



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0010315
(43) 공개일자 2019년01월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G06F 17/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류
G06F 17/509 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-0092937

(22) 출원일자 2017년07월21일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

현대자동차주식회사

서울특별시 서초구 현릉로 12 (양재동)

울산과학기술원

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

기아자동차주식회사

서울특별시 서초구 현릉로 12 (양재동)

(72) 발명자

차진혁

경기도 수원시 장안구 화산로187번길 19, 삼성래미안아파트 110동 2001호

곽상규

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인태평양

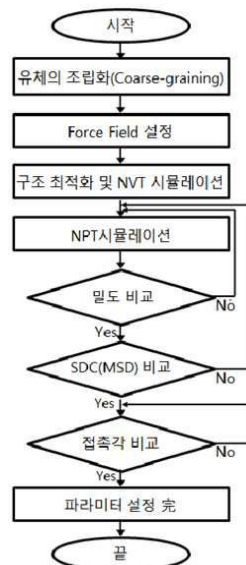
전체 청구항 수 : 총 14 항

(54) 발명의 명칭 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법 및 이를 이용한 유체의 유동 구현방법

(57) 요약

본 발명은 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터를 최적 설정하는 방법 및 상기 방법을 이용하여 유체의 유동을 구현하는 방법에 관한 것이다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

신은혜

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

고은민

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

명세서

청구범위

청구항 1

- a) 유체를 조립화(Coarse-Grained)하는 단계;
- b) 상기 조립화된 유체의 상호작용을 확인하는 포스필드(force field)를 선정하는 단계;
- c) 상기 선정된 포스필드의 계산에 사용되는 파라미터의 초기값을 설정하는 단계;
- d) 상기 설정된 파라미터의 초기값이 올바르게 설정되었는지 확인하여 파라미터의 제1 최적값을 얻어내는 단계;
- e) 상기 유체 및 상기 유체와 접촉하는 접촉대상 간의 상호작용을 확인하기 위해 상기 파라미터의 제1 최적값을 통해 상기 유체와 상기 접촉대상이 이루는 접촉각을 얻어내는 단계; 및
- f) 상기 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하는지 확인하여 파라미터의 제2 최적값을 얻어내는 단계를 포함하는 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 2

청구항 1에 있어서,

상기 a) 단계는,

- a-1) 유체를 선정하는 단계; 및
- a-2) 상기 선정된 유체의 비드(bead)를 설정하는 단계를 포함하는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 3

청구항 1에 있어서,

상기 b) 단계에서의 포스필드는 마르티니(Martini), 시노다(Shinoda), 소산 입자 동력학(Dissipative particle dynamics) 및 레너드-존스 포텐셜(Lennard-Jones potential)로 이루어진 군에서 선택되는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 4

청구항 1에 있어서,

상기 c) 단계에서의 포스필드가 레너드-존스 포텐셜(Lennard-Jones potential)이고,
 상기 c) 내지 상기 f) 단계에서의 파라미터가 입실론(ϵ) 및 시그마(σ)로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상인 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 5

청구항 1에 있어서,

상기 d) 단계는,

- d-1) 상기 설정된 파라미터의 초기값으로 조립화된 유체의 밀도를 얻어내고, 얻어진 유체의 밀도와 과학 연구 문헌 상의 밀도가 일치할 때의 파라미터의 보정값을 확인하는 단계;
- d-2) 상기 확인된 파라미터의 보정값을 이용하여 유체의 자기확산계수(Self-Diffusion coefficient)를 계산하는 단계; 및
- d-3) 상기 계산된 유체의 자기확산계수와 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수가 일치할 때의 파라미터의 보정값을 제1 최적값으로 설정하는 단계를 포함하는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 6

청구항 5에 있어서,

상기 d-1) 단계는,

d-1a) 상기 조립화된 유체의 구조를 안정화시키고, 정준 앙상블(cannonical ensemble) 시뮬레이션을 수행하는 단계;

d-1b) 상기 정준 앙상블 시뮬레이션의 수행을 완료한 후 등온등압 앙상블 시뮬레이션을 수행하여 유체의 밀도를 얻어내는 단계;

d-1c) 상기 얻어진 유체의 밀도와 과학 연구 문헌 상의 밀도가 일치하는지를 확인하는 단계;

d-1d) 상기 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하지 않을 경우 파라미터의 초기값을 보정하여 파라미터의 보정값을 설정하는 단계;

d-1e) 상기 설정된 파라미터의 보정값으로 상기 d-1b) 단계를 재수행하여 유체의 밀도를 다시 얻어내는 단계;

d-1f) 상기 다시 얻어진 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하는지를 재확인하는 단계; 및

d-1g) 상기 d-1d) 단계 내지 상기 d-1f) 단계를 반복 수행하여 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치할 때의 파라미터의 보정값을 얻어내는 단계를 포함하는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 7

청구항 5에 있어서,

상기 d-2) 단계는,

d-2a) 상기 확인된 파라미터의 보정값으로 유체의 평균제곱변위(mean square displacement)를 계산하는 단계;

d-2b) 상기 계산된 평균제곱변위로 유체의 자기확산계수를 계산하는 단계;

d-2c) 상기 계산된 자기확산계수가 과학 연구 문헌 상 자기확산계수와 일치하는지를 확인하는 단계;

d-2d) 상기 계산된 자기확산계수가 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치하지 않을 경우 상기 파라미터의 보정값을 보정하여 파라미터의 보정값을 재설정하는 단계;

d-2e) 상기 재설정된 파라미터의 보정값으로 유체의 평균제곱변위를 재계산하는 단계;

d-2f) 상기 재계산된 평균제곱변위로 유체의 자기확산계수를 재계산하는 단계;

d-2g) 상기 재계산된 자기확산계수가 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치하는지를 재확인하는 단계; 및

d-2h) 상기 d-2d) 단계 내지 상기 d-2g) 단계를 반복 수행하여 계산된 자기확산계수와 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수를 일치시키는 단계를 포함하는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 8

