

체커보드 형상을 가진 3차원 복합소재의 연결도와 전도율

김 인 찬*

(2003년 8월 18일 접수, 2003년 11월 29일 심사완료)

Connectivity and Conductivity of a Three-Dimensional Checkerboard-Shaped Composite Material

In Chan Kim

Key Words: Checkerboard(체커보드), Connectivity(연결도), Effective Conductivity(유효전도율), Brownian Motion Simulation Method(브라운운동 시뮬레이션방법), First-Passage-Time Technique(최초경과시간기법)

Abstract

We consider the problem of whether the three-dimensional checkerboard has the connectivity. For this purpose, we first consider the problem of determining the effective conductivity of a checkerboard-shaped composite material by the Brownian motion simulation method. Specifically, we use the efficient first-passage-time technique. Simulation results show that the effective conductivity of the three-dimensional checkerboard increases faster than the two-dimensional counterpart as the contrast between the phase conductivities increases. This implies that the three-dimensional checkerboard's connectivity is stronger than the two-dimensional checkerboard's and thus each phase material of the three-dimensional checkerboard is more likely to be connected than not to be connected.

1. 서 론

복합소재의 물성치는 일반적으로 소재를 구성하는 각 상(phase)의 고유물성치(phase property)와 각 상의 구성비율, 그리고 복합소재 내에서 각 상이 배치된 배열이나 형상에 따라 달라지게 된다. 특히 각 상의 고유물성치나 구성비율은 복합소재의 외적 조건으로서 복합소재의 유효물성치(effective property)에 미치는 영향이 명백하지만, 복합소재 내에서 각 상이 배열된 내적 형상(internal configuration)이 미치는 영향의 정도나 영향을 미치는 방법 등을 규명하기 위해서는 상당한 공학적, 물리학적 고찰이 필요하다. 복합

소재의 내적 형상이 유효물성치에 미치는 영향을 수학적으로 정확하게 규명하려면 무한한 개수의 상관함수(correlation function)가 알려져야 하지만 이는 특별한 예를 제외하고는 일반적으로 불가능한 일이다. 그러나 비록 무한한 개수의 상관함수가 알려져 있지 않아도 복합소재의 어떤 물리적인 특성이 특정한 물성치에 결정적인 영향을 미치는 것은 직관적으로나 경험적으로 쉽게 알 수 있는 경우가 드물지 않다. 특히 복합소재를 구성하는 각 상의 소재들이 서로 연결되었는지의 여부, 즉 연결도(connectivity)는 복합소재의 기계적 성질(mechanical property)이나 이동성질(transport property) 등의 유효물성에 결정적인 영향을 미치게 된다. 예를 들어, 대표적인 이동성질의 하나인 전도율(conductivity)을 결정하는 문제를 생각해 보자. 부도체, 즉, 전도율이 영인 기초소재(matrix material)에 도체, 즉, 전도율이 영이 아닌 소재를 점차적으로 첨가하여 복합소재

* 회원, 군산대학교 기계공학부

E-mail : ickim@kunsan.ac.kr
TEL : (063)469-4720 FAX : (063)469-4727

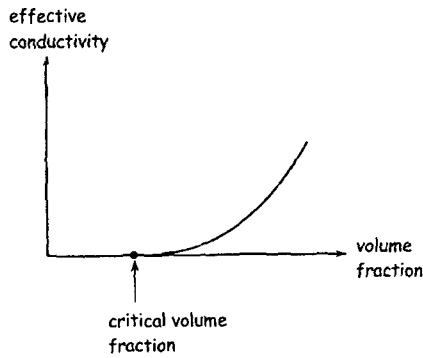


Fig. 1 Effective conductivity of a heterogeneous material in which the conducting material is dispersed in the insulating matrix. Conductivity increases as the volume fraction of conducting phase increases

를 구성한다고 할 때, 첨가된 소재가 서로 연결 되기 전에는 복합소재의 유효 전도율(effective conductivity)이 영으로 유지될 것이고 첨가된 소재의 체적비가 일정한 값 이상이 되어서 서로의 연결(connectedness)이 확립되어야 복합소재가 전도성을 갖게 될 것이다.⁽¹⁾ 즉, 연결된 소재가 전도성을 가지면, 복합소재 역시 전도성을 갖게 된다. Fig. 1은 이같은 관계를 설명하는 예이다. 만약, 연결된 소재가 초전도성을 가지면, 즉, 전도저항이 영인 소재라면, 복합소재 내에서 초전도성을 가지는 전도 경로가 형성되므로, 복합소재는 초전도성을 띠게 될 것이다.

