

몬테카를로 방법을 이용한 기체로 채워진 평판 사이의 마이크로 역열전달 해석[§]

김 선 경^{*†}

* 서울과학기술대학교 제품설계금형공학과

Inverse Heat Transfer Analysis Using Monte Carlo Method in Gas-Filled Micro-Domains Enclosed by Parallel Plates

Sun Kyoung Kim^{*†}

* Dept. of Product Design Manufacturing Engineering, Seoul National University of Science and Technology

(Received May 19, 2010 ; Revised April 13, 2011; Accepted April 13, 2011)

Key Words : Inverse Heat Transfer(역열전달), Direct Simulation Monte Carlo(DSMC), Simulated Annealing (모사 어닐링)

초록: 이 연구는 기체로 채워진 1 차원 평행 공간에서 경계 온도를 추정하는 역해석 기법을 제안한다. 평판사이의 거리는 마이크로 이하의 크기부터 1 밀리미터 까지를 고려한다. 한쪽 경계에서는 온도와 열유속이 동시에 활용 가능하지만 다른 경계에서는 아무런 측정이 불가능한 상황을 가정한다. 한쪽 경계의 온도는 알려진 열유속과 온도를 이용하여 거꾸로 결정하여야 한다. 이 연구는 이 온도를 몬테카를로 모사를 통하여 산정하는 절차를 제안하였는데 직접 문제는 DSMC 를 사용하고 역문제는 모사 어닐링을 이용한다.

Abstract: This study proposes an inverse method for estimating the boundary temperature in a gas-filled, one-dimensional parallel domain enclosed by parallel plates. The distance between the plates is considered submicron to one mm. In the current method, it is assumed that the conditions of both heat flux and temperature are simultaneously applicable to one boundary, while no conditions are applicable to the other boundary. The temperature on one of the boundaries should be inversely determined from the known temperature and heat flux on the other boundary. This study proposes a procedure for estimating the unknown boundary temperature through Monte Carlo simulation. Both the forward and inverse problems employ the Monte Carlo approach. The forward (direct) problem is solved by using the direct simulation Monte Carlo while the inverse solution is obtained by the simulated annealing.

1. 서론

최근의 기계공학 시스템의 미세화 추세에 따라 마이크로 혹은 나노 크기 영역에서 열전달 해석의 요구는 증가하고 있다. 그러나 이러한 미세 영역에서의 열전달에 대한 실험적 접근은 측정의 어려움으로 상당히 제한된다. 온도나 열유속의 측정이 센서의 접근이 불가하거나 미세형상으로 인

해 센서 자체가 열전달 현상에 영향을 크게 미쳐 측정이 어렵게 된다. 따라서 이러한 제약이 심한 상황에서 얻어진 측정 정보는 최대한 활용이 되어야 한다. 최대한 열전달 정보를 활용하기 위한 방법으로 역열전달 해석(inverse heat transfer analysis)은 매우 유용한 수단이 된다.^(1~3) 예를 들면, 경계에서의 측정만을 활용하는 역열전달 문제에서는, 측정이 가능하지 않은 어떤 경계에서의 열적 조건이 두 가지 이상의 조건이 측정 혹은 관찰 가능한 다른 경계에서 얻어진 중첩된 정보를 활용하여 산정된다.^(4~6) 본 연구에서는 이와 같은 상황을 다루고자 한다.

유한한 폭을 가진 기체로 채워진 1 차원 공간

§ 이 논문은 2010년도 대한기계학회 마이크로/나노공학부문 춘계학술대회(2010. 5. 7., KIMM) 발표논문임.

† Corresponding Author, sunkkim@snut.ac.kr

© 2011 The Korean Society of Mechanical Engineers

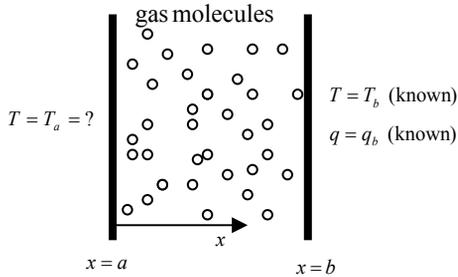


Fig. 1 Analysis model

을 대상으로 해석을 수행하기로 한다. 이 영역은 일정 거리가 떨어진 고정된 두 평판 사이의 공간으로 정의된다. 하나의 경계에서는 온도와 열유속이 모두 측정 가능한 반면 다른 경계에서는 어떠한 측정도 불가능한 상황을 생각해 보자. 실제로 많은 공업적 응용에서 이런 상황이 발생하는데 이는 전형적인 1 차원 역열전달 문제의 경우이다. 예를 들어, 마이크로 채널을 가로질러 일어나는 열전달 문제나, 이중창 내부에서의 열전달, 고체 표면간의 접촉 경계 등, 공기로 채워진 층이 존재하는 많은 문제들과 이 해석은 연관된다. 최근의 열전달 연구 및 응용에서 이러한 역해석의 필요성은 강화되고 있다. 마이크로 혹은 나노 크기의 고체 구조물에서의 역열전도는 해석된 사례가 있으나^(7,8) 기체로 채워진 공간에서의 해석 사례는 찾아보기 어렵다. 직접 문제의 경우에는 주로 채널에서의 유동 해석에 집중되어 있다.

