

노즐 형상에 따른 터빈 축동력 형성 비교를 위한 분자동역학 시뮬레이션

김수희*

Molecular Dynamics Simulation to compare Turbine Rotational Power based on Nozzle Shapes

Su-Hee Kim*

요 약

노즐모양이 터빈의 회전력과 축동력에 미치는 영향을 분석하기 위해, 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하였다. 3 개의 파라메타, 노즐모양, 터빈의 회전속도 w , 분자들의 초기 속도 (V_x, V_y) 값들을 변화하면서, 시뮬레이션을 수행하여 터빈입구와 출구에서 분자들의 터빈 회전방향으로의 속도를 계산하였다. 이 두 영역에 걸쳐 평균 운동량을 각각 계산하고 그 차이(AMD)를 비교 분석하였다. 사용한 노즐 모양을 대상으로 AMD를 향상할 수 있는 w 의 최적의 범위 도출하였으며, 터빈의 축동력 형성에 더 많이 기여할 수 있는 우수한 노즐 모양을 파악하였다.

ABSTRACT

Molecular dynamics simulations were carried out to analyze the impact on turbine rotational power based on nozzle shapes. By varying two parameters, turbine rotational velocity w and initial velocities (V_x, V_y) for generating molecules, turbine rotation velocities of molecules in turbine entrance arc region and turbine exit arc region were calculated. Average momentums were calculated over two regions, respectively and the differences (AMD) were compared and analyzed. The optimal range of w values to enhance AMD was investigated over 4 different nozzle shapes used, and an excellent nozzle shape to achieve more turbine rotational power was drawn.

키워드

Molecular Dynamics, Nozzle, Simulation, Turbine, Turbine Rotational Power
분자 동역학, 노즐, 시뮬레이션, 터빈, 터빈 축동력

1. 서론

기체분자의 운동(열) 에너지를 터빈의 축동력으로 최대한 이용할 수 있는 터빈 설계를 위해, 기체분자의 운동에너지가 터빈에 전달되는 메커니즘을 상세히 이해하고 정확하게 예측하는 것은 매우 중요하다.

터빈 내부에서 과포화된 수증기는 대단히 불안정해서 급격한 응축 또는 팽창이 수반되며, 캐비테이션을 포함한 여러 가지 문제가 일어나는 영역인데, 이에 대한 연구는 활발하지 못하다[1-3]. 기존의 유체역학 연구방법은 액상과 기상을 분리하여 연속체를 기반으로 이론이 발전되어 왔고 기계장치들이 발전되어

* 교신저자 : 호서대학교 컴퓨터정보공학부
• 접수일 : 2018. 12. 14
• 수정완료일 : 2019. 02. 13
• 게재확정일 : 2019. 04. 15

• Received : Dec. 14, 2018, Revised : Feb. 13, 2019, Accepted : Apr. 15, 2019
• Corresponding Author : Su-Hee Kim
Division of Computer and Information Engineering, Hoseo University,
Email : shkim@hoseo.edu

왔다. 이에 반해, 본 연구대상에서는 터빈내부에서 기상과 액상이 공존하며 진공도가 높아지면서 연속체로 볼 수 없는 상황이 되고 분자동력학 연구가 정확성을 더 높일 수 있다[4].

기체 분자의 운동에너지가 터빈에 효율적으로 전달되도록 터빈을 설계하고 개발하는 경비를 줄이기 위해, 여러 형상을 대상으로 분자동력학을 이용한 시뮬레이션을 수행하여 그 특징을 파악하는 것이 좋다. 실질적으로 다양한 실물 제작을 할 수 없으므로, 시뮬레이션을 통해 축동력에 기여하는 요소들의 값들을 비교하여 우수한 형상을 찾고, 또한 실물 제작 후 실험에 의한 오류를 상호 보완하는 역할을 할 수 있으므로 시뮬레이션은 중요한 수단이 된다. 이러한 목적으로 사용하기 위해, 분자동력학 시뮬레이션 시스템을 설계하고 개발하였다[5].

개발한 시스템은 분자들이 계속적으로 일정 위치에서 일정범위의 무작위한 속도로 생성되고, 이들이 노즐 내부를 통과하고 터빈 속으로 진입한다. 터빈 날개의 안쪽 파트에 충돌하면서 터빈 외부 방향으로 전진하고, 바깥 쪽 날개에 의하여 외부로 배출되는 전체 과정에서 분자들의 거동을 모사한다. 기 수행한 연구에서, 몇 개의 노즐 형상을 대상으로 분자동력학 시뮬레이션을 수행하여 터빈의 축동력에 기여할 수 있는 데이터를 비교 분석하였다[6]. 이 연구에서는 분석항목을 더 추가하기 위해 시뮬레이션 시스템을 확장하여 개발하였다. 기존의 분석 항목과 추가한 분석 항목을 결합하여 터빈의 축동력에 기여할 수 있는 효율을 노즐 형상을 중심으로 분석한다.

