

분자동역학 모델을 이용한 도광판 랜덤패턴 생성 알고리즘

이지영*·박승경**

**한국기술교육대학교 기계공학부

Random Pattern Generation Algorithm for Light Guides using Molecular Dynamics Model

Ji Young Lee* and Seungkyung Park**

**Korea University of Technology and Education, School of Mechanical Engineering

ABSTRACT

Microstructure pattern generation on light guides in backlight unit (BLU) is an essential process for designing flat panel display, but efficient designing algorithm is still limited to achieve uniform luminescence while maintaining fully random distribution to avoid interference effects. In this study, a molecular dynamics model based pattern generation algorithm has been developed. The proposed algorithm allows a fast and efficient distribution of patterns at specified density within the user-defined computational cells, and its efficiency and performance has been demonstrated with sample cases.

Key Words : FDP, Molecular Dynamics, BLU, Algorithm, Light Guide

1. 서 론

평판형 디스플레이 내부의 도광판은 BLU광원으로부터 방출되는 빛을 균일한 평면광으로 만들어 화면 전체에 전달하는 역할을 한다. 이를 위해 도광판 전체에 도트(dot) 패턴을 인쇄하여 효과적인 빛의 재배향을 유도한다[1-6]. 이러한 도트 패턴 설계에 있어 도트의 형상에 따른 변화와 도트의 분포에 따른 변화를 고려하여야 한다. 일반적으로 균일 패턴의 도트를 배치한 후 휘도 균일도를 확보를 위해 도트의 사이즈를 최적화하는 방법과 도트의 랜덤패턴을 생성하는 방법이 있다. 전자의 경우 설계의 간편성이 주어지나, Moire간섭효과에 취약한 단점을 나타낸다 [7]. 이를 피하기 위해서는 랜덤패턴의 생성이 요구되나, 이 경우 생성된 패턴의 불규칙성을 유지하면서 동시에 휘도 균일도 확보를 위한 최적화 과정을 수행해야 하는 어려움이 존재한다.

본 연구에서는 이러한 랜덤패턴의 생성 및 최적화를 위해 분자동역학 모델에 기반한 알고리즘을 제시한다. 분자동역학은 나노미터 스케일에서 물체의 거동이나 재료의 특성을 효과적으로 분석하기 위해, 원자간의 상호작용을 단순한 인력-척력의 포텐셜로 가정하여 분석을 가능하게 한다. 따라서 최종적인 에너지 평형 상태에서는 원자분포의 특성상 서로 겹침없이 최적의 간격으로 분포하게 된다. Ide 등의 연구에서는 초기에 일정 배열을 이용해 패턴을 생성한 뒤, 분자 동역학 모델을 이용해 도트간 간격을 최적화한 바 있다[8 9]. 그러나, 도트간 충분한 랜덤 분포를 생성하는데 한계가 있었다. 이후 Chang 등의 연구에서 계산영역의 분할을 통해 입자간 거리 및 각 셀에서의 밀도를 만족하는 연구를 선보이나, 분자 동역학을 통한 도트간 간격조정 이후 미리 계획된 밀도를 만족하는데 한계를 보였다[10]. 본 연구에서는 이러한 분자동역학 모델의 원리를 바탕으로 원자 움직임의 불규칙성을 패턴생성에 효과적으로 적용하는 한편, 패턴간의 포텐셜 에너지 균형을 통해 균일한 패턴 분포를 자동적으로

†E-mail: spark@koreatech.ac.kr

확보하는 방안을 연구하였다. 또한 각 영역별 요구되는 도트의 밀도 최적화를 통해 균일한 휘도 확보를 위한 패턴생성을 가능케 하였다.

