

전파화염 수치모사에서의 Solution-Adaptive-Grid의 응용

Applications of Solution-Adaptive-Grid on Numerical Simulation of
a Propagating Flame

黃 相 淳*, 鄭 仁 碩**
S. S. Hwang, I. S. Jeung

1. 서 론

내연기관내의 연소현상에 대한 이해를 위하여 수치계산 방법을 통한 해석이 근래 컴퓨터의 발달과 아울러 보다 효과적인 수치해법의 개발을 통하여 광범위하게 적용되고 있다.

이러한 수치계산 결과가 실제 내연기관내의 연소현상을 제대로 예측하기 위하여서는 수치적인 면에서 뿐만 아니라 화학반응을 수반하는 연소현상에 관련된 여러 물리화학적 데이터의 불확실성으로 인해 아직 극복해야 할 많은 단계가 남아 있으나, 최근에 들어 몇몇 연소현상에 대하여서는 실제 현상을 예측할 수 있는 수준에 이르게 되었다.^{1,2)}

그런데 내연기관내에서의 유동현상은 시간적으로 비정상적으로 전파하는 전파화염면에 의하여 결정적으로 영향을 받게 되므로 수치계산에 있어서 이 화염면의 정확한 수치계산이 매우 중요한 역할을 하게 된다.

이러한 전파화염면은 층류화염면인 경우 0.1 mm 정도의 두께에서 난류화염면인 경우 수 mm 의 값을 가지고 있어 통상의 등간격 격자망으로서 화염면에 대한 적절한 공간분해능을 가질려면 현존의 계산기능력으로는 다룰 수 없는 대규모의 메모리와 빠른 계산속도를 필요하게 된다.

일반적으로 수치계산을 할 경우 계산하고자 하는 해당 유동장을 몇 개의 격자점으로 분할하여 연속적인 실제 유동장을 각 격자점에 설정된 수치값들의 조합으로 대표하게 한다.

그런데 이러한 격자망을 형성할시 유동장내에서의 여러 변수들에 대한 값의 분포를 미리 알 수 없기 때문에 계산전에 조밀한 격자간격이 필요하다고 판단되어 지는 벽면 근방과 같은 영역을 제외하고는 대개의 경우 균일한 격자간격을 두어 격자망을 형성한다.

그러나 앞서 언급한 바와 같이 내연기관내에서의 화염전파과정과 같이 유동장을 절대적으로 지배하는 화염면의 두께가 매우 작고 비정상적으로 움직일 때 이러한 화염전파현상에 맞는 적절한 격자망을 형성하는 것은 매우 중요하다.

이런 화염면과 같은 공간적으로 좁은 지역에 물리량의 구배가 급격한 불연속적인 지점에 대하여, 유동장에 대한 수치계산과정 중에 이 불연속지점을 수치적으로 감지하여 격자점을 충분히 분포시키고 그 밖의 물리량의 구배가 크지 않은 지점에서는 격자 간격을 넓게 두으로써 물리적으로 의미있고 수치적으로 안정된 격자망을 형성시키는 이른바 Solution Adaptive Grid 방법이 최근 활발히 연구되고 있다.^{3,4)}

* 서울대학교 항공공학부, 助敎

** 正會員, 서울대학교 항공공학부, 副敎敎

이러한 Solution Adaptive Grid 방법은 화염면 뿐만 아니라 충격파⁵⁾, 그리고 두 물질간의 경계면 등과 같은 일반적인 불연속면의 수치계산에도 적용할 수 있어 그 응용범위가 매우 넓다.

본 해설에서는 이와 같은 Solution Adaptive Grid 방법중 1982년 Blackbill과 Salzman³⁾에 의하여 제안된 변분법을 이용한 Solution Adaptive Grid 방법에 대한 기본방정식 그리고 계산방법들을 소개하고자 한다. 이 방법은 논리적 구조에 있어서 명확하고 2차원 3차원 문제에 쉽게 확장시켜 적용할 수 있기 때문에 많은 연구자들에 의하여 채택되고 있다.

본 해설에서는 기본적인 방정식의 기술에 덧붙여 이 방법을 이용하여 계산된 풍동내의 전파충격파의 수치계산, 그리고 필자가 수행한 내연기관내의 화염전파 과정과 유사한 밀폐용기내의 충류화염 전파과정계산 등에 적용된 예를 함께 소개하고자 한다.

