

# 단순액체의 층밀리기 흐름에 대한 비평형 분자동력학 계산에서 공제방법의 효과

The efficiency of subtraction technique in a nonequilibrium molecular dynamics simulation of a simple liquid shear flow

안성청\*

Sung-Chung An

## Abstract

Results from a nonequilibrium molecular dynamics(NEMD) simulation are presented for an argon liquid subject to a shear flow. The segmented molecular dynamics method and the subtraction technique used in NEMD program to reduce the thermal fluctuation noise in data are studied with different shear rates. The standard deviation in the shear stress reduced from 0.030 to 0.004 by the segmented molecular dynamics method for 50 repeated segments. On the other hand, the standard deviation of the data remained the same when the subtraction technique was applied, where as the results of shear stress shifted by constant value in a random way.

## 1. 서 론

컴퓨터 시뮬실험인 비평형 분자동력학(Non-equilibrium Molecular Dynamics, NEMD)방법은 매우 큰 외부 건드림으로 평형상태로부터 벗어난 비평형 액체계의 비선형적 수송현상을 이해하는데 매우 넓게 활용되고 있으며 특히 컴퓨터 시뮬실험은 계의 거시적 수송특성을 나타내는 점성(viscosity), 퍼짐계수(diffusion coefficient), 열전도도(thermal conductivity)등의 수송계수의 결정과정을 미시적으로 이해할 수 있다는 특성을 가지고 있다[1-3]. 근래 이 분야의 연구는 NEMD방법에 의

한 비평형 수송계수의 변화를 구하는 계산이 계속 이루어지고 있으며[4, 5], 또한 효과적으로 층밀리기 흐름을 시뮬레이션하기 위한 알고리즘의 개발에 관한 연구[6, 7] 등이 이루어지고 있다. NEMD의 응용분야로는 층밀리기 흐름을 이루는 분자간의 상호작용의 형태와 흐름의 특성을 분석하기 위한 연구[8-12] 등이 활발히 이루어지고 있다.

NEMD 방법은 평형계의 수송계수를 구하는데도 좋은 성과를 얻고 있다. Green-Kubo의 선형이론에서 점성은 평형 계에서 구한 층밀리기 응력의 시간 상관 함수에 대한 적분으로 주어지므로, 평형계에 대한 컴퓨

\* 세종대학교 물리학과 교수

터 시뮬실험인 평형 분자동력학에서는 이 적분 값을 구한다. 그러나 3차원 액체 계의 경우 시간 상관함수의 감소가 예상보다 작아 평형 분자동력학의 계산이 매우 어렵게된다. NEMD에서는 층밀리기 흐름에서 점성을 구하게 됨으로 층밀리기 점성의 변화를 알 수 있어 이 값을 이용하여 외삽법을 적용하면 매우 효과적으로 평형 계의 점성을 구할 수 있다. 외삽법을 적용하기 위하여는 약한 층밀리기 흐름에 대한 층밀리기 응력의 정확한 값을 구하는 것이 매우 중요할 수 밖에 없는데 이를 위하여는 액체 상태의 계산 결과에 큰 영향을 미치는 열 잡음의 영향을 제거할 수 있는 방안이 마련되어야 한다. 액체 계를 연구 대상으로 하는 경우 실제 계를 근접하게 시물레이션함으로 실제 계가 보이는 결과를 얻고 열 잡음의 영향을 제거하기 위하여는 충분한 입자 수로 계산 계를 구성하면 되나 구성 입자수를 증가시키면 계산 시간이 입자수 증가의 3배로 증가함으로 최소의 입자로 계를 구성할 수 밖에 없다. 대신 물리적으로 의미있는 결과를 얻기 위한 여러 가지 방안들이 강구되고 있다. 본 연구에서는 이와 같은 목적으로 NEMD계산에 도입하고 있는 분할 분자동력방법과 공제방법의 효과를 비교 분석하고 앞으로 이들 방법을 효과적으로 이용하기 위하여 고려하여야 할 점을 살펴보았다.

