

노즐과 터빈에 대한 분자동역학 시뮬레이션 설계 및 구현

김수희*

Molecular Dynamics Simulation Design and Implementation for Nozzles and Turbines

Su-Hee Kim*

요약

이 연구에서는 분자들이 노즐과 터빈내부에서 운동하는 거동을 모사하기 위해 분자동역학 시뮬레이션 시스템의 모델을 설계하고 개발하였다. Lennard-Jones Potential 모델을 이용하여 분자들간에 상호 작용을 계산하고, Verlet 알고리즘을 뉴턴의 운동 방정식을 적산하기 위한 수치해석 방법으로 사용하였다. Lennard-Jones Potential 함수를 계산하기 위해, 분자 개수 N 에 대해 $O(N^2)$ 계산량을 cutoff r_c 를 이용하여 $O(N)$ 으로 줄여서 계산하여 CPU 시간을 절약할 수 있도록 구현하였다.

ABSTRACT

In this research, a molecular dynamics system was designed and developed to calculate trajectories of molecules in nozzles and turbin blades. The Lennard-Jones potential model was used to approximate the interaction between a pair of molecules and the Verlet integration is used as a numerical method to integrate Newton's equations of motion. To compute Lennard-Jones potential functions; for the number of molecules N , the computation complexity $O(N^2)$ for interactions of all pairs of molecules is reduced to $O(N)$ by using cutoff radius r_c . This was implemented to save CPU times.

키워드

Nozzle, Turbine, Molecular Dynamics, Model, Simulation
노즐, 터빈, 분자 동역학, 모델, 시뮬레이션

1. 서론

분자동역학(MD : Molecular Dynamics) 기법은 분자의 시간 및 공간적 거동과 이를 지배하는 분자 사이의 포텐셜(intermolecular potential)을 통하여 나노

스케일 시스템의 미세특성 등을 예측 및 시뮬레이션 하는 이론적인 수단으로 개발 및 응용되고 있다[1]. MD는 분자시스템의 동역학적 성질(dynamic property) 등을 이해하고자 1950년대 말에 분자간의 탄성충돌을 모델로 하는 강구(hard-sphere) 시스템에

* 호서대학교(shkim@hoseo.edu)
* 교신저자 : 컴퓨터정보공학부
• 접수일 : 2018. 10. 16
• 수정완료일 : 2018. 12. 16
• 게재확정일 : 2019. 02. 15

• Received : Oct. 16, 2018, Revised : Dec. 16, 2018, Accepted : Feb. 15, 2019
• Corresponding Author : Su-Hee Kim
Division of Computer and Information Engineering, Hoseo University,
Email : shkim@hoseo.edu

처음 적용되었다. 특히, 1990년대 말 이후에 공학분야에서도 마이크로스케일 및 나노스케일 시스템의 해석에 고전적인 연속체 이론에 근거한 연구 또는 확률에 근거한 이론의 한계에 부딪혀, 보다 구체적인 연구기법을 요구하게 되었다[2]. 희박기체와 같이 분자간의 상호작용이 비교적 작거나 무작위한 기상에 대하여는 Monte Carlo법(DSMC)이 용이하게 적용될 수 있다[1]. 이에 반해 기상과 액상이 공존하는 영역에 대한 연구는 분자동역학 기법이 가장 적절한 방법으로 인식되고 있다[2].

액상과 기상이 섞여 있으면 공학적 예측 값이 복잡해진다. 대표적인 예로서, 저기압 상태의 액상 물에서 발생하는 캐비테이션을 들 수 있다. 캐비테이션이 발생하면 진동과 소음을 유발하며 금속 표면에 침식을 일으키는 상태가 된다. 과포화 수증기는 대단히 불안정해서 급격한 응축 또는 팽창이 이루어지며, 캐비테이션이 일어나는 상태에서는 기액이 공존하고 진공도가 높아지며 연속체로 볼 수가 없다[3].

