

연소실 현상의 3차원 수치 해법에 대한 소개

Introduction to 3-D Numerical Solution Procedures for IC Engine Combustion Chambers

허 강 열*
Kang Yul Huh

1. 서 언

가솔린 및 디젤기관의 무차원 열역학적 분석은 1960년대 이후 실험에 대한 보완적 방법으로서 산업체 등에서 새로운 엔진의 개발과 성능 개선에 광범위하게 적용되어 왔다.

1970년대와 80년대에는 고밀도 IC chip의 개발에 따른 계산 능력의 비약적 상승과 전산유체 역학의 발전과 함께 다차원 공간에서의 수치 해법을 이들 기관에 적용함으로써 연소실 현상에 대한 정확한 이해와 design 등에 직접 기여하게 되었다. 일반적으로 질량, 운동량, 에너지의 다차원 보존식은 무차원 해석에서 결여되어 있는 공간상에서의 분포를 고려함으로써 보다 정확한 정량적 해석이 가능하지만 이에 는 질량, 운동량 및 열전달 계수 등을 구하기 위한 실험식이나 상태 방정식과 같은 변수들간의 상관관계와 초기조건 및 경계조건이 정확히 주어져야 한다는 가정이 내포되어 있다. 현재 이와 같은 연소실에 대한 다차원 computer code의 개발은 미국 Los Alamos National Lab의 T-3 group과 영국 Imperial College의 A. D. Gosman group이 대표적인 곳으로서 미, 일, 유럽 등지에서 실제 적용 사례들이 계속 발표되고 있다. 최근 들어 국내에서도 내연기관 연구 개발에서의 다

차원 수치 해법에 대한 관심이 고조되고 있으므로 관련 수치 해법 및 물리적 모델들에 대한 개괄적 소개와 최근 동향 및 적용 사례들을 소개하고자 한다.

2. 수치 해법

현재 적용되는 수치 해법은 크게 FVM(Finite Volume Method)과 FEM(Finite Element Method)로 구분되며 대체로 내연기관 관련 연구에서는 FVM을 중심으로 연구노력이 진행되었고, 최근 발표되는 논문들도 대부분 FVM에 의한 것들이다. FEM은 FVM에 비하여 복잡한 형상에 대한 계산 격자의 생성이 용이하여 이에 대한 관심이 증대되고 있으나 앞으로 소개될 내용은 FVM에 국한된다.

2.1 계산 격자(grid)

FVM의 계산 격자는 그림 1에 표시된 바와 같은 mapped mesh와 unmapped(or unstructured) mesh가 있다. Mapped mesh는 모든 격자점들을 (i, j, k) -index 형태로 나타낼 수 있으나 unmapped mesh는 격자 배열의 불규칙성으로 인해 모든 격자점을 하나의 index로써 차례로 나타내야 하므로 각 격자점에 대해 이웃하는 격자점들의 index와 경계 조건

* 정회원, 포항공대 기계공학과

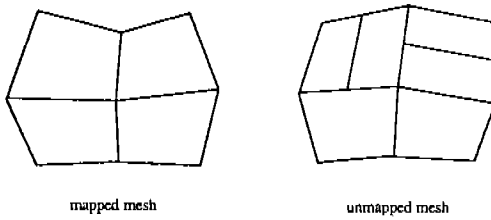


그림 1 Mapped mesh와 unmapped mesh

들을 추가로 지정해 줄 필요가 있다. Unmapped mesh는 FEM과 같이 복잡한 형상을 효율적으로 처리하기가 용이하여 Imperial College에서 개발된 SPEED의 최근 version이나 Los Alamos National Lab에서 개발 중인 KIVA-3 등에서 이와같은 unmapped mesh의 개념이 구체적으로 시도되고 있다.

Mapped mesh는 다시 격자의 모양에 따라 직교 격자와 비직교 격자로 구분되며, 직교격자에서는 계산영역의 전체적 모양이 복잡할 경우 격자 생성을 위한 별도의 계산이 선행되어야 한다. 비직교 격자는 기하학적 적응력이 우수하므로 직교 격자보다는 격자 생성이 용이하지만, 교차각이 90도보다 너무 크거나 작을 경우 오차가 커지게 된다. 계산 영역이 직육면체나 원통형의 조합인 경우에는 직교 좌표계나 원통형 좌표계를 사용함으로써 직교격자 생성에 별도의 계산이 필요없다.

