

Monte Carlo 모사, 그리고 분자동역학

이 글에서는 마이크로와 나노스케일의 해석에 사용하는 수치모사 방법인 직접모사 몬테 카를로 (Direct Simulation Monte Carlo : DSMC)방법과 분자동역학(Molecular Dynamics: MD)과의 관계에 대하여 설명한다.

글 · 유 동 훈 / 연세대학교 자동차기술연구소, 연구원
이 진 호 / 연세대학교 기계공학부, 교수
e-mail · jinholee@yonsei.ac.kr

몬테 카를로법의 정의

몬테 카를로법이란 시뮬레이션 테크닉의 일종으로서 구하고자 하는 수치의 확률적 분포를 반복 가능한 실험의 통계로부터 구하는 방법을 말한다. 확률변수에 의거한 방법이기 때문에, 1949년 Metropolis Uram이 모나코의 유명한 도박의 도시 Monte Carlo의 이름을 본따 명명하였다. 몬테 카를로법은 난수(random number)를 이용하여 문제의 근사해를 구해내는 모든 방법에 적용되는 일반적인 명칭으로서 구하고자 하는 수치의 확률적 분포를 반영

하는 난수의 발생을 통한 반복실험의 통계로부터 구하고자 하는 값을 얻어내게 되는 데 이러한 복잡한 설명보다는 아래의 예제를 통해서 더 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

0부터 1까지의 난수를 발생시켜 이를 각각 x 좌표와 y 좌표라 한다면 이 점은 위 그림의 정사각형 안에 찍히게 될 것이다. 예를 들어 컴퓨터를 이용하여 0~1 사이의 난수를 발생시킨다면 단정도(single precision) 부동소수를 사용하는 경우는 7자리, 배정도(double precision)라면 15자리까지 가능하므로 (0.0124825, 0.4223433)과 같이 두 개의 난수로 한 점의 좌표를 만들 수 있다. 난수를 빠르고 효율적으로 생성하는 것이 몬테카를로 방법의 중요한 인자이기 때문에 물리적 방법이나 표를 이용한 방법 대신에 컴퓨터 소프트웨어를 이용한 직접생성방법이 이용된다. 따라서 알고리즘이 난수발생에 결정적 영향을 미치며 만들어지는 난수들도 완전한 난수가 되지는 않는다. 이러한 난수 발생의 문제가 시스템적인 문제로 발전하는 것에 대하여 많은 연구가 이루어져 초기의 알고리즘을 개선시킨 모델이 사용되고 있으며 계속해서 만들어지고 있다. 가장 일반적이며 기초적인 난수발생 알고리즘은 합동방법(congruential method)이다. 즉, 초기

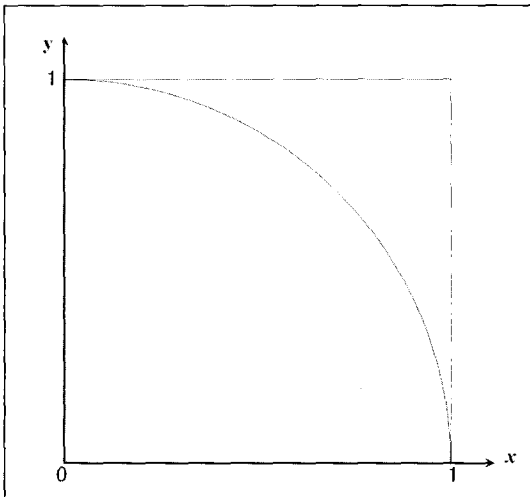
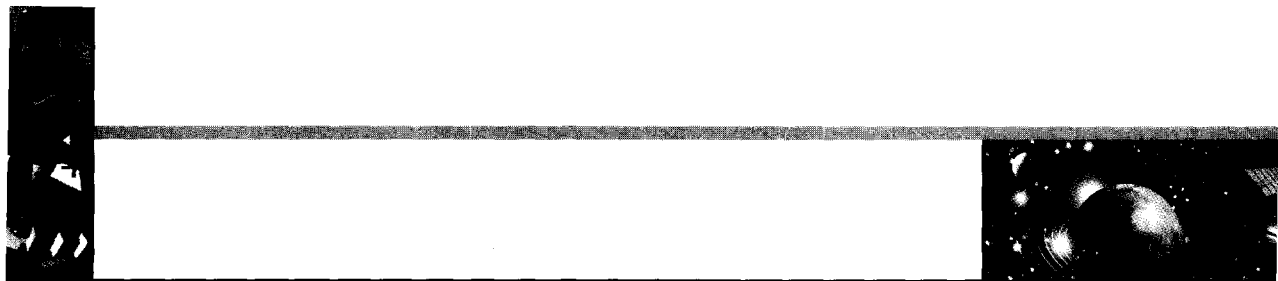