이 연구에서는 분자들이 노즐과 터빈내부에서 운동하는 거동을 모사하기 위해, 분자동역학 시뮬레이션 시스템의 모델을 설계하고 개발하고자 한다. 분자동역학 시뮬레이션을 통해 사용 목적에 따른 물리적 기초 정보를 제공한다. 분자들이 노즐 입구에서 출발하여 노즐 목을 지나 진공영역으로의 분출, 노즐을 통과하여 터빈 날개의 안쪽에 충돌 후에, 바깥 쪽 날개에 의하여 외부로 배출하는 상황을 실제에 가깝도록 수치 모사를 할 수 있도록 개발한다. 분자동역학 시뮬레이션은 터빈 분야에서는 초기단계로 사전에 수행된 참고문헌이 거의 없는 실정이다.

아르곤(Ar) 분자는 분자들 중 가장 간단한 구조를 가지고 있으며 단원자 분자이다. 비활성기체이며 화학 반응성이 거의 없기 때문에 온전한 측정이 가능하다는 장점이 있다. 이 시뮬레이션에서는 아르곤(Ar) 분자를 대상으로 2차원 시뮬레이션을 수행하기 위한 모델을 설계하고 개발한다.

II. 분자동역학 시뮬레이션 모델 설계

분자동역학 시뮬레이션을 위해, 먼저 분자들의 상호작용에 대한 모델을 정립하고, 그 다음으로 각 분자

의 거동을 계산하고, 마지막으로 각 분자의 거동에 따른 물리적 상태량을 분석한다.

지금까지 알려진 물리적 법칙을 적용하여 노즐과 터빈 내부에서의 분자의 운동을 구현한다. 두 분자 사이의 서로간의 거리에 따른 인력과 척력을 계산하기 위해 Van Der Waals force와 Lennard-Jones Potential을 적용한다. 현재 분자의 위치, 속도와 가속도로 일정 시간 이후에 그 분자의 좌표를 계산하기 위해 Verlet 알고리즘을 이용한다. 또한, 분자들이 노즐과 터빈 날개의 경계와 서로 충돌을 할 때, 완전탄성체로 가정하고 충돌 후의 속도를 계산한다.

2.1 Lennard-Jones Potential 모델

원자 자체는 중성을 띄지만, 반데르발스 힘에 의해 근접한 범위 내에서는 생성되는 쌍극자와 쌍극자 사이에 인력이 작용된다. 이로 인해 원자간의 거리가 짧아져 두 원자의 전자구름이 겹치게 되고 파울리의 배타원리에 의하여 시스템 에너지가 급격하게 증가하여 강한 반발력이 작용한다[4].

입체적인 반발과 반데르발스 힘을 잘 나타내는 것으로는 인력이 원자 사이의 거리의 6승에 반비례하고, 척력이 원자 거리의 12승에 반비례하는 Lennard-Jones Potential이 자주 사용된다[4,5]. Lennard-Jones Potential은 중성자나 분자들 간에 상호작용을 가장 근접하게 측정할 수 있는 간단한 모델이다. 그림 1은 Lennard-Jones Potential 에너지 함수를 도식적으로 보여주고 있다.

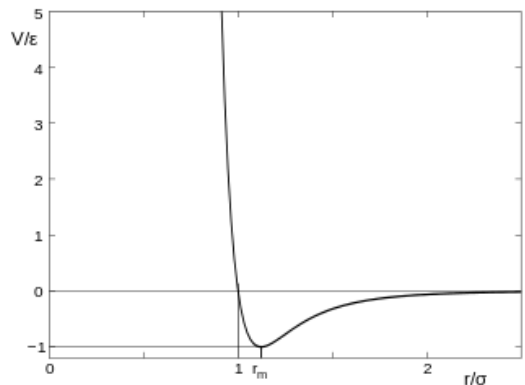


그림 1. 르나드 존스 포텐셜 에너지 함수
Fig. 1 Lennard-Jones Potential energy function

$$U_{LJ} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] = \epsilon \left[\left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

식 (1)에 있는 각 기호들의 의미는 다음과 같다.