청구항 1에 있어서,

상기 e) 단계는,

e-1) 상기 파라미터의 제1 최적값을 이용하여 분자 동력학 시뮬레이션에서의 동경분포함수(Radial Distribution Function)와 조립화 분자동력학 시뮬레이션에서의 동경분포함수(Radial Distribution Function)를 계산하고 계산된 각각의 동경분포함수의 피크값을 통해 상기 파라미터의 제1 최적값을 보정하여 파라미터의 제1 최적 보정값을 설정하는 단계;

e-2) 상기 설정된 파라미터의 제1 최적 보정값으로 상기 유체와 상기 접촉대상 간의 접촉 형태를 안정화시키는 단계; 및

e-3) 상기 유체와 상기 접촉대상 간의 접촉 형태가 안정화된 상태에서의 접촉각을 계산하는 단계를 포함하는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 9

청구항 8에 있어서,

상기 f) 단계는,

f-1) 상기 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하는지를 확인하는 단계;

f-2) 상기 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하지 않을 경우 상기 파라미터의 제1 최적 보정값을 보정하여 파라미터의 제2 최적 보정값을 설정하는 단계;

f-3) 상기 f-1) 단계 및 상기 f-2) 단계를 반복 수행하여 얻어진 접촉각과 과학연구 문헌 상의 접촉각을 일치시키는 단계; 및

f-4) 상기 접촉각과 과학연구 문헌 상의 접촉각이 일치했을 때의 파라미터를 제2 최적값으로 설정하는 단계를 포함하는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 10

청구항 1에 있어서,

상기 접촉각이 하기 수학식 1에 의해 얻어지는 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

[수학식 1]

$$\rho(z) = \frac{1}{2}(\rho^l + \rho^v) - \frac{1}{2}(\rho^l - \rho^v) \tanh\left(\frac{2(z - z_e)}{d}\right)$$

($\rho(z)$: density profile across the interface, ρ^l : bulk liquid density, ρ^v : bulk vapor density, z : the distance above the solid surface, z_e : the height of the equimolar dividing surface, d : the thickness of interface)

청구항 11

청구항 1에 있어서,

상기 유체가 뉴턴유체(Newtonian fluid)인 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 12

청구항 1에 있어서,

상기 유체가 물, 메탄올, 에틸렌글리콜, 프로필렌글리콜, 및 글리세롤로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상인 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 13

청구항 1에 있어서,

상기 접촉대상이 관(pipe)인 것인 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법.

청구항 14

A) 청구항 1 내지 청구항 13 중 어느 한 항의 파라미터 최적 설정방법을 통해 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 최적 파라미터를 설정하는 단계; 및

B) 상기 최적 파라미터를 상기 포스필드에 적용하여 조립화 분자동력학 시뮬레이션을 수행하는 단계를 포함하는 것인 유체의 유동 구현방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터를 최적 설정하고, 최적 설정된 파라미터를 조립화 분자동력학 시뮬레이션에 적용하여 유체의 유동을 구현하는 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 분자동력학(Molecular Dynamics) 시뮬레이션(이하, 'MD 시뮬레이션'이라 함)은 nanoscale(ig. 10^{-6} second, 10^{-9} meter)에서 활용되는 물질의 물성을 예측/해석하는데 사용되는 시뮬레이션 기법이다. 그러나 MD 시뮬레이션은 스케일적인 한계와 더불어 시간과 공간의 제약으로 인해 유체 등과 같은 물질의 유동을 표현하는 것에는 어려움이 있다.

[0003] 한편 조립화 분자동력학(Coarse-Grained Molecular Dynamics) 시뮬레이션(이하 'CGMD 시뮬레이션')은 mesoscale에서 활용되는 재료의 물성을 예측/해석하는데 사용되는 시뮬레이션 기법이다. 상기 CGMD 시뮬레이션은 물질의 분자를 조립화(Coarse-Grained)하고 포스필드(force field)에 적용하여 물질의 물성을 예측/해석하는 것으로, MD 시뮬레이션과 달리 유체와 같은 물질의 유동을 어느 정도 예측/해석하는데 사용될 수 있다.

[0004] 여기서 유체에 유동이 있을 경우, 그 현상을 구현하고 필요한 물성을 예측/해석하기 위해서는 유동의 실제 현상이 구현될 수 있도록 상기 포스필드의 파라미터를 설정하는 것이 요구된다.

[0005] 이에 따라 종래에는 밀도, 평균제곱변위(mean square displacement) 등과 같은 물성치와의 비교검증을 통해 포스필드의 파라미터를 설정하고 CGMD 시뮬레이션을 수행하였으나, 유체의 유동을 구현하는 데는 여전히 한계가 있는 실정이다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제2010-0029248호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명은 유체의 유동이 구현될 수 있도록 조립화 분자동력학(Coarse-Grained Molecular Dynamics) 시뮬레이션의 파라미터를 최적 설정할 수 있는 방법을 제공하고자 한다.

[0008] 또한, 본 발명은 유체의 유동을 구현하는 방법을 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0009] 상기 과제를 해결하기 위해 본 발명은, a) 유체를 조립화(Coarse-Grained)하는 단계; b) 상기 조립화된 유체의 상호작용을 확인하는 포스필드(force field)를 선정하는 단계; c) 상기 선정된 포스필드의 계산에 사용되는 파라미터의 초기값을 설정하는 단계; d) 상기 설정된 파라미터의 초기값이 올바르게 설정되었는지 확인하여 파라미터의 제1 최적값을 얻어내는 단계; e) 상기 유체 및 상기 유체와 접촉하는 접촉대상 간의 상호작용을 확인하기 위해 상기 파라미터의 제1 최적값을 통해 상기 유체와 상기 접촉대상이 이루는 접촉각을 얻어내는 단계; 및 f) 상기 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하는지 확인하여 파라미터의 제2 최적값을 얻어내는 단계를 포함하는 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법을 제공한다.