연소실 경계의 일부를 형성하는 피스톤은 moving boundary이므로 이에 따라 격자의 모양과 위치를 변화시켜 주는 방식을 채택하고 있으며 축 방향에 대해서는 유체의 속도와 격자 자체의 속도의 차에 대한 운동량 보존식을 풀게 된다. 축 방향의 격자 수가 일정할 경우 상사점 근처에서는 격자 간격이 너무 작아짐으로써 계산의 안정성을 저해할 가능성이 있으므로, 피스톤의 상하 운동에 따라 적절한 위치에서 계속적으로 격자를 생성 또는 소멸시키는 방법이 사용된다.

2. 2 차분법 (discretization)

질량, 운동량, 에너지 보존식에 대한 수치해를 구하기 위해서는 연속 영역(continuum domain)에서의 편미분 방정식을 유한 차분의 형태로 나타내어 모든 계산 격자점에서의 연

립해를 구한다. 시간 영역에 대해서는 explicit과 implicit scheme이 있으며 explicit scheme이 매 time step당 요구되는 계산량이 적을 때 비해 안전성을 유지하기 위해 time step이 최소 격자 간격과 압력파의 전달속도의 비에 의해 제한된다. Implicit scheme에서는 time step당 요구되는 계산량은 많지만 time step을 크게 잡을 수 있으므로, 주어진 문제에 대한 전체 계산시간은 총격과 등을 포함하는 특별한 경우외에는 대부분 implicit scheme이 더 유리한 것으로 판단된다. 따라서 KIVA-1¹⁾의 explicit scheme이 KIVA-2²⁾에서는 전체적 계산 효율을 증대시키기 위해 implicit scheme으로 대체되었다. 실제로 KIVA-2에서는 explicit scheme과 implicit scheme의 weighted 형태로 pressure gradient 항과 각 보존식의 확산항을 계산하며 weighting factor는 적절한 경험식에 의해 계산된다. 또한 Imperial College 계열의 TEACH, PHOENIX, MICE, EPISO, SPEED 등의 Code들 모두가 implicit scheme으로 되어 있으며, 최근에 개발된 EPISO, SPEED에서는 SIMPLE algorithm에서의 압력과 속도 분포 계산간의 outer iteration 수를 줄이기 위해 predictor-corrector 형태의 PISO (Pressure Implicit Splitting Operators) algorithm³⁾이 활용되고 있다. PISO algorithm의 기본개념은 매 time step에서 1회의 predictor 단계와 2회의 corrector 단계에 의한 해가 완전히 수렴된 해는 아니지만 불완전 수렴에 의한 오차가 다음 time step으로 진행하면서 발산하지 않고 계속 감소하도록 함으로써 안정성을 유지할 수 있는데 있다.

공간 영역에서의 유한 차분은 기본적으로 원하는 지점에서의 값이 정의되지 않은 경우, 그 값이 정의되는 인접한 격자점들로부터의 interpolation에 의해 구한다. 확산항(diffusion term)은 일반적으로 central differencing에 의해 나타나고 대류항(convective term)은 계산의 안정성과 수치확산에 의한 오차를 고려하여 donor cell, central differencing, partial donor cell, second order upwind differencing 등의 여러가지 방법들이 사용되고 있다. 다차원 대류항의 속도 방향과 격자의 배열 방향이

일치하지 않을 때에는 유한 차분에 의한 오차가 일반적으로 추가의 확산형태로 나타나므로 이를 줄이기 위해 이와 같은 방법들이 사용되나 아직 만족할만한 해결책이 나오지 않고 있다. Imperial College 계열의 코드들은 확산항과 대류항을 동시에 Eulerian 형태로 풀지만 KIVA에서는 ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian)⁴⁾ 방법에 따라 확산항(diffusion term)은 일반적인 fully implicit Eulerian 방식으로 처리되며 대류항은 계산의 안정성을 유지하기 위한 subcycled time step에 의해 Lagrangian 방식으로 explicit하게 풀어 나간다.

