

인공신경망을 통한 2D 용질성 마랑고니 유동 액적의 용질 농도 분포 역추적 기법

김준규* · 류준일** · 김형수†

Reverse tracking method for concentration distribution of solutes around 2D droplet of solutal Marangoni flow with artificial neural network

Junkyu Kim*, Junil Ryu** and Hyoungsoo Kim†

Abstract Vapor-driven solutal Marangoni flow is governed by the concentration distribution of solutes on a liquid-gas interface. Typically, the flow structure is investigated by particle image velocimetry (PIV). However, to develop a theoretical model or to explain the working mechanism, the concentration distribution of solutes at the interface should be known. However, it is difficult to achieve the concentration profile theoretically and experimentally. In this paper, to find the concentration distribution of solutes around 2D droplet, the reverse tracking method with an artificial neural network based on PIV data was performed. Using the method, the concentration distribution of solutes around a 2D droplet was estimated for actual flow data from PIV experiment.

Key Words : Artificial Neural Network(인공신경망), Machine Learning(기계학습), Solutal Marangoni Flow(용질성 마랑고니 유동), Inverse Problem(역문제), Particle Image Velocimetry(입자 영상 유속계)

1. 서론

액적 내 유동의 제어는 잉크젯 프린팅^(1,2), 생물검정^(3,4), 세포 분리⁽⁵⁾, 코팅⁽⁶⁾ 등 여러 분야에서 사용되고 있으며, 음향⁽⁷⁾ 혹은 전자기적인^(8,9) 외력을 이용한 방법들이 존재한다. 이러한 방법들은 크거나 무거운 장치를 필요로 하여 액적 내 유동 제어에 있어서 에너지 관점에서 비효율적인 방법이다.

액적 내 유동의 경우 길이 스케일이 작아서 점성력과 표면장력의 효과가 지배적인 특징을 갖는다. 특히, 표면장력의 효과를 이용하여 액적 내 유동을 제어하는 방법들이 제안되어 왔다. 국부적인 표면장력차를 발생시켜 마랑고니 유동을 발생시키는 것이 대표적인 방법이다. 마랑고니 유동은 크게 온도차⁽¹⁰⁻¹⁴⁾, 계면활성제의 농도차⁽¹⁵⁻¹⁷⁾, 그리고 용질의 농도차⁽¹⁸⁻²¹⁾에 의해 발생할 수 있다. 온도차를 이용하거나 계면활성제의 농도차를 이용한 방법의 경우 샘플을 손상시킬 수 있는 문제점이 있다. 그러나 용질의 농도차를 이용하는 방법은 비교적 샘플을 손상시키지 않기 때문에 각광을 받고 있다.

용질성 마랑고니 유동은 균일 코팅이나⁽¹⁸⁾ 액적 주위의 용질 소스의 개수와 거리를 이용하여 액적

† Department of Mechanical Engineering, KAIST, Associate professor
E-mail: hshk@kaist.ac.kr

** Department of Mechanical Engineering, KAIST, Ph.D student

내부에 형성되는 유동장을 제어하는 연구에 활용되었다⁽²²⁾. 최근에는 2D 액적에 대해서 용질성 마랑고니 유동에 대한 해석해가 제안되었고, 이를 3D 액적에 대한 용질성 마랑고니 유동과 비교하는 연구도 수행되었다⁽²³⁾.

용질성 마랑고니 유동은 계면에서 분포하는 용질의 농도가 지배하기 때문에 유동장을 제어하기 위해서는 액적 계면에 분포하는 용질의 농도에 대한 이해가 필수적이다. 그러나 이를 실험적으로나 이론적으로 파악하는 것은 어렵다. 예를 들어 기체의 물분율에 대해서는 간접계를 이용하는 방법으로 확인할 수 있다⁽²⁴⁾. 그러나 액적의 유동을 제어하는 것은 공기 중에서의 용질 소스의 분포가 아닌 액적 계면에서 용해된 용질의 분포로 이를 직접적으로 측정하는 것은 어렵다. 2D 용질성 마랑고니 유동에서의 해석해⁽²³⁾의 경우에도 경계조건에 대한 정확한 값을 알 수 없어 그 역연산에 의한 정해를 획득하기가 어렵다.

본 연구에서는 2D 액적에 대한 용질성 마랑고니 유동에 대해서 PIV와 같은 가시화 기법을 통해 유동장 정보가 주어질 때 인공신경망을 활용하여 유동장을 일으키는 계면의 용질의 농도 분포를 역추적하는 기법을 개발하였다. 인공신경망 학습을 위한 학습데이터는 난수 생성을 통해 형성한 임의의 계면상 용질 농도 분포와 Michell solution⁽²⁵⁾을 통한 이론적 유동장을 활용하여 구성하였다. 인공신경망은 Fully Connected Neural Network로 구성된 학습데이터셋을 이용해 학습하였다. 마지막으로 실제 2D 용질성 마랑고니 유동에 대한 PIV 데이터에 학습된 인공신경망을 적용하여 유동장의 원인이 되는 액체-기체 계면에서의 용질의 농도 분포를 예측하였다.

