 문턱치보다 작으면(예를 들어 문턱치는 0.01일 수 있으나 이는 본 발명을 한정하는 것은 아니다), 해당 유체는 삭제된다. 만일 C_{cell}^1 이 $C_{equilibrium}^n$ 보다 크다면, 다음 단계에서 생성물의 농도는 감소하고 용매의 입자 농도는 증가한다. 이러한 프로세스는 화학적 평형 상태를 유지하기 위한 동작과 유사하다. 따라서, 정확도에 큰 영향을 미치지 않고서도 연산이 간단해진다.

[0090] 한편, 농도 입자들은 라그랑즈 기법에 따라서 그들의 속도에 의하여 이루어진다. 농도 입자들 각각의 위치는 $p_{particle}^{n+1} = p_{particle}^n + u_{particle}^n \Delta t$ 의 방정식을 이용하여 갱신된다. 또한 유체의 속도 $u_{particle}$ 은 $u_{particle}^{n+1} = u_{particle}^n + f_{advection}$ 과 같은 방정식을 이용하여 연산된다. 농도 입자들의 이유는 다음 수학적 식 20과 같이 분자간 확산, 침투(infiltration) 및 커플링력에 의존한다.

수학적 식 20

[0091]
$$f_{advection} = f_{diffusion} + f_{capillary} + f_{molecular} + f_{coupling}$$

[0092] 이에 따라 농도 입자들은 농도 구배의 방향에 따라서 확산된다. 확산 플럭스는 다음과 같은 피크 법칙(Fick's Law)에 따른다.

수학적 식 21

[0093]
$$f_{diffusion} = -D \nabla C_{cell}$$

[0094] 여기서 D는 확산 계수이다. 그런데, 수학적 식 21만 가지고서는 불규칙 필라멘트들이 생성 및 확산되는 복잡한 확산 시나리오를 용이하게 모델링할 수 없다. 그러므로 모세관력(capillary force) 및 분자간력을 이용한다.

[0095] 모세관력은 농도장(concentration field)의 곡률 구배를 이용하여 모델링된다. 높은 곡률을 가지는 영역이 높은 다공성을 가지므로, 이런 영역에는 유체가 침투하기가 용이하다. 그러므로, 다음 수학적 식 22를 이용하여 모세관력을 모델링한다.

수학적 식 22

[0096]
$$f_{capillary} = I |\kappa_{concentration}| \nabla \kappa_{concentration}$$

[0097] 여기서, $\kappa_{concentration}$ 은 농도장의 곡률이고, I는 침투 계수(infiltration coefficient)이다. $\kappa_{concentration}$ 은 $\kappa_{concentration} = \nabla \cdot (\nabla C_{cell} / \|\nabla C_{cell}\|)$ 와 같이 표현될 수 있다.

[0098] 본 발명에서는 평탄화 입자 유체역학(smoothed particle hydrodynamics, SPH) 기법을 이용하여 분자간력을 시뮬레이션한다. 분자간력 자체는 농도 입자들 간의 인력을 이용하여 모델링된다. 다음 수학적 식 23이 실험적으로 농도 입자들 간의 인력을 모델링하는데 적합하다고 알려져 왔으며, 이것은 전형적으로 SPH-기반 유체 시뮬레이

선에서 압력을 연산하기 위하여 이용되는 것이기도 하다.

수학식 23

$$\mathbf{f}_{\text{molecular}} = A \sum_j m_j \left(\frac{P_i}{C_{\text{particle}_i}^2} + \frac{P_j}{C_{\text{particle}_j}^2} \right) \nabla W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)$$

[0099]

수학식 34에서, 압력 $P_i = \alpha C_{\text{particle}_i}$ 은 제어 파라미터 ~471을 이용하여 표시되며, A는 인력 계수(attraction coefficient)이고 m은 입자의 질량이다.

[0100]

농도 입자가 상이한 유체들 간에 이동하면, 해당 입자가 이동하는 유체에 의하여 저항력이 작용한다. 이러한 저항력이 격자 및 유체 간 속도의 커플링을 야기한다. 커플링력의 크기는 밀도 입자 및 유체 간의 상대속도에 비례하며, 다음 수학식 24와 같이 표현될 수 있다.

