

〈논 문〉

## 비정형 혼합재 이동성질의 변동

김인찬\*

(1996년 3월 26일 접수)

## Fluctuation of Transport Properties of Random Heterogeneous Media

I. C. Kim

**Key Words:** Random Heterogeneous Media(비정형혼합재), Effective Transport Property(유효 이동성질), Fluctuation(변동), Observation Region(관찰구역), Diffusion Coarseness(확산조도), First Passage Time Technique(최초경과시간기법)

## Abstract

The notion of effective transport property of a heterogeneous medium implies that the medium is large enough that the ergodic theorem holds and local fluctuation of the property can be neglected. In case that the medium is not large enough compared to its characteristic microstructure length scale, the effective property fluctuates and differs from the value of the medium being large enough. As a representative transport phenomenon, diffusion was considered and the fluctuation of varying effective diffusion property, diffusion coarseness  $C_k$ , was defined as a quantifying parameter. Scaled effective diffusion property,  $\langle k^* \rangle / k_1$  and  $C_k$  were computed for the two phase random media consisting of matrix of diffusion coefficient  $k_1$  and spheres of diffusion coefficient  $k_2$ . Numerical simulations were performed by use of the so-called first passage time technique and data were collected for existing microstructure models of hard spheres (HS), overlapping spheres (OS) and penetrable concentric shells (PCS).

## 1. 서 론

두 가지 이상의 상(phase)이 불규칙적으로 혼합된 비정형 혼합재(random heterogeneous media)의 이동성질(transport property)을 규명하기 위한 연구는, Maxwell,<sup>(1)</sup> Rayleigh,<sup>(2)</sup> 그리고 Einstein<sup>(3)</sup> 등이 이미 19세기 말과 20세기 초에 관심을 보인 이래, 과학기술의 발전에 따라 증가하는 복합소재의 사용과 그에 따르는 소재물성의 정확한 예측 및 물성치 최적화의 필요 등을 배경으로 연구의 양과 질에서 발전을 거듭하여 관련된 공학 및 과학분야를

통합한 하나의 독립된 전문분야로 인식되어 가고 있다. 자연계에서나 인공계에서 나타나는 소재 또는 재료들은 특별한 경우를 제외하고는 대부분 혼합소재(heterogeneous media)의 형태로 이루어져 있으며 이러한 혼합소재들은 특수한 소수의 인공적인 경우를 제외하고 대부분 그 구성구조, 즉 미시적인 구조면에서 비정형의 형태를 띤다. 따라서 소재가 이용되는 대상과 사용범위가 다양한 만큼 비정형 혼합재의 미시구조(microstructure)도 다양하다. 일반적으로 비정형 혼합재의 이동성질은 소재의 미시구조에 크게 영향을 받으므로 비정형 혼합재의 미시구조와 여러 가지 다양한 이동성질들과의 상관관계를 규명하려는 연구는 오래전부터 활발하였으며<sup>(4,5)</sup> 그 결과 수학적 기술이 단순하면서도 소

\*회원, 군산대학교 기계공학부

재의 특성을 잘 나타낼 수 있는 미시구조 모델들을 개발하였거나 개발중에 있고 이러한 대표적 미시구조 모델들(microstructure models)을 중심으로 이동성질들을 계산 및 예측하는 방향으로 관련 연구의 중심축이 경사되어 있다.

가장 단순한 형태의 비정형 혼합재의 모델로서 비교적 많은 연구노력이 경주되었고 따라서 그 구조에 따른 특성이 어느 정도 이해되고 있는 대표적인 구조모델로서는 등방성 2상재(isotropic two-phase media)로서 Fig. 1에 보이는 바와 같은 강구(hard sphere or rigid sphere) 모델을 들 수 있다. 이것은 예를 들어 전기전도율이  $\kappa_1$ 인 기재, 즉 상 1(phase 1 or matrix phase)에 전기전도율이  $\kappa_2$ 인 구형의 소재, 즉 상 2(phase 2, 입자형이라 해서 입자상(particle phase)이라고도 한다.)가 불규칙적으로 분포되어 열역학적 평형을 이루고 있는 모델로서 구형(혹은 입자형)의 소재끼리 서로 중복이 허용되지 않는다는 의미에서 강구모델, 즉 HS 모델이라 한다. HS 모델은 여러 가지 비정형 혼합재의 미시구조를 잘 모델링하고 있는 편리한 모델이지만 고분자나 사암 또는 소결처리된 소재나 다공성 소재 등에서의 미시구조를 모델링하기 위해서는 Fig. 2에서처럼 구형의 소재 2개끼리 서로 중복을 허용하는 것이 편리하며 이렇게 아무 제한 없이 중복이 허용되는 구조모델을 중복지구(overlapping sphere) 모델, 즉 OS 모델이라 한다. 그러나 실제의 비정형 혼합재의 경우 Lennard-Jones의 분자간 포텐셜에너지에서도 알 수 있듯이<sup>(6)</sup> 입자(혹은 구) 사이의 포텐셜은 유인력과 반발력이 동시에 존재하

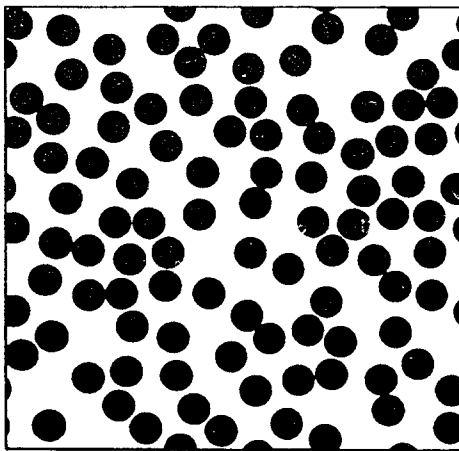


Fig. 1 Hard spheres (HS) structure model

는 복잡한 형태를 띠는 경우가 많으므로 HS 모델과 OS 모델의 양 극단 사이의 중간적인 모델을 도입하는 것이 편리하다. 이러한 중간적인 모델로서 여러 가지가 제안되었지만 그 편리함과 효용성이 가장 우수한 것으로 입증된 것이 Fig. 3에서 보이는 바와 같은 중복가능 동심외피(penetrable concentric shell) 모델, 즉 PCS 모델이다. 이것은 중복이 허용되지 않는 구형의 강구핵(hard core)이 중복가능한 동심의 외피(penetrable concentric shell)에 둘러 싸인 것으로 구형입자의 지름을  $2a$ , 강구핵의 지름을  $2a\lambda$ , 외피의 두께를  $a(1-\lambda)$ 라 할 때  $\lambda$ 를 비중복성계수(impentrability parameter)라 하며  $\lambda=1$ 일 때는 PCS 모델이 HS 모델과

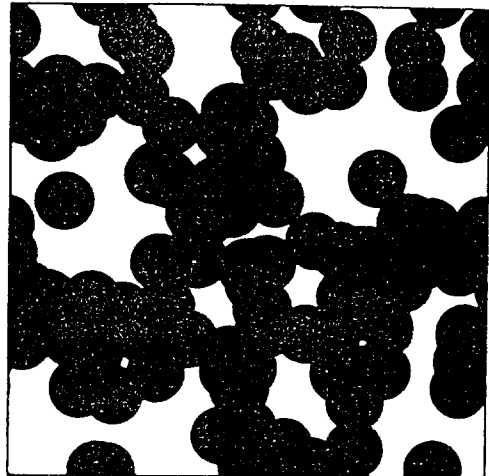


Fig. 2 Overlapping spheres (OS) structure model

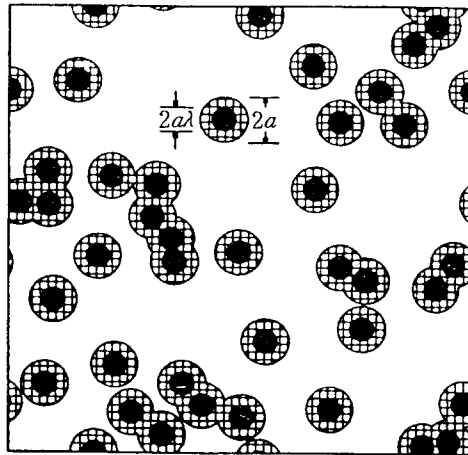


Fig. 3 Penetrable concentric shells (PCS) structure model

갈아지고  $\lambda=0$ 일 때는 PCS 모델이 OS 모델과 같아지게 된다. 2상 이상으로 구성된 혼합재의 모델로서는 동심복합구(concentric composite sphere)가 기재내에 분포된 비정형 3상 소재 모델이 제안되고 이 3상 모델에서의 확산이동성질의 수학적으로 엄밀한 상한치가 본 연구자에 의해 최근에 계산된 것 등을 들 수 있다.<sup>(7)</sup>

주어진 미시구조에서의 비정형 혼합재의 이동성질을 규명하기 위해 현실적으로 사용되는 이론적 접근법으로서의 변분법적 원리를 열역학적 평형에서는 포텐셜 에너지가 최소가 된다는 최소에너지 원리에 적용하여 수학적으로 엄격한 한계를 결정하는 한계법<sup>(8)</sup>과 혼합재 전체를 하나의 유효소재(effective medium)로 근사시켜 이 가상의 균일소재의 이동성질의 근사값을 유추하는 유효소재근사법(effective medium approximation)<sup>(9)</sup> 등이 있다. 그러나 현재의 이러한 이론적 방법으로서의 주어진 미시구조를 갖는 비정형혼합재의 이동성질을 정확하게 예측할 수 없는 단점이 있고 그 대안으로 제시되어 최근에 각광을 받고 있는 것이 몬테카를로법 또는 멧대로걸기(random walk) 기법 등을 사용하는 수치실험적 방법이다. Torquato와 Kim 등은 이미 효율적인 수치실험기법으로서 최초경과시간법(first-passage-time method)이란 새로운 기법을 제안 및 정립한 바 있으며<sup>(10,11)</sup> 이 기법을 전술한 여러 가지 등방성 2상재<sup>(10-13)</sup> 그리고 입자상의 소재 2가 구형이 아니고 타원체형인 이방성 2상재<sup>(14)</sup>의 경우에도 적용하여 대표적인 확산이동성질의 하나인 열전도율을 정확하게 계산한 바 있다.