[0010] 또한, 본 발명은, A) 상기 파라미터 최적 설정방법을 통해 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 최적 파라미터를 설정하는 단계; 및 B) 상기 최적 파라미터를 상기 포스필드에 적용하여 조립화 분자동력학 시뮬레이션을 수행하는 단계를 포함하는 것인 유체의 유동 구현방법을 제공한다.

발명의 효과

[0011] 본 발명은 조립화 분자동력학(Coarse-Grained Molecular Dynamics) 시뮬레이션의 파라미터를 최적 설정할 수 있고, 이를 통해 유체(구체적으로, Newtonian fluid)의 유동을 메조스케일(mesoscale)에서 구현할 수 있기 때문에 유체의 구성성분/형상 등이 유동에 미치는 영향 및 물성의 변화를 예측/해석하는 시스템을 구축하는데 기여할

수 있다.

도면의 간단한 설명

[0012] 도 1은 본 발명의 일례에 따른 조립화 분자동력학 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법의 과정을 나타낸 흐름도이다.

도 2 내지 도 9는 본 발명의 실시예 및 실험예를 설명하기 위한 참고도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0013] 이하 본 발명을 설명한다.

[0015] 본 발명은 조립화 분자동력학(Coarse-Grained Molecular Dynamics) 시뮬레이션(이하, 'CGMD 시뮬레이션'이라 함)의 파라미터 최적 설정방법을 제공하는데, 이에 대해 도 1을 참조하여 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0017] a 단계) 유체의 조립화

[0018] 먼저, 유체를 조립화(Coarse-Grained)한다. 상기 조립화는 유체를 선정하고(a-1) 단계), 선정된 유체의 비드(bead)를 설정하는 과정(a-2) 단계)으로 이루어질 수 있다.

[0019] 상기 유체의 선정은 유동의 구현이 필요한 유체를 바탕으로 이루어질 수 있다. 구체적으로 상기 유체는 뉴턴유체(Newtonian fluid)일 수 있고, 더 구체적으로는 물, 메탄올, 에틸렌글리콜, 프로필렌글리콜, 및 글리세롤로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상일 수 있다.

[0020] 상기 유체의 비드 설정은 여러 개의 원자, 또는 분자를 하나의 입자(덩어리)로 묶는 과정으로 이루어질 수 있다.

[0021] 이와 같이 유체의 비드를 설정하여 조립화하는 과정을 거침에 따라 CGMD 시뮬레이션의 목적에 맞게 시간(time)과 공간(length)의 효과적인 스케일 조절이 가능해질 수 있다.

[0023] b 단계) 포스필드의 선정

[0024] 상기 a) 단계에서 조립화된 유체의 상호작용을 확인하는 포스필드(force field)를 선정한다. 구체적으로 상기 포스필드는 마르티니(Martini), 시노다(Shinoda), 소산 입자 동력학(Dissipative particle dynamics) 및 레너드-존스 포텐셜(Lennard-Jones potential)로 이루어진 군에서 선택하여 선정할 수 있다. 보다 구체적으로 상기 포스필드로는 van der Waals interaction을 근간으로 하는 레너드-존스 포텐셜(Lennard-Jones potential)이 선정될 수 있다.

[0025] 상기 레너드-존스 포텐셜은 평형상태에 있는 두 입자 간의 에너지(입실론(epsilon, ϵ)) 및 거리(시그마(sigma, σ))의 파라미터를 이용하여 나타낸 함수, 즉, 입자 간의 거리에 관한 함수이다.

[0026] 상기 포스필드로 레너드-존스 포텐셜이 선정될 경우, 최적 설정이 필요한 파라미터는 입실론(ϵ) 및 시그마(σ)로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상일 수 있다.

[0028] c 단계) 파라미터의 초기값 설정

[0029] 상기 b) 단계에서 선정된 포스필드의 계산에 사용되는 파라미터의 초기값을 설정한다. 상기 파라미터의 초기값은 과학 연구 문헌 상에 개시된 값이나 유체의 밀도를 이용한 계산 과정을 거쳐 설정될 수 있다.

[0031] d 단계) 파라미터의 제1 최적값 결정

[0032] 상기 c) 단계에서 설정된 파라미터의 초기값이 올바르게 설정되었는지 확인하여 파라미터의 제1 최적값을 얻어 낸다.