2.3 Algorithm

그림 2,3,4에 KIVA-1, KIVA-2와 EPISO-SPRAY⁵⁾의 algorithm 비교를 위해 주요한 부분의 유통도를 나타냈다. KIVA-1은 explicit scheme 이므로 KIVA-2에서와 같은 iteration loop이 필요없으나 허용 time step의 크기가 압력파의 전파 속도에 의해 결정되므로 관심의 대상이 되는 time scale에 비해 time step이 매우 작아지는 결점이 있다. KIVA-2에서는 SIMPLE algorithm과 같은 방식으로 압력과 속도분포간의 반복계산에 의해 pressure gradient 항을 implicit하게 처리하여 주므로 계산결과와 정확도에 영향을 주지 않는 범위내에서는 time step을 충분히 크게 잡을 수 있다. 또한 에너지 보존식과의 결합이 밀접하기 때문에 outer iteration loop내에서 에너지 보존식을 계속 풀고 있음을 알 수 있다.

EPISO-SPRAY도 KIVA-2와 유사한 fully implicit scheme 이지만 iteration loop을 질량과 운동량 보존식에 대한 1회의 predictor step과 2회의 corrector step으로 대체하는 PISO algorithm을 쓰고 있다. KIVA-2를 개발한 Los Alamos National Lab의 유체그룹 연구자들은 이와 같은 algorithm의 안정성에 대해 회의적인 견해²⁾를 나타내고 있으나, A. D. Gosman 그룹의 계산결과들에 의하면 급격한 과도상태나 연소 등을 제외한 대부분의 경우에서 좋은 결과를 보여주고 있다.

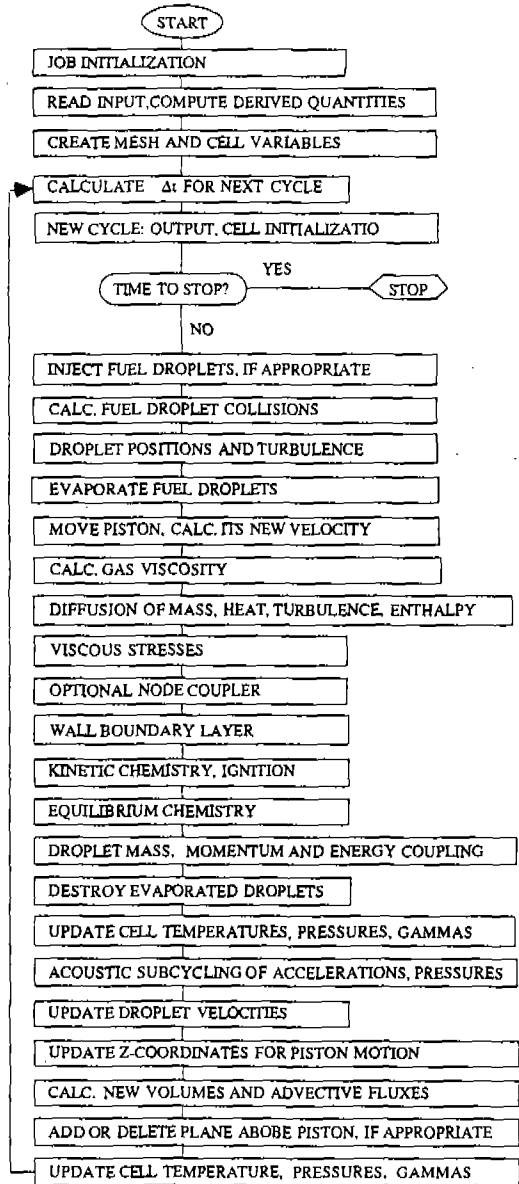


그림 2 KIVA-1의 flow chart

2.4 Matrix inversion

Implicit scheme에서는 일반적으로 모든 계산 격자점에 대한 관계식을 연립시킨 matrix 방정식의 해를 구하여야 하며, Gauss elimination에 의한 direct inversion보다는 Gauss-Seidel, PSOR (Point Successive Overrelaxation), LSOR (Line Successive Overrelaxation)