본 논문의 구성은 다음과 같다. 제 2장은 개발한 시뮬레이션 시스템의 물리적 개요, 노즐 모양, 분자들의 운동에서 적용하는 물리적 이론과 알고리즘을 서술한다. 제 3장에서는 분자들의 터빈 회전방향의 속도가 노즐모양에 따라 다른지를 파악하기 위해 시뮬레이션을 수행하여 관련 데이터를 수집하고 분석한다. 마지막으로 결론에서는 본 논문에 대한 전체적인 결과에 대한 요약과 향후 연구 계획을 언급한다.

II. 시뮬레이션 시스템

노즐과 터빈을 대상으로 하는 분자동력학 시뮬레이션 시스템은 터빈 분야에서는 초기단계로, 거의 파이어나니어 수준이므로 분자 중 가장 간단한 구조를 가진 아르곤(Ar) 분자를 대상으로 개발하였다. 일반적으로 물리적 실험에서 사용하는 파라미터 값들을 모두 1로 가정하는데, 이 시스템에서도 Lennard-Jones 파라미터 ϵ 와 σ 를 1로 가정한다. 또한, 질량(m)과 볼츠만 상수(k_B)도 1로 가정한다[7].

터빈이 3차원이지만, 시뮬레이션의 난이도를 줄이기 위해 터빈의 단면을 대상으로 2차원 시뮬레이션 시스템을 개발하였다. 그리고 시뮬레이션 캔버스의 크기가 수행하는 컴퓨터의 모니터 크기로 제약을 받기 때문에, 터빈을 구성하는 노즐들과 터빈 날개 전체를 모두 포함하지 못하고 일부만을 시스템에 반영하여 개발하였다. 사용한 터빈은 노즐 32개와 터빈 날개 48개로 구성되는데, 시뮬레이션 시스템에서는 노즐 4개와 터빈 날개 5개를 사용하였다. 노즐들은 고정되어 있고, 터빈 날개들은 일정 속도로 회전한다. 회전 속도는 시스템 내부에서 설정이 가능하다.

2.1 노즐 형상

이전에 수행한 연구에서 6개의 서로 다른 모양으로 시뮬레이션을 수행하였다[6]. 그 중, 두 개의 형상은 기존 시뮬레이션에서 분자들이 원활하게 운동하면서 터빈을 빠져나가지 못하고 특정 위치에 누적되어 쌓이는 등 나머지 4개의 형상 보다 훨씬 열등한 거동을 보였으므로, 그 두 개의 형상을 제외하고 그림 1과 그림 2에 있는 4개의 노즐 모양으로 시뮬레이션을 수행한다.

2.1.1 노즐 모양 1-1과 노즐 모양 2-1

노즐 모양 1-1은 가장 처음 시뮬레이션 시스템을 개발하면서 사용한 노즐 모양이다. 이 노즐은 노즐과 터빈을 현장에서 많이 설계하고 제작의 경험이 풍부한 업체에서 제시한 것이다. 시스템을 실행하면서 관찰해보니, 분자들이 노즐 목 근처의 벽과 충돌하면서 노즐 목을 잘 통과하지 못하고, 노즐 입구 방향으로 역으로 운동하는 분자들이 관찰되었다. 이러한 현상

이 노즐목 근처에 있는 경계선들이 뾰족하여 분자들이 경계선들과 강하게 충돌하여 어떤 분자들은 순방향으로 진행하지 못하고 노즐입구로 역주행하는 것으로 파악되었다. 이를 개선하여 고안한 것이 노즐 모양 2-1인데, 1-1 노즐 목 주변의 선들을 변경하여 조금 더 부드럽게 연결한 것이다.

2.1.2 노즐 모양 1-2와 노즐 모양 2-2

노즐 모양 1-1을 이용한 시스템에서 분자들이 노즐출구를 빠져나오면서 너무 자유롭게 흩어지는 것이 관찰되었다. 분자들이 터빈의 회전방향으로 운동하는 것이 축동력 형성에 도움이 되는데, 자유롭게 방향성 없이 운동하는 패턴은 도움이 되지 않는다. 그래서 노즐출구 부분의 왼쪽 선을 좀 더 길게 연장하면, 터빈의 회전 방향으로 분자들이 운동하도록 유도할 수 있을 것 같아 조금 더 길게 설계해 보았다.