2. Solution Adaptive Grid 방법의 수식

Blackbill과 Salzman은 수치계산 결과가 유효한 값을 가지기 위하여 계산격자망이 만족해야 할 성질로서 계산격자간의 완만성, 계산격자간의 직교성, 그리고 물리량의 구배가 큰 지역에 격자점을 많이 분포시키게 할 수 있는 적절한 격자간격 변화를 정의하였다.

그리고 이들 각각의 성질에 대하여 변분법을 이용한 다음과 같은 Euler 방정식들을 유도하였다.

1) 격자간의 완만성(Grid Smoothness)에 대한 Euler 방정식

x, y 를 물리적인 면에서의 좌표이고 ξ, η 를 계산면에서의 좌표라고 할 때 $(\nabla\xi)^2 + (\nabla\eta)^2$ 은 ξ, η 좌표에 따른 격자간의 간격차이 정도를 나타내는 것으로서 계산격자간의 완만성을 판단하는 척도가 된다. 그러므로 완만한 격자망은 다음과 같은 적분함수를 최소화 시킴으로써 얻을 수 있게 된다.

$$I_s = \int_D [(\nabla\xi)^2 + (\nabla\eta)^2] dV \quad (1)$$

이 적분함수를 최소화시키는 방법으로서 변분법을 사용하게 되면 다음과 같은 Euler 방정식이 유도된다.

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial x_\xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial x_\eta} \right) \\ & \left(\frac{x_\xi^2 + x_\eta^2 + y_\xi^2 + y_\eta^2}{J} \right) = 0 \\ & \left(\frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial y_\xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial y_\eta} \right) \\ & \left(\frac{x_\xi^2 + x_\eta^2 + y_\xi^2 + y_\eta^2}{J} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

이 식을 미분한 후 최고미분차수의 계수를 정리한 후 적절한 조건에 의하면 다음과 같이 간단히 나타낼 수 있게 된다. 이 식은 매우 복잡한 경계 형상을 지닌 유동장을 계산할때 격자망 형성에 널리 쓰이는 타원형 형태의 방정식이다.

$$\begin{aligned} \alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} &= 0 \\ \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

여기서, $\alpha = (x_\eta^2 + y_\eta^2)/J^3$, $\gamma = (x_\xi^2 + y_\xi^2)/J^3$

$$\beta = (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta)/J^3, \quad J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi$$

이 식을 이용하면 그림1에서 보는 바와 같은 매우 복잡한 다중연결관과 같은 형태의 유동장을 계산하는데 적절한 격자망을 형성할 수 있다.

그리고 (3)식에 다음 식과 같은 적절한 제어 함수 P, Q 를 적용하면 그림2와 같이 벽면근방이나 필요한 지점에 적절한 격자망을 밀집시킬 수 있는 일반적인 Boundary-Fit 좌표변환을 할 수 있게 된다.⁶⁾

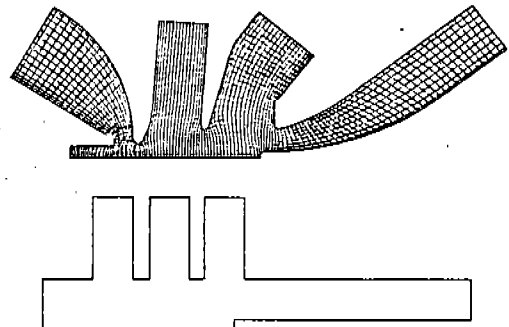


그림 1. 다중연결관에서의 격자점형성

$$\begin{aligned} \alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} &= -[x_{\xi} P(\xi, \eta) \\ &+ x_{\eta} Q(\xi, \eta)] / J \\ \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} &= -[y_{\xi} P(\xi, \eta) \\ &+ y_{\eta} Q(\xi, \eta)] / J \end{aligned} \quad (4)$$

여기서,

$$\begin{aligned} P(\xi, \eta) &= -\sum_{i=1}^n a_i \operatorname{sgn}(\xi - \xi_i) \exp(-c_i |\xi \\ &- \xi_i|) - \sum_{j=1}^m b_j \operatorname{sgn}(\xi - \xi_j) \\ &\times \exp[-d_j \sqrt{(\xi - \xi_j)^2 + (\eta - \eta_j)^2}] \end{aligned}$$

$Q(\xi, \eta)$ 는 $P(\xi, \eta)$ 에서 ξ 와 η 가 상호 바꾸어진 형태로 표시된다.