- U_{LJ} : 두 분자나 원자들간의 포텐셜
- ϵ : 두 입자가 서로 당기는 세기를 나타내는 수치, 우물의 깊이
- σ : 입자간의 퍼텐셜이 0이 되는 거리, 반데르 발스 반경이라고도 함
- r : 두 입자 사이의 거리
- r_m : 전위가 최소값(- ϵ)에 도달하는 거리

r^{-12} 항은 짧은 구간에서의 파울리의 척력을, r^{-6} 항은 긴 구간에서의 당기는 반데르발스 힘을 설명한다. 분자들간의 힘은 r 의 값에 따라 서로 밀든지 당기든지 한다. r 의 값이 매우 작을 때에 분자들은 서로 밀어낸다.

2.2 Verlet 알고리즘

Lennard-Jones Potential 시스템에서 각 분자의 속도와 위치를 시간에 따라 구할 수 있다. 이때, 적용할 수 있는 수치해석 기법중의 하나가 Verlet 알고리즘이다[6]. Verlet 알고리즘은 계산량이 적고 분자동역학 시뮬레이션에서 입자들의 궤적을 계산하기 위해 많이 사용된다. 한 분자의 현재 위치(R), 속도(V), 가속도(A), 그리고 시간 스텝 (dt)을 이용해 dt 시간 이후의 위치를 계산한다[5].

Step 1) 2차급의 정확도로, 분자의 위치를 갱신하기 위해 현재의 속도와 가속도를 이용하여 계산

$$R(t+dt) = R(t) + V(t)*dt + \frac{1}{2}A(t)*dt^2 \quad (2)$$

식 (2)에 있는 각 기호들의 의미는 다음과 같다.

- $R(t)$: 한 분자의 시간 t 에서의 위치
- $V(t)$: 한 분자의 시간 t 에서의 속도
- $A(t)$: 한 분자의 시간 t 에서의 가속도
- dt : 시간 스텝

Step 2) 현재의 속도를 $\frac{1}{2}dt$ 시간 후에 갱신하기 위해, 현재의 가속도를 사용한다.

$$V(t + \frac{1}{2}dt) = V(t) + \frac{1}{2}A(t)*dt \quad (3)$$

Step 3) 갱신된 위치에서 Lennard-Jones force 식을

사용하여 새로운 가속도를 계산한다.

Step 4) 다시, $\frac{1}{2}dt$ 시간 후에 속도를 갱신하기 위해 새로운 가속도를 사용한다.

$$V(t+dt) = V(t + \frac{1}{2}dt) + \frac{1}{2}A(t + \frac{1}{2}dt)*dt \quad (4)$$

Step2와 Step 4를 합치면, 예전의 가속도와 새로운 가속도의 평균을 이용하여 2차급의 정확도로 전체 시간 스텝 dt 에 해당하는 속도를 갱신하는 셈이다.

일반적으로 물리실험을 진행할 때 물리학자들은 Lennard-Jones 파라미터 ϵ 와 σ 을 1로 가정한다. 또한, 질량(m)도 1로 가정한다.

$$\epsilon = \sigma = m = 1$$

2.3 Lennard-Jones Potential 계산 셀 리스트

시뮬레이션 시스템에 N 개의 분자들이 있을 때, 르나드 포텐셜에 의해 각 분자들간에 작용하는 힘을 계산하기위해서 필요한 계산량은 $O(N^2)$ 으로 분자 개수에 대한 2차원 급이다. 그런데, 분자들이 일정 거리 이상을 초과하면 서로 간에 작용하는 힘을 거의 무시할 수 있다. 이 거리를 cutoff 반경 r_c 라고 하자. 분자간의 거리가 이 값 r_c 를 초과하는 경우, 작용하는 힘을 계산하지 않음으로 계산량을 매우 줄일 수 있다.

시뮬레이션 도면을 cutoff 반경 r_c 보다 약간 크게 여러 개의 정사각형 Cell List를 만든다. 한 분자에 대해 그 분자가 속해 있는 정사각형 내에 있는 분자들, 그리고 그 정사각형과 인접한 정사각형 내에 있는 분자들만을 대상으로 Lennard-Jones potential의 힘을 계산한다. 이렇게 함으로서 분자의 개수의 2차급의 계산량을 1차급 $O(N)$ 으로 줄일 수 있다[7,8]. 그림 2는 코딩에서 계산량을 줄이기 위해 적용한 셀리스트를 그림 2로 나타낸 것이다.