노즐 모양 1-2와 2-2는 각각 노즐 모양 1-1과 2-1에서 노즐출구 부분의 왼쪽 선을 좀 더 길게 연장한 것이다.

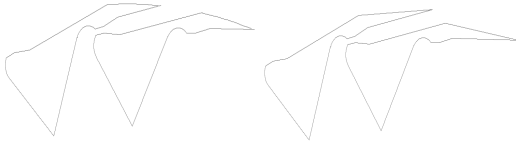


그림 1. 노즐 모양 1-1과 1-2
Fig. 1 Nozzle Shapes 1-1 and 1-2

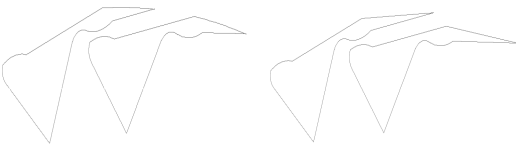


그림 2. 노즐 모양 2-1과 2-2
Fig. 2 Nozzle Shapes 2-1 and 2-2

2.2 분자들의 생성

분자들이 노즐을 통과하는 시간을 줄이기 위해, 각 노즐마다 노즐 목에 가까운 입구에 분자들이 생성되도록 하였다. 각 분자들이 생성될 때, 분자들의 속도를 일정 범위에 분포하도록 랜덤하게 설정한다. 일반적으로 배기가스가 노즐을 통하여 들어갈 때, 매우 빠른 속도로 노즐 입구로 투입된다. 이와 유사하

게 분자들의 초기 속도를 설정하기 위해, X 방향으로는 매우 낮은 속도를 무작위로 설정하고, Y 방향으로는 매우 높은 속도를 무작위로 설정한다.

분자들이 처음으로 생성될 때에, 생성 위치(X, Y), 초기 속도 (V_x, V_y)가 설정되며 가속도 (A_x, A_y)는 각각 0이다. 분자들에 대한 위치, 속도, 가속도 데이터를 시스템이 관리한다. 시뮬레이션을 시작하면, 분자들이 운동을 하면서 다른 위치로 운동하므로, 시뮬레이션 시스템은 계속적으로 그 위치에 분자들을 생성한다.

2.3 분자들의 운동

잘 알려진 대로 분자들은 적절히 떨어진 거리에서는 서로 당기는 힘이 작용하지만, 점점 가까워지면서 강하게 미는 힘이 작용한다. 두 분자가 서로 당기는 힘과 미는 힘을 계산하기 위해 Van Der Waals force와 Lennard Jones Potential을 사용한다[8-9]. 그리고 분자들은 노즐의 선과 터빈의 선들과 충돌하면서 운동한다. 이 시뮬레이션에서는 노즐의 선과 터빈의 선들과의 충돌을 완전 탄성충돌로 가정한다. 그러므로 한 분자를 중심으로 볼 때, 자신의 주위에 있는 분자들과 Van Der Waals force와 Lennard Jones Potential에 의한 힘과 노즐과 터빈 날개와의 충돌로 인한 가속도의 변화로 계속적으로 속도가 변화되면서 운동한다. 분자의 현재 위치, 속도와 가속도를 이용하여 일정시간 이후에 그 분자의 새로운 위치를 계산하기 위해 velocity Verlet algorithm을 사용한다 [10].

분자들이 분자들끼리의 충돌과 노즐선과 충돌을 계속하면서 노즐 내부를 거쳐 노즐출구를 통과하여 터빈입구로 진입하고, 회전하는 터빈 날개에 충돌하면서 분자들이 가지고 있는 운동에너지를 터빈의 축동력으로 전달하고, 속도를 점점 잃으면서 터빈의 바깥 날개벽과 충돌하면서 터빈 밖으로 배출된다. 참고로, 시뮬레이션을 수행하는 캔버스의 크기가 900으로 한정되어 있으며, 분자들이 규정한 영역을 벗어나면 시스템에서 제외된다.

2.4 분자들의 터빈 회전 방향으로의 운동량

터빈 구조에서 노즐은 고정되어 있고, 터빈은 시계방향으로 일정 속도로 회전한다. 분자들이 노즐을

통과하여 터빈 날개들과 충돌하면서 운동을 할 때, 각 분자들이 터빈 날개 안쪽에서는 회전방향으로 운동하는 속도가 크면 클수록 터빈의 축동력 형성에 도움이 된다. 이와는 반대로 터빈 날개 바깥쪽에서는 분자들의 속도가 매우 낮아지고 회전방향의 운동속도도 낮아지는 것이 좋다. 왜냐하면 터빈의 회전방향으로의 속도가 감소한 만큼의 운동에너지가 터빈으로 전달되어 터빈의 축동력으로 사용될 수 있기 때문이다.

