

수치 해석 모델: 1차원 비정상 열전달 및 열분해 (1-D Transient Heat Transfer & Pyrolysis)

작성자: 사용자

February 22, 2026

1 수치 해석 모델 (Mathematical Formulation)

1.1 지배 방정식 (Governing Equation)

본 해석에서는 온도에 따른 물성치 변화를 고려한 1차원 비정상 열전도 방정식(1-D Transient Heat Conduction Equation)을 지배 방정식으로 사용합니다.

$$\rho(T)C_p(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k(T)\frac{\partial T}{\partial x}\right) \quad (1)$$

변수 설명:

- ρ : 밀도 (kg m^{-3})
- C_p : 비열 ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)
- k : 열전도도 ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)
- T : 온도 (K)
- t : 시간 (s)
- x : 깊이 방향 좌표 (m)

1.2 이산화 (Discretization)

해석 영역은 표면 재료(Surface Material)와 내측 재료(Inner Material)의 2층 구조로 구성됩니다. 공간 차분에는 유한체적법(FVM)을 적용하여 전체 두께를 N 개의 노드(Node)로 분할하였으며, 노드 간격은 Δx 로 일정하다고 가정합니다. 시간 적분은 Method of Lines 기법을 적용하여 상미분방정식(ODEs) 형태로 변환하였습니다.

1.2.1 표면 경계 노드 ($i = 1$)

외부 표면($x = 0$)은 공력 가열에 의한 대류 열전달 경계 조건과 내부 전도가 평형을 이루는 검사체적(Control Volume)으로 모델링됩니다.

$$\rho_1 C_{p,1}(T_1) \frac{\Delta x}{2} \frac{dT_1}{dt} = h(T_r - T_1) + \bar{k}_{1 \rightarrow 2} \frac{T_2 - T_1}{\Delta x} \quad (2)$$

변수 설명:

- h : 대류 열전달계수 ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)
- T_r : 회복 온도 (Recovery Temperature, K)
- \bar{k} : 인접 노드 간 유효 열전도도 ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)

1.2.2 제1재료 내부 노드 ($2 \leq i \leq m - 1$)

표면 재료 내부에서의 에너지 보존식은 다음과 같습니다.

$$\rho_1 C_{p,1}(T_i) \Delta x \frac{dT_i}{dt} = \bar{k}_{i-1 \rightarrow i} \frac{T_{i-1} - T_i}{\Delta x} + \bar{k}_{i \rightarrow i+1} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} \quad (3)$$

1.2.3 이종 재료 계면 노드 ($i = m$)

두 재료가 접하는 계면(Interface)에서는 각 재료의 물성치가 혼합된 검사체적을 갖습니다. 좌측은 제1재료, 우측은 제2재료의 물성을 따릅니다.

$$\left[\frac{\rho_1 C_{p,1}(T_m) + \rho_2 C_{p,2}(T_m)}{2} \right] \Delta x \frac{dT_m}{dt} = \bar{k}_{m-1 \rightarrow m} \frac{T_{m-1} - T_m}{\Delta x} + \bar{k}_{m \rightarrow m+1} \frac{T_{m+1} - T_m}{\Delta x} \quad (4)$$

1.2.4 제2재료 내부 노드 ($m + 1 \leq i \leq N - 1$)

내측 재료 내부에서의 거동은 제1재료와 동일한 형태를 가지며 물성치만 변경됩니다.

$$\rho_2 C_{p,2}(T_i) \Delta x \frac{dT_i}{dt} = \bar{k}_{i-1 \rightarrow i} \frac{T_{i-1} - T_i}{\Delta x} + \bar{k}_{i \rightarrow i+1} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} \quad (5)$$

1.2.5 내측 단열 경계 노드 ($i = N$)

내측 끝단($x = L$)은 단열(Adiabatic) 조건으로 가정하여 열유속이 0이 됩니다.

$$\rho_2 C_{p,2}(T_N) \frac{\Delta x}{2} \frac{dT_N}{dt} = \bar{k}_{N-1 \rightarrow N} \frac{T_{N-1} - T_N}{\Delta x} \quad (6)$$

1.3 보조 방정식 (Auxiliary Equations)

