

산업재해 안전을 위한 New Austria Tunnel Method 수지에서 빔산란에 관한 Monte Carlo 시뮬레이션에 관한 연구

김기준[†] · 이주엽^{*}

[†]대진대학교 공과대학 화학공학과, ^{*}중원대학교 융합과학부 방재안전학과
(2012년 8월 2일 접수 ; 2012년 9월 2일 수정 ; 2012년 9월 21일 채택)

A Study on Monte Carlo Simulation by Beam Scattering in Resin of New Austria Tunnel Method for Safety of Industrial Disaster

Ki-Jun Kim[†] · Joo-Youb Lee^{*}

[†]Dep. of Chemical Eng., Daejin Uni., Pocheon 487-711, Korea

^{*}Dep. of Disaster Mitigation and Safety Science, Jungwon Uni., Chungbuk 367-805, Korea
(Received August 2, 2012 ; Revised September 2, 2012 ; Accepted September 21, 2012)

요약 : 혼탁매질에서 산란체와 흡수체의 영향은 빔산란에 의해 파장에 대한 산란세기로 설명된다. New Austria Tunnel Method의 수지에 대한 산란의 분자특성들은 연구하기 위해 Monte Carlo Simulation하였다. 이는 산란매질에서 광학적 파라미터들(μ_s , μ_a , μ_t)에 의해 조사되어 그들의 영향을 알 수 있었다. 산란매질에서 파장에 대한 빛분포에 의한 결과는 광원에서 검출기까지 거리가 가까우면 산란이 증가하여 산란세기가 크게 나타났다. 이는 강구조물의 내구성을 위한 코팅과 부식에서 좋은 모델을 디자인하는데 도움이 될 것이다.

주제어 : 산란, 흡수체, 광학적 파라미터, NA 터널법, 코팅부식, 몬테칼로 시뮬레이션.

Abstract : The influences of scatterer and absorber in turbid material by light scattering were interpreted for the scattered intensity and wavelength. The molecular properties have been studied by Monte Carlo simulation in resin of New Austria Tunnel Method. It has been found that the effects of optical properties in scattering media could be investigated by the optical parameters(μ_s , μ_a , μ_t). Monte Carlo Simulation method for modelling of light transport in the civil engineering and construction field was applied. The results using a phantom were discussed that the distance from source to detector is closer, and scattering intensity is stronger with those obtained through Monte Carlo Simulation. It may also aid in designing the best model for coatings and corrosion for the durability of metal constructions.

Keywords : scattering, absorber, New Austria Tunnel Method, optical parameters, Monte Carlo Simulation, coatings, corrosion.

*교신저자 (E-mail : ljooyoub@hanmail.net)

1. 서론

NATM-Resin(New Austria Tunnel Method)은 오스트리아에서 개발된 터널지지 기반 공법으로 NATM공법에 사용되는 수중경화성 폴리우레탄 수지(polyurethane resin)는 기존의 유기용매를 사용하는 NATM-Resin의 개량형으로 암반의 공극과 Rock-bolt의 전면 접촉에 사용한다[1]. 또한 지하철, 철도, 도로 지중선공사의 터널 굴착시 암반보강 및 천공시의 크랙, 공극 등을 강한 발포성 폴리우레탄 수지와 예폭시 수지 계통의 레진으로 완전 충전시켜 Rock-bolt와 암반사이에 접착력을 순간적으로 강화시킨다. NATM-Resin의 연구개발에 의해, 현재 계획 중의 건축토목용 고강도 고분자 수지는 콘크리트의 무수한 균열을 보수할 목적뿐만 아니라 완충작용으로 수명을 연장시킨다. 건축토목용 고강도 수지는 일시적으로 소비되는 chemical reagents가 아니고 항구적인 재료이다[2]. 따라서 새로운 고분자 수지의 합성 및 새로운 촉매제의 첨가 등의 실험을 통해 수용성 수지개발과 접착성, 내후성, 내약품성이 더욱 우수한 고분자 소재로서 대외 경쟁력을 갖출 뿐만 아니라, 수입대체효과 및 시너지 효과가 매우 크므로 개발이 시급한 상황이었다. 현재 우리나라 터널공사에 적용되고 있는 도로공사 및 철도공사 등에 이용되고 있는 기존의 NATM-Resin은 수분에 약한 단점으로 인하여 습도가 높은 경우에는 Chemical Anchor, 시멘트 고착제로 대체 시공되므로 비용, 인원, 시간의 손실을 가져오고 있는 실정이다[3]. 기존 생산보급중인 NATM-Resin은 원재료가 우레탄으로써 MDI(Methylene diisocyanate)와 polyol의 화학적 반응에 의해 발포, 인발을 조절하여 용도별(급결용, 선단용, 충전용)로 제조 사용하고 있으며, 상당한 인발력(500g당 20 TON/EA)과 팽창성(최고 16배)을 유지하도록 하였으나, 레진의 사용처가 터널 및 지하에서 사용하는 관계로 천공시의 주변의 습기로 인하여 제용량의 인장력과 팽창성을 유지하지 못하는 단점이 있다[4]. 또한, 폴리우레탄 폼(foam)을 발포시키는데 필요한 발포제인 프레온 가스는 오존층 파괴 등의 원인으로 국제 환경조약에 의하여 선진국에서는 이미 사용을 금지하고 있으며, 싸이클로펜탄(cyclopentane), 이소펜탄(isopentane)