두 평판 사이의 거리는 이 연구에서 가장 중요한 기하학적 변수로 문제의 핵심적인 특성 길이이다. 여기서 고려하는 이 거리의 범위는 연속을 가정할 수 있는 영역부터 경계에서 온도 도약이 있는 1 미크론 이하의 영역까지 이다.

이 연구에서의 직접 문제는 마이크로 및 나노 크기 영역에서 기체 운동으로부터 열전달 계산을 수행하여야 한다. 연속 영역에서 사용하는 에너지 방정식으로는 이 문제를 다룰 수 없다. 따라서, 직접 문제에서는 난수 추출된 기체 분자들이 전체 기체 시스템을 대표하게 하는 몬테카를로 방법을 이용하여 기체 역학을 직접 모사하는 DSMC(direct simulation Monte Carlo)를 사용하기로 한다.⁽⁹⁾ DSMC 는 기체 역학 분야에서 특히 시스템의 특성 길이에 비하여 분자의 평균자유행로가 큰 문제에서 검증된 능력을 보여 주었다. 특히, 최근에는 DSMC 는 마이크로 채널의 기체 유동 해석에 널리 활용되었다.⁽¹⁰⁻¹⁵⁾

DSMC 로부터 구해진 해는 결정론적이라기 보다는 추계론적으로 난수 추출된 분자의 비율에 따라

해의 변동폭이 달라진다. 이것이 이 문제의 역해석에 있어서 가장 어려운 부분이다. 직접 문제로부터 얻어진 해는 매우 큰 난수 오차를 가지게 되는데 이는 보통의 역해석에서 측정값에 존재하는 오차와는 별개이다. 이 어려움을 효과적으로 해결하며 이 역해석 과정을 수행하기 위하여 몬테카를로 방식의 최적화 기법인 SA(simulated annealing)을 사용하기로 한다.⁽¹⁶⁾ 통상적인 역열전달 해석에서는 보통 민감도 해석(sensitivity analysis)을 통하여 역해석이 수행되는데 이는 직접문제의 해가 결정론적으로 구하여져 미분이 안정적으로 구해질 수 있음을 가정하고 있다.⁽⁴⁾ 그러나 DSMC 에서는 해의 통계적 변동이 필연적이다. 해의 변동폭은 계산에 참여하는 분자의 수를 늘리고 계산의 반복을 통하여 평균을 내면 줄어들게 되나 계산 시간은 역해석을 비현실적으로 만드는 수준으로 증가하게 된다. 따라서, 미분에 의존하지 않는 기법이 필요하며 SA 를 사용하면 이러한 제약을 극복하고 합리적인 계산시간으로 역해를 구할 수 있을 것으로 판단하였다.

이러한 SA 등의 몬테카를로 기법을 이용한 역해석 기법은 이미 잘 정립되었다.⁽²⁾ 그러나, 역열전달에 적용한 경우는 많지 않으며 일부 역열전도에 사용한 사례들이 있다. HajiSheiki and Buckingham 는 랜덤워크(random walk)기법⁽¹⁷⁾을 역열전도 해석에 적용하였다.⁽¹⁸⁾ 보다 최근에는 Zabarar 가 Bayesian 방법을 역열전도에 적용하는 일반적인 방법을 제시한 바 있다.⁽¹⁰⁾ 이들 해석 사례들에서는 성공적인 결과를 얻었으나 결정론적으로 해가 얻어지는 열전도 문제에 대해 계산 시간이 다른 방법들에 비하여 오래 걸리는 이러한 방법들의 사용이 크게 공감을 얻기는 어렵다.

요약하면 이 연구에서는 강제 유동 없는 기체로 채워진 두 평판을 가로질러 일어나는 열전달 문제의 역해석을 수행한다. 직접문제는 DSMC 를 사용하고 역문제는 SA 를 사용하며 구체적인 공식화는 아래에 전개된다.

2. 공식화와 기법

2.1 문제 정의

역문제는 $x = b$ 에서 온도, T_b 와 열유속, q_b 이 측정값으로 알려진 경우에 $x = a$ 에서의 미지의 온도, T_a 를 결정하는 것으로 정의 된다. 따라서 직접문제에서는 아래의 식과 같이 열유속이 시간의 함수로 두 온도 경계조건에 따라 변화하는 것을 계산하여야 한다.

$$q_b = g_o(t; T_a, T_b) \quad (1)$$

이 문제에서는 경계를 통과하는 질량 전달이 없는 것으로 본다. 이 과정에서 위치에 따른 온도 분포 또한 계산하게 된다. 영역의 특성길이인 채널의 폭, L 은 $b-a$ 로 계산되며 이는 Fig. 1에 보인 바와 같다. 계산시간이 매우 오래 걸리므로 미지의 온도는 아래와 같이 인자화 되어야 한다. 인자 벡터, \mathbf{m} 을 도입하면 아래의 수식으로 표현되며 역문제는 \mathbf{m} 을 결정하는 것이 된다.⁽²⁾

$$T_a = f(t; \mathbf{m}) \quad (2)$$

이를 이용하여 측정되는 열유속을 다시 표현하면 아래와 같다.