운동량을 계산하는 량을 줄이면서 효율적으로 분석하기 위해 터빈입구와 터빈출구를 통과하는 분자들을 대상으로 데이터를 수집한다. 터빈입구와 터빈출구에서 분자들의 터빈 회전 방향의 속도를 각각 계산하고, 그 속도의 차이가 크면 클수록 그만큼 터빈 축동력 형성에 긍정적인 영향을 준다고 해석할 수 있다. 그리고 이 시뮬레이션에서는 기존에 수행한 연구에서 코딩에서의 미흡한 부분을 개선하고, 좀 더 심화하여 일정량의 분자들이 터빈입구와 터빈출구를 통과하는 데 걸리는 시간을 측정하여, 단위 시간당 분자들의 분포를 계산한다. 이 값과 회전방향의 운동속도로 운동량을 계산하여 비교할 수 있다.

2.4.1 주요 위치

터빈입구와 출구에서 터빈 회전 방향으로의 속도를 계산한다. 터빈입구(A), 터빈출구(B)와 노즐출구(C)는 터빈의 회전 중심으로부터 거리가 각각 1500, 1890, 1415인 호이다.

- 터빈입구(A): 터빈 회전 중심에서 거리가 1500인 호
- 터빈출구(B): 터빈 회전 중심에서 거리가 1890인 호
- 노즐출구(C): 터빈 회전 중심에서 거리가 1415인 호

2.4.2 속도 데이터 수집

각 분자들이 주요위치를 통과할 때, 그 분자들의 속도를 이용하여 회전방향의 속도를 계산하여 엑셀 파일에 저장한다. 그리고 각 주요위치에 일정 수의 분자들이 통과하는데 걸리는 시간을 역시 측정한다.

이 시뮬레이션에서는 10,000개의 분자들의 속도 데이터를 엑셀 파일에 저장하고, 각 주요 위치에 10,000개의 분자들이 통과하는데 걸리는 시간을 측정하여 분석에 사용한다.

2.4.3 분자들의 터빈 회전 방향의 속도

터빈입구, 터빈출구, 노즐출구의 호를 지나가는 각 분자들의 속도 (V_x, V_y)를 이용하여 터빈이 회전하는 방향으로의 분자들의 속도 크기를 스칼라로 계산한다[11]. 분자들의 터빈 회전 방향의 속도는 터빈 회전의 중심으로부터 특정 분자의 위치까지를 반지름으로 하는 원을 그리고, 그 분자의 위치에서 이 원의 접선 방향의 속도이다.

터빈 회전의 중심을 (cx, cy) 라 하고, 분자의 위치를 (X, Y) , 분자의 속도를 (V_x, V_y) 라고 하자.

$$(cx, cy) \text{와 } (X, Y) \text{ 사이의 기울기는 } \frac{(Y-cy)}{(X-cx)} \quad (1)$$

(X, Y) 에서 원의 접선의 기울기는

$$\text{slope} = -\frac{(X-cx)}{(Y-cy)} \quad (2)$$

이에 대한 단위 벡터는

$$\left(\frac{1.0}{\sqrt{1+\text{slope}*\text{slope}}}, \frac{\text{slope}}{\sqrt{1+\text{slope}*\text{slope}}} \right) \quad (3)$$

이 분자의 터빈 회전 방향의 속도의 크기는

$$\frac{1.0}{\sqrt{1+\text{slope}*\text{slope}}} * V_x + \frac{\text{slope}}{\sqrt{1+\text{slope}*\text{slope}}} * V_y \quad (4)$$

4) 분자들의 터빈 회전 방향의 운동량

각 주요 위치에 10,000개의 분자들이 통과하는데 걸리는 시간 T 를 이용하여, 단위 시간당 해당 위치에 분포하는 평균 분자들의 수를 계산할 수 있고, 이를 이용하여 운동량을 계산할 수 있다[12].