우선 NEMD 계산 과정을 요약하면 다음과 같다.  $z$ 축에 수직인 평면에  $x$ 축 방향으로 형성된 액체의 층밀리기 흐름(shear flow)의 속도  $u_x$ 가  $z$ 축 방향으로  $\partial u_x / \partial z$ 인 기울기를 가지고 있다면 이 기울기를 층밀리기비  $\dot{\epsilon}_{xz}$ 라고 한다. 이 때  $z$ 축에 수직인 평면에  $x$ 축 방향으로 단위 면적당 층밀리기 변형력  $P_{xz}$ 가 작용하고 있다면 층밀리기 점성계수  $\eta$ 는  $\eta = -P_{xz} / \dot{\epsilon}_{xz}$ 로 정의된다. 층밀리기 점성계수  $\eta$ 의 값은 최초 평형 상태에 있는 계에 일정한 층밀리기비  $\dot{\epsilon}_{xz}$ 를 걸어 주어서 층밀리기 변형력  $P_{xz}(t)$ 가 생겨나게 하고, 시간이 경과하면서 점차적으로 증가하여 결국 최종적인 정상 값에 도달한  $P_{xz}(t)$ 값을 구하면 계산할 수 있다. 즉 층밀리기 점성계수  $\eta$ 는

$$\eta = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P_{xz}(t)}{\dot{\epsilon}_{xz}} \quad (1)$$

로부터 구한다[13]. 여기서 층밀리기 변형력은

$$P_{xz}(t) = \frac{1}{V} \left[ \sum_{i=1}^N m_o v_i^x v_i^z - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N (r_{ij}^x r_{ij}^z / r_{ij}) (\partial \Phi / \partial r_{ij}) \right] \quad (2)$$

으로 주어진다[14]. 위 식에서  $V$ 는 액체의 체적이고  $N$ 은 입자 수를 나타낸다. 또한  $v_i^x, v_i^z$ 는 각각  $i$ 번째 입자 속도의  $x, z$ 성분이고  $v_{ij}^x, v_{ij}^z$ 는  $i$ 번째와  $j$ 번째 입자의 위치 벡터로 정의된  $(r_i - r_j)$  벡터의 해당 성분을 나타낸다. 또한  $m_o$ 는 입자의 질량을 나타내고,  $\Phi$ 는 두 입자간의 상호작용을 결정하는 Lennard-Jones 퍼텐셜 함수로 다음과 같다.

$$\Phi(r) = -4u_o \left[ \left( \frac{a_o}{r} \right)^{12} - \left( \frac{a_o}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

위 식에서  $r$ 은 입자간의 거리를 나타낸다.  $u_o$ 와  $a_o$ 는 각각 에너지 및 거리의 차원을 가지는 상수로  $Ar$ 의 경우  $u_o = 1.65 \times 10^{-21} J$ 이고,  $a_o = 0.345 \times 10^{-9} m$ 이다.  $Ar$ 입자의 질량은  $m_o = 6.64 \times 10^{-26} kg$ 이다. 실제 계산 시에는 길이, 시간 및 에너지의 단위는 모두  $a_o, (m_o a_o^2 / u_o)^{1/2}, u_o$ 를 기본 단위로 하는 환산 단위를 사용하며 그 외 물리량의 단위로 이 기본 단위를 이용하여 나타낸다. 예를 들면 시간의 단위는  $a_o(m_o / u_o)^{1/2}$ 가 되고 이 값은  $2.16 \times 10^{-12} sec$ 이며 점성계수의 단위는  $(m_o u_o)^{1/2} / a_o^2$ 이고 이 값은  $9.03 \times 10^5 Pa \cdot sec$ 이다.

## 2. NEMD 시물레이션 계산

본 계산에서 선택한 입자 계는 삼중점에 가까운 액체 상태에 있는  $Ar$ 으로 밀도는  $\rho = 35.54 kg \cdot mole^{-1} m^3$ 이고 온도가  $T = 86.5K$ 이다. 계산에 사용한 계는 108개의 입자로 구성하였으며, 이 입자들은 밀도에 대응하는 크기의 용기(cell) 내에서 온도에 대응하는 운동량 분포를 가지고 있다. 입자가 들어 있는 용기는 모든 면이 이 용기와 완전히 대칭인 영상 용기와 접하고 있도록 하여 계산 과정에서 용기를 벗어나는 입자가 발생하면 반대 면을 통하여 영상 용기의 입자가 진입하므로 용기 내의 입자 수가 일정하게 유지되도록 한다.

계산에 사용된 시간 구간의 간격은  $\delta t = 4.075 \times 10^{-13} (1.013 \times 10^{-14} sec)$ 로 하였다[15]. 분자간의 상호 작용력은 두 입자간의 거리가  $2.5a_o$ 내에 있을 때만 작용한다고 보고 이보다 먼 거리에 있는 입자간에는 무시하였다[13]. 계의 온도는 매 시간 구간  $\delta t$ 마다 입자의 속도  $v_i$

값을 조정하여 일정하게 유지한다.