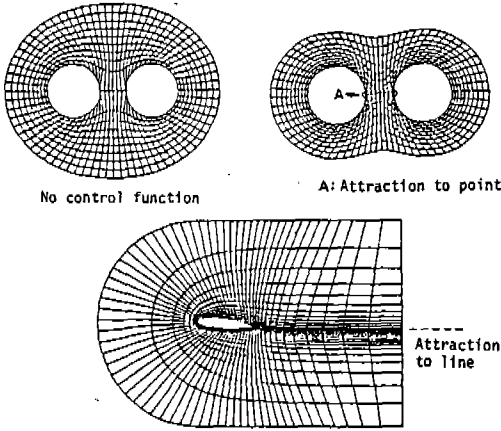


그림 2. 제어함수에 의한 격자망의 형성 예

윗식들은 Boundary-Fit 좌표형성에서 널리 쓰이는 방정식들이며 본 해설에서와 같은 일반적인 Adaptive Grid 생성을 위하여서는 다음 식과 같은 변분법에 의하여 직접 유도된 일반적인 형태의 식을 사용하게 된다.

$$\begin{aligned} b_{s1} x_{\xi\xi} + b_{s2} x_{\xi\eta} + b_{s3} x_{\eta\eta} + a_{s1} y_{\xi\xi} + a_{s2} y_{\xi\eta} \\ + a_{s3} y_{\eta\eta} &= 0 \\ a_{s1} x_{\xi\xi} + a_{s2} x_{\xi\eta} + a_{s3} x_{\eta\eta} + c_{s1} y_{\xi\xi} + c_{s2} y_{\xi\eta} \\ + c_{s3} y_{\eta\eta} &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

여기서,

$$\begin{aligned} a_{s1} &= -A\alpha, \quad b_{s1} = B\alpha, \quad c_{s1} = C\alpha \\ a_{s2} &= 2A\beta, \quad b_{s2} = -2B\beta, \quad c_{s2} = -2C\beta \\ a_{s3} &= -A\gamma, \quad b_{s3} = B\gamma, \quad c_{s3} = C\gamma \\ A &= x_{\xi} y_{\xi} + x_{\eta} y_{\eta}, \quad B = y_{\xi}^2 + y_{\eta}^2, \quad C = x_{\xi}^2 + x_{\eta}^2 \end{aligned}$$

2) 격자간격 조절에 대한 Euler 방정식 Solution Adaptive Grid 방법에 있어서 가장 기본이 되는 성질로서 물리량의 기울기가 큰 지역에 격자를 밀집시키고 기울기가 작은 지역에 격자점을 적게 분포시키는 것이 필요하다.

그래서 물리량의 구배의 크기에 비례하는 가중함수 w 를 정의할 때 수치계산에서 가중함수 w 가 큰 지역에서는 격자간격을 줄이고 많은 격자점을 분포시키기 위해서는 격자면적과 가중함수의 곱이 전체산영역에서 거의 균일하게 유지시키도록 해야 할 것이므로 다음과 같은 적분함수를 최소화시킴으로써 위의 성질을 만족시키게 한다.

$$I_v = \int_D w J dV \quad (6)$$

이 적분함수에 대한 Euler 방정식은 앞서 격자간의 완만성에서와 같은 변분법원리에 의하여 다음 식과 같이 유도된다.

$$\begin{aligned} 2w(b_{v1} x_{\xi\xi} + b_{v2} x_{\xi\eta} + b_{v3} x_{\eta\eta} + a_{v1} y_{\xi\xi} + a_{v2} y_{\xi\eta} \\ + a_{v3} y_{\eta\eta}) &= -J^2 \frac{\partial w}{\partial x} \\ 2w(a_{v1} x_{\xi\xi} + a_{v2} x_{\xi\eta} + a_{v3} x_{\eta\eta} + c_{v1} y_{\xi\xi} + c_{v2} y_{\xi\eta} \\ + c_{v3} y_{\eta\eta}) &= -J^2 \frac{\partial w}{\partial y} \end{aligned} \quad (7)$$

여기서,

$$\begin{aligned} a_{v1} &= -x_{\eta} y_{\eta}, \quad b_{v1} = y_{\eta}^2, \quad c_{v1} = x_{\eta}^2 \\ a_{v2} &= x_{\xi} y_{\eta} + x_{\eta} y_{\xi}, \quad b_{v2} = -2y_{\xi} y_{\eta}, \\ c_{v2} &= -2x_{\xi} x_{\eta} \\ a_{v3} &= -x_{\xi} y_{\xi}, \quad b_{v3} = y_{\xi}^2, \quad c_{v3} = x_{\xi}^2 \end{aligned}$$