다양한 종류의 변화를 가지는 복합소재의 형상 중 특별한 한가지 예는 서양장기판, 즉 체커보드(checkerboard) 형상의 소재이다. Fig. 2(a)에 나타난 체커보드 형상의 2차원 복합소재의 유효 전도율을 계산하는 문제는 얼핏 단순한 문제 같지만 여러 가지 생각해 볼 점들을 내포하고 있다. Fig. 2(a)에서 흰색의 사각형은 전도율이 σ_1 인 상 1을, 검은 색의 사각형은 전도율이 σ_2 인 상 2를 나타낸다고 하자. 그림에서 보이는 복합소재의 형상에서, 상 1, 또는 상 2의 소재는 서로 연결되어 있는가? 이 문제에 답하기 위해서는 복합소재의 유효전도율 σ_e 를 계산하는 것이 한가

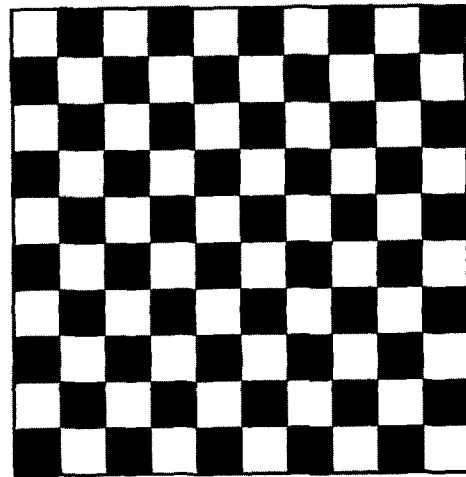


Fig. 2(a) Checkerboard geometry in two-dimensions

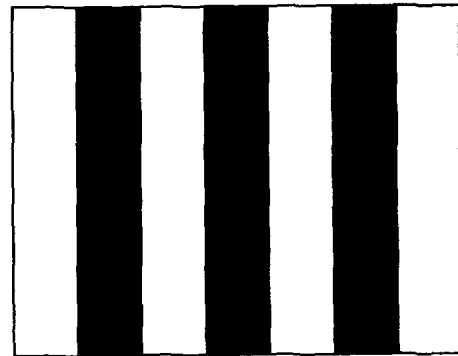


Fig. 2(b) Checkerboard geometry in one-dimension

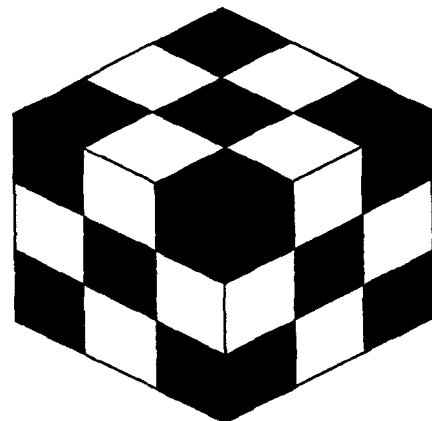


Fig. 2(c) Checkerboard geometry in three-dimensions

지 방법일 것이다. 다행히 이 문제에 대한 해석적 결과는 Keller⁽²⁾의 상호환정리(phase interchange theorem)를 이용하여 얻을 수 있다. 이 정리에 의하면, Fig. 2의 2차원 체커보드 형상의 복합소재의 유효 전도율 σ_e 는

$$\sigma_e = \sqrt{\sigma_1 \sigma_2} \quad (1)$$

의 간단한 관계식으로 주어진다. 식 (1)의 결과를 바탕으로 복합소재 내 상 1과 상 2의 연결도를 생각해 보자. 먼저, 전도율 영인 기초소재 상 1에 전도율 1인 소재 상 2가 첨가된 경우를 생각해 보면, $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 1$ 이므로, 식 (1)에 의해 $\sigma_e = 0$ 이 되고 이것은 전도성을 가진 상 2가 서로 연결되지 않음을 의미한다. 이번에는 전도율 1인 기초소재 상 1에 초전도성을 가지는 상 2가 첨가된 경우를 생각해 보자. 이때, $\sigma_1 = 1$, $\sigma_2 = \infty$ 이므로, 식 (1)에 의해 $\sigma_e = \infty$ 로 되어 복합소재는 초전도성을 띠게 되고, 이는 상 2가 서로 연결되어 있음을 의미하게 된다. (i) $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 1$ 인 경우와 (ii) $\sigma_1 = 1$, $\sigma_2 = \infty$ 인 경우를 함께 고려할 때, Fig. 2(a)의 2차원 체커보드에서 상 2는 (그리고 상 1 역시 마찬가지로) 서로 연결된 것으로 볼 수도 있고 서로 연결되지 않은 것으로 볼 수도 있다. 결론적으로 말하면, 연결된 상태와 연결되지 않은 상태의 중간 상태(semi-connected state)라 할 수 있다. 체커보드 형상의 복합소재는 전도성을 가진 소재가 매우 좁은 경로를 통해 연결된 경우를 모델링한다는 점과 수치해석 방법의 타당성을 점검할 수 있는 벤치마크 문제를 제공한다는 점에서 중요한 이론적 모델이다.

2차원 체커보드 형상 복합소재를 1차원과 3차원으로 확장시킨 소재 형상은 Fig. 2(b)와 Fig. 2(c)로 생각할 수 있다. Fig. 2(b)에 나타낸 1차원 복합소재에서는 상 1과 상 2가 반복적으로 배열되어 있으며 이같은 소재를 1차원 체커보드라 할 수 있을 것이다. 1차원 체커보드의 유효전도율은 쉽게 계산할 수 있다. 흰색으로 나타낸 상 1의

전도율을 σ_1 , 검은 색으로 나타낸 상 2의 전도율을 σ_2 라 할 때, 유효전도율 σ_e 는

$$\sigma_e = 2 \left(\frac{1}{\sigma_1} + \frac{1}{\sigma_2} \right)^{-1} \quad (2)$$