등의 탄화수소계 발포제로 발전하는 단계이며, 물, 이산화탄소, 질소 등이 새로운 발포제로 관심을 모으고 있으며, 우리나라의 지형학적인 조건으로 인하여 지하 천공시 상당수의 지하수 누출이 되고 있는 실정으므로 시공시 많은 노력이 요구되고 있다.

따라서, 본 연구는 기존의 문제점을 해결하고자 적합한 촉매[4]와 사슬연장제[5,6]를 사용함과 동시에 그 양을 조절해 공정상의 경화 온도를 상승시키는 방법을 사용함으로써 상기 경질 폴리우레탄 폼을 사용한 NATM 공법용 수지의 성능 향상과 저장 안정성이 양호하여 점도변화가 없고 자체점도가 낮아 상온에서 액상으로 장기간 보관할 수 있는 인장력과 강도가 양호한 수지에 대한 시뮬레이션이다[7].

2. Monte Carlo Simulation

Monte Carlo simulation을 이용하여 광자의 행적, 성질, 생성, 소멸 등을 $albedo (a = \mu_s / [\mu_s + \mu_a])$ 와 photon source geometry를 변수로 이용하여 확산에 의한 computer simulation을 하는 방법을 사용하였다[8,9]. 빛의 전송부분에 있어서 광자들이 산란되거나 흡수되는 경로를 기록하는데, 여기서 μ_s 는 scattering coefficient, μ_t 는 total attenuation coefficient, 즉 $\mu_t = \mu_a + \mu_s$ 이며, μ_a 는 absorption coefficient이다[10]. Monte Carlo simulation을 이용하여 μ_a , μ_t 등의 변수들을 체계적으로 변화시키며 산란광의 행적을 조사했다. Scattering process에 대한 Monte Carlo simulation의 model geometry는 Fig.1과 같다.

Model geometry는 인체 치아에서 치관을 덮는 조직인 에나멜에 비교된다[11]. 튼튼한 에나멜은 투명하나, 초기의 충치는 에나멜 안쪽의 구조적 변화가 일어나 에나멜에 검은 반점이 생긴다. 치아의 광학 parameters의 측정은 충치 과정의 단계를 나타낸다. Monte Carlo simulation의 computer program은 광자의 산란에서 행동을 관측하기 위한 simulation이다. Computer program은 크게 scattering simulation program들과 image processing부분으로 나눌 수 있는데, 본 program은 C언어로 작성하였으며 산란, 형광과 흡수에 대한 photon

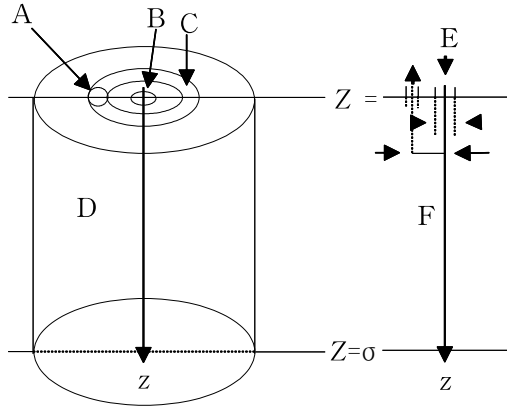


Fig. 1. Geometry to measure the reflected light as a function of the distance to an incident beam.