$RV[i]$: i 번째 분자의 터빈 회전 방향의 속도

T : 10,000개의 분자들이 통과하는데 걸리는 시간

ARV : 10,000개의 분자들의 회전방향의 속도 평균

AN : 단위 시간당 분포하는 분자들의 개수

AMV : 평균 운동량

$$ARV = \frac{\sum_{i=1}^{10000} RV[i]}{10000} \quad (5)$$

$$AN = \frac{10000}{T} \quad (6)$$

$$AMV = AN * ARV \quad (7)$$

III. 시뮬레이션 수행

4가지 모양의 노즐들을 대상으로 터빈 회전속도와 분자들의 초기 속도를 변화해가면서 터빈입구와 터빈출구에서 분자들의 터빈 회전 방향의 운동량의 차이를 최대로 할 수 있는 노즐모양, 최적의 터빈 회전속도, 최적의 분자들의 초기속도 설정 값을 도출한다. 이전에 수행한 시뮬레이션에서 터빈의 회전속도 ($w = -0.015^\circ$)가 느린 경우, 터빈의 입구와 출구에서 터빈 회전 방향의 속도의 차가 상대적으로 적었으므로, 이 시뮬레이션에서는 터빈의 회전속도를 그 보다 더 빠르게 설정하여 분석한다.

3.1 시뮬레이션 관련 파라메타

이 시뮬레이션에서는 터빈 회전속도 w 를 -0.025° 와 -0.03° 로, 분자 생성시의 초기 속도 (V_x, V_y)를 범위 $(-0.5 \sim 0.5, 249.5 \sim 250.5)$, 범위 $(-0.5 \sim 0.5, 249.5 \sim 250.5)$ 내에서 각각 랜덤하게 설정하고, 가속도는 0으로 설정한다.

각 분자들은 설정한 초기 속도로 인접하게 있는 분자들과 인력과 척력으로, 노즐의 선과 충돌하여 속도와 가속도의 변화가 있게 된다. 시스템은 노즐 입구의 정해진 위치에 분자들을 계속적으로 생성하고, 시간이 지나면서 시스템 내부에 분자들의 수가 점점 많아지게 된다. 현재 시뮬레이션 시스템에서는 시스템 내부에서 운동하는 분자들의 수가 20,000개 정도 되면 노즐들 사이와 터빈날개 사이에 분자들이 상당히 분포하게 된다.

이때부터, 각 주요위치의 호를 통과하는 분자들을 10,000개까지 속도 데이터를 수집하고, 터빈 회전 방향의 속도를 계산하여 엑셀 파일로 저장한다. 그리고 각 위치에 10,000개의 분자들이 통과하는데 걸리는 시간을 측정한다.

■ 설정 파라메타

- 터빈 회전속도 w : $-0.025^\circ, -0.03^\circ$
- 분자들의 초기 속도 (V_x, V_y)
($-0.5 \sim 0.5, 249.5 \sim 250.5$), ($-0.5 \sim 0.5, 299.5 \sim 300.5$)
- 분자들의 초기 가속도: 0
- 데이터 수집 시작: 시스템 내부 분자들의 수 20,000개 되는 시점

- 수집 규모: 10,000개의 분자
- 수집 위치: 터빈의 회전 중심에서 거리
노즐출구 1415, 터빈입구 1500, 터빈출구 1890

■ 수집/계산 파라메타

- 분자들의 속도 (V_x, V_y) 수집
- 분자들의 터빈 회전 방향의 속도 계산
- 수집 위치에 10,000개의 분자들이 통과하는데 걸리는 시간 수집

3.2 데이터 분석

터빈 회전 속도 파라미터 2개의 값, 분자 초기 속도 파라미터 2개의 범위 값, 노즐 모양 4개를 각각 조합하면, 전체 16개의 시뮬레이션 세트가 된다.

<표 1>은 16개 세트에 대한 시뮬레이션 결과 데이터이다. 각각의 세트는 모두 4번씩 동일한 시뮬레이션을 반복하여 평균을 구한 것이다. [Fig. 3-Fig. 5]는 터빈입구와 출구의 회전 방향의 속도 차이, 터빈입구에서 단위시간당 분자들의 분포, 터빈입구와 출구의 터빈 회전 방향의 속도 차이를 그래프로 각각 그린 것이다.

<표 1>에서 사용한 기호들의 의미는 다음과 같다.

- 1: 노즐출구 2: 터빈입구 3: 터빈출구
- V_1, V_2, V_3 : 터빈회전 방향의 평균 속도
- T_1, T_2, T_3 : 10,000개의 분자 통과 소요 시간
- D_1, D_2, D_3 : 단위시간당 분포하는 평균 분자들 수
 $-D_1 = \frac{10000}{T_1}, D_2 = \frac{10000}{T_2}, D_3 = \frac{10000}{T_3}$ (8)
- $V_2 - V_3$: 터빈 회전 방향의 평균 속도의 차이
- $(V_2 - V_3) * D_2$: 터빈회전 방향 평균 운동량 차이
- 참고: 노즐 32개와 터빈 날개 48개를 모두 포함하여 시뮬레이션을 수행하면, T_1, T_2, T_3 의 값은 거의 비슷할 것이다. 그러나 시뮬레이션을 수행하는 캔버스의 크기가 900으로 한정되어 있어, 사용한 노즐은 4개, 터빈 날개는 5개이다. 그리고 많은 분자들이 터빈출구에 도달하기 전에 회전하면서 캔버스 영역을 벗어나면서 제외된다. 그러나 터빈입구는 캔버스의 안쪽에 위치하므로, 이 영역에서는 제외되는 분자들이 거의

없다. 그래서 시간당 분포하는 평균 분자들의 수는 터빈입구의 값을 이용하여 계산한다.

