

내연기관의 연소현상에 대한 수치해석

Numerical Simulation on Combustion Phenomena of Internal Combustion Engine

조 경 국* ; 황 상 순**
 K. K. Cho, S. S. Hwang

1. 머리말

내연기관내의 연소현상은 물리 및 화학적현상이 동시에 일어나는 매우 복잡한 현상이다. 물리 및 화학적현상으로는 질량, 운동량, 에너지전달, 화학반응 및 벽면으로의 열전달기구, 난류화염전과과정, 배기가스 생성기구들로 나타낼 수 있으며 이러한 여러 현상들이 내연기관의 연소실내에서 서로 복잡한 상관관계를 가지며 내연기관의 성능에 영향을 미치게 된다. 이와 같은 복잡한 현상들로 인하여 이제껏 내연기관의 성능향상을 위한 연구는 실험적방법 혹은 경험적사실에 의존하여 왔으나 최근에 들어 수치해석 및 컴퓨터의 급속한 발달로 인하여 내연기관내의 연소현상에 대한 여러가지 의미있는 결과를 얻을 수 있는 가능성이 생기게 되었다. 물론 수치해석 결과가 제대로 현상을 표현할 수 있으려면 같은 조건하에서 실험을 병행하여 수치계산의 정확성 및 입력데이터의 검증과정을 거쳐야 할것이다. 일단 이러한 검증과정을 통하여 수치계산의 정확성 및 타당성에 대한 확신이 서면 엔진형태 및 점화시기, 혼합비, 엔진속도등의 매개변수에 대한 기초연구 뿐만아니라, 엔진성능향상을 위한 엔진의 제반 특성에 관한 연구분야로의 응용이 가능하게 된다. 또한, 이를 통하여 실험적으로는 실

험양이 방대하여 도저히 시도할 수 없는 여러 가지 조건에 대한 결과를 얻을 수 있으며 연소실내의 모든 물리량을 보다 세세하게 가시화 할 수 있게 된다. 바로 이런 점이 현재 내연기관내의 연소현상 연구에 수치해법 개발이 계속 되고 있는 주된 이유이다.

본 해설에서는 현존 내연기관내의 연소현상에 적용되고 있는 여러 수치적방법 및 모델에 대한 소개와 주로 유체역학적인 면과 화학반응론적인 면, 화염전과 과정에서의 수치적인 난점들과 그와같은 수치적 난점들을 유발시키는 물리적 현상 및 그 수치적 난점을 해결하는 해결방안을 다루겠으며, 또한 몇가지 내연기관의 연소현상에 대한 수치계산 예를 간략히 소개하고자 한다. 보다 자세한 수치해석 방법은 전산유체역학에 기본적인 참고도서 (1)-(3)를 연소현상 수치해석에 대하여서는 McDonald (4)와 Oran 과 Boris⁽⁵⁾의 최근해설을 참고하기 바란다.

2. 유체역학적인 면에서의 고려사항

먼저 유체역학적 면에서 고려해야 할 사항으로서 차원문제, 격자점수, 마하수, 난류문제에 대하여 간략히 설명한다.

* 正會員, 서울대학교 航空工學科

** 서울대학교 航空工學科

2-1 차원문제

실제 엔진 실린더의 기하학적 형상은 3차원적이거나 2차원 수치계산을 통해서라도 3차원 수치계산에 준하는 많은 정보를 얻을 수 있다. 물론 2차원 수치계산을 통한 연소현상 해석도 CDC7600의 대형 컴퓨터라도 1-4시간 가량의 계산시간을 요하는 방대한 계산량을 요구한다. 최근에 들어와서 실제 엔진의 3차원 형상에까지 적용시킬 수 있는 전산프로그램이 개발되고 있으나 대부분의 3차원 연소현상에 대한 수치해석은 현재의 슈퍼컴퓨터(CRAY 1, CRAY-XMP)로도 많은 계산시간이 걸리기 때문에 주로 내연기관에서의 수치해석은 3차원 연소현상을 2차원으로 적절히 모사하여 계산하는 경우가 많다.