2. 연구 방법

2.1. 2D 액적에 대한 용질성 마랑고니 유동의 해석해와 실험

액적 계면에 증기가 불균일한 분포를 형성하게 되면 증기 용질의 농도에 따라서 국부적으로 표면장력의 분포가 달라지게 되며, 이로 인해 계면을 따라 마랑고니 응력이 발생하여 액적 내부에 유동

장이 발생하게 된다. Ryu 등에 따르면 Fig. 1(a)에서와 같이 원형 액적과 용질 소스가 존재할 때 계면에서 용질의 농도에 따른 표면장력 $\gamma(x)$ 와 액적 계면에서 원주 방향 위치 θ 로의 용질성 입자의 분포 $x(\theta)$ 그리고 액적의 반경 R 을 알면 수식 (1.1), (1.2)를 통해서 액적을 원점으로 할 때 반경 위치 r 과 원주 방향 위치 θ 에서의 반경 방향의 속도 u_r 와 원주 방향의 속도 u_θ 를 구할 수 있다²³. 수식 (1.3)은 수식 (1.1)과 (1.2)에 공통적으로 존재하는 항을 F_n 으로 나타낸 것이다.

$$u_r \left(r, \theta, \frac{\partial \gamma}{\partial x}, \chi(\theta), \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \right) = - \sum_{n=1}^{\infty} \left[F_n \frac{nr^{n-1}(r^2-R^2)}{4\pi\mu nR^{n+1}} \cos n\theta \right], \quad (1.1)$$

$$u_\theta \left(r, \theta, \frac{\partial \gamma}{\partial x}, \chi(\theta), \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[F_n \frac{(n+2)r^{n+1}-nR^2r^{n-1}}{4\pi\mu nR^{n+1}} \sin n\theta \right], \quad (1.2)$$

$$F_n = \int_0^{2\pi} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \Delta\theta \sin n\theta' d\theta'. \quad (1.3)$$

본 연구에서 2D 액적에 형성되는 용질성 마랑고니 유동을 입자영상유속계 실험을 통해서 측정하였다. 그림 1과 같이 두 장의 커버 글라스 사이에 물 액적을 위치시켰으며, 모세관을 통해 용질 소스를 위치시켰다. 본 실험에서 물 액적의 직경($2R$)은 3.0 mm, 액적과 용질 소스의 간격인 d 는 1.0 mm로 유지하였으며, 용질 소스로는 아세톤을 사용하였다. 실험에 사용한 모세관의 내경과 외경은 각 0.5 mm, 1.0 mm이다. 증기 용질 소스를 노출시킨 이후 유동장이 정상상태에 도달하였을 때의 유동장 데이터를 사용하였으며 PIV 분석에는 PIVlab²⁶을 사용하였다. 본 실험에서는 액적이 cover glass를 통해 원봉 형태로 유지되었으며, 액적의 두께가 모세관의 외경과 동일하게 유지되었다. 액적의 두께 $2r_0$ 는 액적의 직경 $2R$ 보다 매우 작으므로 ($\frac{2r_0}{2R} \ll 1$) Lubrication theory에 의해 액적 내 유동장은 2차원으로 가정할 수 있다⁽²³⁾.

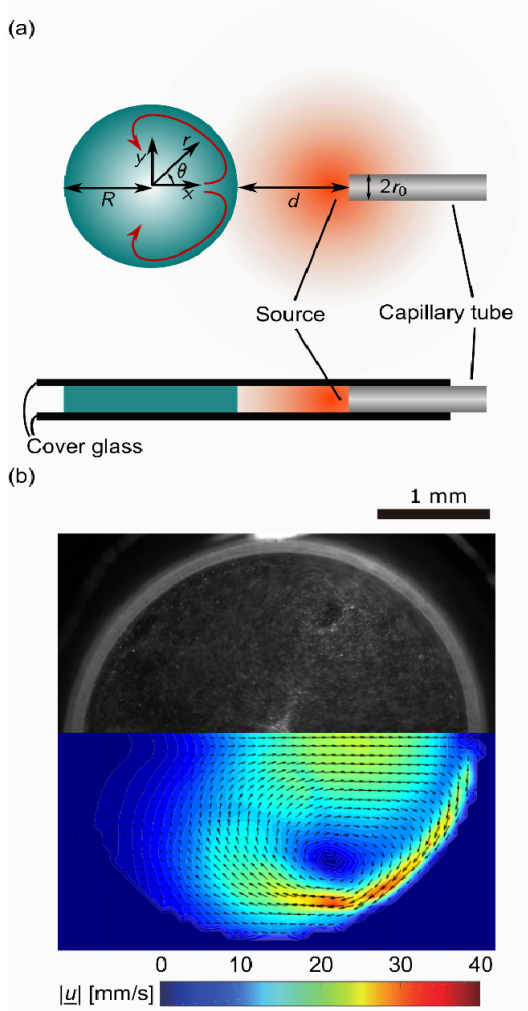


Fig. 1. (a) Experimental apparatus for 2D solutal Marangoni flow (b) Top: Snapshot of particle image velocimetry image (PIV) and Bottom: PIV result.