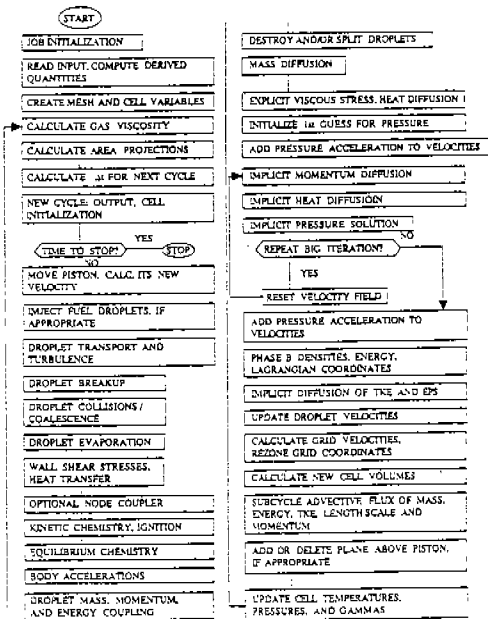


그림 3 KIVA-2의 flow chart

ation), SSIP (Stone's Strongly Implicit), CG (Conjugate Gradient) 등의 반복 계산법이 더 효율적이다. FVM에서의 iteration matrix는 banded structure와 diagonal dominance 등의 특성을 지니며 모든 특성치 (eigenvalue)의 절대값이 1보다 작아야 수렴하고, 해의 수렴 속도는 특성치의 최대 절대값에 의해 결정된다. 일반적인 matrix 방정식의 해를 구하는 방법은 IMSL 등에 잘 정리되어 있으나 최근 전산 유체 코드에서는 FVM에서의 matrix 특성을 활용한 SSIP와 CG법이 많이 쓰인다. SSIP법은 banded matrix에 활용 가능하고 SOR에 비해 diagonal dominance의 영향을 적게 받으며 CG법은 임의의 sparse matrix에 적용될 수 있고 diagonal dominance의 영향을 받지 않는다. KIVA-2에서는 매 iteration step에서의 압력 분포를 CG에 의해 계산하고 있으며, EPISO와 SPEED에서는 predictor step에서는 SSIP를, corrector step에서는 CG를 사용하고 있다.

3. 물리적 모델

3.1 유 동 장

유동장을 결정하는 가장 중요한 요인은 난류 모델로서 turbulence kinetic energy 등의 수송 방정식에 의한 FFM(Full Field Modeling)법과 주어진 계산 격자 간격보다 작은 length scale의 난류 성분은 방향성이 없는 보편적 난류 모델로서 처리하고, 계산 격자보다 큰 length scale의 성분만을 직접 계산하는 LES(Large Eddy Simulation)법이 있다. 전자의 대표적 예로 two-equation k-e 모델이 있으며 후자의 예로서는 LES와 FEM의 절충 형태인 subgrid scale model이 내연기관의 난류 유동 계산에 사용되고 있다.⁶⁾ KIVA-2에서는 두가지 모델을 임의로 선택할 수 있으나 Imperial College 계열의 코드들에서는 k-e 모델만이 사용되고 있다. LES법은 난류성분을 직접 계산함으로써 k-e에서의 turbulent viscosity와 같은 임의의 모델이나 상수를 배제할 수 있으나 과도한 계산시간 등으로 인해 공학적 계산에 활용하기에는 아직 어려움이 있다.

왕복동 기관의 반복 작동(cyclic operation)에서는 난류성분 자체에 대한 일관된 정의를 내리기가 어려우며 각 cycle에서의 연소실 압력 변화나 순간 속도를 비교해 보면 cycle 간의 변화가 크기 때문에 엄밀한 의미에서 cyclic operation으로 보기가 어렵다. 난류 성분을 정의하는 가장 간단한 방법으로서 ensemble average를 취할 경우에는 통계적 편차에 순수한 난류 성분과 평균 속도 성분의 cyclic variation이 포함되며, time average를 취할 경우에는 average를 취하는 time window 크기 등에 따라 두배까지 차이가 나기도 한다. 따라서 난류 유동에 대한 계산 결과를 임의의 실험에 의한 측정치와 비교할 때에는 이와 같은 점들에 유의해야 한다. 벽에서의 경계조건으로서 wall shear stress를 결정하기 위해서는 경계층 내에서의 속도 분포를 알아야 하며 이를 직접 계산하기 위해서는 많은 수의 계산 격자가 필요

하게 되므로, 이를 피하기 위해 경계층 내의 속도 분포를 logarithmic 함수로 대체하는 wall function method⁷⁾가 널리 쓰인다.

KIVA에서는 흡기 valve flow에 대한 직접적인 계산을 할 수가 없으므로 이에 대한 보완책으로서 swirl ratio를 주고 시간에 따른 평균 속도와 난류의 변화를 계산할 수 있도록 되어 있다. High swirl일 경우에는 난류 level이 주로 swirl ratio에 의한 평균 속도에 의해 결정되므로 초기조건으로서는 주어지는 난류 level은 별 의미가 없음을 유의해야 한다.