$$q_b = g(t; f) \quad (3)$$

2.2 DSMC(Direct simulation Monte Carlo)

여기서 해석하여야 하는 강제 대류가 없는 평판 사이의 기체 열전달은 DSMC를 사용하여 해석한다. 이 방법은 밀도가 희박한 영역이나 특성길이와 평균자유행로의 크기가 유사해 지는 영역의 기체 역학에서 널리 사용된다. 짧은 시간 동안은 분자의 운동과 충돌이 독립적으로 다루어질 수 있다는 가정으로부터, DSMC는 전체 시스템을 대표하는 추출된 분자 집합을 수치 모사 중 추적한다. 각각의 추출된 분자들은 매우 많은 실제 분자를 대표하기 때문에 DSMC에서 계산 결과는 상당히 큰 통계적 오차를 갖게 되는데 이는 전체 입자수의 1/2 승의 역수에 비례한다.⁽¹⁹⁾ 이 논문에서는 DSMC 해석 과정이 매우 상세하게 잘 알려져 있으므로 전체 과정을 전개하지는 않는다.⁽⁹⁾

기체 운동 모사를 위한 분자 모델에서, 평균속도, \mathbf{v}_o 로부터의 벗어남으로 정의되는 분자의 열적 속도(thermal velocity), $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{v}_o$,가 사용된다. 이 때 온도는 병진 운동과 회전 운동에 따른 온도의 가중 평균으로 구해 진다.

$$T = (3T_{tr} + \zeta T_{rot}) / (3 + \zeta) \quad (4)$$

여기서 $3RT_{tr} = \overline{\mathbf{v}'^2} = \overline{\varepsilon_{tr}}/m$ 과 $0.5\zeta RT_{rot} = \overline{\varepsilon_{rot}}/m$ 임을 고려하라. R 은 기체 상수이고 ζ 회전운동의 자유도이다. 회전 에너지 $\overline{\varepsilon_{rot}}$ 는 $\overline{\varepsilon_{rot}} = -\ln(R_f)KT$ 로 계산되며 R_f 는 0에서 1 사이의 난수이다.

경계에서 온도 조건을 부과하는 것과 열유속을 계산하는 것은 직접 문제에서 가장 중요한 부분이

다. 경계에서 분자들은 확산적으로 반사 된다. 적용된 경계 조건에 따라 분자들의 열적 속력들을 계산하고 각 방향 별로의 속도 벡터를 결정 한다. 그런 후 분자들은 표면을 주어진 속도로 떠난다. 분자 하나에 의해 운반되는 에너지는 $\varepsilon = \varepsilon_{tr} + \varepsilon_{rot}$ 로 계산되고, 시간 구간 $t_c \leq t < t_c + \Delta t$ 동안 n 개의 분자가 $x = b$ 에서 경계와 충돌할 때 열유속은 아래의 식으로 계산된다.

$$q_b = (F_N / \Delta t \Delta x) \sum_{i=1}^n [\varepsilon_i(t_c + \Delta t) - \varepsilon_i(t_c)] \quad (5)$$

여기서 F_N 은 DSMC에서 하나의 분자에 의해 대표되는 실제 분자의 수이다. 즉, DSMC에서 하나의 분자가 충돌한다면 실제로는 F_N 개의 분자가 주어진 시간 동안 충돌한다는 뜻이다.

2.3 역문제

시간 영역을 일정 간격 Δt 로 차분하면 $t_{i+1} = t_i + \Delta t$ 이 되고 이때 $i = 0, \dots, N_t - 1$ 이다. 수치 모사된 열유속은 차분화된 시간에서 $d_i = g(t_i; \mathbf{m})$ 로 표현된다. 수치 모사된 열유속과 측정된 열유속을 각각 \mathbf{d} 와 \mathbf{d}_o 로 정의하자. 벡터 형태로 기술하면 \mathbf{d} 는 아래와 같다.

$$\mathbf{d} = \mathbf{g}(\mathbf{m}) \quad (6)$$

여기서 \mathbf{g} 는 $g(t_i; \mathbf{m})$ 와 같다. 역해석에서 기본적인 규칙은 아래의 수식을 최소화하는 \mathbf{m} 을 찾는 것이다.⁽²⁾

$$S(\mathbf{m}) = 0.5 \|\mathbf{d} - \mathbf{d}_o\|_D^2 \quad (7)$$

수식의 형태는 일반적인 역열전달 해석의 경우와 유사하나 자유 분자 운동의 경우이므로 열유속의 변동이 매우 크다. 이를 줄이기 위해서는 F_N 값을 크게 하거나 반복 계산하여 평균하여야 한다.