표 1. 노즐 모양에 따른 16 세트 시뮬레이션 결과
Table 1. 16 Simulation results based on nozzle shapes

Initial Velocity of Molecules (V_x, V_y), Turbine Angular Velocity w	Nozzle Shape	Nozzle Exit	Turbine Entrance	Turbine Exit	
		V_1 T_1 D_1	V_2 T_2 D_2	V_3 T_3 D_3	$(V_2 - V_3) * L$
(V_x, V_y) (-0.5~0.5, 249.5~250.5) $w: -0.025^\circ$	1-1	131.97	86.79	50.97	35.82
		65.86	66.37	93.77	
		151.84	150.67	106.64	5,397.00
	1-2	81.13	88.44	51.21	37.23
		45.00	64.97	91.26	
		222.22	153.92	109.58	5730.41
	2-1	138.56	101.44	43.72	57.73
		74.61	76.25	112.60	
		134.03	131.15	88.81	7571.15
	2-2	128.11	76.57	51.76	24.81
		80.14	78.67	105.72	
		124.78	127.11	94.59	3153.68
(V_x, V_y) (-0.5~0.5, 299.5~300.5) $w: -0.025^\circ$	1-1	153.38	100.74	55.60	45.13
		56.95	56.35	79.92	
		175.59	177.46	125.13	8008.87
	1-2	81.48	97.79	53.84	43.95
		35.65	56.17	67.37	
		280.50	178.03	148.43	7824.46
	2-1	155.85	114.21	44.47	69.74
		62.67	64.55	84.34	
		159.57	154.92	118.57	10804.03
	2-2	134.48	81.66	57.53	24.12
		60.76	61.16	73.30	
		164.58	163.51	136.43	3943.75
(V_x, V_y) (-0.5~0.5, 249.5~250.5) $w: -0.03^\circ$	1-1	131.00	84.17	58.63	25.54
		66.19	64.40	105.84	
		151.08	155.28	94.488	3965.85
	1-2	77.74	90.12	58.53	31.59
		43.47	65.66	96.04	
		230.04	152.30	104.12	4811.16
	2-1	144.06	105.79	55.54	50.25
		72.33	73.63	120.15	
		138.26	135.816	83.23	6824.75
	2-2	126.32	75.27	60.15	15.12
		75.98	75.77	112.28	
		131.61	131.98	89.06	1995.54
(V_x, V_y) (-0.5~0.5, 299.5~300.5) $w: -0.03^\circ$	1-1	150.11	97.60	63.65	33.95
		58.90	58.18	81.54	
		169.78	171.888	122.64	5835.60
	1-2	79.13	100.47	62.26	38.21
		35.29	55.86	76.04	
		283.37	179.02	131.51	6840.35
	2-1	166.97	120.20	57.32	62.88
		66.57	67.81	95.00	
		150.22	147.47	105.26	9272.91
	2-2	136.58	84.62	62.22	22.4
		64.18	63.65	81.88	
		155.82	157.11	122.13	3519.26

표 2. 터빈 출구에서 분자들의 평균 속도
Table 2. Average velocity of molecules at turbine exit

Initial Velocity of Molecules V_x, V_y Turbine Angular Velocity w			Nozzle Shape			
V_x	V_y	w	1-1	1-2	2-1	2-2
-0.5~0.5	249.5~250.5	-0.025°	248.08	250.45	249.07	251.49
	299.5~300.5		297.07	299.91	300.46	302.26
	249.5~250.5	-0.03°	250.17	249.81	251.09	254.14
	299.5~300.5		298.70	299.72	302.26	301.25

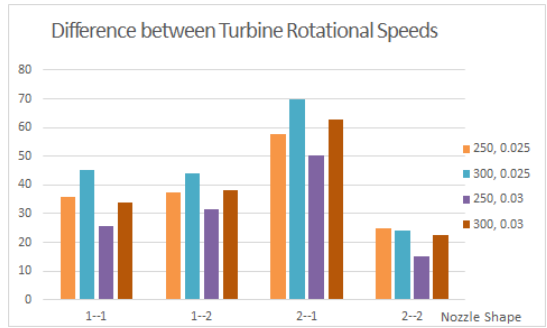


그림 3. 터빈입구/출구에서 분자들 터빈회전 방향의 속도 차이
Fig. 3 Difference between turbine rotational speeds at turbine entrance and exit