A: measuring area, B: source, C: detection ring, D: scattering volume, E: incident beam, F: scattering medium.

flux의 transport 과정을 다룬다. 본 연구에서 scattering simulation program의 code는 약 1400줄로 작성하였으며, scattering program의 설계원리는 다음과 같다.

첫째 ; 초기의 입사광의 성질을 결정한다. Source로 부터 입사되는 광자는 등방적 phase function으로부터 통계적으로 방향 등에 대한 광자의 성질을 부여한다. Random number는 0 와 1사이 값을 갖는다.

둘째 ; 한번 산란되는 구간을 정한다. 매질로부터 광자가 이탈되는 것을 고려하고 광자는 처음 위치에서 충돌에 의해 다음 산란체가 있는 위치로 진행할 때 거리의 함수로서 나타낼 수 있다. 입자간의 거리를 나타내는 평균 자유 행로(mean free path)의 stepsize는 total attenuation coefficient의 역이다.

산란된 구간을 다음식으로

$$\Delta S = \frac{1}{\mu_t} = \frac{1}{\mu_a + \mu_s} \quad (1)$$

나타낼 수가 있는 데, stepsize가 모의 계에서 아주 작아지면 광자의 상호작용(산란과 흡수)을 못한다. 광자는 진행하는 방향에 따라 3개의 공간좌표와 2개의 방향 각도로 설명할 수 있으며,

(X, Y, Z)위치에서 ΔS가 움직인 거리 (μ_x, μ_y, μ_z)에 따라 새로운 좌표 (x', y', z')에 의해 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} x' &= x + \mu_x \Delta S \\ y' &= y + \mu_y \Delta S \\ z' &= z + \mu_z \Delta S \end{aligned} \quad (2)$$

셋째 : 진행된 빛의 세기, 비행거리, 위치 등을 계산한다. 빛이 입사됨에 따라 매질에서 광자의 순수한 흡수가 일어나며 최초의 광자의 질량은 1로 간주하고 경로에 따라 감소한다. 광자가 경계를 통해 매질에 입사됨에 따라 굴절률이 다른 영역에서 내부 반사 (internal reflection)가 일어난다. 이는 Fresnel reflection 방법에 의해 아래와 같이 주어진다.

$$R(\theta_i) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\sin^2(\theta_i - \theta_t)}{\sin^2(\theta_i + \theta_t)} + \frac{\tan^2(\theta_i - \theta_t)}{\tan^2(\theta_i + \theta_t)} \right\} \quad (3)$$

윗 식에서 θ_i = cos⁻¹(μ_z)는 경계에서 입사각이고 θ_t는 Snell 법칙에 의한 반사된 각도이다.

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \quad (4)$$

광자가 내부적 반사를 하지 않으면 광자는 phantom을 빠져 나가거나 backscattering light 이나 transmitted light이 된다. 또한 광자가 내부반사를 하면 광자의 위치와 방향이 변하며, phantoms geometry에서 x, y 방향은 무한하고 z 방향에서 두께만이 변한다. 내부적으로 반사된 광자는 현 광자 위치 (x', y', z')에서 새로운 광자의 위치 (μ_x, μ_y, -μ_z)로 진행함에 따라 (x', y', z') = (μ_x, μ_y, -μ_z)와 같이 나타낼 수 있다.

넷째 ; 광자의 위치가 산란체 밖이거나 세기가 0이 되면 비행을 중지한다.

대부분 표면반사 (surface reflection)에 따른 확산이 일어나지 않는 조건은 매질의 두께 d에서 표면 z = 0 과 바닥 z = d을 경계조건이라 간주하면 다음 식으로 나타낸다[12,13].

$$\int 2\pi, \mu' > 0, L_d(r,s)(s,z) d\omega = 0 \quad (5)$$

윗 식에서 경계조건 밖이란 산란체 밖을 의미하며 광자의 경로 길이가 0이다. 광자의 weighting scheme은 매질에서 순수한 absorption을 설명할 수 있으며, 질량은 1이고 광자가 경로에 따라 순수한 흡수가 감소됨을 감안한다. 광자 packet는 흡수와 산란 두 부분으로 구분하며, 흡수되는 packet의 분율은 다음 식으로 주어진다.

$$\text{fraction absorbed} = \frac{\mu_a}{\mu_s + \mu_a} = 1 - \frac{\mu_s}{\mu_a + \mu_s} = 1 - a \quad (6)$$

여기서 a는 입자의 albedo 이다. 새로운 광자의 질량 $\omega' = a\omega$, 이는 새로운 단계에서 산란되어진 packet의 분율을 나타낸다. 즉 흡수는 흡수된 빛의 량과 위치에 관계됨을 알 수 있지만 특히, 광자는 $(1 - a)\omega$ 가 0이 될 때까지 비행한다.