그림 1 몬테 카를로 방법을 이용한 π 의 계산



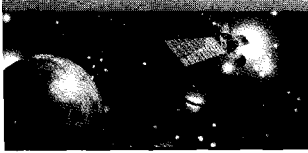
값 X_0 와 함께 상수 c 를 결정하여 다음과 같은 식으로 난수를 만들어 나아가게 된다.

$$X_n = (cX_{n-1} + a_1) \text{MOD } N_{\max} \quad (1)$$

여기서 MOD는 피제수를 제수로 나누었을 경우, 나누어 떨어지지 않고 남는 수를 구하는 연산자이며 N_{\max} 는 피제수로서 발생하는 난수의 주기를 결정하는 값이 된다. 32비트 선형합동알고리즘에서는 N_{\max} 의 값으로 $2^{32}-1$ 을 사용하며 단순한 만큼 상당히 현저한 상관관계를 가지기는 하나 간단하고 또한 높은 비트를 사용하면 특성을 개선할 수 있다. 혼합합동방법과 같이 두개의 난수를 발생시켜 첫 번째 발생시킨 난수들을 도표화하고 두 번째 난수로 이를 선정하는 알고리즘을 이용하여 난수들의 특성을 개선할 수도 있으며 이러한 난수들은 단일성 검사, 중복 M-집합 검사 등을 통해 유용도를 체크할 수 있다. 이러한 방법으로 점은 그림 속의 사각형 안에 위치하며, 어떤 점이 그림 속의 사분원 안에 위치할 확률은 단면적에 비례하므로 원의 단면적의 1/4가 된다. 따라서 위의 방법처럼 임의의 점을 정사각형 안에 찍었을 때 그것이 원안에 들어갈 확률은 $\pi/4$ 가 되며, 이러한 확률실험을 실제로 행하면 사분원안에 들어간 점의 수와 전체 점의 수의 비는 시행회수가 커지면서 큰 수의 법칙에 따라 점차 확률값, 이 경우는 $\pi/4$ 에 가까워지게 된다. 이러한 확률실험은 참값에서 벗어난 결과들의 분산(variance)이 시행회수의 제곱근에 반비례하기 때문에 시행회수가 커지면서 실험의 정확도가 높아 지지만 일정한 정확도 이상을 얻기 위해서는 엄청난 노력을 요하게 된다. 정사각형 안에 원호를 긋고 바늘을 무작위로 던져 쫓

힌 개수의 비로 원주율을 구한다는 것은 지금은 우습게 보일 수 있다. 왜냐하면 현재 원주율을 구할 수 있는 다양한 수학적 해법이 존재하기 때문이다. 전술한 바와 같이 많은 수의 실험을 바탕으로 통계 자료를 얻어 그 자료로부터 역산하여 어떤 특정한 수치나 확률분포를 구하는 방법을 몬테카를로 방법이라고 한다. 몬테 카를로 방법의 장점은 정확한 해법을 알 수 없는 상황에서 주어진 확률에 맞게 난수를 이용해서 최적의 수치를 찾아낼 수 있다는 점에 있다. 특성상 통계자료가 많을수록, 입력값의 분포가 고를수록 결과의 정밀성이 보장된다는 것을 알 수 있으며 이러한 이유 때문에 대부분 컴퓨터를 이용하여 분석을 하게 된다.

몬테 카를로 방법의 특징은 적용하기 쉽다는 점이다. 실제로 π 의 값을 정확히 구하기 위해서는 무한급수에 관한 지식과 오차 범위에 관한 지식 등 다양한 배경 지식을 바탕으로 알고리즘을 만들어 그 값을 계산해야 하지만, 몬테 카를로 방법은 그런 모든 절차와 관계없이 짧은 컴퓨터 프로그램 몇 줄만으로 쉽게 수치를 얻을 수 있다. 이런 장점은 이론적 배경만으로는 계산하기 어려운 수치들 - 예를 들면 복잡한 형태를 가진 표면에 빛을 비추었을 때의 반사광 분포, 복잡한 분자계의 화학적 특성 분석, 핵융합로에서 중성자 빔이 반응에 미치는 영향 등 - 을 직접 구할 필요가 있을 때 능력을 발휘할 수 있다. 때문에 컴퓨터를 이용한 분석이 발달한 최근에는 거의 모든 과학과 공학 분야에 걸쳐 몬테 카를로 방법이 광범위하게 사용되고 있다. 몬테 카를로 방법을 통한 해석에서는 입력값의 확률분포와 실제 현상의