3.2 Spray^{2),6)}

Stochastic Lagrangian 방법에 의해 spray drop 들은 수백에서 수천개 정도의 그룹으로 나누고 각각의 그룹을 대표하는 위치, 속도, 크기, 온도 등을 정의하여 각 그룹의 변화를 계산상으로 추적해 나간다. 전체 그룹의 갯수가 충분히 클 경우에는 spray 도달 거리 등의 spray 전체 특성에 대한 statistical fluctuation은 거의 무시될 수 있다. 기체 유동과의 상호 작용은 질량, 운동량, 에너지 전달율에 대한 실험식들에 의해 나타내지며 breakup, collision/coalescence, turbulent eddy에 의한 dispersion 등에 대한 모델을 포함하여 가능한 spray 특성에 대한 인위적인 변수의 개입을 피하고자 한다.

Spray angle, drop 크기에 대한 분포 함수와 Sauter mean radius, injection rate 등의 spray 특성과 매 time step당 쏘아지는 spray 그룹의 갯수가 결정되면 [0, 1] 범위 내에서 random number를 결정하여 각 그룹의 속도, 방향, 크기(drop 직경)를 결정한다. 시간에 따른 위치와 속도변화는 초기속도, 위치와 주변 기체와의 drag force에 의해 결정된다. Drop 크기의 변화는 연료/기체 상호간의 질량 전달과 breakup, collision/coalescence에 의해 결정된다. 임의의 spray에서의 축 방향 분포를 보면 노즐 근처에서는 breakup에 의해 drop의 크기가 급격히 줄어들지만, breakup과 collision/coalescence가 평형을 이루는 점을 지나면 후자에 의해 drop 크기가 완만히 증가하

거나 평형을 유지하게 된다.

현재 Spray 모델의 문제점으로 지적되는 것으로는 연료 노즐의 종류나 출구에서의 유동 형태가 spray에 미치는 영향과 spray/wall 상호 작용과 연소, 열전달에 대한 모델의 결여를 들 수 있다.

3.3 연 소

연소 모델은 가솔린 기관에서의 기혼합 연소(premixed charge combustion)와 디젤 기관에서의 확산 연소(diffusion combustion)로 구분된다. 일반적으로 기혼합 연소의 연소 영역은 turbulent Reynolds number와 Damkohler number에 따라 distributed reaction과 reaction sheet 영역으로 분류된다. 가솔린 기관에서는 대체로 reaction sheet 영역에 속하는 것으로 판단되나 고속 운전 등의 조건에서는 distributed reaction이 일어날 수 있으며 이들의 화염 구조에 대한 연구가 진행되고 있다.⁸⁾ 스파크에 의한 ignition은 spark gap주위에 적절한 양의 에너지를 더해 줌으로써 모사하며, 에너지의 양, 시간, 격자의 갯수 등에 대해서는 아직 적절한 모델이 없다. 디젤 기관에서는 연료 spray와 공기의 상호 확산에 의해 연소 속도가 결정되며 착화 지연(ignition delay)을 결정하는 autoignition 현상은 active radical의 농도 변화에 대한 Shell model 등에 의해 나타낼 수 있다.

KIVA에서는 global net reaction의 시간정수(time constant)에 따라, 반응이 빨리 진행되어 항상 평형 상태를 유지할 경우에는 평형 모델(equilibrium model)을 쓰고, 반응이 비교적 느리게 진행되어 주어진 time step으로 반응 진행 과정의 후적이 가능할 경우에는 Arrhenius 형태의 비평형 모델(kinetic model)을 쓰도록 되어 있다. 평형 모델에서의 평형 상수나 Arrhenius식의 activation energy, preexponential factor 등은 사용자가 input으로 주도록 되어 있으며 반응의 종류와 갯수도 임의로 결정할 수 있다. 흔히 연료로 쓰이는 탄화수소에 대해서는 발열량 등의 연소에 필요한 특성들이 코드내에 내장되어 있다. 실제

가솔린 및 디젤 기관에서의 연소 계산을 위해 서는 난류의 영향을 고려할 수 있는 모델과 그 에 대한 input 이 추가로 필요하게 되며 많이 쓰이는 예로서 local equilibrium model⁹⁾, eddy breakup model¹⁰⁾, eddy dissipation model¹¹⁾ 등이 있다.