다섯째 ; 광자는 현재의 위치, 방향 및 계의 성질에 의해 새로운 산란구간을 진행한다. 광자의 위치와 운동 방향은 공간 좌표에 의해 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \omega &= \cos(\theta) = \text{reldir}[2] \\ v &= \cos(\phi)\sin(\theta) = \text{reldir}[1] \\ u &= \sin(\phi)\sin(\theta) = \text{reldir}[0] \end{aligned} \quad (7)$$

현재의 광자위치 (x, y, z)와 새로운 광자의 위치 (x', y', z')는 아래 식으로 나타낼 수가 있다.

$$\begin{aligned} x' &= x + \Delta su \\ y' &= y + \Delta sv \\ z' &= z + \Delta s\omega \end{aligned} \quad (8)$$

광자는 (x, y, z)위치와 방향 (θ, φ) 에서 새로운 위치 (x', y', z')와 방향 (θ', φ') 으로 산란에 의해 진행함을 알 수 있다. 광자가 현재의 산란되는 점에서 광섬유에 도달하는 확률밀도 P는 다음식과 같다.

$$P = \omega P(\mu_0) d\omega_0 \exp[-(\rho\sigma_s + a) z_0] \quad (9)$$

여기서 ω = photon의 질량, $p(\mu_0)$ = phase

function, μ_0 는 산란되기 전 광자의 방향사이 cosine각도로 표면 $z = 0$ 에 수직이고, $d\omega_0$ 는 시료에서 검출기의 solid angle $z_0 = \text{scattering}$ 의 depth를 뜻한다. 따라서 $\exp[-(\rho\sigma_s + a) z_0]$ 는 현재 위치에서 산란, 흡수되지 않고 검출기에 도달하는 확률이다.

여섯째 ; 세번째의 과정으로 돌아간다. 광자 무게가 거의 영(0)에 도달하면 비행을 중지하고 산란에 의해 광자 무게가 회복되어 순환을 계속하게 되는 기법을 Roulette라고 한다. 이러한 일련의 Roulette결과에 의해 매질에 입사된 빛이 광섬유에 검출되어 광자 세기를 나타낸다.

결론적으로 확산이론은 광자 flux가 산란체를 확산해 가는 것으로 확산방정식을 분석적으로 푸는 방법이다[14]. 다음 식은 collimated pulsed light 빔이 semi-infinite 또는 finite의 균일한 입자의 매질에 입사된 경우에서 확산 식으로 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, t) - D \nabla^2 \phi(r, t) \\ + \sigma_a \phi(r, t) = S(r, t) \end{aligned} \quad (10)$$

여기서 $\phi(r, t)$ 는 diffuse photon fluence rate로 source-detector 간의 거리(r)와 시간(t)의 함수로 나타내며, c는 이 매질에서의 광속도이며, σ_a 는 linear absorption coefficient을 뜻한다. D는 diffusion coefficient로서 다음과 같다.

$$\begin{aligned} D &= [3(\sigma_a + \mu_s)]^{-1} \quad \text{이고} \\ \mu_s &= (1-g)\sigma_s \quad \text{transport scattering} \\ &\quad \text{coefficient} \\ \sigma_s &= \text{linear scattering coefficient} \\ g &= \text{scattering angle의 평균 cosine} \\ S(r, t) &= \text{photon source} \end{aligned} \quad (11)$$

산란계의 행동을 관측하기 위한 본 프로그램은 광자가 시료 속에서 생성되어 진행되는 산란, 흡수, 형광에 의해 생성되거나 소멸되고 내부적으로 반사, 투과된 진로에 따라 광자의 세기, 비행거리, 위치 등을 계산하였다. Scattering process에 대한 Monte Carlo simulation의 program process의 Roulette는 Fig.2와 같다.