2.2. 마랑고니 응력 구배의 역추적

본 연구에서는 2D 용질성 마랑고니 유동장에 대해서 용질성 소스의 분포를 알 때 액적 내 유동장을 알 수 있는 Michell solution의 역연산을 인공신경망을 통해 구현하고자 한다(Fig. 2). Fig. 2에서 \underline{u} 는 유동장 벡터를 의미하며, $(\underline{\quad})$ 는 벡터 형식의 데이터임을 의미한다. 인공신경망을 구현하기 위해서는 유동장의 특성과 계면에 분포하는 용질의 농도의 특성을 나타낼 수 있는 데이터가 필요하다.

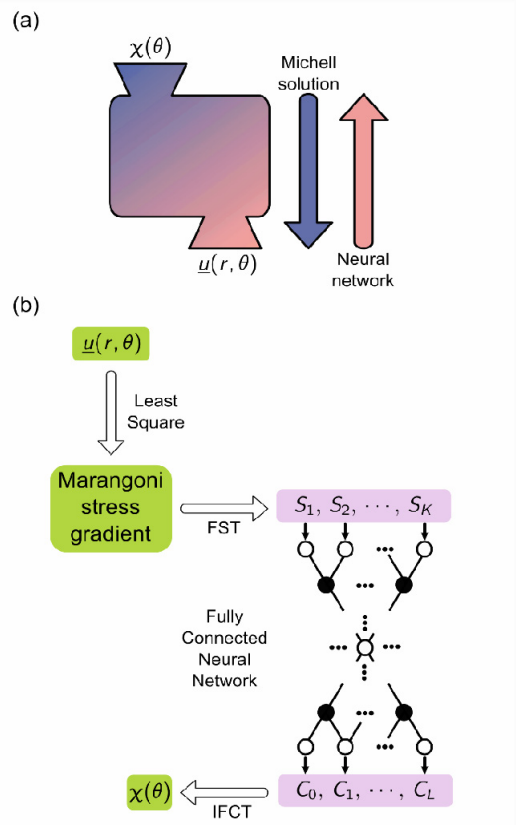


Fig. 2. (a) Schematic of Michell solution to calculate velocity field $\underline{u}(r, \theta)$ inside a 2D droplet for a given solute concentration profile at the liquid-gas interface $\chi(\theta)$ and artificial neural network as the inverse operation. (b) Structure of the artificial neural network. Velocity field $\underline{u}(r, \theta)$ is processed with Least Squares method and Fourier sine transformation (FST). Solute concentration distribution $\chi(\theta)$ is obtained from inverse Fourier cosine transformation (IFCT) of the output of the artificial neural network. S, C indicate Fourier sine and cosine coefficients, respectively. The subscript indicates the order of each coefficient.

PIV를 통해 얻은 이미지에서 취할 수 있는 정보는 이미지 상에서의 위치 정보와 해당 위치에서의 속도 정보이다. 해당 정보들을 입력으로 하고 액적 계면의 용질의 농도 분포를 출력으로 하여 데이터 셋을 구성할 경우 많은 정보가 하나의 데이터 셋

을 구성하게 된다. 이렇게 구성하게 되면 데이터 셋의 용량이 많이 커지며, 학습을 위해 구현하는 인공신경망의 크기가 커지고 이로 인해 학습을 통해 예측되는 값의 불확실성이 커지게 되며, 동시에 학습에 소요되는 시간이 증가한다. 따라서 유동장의 속도 정보가 아닌 유동장을 대표할 수 있는 다른 데이터를 사용하고자 한다.

수식 (1.1)과 (1.2)를 통해서 2D 액적내 유동장을 발생시키는 용질성 마랑고니 효과는 액적 계면의 마랑고니 응력 구배($\partial\gamma/\partial\theta$)에 지배됨을 알 수 있다. 본 연구에서는 마랑고니 응력 구배를 이용하여 액적 주위의 용질성 소스의 분포를 예측하고자 한다.

PIV 실험을 통해 액적 계면의 마랑고니 응력 구배를 구하기 위해서는 실험에서 얻은 유동장 데이터에서 수식 (1.3)에 해당하는 공통항 F_n 의 도출이 필요하다. 이에 본 연구에서는 속도장의 각 성분들에 최소자승법을 이용하여 마랑고니 응력 구배를 역추적하였다.

$$u_r(r_i, \theta_j) = u_r^{i,j} \approx -\sum_{n=1}^N F_n A_1^{i,j,n}, \quad (2.1)$$

$$A_1^{i,j,n} = \frac{nr_i^{n-1}(r_i^2 - R^2)}{4\pi\mu n R^{n+1}} \cos n\theta_j, \quad (2.2)$$

$$\begin{pmatrix} u_r^{1,1} \\ u_r^{2,1} \\ \vdots \\ u_r^{I,1} \\ u_r^{1,2} \\ \vdots \\ u_r^{I,J} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} A_1^{1,1,1} & A_1^{1,1,2} & \dots & A_1^{1,1,N} \\ A_1^{2,1,1} & A_1^{2,1,2} & \dots & A_1^{2,1,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_1^{I,1,1} & A_1^{I,1,1} & \dots & A_1^{I,1,1} \\ A_1^{1,2,1} & A_1^{1,2,1} & \dots & A_1^{1,2,1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_1^{I,J,1} & A_1^{I,J,2} & \dots & A_1^{I,J,N} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_N \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