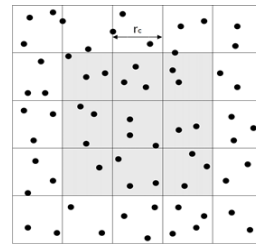


그림 2. 셀 리스트
Fig. 2 Cell List

2.4 분자들과 노즐과 터빈의 충돌

이 시뮬레이션에서는 분자들과 노즐과 터빈과의 충돌을 완전 탄성 충돌로 가정한다. 완전 탄성 충돌에서는 역학적 에너지(운동에너지+위치에너지)가 보존된다[9]. 일반적으로 노즐과 터빈의 벽들은 기울기가 있는 직선들이나 호들로 설계되는데, 분자들이 분자들간의 충돌, 노즐의 변과 터빈 날개들의 벽과 충돌하면서 운동한다.

1) 기울기가 있는 벽과 분자의 충돌

기울기가 있는 노즐 벽이나 터빈 벽에 분자가 충돌하면, 그림 3처럼 a 방향에 대한 속도와 이에 수직인 b 방향에 대한 속도를 계산하고, 그 다음으로 충돌후의 속도를 계산할 수 있다.

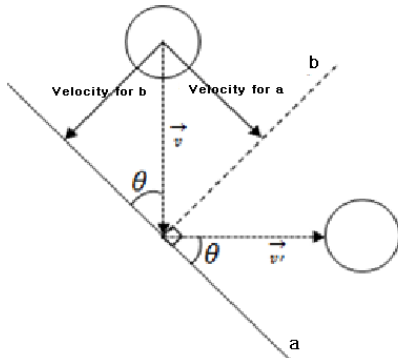


그림 3. 경사진 벽과 분자의 충돌
Fig. 3 Collision between a Sloped Wall and a Molecule

예를 들어, 기울기가 w 인 벽(이하 $i + wj$)에 $ai + bj$ 의 속도를 가진 분자가 완전 탄성 충돌한다고 가정해보자. 이때 탄성 충돌 계수 $e=1$ 이다. 그리고 i 는 x 축 방향의 단위 벡터, j 는 y 축 방향의 단위 벡터를 나타낸다. 먼저 기울기가 w 인 경사진 벽 (직선)에 대한 단위벡터는 식 (5)와 같다.

$$\frac{1}{\sqrt{1^2+w^2}}i + \frac{w}{\sqrt{1^2+w^2}}j \tag{5}$$

기울기가 w 인 직선에 수직인 직선의 단위벡터는 식 (6)과 같다.

$$\frac{1}{\sqrt{1^2+(-\frac{1}{w})^2}}i + \frac{-\frac{1}{w}}{\sqrt{1^2+(-\frac{1}{w})^2}}j \tag{6}$$

식 (5)와 식 (6)의 각 단위벡터에 분자의 속도를 각각 곱하여, 현재 분자의 속도가 경사면 방향으로의 크기와 이에 수직인 면 방향으로의 크기를 구한다. 각 방향의 크기는 그 방향의 단위 벡터와 분자의 속도를 곱한, 즉, 스칼라곱이다. 기울기가 w 인 경사진 벽의 단위 벡터인 식 (5)와 분자의 속도 $ai + bj$ 와의 스칼라 곱은 식 (7)이 되고,

$$\frac{a+bw}{\sqrt{1^2+w^2}} \tag{7}$$

기울기가 w 인 경사진 벽에 수직인 단위 벡터 식 (6)과 분자의 속도 $ai + bj$ 와의 스칼라 곱은 식 (8)가 된다.

$$\frac{a-\frac{b}{w}}{\sqrt{1^2+(-\frac{1}{w})^2}} \tag{8}$$

속도가 $ai + bj$ 인 분자가 경사가 w 인 선과 충돌할 때, 이 방향의 크기가 식 (7)이고, 이에 수직인 방향의 크기는 식 (5)이다. 완전 탄성충돌에서 기울기가 w 인 직선과 같은 방향의 속도는 그대로 보존되고, 이에 수직인 방향의 속도는 크기는 같으나 그 방향은 반대가 된다. 기울기가 w 인 직선과 같은 방향의 속도는 이 방향의 크기 식 (7)과 이 방향의 단위 벡터 식 (8)를 곱한 것인데 식 (9)과 같다.