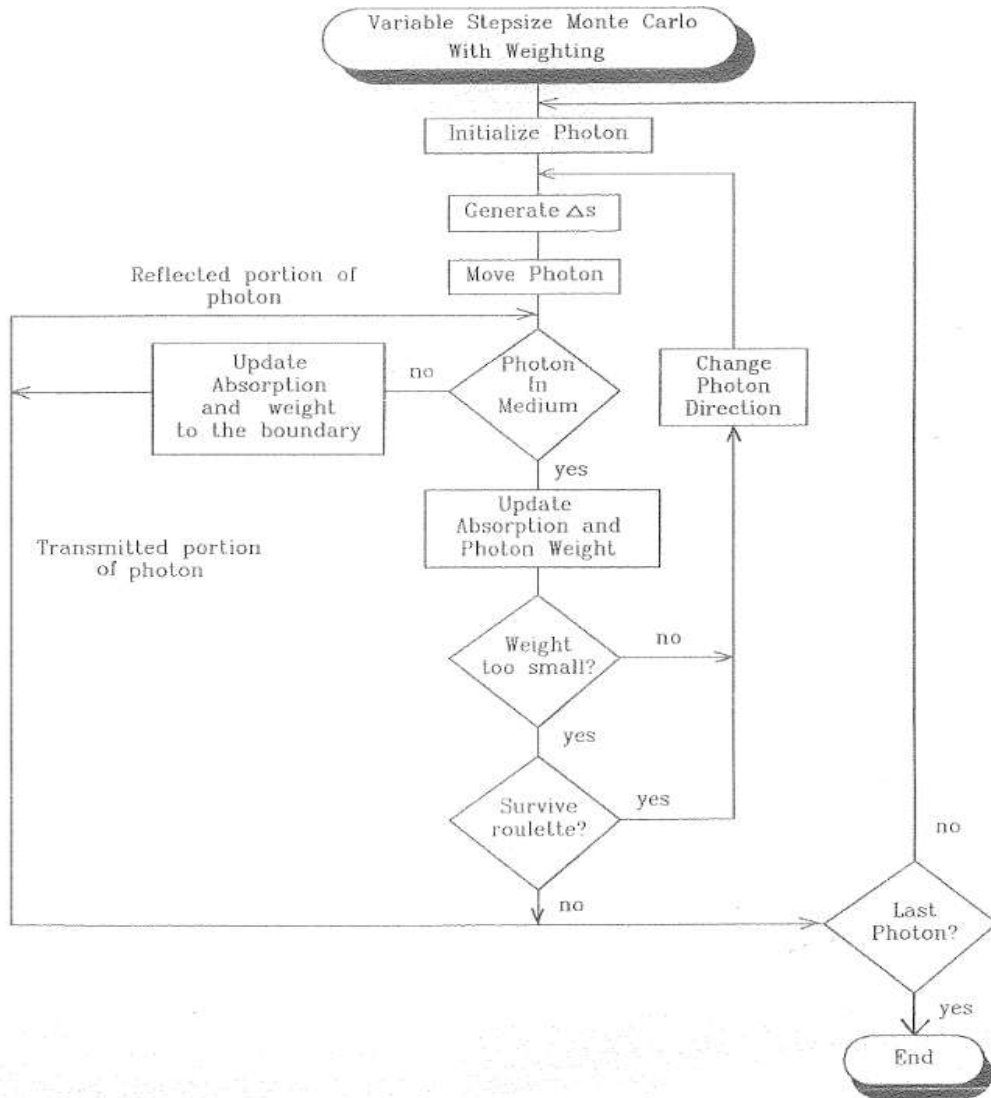


Fig.2. Roulette for variance stepsize of Monte Carlo simulation program.

3. 결과 및 고찰

NATM-resin의 scattering coefficient를 결정하기 위해 Monte Carlo simulation에 의해 수지의 농도 변화에 따라 산란되는 양과 산란되지 않은 빛의 양을 측정하였는데, Added Absorber Technique[15]을 사용하여 total attenuation coefficient(μ_t)가 빔이 수지 속에서

내부산란에 의한 산란 입자의 경로를 추적하여 optical parameters scattering coefficient(μ_s)과 absorption coefficient(μ_a) 조사하였다.