처음 출발할 때 입자 계의 위치 분포는  $Ar$ 결정( $fcc$ )의 격자점과 일치하도록 하고 해당 온도와 일치하는 평균값을 가지는 마구잡이 속도로 움직이게 하여 점차적으로 액체 상태의 위치 분포에 도달하도록 하는 녹이는 과정을 거치도록 하여야 한다. 지금까지 통상적으로 분자 동력학 계산에서 선택하는 녹이는 과정의 길이는  $2-3 \times 10^6 \delta t$ 이면 충분한 것으로 잡고 있다<sup>4, 8, 9, 16, 17</sup>.

계의 위상분포가 액체 상태에 도달하면 충밀리기 흐름을 만들기 위하여 계 내의 입자들을  $z$  성분 값에 비례하는 속도  $u_z$ 로 움직이게 한다. 즉, 입자의 위치와 속도를 새로 구하는 시간 구간  $\delta t$ 마다 입자 위치의  $x$  성분만을 그 입자 위치의  $z$  성분에 비례하도록  $\delta x = \epsilon_{xz} \delta t$  만큼 변위시켜 충밀리기 흐름을 만든다. 여기서  $\epsilon_{xz}$ 는 충밀리기비로 상수이다. 평형 상태에 도달한 계에 충밀리기비를 걸어 정상 상태의 충밀리기 흐름을 만들려면 경과 시간이 필요하고 이때 측정하는 충밀리기 변형력도 처음에는 영에서 시작하여 점차적으로 증가하여 최종적인 정상 값에 도달하게 된다. 그러나 이때 측정된 변형력은 액체 계의 특성인 높은 열 잡음의 영향으로 한 번의 측정으로 그 값을 알 수가 없다.

액체계의 측정값에 나타나는 잡음의 영향을 제거하기 위한 방법으로 본 연구에서는 분할 분자동력학 방법(Segmental Molecular Dynamics)<sup>8</sup>을 채택하였다. 결정 분포에서 출발하는 계를 기준 계라 하고 기준 계를 녹이는데 소요되는 시간 길이를  $N_m \delta t$ 라고 하면, 계산 회수가  $N_m$ 이 될 때 기준 계를 복사하여 기준 계와 위상 분포가 동일한 실험 계를 만든다. 이 후부터 기준 계는 계속 평형 상태를 유지하고 실험 계에는 충밀리기비를 걸어 주어 충밀리기 흐름을 만들고 실험 값을 구한다. 실험 값을 구하는데 충분히 필요한 시간을  $N_s \delta t$ 라 하면 이 시간이 경과한 후 실험 계의 계산을 끝내고 여기서 구한 실험 값은 다음에 평균값을 구하기 위하여 보관한다. 이 때 기준 계의 경과 시간은  $(N_m + N_s) \delta t$ 가 되므로  $N_m \delta t$ 때와는 다른 위상 상태에 있다. 다시 기준 계를 복사하여 새로운 2차 실험 계를 만들고 앞서서와 같은 측정을 반복하여 두번째 실험 값을 구한다. 즉 기준 계의  $(N_m + nN_s) \delta t$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots, n_f$ 마다 이와 같은 과정을 반복하여 구한 실험 값을 평균

함으로써 잡음의 영향을 제거한 값을 구할 수 있다. 따라서 최소한의 계산 시간으로 요구하는 수준의 데이터를 구하려면  $N_s$ 와  $n_f$  값을 적절하게 선정하는 것이 절대적임을 알 수 있다.  $N_s$  값은 정상 충밀리기 흐름에 도달할 때까지 필요한 경과 시간의 길이에 따라 달라지는데 충밀리기비가 작은 때는 1600 정도이면 충분하고 높은 충밀리기비에서는 2400이나 3200까지 연장해야 할 경우도 있었다. 또한 반복 회수  $n_f$  값은 실험 값의 변화가 허용 범위 내로 수렴하는 것을 보아 결정하게 되나 이 값은 충밀리기비에 따라 달라져야 한다. 충밀리기비가 증가하면 이 값도 증가하여야 한다.