3.4 열 전달

Cylinder head, liner, piston crown 등과 작동 유체와의 열전달은 wall shear stress 계산과 마찬가지로 경계층에서의 온도분포를 logarithmic 함수로 가정하는 wall function method가 사용된다. 그러나 연소실 작동유체는 비정상 상태의 압축성 기체이기 때문에 경계층의 압축/팽창, 일(work)에 의한 에너지 전달, 경계층에서의 난류, 열전달, 연소의 상관관계, 비정상 상태에서의 temperature profile adjustment time 등을 고려한 새로운 형태의 wall function method가 연구되고 있다.¹²⁾ 연소실에서의 경계층(1mm정도)이 차지하는 체적비는 그리 크지 않으나, 열전달에 의한 냉각효과로 밀도가 평균치보다 크게 되

Table 1 Cummins-NH DI diesel engine specifications

Shallow Mexican hat bowl	
Bore (mm)	139.7
Stroke (mm)	152.4
Conn Rod (mm)	305.0
Displacement (cc)	233
Fuel injection	
Number of orifice	8
Orifice diameter (mm)	0.2
Spray angle from head (deg)	18
Intake valve closes	147 deg BTDC
Exhaust valve opens	134 deg ATDC

Table 2 Ricardo Comet type prechamber IDI diesel engine specifications

Bore (mm)	83
Stroke (mm)	88
Compression ratio	23:1
Prechamber volume/clearance volume	0.43
Engine speed (rpm)	1500
Fuel injected mass	0.024g/cycle
Injection timing	5 deg. BTDC
Injection duration	20 deg.

므로 상사점 근처에서 경계층에 포함된 연료/ 공기 혼합기의 양과 이들의 연소 과정은 전체 연소에 상당한 영향을 미친다.

4. 실제 적용 사례

4.1 Cummins-NH direct injection Diesel engine¹³⁾

다음은 Table 1에 나타난 직접 분사 디젤 엔진에 대해 KIVA-2를 적용하여 흡기 밸브가 닫힌 후 연소 진행 과정을 모사한 것이다. 상사점에 도달하기 전에 spray 끝 부분에서 연소가 일어나기 시작하여 연료 부분과 공기 부분이 만나는 영역에서 상호 확산에 의해 연소가 유지된다. 상사점을 지난 후에는 고온도 영역이 연소실 전체로 퍼지는 것을 볼 수 있다.

4.2 Indirect injection Diesel engine¹⁴⁾

다음은 P. Pinchon에 의한 Ricardo COM-ET type prechamber 간접 분사식 디젤 엔진의 모사이며, KIVA를 사용하였으나 계산 격자 형성 부분에 상당한 개조를 가한 것으로 보여진다. 상이한 연소실 형태에 대한 계산을 수행함으로써 피스톤 형상과 예열 plug가 유동장 및 연소에 미치는 영향을 분석하였다.

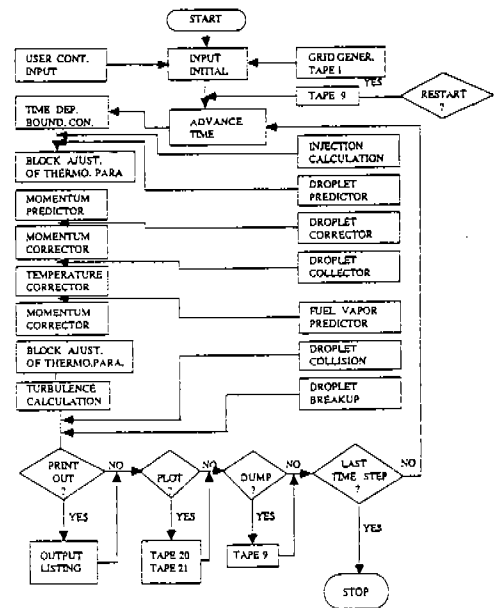
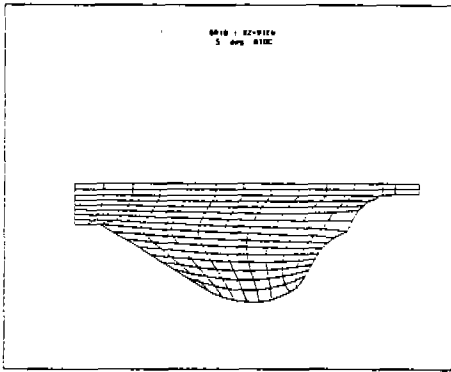
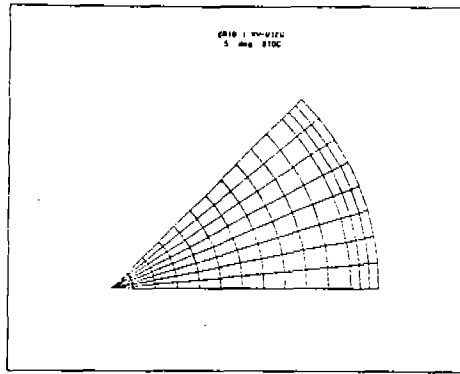