로서 σ_1 과 σ_2 의 조화평균값을 가진다. 2차원 체커보드의 유효전도율의 관한 식 (1)이 σ_1 과 σ_2 의 기하평균값인 것을 고려할 때 1차원과 2차원 체커보드 사이에 흥미로운 상관관계가 있음을 알 수 있다. 또 1차원 체커보드에 관한 식 (2)는 각 상의 연결도를 알 수 있게 해준다. 먼저 $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 1$ 인 경우, $\sigma_e = 0$ 이 되어 전도성을 가진 상 2가 서로 연결되지 않음을 의미한다. 또 $\sigma_1 = 1$, $\sigma_2 = \infty$ 인 경우, $\sigma_e = 2$ 로 되어 초전도성을 가진 상 2가 서로 연결되지 않았음을 나타낸다. 물론 Fig. 2(b)에서 명백하게 확인되었듯이 1차원 체커보드의 경우 각 상 소재끼리는 서로 단절되어 있다. 이렇게 명백한 연결도와 유효 전도율에 관한 논의를 Fig. 2(c)의 3차원 체커보드 형상을 가진 복합소재에 적용하는 것은 생각처럼 단순하지 않다. 우선, 흰색으로 나타낸 상 1의 정육면체와 검은 색으로 나타낸 상 2의 정육면체가 엇갈리게 배열된 3차원 체커보드의 경우, 각 상끼리 서로 연결된 것인지, 연결되지 않은 것인지 명확하지 않다. 또 3차원 체커보드의 경우, 식 (1)과 (2)에 상응하는 유효전도율에 관한 해석적 관계식이 존재하지 않는다. 더욱이 2차원이나 3차원 체커보드의 경우, 해석적 방법을 대신할 수치적인 방법을 적용하려 해도, 모서리를 통한 이동현상이 중요한 구조적 특성 상, 통상적인 수치해석법인 유한차분법이나 유한요소법에 의해 정확한 유효전도율을 계산하기 어렵다는 것이 Torquato 등⁽³⁾에 의해 이미 밝혀진 바와 같다. 따라서 이같은 어려움을 극복할 수 있는, 즉 매우 좁은 경로를 통한 이동현상을 정확하게 포착할 수 있는 수치해석 방법이 요구된다. 다행히 이런 요구에 부응하는 새로운 수치해석 방법이 최근 개발된 바 있는데,⁽³⁻⁶⁾ 이 새로운 수치해석법은 유한차분법이나

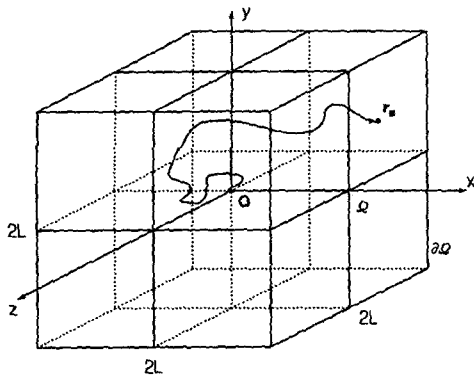


Fig. 3(a) A Brownian walker starting from the origin eventually arrives at the boundary of the first-passage cube of volume $8L^3$. The homogeneous first-passage region is consisted of eight identical unit cubes

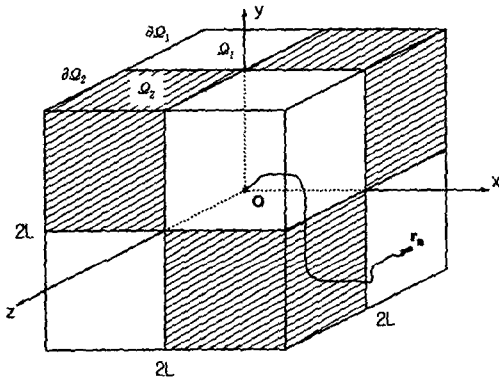


Fig. 3(b) A Brownian walker starting from the origin eventually arrives at the boundary of the first-passage cube of volume $8L^3$. The heterogeneous first-passage region is consisted of eight unit cubes. Here, $\Omega = \Omega_1 + \Omega_2$ and $\partial\Omega = \partial\Omega_1 + \partial\Omega_2$

유한요소법과 같은 결정적인 접근(deterministic approach) 대신 추계적 접근(stochastic approach) 방법을 사용하는 것이다. 구체적으로는, 전도에 의해 전달되는 물리량을 경로에 따라 모델링하는 가상의 추적자(tracer)를 가정하고 이 추적자의 이동 경로를 컴퓨터 시뮬레이션을 통하여 추적하는 것이다. 이 때 전도 추적자의 행동 양식은 브라운 운동을 닮게 되므로 이 방법을 브라운 운동 시뮬레이션 방법(Brownian motion simulation method)이라 하기도 한다. 본 연구에서는 최신의 브라운 운

동 시뮬레이션 방법을 사용하여 3차원 체커보드의 유효전도율을 다양한 경우의 상전도율에 대하여 계산하고 3차원 체커보드에서의 결과를 2차원 체커보드에서의 전도율에 관한 식 (1)의 결과와 비교하여 이를 근거로 3차원 체커보드 내 상의 연결도를 점검해보고자 한다.