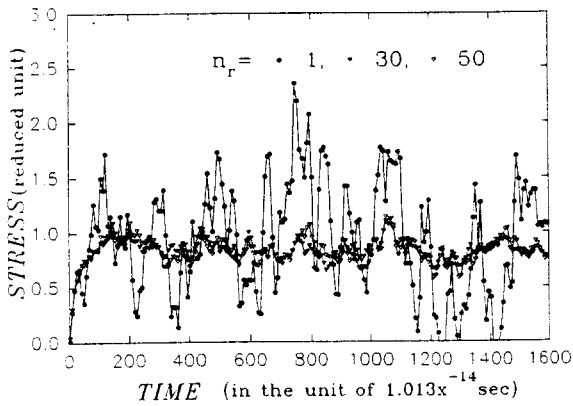
분할 분자동력학 방법을 사용하면 실험 값에 나타나는 열 잡음의 영향을 제거하기 위하여 추가로 공제 방법(Subtraction Technique)<sup>1, 13</sup>을 택할 수 있다. 공제 방법은 변형력을 실험 계에서 구할 때 동시에 평형 상태에 있는 기준 계에서도 변형력을 구하여 매  $\delta t$ 마다 실험 계에서 구한 변형력의 값에서 공제하여 주는 것으로 이렇게 함으로써 변형력에 포함된 열 잡음 성분을 제거할 수 있으므로 외부 건드림에 대한 반응 성분만 남아, 좀더 빨리 열 잡음의 영향을 제거하는 효과를 기대할 수 있다. 본 연구에서는 충밀리기비를 변화시키며 실험 계와 평형 계의 변형력을 분리하여 계산한 후 비교함으로써 열 잡음의 특성과 공제방법의 효과를 직접 알아 볼 수 있도록 하였다. 분할 분자동력학 방법은 매우 효과적으로 열 잡음을 제거하나 공제 방법의 효과는 예상과는 다르게 나타나고 있음을 볼 수 있었다.

본 연구의 계산은 시스템 공학 연구소 슈퍼 컴퓨터 센터의 *cray y-mp c90*로 실행하였다.

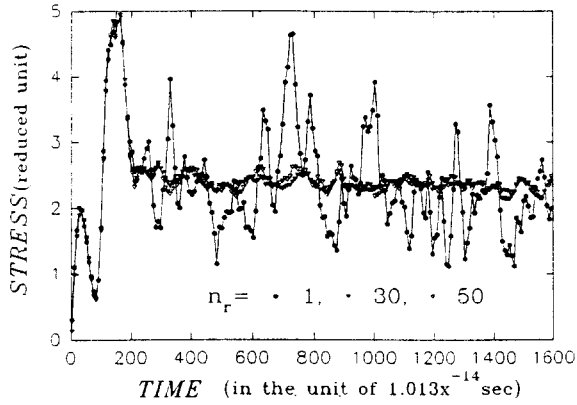
### 3. 계산 결과 분석

#### 3.1 분할 분자동력학의 효과

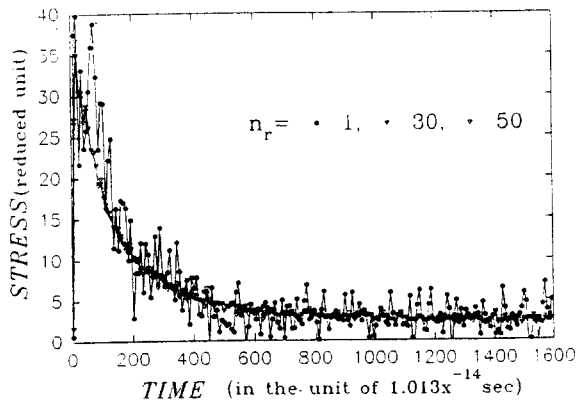
충분히 녹이는 과정을 거친 계( $N_m = 2 \times 10^6$ )에 충밀리기비  $\epsilon_{xz} = 0.3372, 1.686, 16.86$ 을 걸어 줄 때 반복 회수  $n_f$ 에 따라 달라지는 충밀리기 변형력의 변화를 <그림 1>에서 비교하였다. 비교를 위하여  $N_s$ 는 모두 1600으로 하고,  $n_f$ 은 1, 31, 51을 택하였다(충밀리기비가 작은 두 경우에는  $N_s$ 를 800으로 하여도 충분함). 세 그림에서 단 한 번만 측정하였을 때( $n_f=1$ )의 데이터는



(a)



(b)



(c)