이러한 2차원 수치계산으로서도 3차원 연소현상을 적절히 모사할 수 있는 방법으로는 첫째, 원통형 좌표계에서의 축대칭 좌표계를 사용하는 것인데 이럴 경우 대칭축에 대한 3차원 회전류의 수치모사가 가능하게 되며⁽⁶⁾,

둘째, 평면 가변좌표계⁽⁷⁾⁻⁽¹⁰⁾를 사용하는 것인데 이것은 대부분의 연소가 상사점 전후에서 일어나므로 피스톤 운동을 시간에 따라 변하는 길이변수(Depth Factor)를 사용하여 계산함으로써 2차원 수치해법으로도 실제엔진에 유사한 연소과정을 수치모사할 수 있다.

2-2 공간 격자점 차분방법

수치계산을 하기 위하여 계산공간을 여러개의 격자점으로 나누는 차분과정을 거치게 되는데 크게 유한 차분법(Finite Difference Method)과 유한 요소법(Finite Element Method)으로 나누어진다.

유한 차분법을 사용할 경우, 내연기관의 벽면조건이 대개의 경우 곡률을 가지고 있고 또한 피스톤 운동에 따른 움직이는 벽면 조건을 가지고 있어 이를 적절히 처리해야 할 방법이 필요하다. 현재 이와 같은 벽면조건을 처리할 가장 효율적인 방법으로 ALE(Arbitrary Lagrangian Eulerian)⁽¹¹⁾ 방법을 들 수 있는데 이 방법은 격자점을 임의의 사각형으로 구성하고

각 격자점을 시간에 따라 변하는 임의 함수로 두어서 계산하는 방법이다. 이외의 방법으로는 적절한 시간 좌표변환⁽¹²⁾ 기법을 사용하여 변환된 좌표계에서 계산하는 방법이 있으나 물리량이 보존되지 못하는 단점을 지니고 있다.

유한요소법을 통한 해석은 삼각형 격자점을 이용하는 방법으로 기하학적으로는 앞서 설명한 ALE 방법과 같은 정도의 효율성을 지니나 내연기관과 같은 복잡한 조건에서는 수치전개 과정이 너무 복잡하여 계산비용이 많이 들과 동시에 아직 유체역학에로의 적용과정에서 많은 문제점을 안고 있는 실정이다.

2-3 유동속도(또는 마하수)

연소실내의 유동은 대개의 경우 마하수 0.1 이하의 낮은 유동이다. 내연기관내의 연소현상은 압력에 의한 농도의 변화가 생기므로 압축성 수치계산 방법을 사용하는데 이와 같은 수치계산 방법에서 Explicit 수치해법은 항상 Courant Sound Speed Stability 제한조건을 갖게 된다. 즉 유동속도가 늦어지면 질수록 Explicit Time Marching에 있어 계산시간증분값이 짧아지게 되므로 실제 현상이 일어나는 시간동안을 계산하려면 계산시간이 막대하게 증가한다.

그리하여 제안된 것이 ICE(Implicit Continuous Eulerian) 수치해법⁽¹²⁾⁻⁽¹⁵⁾으로 아음속에서부터 초음속까지 효율적으로 계산하는 Implicit 방법이다. 그러나 이러한 ICE 수치해법도 내연기관의 연소현상과 같이 매우 낮은 마하수의 유동일 때는 Implicit 방법에 널리 쓰이는 반복계산(Iteration Procedure)의 반복계산횟수(Iteration Number)가 증대하게 된다. 그리하여 제안된 방법이 O'Rourke와 Bracco⁽¹⁶⁾에 의하여 사용된 α 변환으로서 이 변환의 효과는 인위적으로 음속을 줄여 유동장의 마하수를 크게 해주는 것으로 ICE의 수치해법을 쓸 경우 평균반복 계산횟수(Average Iteration Number)를 적게 하며 그로 인하여 전체계산시간이 매우 줄어들게 되어 효율적인 수치계산이 가능하게 된다.