3) 격자간의 직교성에 대한 Euler 방정식 격자간의 직교성을 유지하기 위하여 $\nabla \xi \cdot \nabla \eta$ 의 값이 전체산영역에 걸쳐 되도록 0의 값에 접근하도록 하여야 하므로 다음과 같은 적분함수를 정의하고 이 적분함수를 최소화시켜야 할 것이다.

$$I_o = \int_D (\nabla \xi \cdot \nabla \eta)^2 J^3 dV \quad (8)$$

이 적분함수에 대하여 변분법을 이용하여 구한 Euler 방정식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
 & b_{01} x_{\xi\xi} + b_{02} x_{\xi\eta} + b_{03} x_{\eta\eta} + a_{01} y_{\xi\xi} + a_{02} y_{\xi\eta} \\
 & + a_{03} y_{\eta\eta} = 0 \\
 & a_{01} x_{\xi\xi} + a_{02} x_{\xi\eta} + a_{03} x_{\eta\eta} + c_{01} y_{\xi\xi} + c_{02} y_{\xi\eta} \\
 & + c_{03} y_{\eta\eta} = 0 \tag{9}
 \end{aligned}$$

여기서,

$$\begin{aligned}
 a_{01} &= x_{\eta} y_{\eta}, & b_{01} &= x_{\eta}^2, & c_{01} &= y_{\eta}^2 \\
 a_{02} &= x_{\xi} y_{\eta} + x_{\eta} y_{\xi}, & b_{02} &= 2(x_{\xi} x_{\eta} + y_{\xi} y_{\eta}), \\
 c_{02} &= 2(x_{\xi} x_{\eta} + 2y_{\xi} y_{\eta}) \\
 a_{03} &= x_{\xi} y_{\xi}, & b_{03} &= x_{\xi}^2, & c_{03} &= y_{\xi}^2
 \end{aligned}$$

위의 3가지 기본적인 성질이 동시에 만족하는 격자망을 얻기 위하여서는 위 세가지 성질이 동시에 고려된 다음과 같은 총괄 적분함수를 정의하여 이 총괄적분함수에 해당되는 Euler 방정식을 사용하게 된다.

$$I = I_0 + \lambda_v I_v + \lambda_o I_o \tag{10}$$

여기서, λ_v 는 I_v 에 대한 가중치 그리고 λ_o 는 I_o 에 대한 가중치를 의미한다.

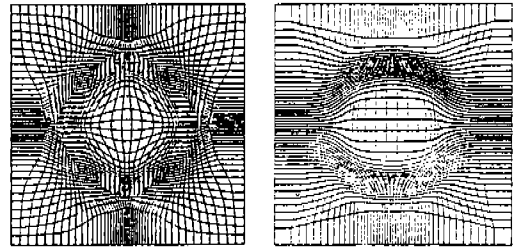
위의 Euler 방정식은 일반적으로 널리 알려져 있는 수치계산방법인 Jacobi 방법이나 SOR 그리고 ADI 방법에 의하여 계산할 수 있다.

3. Solution Adaptive Grid 방법을 사용한 계산 예

3.1 가중함수가 환형형태를 가진 격자망의 형성³⁾

가중함수 $w = (\exp(R-R_0)/k) / (k(1 + \exp(-(R-R_0)/k)^2))$, (여기서 k 의 가중함수의 분포영역을 정하는 상수, R, R_0 는 좌표값)을 지닌 초기 등간격 격자망에 앞서 2장에서 구하여진 Solution Adaptive Grid 방법을 적용하여 계산된 결과가 그림 3에 나타나 있다. (a)는 격자망이 만족할 성질중 완만성과 격자간격 조절만을 고려한 경우이고 (b)는 (a)가 고려한 성질에 격자간의 직교성을 함께 고려하여 계산된 결과이다.

이 그림에서 알 수 있듯이 가중함수가 큰 환형모양의 띠를 중심으로 매우 조밀한 격자점이 밀집되어 있으며 (b)의 그림의 경우 (a)의



(a) 격자간의 완만성, 격자간격 조절을 고려한 경우 (b) 격자간의 완만성, 격자간격 조절, 직교성을 고려한 경우

그림 3. 가중함수 $w = (\exp(R-R_0)/k) / (k(1 + \exp(-(R-R_0)/k)^2))$ 인 경우의 격자망의 형성

결과에 비하여 격자간의 직교성을 고려함으로써 격자간의 직교성이 향상된 것을 보여준다.

