

## Statistical Analysis on the Local Density Augmentation of Supercritical Fluids: A Monte Carlo Simulation Study

윤태준, 하민영, 이원보, 이윤우<sup>†</sup>

서울대학교

(ywlee@snu.ac.kr<sup>†</sup>)

초(아)임계 유체의 임계점 근처에서의 국부 밀도 증가 (Local Density Augmentation)는 초(아)임계 유체 상의 가장 큰 특징이라고 할 수 있다. 본 연구에서는 몬테 카를로 시뮬레이션과 보로노이 다면체 분석을 이용하여 이산화탄소의 기/액 상평형 선과 환산 온도  $T_r=1.06$ 에서 이러한 국부 밀도 증가 현상을 탐구하고자 한다. 우선 기/액 상평형 선에서 정준 앙상블을 이용한 결과 기체 상과 액체 상의 국부 밀도 분포는 각각 역감마 분포와 정규 분포를 통해 표현이 가능함을 확인할 수 있었다. 이러한 결과를 토대로 초(아)임계 유체의 국부 밀도 분포를 분석하기 위해 데이터 과학 분야에서 이용되고 있는 Expectation-Maximization 알고리즘을 이용하여 역감마 분포-정규 분포 혼합 모델을 개발하였다. 개발된 모델은  $T_r=1.06$ 의 초임계 이산화탄소 국부 밀도 분포와 거의 일치하는 것으로 관찰되었으며 임계점 근처에서의 평균 밀도 증가 현상을 잘 표현할 수 있는 것으로 나타났다. 이러한 연구 결과는 다른 순수한 초(아)임계 유체의 국부 밀도 분포뿐만 아니라 혼합 물성의 평가에 있어서도 응용이 가능할 것으로 기대된다.