2-4 난류문제

난류연소문제는 이와같은 한정된 지면으로 설명하기에는 너무나 방대한 내용이므로 본해설에서는 간단히 난류연소에 적용되는 모델과 그 모델을 사용한 몇가지 계산을 한 논문을 소개하는 것으로 대신 하겠다.

가장 일반적으로 사용되는 방법으로는 난류 운동량과 난류소산율로 나타나는 두개의 난류 변수에 대한 미분방정식⁽¹⁷⁾⁻⁽¹⁸⁾을 풀어 난류 확산계수를 계산하는 것이다.

또 다른 난류모델로서는 SGS(Sub Grid Scale) 혹은 LES(Large Eddy Simulation)^{(19)~(22)}를 사용하는 것으로 앞서 2변수 난류모델로는 나타낼 수 없는 Large-Scale Coherent 난류운동에 적용이 가능하게 하였다.

3. 화학반응 측면

이상의 유체역학적인 측면 이외에 연소현상은 급격한 발열반응을 수반하므로 탄화수소계열에 대한 화학반응식이 필요하게 된다. 그러나 지금까지 꽤나 알려진 아세틸렌, 메탄, 프로판등의 공기와의 화학반응은 대략 100여개의 기초 소반응식으로 구성되어 있어 이런 모든 소반응식으로 수치계산을 수행한다고 하는 것은 이제까지의 유체역학적 면에서 소요된 계산기용량과 계산시간 증가보다 훨씬 더 큰 용량과 계산시간을 요구하게 된다. 이런 이유로 내연기관내의 연소에 대하여서는 1단계 혹은 몇단계의 총괄 화학반응식⁽²³⁾⁻⁽²⁴⁾을 사용하게 된다. 또 한가지 화학반응식을 수치 계산할때 나타나는 문제점으로는 화학반응식의 특성시간이 유체역학의 특성시간에 비해 매우 짧을때 수치계산에서의 시간증분이 화학반응의 특성시간에 의하여 결정되어 매우 짧아지게 된다. 이로 인하여 계산시간이 길어지게 되는데, 이러한 현상은 반응계를 나타내는 방정식이 Stiff하다는 것으로 알려져 있으며 이를 해결하는 방법으로 제안하고 있는 것은 부분평형(Partial Equilibrium)⁽²⁵⁾이라는 방법으로 빠른 화학반응율을 가진 반응식은 항상 평형상태를 유

지한다고 생각하고 낮은 반응율을 가진 반응은 일반적인 시간 증분으로 푸는 것으로서 전체 계산시간을 매우 줄일 수 있게된다.

4. 화염전파 과정 고찰

일반적으로 화학반응을 수반하는 연소과정의 수치계산에서 문제가 되는 점은 화염면의 두께가 계산격자점에 비해 매우 작다는 것이다. 특히 층류화염일 경우 더욱 그렇다. 이런 얇은 화염면에서의 현상이 전체계의 물리량에 지배적인 영향을 미치기 때문에 화염면 내부의 물리량의 분포에 대하여 정확히 수치모사하는 것이 무엇보다 중요하다. 이런 얇은 화염면을 분해하기 위하여 미세한 계산격자간격을 사용할 경우 격자점의 수가 매우 많아져서 계산기의 기억용량에 제한을 받게 된다. 이를 수치해법으로 해결하는 방법으로 β 변환⁽¹⁶⁾⁻⁽²⁶⁾을 들 수 있는데 이것은 화염면에서 확산계수를 β 만큼 증가시키고 화학반응을 β 만큼 감소시키는 것으로서 실제의 화염면을 몇개의 계산격자에 걸쳐서 계산되도록 가상적으로 화염면을 팽창시키는 방법이다. 이와 같은 β 변환과 앞서 설명한 α 변환을 사용하여 계산된 수치계산의 예가 Fig. 1에 나타나 있다.

이 계산은 밀폐용기내의 층류화염 전파과정을 수치모사한 것인데 수치계산은 ALE 방법과 ICE 방법에 계산시간과 격자점을 줄이기 위하여 α, β 변환을 사용하였다.⁽²⁷⁾

온도분포와 속도벡터의 변화 및 화염전파의 3차원 그래프가 Fig. 1에 표시되어 있다.