$$(\mathbf{U}_r) = [\mathbf{A}_1](\mathbf{F}). \quad (2.4)$$

$$u_\theta(r_i, \theta_j) = u_\theta^{i,j} \approx -\sum_{n=1}^N F_n A_2^{i,j,n}, \quad (3.1)$$

$$A_2^{i,j,n} = \frac{(n+2)r_i^{n+1} - nR^2 r_i^{n-1}}{4\pi\mu n R^{n+1}} \sin n\theta_j, \quad (3.2)$$

$$\begin{pmatrix} u_\theta^{1,1} \\ u_\theta^{2,1} \\ \vdots \\ u_\theta^{I,1} \\ u_\theta^{1,2} \\ \vdots \\ u_\theta^{I,J} \end{pmatrix} = \quad (3.3)$$

$$\begin{bmatrix} A_2^{1,1,1} & A_2^{1,1,2} & \dots & A_2^{1,1,N} \\ A_2^{2,1,1} & A_2^{2,1,2} & \dots & A_2^{2,1,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_2^{I,1,1} & A_2^{I,1,1} & \dots & A_2^{I,1,1} \\ A_2^{1,2,1} & A_2^{1,2,1} & \dots & A_2^{1,2,1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_2^{I,J,1} & A_2^{I,J,2} & \dots & A_2^{I,J,N} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_N \end{pmatrix},$$

$$(\mathbf{U}_\theta) = [\mathbf{A}_2](\mathbf{F}), \quad (3.4)$$

$$(\mathbf{U}) = [\mathbf{A}](\mathbf{F})$$

여기서 $(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_r \\ \mathbf{U}_\theta \end{pmatrix}, [\mathbf{A}] = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{A}_2 \end{bmatrix}$ (4)

PIV 실험을 통해 획득된 유동장은 이미지에 직교 좌표계의 형태로 유동장 정보들이 기록되어 있는데, 이를 액적의 중심을 원점으로 하는 극좌표계로 하여 데이터를 처리하였다. 반경 방향과 원주 방향으로 각각 I개와 J개의 지점을 등간격으로 지정하고, 해당 지점에서의 반경 방향 속도 u_r 과 원주 방향 속도 u_θ 를 내삽법을 통해 표현할 수 있다. 각각의 지점에서의 속도 성분들은 각각 수식 (2.1)과 수식 (3.1)와 같이 표현된다. 이 때 모든 지점에서의 속도 성분들을 벡터 형태로 표현하면 수식 (2.3)과 (3.3)과 같이 표현할 수 있다. 이를 수식 (2.4)와 (3.4)와 같이 행렬식으로 표현하면 두 수식 모두 공통적으로 벡터 \mathbf{F} 를 포함하고 있는 수식 (4)와 같이 하나의 행렬식으로 표현할 수 있다.

\mathbf{F} 는 수식 (1.3)에서 표현된 바와 같이 본래는 적분 형태의 식으로 표현되지만 이를 유한 개의 급수로 근사할 수 있으며 이를 나타내면 수식 (5.1)과 같다. 이 때 f 는 수식 (5.2)와 같이 마랑고니 응력의 원주 방향 구배에 해당한다. $n=1$ 부터 $n=N$ 까지의 각각의 F 와 각 지점의 f 를 행렬식으로 표현하면 수식 (5.3)과 같으며 간략히 수식 (5.4)와 같이 표현 가능

$$F_n \approx \Delta\theta \sum_{j=1}^J f(\theta_j) \sin n\theta_j, \quad (5.1)$$

$$f(\theta_j) = \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_j} = \frac{\partial y}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_j}, \quad (5.2)$$

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_N \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \sin 1\theta_1 & \sin 1\theta_2 & \dots & \sin 1\theta_J \\ \sin 2\theta_1 & \sin 2\theta_2 & \dots & \sin 2\theta_J \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sin N\theta_1 & \sin N\theta_2 & \dots & \sin N\theta_J \end{bmatrix} \begin{pmatrix} f(\theta_1) \\ f(\theta_2) \\ \vdots \\ f(\theta_J) \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

$$(\mathbf{F}) = (\mathbf{B})(\mathbf{f}) \quad (5.4)$$

하다. 수식 (5.4)와 앞서 구한 수식 (4)를 결합하면 $(\mathbf{U}) = [\mathbf{A}][\mathbf{B}](\mathbf{f})$ 와 같이 구성된다. 일반적으로 행렬 \mathbf{A} 와 \mathbf{B} 는 정사각행렬이 아니므로 두 행렬의 역행렬을 구할 수 없다. 따라서 유사 역행렬 연산(pseudo inverse, †)을 이용하면 $(\mathbf{f}) = [\mathbf{B}]^\dagger [\mathbf{A}]^\dagger (\mathbf{U})$ 로 표현된다. 이는 최소자승법으로 볼 수 있다. 이 방법을 통해서 주어진 2D 액적에 형성된 유동장 정보를 활용하여 마랑고니 응력의 원주 방향 구배를 구할 수 있다.