[0101]

수학식 24

$$\mathbf{f}_{\text{coupling}} = -R(\mathbf{u}_{\text{particle}} - \mathbf{u}_{\text{cell}})$$

[0102]

여기서 R은 저항 계수이다. 유체의 전체 이류는 수학식 21, 22, 23 및 24에 의하여 표시된 힘의 합으로서 제공된다.

[0103]

본 발명의 성능을 평가하기 위하여 3.0GHz CPU를 가지는 개인용 컴퓨터에서 시뮬레이션을 수행하였다.

[0104]

도 8은 본 발명에 의하여 유체가 혼합되는 현상을 시뮬레이션한 결과를 도시한 도면으로, 256*256*128 격자를 이용하여 수행된 시뮬레이션 결과이다.

[0105]

도 8의 (a) 내지 (d)는 비너스 형상을 한 유체 덩어리가 개방된 수면에 떨어지고 혼합되는 과정을 순차적으로 나타낸 것이다. 도 8의 (a) 내지 (d)를 참조하면, 서로 다른 두 개의 유체는 서로 혼합되고 마치 잉크가 물과 섞이듯이 확산된다. 따라서 본 발명에 의하면 유체간 혼합 현상을 매우 사실적으로 모델링할 수 있음을 알 수 있다.

[0106]

도 9는 본 발명에 의하여 주전자 형태의 고체가 액체에 용해되는 현상을 시뮬레이션한 결과를 나타낸 도면이다.

[0107]

도 9의 (a) 내지 (d)를 참조하면, 물질 전달 현상에 의하여 고체의 부피가 감소할수록 고체 주전자가 물에 용해되는 것을 확인할 수 있다. 따라서 도 9에 의해 주전자로부터 물로 용해된 물질이 수면에 떠다니면서 공기 방울과 상호 작용하는 과정이 상세히 시뮬레이션된 것을 알 수 있다. 이와 같이 본 발명에 의하면 물질 전달 현상 및 물질간 상호 작용까지도 고려하여 실제 자연계에서 벌어지는 현상을 양호하게 모델링할 수 있다.

[0108]

도 10은 액체 주전자가 물에 용해되는 과정을 모델링한 결과를 도시한 도면이다.

[0109]

도 10을 참조하면, 도 9와는 달리 두 유체간의 인터페이스에 작용하는 압력 및 액체 코어 자체가 이동하기 때문에 비스커스 핑거링이 발생한다는 것을 확인할 수 있다. 이해의 편의를 위하여, 공기 방울과 반응할 경우 고체 및 액체 간의 차이점을 명확하게 도시하기 위해 의도적으로 공기 방울을 첨가하였다. 따라서 유체 혼합의 복잡한 현상을 거의 실제와 다름없이 관찰할 수 있음을 알 수 있다. 도 9 및 도 10의 시뮬레이션을 위한 격자는 128^3 개이며, 프레임당 평균 시뮬레이션 시간은 120초가 소요되었다.

[0110]

이상으로 본 발명에 의하면 인접 성분들 간의 속성 및 화학적 반응의 처리 방법을 개선함으로써 혼합 가능한 다상 유체들의 흐름을 모델링할 수 있으며, 물질 전달 현상을 모델링함으로써 다른 물질로 용해되거나 다른 물질로 상변이 되는 고체 및 액체를 시뮬레이션할 수 있다. 또한 어떤 유체가 다른 유체의 인터페이스에서 확산되는 경우에 발생하는 극소규모 현상을 현실감 있게 재현할 수 있다. 나아가 본 발명에서는 유체 간의 인터페이스에 작용하는 압력을 다르시 법칙을 이용하여 모델링하고, 유체 인터페이스가 유사-프랙탈(fractal-like) 형상으로 확산되는 비스커스 핑거링 현상을 표현한다. 본 발명은 하이브리드 격자-기반 시뮬레이션 및 평탄화 격자 유체 역학(SPH)을 이용하여 연산 가능한 규모에서 격자들 간의 분자간 확산 및 인력을 시뮬레이션한다.