본 연구에서는 계산 시간을 크게 늘리지 않으면서도 이 문제를 극복하기 위해 이동평균을 이용하기로 한다. 측정값의 표준편차가 σ 로 주어질 때 일반적인 역해석에서 사용하는 기준인 $\|\mathbf{d} - \mathbf{d}_o\|_D^2 < \|\sigma(\mathbf{d}_o)\|^2$ 는 이 해석에서는 적용하기 어렵다. 그 이유는 실제로 계산에서의 변동이 측정치의 오차보다 더 크기 때문이다. 결과적으로 계산에서의 기준은 아래의 식이 적절하다.

$$\|\mathbf{d} - \mathbf{d}_o\|_D^2 < \|\sigma(\mathbf{d})\|^2 + \|\sigma(\mathbf{d}_o)\|^2 \approx \|\sigma(\mathbf{d})\|^2 \quad (8)$$

주어진 측정치 하에서 가장 공산(likelihood)이

큰 \mathbf{m} 을 산정하는 것을 목표로 하고 공산 함수 (likelihood function)를 아래와 같이 정의 한다.

$$L(\mathbf{m}) \propto \exp[-S(\mathbf{m})/\sigma(\mathbf{d})^2] \quad (9)$$

이 식은 \mathbf{m} 이 얼마나 측정된 값을 잘 설명하는지의 척도가 된다. 이러한 해를 최대공산해 (maximum likelihood solution)라 부른다.^(2,16) 이 연구에서는 이러한 해를 SA(simulated annealing)를 사용하여 찾기로 한다.⁽²⁰⁾ 사후 확률 밀도 함수는 아래와 같이 주어진다.

$$\phi(\mathbf{m}) \propto L(\mathbf{m})\rho(\mathbf{m}) \quad (10)$$

이때 사전 확률은 아래와 같다.⁽²⁾

$$\rho(\mathbf{m}) \propto \exp\left[-0.5\|\mathbf{m} - \mathbf{m}_p\|_M^2\right] \quad (11)$$

전체 \mathbf{m} 의 영역 M 에서의 사후 평균은 아래의 식으로 계산하기로 한다.

$$\langle \mathbf{m} \rangle = \int_M \mathbf{m} \phi(\mathbf{m}) d\mathbf{m} \quad (12)$$

2.4 SA(Simulated annealing)

이 연구에서는 기본적으로 랜덤워크를 이용하는데 그 과정은 일반적으로 다음과 같다.⁽²¹⁾ 먼저, 정해진 크기의 난수 벡터를 생성하고, 그 방향으로 이동하여 함수를 계산한 후 그 점으로 이동할지 말지를 결정한다. 여기서 중요한 두 가지는 어떻게 벡터들을 생성하는가와 새로운 점으로의 이동에 대한 의사 결정방식이다. 다양한 방법론들이 존재하지만 메트로폴리스법(Metropolis algorithm)은 효율성이 인정되어 역해석에서 널리 사용되는 방법이다. 본 연구에서는 난수 벡터 생성에는 메트로폴리스법을 이용하고 이동에 대한 결정에는 SA를 이용하기로 한다.⁽²⁰⁾

매 스텝마다 SA에서는 현재 상태와 인접 상태를 비교하여 확률에 의해 이동여부를 결정한다. 이 이동을 결정하는 확률은 아래의 식으로 주어진다.

$$P_B(\mathbf{m}) \propto \exp(\ln L(\mathbf{m})/T_{SA}) \quad (13)$$

여기서 T_{SA} 어닐링 온도로 실제 물리적인 온도와는 아무 관련이 없고 최적화 과정 중의 이동성을 부여하기 위해 최적화 중에 지속적으로 감소시키는 온도이다. 이웃 상태 \mathbf{m}' 를 결정하는 식은 아래와 같다.

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} + \Delta\mathbf{m} \quad (14)$$

여기서 $\Delta\mathbf{m}$ 균일 분포와 평균 0 을 가진 난수

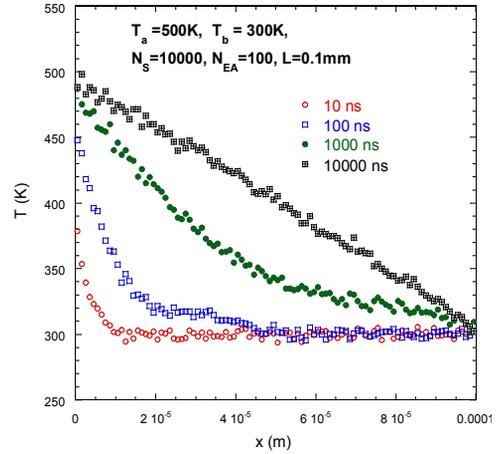


Fig. 2 Simulated temperature for $T_a=500\text{K}$ and $T_b=300\text{K}$ with $N_S=10000$ $N_{EA}=100$ for $L=0.1\text{mm}$

벡터이다. 현재 상태에서 이웃 상태로 이동해갈 확률은 아래에 주어진다.

$$P_A = \min(1, P_B(\mathbf{m}')/P_B(\mathbf{m})) \quad (15)$$

이것은 $S(\mathbf{m}') > S(\mathbf{m})$ 에 경우에 조차 \mathbf{m}' 로 옮겨갈 수도 있음을 뜻한다. 이는 국소 최소점에 갇혀서 전역 최저점을 찾아가지 못하는 문제를 해결하기 위한 것이다. 실제 계산에서는 평균이 0.5 이고 0 에서 1 의 값을 갖는 난수 P_R 를 생성하여 $P_A > P_R$ 이 만족되면 $S(\mathbf{m}') > S(\mathbf{m})$ 인 경우에도 이웃 상태로 이동한다.

