Calculation Time Analysis of Particle Based Heat Transfer Simulation for Fiber-Reinforced Composite Material 파티클법 기반 섬유강화복합재료 열전달 시뮬레이션의 연산시간 분석

Young Jun Cho*1, Jin Young Jung*2, In Hwan Sul2† 1: Research Center, AXIA Materials Co. Ltd., Hwaseong 18523, Republic of Korea ^{2:} Department of Materials Design Engineering, Kumoh National Institute of Technology, Gumi 39177, Republic of Korea

INTRODUCTION

섬유강화복합재료는 비강도 등 물리적 성질이 뛰어나고 금속에 비해 열전달계수와 열팽창계수가 낮아 스포 스용품, 자동차, 항공, 바이오 등 많은 산업 분야에서 활발히 적용되고 있다. 특히 열적 성능이 필요한 분야에 사용하기 위해서는, 최적 설계를 위해 강화섬유와 기재의 열전달계수로부터 최종 복합재료의 열적 특성을 미 리 모델링하는 것이 필요하다. 하지만 섬유강화복합재료의 열전달 거동은 이질적이고 복잡한 경계조건을 가 지고 있어 기존의 수치 해석 방법으로는 계산이 힘들다는 단점이 있다.

지난 연구에서는 직물 형태의 섬유강화복합재료를 복셀(voxel)이라는 세 변의 길이가 동일한 정육면체 격 자 구조로 구성하고, 이에 계산이 간단하고 병렬 연산이 가능한 FDM법을 적용하여 열전달거동을 예측할 수 있는 시스템을 구성한 바 있다. 본 연구에서는 좀 더 큰 시간 간격(large time step)을 사용할 수 있는 것으 로 알려진 반암시적 적분법의 일종인 파티클법을 이용해 탄소복합재료 열전달 시뮬레이션의 수치해석적 안 정성과 성능을 시험해보고자 한다.

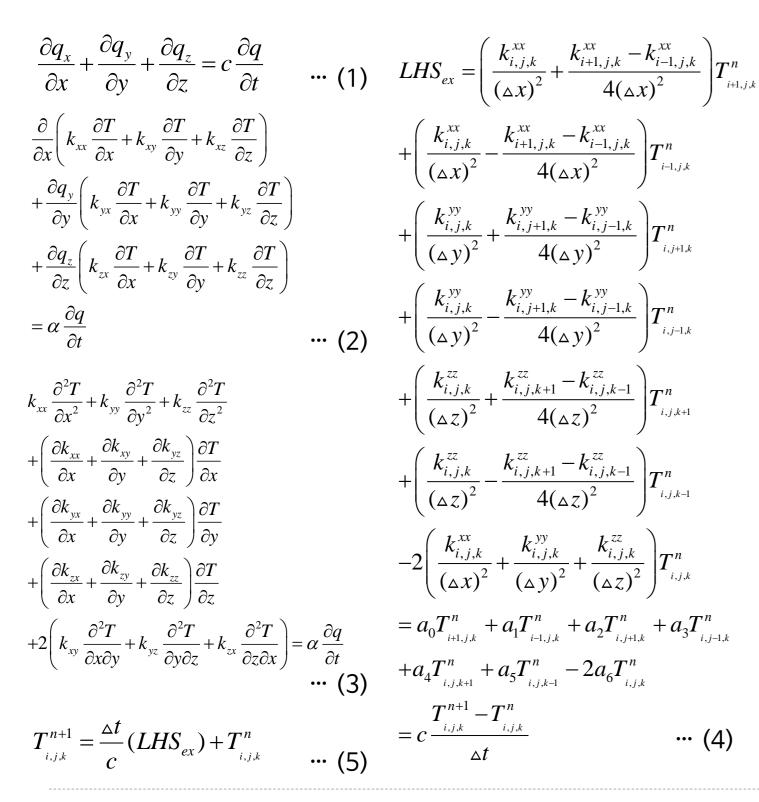
MODELING

1. 지배방정식

1) 명시적 적분법

섬유강화복합재료의 열전달 거동은 비정상 상태이고, 열 원이 없는 경우이므로 식(1)과 같이 정리하며, 열전달에 대한 fourer's law에 의해 식(2)와 같이 정리하였다. 이 때 섬유강화복합재료에 있어 기재는 등방성이지만 강 화섬유는 불규칙적으로 배열되어 있으므로 전체 열전도 계수 k는 위치에 따라 값이 다르고 미분 값이 0이 아니므 로 식(3)이 된다. 또한 공간 미분에 의해 중앙차분법을 적 용하고 시간 미분에 대해 forward explicit integration 을 적용한 결과 식(4)가 된다.