기존의 이와 같은 이동성질 관련 연구의 대다수는 비정형 혼합재가 열역학적 평형상태에 있고 또 소재의 크기가 무한히 커서, 즉 미시구조의 길이척도에 비해 시스템의 길이척도가 훨씬 커서 앙상블 평균이 쉽게 정의되고 어가딕정리(ergodic theorem)가 성립하는 소재를 대상으로 이루어져 왔다. 물론 이러한 무한평형시스템에서도 아직 잘 알려져 있지 않고 유능한 연구자의 손길을 기다리고 있는 중요한 연구분야가 많긴 하지만 실제의 응용면에서 마주치게 되는 비정형 혼합재의 많은 부분은 무한시스템으로 취급할 수 없는 것 또한 사실이다. 무한한 크기의 소재에서 유한한 크기를 갖는 관찰구역(observation region)을 임의로 추출한다면 이 관찰구역에서는 무한시스템을 근거로 계산되고 예측되었던 이동성질들이 그 값을 그대로 유지할 것

을 기대할 수 없을 것이며 이동성질의 변동이 예상될 것이다. 통계적인 관점에서 이러한 변동은 분산(variance) 혹은 표준편차로 정의되며 관찰구역의 크기가 주어지면 그 크기에 따른 변동치(fluctuation value)가 결정된다. 이 변동치는 그 자체가 시스템의 통계적특성으로서 비정형 혼합재의 고유물성 즉 새로운 종류의 이동성질이 된다. 일반적으로 통계적 평균값은 그 표본시스템의 평균값과 함께 분산치나 표준편차가 동반되지 않으면 표본시스템의 통계적 성질을 기술하는 의미가 반감되는 것처럼 비정형 혼합재의 이동성질, 즉 앙상블 평균값은 이동성질의 분산값이 계산될 때 더 큰 의미를 갖게 될 것이다. 그러나 이동성질 자체 못지않은 의미를 갖는 이동성질의 변동 즉 분산값을 계산 및 규명하려는 연구는 놀라운 정도로 드물어 직접적인 이동성질에 관한 연구는 찾아보기 어렵고 이동성질은 아니지만 상채적비(phase volume fraction)의 분산값이 Lu 등<sup>(15)</sup>에 의해 계산된 것이 고작이다. 그 이유는 아마도 비정형 혼합재 관련 연구의 역사는 길지만 본격적으로 유용한 연구성과가 얻어지기 시작한 것이 비교적 최근의 일이기 때문일 것이다.

일반적으로 응력 시스템에서 역학적 구조물이 붕괴(breakdown or rupture)되는 것은 구조물의 평균적 강도가 임계치보다 작기 때문이 아니라 국부적인 피로와 미시적인 균열 등에 의해 발생하는 응력집중 현상 때문인 경우가 많다.<sup>(16)</sup> 또 절연시스템(dielectric system)의 유전학적 붕괴(dielectric breakdown)현상은 시스템내의 일련의 미시적인 파괴(microscopic failure)가 거시적인 붕괴와 정전기적 방전으로 발전하는 것으로 알려져 있다.<sup>(17)</sup> 이와 같은 절연시스템의 전형적인 예는 로켓의 고체연료에서 찾아볼 수 있다. 흔히 사용되는 고체연료에서는 연료역할을 하는 알루미늄 입자들과 산화제 역할을 하는 과염화 암모늄 입자들(ammonium perchlorate particles)이 기재로서의 고무점착제 중에 무작위적으로 분포되어 있어 Fig. 1과 같은 강구구조로 모델링하기에 적합하다. 이와 같은 경우들에 있어서는 구조물의 평균적인 기계적 강도나 절연시스템의 평균적인 유전학적 강도보다는 국부적인 영역, 즉 관찰구역에서의 그 값의 변동범위가 시스템의 안전상 더 중요한 시스템 특성이 될 것이다. 본 연구에서는 이와 같이 비정형 혼합재에서 이동성질 그 자체 못지 않게 중요하지만 연구성과가 상대적으로 적은 이동성질의 변동을 특성화할

수 있는 통계량을 정의하고 이 특성통계량을 주요한 HS, OS, PCS 구조 등의 미시구조 모델들에 대하여 이미 개발된 경제적인 수치실험적 기법을 적용함으로써 계산하고 이의 데이터베이스화함을 그 목적으로 한다.

이하 제2절에서는 경제적인 수치실험기법인 최초경과시간법에 대해 설명한다. 제3절에서는 2상혼합재의 변동성질로서 확산조도(diffusion coarseness)를 정의하고 제4절에서는 제3절에서 정의한 확산조도와 관찰구역의 크기에 따른 이동성질의 변화를 1차원 슬라브 시스템에 대해 해석적 계산을 시도하여 그 의미와 정성적 변화를 살펴본다. 제5절에서는 제2절에서 상술한 수치실험기법을 HS, OS, PCS 모델의 2상혼합재 시스템에 적용하여 계산한 결과를 제시하고 결과와 결론을 제6절에 요약한다.

## 2. 최초경과시간법

본 연구에서는 비정형 혼합재로 구성된 시스템이 대상이 되는 크기에 따라 이동성질이 양상분 평균치를 중심으로 크게 변동하는 현상을 규명하기 위하여 이동성질의 변동을 계산함을 주목적으로 한다. 다양한 응용분야에서 시스템의 붕괴와도 직접적인 연관이 있으리만치 중요한 응용성에도 불구하고 본격적인 연구결과를 찾아보기 힘든 비정형 혼합재의 이동성질의 변동에 관한 연구는 기존의 양상분 평균치를 계산하려는 노력에 비해 가히 다음 세대의 연구과제라 할만큼 광범위하고 다양한 연구분야이다. 본연구에서는 이러한 차세대 연구과제에의 첫걸음으로써 HS구조, OS구조, PCS구조 등을 가지는 여러 가지 등방성 2상재를 대상으로 하여 이러한 비정형혼합재에서의 확산이동성질의 변동을 규명하려 한다. 특별히 여러 가지 다양한 이동성질들 중에서도 확산이동성질을 먼저 고려하는 것은

$$k\nabla^2 C = -\gamma \quad (1)$$

와 같은 정상상태 확산방정식에서  $k$ 로 표시되는 확산이동성질을 계산하기 위한 편리한 수치실험적 방법, 즉 최초경과시간기법이 이미 개발되어 있기 때문이다. 브라운 운동 시뮬레이션(Brownian motion simulation)이라고도 불리는 효율적인 수치실험기법<sup>(11)(12)</sup>인 최초경과시간법의 핵심은 확산운동을 하는 이동성질 트레이서(transport property tracer)의 브라운운동의 라그랑주 궤적을 효율적으로

추적하는 것이다. 이 트레이서는 가시적인 것일 수도 있고 비가시적인 것일 수도 있다. 예를 들어, 농도장(concentration field)내에서의 입자의 확산현상에서는 브라운 운동을 하는 입자 그 자체가 가시적인 트레이서가 되며 온도장(temperature field)내의 열전도현상에서는 이동되는 열에너지가 비가시적인 트레이서가 된다. 이해의 편의상 입자의 확산현상의 관점에서 설명하기로 하자. Figs. 1~3에서 예로 든 것과 같은 혼합재내에서의 유효확산계수(effective diffusion coefficient)는 확산 트레이서의 운동의 측면에서는 3차원 혼합재의 경우

$$k = \frac{\langle X^2(t) \rangle}{6t} \Big|_{t \rightarrow \infty} \quad (2)$$

로 정의되며, 여기서  $\langle X^2(t) \rangle$ 은 확산 트레이서의 시간  $t$  경과후의 평균자승 이동거리이다.<sup>(11)</sup> 트레이서의 이동속도는 소재에 따라 달라지므로 혼합재내 서로 다른 상끼리의 경계면에서는 이동속도의 불연속이 발생하며 또 경계면에서 트레이서가 어느 상으로 향하게 될 것인가를 나타내는 상간의 확률분포 역시 균일하지 않다.<sup>(18)</sup> 최초경과시간법 이전의 수치실험적 방법으로는 피어슨걷기(Pearson random walk)라고도 불리는 일정보폭뿔대로 걷기(fixed-step random walk)의 방법이 거의 유일한 현실적 방법이였다.<sup>(19)</sup> 이 방법은 트레이서의 확산 운동을, 일정한 보폭  $\Delta x$ 를 갖지만 그 방향은 무작위적인 지그재그운동으로 시뮬레이션한 것으로 일반적으로 많은 계산시간을 필요로 한다. 더구나 실제 브라운운동의 매끄러운 궤적을 근사시키기 위해서는 여러 가지 다른 크기의 보폭에 대해 시뮬레이션을 거듭하여 그 때마다의 확산계수들을 보폭 크기  $\Delta x \rightarrow 0$ 으로 외삽보간시켜 원하는 확산 계수  $k$ 의 값을 계산하는 과정이 필요하며, 이에 따라 요구되는 계산시간 외에도 외삽보간이라는 통계적 처리과정에서 추가적인 오차의 발생 가능성마저 있는 단점이 있다. 이러한 일정보폭 뿔대로 걷기법을 획기적으로 개선한 것이 최초경과시간법으로서 임의의 위치에서 확산 트레이서의 다음 보폭은 그 주위의 혼합재의 국부적인 구성구조(local configuration)에 따라 달라지게 된다. 즉, Fig. 4에 개략적으로 나타낸 바와 같이, 예를 들어, 상 1에서의 트레이서를 중심으로 주위의 가장 가까운 경계면을 접하는 가상의 구를 그리면 이 가상의 구는 항상 순소재(homogeneous media)로 이루어지게 되므로