μ_s 를 측정하기 위한 공식은 다음과 같다.

$$I = I_0 \exp(-\mu_s C d) \quad (12)$$

여기에서 C는 농도를 뜻하고, d는 cuvette 의

직경, I 는 irradiance (W/m^2), I_0 는 입사 irradiance를 뜻한다. 그러므로 scattering coefficient; μ_s 는 다음 식으로 나타낸다.

$$\mu_s = \frac{1}{d} \frac{\partial \ln(I/I_0)}{\partial C} \quad (13)$$

본 연구에서 simulation 방법은 일정한 geometry에서 입사하는 광자의 방사를 측정하여 얻을 수 있다. 굴절된 광자가 매질성질에 의해 산란되거나 흡수가 되고, 광자가 내부 반사를 하지 않으면 계 밖으로 이탈함으로써 소멸된다. 따라서 Program은 특정시간이나 공간에서 산란된 광자들의 위치와 방향, 또는 흡수된 광자들의 위치를 알려주게 된다(Fig.3).

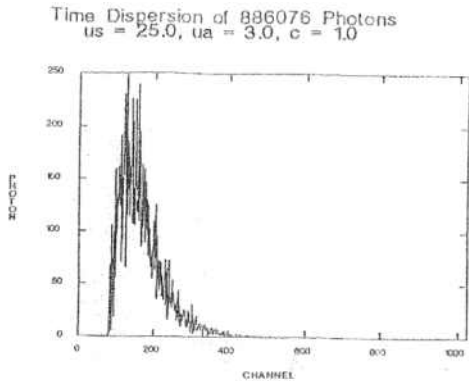


Fig. 3. Propagation pattern of photons(number of photons, 100) in scattering media. ($\mu_s = 25.0 \text{ mm}^{-1}$, $\mu_a = 3.0 \text{ mm}^{-1}$, $z = 1.0 \text{ mm}$).

Fig.3은 입사광과 출사광을 시간에 대해 시뮬레이션하였다. 가로축(Channel)은 시간의 경과를 나타내고 세로축은 광자의 세기를 나타낸다. 총 입사된 광자의 수는 886,076개이고 그 중 770,466개(86.95%)는 흡수되었다. 72,044개(0.81%)가 위쪽에 있는 검출기에 검출되었으며 그것의 시간에 따른 분포를 나타낸 그림이다. Fig. 4는 광자 100개가 윗면으로부터 거리 0.5 mm 로 입사하여 진행되는 과정을 나타낸다. 광자 하나가 입사하면 산란계수와 흡광도에 의하여 결정되는 albedo와 난수발생기(random number generator)에 의해 진행된다.

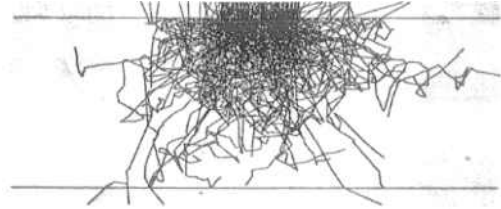


Fig. 4. Transport propagation geometry of photons(number of photons, 100) by Monte Carlo simulation.

한번의 진행 후, 광자의 세기는 흡광도에 따라 감소하게 되며 다시 산란계수와 흡광도, 현재의 진행 방향 및 난수발생기의 숫자에 따라 결정되는 방향과 길이로 진행하게 된다. 일정한 세기로 감소할 때까지 광자는 계속 산란, 흡수 과정을 진행한다. 일정한 세기 이하로 내려가면 그 후의 광자는 산란과 흡수 중 하나로 선택해서 광자가 완전 흡수되거나 산란계 밖으로 빠져 나올 때까지 반복한다. Fig.5는 Monte Carlo simulation에 의해 광자가 NATM의 수지 phantom속에 입사될 때부터 검출기에 닿을 때까지의 깊이에 대하여 레이저를 이용한 광원과 광섬유간의 거리를 1.0cm로 고정해 놓고, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0 cm의 길이에서 광자수가 동시에 혼탁매질에 입사되는 경우의 simulation 결과이다. 이때 각 스펙트럼의 특징은 강구조물의 보수·보강에 필수적인 부식이 발생하는 지점이

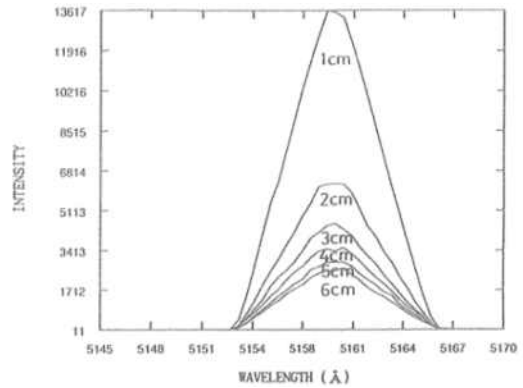


Fig. 5. The Simulation scattered light versus distance to show image processing of total energy fluence rate.