2. 브라운 운동 시뮬레이션 방법

복합소재 내의 전도 현상을 시뮬레이션하기 위해 가상의 전도 추적자를 사용할 경우, 전도 추적자는 거시적으로는 확산 방정식을 따르게 되고 미시적으로는 브라운 운동을 수행하게 된다. 브라운 운동 시뮬레이션 방법은 전도 추적자의 미시적인 브라운 운동을 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 구현하는 추계적인 수치해석방법이다. 일반적으로 추계적인 수치해석법은 결정적인 수치해석법으로 취급하기 어려운 문제를 해결할 수 있는 반면 상대적으로 계산시간이 많이 소요되는 단점이 있으므로 계산의 정확도를 손상시키지 않으면서 계산시간을 단축하는 것이 중요하다. Fig. 2에서와 같은 체커보드 형상의 복합소재에 적용하여 효과적으로 유효전도율을 계산할 수 있는 브라운 운동 시뮬레이션 방법은 최근 Torquato 등(3)에 의해 개발된 바 있다. 본 연구에서 채택하는 이 방법은 추적자의 브라운 운동에 대하여 최초경과시간기법(first-passage time technique)이라는 가속 기법을 사용하여 계산시간을 단축시킨다. 이 방법을 사용하기 위한 일반적인 수식화 과정과 이를 3차원 체커보드에 적용하기 위한 구체적인 관계식을 이하에서 유도한다.

2.1 최초경과 시간기법

복합소재 내 추적자의 브라운 운동을 가속시키기 위한 최초경과시간 기법을 설명하기 위해서 추적자가 Fig. 3(a)에서처럼 단상 영역(homogeneous region) 내에 위치할 때와 Fig. 3(b)에서처럼 다상 영역(heterogenous region) 내에 위치할 때로 분류하여 고찰해 보기로 한다.

2.1.1 단상 영역에서의 추적자 거동

전도율이 σ 인 단상 영역에서 확산에 의해 이

동하는 전도 추적자의 거동을 생각해 보자. Fig. 3(a)에서처럼 추적자는 임의의 단상 영역 Ω 내의 위치 \mathbf{r} 에 있다. 이 영역을 최초경과 영역(first-passage region)이라 부른다. 최초경과 영역 Ω 의 경계면, 즉 최초경과 표면(first-passage surface)은 $\partial\Omega$ 로 나타내고, \mathbf{r}_B 는 $\partial\Omega$ 상의 위치를 나타낸다. \mathbf{r} 에서 출발한 추적자는 필연적으로 조만간 $\partial\Omega$ 상에 도달할 것이다. 이 추적자가 $\partial\Omega$ 상에 처음으로 도달하고, 도달한 위치가 \mathbf{r}_B 이고, \mathbf{r} 에서 출발한 후 \mathbf{r}_B 에 도달할 때까지 소요된 시간이 t 일 확률을 $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t)$ 라 정의한다. 이 확률 $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t)$ 는 가장 근본적인 통계량으로서 추적자의 거동을 시뮬레이션하기 위해서 꼭 필요하다. 통계학적으로 해석하면 $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t)$ 가

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sigma \nabla^2 P \quad (3)$$

의 확산 방정식과

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t=0) = 0, \quad \mathbf{r} \in \Omega, \quad (4)$$

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B), \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega \quad (5)$$

의 초기 및 경계조건을 충족시키는 것을 알 수 있다.

단상 영역에서의 추적자 거동을 구체적으로 컴퓨터 상에서 시뮬레이션하기 위해 중요한 통계량은 평균도달시간 $\tau(\mathbf{r})$ 과 확률밀도함수 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$, 그리고 점프확률이라고 부르는 또 다른 확률 $p(\mathbf{r})$ 이다. 먼저 $\tau(\mathbf{r})$ 은 \mathbf{r} 에서 출발한 추적자가 $\partial\Omega$ 상의 임의의 위치에 처음으로 도달할 때까지 걸리는 시간의 평균값으로 정의되며 $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t)$ 와는

$$\tau(\mathbf{r}) = \int_{\partial\Omega} \int_0^{\infty} t \frac{\partial P}{\partial t} dt d\mathbf{r}_B \quad (6)$$

의 관계를 가진다. 식 (6)과는 별도로 $\tau(\mathbf{r})$ 은 또

$$\sigma \nabla^2 \tau = -1 \quad (7)$$

의 정상상태 확산방정식과

$$\tau(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega \quad (8)$$

의 경계조건을 만족시키는 해로 생각할 수도 있다.

두 번째 필요한 통계량인 확률밀도함수 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 는 \mathbf{r} 에서 출발한 추적자가 $\partial\Omega$ 상의 위치 \mathbf{r}_B 에 처음으로 도달할 확률로 정의된다. $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 는 $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t)$ 와

$$\begin{aligned} w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B) &= \int_0^{\infty} \frac{\partial P}{\partial t} dt \\ &= P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B, t=\infty) \end{aligned} \quad (9)$$

의 관계에 있다. 식 (9)와는 별도로 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 는

$$\nabla^2 w = 0 \quad (10)$$

의 라플라스 방정식과

$$w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B), \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega \quad (11)$$

의 경계조건을 만족하는 해로 생각할 수도 있다.