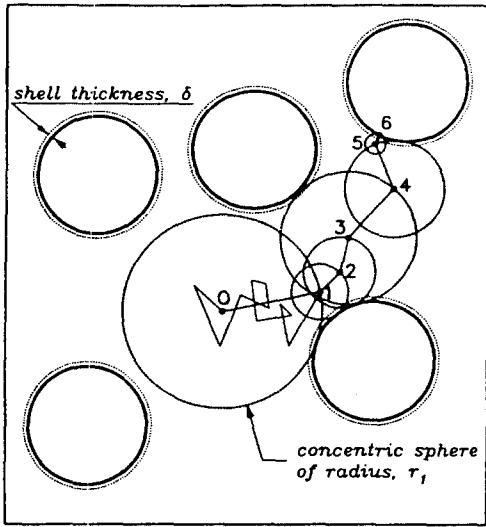


Fig. 4 Schematic diagram of first passage time technique

이 순소재로 이루어진 반경  $R_i$ 를 가지는 가상의 구의 표면상 임의의 위치까지 이동하는데 걸리는 시간, 즉 최초경과시간  $t_i$ 는

$$t_i = \frac{R_i^2}{6k_i} \quad (3)$$

로 쉽게 주어진다. 여기서,  $k_i$ 는 이 가상의 구내 순소재의 확산계수이다. 이와 같은 최초경과운동(first-passage movement)을 트레이서가 경계면에 도달할 때까지 반복하며 일단 경계면에 도달한 트레이서는 상 간의 확산계수의 상대적 비와 국부적인 경계면의 형상에 따라 결정되는 확률분포에 따라 상 1 또는 상 2로 운동을 계속하게 된다. 이 확률분포를 구하는 관계식은 Kim과 Torquato 등에 의해 얻어졌으며 참고문헌 (10), (11)에 상술되어 있다. 이렇게 하여 충분한 시간이 경과한 후의 평균자승 이동거리를 구하고 이를 반복하여 앙상블 평균을 구하면 식 (2)를 이용하여 비정형 혼합재의 유효 확산계수를 결정할 수 있는 것이다. 이 원리는 대표적인 확산이동성질의 하나인 트래핑 계수(trapping coefficient)를 구하는데 이용되어 이전의 일정노퍽 몇대로 걸기법에 비해 약 10배 이상 계산시간을 단축시키는 것이 밝혀진 바 있다.<sup>(20)</sup> 또 최초경과시간법은 Figs. 1~3에서와 같은 등방성 2상재뿐만이 아니고 타원체 형상으로 구성된 이방성 2상재에도 적용될 수 있음이 보여진 바 있다.<sup>(21)</sup>

식 (1)에서  $k$ 로 나타낼 수 있는 확산이동성질들로서는 열전도율, 전기전도율, 자기침투율(magnetic permeability), 확산계수 등이 있으며 이러한 다양한 확산이동성질들이 여러 가지 다양한 미시구조에서 그 앙상블 평균치뿐만 아니라 그 변동치가 어떻게 달라지는가를 본 연구에서 규명하려는 것이다.

### 3. 변동성질의 정의

본 연구에서는 기재(matrix)와 기재내에 무작위적으로 분포된 구형의 소재로 이루어진 2상 혼합재를 고려한다. 이미 잘 정립되어 있는 미시구조 모델들인 강구(Hard Sphere, HS) 모델, 중복구(Overlapping Sphere, OS) 모델, 중복가능외피(Penetrable Concentric Shell, PCS) 모델들은 3차원 2상 혼합재의 모델들이다. 기재를 상 1이라 하고, 구형의 소재를 상 2라 하며, 상 1, 상 2의 체적비를 각각  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ 라 한다. 또 상 1과 상 2는 서로 다른 이동성질을 가지며 상 1의 이동성질을  $k_1$ , 상 2의 이동성질을  $k_2$ 라 한다. 이 2상 혼합재는  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  그리고 혼합재의 미시적인 구성구조에 따라 유효 이동성질  $k_e$ 가 결정된다. 주어진 혼합재의 구성구조와 상체적비에서  $k_e$ 를 결정하는 문제는 최근 많은 연구개발 노력이 경주되어 HS 모델,<sup>(12)</sup> OS 모델,<sup>(13)</sup> 그리고 타원체 모델<sup>(14)</sup> 등의 기본적 구조 모델에서의 유효 이동성질들이 많은 부분 계산되었다.

2상 혼합재의 유효이동성질이  $k_e$ 라는 것은 혼합재의 미시적 크기(즉, 상 2를 이루는 구의 크기)에 비해 충분히 큰 시편(즉, 관찰구역)을 취했을 때 그 소재 시편의 이동성질이  $k_e$ 라는 의미이다. 그러나 시편의 크기가 작아지면 시편의 이동성질은 시편을 채취한 혼합재내 위치에 따라 변동하게 된다. 이러한 변동을 정의하고 정량화하기 위해, 2상 혼합재내 임의의 위치  $\mathbf{x}$ 에 그 중심이 위치한 임의의 형상을 가진 체적  $V_0$ 의 관찰구역을 취한다.  $V_0$ 의 크기가 유한하면 중심의 위치  $\mathbf{x}$ 가 이동함에 따라  $V_0$ 의 이동성질이 변하는 것은 자명하다. 즉  $V_0$ 의 위치에 따라 이동성질이 변동(fluctuation)하는 것이다. 또한 주목할 것은 이동성질이 국부적 위치에 따라 변동할뿐 아니라, 이하에서 보이듯이 이동성질 자체가  $V_0$ 의 크기에 따라서도 변한다는 사실이다. 본 연구에서는 대표적인 이동성질으로서 확산

이동성질을 논한다. 확산은 그 미시적 이동현상을 '뱃대로 걷기(random walk)' 기법을 이용하여 수치실험적으로 시뮬레이션할 수 있는 장점이 있다. 관찰구역을 중심이  $\mathbf{x}$ 에 위치한 반경  $R$ 의 구로 택하면  $(V_0 = \frac{4}{3}\pi R^3)$  관찰구역의 확산이동성질  $k^*(\mathbf{x}; R)$ 는 Kim과 Torquato가 보였듯이<sup>(11)</sup> 뱃대로 걷는 확산 트레이서의 관점에서 식 (2)에서처럼 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$k^*(\mathbf{x}; R) \equiv \frac{R^2}{6\tau} \quad (4)$$

여기서,  $\tau = \tau(R)$ 은 처음에 관찰구의 중심  $\mathbf{x}$ 에 위치한 확산 트레이서 (=뱃대로 걷는 자, random walker)가 상에 따라  $k_1$ 과  $k_2$ 에 비례하는 속도로 이동하다가 반경  $R$ 인 관찰구의 표면에 도달하기까지의 평균도달시간(mean hitting time)이며 수치실험에서 이는 충분히 많은 개수의 확산 트레이서에 대한 평균값으로 계산된다. 충분히 많은 개수의 반경  $R$ 인 관찰구를 혼합재내 임의의 위치에서 취하여 각각의 관찰구내의 확산이동성질을 모든 관찰구에 걸쳐 평균한 앙상블 평균값을  $\langle k^*(R) \rangle$ 이라 하자.  $V_0$ 의 반경  $R$ 이 0일 경우  $k^*(\mathbf{x}; R=0)$ 는 단순히 국부 확산이동성질이 되어  $\mathbf{x}$ 가 상 1에 속할 때는  $k_1$ , 상 2에 속할 때는  $k_2$ 가 되어, 이는 수학적으로 아래의 식 (7)로 정의되는 특성함수를 이용하여 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$k^*(\mathbf{x}) = k_1 + (k_2 - k_1)[1 - I(\mathbf{x})] \quad (5)$$

이때  $k^*(\mathbf{x})$ 의 앙상블 평균치  $\langle k^* \rangle$ 는

$$\langle k^* \rangle = \langle k \rangle = k_1\phi_1 + k_2\phi_2 \quad (6)$$

가 된다. 식 (5)에서  $I(\mathbf{x})$ 는 상 1의 특성함수(characteristic function of phase 1)로서

$$I(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \text{상 1} \\ 0, & \mathbf{x} \in \text{상 2} \end{cases} \quad (7)$$

으로 정의된다. 기호  $\langle \rangle$ 는 앙상블 평균을 의미하며  $I(\mathbf{x})$ 의 앙상블 평균은  $\langle I(\mathbf{x}) \rangle = \phi_1$ 의 성질을 갖는다. 반대로  $R \rightarrow \infty$ 의 경우에는  $\langle k^*(R) \rangle$ 이 혼합재의 거시적인 유효이동성질  $k_e$ 와 동일한 값을 갖는다.