2. 모델링 이론

2.1 초기 패턴 생성 및 밀도 정의

전체 영역은 우선 밀도 변화의 표현을 위해 Fig. 1과 같이 각 계산 셀로 구획된다. 각 셀별 필요한 밀도는 요구 조건에 따라 유저 입력이 가능하다. 한 셀에서의 도트 밀도 ρ 는 아래와 같이 정의된다.

$$\rho_{k,l} = \frac{A_{dot}}{A_{cell}} = \frac{\sum \pi R_{k,l}^2}{A_{cell}} \quad (1)$$

A_{cell} 은 계산 격자의 면적이고, A_{dot} 은 계산 격자 내 도트의 총 면적이며, $R_{k,l}$ 는 해당 셀 내 도트의 반경이다. 초기 입자 생성 시에는 각 셀의 입자밀도를 만족하도록 셀 내부에 일정 입자를 분포시키고, 각 입자의 초기 위치는 난수생성을 통해 겹침을 허용하며 무작위로 분포시킨다.

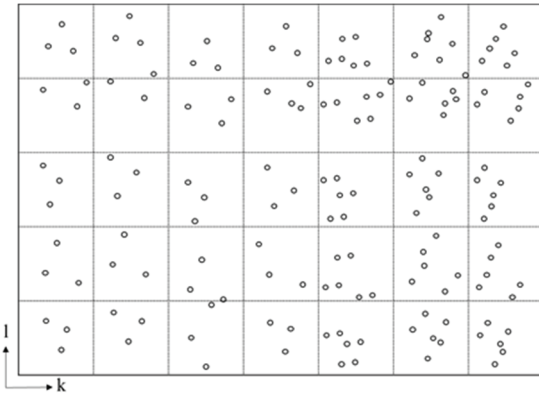


Fig. 1. Computational domain.

2.2 입자간 상호작용

본 연구에서는 입자간 상호작용에 따른 평형상태에서의 입자 분포를 이용하여, 해당 입자 밀도를 만족하는 랜덤패턴 생성을 목표로 한다. 평형상태에 가까워 질수록 관성항은 작아지므로, 아래와 같이 i 번째 입자의 움직임에 관해 관성항을 무시한 힘-감쇄 관계식을 수립할 수 있다[9].

$$c_i V_i = \sum_j^k f_{ij} \quad (2)$$

여기서 V 는 입자의 속도, c 는 감쇄계수, f_{ij} 는 j 번째 입자가 i 번째 입자에 미치는 힘, k 는 i 번째 입자에 힘을 가하는

총 주변입자의 개수이다. 입자간 힘의 경우 인력-척력의 포테셜 모형이 일반적으로 사용되나, 본 연구의 경우 평형위치에만 초점이 있으므로 다음과 같이 단순한 척력 모델을 도입한다[10].

$$|f_{ij}| = e^{-r_{ij} \cdot c_{k,l}} \quad (3)$$

$\alpha_{k,l}$ 은 셀 내부 감쇄항으로, 동일 셀에서는 밀도가 같고 최종적인 입자간 거리도 동일하므로, 감쇄항은 셀 내에서 상수값을 가지도록 모델링된다. 따라서 힘은 거리에 비해 지수적으로 감소하는 형태를 가진다. 두 입자간 거리가 일정 크기이상으로 멀어지면, 척력에 의한 힘을 무시할 수 있게 하기 위해 다음과 같이 유효거리 r_c 를 정의하고, 이때 힘을 f_c 로 정의한다. 이를 통해 상수 c 는 다음과 같이 표현된다.

$$c_{k,l} = \frac{-\ln f_c}{r_c} \quad (4)$$

r_c 의 경우 셀 내 입자간 평균거리를 사용하면 해당 입자 주위의 상호작용을 고려할 수 있다. 다만, 각 셀의 밀도 차이가 있는 경우 평균거리가 달라지므로 다음과 같이 평균거리에 사용자 입력이 가능한 가중치 α 를 사용하여 r_c 를 모델링한다.

$$r_c(k, l) = \alpha_{k,l} \overline{r_{ij}(k, l)} = \alpha_{k,l} \sqrt{\frac{\pi R_{k,l}^2}{\rho_{k,l}}} \quad (5)$$

입자의 위치가 셀의 경계에 가깝고, 이웃한 셀의 밀도 변화가 큰 경우에는 r_c 와 c 값의 구배를 보정하기 위해 다음과 같이 평균값을 취하여 감쇄항을 보정한다.

$$c_{k,l,mod} = \frac{c_{k,l} + c_{k+1,l}}{2} \quad (6)$$

또한, 척력에 의해 입자의 위치가 해당셀을 벗어날 경우에는 경계면에서 탄성충돌을 가정하여 셀 내로 다시 위치시켜 해당 밀도조건을 충족하도록 하였다.