$$\frac{a+bw}{1^2+w^2}i + \frac{aw+bw^2}{1^2+w^2}j \tag{9}$$

기울기가 w 직선에 수직인 방향의 속도는 이 방향의 크기 식 (8)와 이 방향의 단위 벡터 식 (9)을 곱한 것이다. 그런데 충돌 후에는 충돌면과 수직인 속도의 방향이 반대가 되므로, 이의 부호를 바꾸어 주면 되는데 식 (10)과 같다.

$$\frac{-aw^2+bw}{1^2+w^2}i + \frac{aw-b}{1^2+w^2}j \tag{10}$$

기울기가 w 인 직선과 충돌한 후의 분자의 속도는 식 (9)과 (10)을 합한 것이다. 이들을 합하면 식 (11)과 같다.

$$\frac{a-aw^2+2bw}{1^2+w^2}i + \frac{-b+bw^2+2aw}{1^2+w^2}j \quad (11)$$

노즐과 터빈의 선들은 이들을 설계할 때 각 선의 기울기가 계산될 수 있으므로, 어떤 분자가 실제로 충돌할 때, 그 분자가 가지고 있는 속도와 충돌하는 직선의 기울기를 이용하여 충돌후의 분자의 속도를 계산할 수 있다.

2) 호와 분자의 충돌

분자가 노즐이나 터빈의 호들과의 충돌은 충돌하는 지점에서 그 호의 접선과의 충돌과 동일하다. 호와 충돌하는 지점에서 그 호와의 접선은 충돌지점을 끝점으로 하는 호의 반지름에 수직이다. 해당 호의 중심점과 반지름은 노즐과 터빈을 설계할 때 결정되므로, 이를 이용하여 충돌하는 시점에서의 분자의 속도를 이용하여 충돌후의 분자의 속도를 계산할 수 있다.

2.5 분자동역학 시뮬레이션 알고리즘

시뮬레이션을 시작하기 위해서, 먼저 각 분자에 초기 위치와 속도를 설정한다. 각 분자들을 약간의 틈을 두고 겹치지 않도록 위치를 결정하고, 응용에 필요한 대로 속도를 초기화한다. 표 1은 분자동역학 시뮬레이션 알고리즘을 나타낸다.

표 1. 분자동역학 시뮬레이션 알고리즘

Table 1. Molecule dynamics simulation algorithm

Step 0	Initialize appropriate position R , velocity V for simulation purpose, set acceleration A to 0, execution time t to 0, choose time step dt
Step 1	Compute next positions after dt time step. Move molecules to the new positions. Update velocities.
Step 2	Calculate forces for collisions with molecules and nozzle or turbine walls. Compute interaction forces for all pairs of molecules $F = -\nabla U$. Get acceleration A .
Step 3	Compute and output physical quantities of interest
Step 4	Move next time step $t = t + dt$. Go to Step 1 as necessary.

1) 노즐과 터빈의 설계도면

설계한 노즐과 터빈은 각각 32개의 노즐과 48개의 날개로 그림 4와 같이 구성되어 있다.

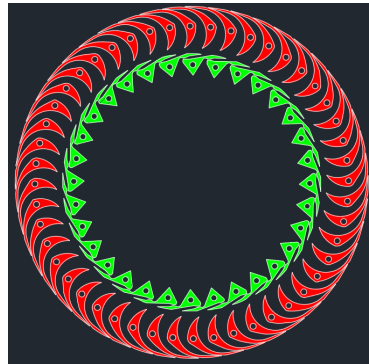


그림 4. 오토캐드로 설계한 노즐과 터빈

Fig. 4 Nozzles & turbines design with autocad

III. 시뮬레이션 시스템 개발

3.1 노즐과 터빈의 설계 및 구현

AutoCAD를 이용하여 시뮬레이션에 사용할 노즐과 터빈을 설계하고 도면을 작성한다. 이 도면을 JAVA Applet Canvas를 이용하여 시뮬레이션 시스템에 그린다.