시뮬레이션에 필요한 또 하나의 중요한 통계량은 점프확률 $p(\mathbf{r})$ 로서 이 확률은 \mathbf{r} 에서 출발한 추적자가 최초경과 표면 $\partial\Omega$ 의 일부분 $\partial\Omega_0$ 에 도달할 확률을 나타낸다. 점프확률은 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 를 적분함으로써 얻어진다.

$$p(\mathbf{r}) = \int_{\partial\Omega_0} w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B) d\mathbf{r}_B \quad (12)$$

$p(\mathbf{r})$ 에 대한 경계조건은

$$p(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in \partial\Omega_0, \\ 0, & \mathbf{r} \notin \partial\Omega_0. \end{cases} \quad (13)$$

으로 주어진다.

2.1.2 다상 영역에서의 추적자 거동

상전도율이 σ_1 과 σ_2 인 두 상이 섞여있는 2상 영역 내에서 확산에 의해 움직이는 추적자의 거동을 생각해 보자. Fig. 3(b)에서처럼 2상 영역을 Ω , 그 경계면을 $\partial\Omega$ 로 나타내기로 한다. Ω 중 상 1에 속한 영역은 Ω_1 으로, 상 2에 속한 영역은 Ω_2 로 나타내기로 하고 $\partial\Omega$ 중 Ω_1 의 경계면은 $\partial\Omega_1$, Ω_2 의 경계면은 $\partial\Omega_2$ 로 나타내기로 하자. 또, Ω 를 Ω_1 과 Ω_2 로 구분하는 상 경계면은 Γ 로 나타내기로 하자. 여기서도 Ω 내의 위치 \mathbf{r} 에서 출발하여 $\partial\Omega$ 상의 위치 \mathbf{r}_B 에 처음으로 도달하는 추적자의 거동을 시뮬레이션하기 위해서는 평균도달시간 $\tau(\mathbf{r})$ 과 확률밀도함수 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 이 필요하다. 2상 영역의 경우, 평균도달시간 $\tau(\mathbf{r})$ 은 식 (7), (8)과 유사하게

$$\sigma_i \nabla^2 \tau(\mathbf{r}) = -1, \quad \mathbf{r} \in \Omega_i \quad (i=1,2) \quad (14)$$

의 정상상태 확산방정식과

$$\tau(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega \quad (15)$$

의 경계조건을 만족시키며, 또 이와는 별도로

$$d_1 = d_2, \quad \mathbf{r} \in \Gamma, \quad (16)$$

$$\left. \frac{\partial \tau}{\partial n_1} \right|_1 = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \left. \frac{\partial \tau}{\partial n_1} \right|_2, \quad \mathbf{r} \in \Gamma \quad (17)$$

의 상경계조건(interface condition)을 만족시켜야 한다. 여기서 n_1 은 상 1의 영역으로부터 바깥 쪽으로 수직인 방향(outward normal direction)을

의미하고 기호 $|_i$ 는 i 번째 상으로부터의 접근을 의미한다.

확률밀도함수 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 역시 식 (10), (11)과 유사하게

$$\nabla^2 w = 0 \quad (18)$$

의 라플라스 방정식과

$$w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B), \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega \quad (19)$$

의 경계조건을 만족시켜야 하며, 또한 이와는 별도로

$$w_1 = w_2, \quad \mathbf{r} \in \Gamma, \quad (20)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial n_1} \right|_1 = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \left. \frac{\partial w}{\partial n_1} \right|_2, \quad \mathbf{r} \in \Gamma \quad (21)$$

의 상경계조건을 만족시켜야 한다.

\mathbf{r} 에서 출발한 추적자가 $\partial\Omega_1$ [또는 $\partial\Omega_2$]에 도착할 점프확률 $p_1(\mathbf{r})$ [또는 $p_2(\mathbf{r})$]은 확률밀도함수 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 를 $\partial\Omega_1$ [또는 $\partial\Omega_2$]에 대하여 적분함으로써 얻어진다.

$$p_1(\mathbf{r}) = \int_{\partial\Omega_1} w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B) d\mathbf{r}_B \quad (22)$$

여기서 $p_1(\mathbf{r})$ 은 단상영역에서의 점프확률에 대한 경계조건

$$p_1(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in \partial\Omega_1, \\ 0, & \mathbf{r} \notin \partial\Omega_1. \end{cases} \quad (23)$$

과 함께, 별도의 상경계조건

$$p_1|_1 = p_1|_2, \quad \mathbf{r} \in \Gamma, \quad (24)$$

$$\left. \frac{\partial p_1}{\partial n_1} \right|_1 = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \left. \frac{\partial p_1}{\partial n_1} \right|_2, \quad \mathbf{r} \in \Gamma \quad (25)$$

을 만족시켜야 한다. 일단 $p_1(\mathbf{r})$ 이 얻어지면, $p_2(\mathbf{r})$ 은

$$p_2(\mathbf{r}) = 1 - p_1(\mathbf{r}) \quad (26)$$

의 단순한 관계식에서 쉽게 구할 수 있다.

2.2 3차원 체커보드에서의 최초경과시간법

3차원 체커보드에서 2.1절의 최초경과시간법을 적용하기 위해 최초경과 영역을 Fig. 3에서 나타낸 것처럼 부피가 $8L^3$ 인 정육면체로 취하여 2.1절에서 제시된 관계식들을 구체적으로 구한다.