마랑고니 응력의 원주 방향 구배는 해당 지점(θ)에서 증기 용질의 물분율에 대한 표면장력의 변화율($\partial\gamma/\partial x$)과 증기 용질의 물분율의 원주 방향 구배($\partial x/\partial\theta$)의 곱으로 나타낼 수 있다. 이때, $\partial x/\partial\theta$ 을 알 수 있다면, 원주 방향으로의 적분을 통해 액적 계면에서의 증기 용질의 물분율(x)을 알 수 있다. 그러나, 계면의 한 지점에서의 $\partial\gamma/\partial x$ 항이 원주 방향 위치 θ 에 의해 비선형적으로 결정되므로 이를 직접 계산하는 것에 어려움이 있다.

23. 학습 데이터 구성 및 학습 데이터 자유도 축소

2.2절에서 설명하였듯 인공지능망 학습의 경우 입력과 출력을 구성하는 데이터의 자유도가 클수록 인공지능망의 구조가 복잡해지고 학습에 소요되는 시간이 길어지며 예측 정확도에 영향을 줄 수 있다. 유동장 데이터로부터 도출된 액적 계면에서의 마랑고니 응력 구배의 경우 유동장 데이터보다 그 자유도가 작지만 본 연구에서는 학습 데이터 셋을 데이터 축소 과정을 통해서 자유도를 축소시켰다.

Fig. 1과 같이 소스가 하나인 경우 입력에 해당하는 마랑고니 응력 구배는 기함수의 형태를 띄게 되고 푸리에 사인 변환을 통해 다음과 같이 표현 가능하다. 여기서 S_k 는 푸리에 사인 계수 중 k 번째 계수를 의미한다.

$$f_j \approx \sum_{k=1}^K S_k \sin k\theta_j. \quad (6)$$

액적 주위의 용질성 소스의 분포 역시 Fig. 1과 같이 소스가 하나인 경우 우함수의 형태를 띄게 되어 아래와 같이 우함수의 경우 푸리에 코사인 변환을 통해 표현할 수 있다. 여기서 C_l 은 푸리에 코사인 계수 중 l 번째 계수를 의미한다.

$$\chi_j \approx \sum_{l=0}^L C_l \cos l\theta_j. \quad (7)$$

푸리에 사인 변환과 푸리에 코사인 변환에서 본래 함수를 표현하기 위해서는 각 항들을 무한히 더해야 하지만 이를 유한개의 항(각각 K 개와 L 개)을 이용하여 근사할 수 있다. 이를 통해서 입력 데이터와 출력 데이터의 자유도를 줄일 수 있다.

학습 데이터 생성은 난수 생성을 통해 임의로 형성한 계면에서의 용질 농도 분포를 이용하였다. 형성된 용질 농도 분포를 푸리에 코사인 변환을 통해 코사인 계수를 도출한 후 출력 데이터셋을 구축하였다. 또한, 형성된 용질 농도 분포와 용질 농도에 따른 표면장력 데이터를 이용하여 마랑고니 응력 구배를 도출하고 이를 푸리에 사인 변환을 거쳐 사인 계수로 변환하여 입력 데이터셋을 구축하였다. 본 연구에서는 입력 데이터셋은 10개의 출력 데이터(사인 계수)로 구성하였으며, 출력 데이터셋은 8개의 출력 데이터(코사인 계수)로 구성하였다. 또한 20,000개의 데이터셋을 구성하였다.

24. 인공지능망 구조

본 연구에서는 Keras⁽²⁷⁾를 이용하여 Fully Connected Neural Network로 인공지능망을 구성하여 입력 데이터로 출력 데이터를 도출하도록 하였다. 본 연구에서 사용된 인공지능망은 2개의 레이어로 구성되

었다. 입력된 데이터는 과학습을 방지하기 위해 배치정규화 과정과 가우스 노이즈를 거친 후에 첫번째 레이어로 전달되었다. 전달된 데이터는 LeakyRelu 활성화 함수를 거쳐서 두번째 레이어로 전달되었다. 두번째 레이어에서는 과학습 방지를 위해 드롭아웃 기법이 적용되었다.

$$\text{Loss} = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L (C_l - \hat{C}_l)^2 \quad (8)$$

인공신경망의 학습된 정도를 확인하기 위해 손실 함수의 정의가 필요하다. 본 연구에서는 위의 수식 8과 같이 학습 데이터셋의 출력값인 C_l 과 인공신경망을 거쳐서 예측된 \hat{C}_l 에 대해 손실 함수로 평균 제곱 오차(mean squared error)를 사용하였다.

2.5. 2D 액적 계면의 마랑고니 응력 구배와 용질 농도 도출을 위한 전처리와 후처리

본 연구에서 인공신경망은 단순히 마랑고니 응력 구배의 푸리에 사인 계수를 대응하는 액적 계면의 용질 농도 분포의 푸리에 코사인 계수로 대응해주는 역할을 하게 된다. 따라서 실질적으로 구현하려는 유동장 데이터로부터 액적 계면의 용질 농도 분포를 구하는 일련의 과정을 구현하기 위해서는 추가적인 과정이 필요하다. Fig. 2(b)는 이를 포함하여 2D 용질성 마랑고니 유동장을 이용하여 2D 액적 계면의 용질 농도 분포를 구하는 전체 과정을 나타내는 개략도이다.