2) 단일 노즐과 단일 터빈 그리기

그림 5는 그림 4와 같이 AutoCAD로 작성한 설계도의 좌표를 가져와서 노즐과 터빈을 각각 하나씩 확

대하여 그린 모습이다. JAVA 언어를 이용하여 graphics 클래스의 paint 메서드를 사용하여 점과 점 사이의 선을 그리고, 원의 좌측 상단의 기준점에서 반지름, 호의 시작 각도, 호의 각도 등을 이용하여 호들을 그려서 단일 노즐 및 단일 터빈을 그림 5와같이 완성한다[10].



그림 5. 단일 노즐과 단일 터빈
Fig. 5 A nozzle and a turbine blade

3) JAVA 캔버스로 표현한 노즐 및 터빈

전체 터빈과 노즐의 도면을 JAVA 캔버스에서 그리기 위해, AutoCAD 프로그램에서의 도면의 좌표를 시뮬레이션 시스템의 좌표로 변환한다. 그림 6과 같이 선택한 첫 노즐과 첫 터빈 날개의 각 좌표를 중심점으로부터 일정한 각도로 회전하면서 프로그래밍으로 그릴 수 있다.

여러 개의 노즐과 터빈 날개들을 그리기 위해, 중심점을 기준으로 단일 노즐과 단일 터빈의 각 좌표를 중심점으로부터 일정한 각도로 회전하면서 그리는데, Canvas 크기에 맞추어 적절히 그린다. 그림 7과 같이 노즐들 사이의 공간에서 분자들이 운동하면 이동하는 구간에 대응하는 터빈들을 함께 그려서 시뮬레이션에 활용한다.

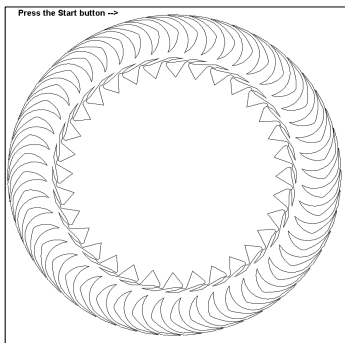


그림 6. 자바 캔버스로 표현한 노즐과 터빈
Fig. 6 Nozzles & Turbines with JAVA Canvas

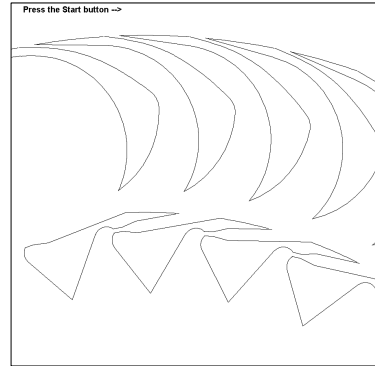


그림 7. 노즐과 터빈의 일부
Fig. 7 Part of Nozzles & Turbines

3.2 시뮬레이션 시스템 개발

이 시뮬레이션 시스템을 개발하기 위해 사용한 컴퓨터 사양은 표 1과 같고, 사용한 언어는 Java이다[10].

표 1. 시뮬레이션 시스템 사양
Table 1 Simulation system specification

System Information	
CPU	intel i-7 extreme 5960x (haswell-E)
RAM	DDR4 PC4-22400 CL15 (8Gx2) x2 = 32GB
GPU	NVIDIA Geforce GTX1080 super JETSTREAM D5X 8GB

현재 개발한 시뮬레이션 시스템은 그림 7에서 볼 수 있는 것처럼 노즐 몇 개와 터빈 날개 몇 개를 결합하여 실행하는 것이다. 그림 6에 있는 전체 노즐과 터빈을 대상으로 시뮬레이션을 하지 못하는 것은 시뮬레이션용 PC 모니터의 크기가 제한이 있기 때문이다.

1) 실행 초기 단면

분자동력학 시뮬레이션 시스템은 노즐입구에서 분자들이 생성되어 운동하면서 터빈으로 이동하고, 터빈 날개들은 일정한 속도로 시계방향으로 회전한다. 그림 9는 개발한 시스템의 실행 단면이다. 중앙에 노즐과 회전하는 터빈이 중앙에 위치하고, 우측에는 시뮬레이션을 위한 각 요소들의 값을 설정하고 실행의 시작, 정지 등의 액션을 제어할 수 있는 버튼들이 있다. 분자들의 초기 값을 설정, 터빈의 시계방향 회전속도 등의 설정이 가능하다.