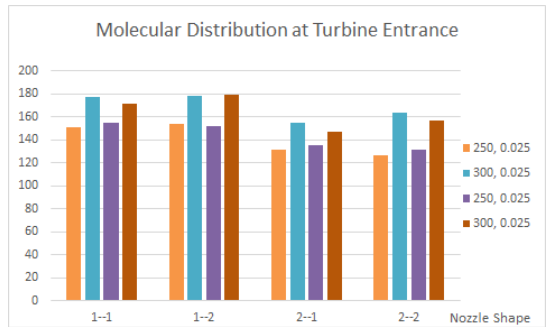


그림 4. 터빈 입구에서 단위 시간당 분자들의 분포
Fig. 4 Molecular distribution at turbine entrance

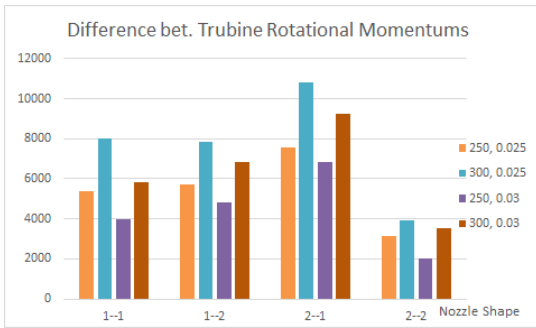


그림 5. 터빈입구/출구 분자들 터빈회전 방향 운동량 차이
Fig. 5 Difference between turbine rotational momentums at turbine entrance and exit

- 1) 노즐출구와 터빈입구에서 터빈 회전 방향의 평균 속도는 노즐 2-1에서 가장 크다.
- 2) 터빈출구에서 터빈 회전 방향의 평균속도는 노즐 2-1에서 가장 작다.
- 3) 터빈입구/출구에서 회전 방향의 평균 속도의 차이는 노즐 2-1에서 가장 크다.
- 4) 노즐 1-1과 노즐 1-2에서 단위 시간당 평균 분자들의 분포가 더 큰 편이다.
- 5) 터빈입구와 출구에서 회전 방향의 평균 운동량의 차이는 노즐 2-1에서 가장 크다.
- 6) 분자들의 Y 방향의 초기 속도를 299.5~300.5로 설정한 것이 249.5~250.5로 설정한 것 보다 터빈 회전 방향의 평균 운동량의 차이가 더 크다. Y 방향의 속도가 증가하면 모든 노즐에서 회전 방향 평균 운동량의 차이가 더 증가한다.
- 7) 터빈의 회전 속도 w 를 -0.025° 로 설정한 것이 w 를 -0.03° 로 설정한 것보다 평균 운동량의 차이가 더 크다. 이전의 시뮬레이션에서 w 를 -0.025° 로 설정한 것이 w 를 -0.015° 로 설정한 것보다 운동량의 차이가 더 크다. 터빈의 회전속도를 -0.05° 로 설정하여 시뮬레이션을 수행하니, 터빈 출구에서 회전 방향의 평균 속도가 터빈입구에서 보다 더 크게 계산되었다. 터빈의 회전속도 $w > -0.03^\circ$ 로 설정하면 터빈의 축동력을 얻는데 도움이 되지 않음을 알 수 있다. 터빈의 회전 속도를 w 를 -0.025° 로 설정하는 것이 최적으로 가까움을 파악할 수 있다.
- 8) [Table 1]을 보면 터빈입구에서 분자들의 평균 운

동속도는 노즐 모양에 관계없이 비슷하다. 노즐 선과의 충돌을 탄성충돌로 계산하였으므로, 운동량이 보존되므로 당연한 결과라고 볼 수 있다. 그러나, 회전 방향의 속도는 노즐 모양에 따라 크게 다를 수 있다.

- 9) 노즐 1-2와 노즐 2-2는 원래의 모양에서 노즐출구 부분의 왼쪽 선을 좀 더 길게 연장한 것이다. 그러나 육안으로 관찰하는 것과는 달리, 회전 방향의 속도 개선에는 별로 영향을 주지 못하는 것을 파악할 수 있다.
- 10) 분자들의 초기 Y 방향의 속도가 클수록, $(V_2 - V_3) * D_2$ 의 값이 더 크다. 이 점은 실제로 터빈을 제작하여 운전할 때, 소모비용 대비 최적의 효율을 낼 수 있는 배기가스의 속도를 선택해야함을 시사한다.
- 11) 노즐 모양 2-1은 터빈의 회전속도나 분자들의 초기 속도의 선택에 상관없이 터빈 입구와 출구에서의 운동량의 차이가 가장 크다. 터빈의 회전속도 w 를 -0.025° 로 설정하고, 분자들의 초기 생성 속도 중 Y 방향의 속도를 높여주면, 다른 회전 속도 보다 더 좋은 축동력을 얻을 수 있다.