광원과 검출기가 멀어질수록 energy fluence가 현저하게 감소하였음을 알 수 있다. 이에 대한 simulation 결과는 Table 1과 같다.

내부반사 등에 의한 이들의 광자에 대한 분포를 조사하면 매질에서 거리가 가까우면 산란 세기가 증가하고, 거리가 멀어지면 산란 세기가 감소함을 알 수 있다. 따라서 광자수를 많이 simulation의 대상으로 할수록 편차가 적고 정확도가 커짐을 알 수 있었다.

Table 1. Monte Carlo Simulation Values of Optical Parameters in NATM-Resin

species	distanc(cm)	μ_t	I
NATM-Resin	1.0	31.09	13,619
	2.0	28.46	9,605
	3.0	19.59	6,728
	4.0	16.66	5,923
	5.0	14.32	9,781
	6.0	9.07	7,368

Scattering media 안에서 광원과 광검출을 하는 광섬유까지 광분포를 분석한 결과 거의 일치함을 알 수 있었다. Fluorescence lineshape의 변화는 이론 및 실험 두 방법에서 거의 일치함을 알 수 있었다.

4. 결론

Phantom속에 레이저 빛이 입사됨에 따라 광원으로부터 광자를 검출하는 광섬유까지 거리가 가까울수록 산란세기가 증가하였다. 산란체, 흡수체 및 광증감제인 HPD에서 스펙트럼의 선모양은 광학적 파라미터의 경향을 알 수 있으며 산란체가 증가할수록 광자세기가 증가하였다. Monte Carlo simulation에 의해서 측정된 값은 철 또는 금속 등이 불안정한 상태에 놓여 있는 환경속의 물질과 반응하여 안정한 화합물로 변화하여 표면층으로부터 부식방지에 활용된다. 금속에 부식이 발생하면 금속소재의 강도가 현저하게 떨어지게 되어 사용할 수 없게 됨

에 따라 막대한 경제적 손실이 수반된다. 따라서 부식의 원인을 차단하여 강구조물의 내구성을 향상시켜 방식과 방청에 응용이 크게 활용된다.

감사의 글

본 연구는 2012년도 대전대학교 교내연구의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

1. R. R. Meier, J. S. Lee, and D. E. Anderson, *Appl. Opt.*, **17(20)**, 3216(1978).
2. J. Langerholc, *ibid.* **18(13)**, 2286(1979).
3. W. E. Meader and W. R. Weaver, *ibid.*, **18(8)**, 1204(1979).
4. L. O. Svaasand and Reinold Ellingsen, *Photochem. photobiol.*, **39(3)**, 293(1983).
5. P. S. Mudgett and L. W. Richards *Appl. Opt.*, **10(7)**, 1485(1971).
6. L. G. Henyey and J. L. Greenstein, *Astrophysical J.*, **93**, 70(1941).
7. R. G. Giovanelli : *Opt. Acta.*, **3(3)**, 127(1956).
8. R. E. Wharen, R. E. Anderson, and E. R. Laws: *Neurosurgery* **12**, 446(1983).
9. W. A. G. Bruls and J. V. Leun : *Photochem. Photobiol.*, **40(2)**, 231(1984).
10. R. R. Anderson and J. A. Parrish: *J. Inv. Derm.*, **77**,13(1981).
11. T. J. Dougherty : *Clin. Chest. Med.*, **6**, 219(1985).
12. L. O. Svaasand, C.J. Gomer, and A. E. Profio: *Appl. Opt.*, **28(12)**, 2250(1989).
13. S. L. Jacques, C. A. Alter, and S. A. Prahl, *Las. L. Sci.*, **1(4)**,309(1987).
14. S. L. Jacques, and S. A. Prahl, *Las. Surg. Med.*, **6**, 494(1987).
15. R. Richards-Kortum et al., *Spectrochim. Acta* **45A**, 87(1989).