3.2 2차원 전파충격파와 계단벽면과의 간섭⁷⁾

초음속 총동내의 계단형상의 벽면과 전파충격파의 간섭을 수치모사하기 위하여 유동장에 대하여서는 비점성 압축성 수치해법을 사용하고 격자점 형성은 Solution Adaptive Grid 방법을 사용하여 계산된 결과가 그림 4에 나타나 있다. 여기서 초기 좌표계는 직교 좌표계를 사용하였고 충격파는 인공점성항을 도입하여 계산하였다.

Adaptive Grid 방법에 필요한 가중함수는 무차원 압력구배인

$$w(x, y) = \left| \frac{\nabla P}{P} \right|^2$$

으로 취하였으며, 그림 4에서 (a)는 시간이 0.5인 경우 (b)는 2.0인 경우에서의 계산격자망과 압력차를 보여주고 있다.

충격파를 전후로 급격한 압력변화가 수반되므로 압력불연속면을 따라 계산격자망이 Solution Adaptive Grid 방법에 따라 조밀하게 분포되어 있으며 충격파가 전파함에 따라 격자망도 충격파를 따라 변화하고 있음을 잘 보여주고 있다.

3.3 밀폐연소실내에서의 종류화염전파과정 에로의 적용 예⁸⁾

전파화염면에 대한 Solution Adaptive Grid

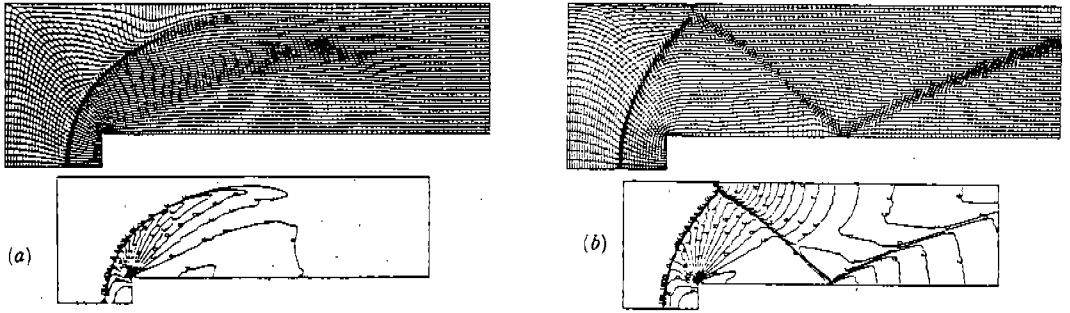


그림 4. 초음속 풍동내의 계단형상의 벽면과 충격파의 간섭에 대한 수치계산 예

기법의 적용도 앞서 예와 마찬가지로 화염면을 수치적으로 감지할 수 있게 적절한 가중함수를 정의하여 계산을 수행하게 된다.

일반적으로 화염면을 전후로 온도 및 농도의 구배가 매우 크게 나타남으로 가중함수는 온도나 농도의 기울기의 크기를 무차원화하여 정의한다.

그림 5는 밀폐연소기내에서의 종류화염전과 과정을 앞서 설명한 Solution Adaptive Grid 기법과 화학반응이 존재하는 압축성 점성 유동방정식을 풀이할 수 있는 Conchas-Spray 프로그램을 사용하여 필자에 의하여 수행된 계산격자망의 시간에 따른 변화를 나타내고 있다.

사용된 연소실은 반경 25mm 높이 80mm의 원통형이며 점화는 상단 20mm 되는 지점에서 수치점화를 시켰다.

그림에서 알 수 있듯이 점화 후 화염면에 해당되는 부분이 시간이 경과함에 따라 점화되고 있음을 격자망의 변화형태를 통하여서도 알 수 있다.

이와 같은 화염면 전파에 관한 Solution Adaptive Grid 기법의 적용은 수치적인 공간분해능 향상이라는 측면과 보다 실제 현상을 적절한 컴퓨터 용량으로 계산할 수 있다는 면에서 현재 많은 연구자들이 관심을 갖고 연구를 진행하고 있다.