- [0033] 구체적으로 상기 파라미터의 제1 최적값을 얻어내는 과정은, 상기 설정된 파라미터의 초기값으로 조립화된 유체의 밀도를 얻어내고, 얻어진 유체의 밀도와 과학 연구 문헌 상의 밀도가 일치할 때의 파라미터의 보정값을 확인하고(d-1) 단계),
- [0034] 상기 확인된 파라미터의 보정값을 이용하여 유체의 자기확산계수(Self-Diffusion coefficient, SDC)를 계산하고(d-2) 단계),
- [0035] 상기 계산된 유체의 자기확산계수와 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수가 일치할 때의 파라미터의 보정값을 제1 최적값으로 설정하는 과정(d-3) 단계)을 거쳐 이루어질 수 있다.
- [0037] 구체적으로, 상기 파라미터의 보정값을 확인하는 과정(d-1) 단계)은, 상기 조립화된 유체의 구조를 안정화시키고, 정준 앙상블(cannonical ensemble) 시뮬레이션(NVT 시뮬레이션)을 수행하고(d-1a) 단계),
- [0038] 상기 정준 앙상블 시뮬레이션의 수행을 완료한 후 등온등압 앙상블 시뮬레이션(NPT 시뮬레이션)을 수행하여 유체의 밀도를 얻어내고(d-1b) 단계),
- [0039] 상기 얻어진 유체의 밀도와 과학 연구 문헌 상의 밀도가 일치하는지를 확인하고 (d-1c) 단계),
- [0040] 상기 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하지 않을 경우 파라미터의 초기값을 보정하여 파라미터의 보정값을 설정하고(d-1d) 단계),
- [0041] 상기 설정된 파라미터의 보정값으로 상기 등온등압 앙상블 시뮬레이션을 재수행하여 유체의 밀도를 다시 얻어내고(d-1e) 단계),
- [0042] 상기 다시 얻어진 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하는지를 재확인하고(d-1f) 단계),
- [0043] 상기 파라미터의 보정값을 설정하는 과정(d-1d) 단계)에서부터 상기 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하는지를 재확인하는 과정(d-1f) 단계)을 반복 수행하여 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치할 때의 파라미터의 보정값을 얻어내는 과정(d-1g) 단계)을 거쳐 이루어질 수 있다.
- [0044] 여기서 파라미터의 초기값을 적용하여 계산된 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치할 경우 파라미터의 초기값을 보정한 후 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하는지를 재확인하는 과정(d-1d) 단계 내지 d-1f) 단계)은 생략될 수 있다. 또한 파라미터의 초기값에서 보정된 파라미터의 보정값을 적용하여 유체의 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하지 않을 경우, 상기 d-1d) 단계부터 다시 수행하게 되는데, 이때 상기 d-1d) 단계는 파라미터의 초기값을 보정하는 것이 아닌 파라미터의 보정값(P_c)을 다시 보정하여 파라미터의 보정값(P_{c+n} , $1 \leq n$)을 재설정하는 과정으로 이루어질 수 있다.
- [0046] 다음, 상기 확인된 파라미터의 보정값을 이용하여 유체의 자기확산계수(SDC)를 계산하는 과정(d-2) 단계)은, 상기 확인된 파라미터의 보정값(예를 들어, 파라미터의 초기값, 1차 보정된 파라미터의 보정값(P_c), 2차 보정된 파라미터의 보정값(P_{c+1}) 등)으로 유체의 평균제곱변위(mean square displacement, MSD)를 계산하고(d-2a) 단계),
- [0047] 상기 계산된 평균제곱변위로 유체의 자기확산계수를 계산하고(d-2b) 단계),
- [0048] 상기 계산된 자기확산계수가 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치하는지를 확인하고(d-2c) 단계),
- [0049] 상기 계산된 자기확산계수가 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치하지 않을 경우 상기 파라미터의 보정값을 보정하여 파라미터의 보정값을 재설정하고(d-2d) 단계),
- [0050] 상기 재설정된 파라미터의 보정값(예를 들어, P_{c+n} , $2 \leq n$)으로 유체의 평균제곱변위를 재계산하고 (d-2e) 단계),
- [0051] 상기 재계산된 유체의 평균제곱변위로 유체의 자기확산계수를 재계산하고(d-2f) 단계),
- [0052] 상기 재계산된 자기확산계수가 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치하는지를 재확인하고(d-2g) 단계),
- [0053] 상기 파라미터의 보정값을 재설정하는 과정(d-2d) 단계)에서부터 상기 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치하는지를 재확인하는 과정(d-2g) 단계)을 반복 수행하여 계산된 자기확산계수와 과학 연구 문헌 상의 자기확

산계수를 일치시키는 과정(d-2h) 단계)을 거쳐 이루어질 수 있다.

[0054] 여기서 파라미터의 보정값을 적용하여 얻어진 자기확산계수가 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치할 경우 파라미터의 보정값을 보정한 후 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치하는지를 재확인하는 과정(d-2d) 단계 내지 d-2g) 단계)은 생략될 수 있다.

[0056] 그 다음, 상기 d-2) 단계를 완료하여 유체의 자기확산계수를 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수와 일치시킨 후, 파라미터의 보정값을 확인하여 이를 파라미터의 제1 최적값으로 설정한다(d-3) 단계).

[0058] e 단계) 접촉각 계산

[0059] 상기 유체 및 상기 유체와 접촉하는 접촉대상 간의 상호작용을 확인하기 위해 상기 d) 단계에서 설정된 파라미터의 제1 최적값을 통해 상기 유체와 상기 접촉대상이 이루는 접촉각을 얻어낸다.

[0060] 구체적으로 상기 유체와 상기 접촉대상이 이루는 접촉각을 얻어내는 과정은, 상기 파라미터의 제1 최적값을 이용하여 분자 동력학 시뮬레이션에서의 동경분포함수(Radial Distribution Function)와 조립화 분자동력학 시뮬레이션에서의 동경분포함수(Radial Distribution Function)를 계산하고 계산된 각각의 동경분포함수 피크값을 통해 상기 파라미터의 제1 최적값을 보정하여 파라미터의 제1 최적 보정값을 설정하고(e-1) 단계),

[0061] 상기 설정된 파라미터의 제1 최적 보정값으로 상기 유체와 상기 접촉대상 간의 접촉 형태를 안정화시키고(e-2) 단계),

[0062] 상기 유체와 상기 접촉대상 간의 접촉 형태가 안정화된 상태에서의 접촉각을 계산하는 과정(e-3) 단계)을 거쳐 이루어질 수 있다.

[0063] 상기 파라미터의 제1 최적값을 적용하여 계산된 각각의 동경분포함수 피크값이 일치할 경우 상기 e-1) 단계는 생략하고 파라미터의 제1 최적 보정값을 이용하여 접촉각을 계산할 수 있다.