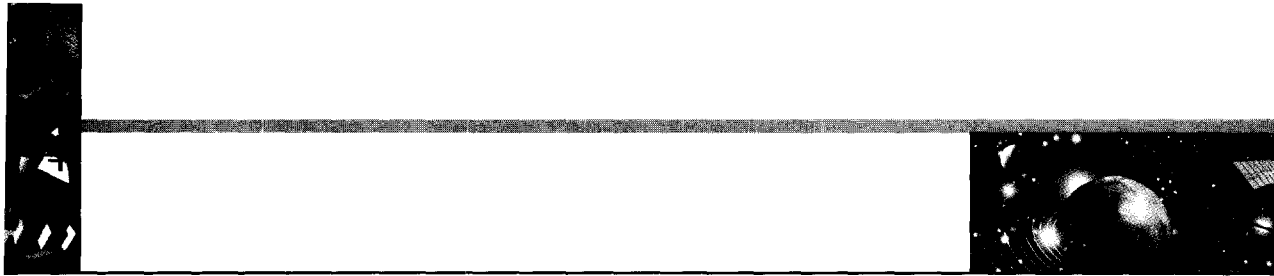


수학적 모델링이 정확해야 한다는 점에 주의하여야 하며, 난수의 분포가 분석에 큰 영향을 미치기 때문에 필요한 난수의 범위와 분포에 따른 올바른 난수 생성 함수에도 주의를 기울여야 한다.

입자기반 수치해석의 필요성

기존의 수치해석방법은 어떤 시스템을 기술하는 방정식을 구해서 그 방정식을 푸는 것인데 예를 들면 동판에서의 전도문제를 풀고자 한다면 푸리에의 전도방정식에 적절한 경계조건을 주고 문제를 풀면 동판에서의 온도분포나 열전달을 구할 수 있다. 이러한 경우 간단한 조건에서의 해는 수계산으로도 충분히 구할 수가 있으며 보다 복잡한 문제의 경우에도 대부분 이론적으로 해를 구해낼 수 있다. 유동의 지배방정식으로는 Navier-Stokes 방정식(이하 N-S방정식)이 사용되는데 전도방정식에 비해서 변수가 많으며 여러 개의 방정식이 서로 연계되어 있고 비선형이기 때문에 이론적으로 해를 구할 수 있는 경우가 극히 제한되어 있다. 따라서 실제 조건과 흡사한 복잡한 기기의 유동해석은 컴퓨터를 이용한 수치해석으로 근사해를 구하게 된다. 이러한 해법에 사용하는 방정식은 그 형태가 매우 복잡하고 많은 항들을 포함하고 있어 적절한 가정을 통해 중요성이 적은 항들을 소거하고 문제를 풀게 된다. 그러나 모든 항들을 포함하고 있는 방정식을 이용하여 해를 구할 수 있는 경우라도 이론적으로 어떤 상황에서도 사용할 수 있는 이론해를 구할 수 있다는 의미는 아니다. 실제로 N-S방정식을 만드는

과정에서도 어떤 가정이 들어가게 되는데 그것이 바로 연속체 가정이다. 즉, 분자들의 크기와 또한 충돌을 통해 서로의 운동량을 전달하는데 필요한 길이가 실제로 해석을 하고자 하는 영역의 길이에 비하여 아주 작기 때문에 유동의 물성치의 구배가 연속적으로 분포한다고 가정할 수 있다는 것이다. 초당 10cm의 속도, 가벼운 산들바람과 같은 정도로 공기가 흘러가는 경우를 생각해 보면 입자 하나하나의 평균 속도는 20°C, 1기압 정도의 조건에서 대략 500m/s 정도인데, 이는 평균속도의 5,000배에 해당하는 것이며 따라서 많은 수의 입자들의 속도를 평균하여 분산을 줄여야만 10cm/s라는 속도를 구할 수가 있다. 이러한 오차는 평균을 취하는 입자들의 수의 제곱근에 반비례하며 100만 개의 입자들로부터 평균을 취한다고 해도 오차는 0.5m/s에 달한다. 입자수밀도가 1cm³당 10¹⁹개 정도라면 μm 단위의 길이를 갖는 입방면체 안에 100만 개의 입자들이 들어가게 된다. 보통의 방 정도의 크기를 해석하는 문제라면 단방향의 길이는 수m이며 연속체 가정은 아무 문제 없이 적용될 수 있다. 이제 해석의 대상을 길이가 수μm인 공간으로 바꾸어 생각해 보자. 우선 전체길이 L에 대해서 입자의 수가 충분하지 않으며 해석을 적용하면서 물성치의 구배를 구하기 위한 평균을 적용할 대상의 길이인 δ를 어떻게 정해도 그 값은 엄청난 오차를 가지게 될 것이다. 따라서 이러한 유동장의 움직임을 모사하는데 N-S방정식이 잘 적용될 수 있을 것이라고 보기는 어렵다. 최근에 와서는 이러한 가정이 성립하지 않는 영역에서의 유동에 대한 해석이