격자 좌표(i,j,k)에서 시간의 온도 값 $T_{i,j,k}^{n+1}$ 에 대해 정리하 면 식(5)가 된다. 바운더리의 경우 LHS를 수정한다.

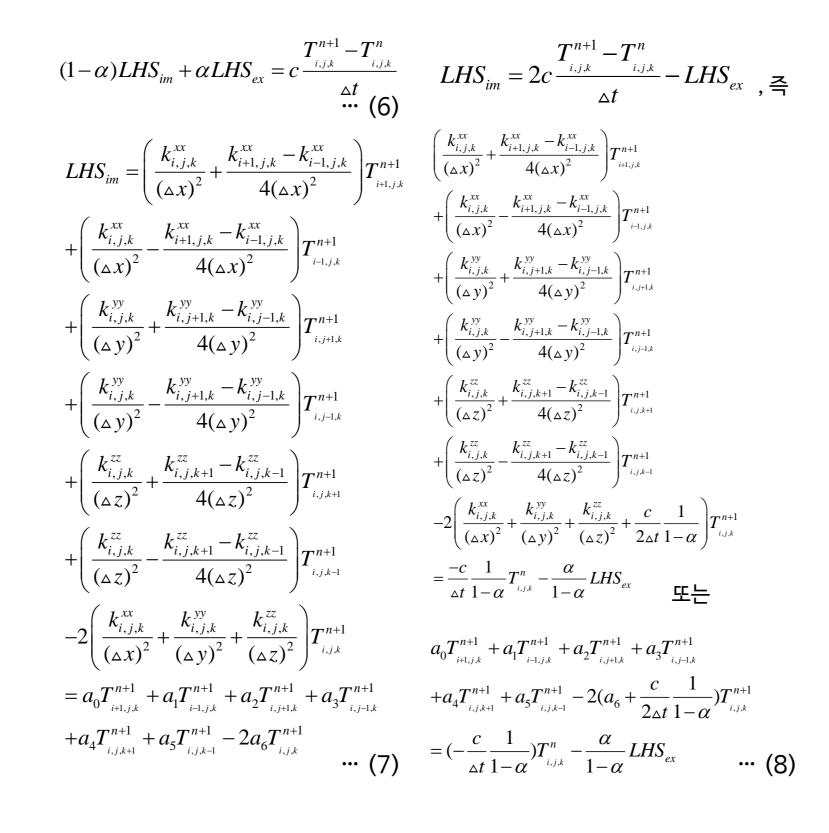


2) IMEX적분법

IMEX적분의 경우 crank-Nicholson법을 이용한 암시적 적분값과 explicit-Euler의 명시적 적분값은 일정비율(α) 로 선형보간하는 방식으로서, 그 식은(6)과 같다.

여기서 LHS_{ex} 는 식(4)로 부터 온 것이며, LHS_{im} 는 식(7) 과 같이 구할 수 있다. 그러면 암시적 적분의 영향으로 전체 식은 선형 방정식을 구성하게 되므로, 역행렬을 구하여 풀 면 다음 시간 스텝에서의 열분포를 알 수 있다.

4(6)에서 LHS_{ex} 는 상수항이므로 4(8)의 형태가 된다.