[0064] 여기서 유체와 접촉대상 간의 접촉각이란 유체가 접촉대상 위에 떨어졌을 때, 유체 분자 간에 상호작용하는 힘과 유체와 접촉대상 간의 상호작용하는 힘이 균형을 이루는 각, 또는 유체가 접촉대상 위에 안정적인 형태로 접촉되었을 때 이루는 각으로 정의될 수 있다. 이때, 유체와 접촉대상 간의 접촉각을 측정하기 위해 접촉대상도 유체의 조립화 과정을 동일하게 거치게 되며, 접촉대상의 조립화된 입자 수(비드 입자수)는 유체가 접촉대상 위에 안정적인 형태로 접촉되는 조건이 만족되도록 설정할 수 있다.

[0065] 이러한 접촉각은 하기 수학적 1(Ruijter *et al*, *Langmuir* (1999))에 따른 계산 과정을 거쳐 얻어질 수 있다.

[0066] [수학적 1]

$$\rho(z) = \frac{1}{2}(\rho^l + \rho^v) - \frac{1}{2}(\rho^l - \rho^v) \tanh\left(\frac{2(z - z_e)}{d}\right)$$

[0068] ($\rho(z)$: density profile across the interface, ρ^l : bulk liquid density, ρ^v : bulk vapor density, z : the distance above the solid surface, z_e : the height of the equimolar dividing surface, d : the thickness of interface)

[0069] 한편 상기 접촉대상은 구체적으로 관(pipe)일 수 있다.

[0070] f 단계) 파라미터의 제2 최적값 결정

[0071] 상기 e) 단계에서 계산된 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하는지 확인하여 파라미터의 제2 최적값을 얻어낸다.

[0072] 구체적으로, 상기 파라미터의 제2 최적값을 얻어내는 과정은, 상기 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하는지를 확인하고(f-1) 단계),

[0073] 상기 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하지 않을 경우 파라미터의 제1 최적 보정값을 보정하여 파라미터의 제2 최적 보정값을 설정하고((f-2) 단계),

- [0074] 상기 f-1) 단계 및 상기 f-2) 단계를 반복 수행하여 얻어진 접촉각과 과학연구 문헌 상의 접촉각을 일치시키고 (f-3) 단계),
- [0075] 상기 접촉각과 과학연구 문헌 상의 접촉각이 일치했을 때의 파라미터를 제2 최적값으로 설정하는 과정(f-4) 단계)을 거쳐 이루어질 수 있다.
- [0076] 여기서 상기 파라미터의 제1 최적 보정값으로 접촉각을 계산하고, 계산된 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치할 경우에는 파라미터의 제2 최적 보정값이 아닌 파라미터의 제1 최적 보정값이 파라미터의 제2 최적값으로 설정될 수 있다.
- [0077] 상기 과학연구 문헌이란 유체와 접촉대상 간의 접촉각에 대해 실제 실험을 거쳐 연구한 내용이 기록된 논문(예를 들어, 물과 철 재질의 접촉각 연구가 기재된 'Osita Sunday Nnyigide and Kyu Hyun, Int. J. Multidiscip. Sci. Eng., 2015, 6, 15-18' 등)으로 정의될 수 있다.
- [0078] 이상과 같이 본 발명은 유체 분자 간의 상호작용하는 힘을 상기 a) 단계 내지 d) 단계를 거쳐 1차적으로 확인하여 파라미터를 최적화한 후, 유체와 유체가 접촉하는 접촉대상 간의 상호작용하는 힘을 상기 e) 단계를 거쳐 2차적으로 확인하여 파라미터를 최적화함에 따라 접촉대상에서의 유체의 유동을 보다 실제적으로 구현할 수 있다.
- [0079] 참고로 상술한 과학 연구 문헌(즉, 과학 연구 문헌 상의 밀도, 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수, 과학 연구 문헌 상의 접촉각 등에서의 과학 연구 문헌)은 공지된 자료(예를 들어, 논문, 실험적 수치 등)를 의미할 수 있다. 또한 문헌 상의 밀도, 문헌 상의 자기확산계수, 문헌 상의 접촉각 등은 실제 실험을 바탕으로 계산되어 얻어진 고유의 값들을 의미할 수도 있다.
- [0080] 한편 본 발명은 상술한 파라미터 최적 설정방법을 이용하여 유체의 유동을 구현하는 방법을 제공하는데, 이에 대해 구체적으로 설명하면 다음과 같다.
- [0082] A) 최적 파라미터 설정
- [0083] 먼저 CGMD 시뮬레이션의 최적 파라미터를 설정한다. 상기 최적 파라미터의 설정은 상술한 CGMD 시뮬레이션의 파라미터 최적 설정방법을 통해 이루어질 수 있다.
- [0085] B) CGMD 시뮬레이션 수행
- [0086] 다음 설정된 최적 파라미터를 상술한 포스필드에 적용하여 CGMD 시뮬레이션을 수행함으로써 유체의 유동을 구현한다.
- [0088] 이와 같은 과정에 따라 본 발명은 실제 유동 현상과 같이 유체의 유동이 일어날 수 있도록 유체의 유동을 구현할 수 있으며, 이로 인해 본 발명은 유체의 구성성분/형상 등이 유동에 미치는 영향 및 물성의 변화(예를 들어, 온도 또는 속도 등의 변화)를 예측/해석하는 시스템(예를 들어, 차량용 냉각수의 열전달 시스템)을 구축하는데 기여할 수 있다.
- [0090] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.
- [0091] **[실시예 1]**
- [0092] a) 단계
- [0093] 유체의 대상으로 물을 선정하고, 4개의 물 분자를 1개의 비드로 설정하여 물 분자를 조립화하였다(도 2 참조). 즉, 산소 원자와 수소 원자가 각각 가지는 상태량과 상호작용을 4개의 분자로 묶어 1개의 비드로 설정하고, 1개 비드의 상태량이 4개의 물 분자와 같은 물성을 가지도록 설정하였다.

[0095] b) 단계

[0096] 상기 비드 입자 간의 상호작용(interaction)을 확인하기 위해 포스필드로 하기 수학적 식 2로 표시되는 레너드-존스 포텐셜(Lennard-Jones Potential)을 선정하였다.