5. 실제 내연기관의 연소현상 해석에

앞에서 설명한 바와 같이 내연기관의 연소현상의 수치계산과정은 매우 복잡하고 또한 수치계산 이전에 내연기관의 연소현상 자체에 관련된 여러 물성치에 대한 데이터의 부족으로 수치계산의 범위가 매우 한정될 수 밖에 없으나 이와같은 문제들은 차후에 진행되는 실험결과와 이론의 발전에 의하여 조금씩 해결되는 것이므로 실제 내연기관내의 연소현상에 대하여 계산된 한 수치계산예를 보도록 하자.

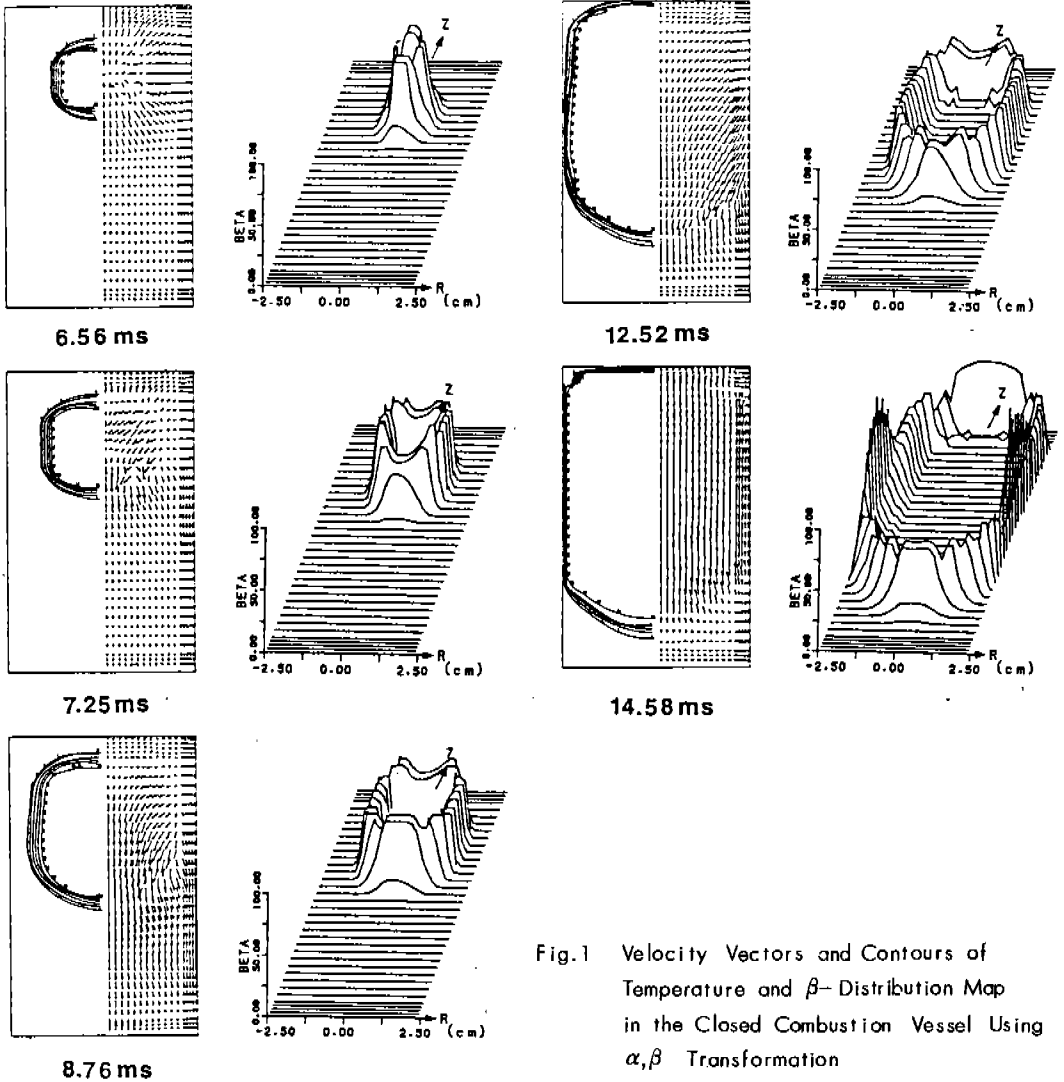


Fig.1 Velocity Vectors and Contours of Temperature and β - Distribution Map in the Closed Combustion Vessel Using α, β Transformation