2.2.1 단상 영역에서의 추적자 거동

Fig. 3(a)에서처럼 부피가 $8L^3$ 이고 전도율이 σ 인 단상 정육면체가 그 중심을 원점에 두고 있다. 시뮬레이션에서는 항상 추적자를 중심에 두고 그 주위에 정육면체 형상의 최초경과 영역을 구성하므로 필요한 통계량 $\tau(\mathbf{r})$, $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$, $p(\mathbf{r})$ 는 $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ 에 대해서만 구하면 된다. 먼저 평균도달시간 $\tau(\mathbf{r})$ 은 경계조건문제 (7), (8)의 해로서 주어지며 이 문제는 변수분리법에 의해 쉽게 풀 수 있다. $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ 에 대한 해는

$$\tau = \frac{L^2}{2\sigma} - \frac{16L^2}{\sigma\pi^3} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\gamma^3(m) \cosh[\gamma(m)\pi/2]} - \frac{64L^2}{\sigma\pi^4} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n}}{\gamma(m)\gamma(n)\theta^2 \cosh[\theta\pi/2]} \quad (27)$$

으로 얻어진다. 여기서 γ 와 θ 는 각각

$$\gamma(n) = 2n + 1, \quad (28)$$

$$\theta^2 = \gamma^2(m) + \gamma^2(n) \quad (29)$$

으로 정의되는 양이다. 식 (27)은 수치적으로 계산하면 간단하게

$$\tau \approx \frac{0.22485L^2}{\sigma} \quad (30)$$

으로 된다. 확률밀도 함수 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$ 는 식 (10), (11)의 경계조건 문제의 해로서 주어지며, $\mathbf{r} = \mathbf{0} = (0, 0, 0)$, $\mathbf{r}_B = (L, y_B, z_B)$ 일 때의 해 $w(y_B, z_B)$ 는

$$w(y_B, z_B) = \frac{1}{2L^2} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(m\pi/2) \sin[m\pi(y_B + L)/2L]}{\cosh(kL)} \times \sin(n\pi/2) \sin[n\pi(z_B + L)/2L] \quad (31)$$

으로 얻어진다. 여기서 k 는

$$k^2 = \left(\frac{\pi}{2L}\right)^2 (m^2 + n^2) \quad (32)$$

으로 정의되는 양이다. 마지막으로, 추적자가 $x = L$ 인 면에 처음으로 도달할 확률을 p 라 하면 p 는

$$p = \int_{-L}^L \int_{-L}^L w(y_B, z_B) dy_B dz_B = \frac{1}{6} \quad (33)$$

으로 된다.

2.2.2 다상영역에서의 추적자 거동

Fig. 3(b)에서처럼 부피가 $8L^3$ 인 다상 정육면체가 그 중심을 원점에 두고 있다. 이 정육면체는 각각 부피가 L^3 이고 전도율이 $\sigma^{(i)}$ 인 단상 정육면체 8개가 합쳐진 것이다. 여기서 $\sigma^{(i)}$ 는 부피 L^3 인 정육면체 8개 중 i 번째 정육면체의 전도율을 나타내며, i 번째 상전도율 σ_i 와는 다른 것을 유의해야 한다. 2상 소재의 경우 $\sigma^{(i)} = \sigma_1$

또는 $\sigma_2 (i=1, \dots, 8)$ 이다. 이 다상 소재 내 원점 $\mathbf{r}=\mathbf{0}$ 에서 출발한 추적자에 대해 시뮬레이션에 필요한 통계량 $\tau(\mathbf{r})$, $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_B)$, $p(\mathbf{r})$ 는 2.2.2절에서 구한 단상 소재에서의 τ , w , p 를 이용하여 쉽게 구할 수 있다. 먼저 최초경과시간 τ 는

$$\tau = \frac{1}{\langle \sigma \rangle} \tau_H \quad (34)$$

으로 주어진다. 여기서 $\langle \sigma \rangle$ 는 전도율의 평균값으로서,

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 \sigma^{(i)} \quad (35)$$

으로 정의되는 양이며, τ_H 는 $\sigma=1$ 인 단상 정육면체에서의 τ 값으로서 식 (30)으로부터

$$\tau_H \approx 0.22485L^2 \quad (36)$$

으로 주어진다. 다음으로 단상 정육면체에 대하여 식 (31)로 주어진 확률밀도함수를 편의상 w_H 라 한다면, 즉,

$$w_H(y_B, z_B) = \frac{1}{2L^2} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(m\pi/2) \sin[m\pi(y_B+L)/2L]}{\cosh(kL)} \times \sin(n\pi/2) \sin[n\pi(z_B+L)/2L] \quad (37)$$

이라 하면, 다상 정육면체의 전체 표면 $\partial\Omega$ 중에서 i 번째 상에 속하는 $\partial\Omega_i$ 에 도달하게 될 확률 밀도함수 w 는

$$w(y_B, z_B) = \frac{\sigma_i(y_B, z_B)}{\langle \sigma \rangle} w_H(y_B, z_B) \quad (38)$$

으로 된다. 마지막으로, 추적자가 $x=L$ 인 면에

처음으로 도달하게 될 점프확률은

$$p = \frac{1}{24\langle \sigma \rangle} \sum_{i=1}^4 \sigma^{(i)}(y_B, z_B) \quad (39)$$

으로 결정된다.