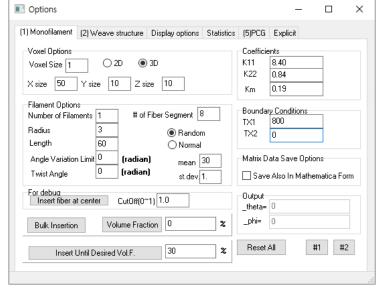


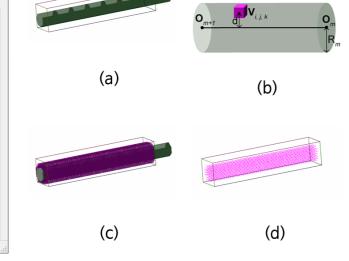
2. 복셀 구성

1) 단섬유 복셀 구조

엠바카데로 C++ Builder XE5 컴파일러에서 C++언어를 사용하여 MS윈도우 환경하에서 32bit 모델링 프로그램 을 작성하였다.

복합재료의 특성과 조건을 지정하고, 특정 개수의 섬유를 직접 삽입하거나 정해진 부피비가 될 때까지 랜덤한 위치 와 배향도를 가진 강화섬유를 삽입할 수 있도록 하였다. 각 섬유는 원통형 구조로 가정하고, 복셀의 무게중심 $V_{I,J,K}$ 와 원통 무게 중심축 사이의 거리가 원통 반지름보 다 작을 때 섬유 내 복셀로 기록하였다.



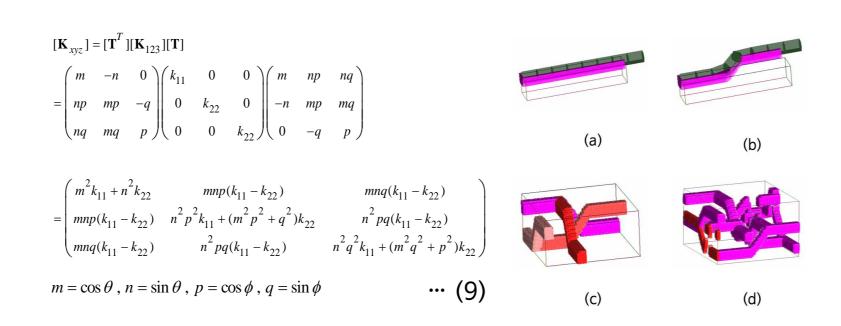


2) 직물 복셀 구조

임의의 직물구조 표현을 위해 단섬유의 원통 무게중심들 을 삼각함수 형태로 이동시켜 크림프를 부여하고, 이를 평직 및 주자직 구조의 복셀구조를 형성하였다.

이후 각 섬유의 배향을 원통좌표계로 나타내고 길이방향 및 반지름 방향 보강섬유의 열전달계수를 k_{11} 와 k_{12} 라고 할 때, 회전하지 않았을 때의 보강섬유 내 복셀의 열전달 텐서 \mathbf{K}_{123} 에 회전행렬 T를 곱하여 식(9)와 같이 각 복셀 의 최종 열전달 텐서 \mathbf{K}_{XYZ} 를 설정하였다.

그리고 섬유 외에 존재하는 복셀에는 기재의 열전달계수 인 k_m 값을 대입하였다.



EXPERIMENTAL

보강섬유로는 PAN 섬유(Pyron®; Zoltek Co., Ltd)를 전구체로 하고 기재로는 에폭시 수지를 이용한 복합 재료를 기준으로 하였으며, 열전달계수 값은 각각 8.40, 0.84, 0.19 W/mK를 사용하였다. 복셀의 크기는 한 변의 길이를 0.1㎜로, 복셀의 개수는 단섬유(Figure 4,5)의 경우 50x10x10개로, 직물 구조(Figure 6)의 경우 50x50x25 개로 하였다.

시뮬레이션 시간 간격은 1, 10, 100, 1000ょs를 각각 사용하였고, 복셀 양 끝단의 온도 경계조건은 800 ℃ 및 0℃로 설정하였다. 식 (8)에서 명시적 적분과 암시적 적분 간의 선형보간 계수 α 는 0.5로 하였다. 식(8)의 선형방정식은 행렬의 크기가 다소 큰 편에 속하므로 켤레기울법을 이용해 10회 정도 반복 하여 근사해를 구 하는 방법을 썼으며, 발생하는 에러 값을 측정하여 해의 수렴 여부를 확인하였다.