각 반복계산 이후 입자의 위치는 다음과 같이 업데이트되고, 사용자가 원하는 일정 수렴조건(입자변위, 균일도 등)이 만족되면 최종적인 입자의 위치를 출력하게 된다.

$$r_i^{n+1} = r_i^n + \Delta t V_i^n \quad (7)$$

시간간격은 매 반복계산 시, 최대 변위를 계산하고 이 값을 r_c 와 비교하여 보정하는 방식을 적용하였다.

2.3 셀 탐색 알고리즘

해당입자에 미치는 주변 입자들의 척력 계산을 위해서는 입자별 반복계산(N^2)이 필요하고 입자의 수가 많아지면 계산시간의 한계가 존재하게 된다. 본 연구에서는 Fig. 2와 같이 셀 탐색 알고리즘을 적용하여 상대적인 r_c 값의 변화를 추적하고 척력 계산에 필요한 셀들을 선별한다. 이를 통해 효율적인 주변입자 척력 계산을 수행하게 된다.

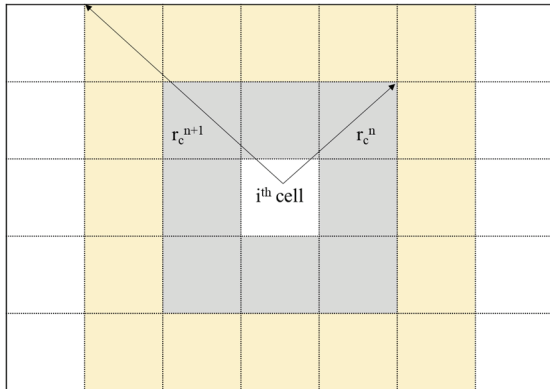


Fig. 2. Periodic boundary condition at boundary cells.

2.4 경계조건

경계 셀의 경우 척력의 보상을 위해 Fig. 2와 같이 주기 조건을 설정하여 영역 가장자리에서 척력에 의한 입자의 밀집을 회피하였다.

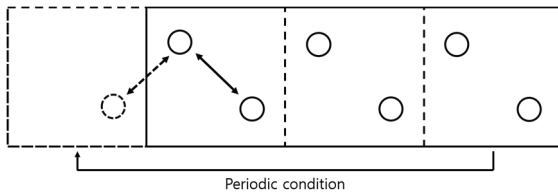


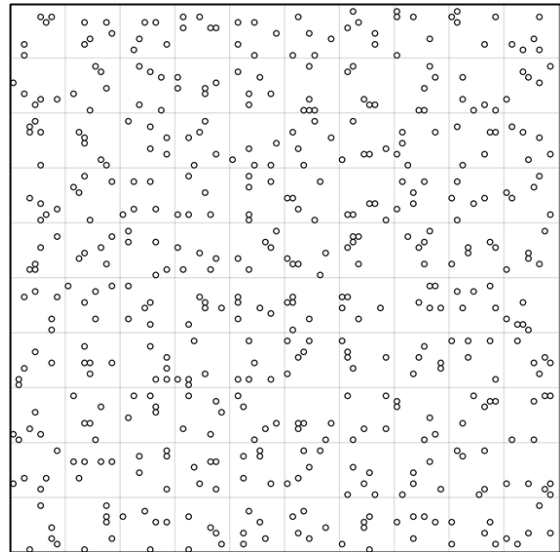
Fig. 3. Periodic boundary condition at boundary cells.