2.5 DSMC 계산

앞에 언급한 대로 계산된 \mathbf{d} 는 매우 심하게 변동하며 이 변동은 최적화가 진행될 수록 더욱 억제되어야 한다. 앙상블 평균(ensemble average) N_{EA} 와 모사되는 분자수 N_S 를 증가시키는 것은 매우 큰 계산 비용이 발생하므로 \mathbf{d} 와 \mathbf{d}_0 는 시간 영역에서 N_{MA} 의 데이터를 이용하여 이동평균을 구하여 사용한다. 여기서 N_{MA} 는 홀수로 주어진 시간 t_i 에서의 값은 전후로 $(N_{MA}-1)/2$ 개의 측정 값을 이용하여 평균을 내어 $S(\mathbf{m})$ 의 계산에 사용한다.

3. 결과와 토의

3.1 해석 조건

해석 대상이 되는 1 차원 공간의 100 개의 공간으로 분할되고 각각의 분할 공간은 다시 10 개의 부공간으로 나누어진다. 이 연구의 계산 예제에서는, 공간을 채우는 기체는 질소이다. 온도 273.15K

와 압력 101.325kPa 에서 분자의 개당 질량은 4.65×10^{-26} kg, 직경은 0.417nm, 점도 지수는 0.74, 분산 인자는 1.36 이다. 이 값들은 온도의 변화에 독립적인 것으로 가정한다.

사용된 DSMC 컴퓨터 코드는 타 문헌에서 검증된 것으로 여러 연구에 널리 사용되고 있으나⁹⁾ 검증을 위하여 충분히 큰 값인 $L = 0.1\text{mm}$ 인 경우에 대하여 시험하여 그 결과를 Fig. 2 에 보였다. 시간의 흐름에 따라 해는 알려진 정상상태로 수렴해감을 볼 수 있다. 본 연구에서는 미지의 온도 $T_a(t)$ 는 사전 정보가 있는 경우에 한정하여 적용하기로 하고 다음과 같이 매개변수화(parameterization) 한다. 상수인 경우, $T_a(t) = m_1$, 계단 형태의 온도 상승이 있는 경우,

$T_a(t) = m_1 u(t - m_2)$, 보다 일반적인 형상인 경우, $T_a(t) = \sum_{i=1}^M m_i \phi_i(t)$ 로 변수화하여 시험 한다. 여기서 $\phi_i(t)$ 는 cubic-spline 함수이다.

3.2 이동 평균

해의 변동폭은 에르고딕 가설(ergodic hypothesis)에 따라 $N_S \times N_{EA}$ 에 따라 결정되는데 계산시간의 제한으로 인해 이 값을 늘리기는 용이하지 않다. $N_{EA} = 1$ 이고 $N_S = 10000$ 인 경우 Pentium4 3.0GHz CPU 에서 100s 정도의 시간이 걸리게 된다.

$N_{EA} = 100$ 인 경우 10^4s (2hr 45min)이 걸리게 되어 역해석의 직접문제 풀이로서는 사용하기 어려울 정도로 오래 걸린다. 따라서 계산된 열유속의 시간 이동평균을 구하여 사용하기로 한다.

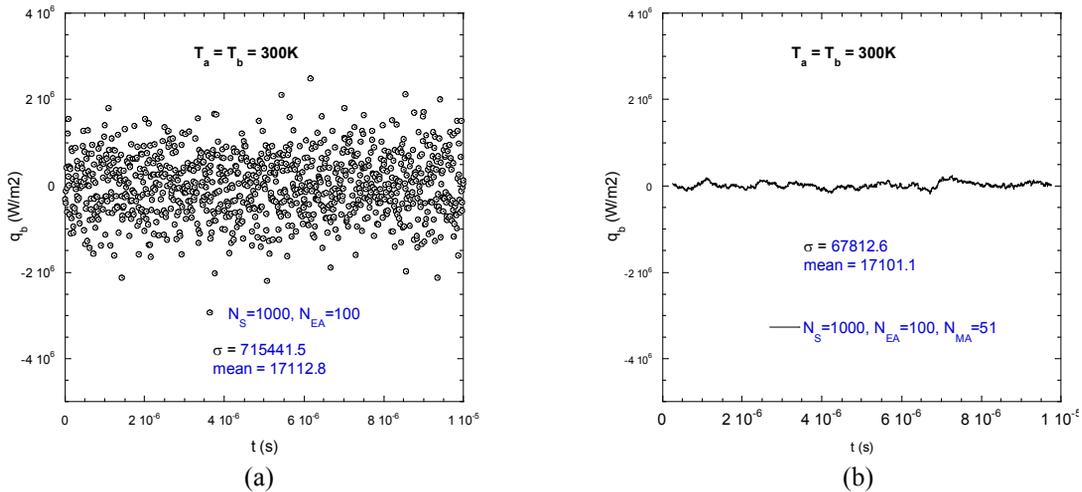


Fig. 3 Heat flux calculations for different N_S and N_{EA} with $T_a = T_b = 300\text{K}$ and $L = 10\mu\text{m}$: (a) $N_S=1000$ and $N_{EA}=100$; (b) $N_S=1000, N_{EA}=100$ and $N_{MA}=51$