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \langle k^*(R) \rangle = k_e \quad (8)$$

본 연구에서는 관찰구의 위치와 크기에 따라 달라지는 확산이동성질의 변동의 척도로서 다음과 같

은 통계량을 제안한다.

$$C_k = \frac{\sigma_k}{\langle k^* \rangle} \quad (9)$$

여기서,  $\sigma_k$ 는

$$\sigma_k^2 = \langle k^{*2} \rangle - \langle k^* \rangle^2 \quad (10)$$

의 관계로 정의되며 식 (7)의  $\sigma_k^2$ 은  $k^*(\mathbf{x}; R)$ 의 분산값(variance)이다.  $C_k$ 는 본 연구에서 처음으로 정의하고 계산하려는 변수로서 확산조도(diffusion coarseness)라 명명하기로 한다. 통계학적으로  $C_k$ 는 정규화된 표준편차의 의미를 갖는다. Lu와 Torquato는 국부적 상체적비의 변동치를 조도(coarseness)라 정의하고 그 값을 계산한 바 있다.<sup>(15)</sup> 식 (9)의 정의에 의해 관찰구 크기가 매우 작을 때와 매우 클 때의 양극단의 경우  $C_k$ 를 계산할 수 있다. 먼저  $R=0$ 인 경우

$$C_k = \left[ \frac{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}{\langle k \rangle^2} \right]^{1/2} \quad (11)$$

이며  $R \rightarrow \infty$ 인 경우

$$C_k \rightarrow \left[ \frac{\langle k_e^2 \rangle - \langle k_e \rangle^2}{\langle k_e \rangle^2} \right]^{1/2} = 0 \quad (12)$$

이 된다. 여기서, 여러 가지 앙상블 평균들은

$$\langle k \rangle = k_1\phi_1 + k_2\phi_2 \quad (13)$$

$$\langle k^2 \rangle = k_1^2\phi_1 + k_2^2\phi_2 \quad (14)$$

$$\langle k_e \rangle = k_e \quad (15)$$

$$\langle k_e^2 \rangle = k_e^2 \quad (16)$$

의 관계를 갖는다.

이하에서는 관찰구의 크기에 따라 달라지는  $\langle k^* \rangle$ 와  $C_k$ 를 혼합재의 구성구조에 따라 계산한다. 수치실험에 의한 결과를 검토하기 전에 해석적 결과의 예로서 제4절에 해석적 계산이 가능한 간단한 구조모델의 하나인 1차원 슬라브 구조에서의 계산 결과를 제시한다.

#### 4. 1차원 슬라브 구조에 대한 이론적 고찰

관찰구역의 크기  $V_0$ , 즉 관찰구의 반경  $R$ 에 따른 확산이동성질  $\langle k^* \rangle$ 와 확산조도  $C_k$ 의 변화를 임의의 미시구조를 갖는 혼합재에 대하여 해석적으로 예측하는 것은 매우 어려운 일이다. 그러나 가장 간단한 혼합재 구조의 하나인, Fig. 5와 같은, 규

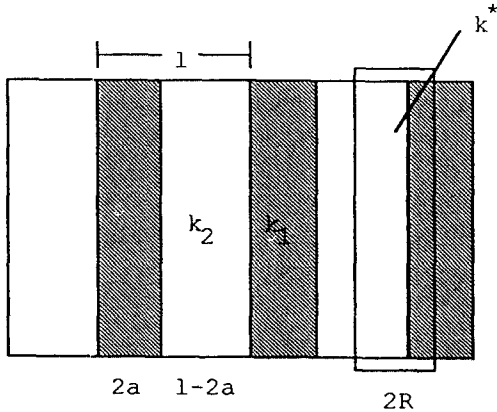


Fig. 5 A regular heterogeneous medium of periodic slabs

칙적으로 배열된 슬라브 구조의 경우에는 1차원 혼합재로 생각하여 상당부분 해석적 예측이 가능하다. 1차원 혼합재의 경우에 대한 해석적 결과는 그 자체의 중요성만 아니라 이 결과를 근거로 보다 복잡한 3차원 혼합재에서의 거동을 정성적으로 예측할 수 있고 나아가서 3차원 혼합재 수치실험에서의 결과에 대한 오류 가능성을 판별할 수 있다는 점에서 중요하다. Fig. 5에서처럼 확산이동성질이  $k_2$ 인 기재(상 1)내에 폭(직경)이  $2a$ 이고 확산이동성질이  $k_1$ 인 상 2의 물질이  $1-2a$ 의 간격으로 규칙적으로 배열된 혼합재를 고려해 보자. 문제를 단순화하기 위해 상 2의 소재의 직경  $2a$ 가 상 1의 소재의 폭  $1-2a$ 보다 작다고, 즉  $a < l/4$ 이라고 가정한다.  $a > l/4$ 인 경우에는 상 1과 상 2를 뒤바꾸면 되므로 이 가정은 결과에 아무런 제약을 가하지 못한다. 폭(직경)  $2R$ 인 관찰구역(관찰구)이 이 혼합재 내에 놓이는 것을 생각하면 관찰구의 크기와 위치에 따라 관찰구역의 확산이동성질  $k^*$ 가 달라지는 것은 자명하다.

#### 4.1 $R < a$ 인 경우

다음과 같이 세 가지 경우로 나누어 생각할 수 있다.

- 관찰구가 상 1에 완전히 포함되는 경우 :

$$\langle k^* \rangle = k^* = k_1 \quad (17)$$

- 관찰구가 상 2에 완전히 포함되는 경우 :

$$\langle k^* \rangle = k^* = k_2 \quad (18)$$

- 관찰구가 상 1과 상 2에 걸치는 경우 :

$$\begin{aligned} \langle k^* \rangle &= k_1 \phi_1 + k_2 \phi_2 \\ &\quad - \frac{2R}{l} \left[ k_1 + k_2 - \frac{2k_1 k_2}{k_2 - k_1} \ln \left( \frac{k_2}{k_1} \right) \right] \\ &= \langle k \rangle - \frac{2R}{l} \left[ k_1 + k_2 - \frac{2k_1 k_2}{k_2 - k_1} \ln \left( \frac{k_2}{k_1} \right) \right] \quad (19) \end{aligned}$$

또  $\langle k^{*2} \rangle$ 는

$$\begin{aligned} \langle k^{*2} \rangle &= k_1^2 \phi_1 + k_2^2 \phi_2 - \frac{2R}{l} (k_2 - k_1)^2 \\ &= \langle k^2 \rangle - \frac{2R}{l} (k_2 - k_1)^2 \quad (20) \end{aligned}$$

가 된다.

#### 4.2 $a < R < l/2 - a$ 인 경우

역시 다음과 같이 세 가지 경우로 나누어 생각할 수 있다.

- 관찰구가 상 1에 완전히 포함되는 경우 :

$$\langle k^* \rangle = k^* = k_1 \quad (21)$$

- 관찰구가 상 2를 완전히 포함하는 경우 :

$$\langle k^* \rangle = k^* = \frac{k_1 k_2}{k_2 - (k_2 - k_1) a/R} \quad (22)$$

- 관찰구가 상 2의 일부분을 포함하는 경우 :

$$\begin{aligned} \langle k^* \rangle &= k_1 \left( \phi_1 - \frac{2R}{l} \right) \\ &\quad + \frac{k_1 k_2}{k_2 - (k_2 - k_1) a/R} \left( \frac{2R}{l} - \phi_2 \right) \\ &\quad - \frac{4R}{l} \frac{k_1 k_2}{k_2 - k_1} \ln \left[ \frac{k_2 - (k_2 - k_1) a/R}{k_2} \right] \quad (23) \end{aligned}$$

또  $\langle k^{*2} \rangle$ 는

$$\begin{aligned} \langle k^{*2} \rangle &= k_1^2 \left( \phi_1 - \frac{2R}{l} \right) \\ &\quad + \left[ \frac{k_1 k_2}{k_2 - (k_2 - k_1) a/R} \right]^2 \left( \frac{2R}{l} - \phi_2 \right) \\ &\quad + \frac{4a}{l} \frac{k_1^2 k_2}{k_2 - (k_2 - k_1) a/R} \quad (24) \end{aligned}$$

가 된다.

#### 4.3 $l/2 - a < R < l/2$ 인 경우

마찬가지로 세 가지 경우로 나누어 생각할 수 있다.

- 관찰구가 상 1을 완전히 포함하는 경우

$$\langle k^* \rangle = k^* = \frac{k_1 k_2}{k_1 + (k_2 - k_1) (l - 2a)/2R} \quad (25)$$

- 관찰구가 상 2를 완전히 포함하는 경우

$$\langle k^* \rangle = k^* = \frac{k_1 k_2}{k_2 - (k_2 - k_1) a/R} \quad (26)$$

- 관찰구가 상 2의 일부분을 포함하는 경우

$$\langle k^* \rangle = \frac{k_1 k_2 (2R/l - \phi_2)}{k_1 + (k_2 - k_1) (l - 2a)/2R}$$

$$+ \frac{k_1 k_2 (2R/l - \phi_2)}{k_2 - (k_2 - k_1) a/R} - \frac{4R}{l} \frac{k_1 k_2}{(k_2 - k_1)} \ln$$

$$\left[ \frac{k_2 - (k_2 - k_1) a/R}{k_1 + (k_2 - k_1) (l - 2a)/2R} \right] \quad (27)$$

또  $\langle k^{*2} \rangle$ 는

$$\langle k^{*2} \rangle = \frac{k_1^2 k_2^2 (2R/l - \phi_1)}{[k_1 + (k_2 - k_1) (l - 2a)/2R]^2} + \frac{k_1^2 k_2^2 (2R/l - \phi_2)}{[k_2 - (k_2 - k_1) a/R]^2} + \frac{2k_1^2 k_2^2 (1 - 2R/l)}{[k_1 + (k_2 - k_1) (l - 2a)/2R] (k_2 - (k_2 - k_1) a/R)} \quad (28)$$

가 된다.