필요하게 되었으며 또한 많은 연구가 이루어지고 있다. 즉 마이크로 전자기계 시스템(MEMS : Micro Electro Mechanical System)기술의 발전과 미세가공기술의 발달로 점차 마이크로 스케일에서 작동하는 기기의 종류와 수가 늘어나면서 이러한 영역에서의 해석의 필요성이 늘어난 것이다. 주위에서 흔히 볼 수 있는 하드디스크의 저장용량이나 CD보다 훨씬 많은 데이터를 저장할 수 있는 DVD의 저장용량은 모두 기록밀도에 관계가 있는데 같은 공간에 많은 양의 데이터를 정확하게 쓰고 읽기 위해서는 기록장치와 미디어간의 거리가 중요한 변수가 된다. 따라서 미디어와 기록장치인 레이저픽업간의 거리를 줄이는 노력이 계속 되어 왔고, 이러한 거리는 CD의 경우 수십 μm , HDD의 경우는 30nm 정도에서 작동하게 된다. 이외에도 기기의 소형화와 이에 따른 발열밀도 증가를 해결하기 위한 초소형 열교환기나 DNA칩 등에서 극미세유동을 전달하고 제어할 필요가 있으며 이러한 기기들에서의 해석은 기존의 N-S방정식을 이용하는 것이 적절치 않은 것이다. 위의 논의에서 보았듯이 입자들의 평균을 이용한 유동장을 구하는데 있어서 기체의 경우 기기의 크기가 분자가 충돌을 하기 전에 움직이는 평균거리인 평균자유행로(mean free path)와 같은 단위로 작아지면 N-S방정식의 성립 자체가 어려워지게 된다. 물론 유체의 경우에는 유체분자들간의 반접촉상태 때문에 D/L 이 0.1 정도만 되면, 곧 채널 폭이 유체분자 지름의 10배만 되면 N-S방정식을 쓸 수 있다고 생각할 수 있다. 이러한 D/L 을 수학적으로 정의하여 해석방

법의 적용가능성을 제시하는 것이 Knudsen 수이다. 평균 자유 행로와 특성길이의 비를 Knudsen수(이하 Kn)로 정의하며 다음과 같은 식으로 표시된다.

$$Kn = \lambda / L \quad (2)$$

지금까지의 설명에서 보았듯이 Kn수가 0에 가까울수록 연속체에 가까운 물체가 되며 Kn수가 0.1보다 작은 경우에는 N-S방정식이 적용가능하고 $0.1 < Kn < 0.3$ 인 영역에서는 천이영역으로 경계조건을 수정해주면 해석이 가능하다고 알려져 있다. Kn수가 그 이상인 영역은 N-S방정식을 이용한 해석이 성립하지 않으며 연속체 가정이 들어가지 않는 Boltzmann 방정식을 이용하여 해석을 해야 한다. 그러나 Boltzmann 방정식의 이론적인 풀이는 제한적인 조건하에서만 가능하며 일반적으로는 불가능하다. 따라서 입자기반의 직접모사방법을 이용하여 이러한 영역의 문제들의 해를 구하려는 연구가 이루어지고 있다. 이처럼 입자들을 이용하여 직접모사를 하는 방법으로는 다음에 설명할 분자동역학과 몬테 카를로 직접모사방법이 있다. Kn수가 1보다 큰 값을 갖게 되는 경우는 우선 분자인 λ 값이 큰 경우가 있다. λ 가 수m에 달하는 우주 공간과 같은 진공상태에서는 분자간의 평균거리가 길어지고 이에 따라 평균자유행로가 길어져 Kn수가 커지게 되는 것이다. 반대로 분모인 L이 작아져도 Kn수는 커지게 된다. 곧 일반적인 대기압과 온도조건에서도 시스템의 특성길이 L이 수 μm 또는 수nm로 작아지면 상대적으로 Kn수가 커지게 되어 희박기체로 가정하고 DSMC방법을 이용하여 해석할 수 있다.