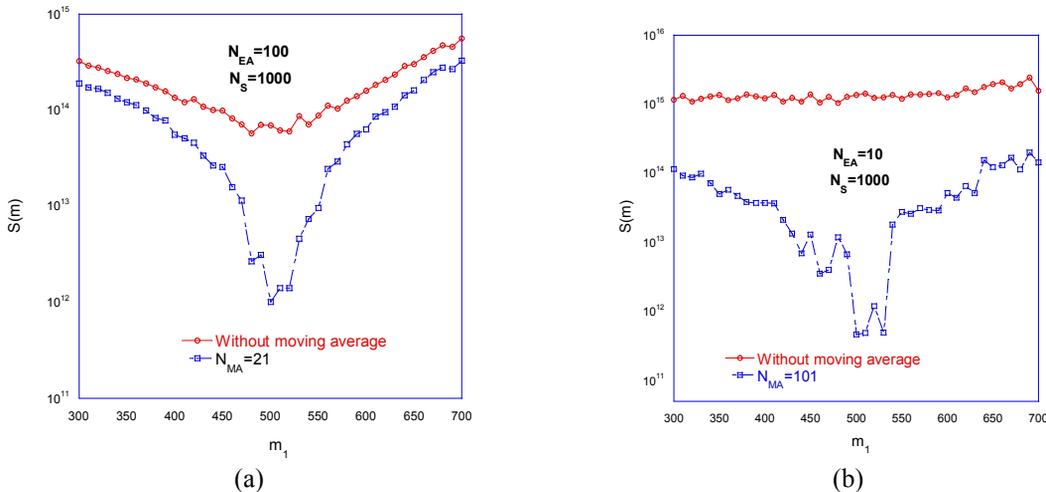
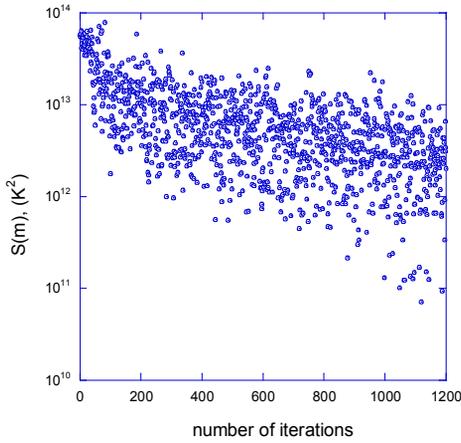
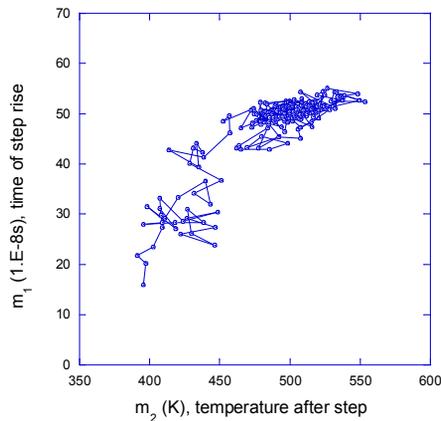


Fig. 4 Exhaustive search for case A with $N_S=1000$: (a) $N_{EA}=100$ and $N_{MA}=21$; (b) $N_{EA}=10$ and $N_{MA}=101$



(a)



(b)

Fig. 5 Convergence curves for case 2: (a) least squares norm; (b) solution path during the simulated annealing

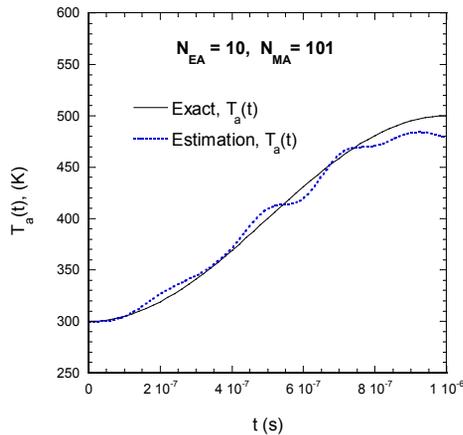


Fig. 6 Estimated results with $N_S=1000$, $N_{EA}=10$ and $N_{MA}=101$ for case 3 (smooth function form)

이 방법은 이론적 엄밀함과는 거리가 먼 역해석을 가능하게 하기 위한 어쩔 수 없는 수단이다.