이상으로 4.1~4.3의 경우를 종합하면 1차원 혼합재의 경우  $\langle k^* \rangle/k_1$ 와  $C_k$ 의  $R/a$ 에 따른 변화를  $0 < R < l$ 의 범위에서 Figs. 6, 7과 같이 정리할 수 있다. Figs. 6, 7에서는  $k_2/k_1=10$ 으로,  $\phi_2=0.1, 0.3, 0.5$ 으로 하였다. Fig. 6에서 모든 범위의  $\phi_2$ 에 대해 관찰구역의 상대적 크기  $2R/l$ 이 작아질수록  $\langle k^* \rangle/k_1$ 의 값이 커져서  $2R/l=0$ 일 때 최대값  $\langle k^* \rangle/k_1 = \langle k \rangle/k_1$ 을 갖는 것을 알 수 있다. 또 체적  $\phi_2$ 가 커질수록  $\langle k^* \rangle/k_1$ 이  $k_e/k_1$ 으로부터 크게 벗어나기 시작하는 관찰구역 크기가 커지는 것을 알 수 있다. 즉, 예측되는 확산이동성질  $k_e/k_1$ 을 갖는 시편을 취하기 위해, 체적비  $\phi_2$ 가 클수록 시편의 크기가 더 커야 된다는 의미이다. Fig. 7은 확산 속도  $C_k$ 의 관찰구역 크기  $2R/l$ 에 따른 변화를 나타

낸다.  $2R/l$ 이 작아짐에 따라  $C_k$ 의 값이 0으로부터 달라지기 시작하여  $\phi_2=0.1$ 의 경우  $2R/l=0$ 일 때 최대값을 갖는 것을 알 수 있다.  $\phi_2=0.3$ 일 때와  $\phi_2=0.5$ 일 때  $C_k$ 의 값이  $2R/l$ 이 작아짐에 따라 상승-하강을 하는 것은 상 2의 물질(슬라브) 한 개의 크기( $2a$ )가 시스템의 크기( $l$ )의  $\phi_2$ 배 만큼 되어 상대적으로 매우 큰 규칙적 1차원 슬라브 시스템의 독특한 특성 때문으로 생각된다. 2차원 이상의 비정형 시스템에서는 상 2의 물질 한 개의 크기가 시스템의 크기에 비해 훨씬 작으므로 3차원 비정형 혼합재에서의 수치실험 결과는 Fig. 7에서의  $\phi_2=0.3$ 이나  $\phi_2=0.5$ 의 상승-하강의 경우보다는  $\phi_2=0.1$ 의 단순 상승의 경우에 가까울 것으로 예상되며 이는 다음 절에 제시된 수치실험 결과에서도 확인된다.

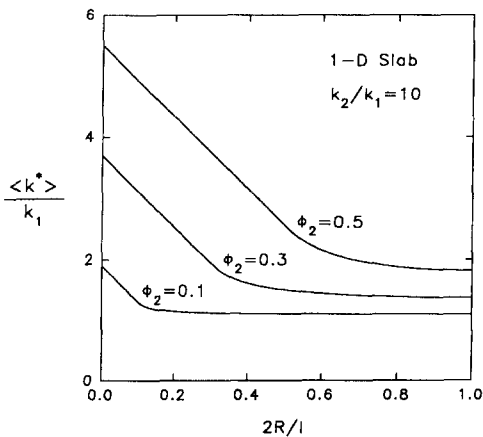


Fig. 6 Effective diffusion property  $\langle k^* \rangle/k_1$  versus the size of the observation region  $2R/l$  in the regular heterogeneous media of one dimensional periodic slabs

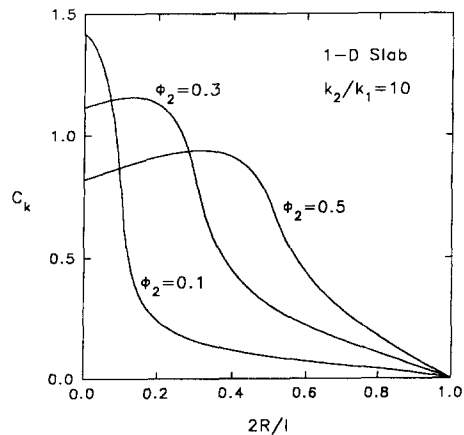


Fig. 7 Diffusion coarseness  $C_k$  versus the size of the observation region  $2R/l$  in the regular heterogeneous media of one dimensional periodic slabs



## 5. 계산 및 결과

확산이동성질  $\langle k^* \rangle$ 와 확산조도  $C_k$ 를 2상 혼합재의 HS, OS, PCS 모델들에 대하여  $k_2/k_1=10$ 으로 하여 관찰구역의 크기에 따라 계산하였다. HS모델에서는  $\phi_2=0, \dots, 0.5$ 의 값에 대하여, OS 모델에서는  $\phi_2=0, \dots, 0.8$ 의 값에 대하여, PCS 모델에서는  $\lambda=0.8$ 과  $\eta_2=0, \dots, 0.8$ 의 값에 대하여 계산하였다. 여기서,  $\phi_2$ 는 상 2의 체적비,  $\eta_2$ 는 상 2를 이루는 구의 환원 수밀도(reduced number density)이다.  $\phi_2$ 와  $\eta_2$ 의 관계는, HS모델에서는  $\phi_2=\eta_2$ , OS모델에서는  $\phi_2=1-\exp(-\eta_2)$ 의 관계가 성립하나  $0<\lambda<1$ 의 범위에서 PCS모델에서는  $\phi_2$ 와  $\eta_2$ 와의 사이의 명시적 관계가 알려져 있지 않다. 그러나 Lee와 Torquato는  $\lambda=0.8$ 일 때  $\phi_2$ 와  $\eta_2$ 와의 관계를 수치적으로 보고한 바 있으며<sup>(22)</sup> 여기서는 이들의 결과를 이용한다.

Tables 1~3과 Figs. 8~10은 각각 HS, OS, PCS 모델들에서 관찰구의 크기  $R/a$ 에 따른 확산 계수  $\langle k^* \rangle/k_1$ 의 변화를 나타낸 것이다. 각 모델에서 모두  $R/a$ 가 작아질수록  $\langle k^* \rangle/k_1$ 의 값이 커져서  $R/a=0$ 일 때 최대  $\langle k^* \rangle/k_1=\langle k \rangle/k_1$ 의 관계가 됨을 알

**Table 1** The dimensionless diffusional transport property  $\langle k^* \rangle/k_1$  for selected values of the second phase volume fraction  $\phi_2$  and the dimensionless size  $R/a$  of the observation region in the hard spheres (HS) structure model. Here  $k_2/k_1$  is set to be 10

$\phi_2$ R/a	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
0	1.90	2.80	3.70	4.60	5.50
0.1	1.86	2.72	3.59	4.47	5.32
0.2	1.83	2.64	3.45	4.29	5.10
0.3	1.77	2.57	3.33	4.13	4.93
0.4	1.74	2.47	3.22	3.99	4.76
0.5	1.71	2.40	3.14	3.85	4.60
1.0	1.53	2.10	2.69	3.36	4.12
2.0	1.37	1.79	2.29	2.83	3.43
$\infty$	1.24	1.53	1.89	2.36	3.11

수 있다. 또  $R/a$ 가 커지면  $\langle k^* \rangle/k_1$ 의 값이 작아져서  $R/a \rightarrow \infty$ 일 때  $\langle k^* \rangle/k_1 \rightarrow k_e/k_1$ 으로 수렴함을 알 수 있다. Tables 4~6, 그리고 Figs. 11~13은 각각 HS, OS, PCS 모델들에서 관찰구의 크기  $R/a$ 에 따른 확산 조도  $C_k$ 의 변화를 나타낸다. 각 모델에서 모두  $R/a$ 가 작아질수록  $C_k$ 의 값이 커져서  $R/a=0$ 일 때 최대값을 나타내며  $R/a$ 가 커지면  $C_k$ 의 값이 작아져서  $R/a \rightarrow \infty$ 일 때  $C_k \rightarrow 0$ 으로 수렴함을 알 수 있다. 그러나 1차원 슬라브에 대한 Fig. 7에서  $\phi_2=0.3, \phi_2=0.5$ 일 때 보인 것 같이

**Table 2**  $\langle k^* \rangle/k_1$  for selected values of  $\phi_2$  and  $R/a$  in the overlapping spheres (OS) structure model. Here  $k_2/k_1=10$

$\phi_2$ R/a	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
0	1.90	2.80	3.70	4.60	5.50	6.40	7.30	8.20
0.1	1.86	2.72	3.61	4.48	5.39	6.28	7.19	8.11
0.2	1.83	2.65	3.50	4.37	5.27	6.15	7.07	8.01
0.3	1.78	2.60	3.14	4.28	5.15	6.01	6.96	7.92
0.4	1.75	2.52	3.32	4.18	5.02	5.90	6.85	7.84
0.5	1.71	2.47	3.24	4.05	4.92	5.81	6.79	7.79
1.0	1.56	2.17	2.82	3.60	4.52	5.43	6.42	7.55
2.0	1.40	1.89	2.50	3.27	4.09	5.09	6.23	7.47
$\infty$	-	1.64	-	2.73	-	4.63	-	7.11

**Table 3**  $\langle k^* \rangle/k_1$  for selected values of  $\phi_2$  and  $R/a$  in the penetrable concentric shells (PCS) structure model. Here  $k_2/k_1=10$