노드 계면에서의 유효 열전도도 \bar{k} 는 온도의 존성을 고려하여 조화 평균(Harmonic Mean)을 사용하여 계산합니다.

$$\bar{k}_{i \rightarrow i+1} = \frac{2k(T_i)k(T_{i+1})}{k(T_i) + k(T_{i+1})} \quad (7)$$

2 열분해 수치해석 모델 (Pyrolysis Numerical Model)

본 장에서는 코르크(P50)와 같은 삭마(Ablation) 재료에서 발생하는 열분해(Pyrolysis) 현상을 수치적으로 모사하기 위한 모델링 기법을 기술합니다. 본 모델은 단순한 온도 의존성을 넘어, 재료가 겪은 최대 온도(T_{\max})에 따라 물성치가 비가역적으로 변화하는 이력 현상(Hysteresis)을 고려합니다.

2.1 상태 변수 정의: 최대 도달 온도 (T_{\max})

열분해는 비가역 반응이므로, 현재 온도(T)뿐만 아니라 해당 노드가 과거에 겪었던 최고 온도인 T_{\max} 를 추적해야 합니다. 이를 위해 각 노드의 T_{\max} 를 온도의 시간 변화와 함께 계산되는 상태 변수(State Variable)로 정의합니다.

$$T_{\max}(t) = \max_{0 \leq \tau \leq t} \{T(\tau)\} \quad (8)$$

수치 해석상에서는 급격한 불연속성을 방지하기 위해, 다음과 같은 상미분방정식(ODE) 형태로 변환하여 온도(T)와 연립하여 풀이할 수 있습니다. 여기서 $\sigma(\cdot)$ 는 시그모이드(Sigmoid) 게이트 함수를 의미합니다.

$$\frac{dT_{\max}}{dt} = \sigma(\alpha(T - T_{\max})) \frac{dT}{dt}, \quad \text{for } \frac{dT}{dt} > 0 \quad (9)$$

2.2 물성치의 비가역 동결 (Irreversible Property Freezing)

코르크 P50은 가열 시 열분해를 통해 숙(Char)으로 변하며, 이후 냉각되더라도 원래의 코르크(Virgin) 물성으로 돌아가지 않습니다.[1] 본 모델에서는 이를 모사하기 위해 물성 동결(Property Freezing)로직을 적용합니다.

2.2.1 동결 계수 (λ)의 정의

재료가 열분해 임계 온도(T_{crit})를 초과한 상태에서 냉각(Cooling) 단계로 진입할 경우, 비열(C_p)과 열전도도(k)는 현재 온도 T 가 아닌 최대 도달 온도 T_{\max} 에서의 값을 유지하도록 구성할 수 있습니다. 이를 결정하는 동결 계수 λ 는 두 개의 시그모이드 게이트의 곱으로 표현됩니다.

$$\lambda = \sigma(T_{\max} - T_{\text{crit}}) \sigma(T_{\max} - T) \quad (10)$$

조건 설명:

- $\sigma(T_{\max} - T_{\text{crit}})$: 열분해가 시작되었는가? (임계 온도 초과 여부)
- $\sigma(T_{\max} - T)$: 현재 냉각 중인가? (현재 온도가 최대 온도보다 낮은지 여부)

2.2.2 유효 물성치 결정

계산된 동결 계수 λ 를 사용하여 최종 유효 물성치(ϕ_{eff})는 다음과 같이 선형 보간됩니다. $\lambda \approx 1$ 인 경우(열분해 후 냉각 시) 물성치는 T_{\max} 시점의 값으로 고정됩니다.

$$\phi_{\text{eff}}(T, T_{\max}) = (1 - \lambda) \phi_{\text{table}}(T) + \lambda \phi_{\text{table}}(T_{\max}) \quad (11)$$

여기서 ϕ 는 열전도도 (k) 또는 비열 (C_p)을 나타냅니다.

2.3 밀도 감소 모델링 (Density Decomposition)

본 수치해석 모델은 밀도 변화 계산 방식에 따라 두 가지 모드(Simple, Advanced)를 제공합니다.