분자들이 처음으로 생성될 때에, 생성 위치(X, Y),

초기 속도 (V_x, V_y)가 설정되며 가속도 (A_x, A_y)는 각각 0이다. 생성된 분자들에 대한 위치, 속도, 가속도 데이터를 시스템이 관리한다.

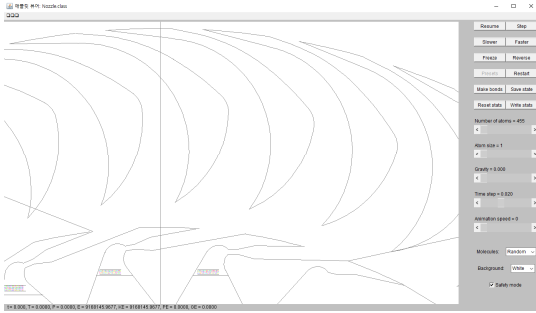


그림 8. 실행 초기 설정
Fig. 8 Initial setting for execution

2) 회전하는 터빈에서의 시뮬레이션

각 노즐의 입구에서 분자들이 일정 범위내에서 랜덤하게 초기속도를 가지고 생성되어, 노즐 목, 노즐 출구, 그리고 터빈을 통과한다. 분자들과의 충돌, 분자와 노즐의 벽과의 충돌, 분자와 터빈의 벽과의 충돌을 계속하며 터빈 밖으로 배출된다.

각각의 노즐에서 생성된 분자들이 일정한 속도로 회전하는 터빈 벽에 충돌하면서 분자들이 가지고 있는 운동에너지를 터빈에 전달하고, 터빈의 바깥 날개 벽과 충돌하면서 터빈 밖으로 배출된다. 노즐 내부에서 클러스tring을 형성한 분자들이 목을 지나 노즐을 통과하고 터빈으로 진입하는 모습이다(그림 9). 터빈에 진입하여 터빈 벽과 충돌하면서 터빈을 통과해 나가는 것을 관찰할 수 있다(그림 10).

3) 사용자 인터페이스

시뮬레이션 화면 오른쪽에는 시뮬레이션을 위한 각 요소들의 값을 설정하고 실행의 시작, 정지, 다시 시작 등의 액션을 제어할 수 있는 버튼들이 있다.

시간 스텝 dt 를 조정할 수 있고, 애니메이션 속도도 역시 설정가능하다. 분자들의 색깔과 백그라운드 색깔을 역시 선택할 수 있다.