<그림 1> 총밀리기비 (a)0.3372, (b)1.686, (c)16.86에서 반복회수 증가에 대한 분할 분자동력화방법의 효과 비교

높은 열 잡음 신호에 가려 변형력의 정상 값을 읽기가 어려운 것을 볼 수 있다. 그러나 측정 회수  $n_r$ 을 30회로 증가하면 열 잡음의 영향이 많이 사라지고 있음을 볼 수 있고, 50회로 증가하면 더욱 개선되고 있음을 알 수 있다. 또한 그림의 변형력은 초기 전이 과정에서 (0-800  $\delta t$ ) 높은 요동을 보이고 있는데 이 영역에서 변형력은 위상조건과 총밀리기비에 따라 달라지며 높은 총밀리기비 영역에서는 지수 함수적 감소 과정이나 진동 과정을 보이고 있다[18]. 한편 정상적인 총밀리기 흐름을 형성한 800  $\delta t$  이후부터 1,600  $\delta t$  사이의 데이터 값은 변화가 작아 정상 상태에 있다고 볼 수 있고 식 1의  $P_{\infty}(t)$ 값은 이 구간의 값이라고 볼 수 있다. 그림을 비교하면 총밀리기비가 증가하면 열 잡음의 영향이 감소한다고 볼 수 있으나 이것은 그림의 척도를 다르게 한 결과로 사실은 반대로 총밀리기비에 따라 열 잡음의 영향이 증가하고 있다. <표 1>에 총밀리기비에 대하여 반복회수  $n_r$ 이 증가할 때 데이터 표준편차의 변화를 정리하였다. 표에서 보면 총밀리기비가 증가하면 데이터의 표준편차도 증가하고 있어 열 잡음의 제거를 위하여는 반복회수도 증가하여야 함을 알 수 있다. 따라서 총밀리기비가 1.686보다 작을 때 반복회수는 50이면 충분하나 16.86일때는 100이상으로 하여야 한다. 데이터에 나타나는 열 잡음이 총밀리기비에 따라 달라진다는 점은 NEMD에서 열 잡음을 줄이기 위하여 채택하는 공제 방법의 기본가정에 문제가 있음을 의미한다. 그러나 반복회수의 증가에 대한 표준편차의 감소 효과가 높아 NEMD시물레이션에서 열 잡음의 영향을 줄이는데 분할 분자동력화방법이 매우 효과적임을 알 수 있다.

<표 1> 총밀리기비별로 반복회수 증가에 대한 표준편차 감소비교

반복회수 \ 총밀리기비	16.86	1.686	0.3372
1	0.171	0.030	0.056
31	0.039	0.005	0.011
51	0.031	0.004	0.009
71	0.027	0.004	0.007
91	0.023	0.004	0.006

### 3.2 공제 방법의 효과

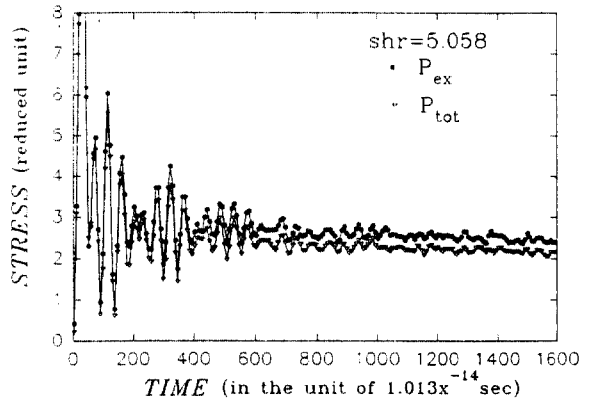
NEMD 시뮬레이션 계산에서 열 잡음의 영향을 제거하기 위하여 채택하는 공제 방법의 효과를 보이기 위하여 충밀리기비를 변화하면서 구한 변형력을 <표 2>에 정리하였다. 표의 값은  $2 \times 10^6 \delta t (2.026 \times 10^{-8} sec)$  시간 동안 녹이는 과정을 거친 계에 0.6745에서 16.86까지 충밀리기비를 증가시키면서, 분할 분자동력학( $n_p=100, N_s=1600$ )을 적용하여 구한 것이다. 변형력은 충밀리기 흐름이 정상류를 이룬 후  $800 \delta t$ 부터  $1,600 \delta t$  구간 사이에서 구한 변형력의 평균값을 나타낸다. 표의 변형력은 평형계에서 구한 변형력  $P_{eq}$ 와 실험계에서 구한 변형력  $P_{ex}$ 와 표준편차, 공제 방법을 적용하여 구한 변형력  $P_{tot} (P_{ex} - P_{eq})$ 와 표준편차로 분리하여 구분하여 두었다. 우선 모든 충밀리기비 영역에서 실험 계와 공제 방법을 적용하여 구한 공제 계의 변형력에 나타나는 표준편차에 큰 차이가 없어 공제 방법이 시도한 열 잡음의 제거 효과가 없다는 것을 알 수 있다. 표에서 보면 모든 충밀리기비에서 평형계의 변형력이 -0.175나 -0.176으로 변화가 없는데 이것은 충밀리기비에 대한 변화를 보기 위해서는 초기 조건이 동일한 계를 사용하고  $N_m$  값이 같은 점에서 분할 분자동력학 방법을 적용함으로써 변형력을 구하는 계산을 할 때 모든