IV. 결론

이 연구에서는 노즐모양이 터빈의 축동력에 미치는 영향을 분석하기 위해, 4가지 모양의 노즐들을 대상으로 터빈 회전속도와 분자들의 초기 속도를 변화해가면서 시뮬레이션을 수행하였다. 노즐 모양 4개, 터빈의 회전속도 2개의 값, 분자들의 초기 생성시의 속도설정 범위 2개를 조합하여 전체 16개의 세트로 시뮬레이션을 수행하여 수집하고 계산한 데이터로 터빈의 입구와 출구에서의 터빈 회전 방향으로의 운동량 차이를 비교 분석하였다.

하나의 노즐 모양에서 터빈의 회전속도나 분자들의 초기 속도의 선택에 상관없이 터빈 입구와 출구에서의 운동량의 차이가 다른 노즐 모양의 운동량의 차이에 비해 가장 크다는 것을 분석하였다.

그리고 터빈의 회전속도를 변화해가면서 터빈 입구와 출구에서의 운동량의 차이가 가장 많이 나는 최적의 터빈 회전 속도 영역을 도출하였다. 이 영역

의 회전 속도를 이용하여 분자들의 초기 속도에서 Y 방향의 속도를 높여주면, 더 높은 운동량의 차이를 얻을 수 있음을 파악하였는데, 이 점은 실제로 터빈을 제작하여 운전할 때, 소모비용 대비 최적의 효율을 낼 수 있는 속도를 선택해야함을 시사한다.

시뮬레이션 캔버스의 크기가 제한이 있어서, 터빈 전체를 대상으로 하지 못하고, 노즐 일부와 터빈 날개 일부로 시뮬레이션을 수행하였다. 터빈이 시계방향으로 회전하므로 많은 분자들이 터빈출구로 나가기 전에 캔버스의 오른쪽으로 밀려나서 시스템에서 제외된다. 좀 더 정확한 데이터를 분석하기 위해서는 노즐 전체와 터빈 날개 모두를 대상으로 완전한 원의 형태로 시뮬레이션을 하는 것이 필요하고, 그 다음으로 이를 더 확장하여 3차원으로 수행하는 것이 필요하다.

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 Molecule Dynamics Simulation," *J. of The Korean Society of Mechanical Engineers*, vol. 43, Mar. 2003, pp. 49-57.
- [3] D. Liuzzi, "Two-Phase Cavitation Modelling," Ph.D Dissertation, *University of ROME*, 2012, pp. 11-17.
- [4] J. Na, J. Lee, C. Hong and S. Kim, "Molecular Clustering and Velocity Increase in Converging-Diverging Nozzle in MD Simulation," *International Conference on Mechanical, Aeronautical and Automotive Engineering*, Malacca, Malaysia, Feb. 2017.
- [5] S. Kim, "Molecular Dynamics Simulation Design and Implementation for Nozzles and Turbines," *J. of the Korea Institute of Electronic Communication Sciences*, vol. 14, no. 1.
- [6] S. Kim, N. Joo and J. Na, "Molecular Dynamic Simulation for Convergence-Diverging Nozzle Performance," *Woman ICT Committee Conference, Korea Institute of Information and Communication Engineering*, Cheonan, Korea, Aug., 2018, pp. 132-135.
- [7] D. Schroedera, "Interactive molecular dynamics," *Am. J. Phys.*, vol. 83, no. 3, Mar. 2015, pp. 210-218.
- [8] B. R. Holstein, "The van der Waals interaction," *Am. J. Phys.* vol. 69, no. 4, 2001, pp. 441 - 449.
- [9] J. Jones, "On the Determination of Molecular Fields," *In Proc. Royal Society of London, England*, October, 1924, pp. 463 - 477.
- [10] L. Verlet, "Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules," *Physical Review*. vol. 159, 1967, pp. 98-103.
- [11] S. Axler, *Linear Algebra Done Right*, 3rd Edition, New York: Springer, 2015.
- [12] A. Serway and S. Faughn, *Physics*, 3rd Edition, New York: Holt, RINEHART and WINSTON, 2006.

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, 분자동역학