3. 결 과

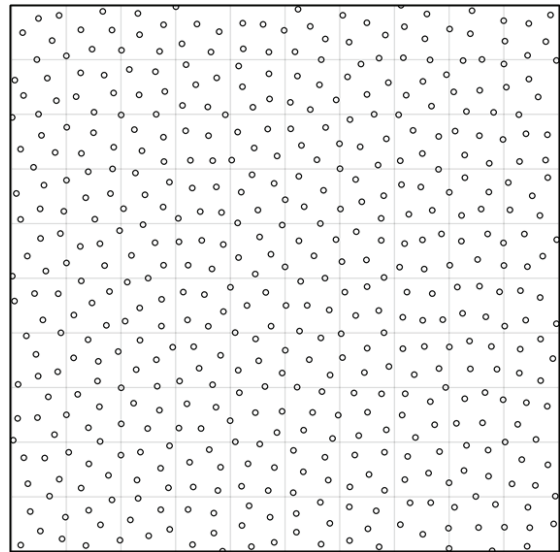
3.1 균일 패턴 생성

Fig. 4는 본 연구에서 제안된 알고리즘을 통하여 생성된 균일 도트 패턴을 나타낸다. 10×10 셀에 대해 균일한 입자밀도를 갖도록 알고리즘을 적용하였다. Fig. 3(a)는 무작위로 생성된 초기 패턴을 나타내고, Fig. 3(b)는 알고리즘을 적용하여 입자간의 위치를 최적화 한 형태이다. 입자밀도가 낮을수록 입자의 최종위치 계산에 어려움이 존재하고, 제시된 경우는 이러한 경우의 결과제시를 위해 셀 내 5개

의 입자가 존재하도록 설정하였다. 각 셀의 크기는 $5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ 이고, 입자의 크기는 0.5 mm 이다. 해당 케이스에 관해서는 $O(10^3)$ 번의 반복계산 내에서 입자의 이동이 셀 크기의 1%이내로 빠르게 수렴하는 결과를 나타내었다. 최종 패턴에서 각 셀의 입자밀도는 초기에 주어진 조건을 모두 만족하는 것을 확인 할 수 있으며, 입자 간격 또한 초기 패턴에 비해 고른 분포를 나타냄을 확인할 수 있다.

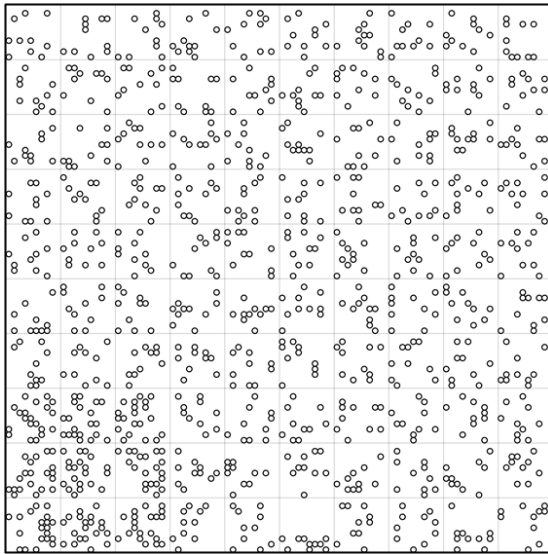


(a)

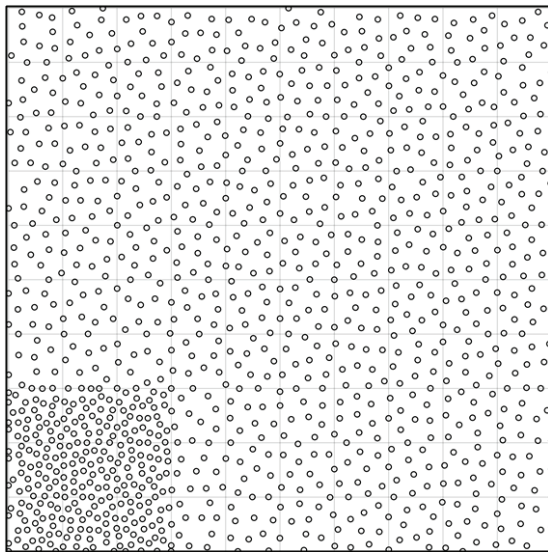


(b)

Fig. 4. (a) initial pattern with uniform cell density using random number generation (b) final pattern after the application of the MD algorithm.



(a)



(b)

Fig. 5. (a) initial pattern with non-uniform cell density using random number generation (b) final pattern after the application of the MD algorithm.