전처리는 유동장 데이터를 입력 데이터의 형태로 변환해주는 과정이며, 후처리는 출력 데이터를 액적 주위의 용질성 소스 분포로 변환해주는 과정이다. 유동장 데이터는 2.2에서 제시된 방법을 통해서 마랑고니 응력 구배로 변환이 가능하다. 도출된 마랑고니 응력 구배는 식 (6)을 통해서 지정된 입력 데이터의 자유도와 같은 수의 사인 계수로 변환된다. 인공신경망을 통해서 예측된 출력 데이터의 경우 식 (7)의 역연산인 역 푸리에 코사인 변환을 통해서 액적 주위의 용질성 소스 분포로 변환된다.

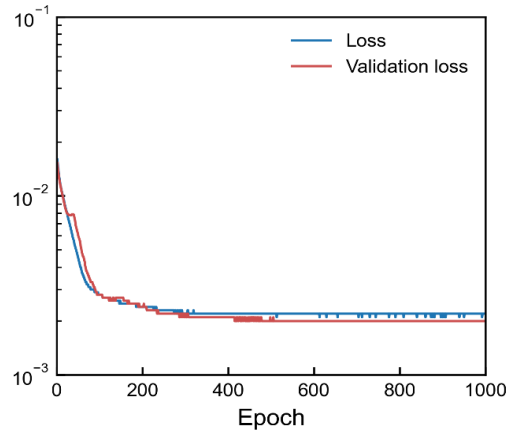


Fig. 3. Comparison between loss and validation loss based on artificial neural network learning where $\text{Loss} = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L (C_l - \hat{C}_l)^2$

3. 연구 결과

3.1. 인공신경망 학습

2.2절에서 구성한 데이터셋은 학습용 데이터셋과 검증용 데이터셋으로 구분시켰다. 2.3절에서 난수를 통해 생성한 20,000개의 데이터셋의 70%에 해당하는 14,000개의 데이터셋을 무작위로 추출하여 학습용 데이터셋으로 사용하였으며, 나머지 30%에 해당하는 6,000개의 데이터는 검증용 데이터셋으로 사용하였다. 인공신경망의 학습에는 학습용 데이터셋만 이용되며, 검증용 데이터셋을 이용해 인공신경망의 학습 정도와 과학습 정도를 확인하였다.

인공신경망을 구성하는 매개변수들은 학습 과정을 통해 인공신경망의 출력이 데이터셋의 출력에 피팅 되도록 업데이트된다. 따라서 학습 epoch가 거듭해 감에 따라 학습용 데이터셋의 손실은 감소하게 된다. 인공신경망의 목적은 학습되지 않은 데이터셋에 대해서 낮은 손실로 예측하는 것으로, 이를 확인하기 위해 검증용 데이터셋을 활용하여 검증용 손실을 계산하였다. 검증용 데이터셋은 학습에는 이용되지 않으므로 인공신경망을 구성하는 매개변수에는 영향을 주지 않는다. 따라서 손실과 검증 손실의 감소 정도를 바탕으로 학습 정

도를 확인할 수 있다.

또한 손실과 검증 손실의 감소 추세를 바탕으로 과학습 여부를 확인할 수 있다. 학습에 이용되지 않는 검증용 데이터셋의 손실이 학습을 거듭할 때마다 감소한다면 인공지능망의 정확도가 증가하는 것으로 볼 수 있으며, 학습용 데이터셋의 손실이 감소함에도 검증용 데이터셋의 손실이 증가한다면 인공지능망이 학습 데이터에 대해 과학습 되었다고 볼 수 있다. 앞서 설명한 바와 같이 인공지능망의 목적은 학습되지 않은 데이터에 대한 예측이므로, 과학습이 된 경우에는 인공지능망의 예측에 오차가 있을 수 있다.

Fig. 3에서 매 학습 epoch마다 학습용 데이터셋의 손실과 검증용 데이터셋의 검증 손실을 확인하였다. 학습 epoch가 거듭해 감에 따라 손실과 검증용 손실은 감소하였다. 또한 검증 손실이 증가하는 현상이 없음을 통해서 과학습 또한 일어나지 않은 것으로 볼 수 있다. 1000 epoch에서 손실과 검증용 손실은 각각 0.0020과 0.0018로 수렴하였다. 과학습이 일어나지 않으면서도 검증 손실이 손실과 비슷한 수준으로 감소하였으며, 감소 경향이 수렴한 것을 고려하여, 주어진 인공지능망의 학습이 충분히 이루어졌다고 볼 수 있으므로 1000 epoch에서 학습을 중단시켰다.

3.2. 입자영상속도계를 통한 2D 액적 주위 용질성 소스 분포 예측

3.1절에서 학습된 인공지능망을 이용하여 실제 PIV 실험으로 얻어진 2D 용질성 마랑고니 유동장에서 액적 계면의 용질 농도 분포를 예측하였다. Fig. 4(a)는 이때 사용한 PIV 유동장 데이터이다. Fig. 4의 유동장은 액적이 용질성 소스에 노출되어 유동장이 발생한 후 정상상태에 도달하고 나서 촬영된 이미지들을 활용하여 PIVlab을 통해서 획득하였다. 이 유동장 데이터와 학습된 인공지능망을 이용하여 액적 계면의 용질 농도의 분포를 예측하였다 (Fig. 4(b)).