$\eta_2$ R/a	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
0	1.90	2.79	3.66	4.52	5.36	6.18	6.94	7.64
0.1	1.86	2.72	3.57	4.39	5.20	6.00	6.75	7.49
0.2	1.80	2.64	3.46	4.28	5.06	5.84	6.58	7.31
0.3	1.77	2.57	3.34	4.12	4.88	5.67	6.44	7.19
0.4	1.74	2.49	3.23	4.01	4.74	5.52	6.28	7.06
0.5	1.70	2.41	3.14	3.88	4.63	5.40	6.17	6.95
1.0	1.55	2.12	2.77	3.41	4.12	4.93	5.76	6.60
2.0	1.39	1.83	2.38	3.00	3.75	4.57	5.48	6.46

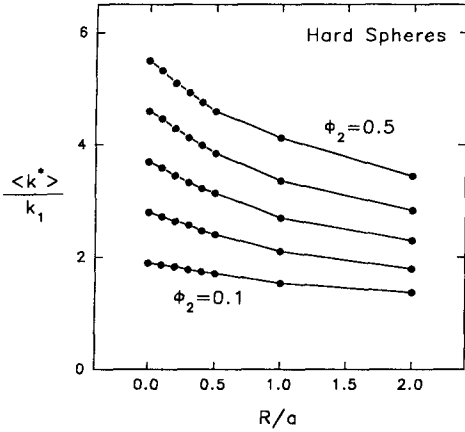


Fig. 8 Effective diffusion property  $\langle k^* \rangle / k_1$  versus the size of the observation region  $R/a$  in the HS model. In the figure, the circles denote simulation data and the lines are for the various volume fractions  $\phi_2=0.5, 0.4, 0.3, 0.3, 0.1$  from above, respectively

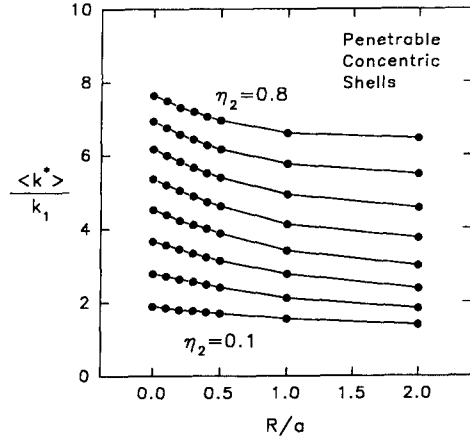


Fig. 10 Effective diffusion property  $\langle k^* \rangle / k_1$  versus the size of the observation region  $R/a$  in the PCS model. In the figure, the circles denote simulation data and the lines are for the various reduced densities of  $\eta_2=0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1$  from above, respectively

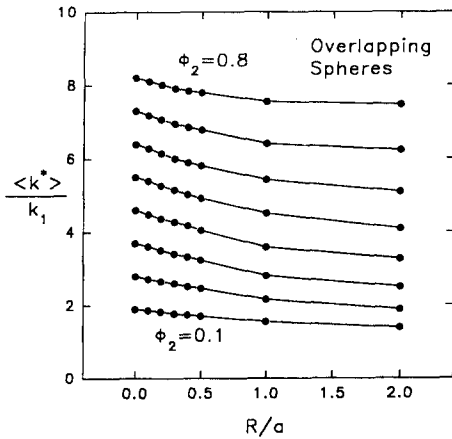


Fig. 9 Effective diffusion property  $\langle k^* \rangle / k_1$  versus the size of the observation region  $R/a$  in the OS model. In the figure, the circles denote simulation data and the lines are for the various volume fractions  $\phi_2=0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1$  from above, respectively

Table 4 The diffusion coarseness  $C_k$  for selected values of  $\phi_2$  and  $R/a$  in the HS model. Here  $k_2/k_1=10$

$R/a \backslash \phi_2$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
0	1.42	1.29	1.11	0.959	0.818
0.1	1.38	1.25	1.09	0.934	0.797
0.2	1.32	1.21	1.06	0.907	0.774
0.3	1.27	1.17	1.02	0.875	0.741
0.4	1.21	1.12	0.974	0.833	0.698
0.5	1.14	1.06	0.922	0.786	0.655
1.0	0.736	0.699	0.594	0.480	0.359
2.0	0.275	0.264	0.223	0.183	0.188
$\infty$	0	0	0	0	0

$C_k$ 가 관찰구의 크기가 작아짐에 따라 상승-감소하는 현상은 나타나지 않았다. 이는 규칙적 1차원 슬라브 구조와 3차원구의 혼합재 구조와의 차이, 즉 시스템의 크기에 대한 상 2의 물질의 상대적 크기가 다른 것에 기인한다. OS모델에 대한 Fig. 12에서  $\phi_2=0.1$ 일 때의 데이터 곡선이  $\phi=0.2$ 의 데이터 곡선과 어긋나는, 얼핏 보기에 이상식적인 듯한

경향은 아래의 Fig. 15와 관련되어 이해된다. Fig. 15에서 볼 수 있듯이 주어진 상전도율비  $k_2/k_1=10$ 에서  $C_k$ 가 최대가 되는 상체적비  $(\phi_2)_{max}$ 는  $R/a=0$ 일 때  $(\phi_2)_{max}=k_1/(k_1+k_2) \approx 0.091$ 이며  $R/a$ 가 커질수록  $(\phi_2)_{max}$ 도 커져서  $R/a=2$ 일 때  $(\phi_2)_{max} \approx 0.25$ 에 이르는 것을 알 수 있다. Fig. 12는 Fig. 15의 이러한 경향을 반영하는 것으로서 본 연구에서

**Table 5**  $C_k$  for selected values of  $\phi_2$  and  $R/a$  in the OS model. Here  $k_2/k_1=10$

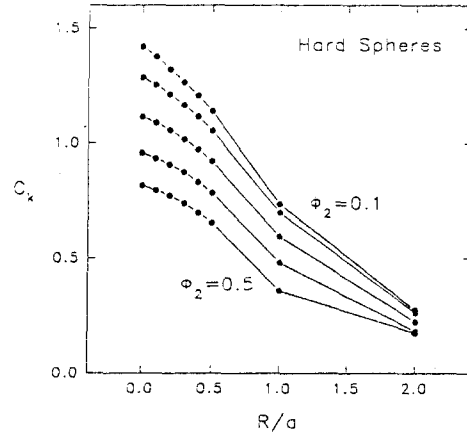
$\phi_2 \backslash R/a$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
0	1.42	1.29	1.11	0.959	0.818	0.689	0.565	0.439
0.1	1.38	1.26	1.09	0.942	0.800	0.674	0.552	0.425
0.2	1.33	1.22	1.07	0.922	0.785	0.661	0.540	0.417
0.3	1.27	1.18	1.04	0.894	0.765	0.649	0.528	0.407
0.4	1.22	1.15	1.012	0.870	0.750	0.635	0.517	0.397
0.5	1.16	1.09	0.971	0.848	0.725	0.613	0.500	0.379
1.0	0.795	0.813	0.754	0.676	0.583	0.498	0.410	0.310
2.0	0.357	0.422	0.422	0.397	0.360	0.311	0.253	0.186
$\infty$	0	0	0	0	0	0	0	0

**Table 6**  $C_k$  for selected values of  $\phi_2$  and  $R/a$  in the PCS model. Here  $k_2/k_1=10$

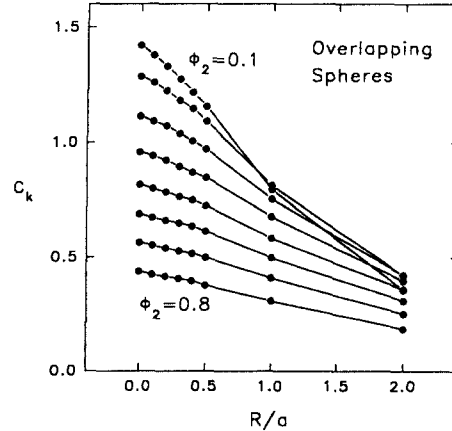
$\eta_2 \backslash R/a$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
0	1.42	1.29	1.12	0.971	0.839	0.720	0.615	0.518
0.1	1.38	1.26	1.10	0.951	0.821	0.704	0.600	0.498
0.2	1.32	1.22	1.06	0.928	0.799	0.688	0.582	0.484
0.3	1.27	1.18	1.03	0.897	0.778	0.663	0.559	0.465
0.4	1.21	1.13	1.00	0.866	0.750	0.642	0.548	0.442
0.5	1.14	1.10	0.959	0.835	0.717	0.617	0.522	0.416
1.0	0.763	0.754	0.669	0.589	0.508	0.428	0.351	0.283
2.0	0.316	0.335	0.318	0.288	0.251	0.219	0.181	0.150
$\infty$	0	0	0	0	0	0	0	0

계산된 데이터 점들 중에서는  $R/a=0$ 일 때는  $\phi_2=0.1$ 인 경우  $C_k$ 가 최대값을 가지며  $R/a=2$ 일 때는  $\phi_2=0.3$ 일 때  $C_k$ 가 최대값을 가진다. 이같은 경향은 PCS모델에 대한 Fig. 13에서도 나타난다.