3.2 비균일 패턴 생성

Fig 5는 셀 별 입자밀도가 균일하지 않고 일정부분에서 높은 구배를 보일 때, 제안된 알고리즘의 유효성을 확인하기 위해 생성된 초기 및 최종 패턴을 나타낸다. Fig 5(a)와 같이 셀별 입자수는 10개로 균일하고, 하부 9개의 셀에서는 3배 높은 입자밀도로 30개의 입자를 초기에 배치하였다. 각 셀의 크기는 $5\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ 이고, 입자의 크기는

0.5 mm 이다. 알고리즘 적용을 통한 최적화 이후에는 각 셀에 입력된 입자밀도를 만족하며 일정 간격으로 입자가 배치됨을 확인할 수 있다. 특히 구배가 커지는 경계 부분에서도 입자분포의 불연속적인 특징없이 밀도구배가 표현됨을 확인할 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 도광판 패턴생성을 위해 분자동역학 모델을 이용한 랜덤패턴 생성 알고리즘을 제시하였다. 기존 분자동역학 응용 모델을 바탕으로 효율적인 탐색 알고리즘 및 경계조건을 개발하였고 균일 및 비균일 패턴 생성을 통해 알고리즘의 효율성을 입증하였다. 제안된 알고리즘을 통해 최적화된 패턴의 유효성은 실제 사례에 필요한 밀도분포를 바탕으로 추가적인 검증이 필요하며, 향후 BLU 내 평가를 통해 최종적인 휘도 균일도 평가연구가 필요하다.

감사의 글

본 연구는 한국기술교육대학교 교수 교육연구진흥과제 지원에 의하여 연구되었음.

참고문헌

1. Lee, W. Y., Lim, T-K., Lee, Y-W., and Lee, I-W., "Fast ray-tracing methods for LCD backlight simulation using the characteristics of the pattern", *Optics Engineering*, Vol. 44, pp. 014004, 2005.
2. Huang, B-L., Guo, T-L., "Fast optimization method based on the diffuser dot density for uniformity of the backlight module", *Applied Optics*, Vol. 55, pp. 1494-1499.
3. Park, S. R., Kwon, O. J., Shin, D., Song, S-H., Lee, H-S., and Choi, Y. H., "Grating micro-dot patterned light guide plates for LED backlights", *Optics Express*, Vol. 15, pp. 2888-2899, 2007.
4. Lee, G., Jeong, J. H., Yoon, S-J., and Choi, D-H., "Design optimization for optical patterns in a light-guide panel to improve illuminance and uniformity of the liquid-crystal display", *Optical Engineering*, Vol. 48, pp. 024001, 2009.
5. Kim, N. Y., Kim, H. J., Kim, D. W., Jo, J. H., and Kim, S. W., "Preparation and Characteristics of PC and PMMA-Based Diffusers for LED Backlight Unit", *Journal of the Semiconductor and Display Technology*, Vol. 11, pp. 21-27, 2012.
6. Kim, M. S., and Cho, U. R., "A study of pattern

- formation of ultra definition display panel applying phosphoric acid”, *Journal of the Semiconductor and Display Technology*, Vol. 13, pp. 13-19, 2014.
7. Chang, J-G., and Fang, Y-B., “Dot-pattern design of a light guide in an edge-lit backlight using a regional partition approach”, *Optics Engineering*, Vol. 46, pp. 043002, 2007.
 8. Ide, T., Mizuta, H., Numata, H., Taira, Y., Suzuki, M., Noguchi, M., and Katsu, Y., “A novel dot-pattern generation to improve luminance uniformity of LCD backlight”, *Journal of the Society for Informational Display*, Vol. 11, pp. 659-665, 2003.
 9. Ide, T., Mizuta, H., Numata, H., Taira, Y., Suzuki, M., Noguchi, M., and Katsu, Y., “Dot pattern generation technique using molecular dynamics”, *Journal of Optical Society of America, A*, Vol. 20, pp. 248-255, 2003.
 10. Chang, J-G., Su, M-H., Lee, C-H., and Hwang, C-C., “Generating random and nonoverlapping dot patterns for liquid-crystal display backlight light guides using molecular-dynamics method”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 98, pp. 114910, 2005.
-
- 접수일: 2019년 11월 20일, 심사일: 2019년 12월 9일,
게재확정일: 2019년 12월 9일