

## Decimated Sampling 기법을 이용한 위상공간에서의 복잡구조를 가진 유체의 전산모사

이희동, 신광섭, 박홍목\*  
서강대학교 이동현상연구실  
(hmpark@sogang.ac.kr\*)

복잡구조유체에서 원자보다 구조적 길이가 훨씬 긴 용질 분자들은 단순구조유체의 용매에서 분산되어 있다. 복잡구조유체의 유변학적 성질은 단순구조유체와 차이를 보이며, 용질 분자나 입자의 역학적인 정확한 묘사는 복잡구조유체 흐름 거동을 특성화하거나 예측하는데 있어 매우 중요하다. 복잡구조유체에서의 구조를 가진 용질 분자들의 방향성이나 위치를 명확히 하기 위해서는 위상공간의 개념을 도입할 필요가 있다. 본 연구에서는 용질의 거동을 6차원 위상공간에서 정의된 Fokker-Planck 식을 통해 모델링을 하고 Karhunen-Loeve-Galerkin(KLG) 방법을 도입하여 복잡구조유체 흐름의 효율적인 모사 방법을 고안하였다. 용매 흐름장에서의 decimated sampling을 도입하여 Fokker-Planck 식의 차수 감소 모델을 구하였고, 이를 통해 복잡구조유체의 모사에 있어 컴퓨터로 계산하는데 걸리는 시간을 크게 줄일 수 있었다. 예로, 실린더를 지나가는 고분자 희박 용액의 흐름을 고려하였다. 이때의 구성방정식은 FENE(finitely extensible nonlinear elastic) 모델을 채택하였다. decimated sampling 기법과 KLG 방법의 사용을 통해 본래의 Fokker-Planck 식을 이용한 모사보다 100분의 1 수준으로 컴퓨터 계산시간을 줄이면서도 정확한 결과를 얻을 수 있었다. decimated sampling 기법을 보완한 KLG 방법은 위상공간에서 정의된 복잡구조유체의 방정식에 대한 coarse-graining의 효율적인 방법임을 보였다.