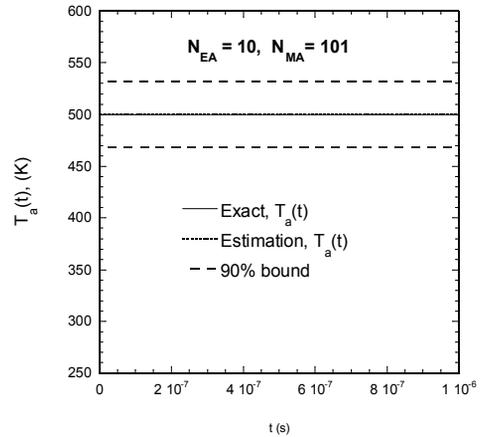


Fig. 7 Estimated results with $N_S=1000$, $N_{EA}=10$ and $N_{MA}=101$ for case 1 (constant function form)

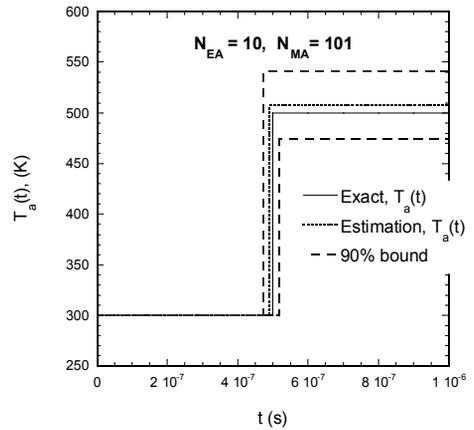


Fig. 8 Estimated results with $N_S=1000$, $N_{EA}=10$ and $N_{MA}=101$ for case 2 (step function form)

이 방법의 효과를 확인하기 위하여 양단의 간격이 $10\mu m$ 이고 온도가 일정한 동안의 열유속을 $N_{EA}=100$ 이고 $N_S=1000$ 에 대해 계산하였는데 Fig. 3(a)와 (b)는 이동평균을 취하지 않은 경우와 $N_{MA}=51$ 에 대해 계산한 결과를 각각 보인 것이다. 그림에서 볼 수 있듯이 이동 평균이 해의 변동을 줄이는 데 매우 효과적임을 알 수 있다.

역해석 과정 중의 이동 평균의 효과를 확인하기 위해, 일정 간격으로 완전 탐색(exhaustive search)를 실시하였다. 그 결과를 이동 평균을 사용한 경우와 아닌 경우에 대해 Fig. 4(a)와 (b)에 나타내었다. 이 문제에서 참 값 $T_a(t) = m_1$ 는 500 인데 S 를 10K 간격으로 계산하였다. Fig. 4(a)에서는 이동 평균을 수행한 경우 최소값이 더 뚜렷이 나타나지만 하지 않은 경우에도 근사하게 최소값을 유추할 수 있다. 그러나 Fig. 4(b)에서는 이동평균을 수행하지 않은 경우 최소값을 찾는 것이 불가능하다. 이동

평균을 통해 값의 변동이 심한 이런 극한적인 경우에서도 비교적 뚜렷하게 최소값이 탐색됨을 알 수 있다.

3.3 역해석

역해석을 $L=10\mu\text{m}$ 인 형상에 대해 세 가지 경우에 대해 수행하였다. Fig. 5 은 $T_a(t)=m_1$ 의 형태로 사전 정보가 주어진 경우의 역해석 결과를 보여 준다. 결과에서 보여 주듯이 원래의 온도가 비교적 정확하게 구하여 졌고 90% 신뢰 구간은 468.1K 에서 531.3K 사이이다. 이 구간은 SA 에서 최종해가 구해진 후 샘플링을 통하여 계산하게 된다. 여기서는 상한값과 하한값은 평균치에서 같은 거리가 떨어지는 것으로 가정하였다. 즉, $\int_{\langle m \rangle - \delta}^{\langle m \rangle + \delta} \phi(\mathbf{m}) d\mathbf{m} \approx 0.9$ 을 만족하는 δ 값을 구하여 신뢰 구간을 결정하는 것이다. 이 과정은 이 1 변수 문제에서조차 상당히 많은 계산 시간을 요구하는 과정이다.

계단이 있는 $T_a(t)=m_1u(t-m_2)$ 로 주어지는 2 변수 경우의 결과를 Fig. 6 에 보였다. 온도가 상승하는 시간과 상승 후의 온도가 비교적 정확하게 구하여 졌다. Fig. 7(a)에 해를 찾아가는 중에 S 값이 변화하는 추이를 보였고 Fig. 7(b)에 계산 과정 중에 m_1 과 m_2 값이 변화해 가는 추이를 확인할 수 있다.

이 역해석에서의 어려움은 매우 긴 계산시간이며 이러한 이유로 미지수의 개수는 매우 제약된다. 일반적인 적용의 가능성을 확인하기 위해 곡선 형태의 5 변수 경우에 대하여 계산을 수행하였다. 이 경우 원래의 정확한 온도는 삼각함수 형태인 $T_a(t)=100[\cos\pi(t/10^{-6}-1)+1]+300$ 로 주어진다. 미지의 온도는 $T_a(t)=\sum_{i=1}^5 m_i \phi_i(t)$ 로 보고 계산을 수행하여 Fig. 8 에 그 결과를 보였다. 그림에서 볼 수 있듯이 다변수 문제의 경우에도 비교적 정확하게 해를 구할 수 있음을 알 수 있다.