4. 맺는 말

화학반응이 존재하는 압축성점성유동이 지배하는 내연기관내의 화염전과과정을 수치해석하는데 있어 여러 수치해석기법의 발달로 인하여 어느정도 수치적 접근이 용이하게 되었

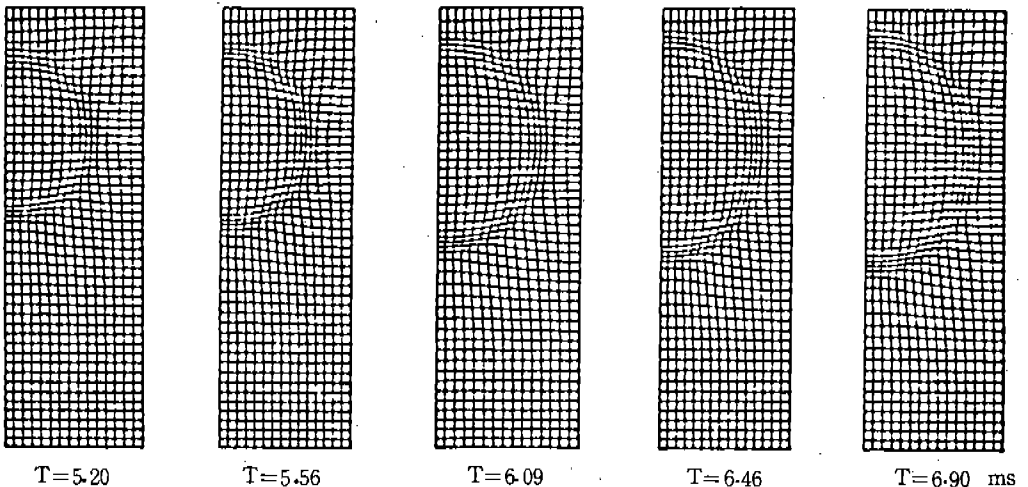


그림 5. 원통형 밀폐용기내의 종류화염전과과정에 적용된 예

으나 화염면과 같은 유동장내의 불연속면의 존재는 수치계산에 있어 또 다른 수치적 장애요인이 되어 왔다.

본 필자의 견해로는 이러한 불연속면의 궁극적인 수치적 처리방안은 Solution Adaptive Grid 방법의 도입이라고 사료되며 그런 관점에서 본 해설에서는 Solution Adaptive Grid 방법 중에서 가장 수학적인 논리의 뒷받침을 받고 있는 변분법을 이용한 Solution Adaptive Grid 방법을 개략적으로나마 소개하고자 하였으며 이 글이 이 분야에 관심있는 여러 연구자에게 조금이나마 도움이 되었으면 한다.

참 고 문 헌

1. F.V. Bracco and P.J. O'Rourke, "A Review of Initial Comparisons of Computed and Measured Two-Dimensional Unsteady Flow Fields," *Progress in Energy and Combustion Science* 7, 103-124 (1981).
2. T.D. Butler, L.D. Cloutman, J.K. Dukowicz and J.D. Ramshaw, "Multidimensional Numerical Simulation of Reactive Flow in Internal Combustion Engines," *Progress in Energy and Combustion Science* 7, 293-315 (1981).
3. J.U. Blackbill and J.S. Saltzman, "Adaptive Zoning for Singular Problems in Two Dimensions," *Journal of Computational Physics* 46, 342-368 (1982).
4. H.A. Dwyer and B.R. Sanders, "Ignition and Flame Propagation Studies with Adaptive Numerical Grids," *Combustion and Flame* 52, 11-23 (1983).
5. P.A. Gnoffo, "A Finite-Volume, Adaptive Grid Algorithm Applied to Planetary Entry Flowfields," *AIAA Journal* 21, No. 9, 1249-1254 (1983).
6. J.F. Thompson, F.C. Thames, and C.W. Mastin, "Automatic Numerical Generation of Body-Fitted Curvilinear Coordinate System for Flow Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies," *Journal of Computational Physics* 15, 299-319 (1974).
7. J. Salzman, "A Variational Method for Generating Multidimensional Grids," Thesis, New York University, October 1981.
8. 황상순, "밀폐연소실내의 증류화염전과 과정에 대한 수치해석 및 실험적 연구", 박사학위논문, 서울대학교, 1988.
9. L.D. Cloutman, J.K. Dukowicz, J.D. Ramshaw, A.A. Amsden, "CONCHAS-SPRAY; A Computer Code for Reactive Flows with Fuel Sprays," Los Alamos National Laboratory, LA-9294-MS, 1982.