이것은 Butler⁽²⁸⁾에 의하여 계산된 것으로서 수치계산에 사용된 엔진의 제원 및 작동조건은 표 1에 나타나 있다.

Fig. 2는 상사점 직전 점화할 시기의 속도 벡터와 상사점 직후의 온도, NO농도의 분포를 표시하고 있다.

이러한 수치계산은 가상적인 엔진에 대하여 계산하였으나 전술한 바와같이 실험과의 상호 비교를 통한 보다 면밀한 검증과정을 거침으로써 실제 내연기관내의 연소현상을 예측하는

표 1. 엔진 제원 및 작동조건

Bore	98.4 mm
Stroke	95.5 mm
Cap diameter	49.2 mm
Compression ratio	10:1
Speed	1600r/min
Fuel	n-octane
Initial Temperature	314 K
Pressure	0.1 Mpa

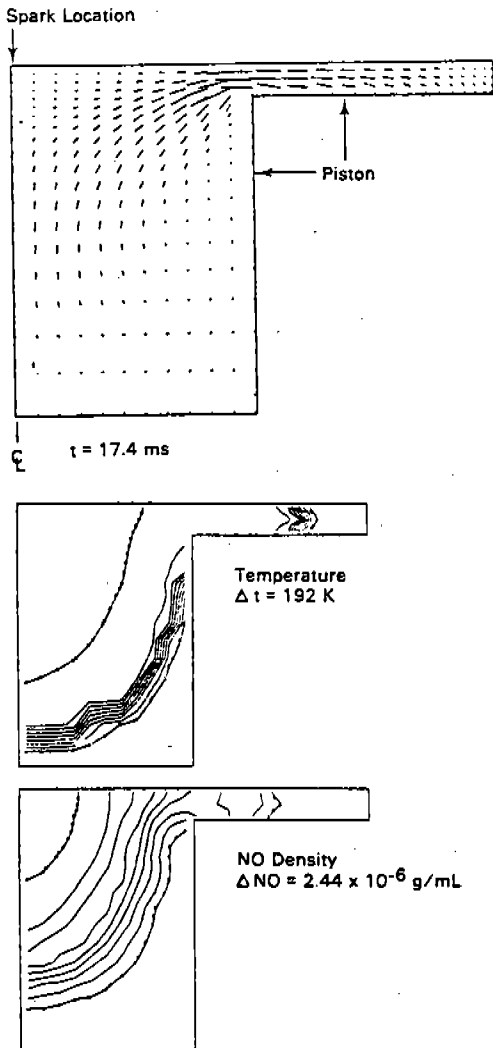


Fig.2 Velocity Vectors at the Time of Ignition Time=17.4 ms and Contours of Temperature and NO Density. Time = 20.6 ms

데 있어 수치해석의 적용가능성이 보다 높아지게 될것이다.

6. 맺는 말

본 해설을 통해 내연기관의 연소현상을 수치해석하는데 나타나는 여러 수치적 난점들과 그 해결방법들에 대하여 간략히 소개하였다. 보다 자세한 내용은 해당 참고문헌을 참조하기 바라며 수치계산을 통한 내연기관내의 연

소현상해석에 관심있는 독자들에게 이 해설이 조금이나마 도움이 되었으면 한다.