RESULTS & DISCUSSION

매 시간 간격마다 격자점의 온도 $(T_{i,i,k}^{n+1})$ 와 온도 등고선을 그림3과 같이 색상으로 표시한 결과, 정상적으로 해가 수렴한 경우는 매 시간 간격마다 역행렬 연산의 에러값이 감소하면서 색상이 천천히 연속적인 형상(그림4a)으로 변이하게 되지만, 발산하는 경우에는 켤레기울법의 에러값이 줄어들지 않고 그림4b와 같이 매 시간 간격마다 급격히 다른 값을 나타낸다.

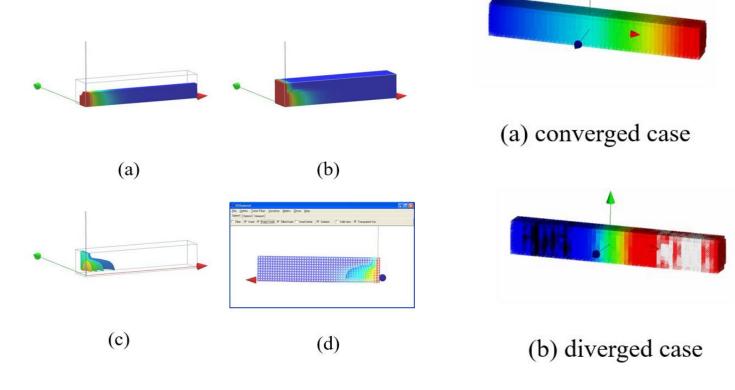


Figure 3. Heat flux illustration of single fiber reinforced composite

Figure 4. Examples of typical time integration results

Total calculation time needed for 1-second simulation Time [Explicit / IMEX] step(us) sum (min:sec) iteration $+ (\mu s)$ iterations [54.6/629.8] [0:54.6/10:29.8] [54.7/557.8] [0:5.47/0:55.8] 10 100 [n.a./558.4] [n.a./0:5.6] 1,000 [n.a./557.1] [n.a./0:0.6]

Table 1. Quantitative evaluation of heat transfer calculation time

간격에서는 쉽게 발산하는 양상을 보였다. 반면 IMEX 적분법의 경우 모든 시간 간격에서 안정적으로 연산이 수행되었다. 명시적 적분의 시간 간격에 제한이 따르는 이유는 잘 알려진 Courant 조건 때문인 것으로 보인다. $C = \Delta t \cdot \sum_{i=1}^{3} \frac{u_i}{\Delta x_i} \le C_{\max}$ 익반적인 3차워 문제에서의 FDM의 시간 간격(Δt)에 관한 코랑 상수 C는 식(10)과 같이 나타나

연산의 안전성과 연산시간을 정량적으로 측정하여 보면 표1과 같다.

명시적 적분의 경우 1, 10µs에서는 수렴하였으나, 100 이상의 시간

일반적인 3차원 문제에서의 FDM의 시간 간격(Δt)에 관한 코랑 상수 C는 식(10)과 같이 나타나 며 u_i를 열이 전달되는 속도라고 가정하였을 때(식11), 명시적 적분의 경우 사용할 수 있는 최대 시 간 간격은 43.8µs에 불과하므로, 1초의 열전달 거동을 모사하기 위해서는 1s / 43.8µs, 즉 22785 번 가량의 반복 연산이 필요하다.

··· (11)

명시적 적분법은 행렬 연산이 필요치 않으므로 각 스텝에서의 연산 시간은 짧지만, 제한된 시 간 간격 조건 때문에 실제 연산 시간은 암시적 적분이나 IMEX 적분에 비해 불리한 것이 확인

반면 IMEX 적분의 경우 모든 시간 간격에서 안정적으로 해가 수렴하였다. 행렬 연산으로 인 해 각 스텝의 연산 시간이 명시적 적분에 비해 크지만, 더 큰 시간 간격을 사용할 수 있으므로 이러한 단점이 상쇄된다.

식(9)에서 LHS_{ex}는 명시적 적분으로 얻어지는 값이므로 코랑 조건의 제한을 받지만, 식(9) 의 좌변 행렬이 댐핑의 역할을 하여 해가 발산하는 것을 방지해주는 것으로 보인다.