[0097] [수학적 식 2]

$$\phi(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\}$$

[0098]

[0099] (ϕ : Lennard-Jones Potential, ϵ : energy parameter, σ : van der Waals radius, r : distance between two particle)

[0100] c) 단계

[0101] 상기 화학식 2에서 파라미터 중 하나인 입실론(ϵ)의 초기값을 1.1 kcal/mol(과학 연구 문헌 상에 주로 나타나는 값)로, 다른 하나인 시그마(σ)의 초기값을 물의 밀도를 바탕으로 하기와 같이 계산하여 4.93 Å로 각각 설정하여 입력하였다.

[0102] * 상온(298K)에서 물의 밀도(0.997 g/cc 1.0 g/cc): 물 분자 4개가 가지는 부피

$$\frac{cm^3}{1g} \times \frac{18g \times 4}{1mol} \times \frac{10^{24} \text{Å}^3}{1cm^3} \times \frac{1mol}{6.02 \times 10^{23}} \cong 120 \text{Å}^3$$

[0103]

$$\sqrt[3]{120} \cong 4.93 \text{Å}$$

[0104]

[0105] d) 단계

[0106] 상기 설정된 입실론(ϵ)과 시그마(σ) 각각의 초기값이 올바르게 설정되었는지를 다음과 같은 과정으로 확인하여 입실론(ϵ)과 시그마(σ) 각각의 제1 최적값을 얻어내었다.

[0107] 먼저, Material Studio의 툴을 사용하여 구조 내에서 물의 비드 입자 간의 상호작용을 확인하여 에너지 상태가 가장 안정적일 때의 상태를 찾아내었다. 이후 N(비드입자수), V(시스템체적), T(시스템온도)를 일정하게 유지하며 정준 앙상블(cannonical ensemble) 시뮬레이션을 수행하였다(비드입자수: $8332/100 \times 100 \times 100 \text{ Å}^3$).

[0108] 다음, N(비드입자수), P(시스템압력), T(시스템온도)를 일정하게 고정하고 체적(V)이 자유롭게 변화도록 설정한 후 등온등압 앙상블 시뮬레이션을 수행하여 시스템이 가지는 물의 밀도를 구하였으며, 그 결과를 도 3에 나타내었다. 도 3을 참조하면 구해진 밀도가 0.921 g/cm³ 전후로써, 과학 연구 문헌 상의 물의 밀도인 0.997 g/cm³ 보다 낮은 것을 확인할 수 있다.

[0109] 구해진 밀도가 과학 연구 문헌 상의 밀도와 일치하지 않아 시그마(σ)의 초기값을 4.795 Å로 보정하여 시그마(σ)의 보정값을 설정하였다.

[0110] 상기 시그마(σ)의 보정값을 적용하여 등온등압 앙상블 시뮬레이션을 재수행하여 시스템이 가지는 물의 밀도를 다시 구하였으며, 그 결과를 도 4에 나타내었다. 도 4를 참조하면 구해진 밀도가 과학 연구 문헌 상의 물의 밀도인 0.997 g/cm³ 부근으로 나타나 시그마(σ)의 보정값이 적절하게 설정되었음을 확인할 수 있다.

[0111] 다음 상기 시그마(σ)의 보정값을 적용하고, 하기 수학적 식 3에 따라 평균제곱변위(mean square displacement)를 계산하였다.

[0112] [수학적 식 3]

$$Mean \ square \ displacement = \langle (x - x_0)^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n(t) - x_n(0))^2$$

[0114]

[0115] (x : position, x_0 : initial position at time zero, $x_n(t)$: position of particles at time t , $x_n(0)$: position of particles at time zero, N : the number of particles)

[0116] 상기 평균제곱변위를 계산했을 때 과학 연구 문헌 상의 값과 일치하지 않을 경우 시그마(δ) 값을 보정하는 과정을 거쳤으며, 계산된 평균제곱변위 값을 도 5에 나타내었다. 도 5를 참조하면 시그마(δ)의 보정값이 4.795 Å에서 4.475 Å로 보정되었음을 확인할 수 있다. 다음, 시그마(δ)의 보정값인 4.475 Å를 적용하여 상기 수학식 3에 따라 평균제곱변위를 다시 계산하였다.

[0117] 그 다음 시그마(δ)의 보정값이 4.475 Å일 때 계산된 평균제곱변위 값을 하기 수학식 4에 적용하여 자기확산계수(Self-Diffusion coefficient)를 계산하였다. 구체적으로 계산된 평균제곱변위 값을 6으로 나누고 물의 비드를 설정할 때 포함시킨 분자의 수를 곱한 후 time scale factor로 나누어 주어 자기확산계수를 계산하였다.

[0118] [수학식 4]

[0119]
$$D(\text{Self-Diffusion Coefficient}) = \frac{1}{6} \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{dMSD}{d\Delta t}$$

[0120] 상기 자기확산계수를 계산했을 때 과학 연구 문헌 상의 자기확산계수 값과 일치하지 않을 경우 상기 등온등압 앙상블 시뮬레이션을 재수행하여 다른 쌍(pair)의 입실론(ϵ)과 시그마(δ)를 설정한 후 밀도->평균제곱변위->자기확산계수를 구하는 과정을 반복하여 규칙성을 갖는 입실론(ϵ)과 시그마(δ)의 쌍을 찾아내었으며, 그 결과를 도 6에 나타내었다.

[0121] 도 6을 참조하면 4개의 물 분자가 1개의 비드가 되었을 때 실제 물의 밀도와 자기확산계수를 만족할 수 있는 입실론(ϵ)과 시그마(δ)의 쌍이 찾아졌음을 확인할 수 있다.