Ryu 등⁽²³⁾은 2D 액적 계면에 형성되는 용질의 농도를 용질 소스와 가장 근접한 부분을 기준으로 가장 먼 곳까지 계면을 따라 가우시안 분포로 가

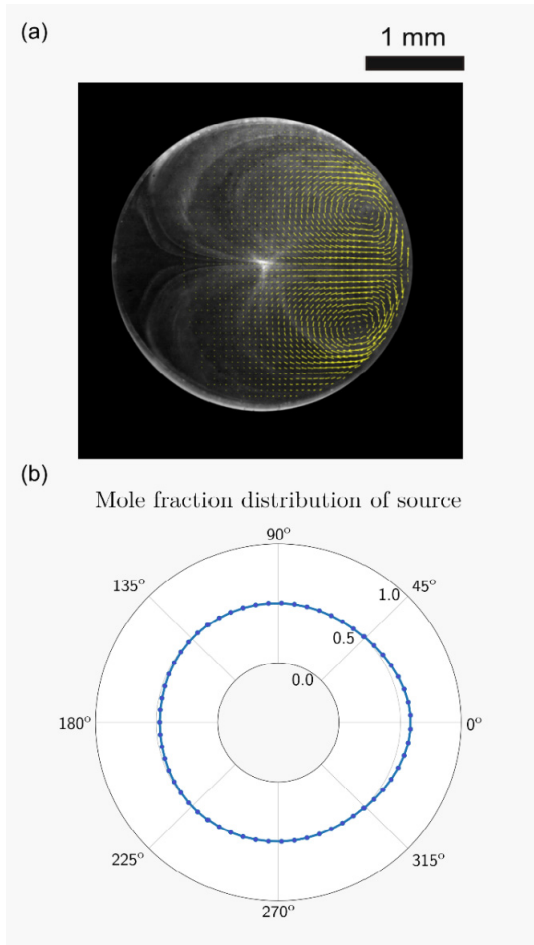


Fig. 4. Velocity field of solutal Marangoni flow inside a droplet and the estimation of the concentration of solutes along the interface. (a) PIV result of velocity field and (b) solute concentration distribution along the interface ($r=R$) based on the artificial neural network using reverse tracking method. Yellow arrows indicate velocity vector at each position.

정하고 형성되었다고 모델링하였다. 그리고 액적 계면에서 용질 소스 분포를 매개변수를 통해 조절해가면서 해석해를 통해 유동장을 계산하고 PIV 실험에서 획득한 유동장과 유사한 결과를 도출하는 용질의 농도 분포를 예측하였다.

본 연구에서 구현한 인공지능망 기술을 활용하여 예측한 액적 계면($r=R$)에서의 용질 소스 분포

(Fig. 4(b))에서도 가우시안 분포와 유사하게 소스와 가장 가까운 0° 방향에서 용질 농도의 분포가 가장 높은 것으로 나타나며 180° 에 가까워짐에 따라 용질의 농도가 낮아지는 것을 확인할 수 있다. 그러나 용질 소스와 가장 멀리 떨어진 180° 부근에서 물분율이 약 0.5 이하로 용질 소스의 물분율이 가우시안 모델에 따른 예측값과 같이 0에 근접하는 작은 값이 아님을 확인할 수 있다. 실제로 본 연구에서 사용한 2D 액적의 용질성 마랑고니 유동의 PIV 데이터는 유동장이 정상상태에 도달하였을 때의 데이터이며, 유동이 정상상태에 도달하기 위해 소요되는 시간 동안 용질 소스의 확산이 계속되기 때문에 용질 소스로부터 가장 멀리 떨어진 180° 지점에서 용질의 농도가 비록 계면상에서 가장 낮지만 가우시안 분포와 같이 0에 수렴하지 않는 것이 타당함을 추론할 수 있다.

4. 결론

2D 용질성 마랑고니 유동은 유동을 유발하는 계면에서의 용질 농도 분포를 실험을 통해 직접 확인하는 것은 어려움이 있다. 또한, 해석해의 존재에도 불구하고 실제 유동장 데이터와 용질의 물분율에 따른 표면장력 데이터를 활용하여 직접적인 역연산을 수행하는 것에는 어려움이 존재한다. 이를 해소하고 주어진 2D 용질성 마랑고니 유동장에서 유동의 실질적인 원인이 되는 액적 계면에서의 용질의 농도 분포에 대해 확인하고자 본 연구에서는 인공신경망을 이용하여 액적 계면의 용질 농도 분포를 예측하는 기법을 개발하였다.

인공신경망에 이용되는 입력 데이터와 출력 데이터의 자유도를 줄이고 이를 통해 인공신경망의 구조를 단순화시켜서 인공신경망의 예측 불확실성을 줄였다. 학습된 인공신경망을 이용하여 실제 2D 용질성 마랑고니 유동의 PIV 실험 데이터를 활용하여 액적 계면에서의 용질 농도 분포를 예측할 수 있음을 확인하였다.