충밀리기비에서 평형계는 같은 위상 궤적을 따르게 됨으로 이와 같은 결과가 나오게 된다. 결국 모든 충밀리기비에서 공제 방법을 택한 결과는 실험 계에서 구한 변형력에 상수를 가감하는 효과만을 가지고 오는 것을 볼 수 있다.

이와 같은 효과가 큰 경우를 예로 <그림 2>에 나타내었다. 그림의 변형력은  $1.6 \times 10^6 \delta t (1.621 \times 10^{-8} sec)$  시간 동안 녹이는 과정을 거친 계에서 충밀리기비  $\epsilon_{sr}=5.058$ 을 걸어 주고 마찬가지로 분할 분자동력학( $N_s=1600, n_p=100$ )을 적용하여 구한 변형력의 변화를 보여 주고 있다. 이 경우 실험 계에서 구한 변형력이 2.527일 때 공제 방법을 적용하여 구한 변형력은 3.445로 실험 계의 값보다 36.3% 더 많게 나오고 있다. 그림에서 보면 전 시간 영역에서 공제 방법으로 구한 변형력은 잡음의 제거 효과는 볼 수 없고 곡선을 평행 이동시키는 효과만 나타나고 있음을 볼 수 있다.

<표 2> 충밀리기비 변화에 대한 변형력의 변화. 평형계, 실험계, 공제방법을 적용한 변형력의 비교

SHR	평형계	실험계		공제계	
	$P_{eq}$	$P_{ex}$	표준편차	$P_{tot}$	표준편차
16.863	-0.176	1.993	0.008	2.169	0.008
15.174	〃	1.816	0.012	1.992	0.012
13.490	〃	1.638	0.006	1.814	0.006
11.802	〃	1.703	0.005	1.878	0.005
10.117	〃	1.900	0.005	2.075	0.005
8.430	〃	1.945	0.006	2.120	0.006
6.748	〃	1.927	0.007	2.103	0.007
5.058	-0.175	2.285	0.005	2.461	0.005
3.372	-0.176	3.082	0.004	3.257	0.004
1.686	〃	2.901	0.002	3.077	0.002
1.348	〃	2.494	0.002	2.669	0.002
1.012	〃	1.996	0.004	2.172	0.004
0.674	〃	1.417	0.004	1.592	0.004



<그림 2> 충밀리기비 5.058에서 분할 분자동력학방법과 공제방법을 적용하였을 때 실험계와 공제계에서 구한 변형력의 시간에 대한 변화

계산시 초기 조건이나 충밀리기비를 걸어 주기 시작하는  $N_m$  값을 다르게 하면서 공제 방법을 적용하면 평형 계의 변형력에 따라 공제 방법은 변형력의 크기를 각기 다른 값으로 가감시켜 결과적으로 계산 결과를 왜곡시키고 있다. 실제로 이와 같은 현상을 정리한 결과가 <표 3>에 나타나 있다. <표 3>에서 세 개의 다른 초기 조건에서 충밀리기비별로 구한 변형력의 변화를