[0122] e) 단계

[0123] 상기 과정을 통해 입실론(ϵ)과 시그마(δ) 각각의 제1 최적값을 찾는 것을 완료한 후, 이를 이용하여 물과 접촉하는 접촉대상 간의 접촉각을 다음과 같은 과정을 거쳐 얻어내었다. 이때 접촉대상으로는 철로 이루어진 관(pipe)을 적용하였다.

[0124] 먼저, 입실론(ϵ)과 시그마(δ) 각각의 제1 최적값을 이용하여 분자 동력학 시뮬레이션에서의 동경분포함수(Radial Distribution Function)와 조립화 분자동력학 시뮬레이션에서의 동경분포함수(Radial Distribution Function)를 계산하고, 피크가 일치하도록(도 7 참조) 시그마(δ)의 제1 최적값을 보정하여 시그마(δ)의 제1 최적 보정값을 3.59 Å로 설정하였다.

[0125] 다음 최적 보정 과정을 거쳐 얻어진 입실론(ϵ)과 시그마(δ)의 값을 적용하여 물과 관 간의 접촉 형태를 안정화시켰다(도 8 참조, 물 비드 약 65,000 개/철 비드 약 65,000개 적용).

[0126] 그 다음 물과 관 간의 접촉 형태가 안정화되었을 때의 접촉각을 하기 수학식 1에 따라 계산하여 접촉각을 89 °로 얻어내었다.

[0127] [수학식 1]

[0128]
$$\rho(z) = \frac{1}{2}(\rho^l + \rho^v) - \frac{1}{2}(\rho^l - \rho^v) \tanh\left(\frac{2(z - z_e)}{d}\right)$$

[0129] ($\rho(z)$: density profile across the interface, ρ^l : bulk liquid density, ρ^v : bulk vapor density, z : the distance above the solid surface, z_e : the height of the equimolar dividing surface, d : the thickness of interface)

[0130] f) 단계

[0131] 마지막으로 상기 얻어진 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하는지를 다음과 같은 과정으로 확인하여 입실론(ϵ)과 시그마(δ) 각각의 제2 최적값을 얻어내었다.

[0132] 먼저, 상기 얻어진 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각(Osita Sunday Nnyigide and Kyu Hyun, Int. J. Multidiscip. Sci. Eng., 2015, 6, 15-18 참조)과 일치하는지를 확인하였다.

[0133] 확인 결과, 얻어진 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하지 않아 최적 보정 과정을 거쳐 얻어진 입실론(ϵ)과 시그마(δ)의 값을 보정하고 상기 수학식 1에 따라 접촉각을 계산한 후 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치하는지 확인하는 과정을 반복 수행하였다.

[0134] 반복 수행 완료 후 계산된 접촉각이 과학연구 문헌 상의 접촉각과 일치할 때의 입실론(ϵ)과 시그마(δ)의 값을 제2 최적값으로 설정함으로써 조립화 분자동력학 시뮬레이션을 수행하기 위한 입실론(ϵ)과 시그마(δ)의 최적 설정을 완료하였다.

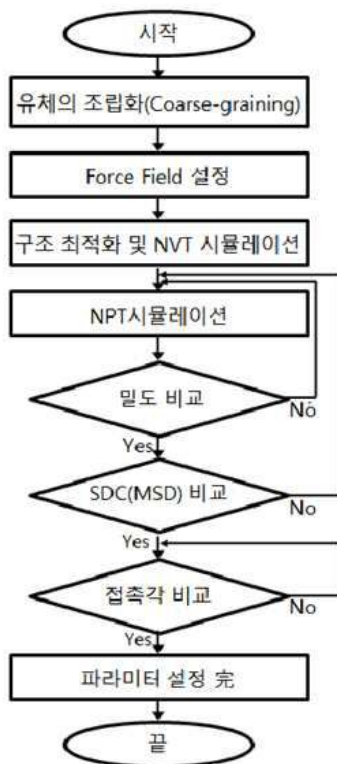
[0135] [실험예 1]

[0136] 상기 실시예 1 및 실시예 2에서 각각 최적 설정된 입실론(ϵ)과 시그마(δ) 각각의 제2 최적값을 이용하여 물과 에틸렌글리콜이 혼합된 유체(비드 입자수: 1,932,800)의 관내 유동을 구현하기 위해 조립화 분자동력학 시뮬레이션을 수행하였으며, 그 결과를 도 9에 나타내었다.

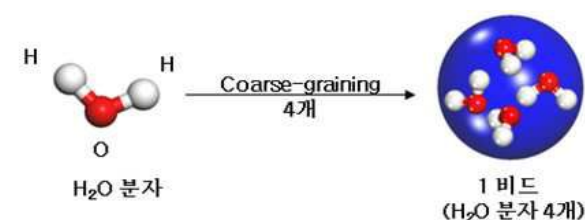
[0137] 도 9를 참조하면 물과 에틸렌글리콜이 혼합된 유체의 관내 유동이 구현됨을 확인할 수 있다. 이때 입구영역과 완전발달영역은 속도의 분포에 의하여 입구로부터 약 35 Å 후인 것으로 확인되었다.