References

- 1) Kuang, M. *et al.*, 2014, "Controllable printing droplets for high-resolution patterns," *Adv. Mater.*, Vol. 26(40), pp.6950–6958.
- 2) Park, J. and Moon, J., 2006, "Control of colloidal particle deposit patterns within picoliter droplets ejected by ink-jet printing," *Langmuir*, Vol.22(8), pp.3506–3513.
- 3) Wong, T. S. *et al.*, 2011, "Nanochromatography driven by the coffee ring effect," *Anal. Chem.*, Vol.83(6), pp.1871–1873.
- 4) Hernandez-Perez, R. *et al.*, 2016 "Evaporation-driven bioassays in suspended droplets," *Anal. Chem.*, Vol.88(14), pp.7312–7317.
- 5) Jung, J.Y. and Kwak, H.Y., 2007, "Separation of microparticles and biological cells inside an evaporating droplet using dielectrophoresis," *Anal. Chem.*, Vol.79(13), pp.5087–5092.
- 6) Malinowski, R. *et al.*, 2018, "Dynamic control of particle deposition in evaporating droplets by an external point source of vapor," *J. Phys. Chem. Lett.*, Vol.9(3), pp.659–664.
- 7) Destgeer, G. *et al.*, 2016, "Acoustofluidic particle manipulation inside a sessile droplet: four distinct regimes of particle concentration," *Lab Chip*, Vol.16(4), pp.660–667.
- 8) Mampallil, D. *et al.*, 2011, "Controlling flow patterns in oscillating sessile drops by breaking azimuthal symmetry," *Appl. Phys. Lett.*, Vol.99(15) p.154102.
- 9) Chen, G. *et al.*, 2019, "Towards the rapid and efficient mixing on 'open-surface' droplet-based microfluidics via magnetic actuation," *Sens. Actuators B-Chem.*, Vol.286, pp.181–190.
- 10) Sempels, W. *et al.*, 2013 "Auto-production of biosurfactants reverses the coffee ring effect in a bacterial system," *Nat. Commun.*, Vol.4 p.1757.
- 11) Still, T. *et al.*, 2012 "Surfactant-induced Marangoni eddies alter the coffee-rings of evaporating colloidal drops," *Langmuir*, Vol.28(11),

- pp.4984–4988.
- 12) Iasella, S. V. *et al.*, 2019, "Flow regime transitions and effects on solute transport in surfactant driven mMarangoni flows," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol.553, pp.136–147.
 - 13) MacDonald, B.D and Ward, C., 2012, "Onset of Marangoni convection for evaporating sessile droplets," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol.383(1), pp.198–207.
 - 14) Park, J. *et al.*, 2017, "Acoustothermal tweezer for droplet sorting in a disposable microfluidic chip," *Lab Chip*, Vol.17(6), pp.1031–1040.
 - 15) Grigoriev, R. O., 2005, "Chaotic mixing in thermocapillary-driven microdroplets," *Phys. Fluids*, Vol.17(3), p.033601.
 - 16) Grigoriev, R. O. *et al.*, 2006. "Chaotic mixing in microdroplets," *Lab Chip*, Vol.6(10), pp.1369–1372.
 - 17) Baroud, C. N. *et al.*, 2007, "Thermocapillary valve for droplet production and sorting," *Phys. Rev. E*, Vol.75(4), p.046302.
 - 18) Kim, H. and Stone, H. A., 2018, "Direct measurement of selective evaporation of binary mixture droplets by dissolving materials," *J. Fluid Mech.*, Vol.850, pp.769–783.
 - 19) Kim, H. *et al.*, 2015, "Spontaneous Marangoni mixing of miscible liquids at a liquid–liquid–air contact line," *Langmuir*, Vol.31(31), pp.8726–8731.
 - 20) Cira, N. *et al.*, 2015, "Vapour-mediated sensing and motility in two-component droplets," *Nature*, Vol.519(7544), p.446.
 - 21) Kim, H. *et al.*, 2016, "Controlled uniform coating from the interplay of marangoni Marangoni flows and surface-adsorbed macromolecules," *Phys. Rev. Lett.*, Vol.116(12), p.124501.
 - 22) Park, J. *et al.*, 2020, "Control of solutal Marangoni-driven vortical flows and enhancement of mixing efficiency," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol.561, pp.408–415.
 - 23) Ryu, J. *et al.*, 2021, "Analysis of vapor-driven solutal Marangoni flows inside a sessile droplet," *Int. J. Heat Mass Transf.*, Vol.164, p.120499.
 - 24) Shukla, D. and Panigarhi, P. K., 2020, "Digital holographic interferometry investigation of liquid hydrocarbon vapor cloud above a circular well", *Appl. Opt.*, Vol.59(19), p.5851.
 - 25) Michell, J. H. 1899, "On the direct determination of stress in an elastic solid, with application to the theory of plates," *Proc. London Math. Soc.*, Vol. 31, pp. 100-124.
 - 26) Thielicke, W. and Stamhuis, E. J., 2014, "PIVlab – Towards User-friendly, Affordable and Accurate Digital Particle Image Velocimetry in MATLAB," *J. Open Res. Softw.*, Vol.2(1) e30.
 - 27) Chollet, F. *et al.*, 2015, Keras, <https://keras.io>.