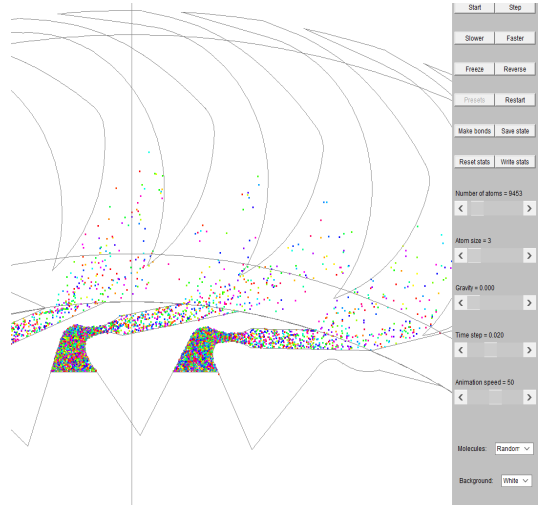


그림 9. 시뮬레이션 단면 1
Fig.9 Simulation Snapshot 1

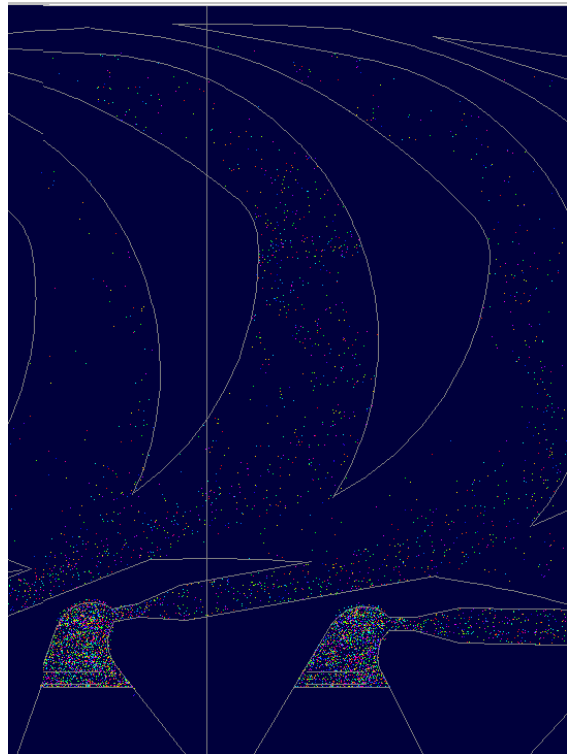


그림 10. 시뮬레이션 단면 2
Fig. 10 Simulation Snapshot 2

V. 결 론

이 연구에서는 노즐과 터빈에서 분자들의 거동을 관찰하고 사용 목적에 따른 물리적 기초 정보를 제공하기 위해 분자동력학 시뮬레이션을 위한 모델을 설계하였다. 설계한 모델을 바탕으로 노즐과 터빈의 단면을 대상으로 하는 2차원 분자동력학 시뮬레이션 시스템을 개발하였다. 노즐과 터빈의 도면을 오토캐드로 설계하고 작성한 것을 프로그래밍으로 형상화하여 시뮬레이션의 경계면의 역할을 하도록 사용하였다.

화면의 크기가 제약이 있어서 터빈 전체 (모든 노즐과 터빈 날개들을 포함)를 대상으로 하지 못 했는데, 좀 더 정확한 결과를 얻기 위해서는 터빈 전체를 시뮬레이션에 포함하는 것이 필요하다. 그리고 2차원 분자동력학 시뮬레이션 시스템을 3차원으로 확장하는 것도 실질적으로 상황에 가깝게 모사하기 위해서는 반드시 필요하다.

현재 시스템에서는 노즐과 터빈의 모양이 변경되면 이에 따라 캔버스에 다시 그려 넣어야 하는데, 터빈과 노즐의 형상을 용이하게 변경할 수 있는 편집기 설계하고 개발 하는 것이 역시 필요하다. 이를 위해 벡터 곡선 생성 알고리즘을 이용할 수 있다.

References

- [1] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow*. New York: Oxford University Press, 1994.
- [2] S. Park, "Application of Molecular Dynamics Simulation," *J. of The Korean Society of Mechanical Engineers*, vol. 43, no. 3, Mar. 2003, pp. 49-57.
- [3] D. Liuzzi, "Two-Phase Cavitation Modelling," Ph.D Dissertation, *University of ROME Graduate School of Civil and Industrial Engineering*, 2012.
- [4] J. E. Jones, "On the Determination of Molecular Fields," *Proc. R. Soc. Lond. A*, London, England, 1924, pp. 463-477.
- [5] B. R. Holstein, "The van der Waals interaction," *Am. J. Phys.*, vol. 69, no. 4, 2001, pp. 441-449.
- [6] L. Verlet, "Computer "Experiments" on

Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules," *Physical Review*. 1967, pp. 98-103.

- [7] D. V. Schroedera, "Interactive molecular dynamics," *Am. J. Phys.*, vol. 83, no. 3, Mar. 2015, pp. 210-218.
- [8] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*. New York: Academic, 2002.
- [9] D. J. Cutnell and W. K. Johnson, *Essential of Physics*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2006.
- [10] B. Eckel, *Thinking in Java*, New Jersey: Prentice Hall, 2007.

저자 소개

김수희(Su-Hee Kim)



1979년 부산대학교 물리교육학과 (이학사)

1986년 University of Georgia, Computer science (이학석사)

1989년 University of Georgia, Mathematics (이학석사)

1993년 University of South Carolina, Computer science (이학박사)

1994년 호서대학교 컴퓨터공학과 교수

※ 관심분야 : 데이터분석, 분자동력학