3. 컴퓨터 시뮬레이션

컴퓨터 시뮬레이션에 의해 다상소재의 유효전도율을 구하기 위해서는 먼저 많은 수의 전도추적자를 가상 공간에서 구현시켜 이 추적자의 거동을 추적한다. 구체적으로는 추적자의 평균자승이동거리(mean square displacement)를 경과시간의 함수로 구하는 것이다. 평균자승이동거리를 $\langle R^2(t) \rangle$ 라 하면 3차원 소재의 경우, 유효전도율 σ_e 는

$$\sigma_e = \frac{\langle R^2(t) \rangle}{6t} \Big|_{t \rightarrow \infty} \quad (40)$$

으로 주어진다. 추적자는 다상소재 내에서 이동하는 동안 국부적인 위치에 따라 추적자의 인근 영역이 단상 소재일 수도 있고 다상 소재일 수도 있다. 추적자가 단상 정육면체의 내부에 위치할 때는 추적자의 위치를 중심으로 정육면체 형상의 단상 최초경과 영역을 구성할 수 있다. 또 추적자가 두 개의 서로 다른 상끼리의 상경계면에 위치할 때는 추적자의 위치를 중심으로 정육면체 형상의 2상 최초경과 영역을 구성한다. 이 두가지 경우를 나누어 구체적으로 설명하기로 한다.

3.1 단상영역에서의 추적자 거동

대부분의 경우, 추적자는 단상영역 내에 위치하며 이 경우 추적자를 중심으로 정육면체 형상을 가진 가상의 최초경과 영역을 구성한다. 이때 최초경과 영역의 체적 L^3 은 가능한 한 크게 하며, 이를 위해 최초경과 영역의 적어도 한쪽 면은 상경계면과 접하게 된다. 최초경과 영역이 설정되면 먼저 추적자가 도달하게 될 면을 결정하게 된다. 이 때, 2.2.1절의 식 (33)의 확률분포에 따라 6면 중 한 면이 선정된다. 물론, 단상 정육면체의 경우, 각 면에 도달할 확률은 균등하게

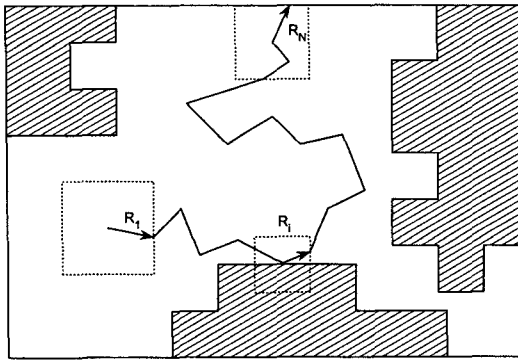


Fig. 4 A Brownian walker makes an initial jump of distance R_1 to the boundary of the first-passage region. It crosses the two-phase interface for the first time in the i th jump and reaches the sample boundary at the N th jump

1/6이 된다. 면이 선정되면 추적자가 도달하게 될 면 내의 구체적인 위치는 식 (31)의 확률분포 w 에 의해 선정된다. 여기서 선정된 면이 $x=L$ 인 면이면 식 (31)이 그대로 사용되고 다른 면이면 식 (31)과 유사한 식이 사용된다. 이 과정에서 추적자의 움직임에 소요된 시간은 식 (27)이나 식 (30)의 τ 에 의해 정해진다. 매 걸음마다 τ 는 계속하여 합해져서 그 합이 충분한 양에 이를 때까지 이같은 추적자의 움직임은 계속된다. 추적자의 걸음이 계속되는 중 가끔씩은 추적자가 상경계면에 위치하게 될 때가 있다. 이 경우의 추적자 움직임은 다음의 3.2절에서 설명하기로 한다.

3.2 2상영역에서의 추적자 거동

추적자가 상경계면에 위치할 때는 추적자를 중심으로 정육면체 형상을 가진 가상의 2상 영역을 구성한다. 이 경우 역시 정육면체 형상의 최초경과 영역의 체적 $8L^3$ 이 최대가 되도록 설정하며 그러려면 이 정육면체의 적어도 한쪽 면은 다른 상과의 상경계면에 접하게 된다. 추적자는 정육면체 형상의 최초경과 영역의 6면 중 한 면으로 이동하게 되는데 이 때 각 면을 선택할 확률은 균일하지 않으며 2.2.2 절의 식 (39)에 의해서 결정된다. 선정된 면에서 추적자가 도달하게 될 구체적인 위치는 식 (37)의 확률분포 w 에 의해 정

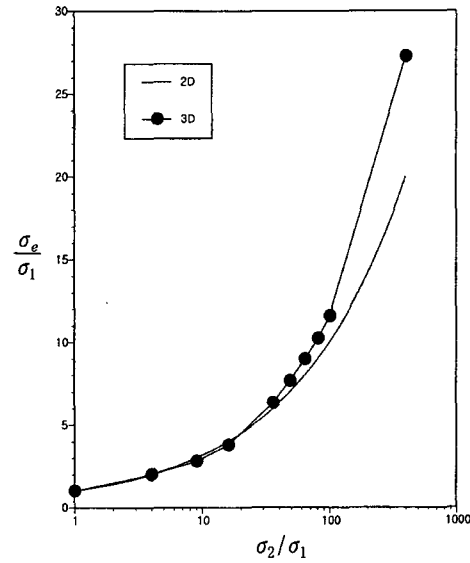


Fig. 5 Simulation result on scaled effective conductivities σ_e/σ_1 of three-dimensional checkerboard for various conductivity ratios σ_2/σ_1 . The curve denotes the effective conductivity of the two-dimensional checkerboard

해진다. 선택한 면이 $x=L$ 인 면이면 식 (37)이 그대로 적용되고, 다른 면이면 식 (37)과 유사한 식이 적용된다. 그리고 이 과정에서 추적자가 사용한 시간 τ 는 식 (34)에 의해 결정된다.