4. 결론

이 연구는 두 평판 경계에 갇힌 기체를 가로질러 일어나는 열전달의 역해석에 관한 것이다. 한 경계에서는 온도와 열유속이 모두 측정 가능하나 다른 경계에서는 측정이 불가하여 이 경계에서의 온도를 역해석을 통하여 산정하여야 한다. 마이크로 영역에서는 기존의 연속 에너지 방정식으로는 정확한 해를 구할 수 없으므로 분자 수준의 기체

역학 문제를 다루어야 한다. 본 연구에서는 DSMC 를 사용하여 직접문제를 해석하고 SA(simulated annealing)을 이용하여 역해석을 수행하였다. 이 역해석에 요구되는 계산 부하는 매우 크며 이를 극복하기 위하여 측정값에 이동평균을 사용하는 방법을 제안하였고 해의 형태가 매개 변수화된 3 가지 경우에 대하여 적용하여 유효한 결과를 얻을 수 있음을 입증하였다.

참고문헌

- (1) Ramm, A. G., 2005, *Inverse Problems*, Springer, New York.
- (2) Mosegaard, K. and Tarantola, A., 1995, "Monte-Carlo Sampling of Solutions to Inverse Problems," *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, Vol. 100, pp. 12431~12447.
- (3) Tikhonov, A. N. and Arsenin, V. I. A., 1977, *Solutions of ill-posed problems*, Winstonm, New York.
- (4) Alifanov, O. M., 1994, *Inverse Heat Transfer Problems*, Springer-Verlag, New York.
- (5) Beck, J. V., Blackwell, B. and HajiSheikh, A., 1996, "Comparison of Some Inverse Heat Conduction Methods Using Experimental Data," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 39, No. 17, pp. 3649~3657.
- (6) Liu, F. B. and Ozisik, M. N., 1996, "Inverse Analysis of Transient Turbulent Forced Convection Inside Parallel-Plate Ducts," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 39, No.12, pp. 2615~2618.
- (7) Kim, S. K. and Daniel, I. M., 2004, "Gradient Method For Inverse Heat Conduction Problem In Nanoscale," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 60, No.3, pp. 2165~2181.
- (8) Kim, S. K. and Daniel, I. M., 2003, "Solution To Inverse Heat Conduction Problem In Nanoscale Using Sequential Method," *Numerical Heat Transfer Part B-Fundamentals*, Vol. 44, No. 5, pp. 439~456.
- (9) Bird, G. A., 1994, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford University Press, Oxford.
- (10) Wang, M. R. and Li, Z. X., 2004, "Simulations For Gas Flows In Microgeometries Using The Direct Simulation Monte Carlo Method," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 25, No.6, pp. 975~985.
- (11) Park, J. H. and Baek, S. W., 2004, "Investigation of Influence of Thermal Accommodation on Oscillating Micro-Flow," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 47, No. 6-7, pp. 1313~1323.

- (12) Yan, F. and Farouk, B. , 2002, "Computations of Low Pressure Fluid Flow and Heat Transfer In Ducts Using The Direct Simulation Monte Carlo Method," *Journal of Heat Transfer-Transactions of the ASME*, Vol. 124, No.4, pp. 609~616.
- (13) Fang, Y. C. and Liou, W. W., 2002, "Computations of The Flow and Heat Transfer In Microdevices Using DSMC With Implicit Boundary Conditions," *Journal of Heat Transfer-Transactions of the ASME*, Vol. 124, No.2, pp. 338~345.
- (14) Hadjiconstantinou, N.G. and O. Simek, Constant-wall-temperature Nusselt number in micro and nano-channels, *Journal of Heat Transfer-Transactions of the ASME*, 2002. 124(2): pp. 356~364.
- (15) Ju, Y. S., 2000, "Thermal Conduction and Viscous Heating In Microscale Couette Flows," *Journal of Heat Transfer-Transactions of The ASME*, Vol. 122, No.4, pp. 817~818.
- (16) Mosegaard, K. and Sambridge, M., 2002, "Monte Carlo Analysis of Inverse Problems," *Inverse Problems*, Vol. 18, No. 3, pp. R29~R54.
- (17) Haji-Sheikh, A. and Howell, J. R., 2006, Monte Carlo Methods, in *Handbook of Numerical Heat Transfer, 2nd Edition*, ed. by Minkowycz, W. J., et al., Wiley, pp. 249~296.
- (18) Haji-Sheikh, A. and Buckingham, F. P., 1993, "Multidimensional Inverse Heat Conduction Using The Monte Carlo Method," *Journal of Heat Transfer-Transactions of the ASME*, 1993, Vol. 115, No.1, pp. 26~33.
- (19) Oran, E. S., Oh, C. K. and Cybyk, B. Z., 1998, "Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications," *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 30, pp. 403~441.
- (20) Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. G. Jr., and Vecchi, M. P., 1983, "Optimization by Simulated Annealing," *Science*, Vol. 220, No.4598, pp. 671~680.
- (21) Hughes, B. D., 1996, *Random Walks and Random Environments*, Oxford University Press, Oxford.