DSMC와 MD

DSMC방법은 Direct Simulation Monte Carlo방법의 약자로서 분자들의 움직임을 시뮬레이션하는 수치해석방법의 일종이다. 직접모사란 물질을 구성하는 분자나 입자들의 움직임을 직접 모사하여 그로부터 거시적인 유동이나 열전달을 해석하는 방법을 의미한다. DSMC방법은 몬테 카를로라는 이름이 들어가는 것으로부터 알

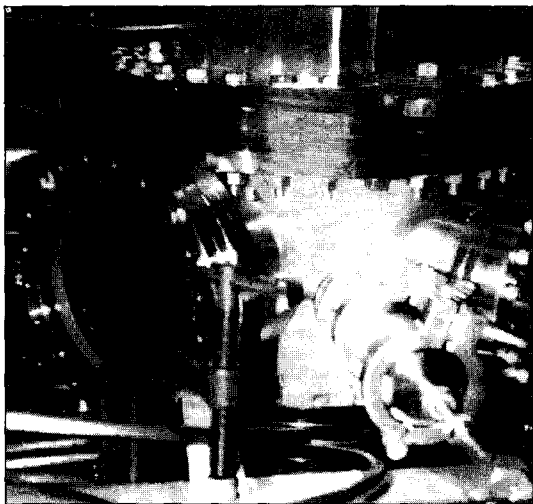


그림 2 기준 단위 반응로

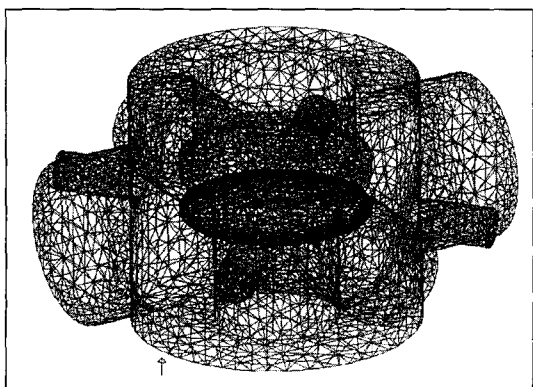


그림 3 기준 단위 반응로 격자

수 있듯이 난수를 이용한다. 난수가 어떻게 이용되는지 살펴보기 위해서는 분자동역학(MD : Molecular Dynamics) 방법과의 차이를 아는 것이 중요하므로 먼저 분자동역학 방법에 대해서 간략히 알아보도록 한다. 분자동역학은 분자들의 움직임을 뉴턴 방정식에 따른 운동으로 모사하여 이들의 움직임으로부터 원하는 유동장을 해석해 내는 방법이다. 이러한 입자들의 운동을 해석하는 데 있어서 가장 중요한 것은 이러한 운동량의 변화를 일으키는 힘의 계산이고 이것은 입자들 간에 작용하는 인력(attractive force)과 척력(repulsive force)이 가장 기본적인 작용력이 되는데 수많은 입자들이 운동하면서 서로간의 상대적 거리가 변화하면 이러한 힘도 바뀌게 된다. 따라서 입자들간의 상호작용력을 고려하면서 적분을 통해서 이동경로를 구해야 하는데 여기에 입자가 극성을 띤 다원자분자가 되면 분자간의 거리뿐 아니라 그 상대적인 방위나 회전력 등 계산해야 할 수치는 더욱 많아지게 된다. 척력은 아주 가까운 거리에서만 작용하지만 인력은 훨씬 넓은 범위에서 작용하므로 어느 정도 거리를 기준으로 인력의 영향을 배제할 것인가를 결정하고 분자들간의 상호거리를 계속 계산하면서 움직임을 모사해야 하는 분자동역학은 엄청난 수치부하로 인하여 실제 사용되는 기기의 수치해석에는 거의 사용하기 어렵다. 기체의 해석, 그것도 희박기체의 해석에 분자동역학을 이용하는 것에 대하여 생각해 보면 분자는 다른 분자와 충돌하지 않고 아주 먼 거리를 가며 또한 다른 분자들과의 인력도 미미한데, 이러한 과정을 거의 존재하지 않는

다른 분자들과의 인력을 고려하면서 적분해 나아간다는 것은 낭비가 아닐 수 없다. 이러한 단점을 극복하기 위해 Bird⁽¹⁾가 DSMC방법을 고안해 처음에 우주공간과 같이 입자들의 밀도가 매우 낮은 곳의 해석에 사용하였다. 밀도가 매우 낮아지면 분자들이 충돌하지 않고 이동하는 평균거리인 평균자유행로 λ 가 아주 길어지며 우주선 외벽에서의 현상에 대한 해석은 희박기체라고 가정하고 해석하면서 DSMC방법이 만들어지게 되었다. DSMC에서는 일단 계산간격인 Δt 를 분자들의 평균충돌시간보다 작게 한다는 전제조건하에 분자들의 이동과 충돌이 완전히 분리되어 각각 계산이 된다. 충돌이 일어날 입자들의 선정이나 충돌여부, 충돌후의 입자들의 방향전환에 대하여 확률에 의거한 난수를 발생시켜 결정하게 된다. 이러한 DSMC방법은 우주공간에서의 서틀 외부 유동장 해석 등에서 성공적이었으며 급속한 컴퓨터 연산속도의 발전으로 일반적인 산업용 기기에서의 적용가능성도 검토되고 있다. 그림 2는 DSMC방법을 적용하여 실제적인 기기에서의 해석을 하기 위한 argon가스의 플라즈마 반응로의 기준셀을 나타낸 것이다. 그림 3은 이를 모델링하기