2.3.1 단순 모드 (Simple Mode)

단순 모드에서는 열분해에 의한 질량 손실을 무시하고, 밀도를 상수로 가정합니다. 이는 열적 특성 (k, C_p)의 변화에 집중할 때 사용됩니다.

$$\rho(T) = \rho_{\text{virgin}} \quad (\text{constant}) \quad (12)$$

2.3.2 고급 모드 (Advanced Mode)

고급 모드에서는 열분해 가스 방출에 의한 밀도 감소를 고려합니다. 고정 격자(Fixed Grid) 모델을 사용하므로 부피 변화는 없다고 가정하며, 밀도는 T_{\max} 의 함수인 질량 잔존율(Mass Fraction)에 비례하여 감소합니다.[2, 3]

$$\rho_{\text{eff}}(T_{\max}) = \rho_{\text{virgin}} \times \frac{\mathcal{M}(T_{\max})}{100} \quad (13)$$

변수 설명:

- ρ_{eff} : 열분해 진행을 고려한 유효 밀도 (kg m^{-3})
- ρ_{virgin} : 초기 코르크 밀도 (예: 465.6 kg m^{-3})
- $\mathcal{M}(T_{\max})$: 정규화된 질량 프로파일 함수 (%), T_{\max} 에 의존)[1]

이때 $\mathcal{M}(T_{\max})$ 는 TGA(열중량 분석) 데이터를 기반으로 미리 정의된 보간 함수를 사용하며, 온도가 상승함에 따라 100 %에서 약 20 %(완전 탄화) 까지 감소합니다.[4]

2.4 수치 해법 (Numerical Solution)

위의 과정들을 종합하여 최종적으로 풀어야 할 시스템은 온도 벡터 \mathbf{T} 와 최대 온도 벡터 \mathbf{T}_{\max} 를 포함한 $2N$ 크기의 시스템입니다.

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{T}_{\max} \end{bmatrix} = \mathbf{F}(t, \mathbf{T}, \mathbf{T}_{\max}) \quad (14)$$

본 모델은 열분해 반응의 급격한 변화로 인한 수치적 강성(Stiffness)을 해결하기 위해 BDF(Backward Differentiation Formula) 기반의 내재적(Implicit) 시간 적분법을 사용할 수 있으며, 희소 야코비안(Sparse Jacobian) 처리를 통해 연산 속도를 최적화할 수 있습니다.

3 코드 아키텍처 (Code Architecture)

본 소프트웨어는 수치 해석을 담당하는 물리 엔진(Physics Engine)과 사용자 인터페이스(GUI)가 명확히 분리된 객체 지향(Object-Oriented) 구조를 따릅니다. Python 환경에서 구동되며, 고성능 수치 연산을 위해 NumPy와 SciPy를, 현대적인 UI 구성을 위해 CustomTkinter를 사용합니다.

3.1 시스템 개요 (System Overview)

전체 시스템은 크게 세 가지 계층으로 구분됩니다.

- 물리 엔진 계층 (Physics Layer): 1차원 비정상 열전달 미분방정식을 정의하고 풀이합니다. HeatSolver 클래스가 핵심 역할을 수행하며, BDF(Backward Differentiation Formula) 기반의 ODE 솔버를 내장하고 있습니다.
- 데이터 관리 계층 (Data Layer): 물성치(Proprieties)와 경계 조건(Boundary Conditions)을 관리합니다. default_data.py에 정의된 기본 데이터셋과 사용자 정의 데이터를 처리하며, CSV 입출력을 지원합니다.
- 프레젠테이션 계층 (Presentation Layer): HeatTransferApp 클래스를 중심으로 사용자 입력을 받고, 실시간 진행률을 표시하며, Matplotlib을 통해 결과를 시각화합니다.

3.2 클래스 상세 설계 (Class Specifications)

3.2.1 HeatSolver: 물리 엔진 코어

HeatSolver 클래스는 열전달 시뮬레이션의 모든 수학적 연산을 담당합니다. 특히 계산 속도 향상을 위해 희소 행렬(Sparse Matrix) 형태의 야코비안(Jacobian)을 미리 구축하여 솔버에 제공합니다.