단상영역이나 2상영역에서의 추적자의 걸음은 매 추적자 당 충분한 시간이 경과될 때까지 계속된다. Fig. 4는 다상 소재 내 추적자의 거동을 개념적으로 보여준다. 충분한 시간이 지난 후에는 다른 추적자의 운동이 임의의 위치에서 시작되며 같은 과정이 반복된다. 충분한 개수의 추적자 운동이 완성되면 식 (40)에서처럼 모든 추적자의 앙상블 평균자승 이동거리 $\langle R^2(t) \rangle$ 의 t 에 대한 구배로서 유효전도율이 계산된다.

4. 결과 및 결론

3장에서 기술한 시뮬레이션 방법을 이용하여 3차원 체커보드에서의 유효전도율 σ_e 를 계산하였다. 본 연구에서는 두 개의 서로 다른 상으로 이

루어진 3차원 체커보드에서 두 상 사이의 전도율 비율 σ_2/σ_1 이 $1^2=1$ 에서 $20^2=400$ 에 이르기까지 변하는 다양한 값에 대하여 시뮬레이션을 수행하였다. 시뮬레이션 결과는 Fig. 5에 요약한다. Fig. 5에서는 2차원 체커보드에서의 유효전도율에 관한 결과도 함께 나타내었다. 1장에서도 언급하였듯이 2차원 체커보드는 상 소재끼리 완전히 연결된 것도 아니고, 완전히 단절된 것도 아닌 중간적인 연결도를 가진다는 점에서 중요한 벤치마크 역할을 한다. 특히 2차원 체커보드에서, σ_2/σ_1 을 1에서 시작하여 점차 증가시킬 때, $\sigma_e/\sigma_1 \propto \sqrt{\sigma_2/\sigma_1} \rightarrow \infty$ 으로 되는 것과 비교하여, 3차원 체커보드에서 σ_e/σ_1 이 $\sqrt{\sigma_2/\sigma_1}$ 보다 더 빠른 속도로 증가하면 상 연결도가 2차원 체커보드보다 더 큰 것을 의미하고, 증가속도가 $\sqrt{\sigma_2/\sigma_1}$ 보다 작으면, 상연결도가 2차원 체커보드보다 작은 것을 의미한다. Fig. 5가 나타내듯이 3차원 체커보드의 유효전도율은 명백하게 전자의 경우를 따라, 2차원 체커보드보다 더 빠른 속도로 증가하는 것을 알 수 있고, 따라서 3차원 체커보드에서 상 소재끼리는 서로 연결되어 있을 가능성이 더 크다고 할 수 있다. 3차원 체커보드가 서로 연결된 것은 이론적으로나 실용적으로 많은 점을 시사한다. 두 개의 상이 서로 섞인 2상 소재에서 이동성질이 상대적으로 큰 상의 소재가 매우 좁은 연결경로를 통해 연결되더라도 이 좁은 경로가 이동현상에서 주도적인 역할을 할 수 있다는 것을 유추할 수 있다.

결론적으로, 본연구에서는 (i) 다상소재의 유효전도율을 계산하기 위한 브라운 운동 시뮬레이션 방법을 이용하여 3차원 체커보드의 유효전도율을 계산하였고 (ii) 이 결과를 2차원 체커보드의 경우와 비교하여, 3차원 체커보드가 2차원 체커보드보다 연결도가 더 크며, 따라서, 3차원 체커보드에서 같은 상끼리는 서로 연결되어 있을 가능성이 더 크다는 것을 알 수 있었다.

향후 연구과제로서는, 각 상의 연결도가 유효물성치에 미치는 영향의 크기를 정량적으로 규명하는 것이 될 것이다.

후 기

본 연구는 2000년도 한국과학재단의 지방대 육성 연구비 지원에 의하여 연구되었습니다.

참고문헌

- (1) Stauffer, D., and Aharony, A., 1994, "Introduction to Percolation Theory," *Taylor and Francis, London*.
- (2) Keller, J. B., 1964, "A Theorem on the Conductivity of a Composite Medium," *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 5, pp. 548~549.
- (3) Torquato, S., Kim, I. C. and Cule, D., 1999, "Effective Conductivity, Dielectric Constant, and Diffusion Coefficient of Digitized Composite Media via First-Passage-Time Equations," *Journal of Applied Physics*, Vol. 85, pp. 1560~1571.
- (4) 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.
- (5) Miller, C. A., Kim, I. C. and Torquato, S., 1991, "Trapping and Flow Among Random Arrays of Oriented Spheroidal Inclusions," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 94, pp. 5592~5598.
- (6) 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*, Seoul, Korea, pp. 1515~1519.