위한 격자계를 나타내며 초저압인 경우에 DSMC방법을 이용하여 해석을 하게 된다. 마이크로 기기에서는 우주공간에서와는 반대로 평균자유행로에 비해 특성길이가 작아져서 상대적으로 Knudsen수가 커지고 희박기체와 같은 거동을 하게 된다. 우주공간에서의 일반적인 크기의 물질과 일상공간에서의 마이크로기기는 이처럼 눈으로 보이는 차이와 달리 공통점을 가지고 있으며 따라서 DSMC방법을 마이크로기기의 해석에 적용하게 되는 것이다.

마이크로시스템에서의 DSMC

마이크로 유체공학(micro fluidics)은 MEMS장비 내의 유동에 대한 정밀한 조절과 측정의 중요성이 증대되면서 최근 각광을 받고 있는 분야이다. 이는 앞서 설명했듯이 기기의 소형화로 인하여 미세적인 관점에서의 접근의 중요성이 커졌으며 실험장치 제작의 어려움과 측정장비의 설치문제로 변수에 대한 정확한 측정결과를 얻어낼 수 있는 실험방법에 대한 기준이 정해져 있지 않기 때문이다. 직경이 수십 μm 에 불과한 마이크로관 내에 센서를 장치하여 유속을 측

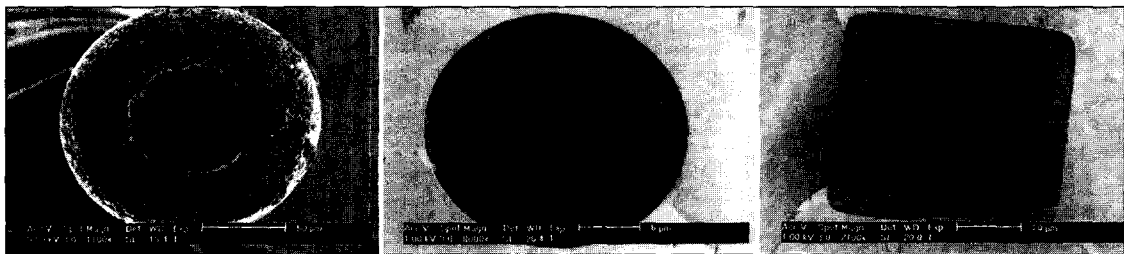
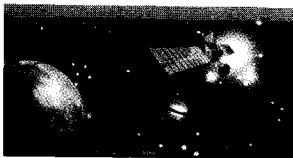


그림 4 (a) 내경 75 μm 인 스테인리스강 마이크로관의 SEM단면사진 (b) 내경 22 μm 인 용융실리카(fused silica)마이크로관의 SEM단면사진 (c) 수력내경 50 μm 인 용융실리카 정사각형관의 SEM단면사진⁽²⁾



정하는 것은 설치 자체의 곤란함과 유동에 대한 영향을 고려하지 않을 수 없고 광학장비를 이용한 관찰도 추적입자 선정의 어려움이 있다. 그림 4에 나와 있는 마이크로관에 대한 Judy 등⁽²⁾의 실험도 관의 입출구에서의 압력을 측정하는 데 그쳤다. 이러한 어려움을 극복하기 위해 수치해석을 이용한 마이크로시스템 연구도 이루어지고 있으며 DSMC방법도 그 중 하나이다. 앞서 설명한 Kn수의 증가로 마이크로 시스템은 희박기체로 가정할 수 있으며 따라서 DSMC방법을 이용하여 해석하는 것이 가능한 것이다. DSMC방법에서 사용하는 입자는 분자1개가 아니라 $10^6 \sim 10^{17}$ 개의 실제 분자들을 대표하는 입자로 놓고 해석을 하게 된다. 따라서 그 입자의 속도는 하나의 벡터가 아니라 속도분포로 나타나게 된다. 이러한 분포를 갖는 대표입자의 거동이 어떤 방향으로 이루어지는가를 모사하는 데 있어서 분포를 결정하면 그 중에서도 어떠한 거동을 할 것인가는 난수를 이용한 판정으로 이루어지게 된다. 예를 들어 초기의 입자들의 속도분포를 결정한다면 평형정지상태의 입자들의 분포인 맥스웰분포로 이를 가정하고 입자하나 하나의 속도는 그러한 분포를 갖도록 무작위로 결정된다. 곧, 예상속도를 기준으로 속도를 무작위로 결정하는데 그 확률분포가 맥스웰 분포를 갖도록 하는 것이다. 그 방법은 앞에서 설명한 0~1 사이의 값을 균일하게 갖는 확률분포로 산출한 난수를 역함수변환으로 맥스웰함수의 형태로 바꾸는 것인데 이 과정에서 역함수가 존재하지 않기 때문에 다른 방법을 이용하여 정확한 분포를 맞추게 된다. 분포된 입자들의 거동은