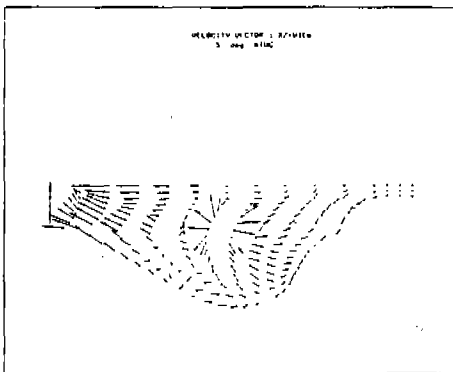
그림 4 EPISO-SPRAY의 flow chart



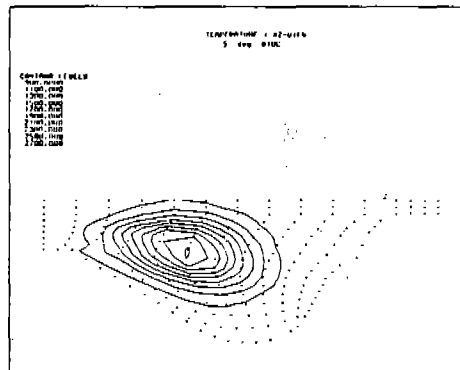
Computational grid of Cummins
-NH Diesel engine on the xy-plane
at 5 degrees before TDC



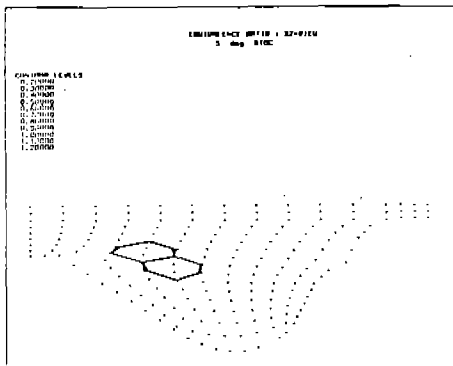
Computational grid of Cummins
-NH Diesel engine on the xz-plane
at 5 degrees before TDC



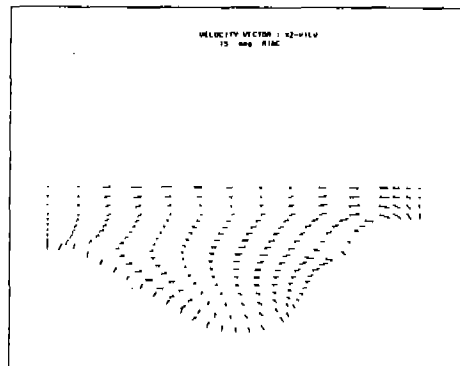
Velocity vector on the xz-plane
at 5 degrees before TDC



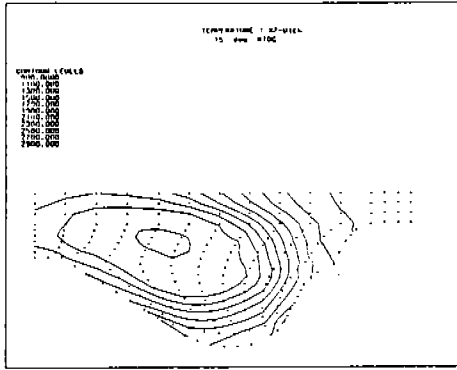
Temperature contour on the xz-
plane at 5 degrees before TDC