도면

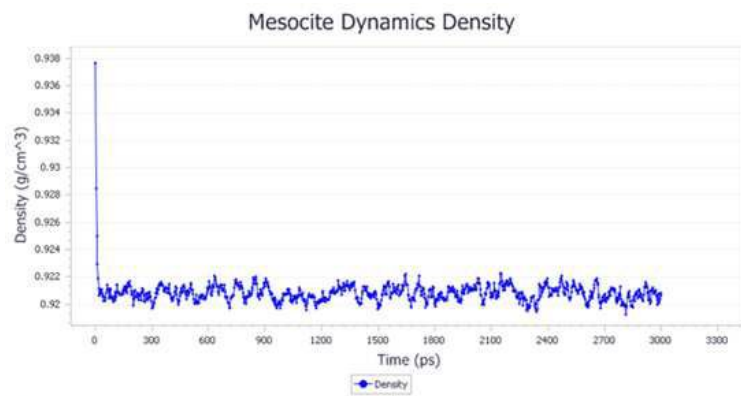
도면1



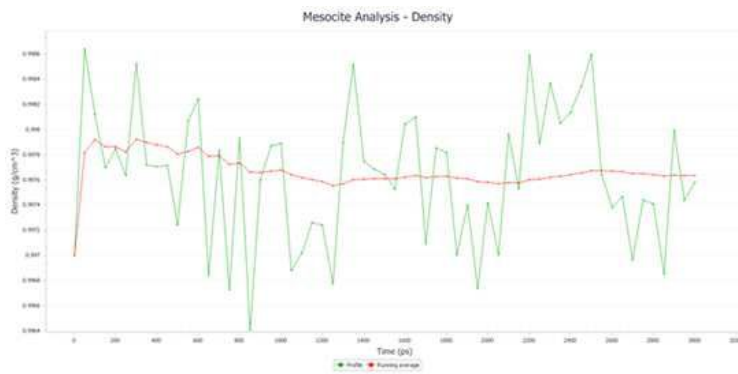
도면2



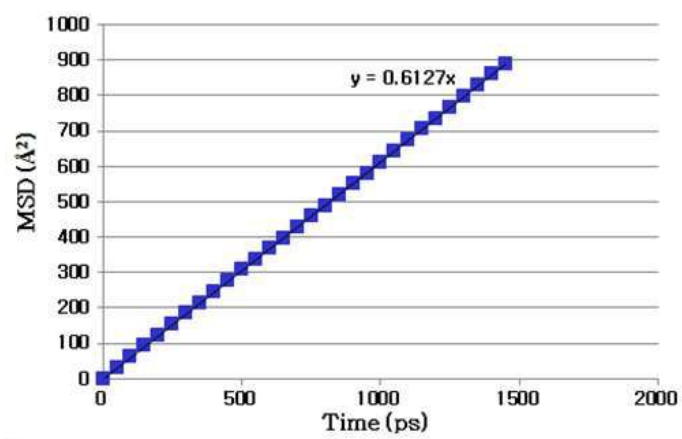
도면3



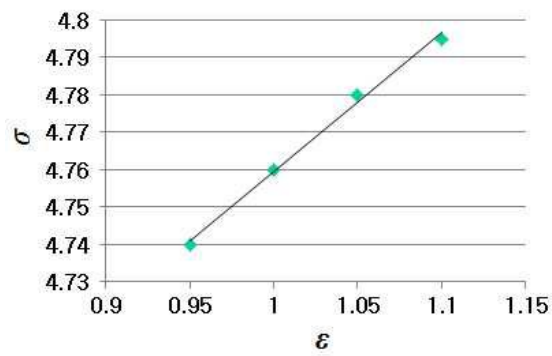
도면4



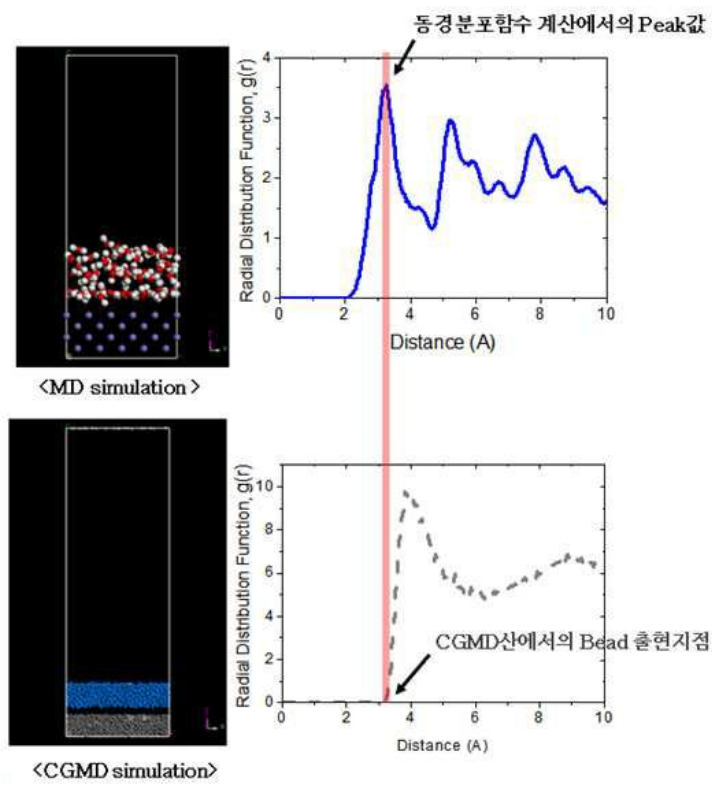
도면5



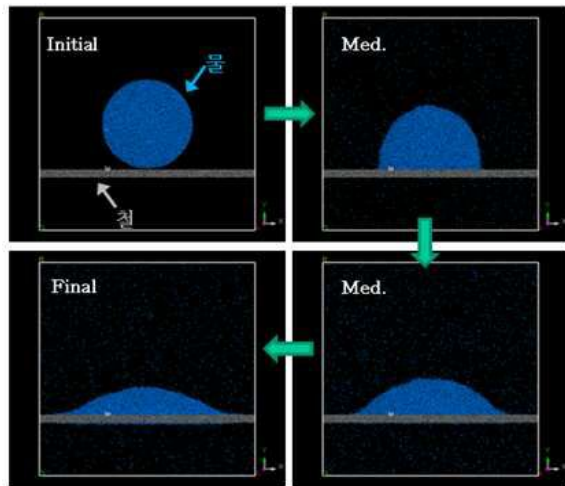
도면6



도면7



도면8



도면9