이동과 충돌을 거듭하면서 변화하게 된다. 입자들의 충돌 또한 충돌하는 두 입자의 선정을 무작위로 행하며 실제로 충돌을 할 것인가 하지 않을 것인가 그리고 충돌후의 궤적은 어떻게 변화할 것인가를 적절한 모델링을 통하여 이루어낸 확률분포에 근거하여 모사하게 되는 것이다. 이러한 입자들의 분포변화과정을 적절한 확률분포로 설정하여 모사하게 되면 주어진 조건을 만족하는 유동의 변화형태를 모사하게 되는 것이다.

DSMC방법과 MD와의 연계

DSMC방법과 MD와의 관련을 마이크로관에서의 2상유동의 해석방법에서 살펴보기로 하자. 기존의 2상유동 연구방법은 이론적인 연구와 함께 실제유동현상의 예측은 실험적 결과들의 분류와 적절한 상관관계식의 적용 위주로 이루어져 왔다. 마이크로관에서의 2상유동 해석을 위한 적합한 방정식은 없으며 따라서 미분방정식의 수립과 해석을 행하는 기존의 수치해석방법으로는 이를 해결하기가 어렵다. 실험적인 연구는 Stanley⁽³⁾ 등이 수력직경이 $56\mu\text{m}$ 에서 $256\mu\text{m}$ 인 사각 알루미늄 마이크로관을 이용하여 실험을 행하였고 결과는 압력강하가 기존의 2상유동에 대한 준실험식으로 예측된 값보다 작게 나타났다. Peng 등⁽⁴⁾은 마이크로관에서의 증발현상을 관찰했으며 기포의 발생이 나타나지 않는 것에 대하여 이론적으로 마이크로관의 직경이 작으면 이로 인한 수역학적 힘(hydrodynamic force)이 커져서 높은 열유속에서도 기포가 발생하지 않는다고 해석하였다. 액상에서는 분

자간의 인력이 매우 크며 또한 희박가스로 가정할 수가 없고 분자의 속도분포도 단일하게 나타나지 않아서 액상 유체의 해석에는 DSMC방법을 적용할 수가 없다. 이에 MD를 이용하여 액체와 기체간의 상변화를 해석하는 연구가 진행되고 있는데 Takaharu 등⁽⁵⁾이 argon분자들에 대하여 MD를 이용한 상변화 연구를 행하였고 그 대략적인 결과를 그림 5에 도시하였다. MD는 계산부하가 크기 때문에 해석높이를 수십nm로 제한했으며 입자들이 응집되어 cluster를 이루는 곳이 액체로 상변화가 일어난 것으로 해석하여 입자가 고체상에 충돌할 때 가지고 있는 충돌면에 수직인 성분의 에너지량이 응축과 증발에 연관이 있

다는 결과를 보였다. Takaharu 등은 MD를 이용한 연구결과를 응용하여 상변화 경계면에서 입자들이 응축과 증발을 행하는 비정상상태에서의 물질전달을 DSMC방법을 사용하여 1차원으로 해석하여 비정상상태에서의 입자들의 응축계수와 증발계수의 상관관계식을 구할 수 있다. DSMC방법으로 관 내의 2상유동을 해석하는 경우에 상변화경계면에서 응축과 증발이 일어나는 과정을 모사할 적절한 수학적 모델이나 확률분포가 필요하며 이러한 기반을 MD 결과로부터 유용할 수 있다. 곧 입자들의 운동에너지와 응축확률과의 상관관계식, 증발하는 입자들의 속도분포 등을 위의 MD방법으로 구한 결과를 이용하여 만들 수 있고 이러한 방법으로 MD만으로는 해석이 곤란한 큰 범위의 해석에 DSMC방법과 결합하여 복잡한 유동해석에 응용할 수 있다.