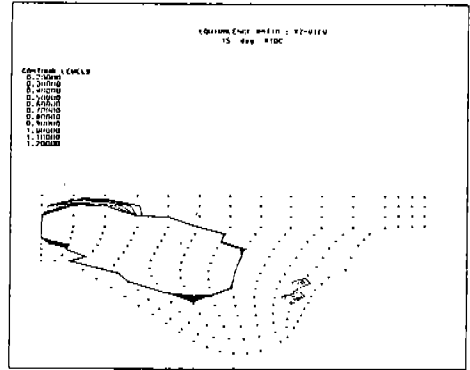
Equivalence ratio contour on the
xz-plane at 5 degrees before TDC



Velocity vector on the xz-plane
at 15 degrees after TDC

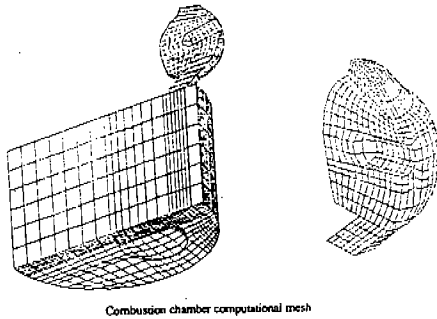


Temperature contour on the xz-plane at 15 degrees after TDC

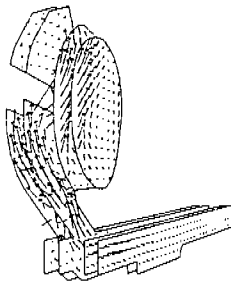


Equivalence ratio contour on the xz-plane at 15 degrees after TDC

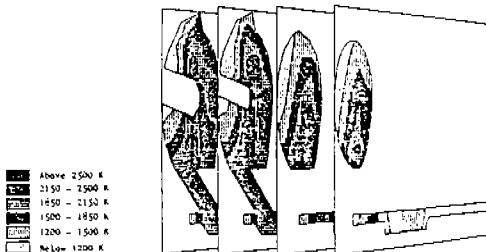
그림 5 KIVA-2에 의한 DI diesel engine의 3차원 모사



Combustion chamber computational mesh



Three dimensional representation of the flow field, in configuration A-20 deg. BTDC (of a half chamber)



Three dimensional representation of isotherms using arbitrary section planes. Configuration A-5 deg. ATDC

그림 6 KIVA에 의한 IDI diesel engine의 3차원 모사

참 고 문 헌

1. Amsden, A.A., Ramshaw, J.D., O'Rourke, P.J. and Dukowicz, J.K., "KIVA: A computer program for two- and three-dimensional fluid flows with chemical reactions and fuel sprays," Los Alamos National Laboratory report LA-10245-MS (Feb. 1985).
2. Amsden, A.A., O'Rourke, P.J., Butler, T.D., "KIVA-2: A computer program for chemically reactive flows with sprays," Los Alamos National Laboratory report LA-11560-MS (May 1989).
3. Issa, R.I., "Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by Operator-Splitting," J. Comp. Phys. 62, 40-65 (1985).
4. Hirt, C.W., Amsden A.A. and Cook, J.L., "An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds," J. Comp. Phys. 14,227-253 (1974).
5. Gosman, A.D., Huh, K.Y., Tabrizi, B.S. and Zhang, Q., "The EPISO-SPRAY computer code for prediction of fuel spray and air motion in motored internal combustion engines," Manual for EPISO-SPRAY Code (Dec. 1987).

6. Heywood, J.B., *Internal combustion engine fundamentals*, McGraw-Hill, Inc., 1988.
7. Launder B.E. and Spalding D.B., *Mathematical models of turbulence*, Academic Press, New York, 1972.
8. Abraham J., Williams F.A. and Bracco, F.V., "A discussion of turbulent flame structure in premixed charges," SAE 850345.
9. Abraham J., Bracco F.V. and Reitz, R.D., "Comparisons of computed and measured premixed charge engine combustion," *Combustion and Flame* 60, 309-322, 1985.
10. Spalding, D.B., "Development of the eddy breakup model of turbulent combustion," 16th International Symposium on Combustion, 1976.
11. Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H., "On mathematical modelling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion," 16th International Symposium on Combustion, 1976.
12. Huh, K.Y., Chang, I-P. and Martin, J.K., "A comparison of boundary layer treatments for heat transfer in IC engines," SAE 900252.
13. Huh, K.Y. and Borman G., "Multidimensional homogeneous charge compression ignition and direct injection diesel engine, to be submitted SAE 92.
14. Pinchon, P., "Three dimensional modeling of combustion in a prechamber diesel engine," SAE 890666.