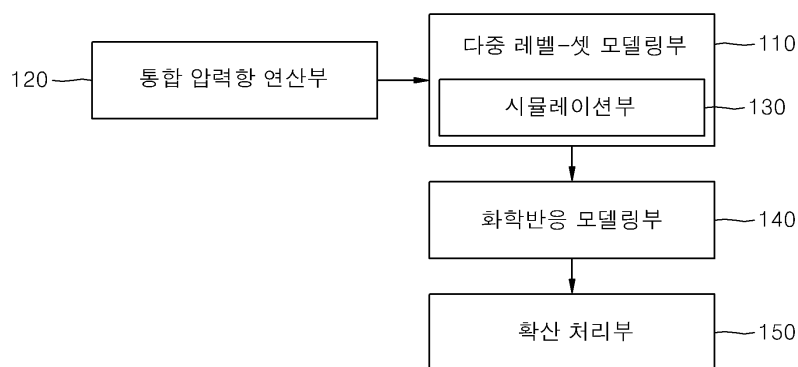
[0111]

[0112] 본 발명은 또한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체에 컴퓨터가 읽을 수 있는 코드로서 구현하는 것이 가능하다. 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체는 컴퓨터 시스템에 의하여 읽혀질 수 있는 데이터가 저장되는 모든 종류의 기록장치를 포함한다. 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체의 예로는 ROM, RAM, CD-ROM, 자기 테이프, 플로피디스크, 광데이터 저장장치 등이 있으며, 또한 캐리어 웨이브(예를 들어 인터넷을 통한 전송)의 형태로 구현되는 것도 포함한다. 또한 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체는 네트워크로 연결된 컴퓨터 시스템에 분산되어 분산방식으로 컴퓨터가 읽을 수 있는 코드가 저장되고 실행될 수 있다.

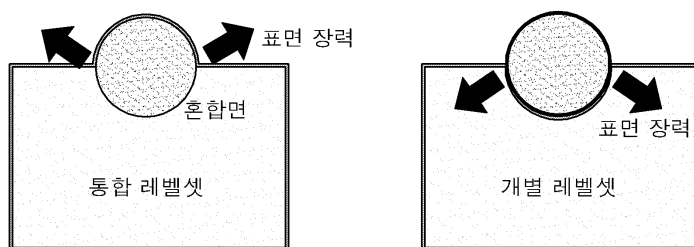
[0113] 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예에 대해 도시하고 설명하였으나, 본 발명은 상술한 특정의 바람직한 실시예에 한정되지 아니하며, 청구범위에서 청구하는 본 발명의 요지를 벗어남이 없이 당해 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 누구든지 다양한 변형 실시가 가능한 것은 물론이고, 그와 같은 변경은 청구범위 기재의 범위 내에 있게 된다.