참 고 문 헌

1. Richtmyer, R.D. and Morton, K.W., Difference Methods for Initial- Value Problems (Wiley/Interscience, New York, 1967), 2nd ed.
2. Roache, P.J., Computational Fluid Dynamics (Hermosa, Albuquerque, 1976), revised ed.
3. Chow, C.Y., An Introduction to Computational Fluid Mechanics (Wiley, New York, 1979).
4. McDonald, H., Prog. Energy Combust. Sci. 5, 97 (1979).
5. Oran, E.S. and Boris, J.P., Detailed Modeling of Combustion System, Prog. Energy Combust. Sci. 7, 1 (1981).
6. Butler, T.D., Cloutman, L.D., Dukowicz, J.K. and Ramshaw, J.D., CONCHAS: An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Computer Code for Multi-component Chemically Reactive Fluid Flow at All Speeds, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-8129-MS (November 1979).
7. Nakayama, P.I. and Romero, N.C., J. Comp. Phys. 8, 230 (1971).
8. Ramshaw, J.D. and Dukowicz, J.K., APACHE: A Generalized-Mesh Eulerian Computer Code for Multi-component Chemically Reactive Fluid Flow, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-7427 (January 1979).
9. Gupta, H.C. and Syed, S.A., REC-P3 (Reciprocating Engine Combustion, Planar Geometry, Third Version): A Computer Program for Combustion in Reciprocating Engines, MAE Report No. 1431, Mechanical and Aerospace Engineering Department, Princeton University (March 1979).

10. Benjamin, S.F., Weaving, J.H., Glynn, D.R., Markatos, N.C. and Spalding, D.B., Development of a Mathematical Model of Flow, Heat Transfer and Combustion in a Stratified Charge Engine, Institution of Mechanical Engineers Paper C430/80.
11. Hirt, C.W., An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Computing Technique, Proceedings of the Second International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics (Springer-Verlag, Berlin, 1971), p.350.
12. Harlow, F.H. and Amsden, A.A., J. Comp. Phys. 3, 80 (1968).
13. Harlow, F.H. and Amsden, A.A., J. Comp. Phys. 8, 197 (1971).
14. Harlow, F.H., Amsden, A.A. and Hirt, C.W., Numerical Calculation of Fluid Flows at Arbitrary Mach Number, Proceedings of the Second International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics (Springer-Verlag, Berlin, 1971), p.447.
15. Cloutman, L.D., Hirt, C.W. and Romero, N.C. SOLA-ICE: A Numerical Solution Algorithm for Transient Compressible Fluid Flow, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-6236 (July 1976).
16. O'Rourke, P.J. and Bracco, F.V., J. Comp. Phys. 33, 185 (1979).
17. Launder, B.E. and Spalding, D.E., Mathematical Models of Turbulence (Academic, London and New York, 1972).
18. Harlow, F.H., Turbulence Transport Modeling, Vol. XIV, AIAA Selected Reprint Series (AIAA, New York, 1973).
19. Deardorff, J.W., J. Fluid Mech. 41, 453 (1970).
20. Deardorff, J.W., J. Comp. Phys. 7, 120 (1971).
21. Deardorff, J.W., J. Fluids Eng. (Trans. ASME) Sept. 1973, p.429.
22. Ramshaw, J.D., Alternate Interpretation of the Subgrid Scale Eddy Viscosity, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-7955-MS (August 1979).
23. Kono, M. et. al., Fundamental Study on the Modeling of Flame Propagation in Constant Volume Vessels, Proceedings of International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Reciprocating Engines (1985), p.325-334.
24. Hautman, D.J. et. al., A Multi-step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons, Combustion Science and Technology, vol.25, (1981), p.219-235.
25. Ramshaw, J.D., Phys. Fluids 23, 675 (1980).
26. Butler, T.D. and O'Rourke, P.J., A Numerical Method for Two Dimensional Unsteady Reacting Flows, Sixteenth Symposium (International) on Combustion (Combustion Institute, Pittsburgh, 1976), p.1530.
27. 황상순, 정인석, 조경국, 원통형 밀폐 연소기내에서의 층류화염 전파과정의 수치 해석, 한국항공우주학회, 제 15 권 제 2 호 (1987), p.32-39.
28. Butler, T.D. et. al., Toward a Comprehensive Model for Combustion in Direct Injection Stratified-Charge Engine, Combustion Modeling in Reciprocating Engines (1980), p.231-264.