3차원 혼합재의 구조모델들인 HS, OS, PCS 모델들은 혼합재를 이루는 두 번째 상인 구들끼리의 연결도(connectivity)가 달라짐에 따라 혼합재의 형상이 달라지는 것을 나타내기 위한 모델들이다. 혼합재 형상이 달라짐에 따라 혼합재에서 채취한 관찰구역의 유효이동성질이 달라지는 것은 당연하

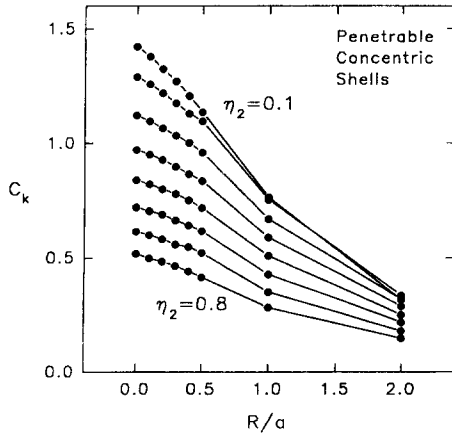


**Fig. 11** Diffusion coarseness  $C_k$  versus the size of the observation region  $R/a$  in the HS model. In the figure, the circles denote simulation data and the lines are for the various volume fractions  $\phi_2=0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$  from above, respectively

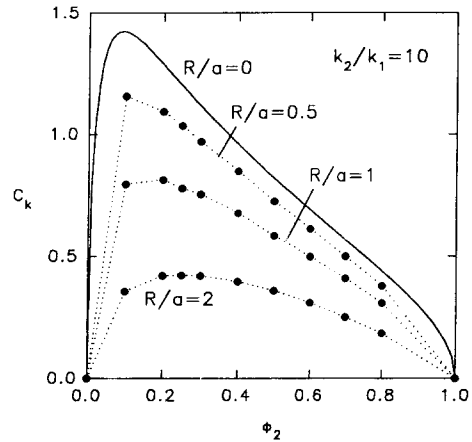


**Fig. 12** Diffusion coarseness  $C_k$  versus the size of the observation region  $R/a$  in the OS model. In the figure, the circles denote simulation data and the lines are for the various volume fractions  $\phi_2=0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$  from above, respectively

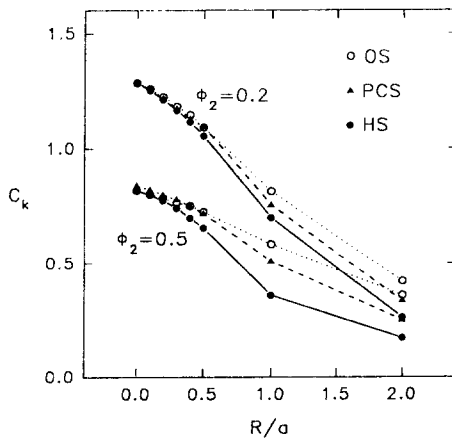
며 따라서 각 모델들에 따라 달라지는  $C_k$ 의 변화를 비교해 보는 것이 의미있는 일일 것이다. Fig. 14에 대표적으로  $\phi_2=0.2$ 와  $\phi_2=0.5$ 에 대하여 HS 모델과 OS모델에서의  $R/a$ 에 따른  $C_k$ 의 변화를 비교하였다.  $R/a$ 가 커짐에 따라 OS모델에서 HS 모델보다  $C_k$ 의 값이 항상 더 큰 것을 알 수 있다. 이는 OS모델에서 혼합재내 구들끼리 중복이 허용



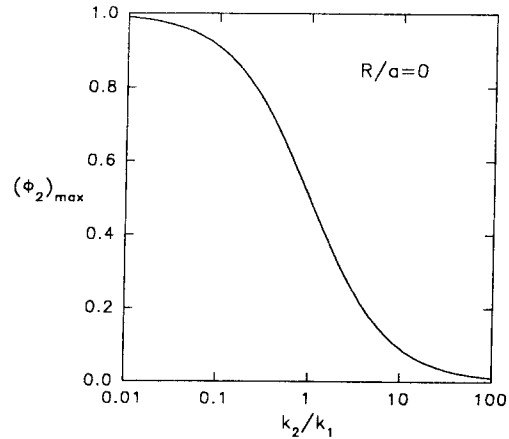
**Fig. 13** Diffusion coarseness  $C_k$  versus the size of the observation region  $R/a$  in the PCS model. In the figure, the circles denote simulation data and the lines are for the various volume fractions  $\eta_2 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$  from above, respectively



**Fig. 15** Diffusion coarseness  $C_k$  versus the volume fraction  $\phi_2$  for the various sizes of the observation region  $R/a=0, 0.5, 1, 2$  of OS model. Here  $k_2/k_1=10$ . Note that for  $R/a=0$  the peak lies at  $\phi_2=k_1/(k_1+k_2)=1/11$



**Fig. 14** Comparisons of  $C_k$ 's of HS, PCS, OS models for cases of  $\phi_2 = 0.2$  and  $0.5$



**Fig. 16** Volume fractions  $(\phi_2)_{\max} = k_1/(k_1+k_2)$  at which the peaks of  $\langle k^* \rangle/k_1$  lie versus  $k_2/k_1$  in the limit of  $R/a \rightarrow 0$

됨으로 인해 혼합재내에서 국부적으로 구의 밀도가 높은 부분이 생겨나게 되고 따라서 구들끼리 중복이 허용되지 않는 HS모델에 비해 상대적으로 덜 균일함을 의미한다. Fig. 14에는  $\lambda=0.8$ 일 때  $\eta_2=0.2$ 와  $\eta_2=0.5$ 인 PCS 모델에서의  $R/a$ 에 따른  $C_k$ 의 변화를 포함하였다.  $\lambda_2=0.2$ 일 때는  $\eta_2$ 와  $\phi_2$ 의 값이 같지 않으므로 직접적으로 비교할 수는 없지만 PCS모델에서  $\eta_2=0.2$ 일 때  $\phi_2=0.19844$ ,  $\eta_2=0.5$ 일 때  $\phi_2=0.48463^{(22)}$ 인 점을 고려하면 대강의 비교는 할 수 있을 것이다.  $\eta_2=0.2$ 나  $\eta_2=0.5$ 의

어느 경우든지 PCS모델에서 HS모델과 OS모델의 중간 값을 갖는 것을 알 수 있으며 이는 PCS모델에서의 균일 정도가 HS모델과 OS모델의 중간에 해당함을 의미한다 하겠다.

관찰구역의 크기가 시스템의 크기는 물론 미시구조의 크기, 즉 구의 반경  $a$ 에 대해서도 매우 작은  $R/a \rightarrow 0$ 의 한계에서는 제3절에서 지적하였듯이  $\langle k^* \rangle$ 는 단순히  $\langle k \rangle$ 로 되어  $\phi_2$ 에 선형적으로 비례하게 된다. Fig. 15는 역시  $k_2/k_1=10$ 에 대해  $R/a$ 와  $\phi_2$ 에 따른  $C_k$ 의 변화를 나타낸다. Fig. 16은

$R/a=0$ 일 때  $C_k$ 를 최대로 하는  $\langle\phi_2\rangle_{\max}$ 의 변화를  $k_2/k_1$ 에 따라 도시한다. Fig. 17은  $R/a=0$ ,  $\phi_2 = \langle\phi_2\rangle_{\max} = k_1/(k_1+k_2)$ 일 때  $k_2/k_1$ 에 따른  $\langle k^*\rangle/k_1$ 의 변화를 나타내며 Fig. 18은  $R/a=0$ ,  $\phi_2 = \langle\phi_2\rangle_{\max} = k_1/(k_1+k_2)$ 일 때  $k_2/k_1$ 에 따른  $C_k$ 의 변화를 나타낸다. 또 상전도율비  $k_2/k_1$ 에 따른  $\langle k^*\rangle/k_1$ 과  $C_k$ 에 대한 영향을 살펴보기 위해 임의로 OS 모델을 택하여  $\phi_2=0.2$ 일 때  $R/a=0.2$ 와  $R/a=0.5$ 의 경우에 대해 각각  $0.01 \leq k_2/k_1 \leq 100$  범위에 대해 계산해 보았다. 이때  $k_2/k_1$ 에 따른  $\langle k^*\rangle/k_1$ 의 변화는 Fig. 19에,  $k_2/k_1$ 에 따른  $C_k$ 의 변화는 Fig. 20에 도시하고 이를 Table 7에 요약하였다. Fig. 19에서

$R/a$ 의 값에 관계 없이  $k_2/k_1$ 이 커짐에 따라  $\langle k^*\rangle/k_1$ 이 커지는 것을 알 수 있다. 또 동일한  $k_2/k_1$ 에 대해서는  $R/a=0.2$ 일 때가  $R/a=0.5$ 일 때보다  $\langle k^*\rangle/k_1$ 이 커지는 것을 알 수 있으며 이것은 Figs. 8~10에서  $R/a$ 가 작아질수록  $\langle k^*\rangle/k_1$ 이 커지는 경향과 일치한다. Fig. 20은  $k_2/k_1$ 에 따른  $C_k$ 의 변화로서 주어진 변수  $\phi_2=0.2$ 에서  $k_2/k_1$ 이 1에서 멀어질수록  $C_k$ 가 커지며  $k_2/k_1 > 1$ 일 때  $C_k$ 의 증가가  $k_2/k_1 < 1$ 일 경우에 비해 현저함을 알 수 있다. 동일한  $k_2/k_1$ 의 경우  $C_k$ 의 값은  $R/a=0.2$ 일 때  $R/a=0.5$ 일 경우에 비해 더 커지는 것을 알 수 있고 이는 역시  $R/a$ 가 작아질수록  $C_k$ 가 커지는 Figs.