맺음말

가속화되는 시스템의 집적화와 소형화는 증가하는 그 수요와 함께 기존의 기술과 이론이 적용되지 않는 새로운 영역에서의 연구의 필요성을 불러왔으며 이를 충족할 새로운 연구방법으로서 입자기반의 직접모사 방법인 DSMC에 대하여 알아보았다. DSMC는 MD에서 이루어진 나노단위의 연구를 이용한 모델링과 확률분포에 기반한 통계학적 지식을 이용하여 기존의 마이크로 영역의 기기에 적용할 수 있는 수치해석방법이며 추후 적용범위를 확장하여 실제의 마이크로기기의 해석에 사용할 수 있을 것이다.

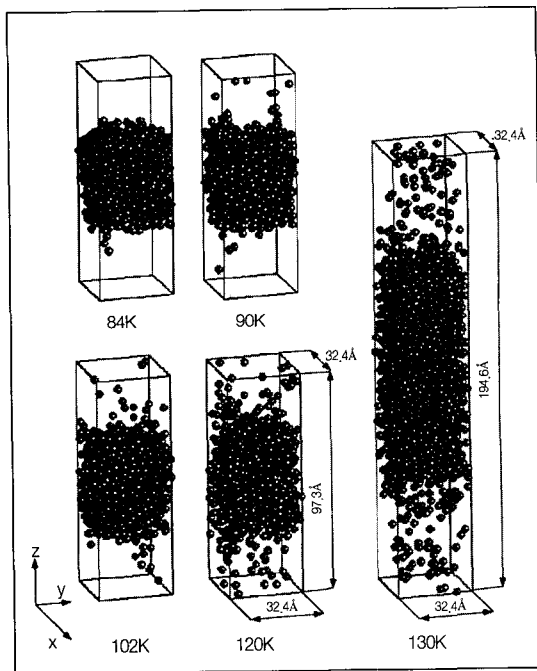


그림 5 기체-액체 계면에서의 응축/증발 계수 계산을 위한 MD시뮬레이션 결과⁽⁵⁾

참 고 문 헌

- (1) Bird, G. A., 1994, "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows", Oxford University Press, New York.
- (2) Judy, J., Maynes, D. and Webb, B.W., "2002, Characterization of Frictional Pressure Drop for Liquid Flows Through Microchannel", "International Journal of Heat and Mass Transfer", Vol. 45, pp. 3477~3489.
- (3) Stanley, R. S., Barron, R. F. and Ameal, T. A., 1997, "Two-phase Flow in Microchannels", ASME DSC-Vol. 62, HTD-Vol. 354, Microelectro-mechanical Systems(MEMS), pp. 143~152.
- (4) Peng, X. F., HU, H. Y. and Wang, B. X., 1998, "Boiling nucleation in liquid flow in microchannels, Int. J. of Heat and Mass Transfer", Vol. 41, No. 1, pp. 101~106.
- (5) Tsuruta, T., Tanaka, H. and Masuoka, T., 1999, "Condensation/ Evaporation Coefficient and Velocity Distributions at Liquid-vapor Interface, Int. J. of Heat and Mass Transfer," Vol. 42, pp. 4107~4116.

기계용어 해설

스턴-볼머(Stern-Volmer) 관계식

1919년 스텐과 볼머에 의해 개발된 관계식으로서 기체의 퀘칭에 의한 형광물질의 방사량의 변화와 압력과의 관계를 밝힌 식이다. 그들은 진공에서의 형광빛의 밝기(I_0)와 현재 밝기(I)의 비는 정확히 압력(p)에 비례함($I_0/I = 1 + Kp$, K 는 상수)을 밝혔으며, 이 관계식은 압력감응 페인트의 기본원리가 되고 있다.

압력감응 페인트(Pressure Sensitive Paint)

압력에 의하여 빛의 밝기가 변하는 페인트, 주로 백금 계열의 형광물질로 구성되며, 일정한 파장의 빛에 의해 여기되어 다른 파장의 빛을 방사한다. 이 때 산소와 반응하게 되면 산소 퀘칭에 의해 빛의 방사량이 변화한다. 공기 중에 산소의 분압은 일정하므로 빛의 방사량의 변화를 스텐-볼머(Stern-Volmer) 관계식을 통하여 공기의 압력으로 환산할 수 있다.

이미지 등록(Image Registration)

일반적으로는 영상처리 과정에 나오는 개념으로 두 장의 이미지의 변화를 감지하여 보정하는 과정을 의미한다. 압력감응 페인트를 이용하여 압력을 측정하고자 할 때, 두 장의 이미지의 비를 사용하여 압력을 얻는 과정에서 두 이미지 사이의 움직임을 보정하여 주어야 하기 때문에 이미지 등록이 필수적이다.