(b) 330 iterations Figure 5. Heat transfer example of 8-satin based composite structure using IMEX . (⊿t=1,000μs, Vf=28.4%)

마지막으로 Figure 5는 8-주자직 구조에 대해 IMEX적분을 이용해 시간 간격을 1,000 μ s 하여 안정적으로 연산을 수행한 사례를 나타낸다.

CONCLUSION

섬유복합재료의 열전달거동을 모사하기 위해 복셀화 기법과 FDM을 적용하였다. IMEX적분의 경우 행렬 연 산에 켤레기울법을 적용해 근사해를 구하였으며, 명시적 적분값과 암시적 적분값의 선형보간계수를 0.5로 하 여 강성행렬이 얻어지는 것을 방지하였다. 코랑 조건을 적용한 결과 이 문제의 경우 사용 가능한 이론적인 최 대 시간 간격은 43.8 \(\mu \mathbb{G} \, \mu \, \mathbb{I} \, \mathbb{O} \, \mu \, \m 서는 명시적 적분과 IMEX적분법이 모두 수렴하였으나 그 후로는 IMEX적분법만 사용 가능하였다. 섬유강화 복합재료의 경우 대부분 경계조건이 복잡하고 비균질한 물질에 해당하므로, IMEX적분법을 사용하는 것이 더 적합한 것으로 보인다. 차후 연구에서는 개발된 알고리즘을 이용해 실제 실험결과와 비교하여 일부 파라미터 를 보정하는 것이 필요하다.

REFERENCES

1. Seo, B.H., et al., Model for thermal conductivities in spun yarn carbon fabric composites. Polymer composites, 2005. 26(6): p. 791–798. 2. Gu, Y., et al., The generalized finite difference method for long-time transient heat conduction in 3D anisotropic composite materials. Applied Mathematical Modelling, 2019. 71: p. 316-330. 3. Song, Y.S. and J.R. Youn, Evaluation of effective thermal conductivity for carbon nanotube/polymer composites using control volume finite element method. Carbon, 2006. 44(4): p. 710-717. 4. Junyan, L., T. Qingju, and W. Yang, The study of inspection on SiC coated carbon - carbon composite with subsurface defects by lock-in thermography. Composites science and technology, 2012. 72(11): p. 1240-1250. 5. Puszkarz, A.K. and I. Krucińska, Study of multilayer clothing thermal insulation using thermography and the finite volume method. Fibres & Textiles in Eastern Europe, 2016. 6. Mora, P., Y. Wang, and F. Alonso-Marroquin. Particle-based simulation of hydraulic fracture and fluid/heat flow in geothermal reservoirs. in AIP Conference Proceedings. 2013. AIP.

7. Wang, H. and Z. Yao, Large-scale thermal analysis of fiber composites using a line-inclusion model by the fast boundary element method. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2013. 37(2): p. 319-326. 8. Traille, A. and M. Tentzeris. Multi-resolution time-domain and level-set techniques for multi-domain/multi-physics/multi-phase simulations. in 2011 IEEE MTT-S International Microwave Symposium. 2011. IEEE. 9. Tan, E.L., Efficient algorithms for Crank - Nicolson-based finite-difference time-domain methods. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2008. 56(2): p. 408-413. 10. Sul, I.H. and C.K. Park, A Study on the Speed of Real-time Garment Simulation Using Particle Based Method. Textile science and engineering, 2009. 46(6): p. 362-368. 11. Dasgupta, A., R. Agarwal, and S. Bhandarkar, Three-dimensional modeling of woven-fabric composites for effective thermo-mechanical and thermal properties. Composites science and technology, 1996. 56(3): p. 209-223.

12. Ascher, U.M. and E. Boxerman, On the modified conjugate gradient method in cloth simulation. The Visual Computer, 2003. 19(7): p. 526-531. 13. Courant, R., K. Friedrichs, and H. Lewy, *On the partial difference equations of mathematical physics.* IBM journal of Research and Development, 1967. **11**(2): p. 215–234. 14. Rouf, H.K., F. Costen, and S.G. Garcia, 3D Crank-Nicolson finite difference time domain method for dispersive media. Electronics letters, 2009. 45(19): p. 961–962.

<u>Acknowledgement</u>

This research was supported by Kumoh National Institute of Technology (2018–104–067).