도면

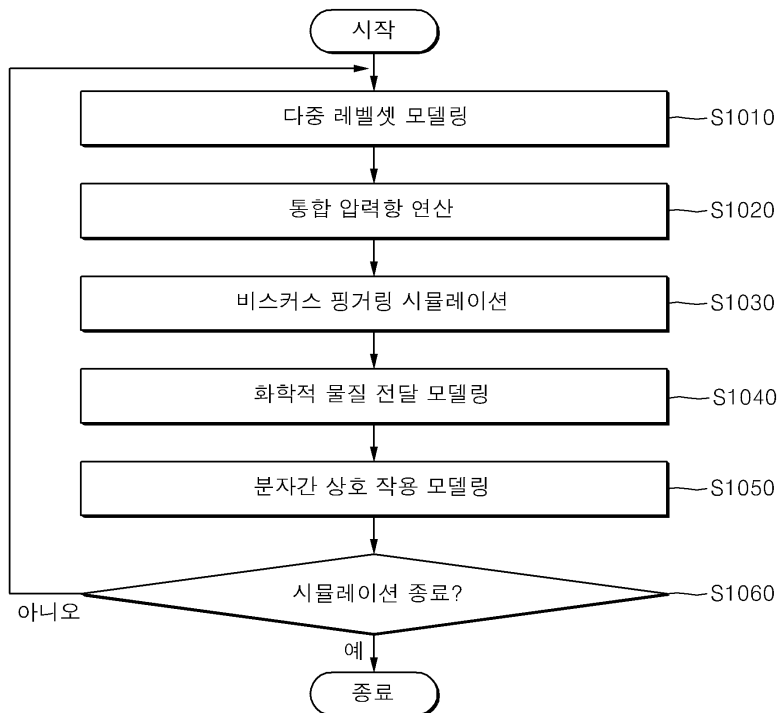
도면1



도면2



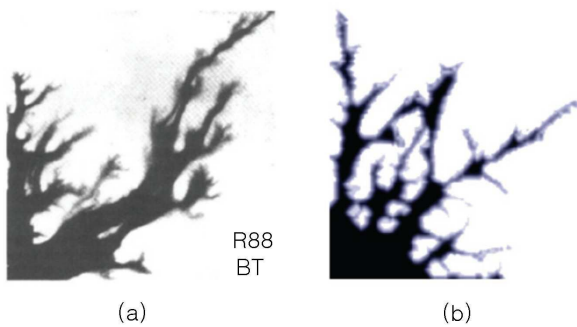
도면3



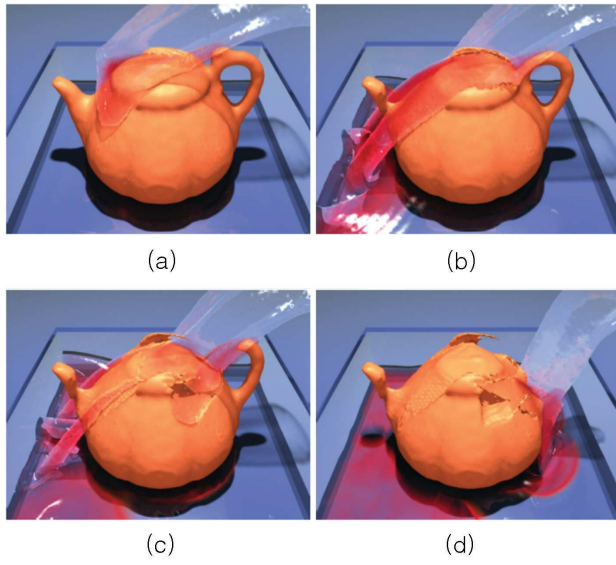
도면4



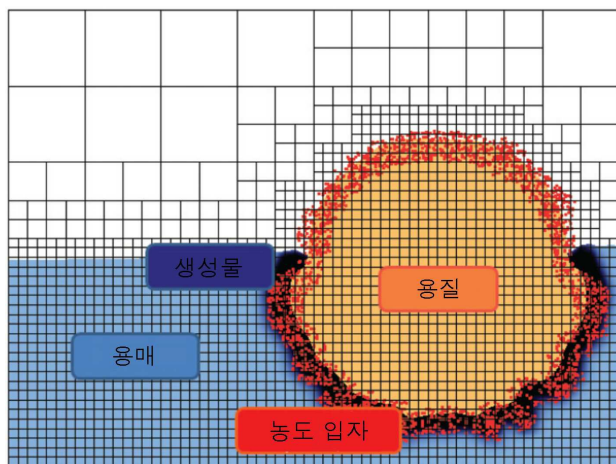
도면5



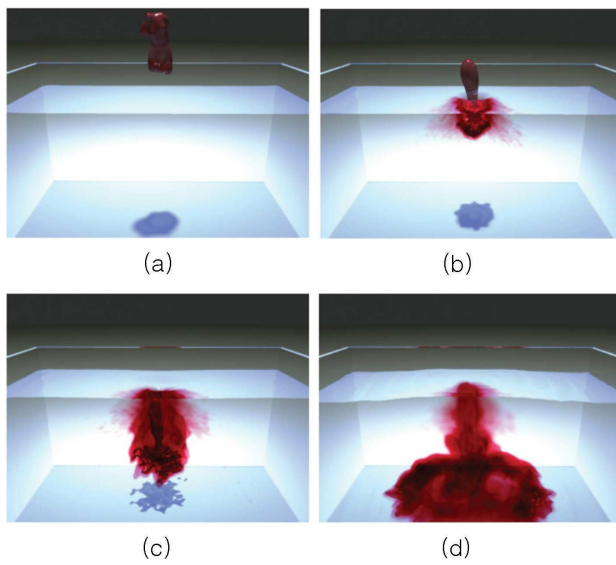
도면6



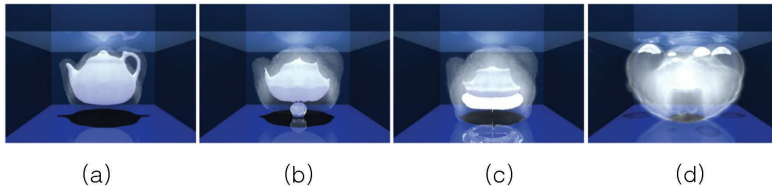
도면7



도면8



도면9



도면10