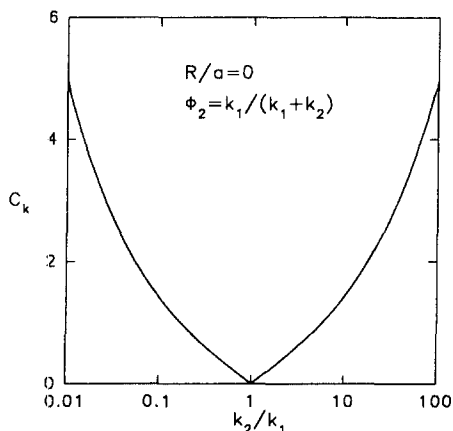


Fig. 17 Peak values of  $\langle k^*\rangle/k_1$  at volume fractions  $\phi_2 = k_1/(k_1+k_2)$  versus  $k_2/k_1$  in the limit of  $R/a=0$

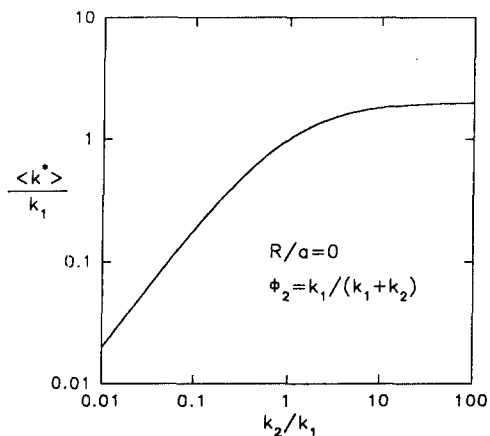


Fig. 18 Peak values of  $C_k$  at volume fractions  $\phi_2 = k_1/(k_1+k_2)$  versus  $k_2/k_1$  in the limit of  $R/a=0$

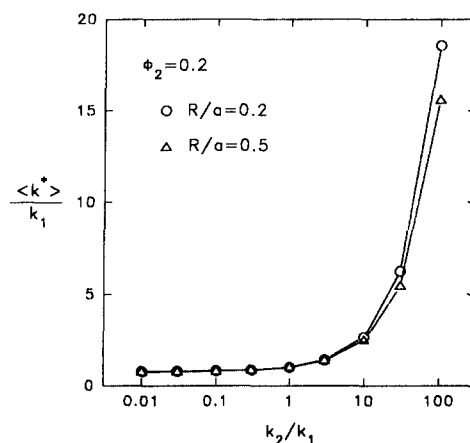


Fig. 19  $\langle k^*\rangle/k_1$  versus  $k_2/k_1$  for  $R/a=0.2, 0.5$  and  $\phi_2=0.2$  in the OS model

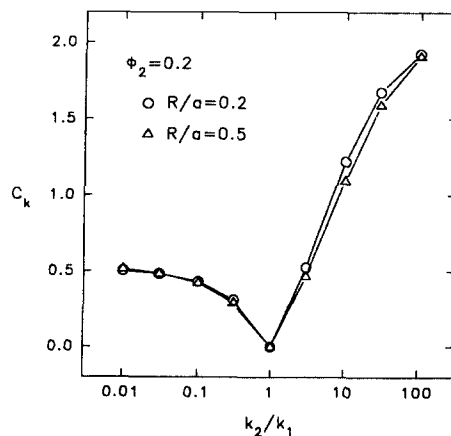


Fig. 20  $C_k$  versus  $k_2/k_1$  for  $R/a=0.2, 0.5$  and  $\phi_2=0.2$  in the OS model

**Table 7**  $\langle k^* \rangle / k_1$  and  $C_k$  for selected values of  $R/a$  and  $k_2/k_1$  in the OS model

$k_2/k_1$	$R/a=0.2$		$R/a=0.5$	
	$\langle k^* \rangle / k_1$	$C_k$	$\langle k^* \rangle / k_1$	$C_k$
0.01	0.779	0.504	0.745	0.516
0.03	0.787	0.483	0.756	0.485
0.1	0.805	0.431	0.785	0.423
0.3	0.855	0.309	0.845	0.291
1	1	0	1	0
3	1.38	0.526	1.36	0.467
10	2.65	1.22	2.46	1.09
30	6.25	1.68	5.43	1.59
100	18.6	1.93	15.6	1.91

11~13의 경향과 일치한다.

## 6. 결 론

일반적으로 비정형 혼합재의 유효이동성질은 소재의 미시적 특성길이척도에 비해 상대적으로 크기가 매우 커서 어가덕정리가 적용될 수 있는 소재시편을 대상으로 한다. 소재시편, 즉 관찰구역의 크기가 작아지면 관찰구역의 소재내 위치뿐 아니라 관찰구역의 크기에 따라서도 이동성질이 달라지게 된다. 이렇게 크기가 달라지는 이동성질의 변동은 그 자체가 혼합재의 새로운 이동성질의 의미를 갖는다. 본 연구에서는 대표적인 이동성질인 확산이동성질을 대상으로하여 확산이동성질의 변동을 통계학적으로 정규표준편차의 의미를 갖는 확산 조도  $C_k$ 로서 정의하고 관찰구역의 크기에 따라 달라지는 확산이동성질  $\langle k^* \rangle / k_1$ 과  $C_k$ 를 기존의 대표적인 3차원 미시구조 모델들인 HS, OS, PCS 모델들에 대하여 수치실험적으로 계산하였다. 수치실험에는 확산이동현상을 시뮬레이션하기에 적합한 경제적인 최초경과시간법이 사용되었다. 아울러 이론적 접근이 쉬운 간단한 1차원 슬라브 모델구조에 대한 결과도 제시되었다.

## 후 기

본 연구는 94년도 한국과학재단 핵심전문 연구비

지원(과제번호 941-1000-033-2)에 의한 결과이며 관계자 여러분께 감사드립니다.

## 참고문헌

- (1) Maxwell, J. C., 1873, *Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon, Oxford.
- (2) Lord Rayleigh, 1892, "On the Influence of Obstacles Arranged in Rectangular Order upon the Properties of a Medium," *Philosophical Magazine*, Vol. 34, pp. 481~502.
- (3) Einstein, A., 1906, "Eine Neue Bestimmung der Molekuldimensionen," *Annalen der Physik*, Vol. 19, pp. 289~306.
- (4) Hashin, Z., 1970, *Theory of Composite Materials in Mechanics of Composite Materials*, Pergamon Press.
- (5) Torquato, S., 1991, "Random Heterogeneous Media: Microstructure and Improved Bounds on Effective Properties," *Mechanical Engineering Review*, Vol. 44, pp. 37~76.
- (6) Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. and Bird, R. B., 1954, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, New York, Wiley.
- (7) 김인찬, 1996, "비정형 3상 소재의 유효전도율," 대한기계학회논문집(A) 제20권 제3호, pp. 910~932.
- (8) Hashin, Z. and Shtrikman, S., 1962, "A Variational Approach to the Theory of the Effective Magnetic Permeability of Multiphase Materials," *Journal of Applied Physics*, Vol. 33, pp. 1514~1517.
- (9) Bruggeman, D. A. G., 1935, "Berechnung Verschiedener Physikalischer Konstanten und Leitfaehigkeiten der Mischkoerper aus Isotropen Substanzen," *Annalen der Physik*, Vol. 24, 636.
- (10) Kim, I. C. and Torquato, S., 1991, "First Passage Time Calculations of the Conductivity of Continuum Models of Multiphase Composites," *Physical Review A*, Vol. 43, pp. 3198~3201.
- (11) Kim, I. C. and Torquato, S., 1990, "Determination of the Effective Conductivity of Heterogeneous Media by Brownian Motion Simulation," *Journal of Applied Physics*, Vol. 68, pp.

- 3892~3903.
- (12) Kim, I. C. and Torquato, S., 1991, "Effective Conductivity of Suspensions of Hard Spheres by Brownian Motion Simulation," *Journal of Applied Physics*, Vol. 69, pp. 2280~2289.
- (13) Kim, I. C. and Torquato, S., 1992, "Effective Conductivity of Suspensions of Overlapping Spheres," *Journal of Applied Physics*, Vol. 71, pp. 2727~2735.
- (14) Kim, I. C. and Torquato, S., 1993, "Effective Conductivity of Composites Containing Spheroidal Inclusions : Comparison of Simulations with Theory," *Journal of Applied Physics*, Vol. 74, pp. 1844~1854.
- (15) Lu, B. and Torquato, S., 1990, "Local Volume Fluctuations in Heterogeneous Media," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 93, 3452.
- (16) Gilbert, A., Vanneste, C., Sornette, D. and Guyon, E., 1987, "The Random Fuse Network as a Model of Rupture in a Disordered Medium," *Journal de Physique*, Vol. 48, pp. 763~770.
- (17) Beale, P. D. and Duxbury, P. M., 1988, "Theory of Dielectric Breakdown in Metal-Loaded Dielectrics," *Physical Review B*, Vol. 37, pp. 2785~2791.
- (18) Hong, D. C., Stanley, H. E., Coniglio, A. and Bunde, A., 1986, "Random Walk Approaches to the Two-Component Random-Conductor Mixture : Perturbing away from the Perfect Random Resistor Network and Random Superconducting-Network Limits," *Physical Review B*, Vol. 33, pp. 4564~4573.
- (19) Chandrasekhar, S., 1943, "Stochastic Problems in Physics and Astronomy," *Review of Modern Physics*, Vol. 15, pp. 1~89.
- (20) Torquato, S. and Kim, I. C., 1989, "Efficient Simulation Technique to Compute Effective Properties of Heterogeneous Media," *Applied Physics Letters*, Vol. 55, pp. 1847~1849.
- (21) Kim, I. C., 1993, "Efficient Simulation Technique to Compute Effective Transport Properties of Anisotropic Heterogeneous Media," *Proceedings of The sixth International Symposium on Transport Phenomena in Thermal Engineering*, pp. 1515~1519.
- (22) Lee, S. B. and Torquato, S., 1988, "Porosity for the Penetrable-Concentric-Shell Model of Two-Phase Disordered Media : Computer Simulation Results," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 89, pp. 3258~3263.