Table 1: HeatSolver 클래스 주요 메서드

메서드 (Method)	기능 설명
<code>__init__</code>	기하학적 파라미터(L_1, L_2, N_1, N_2) 설정 및 유한 차분 그리드 생성
<code>__build_jac_sparsity</code>	ODE 솔버 가속을 위한 3중 대각(Tri-diagonal) 희소 야코비안 구조 생성 (CSR 형식)
<code>__init_interpolators</code>	온도 의존성 물성(k, C_p) 및 시간 의존성 경계 조건(h, T_r)의 보간 함수 초기화
<code>get_props1</code>	코르크 물성 반환 (Simple/Advanced 모드에 따른 C_p/k 고정 및 밀도 보정 로직 포함)
<code>ode_system</code>	ODE의 우변(RHS) 계산 ($\frac{dT}{dt}$ 및 상태 변수 $\frac{dT_{max}}{dt}$ 연산)
<code>solve</code>	SciPy.solve_ivp를 호출하여 BDF 방식으로 시간 적분 수행

3.2.2 HeatTransferApp: 메인 GUI 컨트롤러

애플리케이션의 생명 주기를 관리하며, 사용자 입력 검증 및 시각화를 담당합니다.

- 스레드 관리: GUI 브리징(Freezing)을 방지하기 위해 `run_simulation` 메서드는 별도의 스레드(Worker Thread)에서 솔버를 실행합니다. 메인 스레드는 `monitor_progress`를 통해 100ms 간격으로 진행 상황을 폴링(Polling)합니다.
- 차트 통합: Matplotlib의 캔버스를 Tkinter 위젯에 통합하여 온도 이력, 비열 변화, 열분해 비교 그래프를 실시간으로 렌더링합니다.

3.2.3 보조 UI 클래스

사용자 경험을 향상시키기 위해 별도의 팝업 윈도우 클래스를 제공합니다.

- **TableEditor:** 재료 및 경계 조건 데이터를 스프레드시트 형태로 편집하는 팝업입니다. 행 추가/삭제 및 실시간 그래프 미리보기를 지원합니다.
- **GraphSettingsWindow:** 그래프의 선 색상, 레이블, 표시할 노드 인덱스를 사용자가 직접 커스터마이징 할 수 있는 설정 창입니다.

3.3 데이터 지속성 및 연동 (Data Persistence)

사용자가 수정한 물성 데이터는 로컬 JSON 파일에 영구 저장되어 다음 실행 시에도 유지됩니다. 데이터 무결성을 위해 다음과 같은 연동 그룹(Linked Group) 정책을 사용합니다.

$$\text{Consistency Group} = \{\text{Cork}_{Pyrolysis}, \text{Cork}_{NoPyro}, \text{Mass}_{Profile}\} \quad (15)$$

위 세 가지 데이터 중 하나라도 수정되어 저장될 경우, 나머지 데이터도 함께 묶여서 저장됩니다. 이는 열분해 해석과 비열분해 해석 간의 비교 정합성을 보장하기 위함입니다.

3.4 파일 구조 (File Structure)

프로젝트의 물리적 파일 구성은 다음과 같습니다.

```
HTP50cork/
├── app.py                  # 진입점(Entry Point), GUI 및 물리 엔진 클래스 포함
├── default_data.py        # SI 단위계 기준 기본 물성(P50, A17075) 및 경계 조건 데이터
├── assets/                 # 아이콘 및 리소스 파일
└── saved_data/            # 사용자 정의 데이터 저장소 (JSON, 자동 생성)
```

4 Nomenclature (기호 설명)

기호	설명	단위
T	온도	K
t	시간	s
x	깊이 방향 좌표	m
ρ	밀도	kg m^{-3}
C_p	비열	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
k	열전도도	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
h	대류열전달계수	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
T_r	회복 온도	K
\bar{k}	유효 열전도도	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
N	전체 노드 개수	-
m	계면 노드 인덱스	-
Δx	공간 격자 간격	m

References

- [1] Reference 16 placeholder (P50 pyrolysis / irreversible change).
- [2] Reference 24 placeholder (fixed-grid / density decomposition model).
- [3] Reference 25 placeholder (mass fraction / decomposition approach).
- [4] Reference 90 placeholder (TGA-based mass fraction profile for P50).