실험 계 결과와 공제 방법을 적용하여 얻은 결과와 비교하여 보았다. 전 층밀리기비 영역에서 실험 계의 변형력은 모두 미소한 차이를 보이고 있으나 공제 방법을 적용한 값은 큰 차이를 보이고 있다(예로  $\epsilon_{xz}=1.348$  일 때 실험계의 변형력은 2.523, 2.527, 2.523이나 공제 방법을 적용하면 1.947, 3.445, 2.541이 됨). 평균값을 비교하여 보면 공제 방법을 적용하는 경우 결과적으로 전 층밀리기비 영역에서 변형력의 값이 4.5% 증가하고 있어 식(1)을 적용하여 층밀리기 점성계수를 구할 때 결과에 영향을 미치게 됨을 알 수 있다. 그러나 공제 방법의 가장 큰 영향은 계산한 값들의 평균치를 변형력으로 정할 때 보이는 표준 편차를 비교하면 더욱 명확하여 진다. 공제 방법을 적용 할 때 표준 편차가 8 배정도 증가함을 볼 수 있다. 결국 평형 계에서 구한 변형력의 값은 열 잡음의 제거에는 전연 도움이 되지 못하고 데이터의 표준 편차만 증가시키는 결과를 가지고 온다는 것을 알 수 있다.

〈표 3〉 초기위상이 다른 3경우에 층밀리기비별로 구한 변형력, 실험계와 공제방법을 적용한 변형력의 비교

SHR	실험계 변형력					공제방법 결과				
	1	2	3	평균	표준 편차	1	2	3	평균	표준 편차
16.863	2.559	2.428	2.426	2.471	0.044	1.979	3.357	2.425	2.587	0.406
13.490	2.995	2.662	2.618	2.758	0.119	2.415	3.590	2.644	2.883	0.306
10.117	2.772	2.496	2.596	2.621	0.081	2.190	3.424	2.521	2.712	0.369
6.745	2.511	2.197	2.230	2.310	0.101	1.931	3.125	2.262	2.439	0.356
5.058	2.439	2.379	2.354	2.391	0.025	1.859	3.307	2.395	2.520	0.423
3.372	3.182	3.170	3.154	3.169	0.008	2.601	4.097	3.165	3.288	0.436
1.686	2.958	3.004	2.978	2.980	0.013	2.377	3.929	3.002	3.103	0.451
1.348	2.523	2.527	2.523	2.524	0.001	1.947	3.445	2.541	2.644	0.436
1.012	2.015	2.021	2.031	2.022	0.005	1.440	2.939	2.046	2.142	0.435
0.674	1.519	1.468	1.478	1.488	0.016	0.945	2.386	1.490	1.607	0.420
0.337	1.100	0.704	0.846	0.883	0.116	0.522	1.623	0.868	1.004	0.325

#### 4. 결 론

입자간에 Lennard-Jones 퍼텐셜로 상호작용이 이루어지는 밀도  $\rho=35.54\text{kg} \cdot \text{mole}^{-1}\text{m}^3$ , 온도  $T=86.5\text{K}$ 인 108개

의 입자로 구성된 Ar유체계에 비평형 분자동력학(NEMD)으로 층밀리기 흐름을 시물레이션 하였다. 본 연구에서는 계가 액체 상태에 도달한 후 일정한 층밀리기비를 걸어 주며 층밀리기 흐름을 만들 때 계에 걸리는 층밀리기 변형력의 변화를 분석하여 계산에서 택한 분할 분자동력학 방법과 공제방법의 효과를 분석하였다. 계산시 평형 상태에 있는 기준 계를 계속 유지하면서 필요한 회수만큼 기준 계를 복사한 후 층밀리기 흐름을 만들어 변형력을 구함으로써 열 잡음이 상쇄하도록 하는 분할 분자동력학의 효과를 알아 보기 위하여 반복 회수를 증가하면서 데이터에 나타나는 표준 편차의 변화를 비교하여 보았다. 반복회수의 증가에 대한 표준편차의 감소가 높아 분할 분자동력학 방법이 열잡음의 제거에 매우 효과적이나 열 잡음은 층밀리기비에 따라 증가하고 있어 요구하는 수준의 데이터를 구하기 위하여는 층밀리기비별로 반복회수를 다르게 하여야 함을 알았다. 1.686보다 작은 층밀리기비 영역에서는 50회정도, 층밀리기비가 16.86에 가까울 때는 100회 이상의 반복회수를 택하여야 한다. 이와 같은 열잡음의 특성은 층밀리기비에 무관하게 평형계에서 구한 변형력을 빼주는 공제방법의 기본가정에 문제가 있음을 알 수 있다. 뿐만아니라 공제 방법을 적용하여 구한 데이터에서 열 잡음의 제거 효과는 전연 없고 결과적으로 변형력을 평행 이동시키기만 함을 밝혔다.

변형력에 미치는 평형계의 영향은 평형계의 초기조건과 최초 변형력을 걸어 줄 때의 위상 상태에 따라 달라지게 된다. 변형력을 걸어주기 시작하는 초기 위상 상태가 같을 경우에는 결국 층밀리기비를 변화시켜도 평형 계의 위상 궤적은 동일 할 수밖에 없어 이 경우 공제 방법은 층밀리기비에 무관하게 같은 상수를 더하거나 빼주기만 한다. 한편 기준 계의 초기 위상이 다르거나 층밀리기비를 걸어주는 점의 초기 위상이 달라지면 공제 방법은 최종 변형력의 값에 각기 다른 상수를 더하거나 빼주게 됨으로 표준 편차를 증가시키는 결과를 가지고 온다. 이때 나타나는 표준 편차의 증가는 8배에 이르고 있어 공제 방법의 도입은 계산 시간의 소비에도 불구하고 결과치에 부정적 영향만을 남기고 있음을 보였다.

## 참고문헌

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, New York, 1987
- [2] G. Ciccotti, D. Frenkel and I. R. McDonald, *Simulation of Liquids and Solids*, North Holland, Amsterdam, 1987
- [3] D. J. Evans and G. P. Morriss, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids*, Academic Press, New York, 1990
- [4] Andras Baranyai, "Calculation of transport properties from molecular dynamics simulation", *J. Chem. Phys.*, V101, No.6(1994), pp5070-5075.
- [5] Florian Muller-Plathe, "A Simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity", *J. Chem. Phys.*, V106, No.14(1997), pp6082-6085.
- [6] K. P. Travis, P. J. Davis and D. J. Evans, "Computer simulation algorithms for molecules undergoing planar Couette flow: A nonequilibrium molecular dynamics study", *J. Chem. Phys.*, V103, No.3(1995), pp1109-1118.
- [7] M. E. Tuckerman, C. J. Mundy and S. Balasubramanian, "Modified nonequilibrium molecular dynamics for fluid flows with energy conservation", *J. Chem. Phys.*, V106, No.13(1997), pp5615-5621.
- [8] Song Hi Lee and Peter T. Cummings, "Shear viscosity of model mixtures by nonequilibrium molecular dynamics", *J. Chem. Phys.*, V99, No.5(1993) pp3919-3925.
- [9] Song Hi Lee and Peter T. Cummings, "Effect of three-body forces on the shear viscosity of liquid argon", *J. Chem. Phys.*, V101, No.7(1994), pp6206-6209.
- [10] Andras Baranyai and P. T. Cummings, "Nonequilibrium molecular dynamics study of shear and shear-free flows in simple fluids", *J. Chem. Phys.*, V103, No.23(1995), pp10217-10225.
- [11] P. Padilla and S. Toxvaerd, "Simulating shear flow", *J. Chem. Phys.*, V104, No.15(1996), pp5956-5963.
- [12] Song Hi Lee and Peter T. Cummings, "Shear viscosity of model mixtures by nonequilibrium molecular dynamics II. Effect of dipolar interactions", *J. Chem. Phys.*, V105, No.5(1996) pp2044-2055.
- [13] D. M. Heyes, J. J. Kim, C. J. Montrose and T. A. Litovitz, "Time dependent nonlinear shear stress effects in simple liquids: A molecular dynamics study", *J. of Chem. Phys.*, V73, No.8(1980), pp3987-3996.
- [14] J. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, London, 1976
- [15] D. Levesque, L. Veret and J. Kurkjarvi, "Computer Experiment on Classical Fluids. IV", *Phys. Rev. A*, V7, No.5(1973), pp1690-1700.
- [16] Loup Veret, "Computer Experiment on Classical Fluids. I" *Phys. Rev.*, V159, No.1(1967), pp98-103.
- [17] Hubert Stassen and William A. Steele, "Simulation studies of shear viscosity time-correlation-functions", *J. Chem. Phys.*, V102, No.2(1995), pp932-938.
- [18] 안성경, "비평형 분자동력학을 이용한 단순액체의 총밀리기 변형력 계산", *새물리*, V36, No.1(1996), pp48-53.

● 저자소개 ●



안성청

1967년

육군사관학교 졸업(이학사)

1971년

The Catholic U. of America 물리학과 졸업(이학석사)

1975년

The Catholic U. of America 물리학과 졸업(이학박사)

1975~1988년

육군사관학교 물리학과 교수

1988~현재

세종대학교 물리학과 교수

관심분야

Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation.