

## 도데케인 연료액적의 초임계 상태 기화 특성

고정빈\*, 이관형\*, 구자예\*\*, 전창수\*\*, 문희장\*\*  
J.B.Ko, K.H.Lee, J.Y.Koo, C.S.Jeon, H.J. Moon

### Vaporization Characteristics of Dodecane Fuel Droplet in Supercritical Condition

#### Abstract

Characteristics of droplet vaporization at high ambient pressures and temperatures which are supercritical conditions is studied numerically by formulating one dimensional vaporization model in liquid dodecane and air. Modified Soave-Redlich-Kwong state equation is used to consider real gas effect. Non-ideal behavior of properties at near critical and supercritical conditions is considered in the high pressure condition. Characteristic spatial distribution of properties with various conditions of pressure and temperature is evaluated in order to understand vaporizing evolution.

주요기술용어 : droplet vaporization(액적 기화), real gas effects (실기체 효과)  
droplet lifetime(액적 수명), liquid dodecane(액체 도데케인)

#### 1. 서론

디젤 엔진에서 연료 액적의 기화 및 연소는 엔진의 효율과 성능에 큰 영향을 미치게 된다. 대부분의 고성능 연소 시스템에서는 연료 액적의 임계점 이상에서 작동이 되고 있다. 연료 액적이

임계온도와 임계 압력을 넘어선 초임계 상태에 놓이게 되면 액적의 표면장력은 없어지고, 기화 잠열이 아주 작아지게 되고, 기화에 관련된 여러 물성치들이 변하여 통상의 압력 및 온도에서의 기화와는 전혀 다른 특성을 나타내게 되며, 액적의 연소율은 기화율에 전적으로 영향을 받게된다.

정상상태 기화를 해석하는데 액적내부의 온도가 일정하고, 초기 가열기간을 무시한 준정상 모델에서 고압에 의

\* 한국항공대학교 대학원

\*\* 한국항공대학교 항공우주및기계공학부

E-mail : jykoo@hau.ac.kr

TEL : (02) 300 - 0116

한 실제기체의 효과를 고려하여 계산을 하였다. 그러나 각 물성치를 상수로 하고, 고압에서의 기체용해도를 무시하였다. 아임계압과 초임계압 모두에서 액적 기화 현상을 해석하였다.

본 연구에서는 각 화학종의 물성치 변화, 고압에 의한 실제기체효과를 고려한 비정상 모델을 사용하여 아임계 및 초임계 조건에서의 도데케인 연료 액적의 기화를 구현하였다. 연료의 임계 온도 및 압력을 고려하여 아임계와 초임계 상태의 현상이 잘 나타나도록 주위 조건을 주었다. 주위 압력 및 온도 변화가 연료 액적의 기화에 어떠한 영향을 미치는지 알아보았다.

## 2. 수치 계산

정지상태의 초임계 기화는 유한체적법을 사용하여 풀었다.

액적을 구형대칭으로 가정하였으므로 1차원으로 격자를 생성하였다. 액상과 기상을 동시에 풀어야 하므로 액상인 연료 액적과 정지한 주위 기체를 따로 분리하여 푼다. 액적 기화의 수치 계산 제어 표면은 중심을 이루고 액적표면에서는 구배가 심하므로 격자 밀도를 조밀하게 생성시킨다.

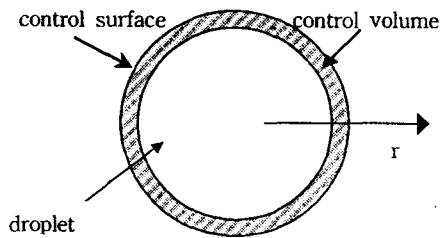


Fig 1. Schematic of Spherical Droplet

액적이 기화하면 액적반경은 시간에 따라 작아진다. 따라서 기화 과정의 전 계산 영역에서 액적표면은 기화와 함께 이동하도록 격자를 구성한다. 함수에 의해 격자 전체가 균일한 비율로 감소를 한다. 이때 최종 격자의 간격이 이전 격자의 간격보다 2배 이상 크면 새로운 격자를 최종격자와 이전격자의 중간에 생성하여 계속 균일한 격자를 만들게 된다. 움직이는 반경은 다음의 공식에 의해 만들어진다.

$$r(\xi, t) = R(t) f(\xi) \quad (1)$$

여기서  $\xi$ 는 반 정수 값이 제어 표면적에 해당하도록 하는 변형 격자 좌표계 값이고,  $r$ 은 위치와 시간에 따라 변하는 제어체적의 반경이고,  $R$ 은 시간에 따라 변하는 액적의 반경이다.  $f(\xi)$ 는 격자의 균일성 유지를 위한 새로운 격자를 생성하기 위해 사용되는 함수이다.

내재적 계산법(implicit scheme)에서 온도, 압력 및 화학포텐셜은 독립변수에 대하여 선형화 되어야 풀 수 있다. 계산에 사용되는 독립변수는 다음과 같다.

$$Q = (\rho V, \rho v_r A, \rho e V, \rho Y_i V, V)^T \quad (2)$$

여기서  $V$ 는 제어체적이고,  $A$ 는 제어 표면적,  $v_r$ 은  $r$  방향속도이다. 여기서 제어체적  $V$ 는 시간에 따라 변하는 이동 경계 문제이므로 변수로 생각한다. 제어체적은 다음 식과 같이 변한다.

$$\frac{d}{dt} \int_{V_a(t)} dV - \int_{A_a(t)} \vec{\omega} \cdot \vec{n} dA = 0 \quad (3)$$

여기서  $\vec{\omega}$ 는 제어표면의 속도이다. 일차원 문제에서 제어체적은 다음 식으로 표시된다.

$$\begin{aligned} V(\xi) &= \frac{4}{3} \pi r^3 \Big|_{\xi+1/2} - \frac{4}{3} \pi r^3 \Big|_{\xi-1/2} \\ &= [f^3(\xi+1/2) - f^3(\xi-1/2)] V_d \end{aligned} \quad (4)$$

윗 식에서 모든 제어 체적은 액적 체적과 연관되어 있으며 기상과 액상의 경계면 경계 조건에 의해 결정된다.

표면 플럭스 계산에서는 제어 표면의 이동속도에 대한 다음 식이 추가로 사용된다

$$\begin{aligned} w_r A_{(at \ \xi+1/2)} &= \frac{dr}{dt} 4\pi r^2 \\ &= \frac{d\left(\frac{4}{3} \pi r^3 \Big|_{(at \ \xi+1/2)}\right)}{dt} \\ &= f^3(\xi+1/2) \frac{dV}{dt} \end{aligned} \quad (5)$$

온도의 독립변수에 대한 선형화 식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} T^{n+1} &= T^n + \left(\frac{dT}{dQ}\right) \Delta Q \\ &= T^n + \left(\frac{dT}{dQ}\right) (Q^{n+1} - Q^n) \end{aligned} \quad (6)$$

압력의 독립변수에 대한 선형화 식은

다음과 같다.

$$\begin{aligned} P^{n+1} &= P^n + \left(\frac{dP}{dQ}\right) \Delta Q \\ &= P^n + \left(\frac{dP}{dQ}\right) (Q^{n+1} - Q^n) \end{aligned} \quad (7)$$

위에서 수행한 선형화 과정을 통해 독립변수들인 Q를 이산화한 식들을 얻을 수 있다.

$$A_i Q_{i-1}^{n+1} + B_i Q_i^{n+1} + C_i Q_{i+1}^{n+1} = D_i^n \quad (8)$$

위 식을 블록 삼중대각행렬을 사용하여 계산한다.

### 3. 결과 및 고찰

해석에 사용된 도데케인 연료액적은 주위를 공기라 가정하였고 공기의 성분은 질소와 산소로 구성되어 있다고 가정하였다. 계산은 연료 액적의 초기 직경을 0.15 mm, 액적의 초기 온도를 300K로 하고, 주위 온도 및 압력 등의 조건을 변화시켜 가면서 액적의 기화 현상에 대한 액적수명, 기화열, 경계면에서의 화학종의 분포 등의 데이터를 구하였다. 기화는 액적의 체적이 초기 체적의 2.7% 일 때를 충분히 기화된 상태로 멈춤 조건으로 가정하였다. 본 연구에서는 이 때까지의 시간을 액적 수명이라 가정하겠다.

Table 1은 각각 화학종의 임계 물성치이다. 이를 이용하여 임계 온도 압력을 기준으로 초임계와 아임계를 비교하였다.

Table 1. Critical properties of the species in the hydrocarbon/air system

물성치 화학종	$M_w$ (g/mole)	$T_c$ (K)	$P_c$ (MPa)	$V_c$ ( $\text{cm}^3$ / mole)
$C_{12}H_{26}$	170.3	658.0	1.82	754.0
$N_2$	28	126.2	3.39	89.5
$O_2$	32	154.5	5.04	73.4

또한 계산 결과에 의해서 비교하여 보면 열전달이 발생하여 액적의 기화에 영향을 미치게 되고 이러한 열전달 효과는 기준 압력에서 액적의 직경이 작을수록 그리고 주위 온도가 높을수록 크게 작용하였다.[1]

그림 2와 3은 아임계 상태와 초임계 상태의 액적 수명 감소율의 수치결과를 나타낸다. 초기에는 외기의 열을 흡수하는 예열과정으로 반경이 증가하다가 감소하게 되었으며 아임계 상태에서는 압력 변화에 따라 반경 감소율의 시간 변화율이 점차적으로 증가하는 반면, 초임계 상태에서는 압력에 따라 감소하였다.

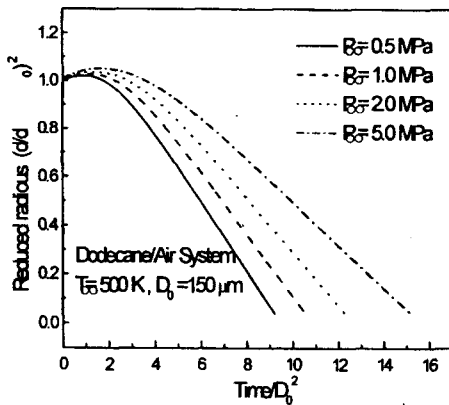


Fig 2. Vaporization of droplet diameters for various pressures at subcritical condition

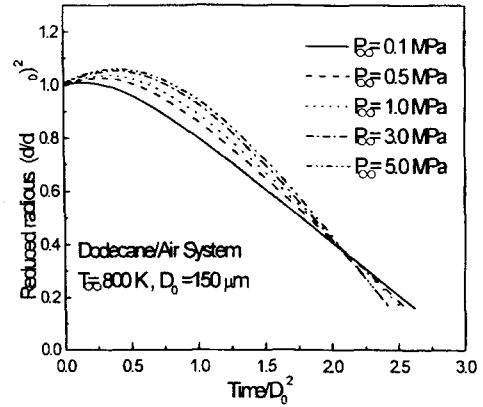


Fig 3. Vaporization of droplet diameters for various pressures at supercritical condition

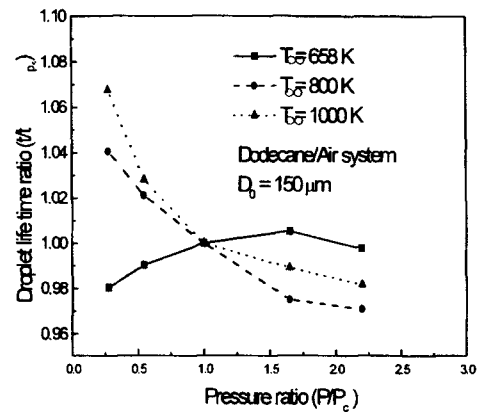


Fig 4. Droplet lifetime ratio versus variation of pressure ratio and temperature

그림 2와 3을 자세히 비교하기 위해서 그림 4는 압력 변화율에 따른 액적 수명 감소율을 나타내었다. 아임계 상태에서는 액적 수명이 증가하다 임계 압력을 지나서는 서서히 감소하였으며 초임계 상태에서는 급격히 감소하다가 임계 압력을 지난 후 감소율이 줄어들었다.

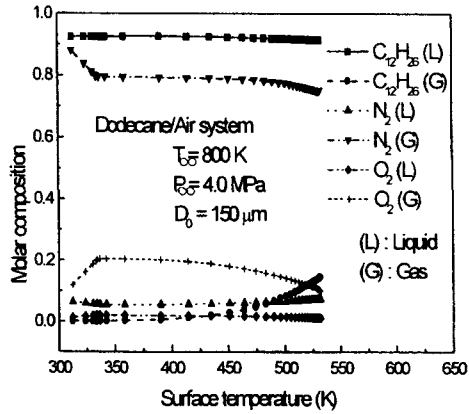


Fig 5. Molar composition versus surface temperature at supercritical condition

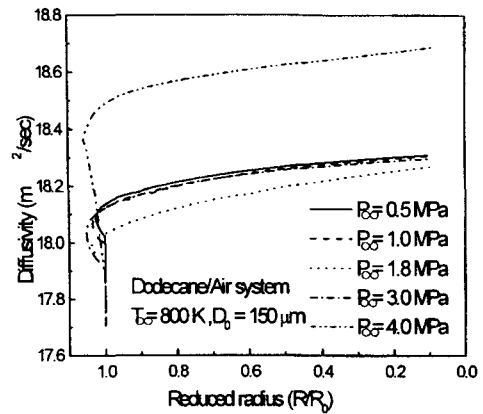


Fig 7. Vaporization diffusivity for various pressures at supercritical condition

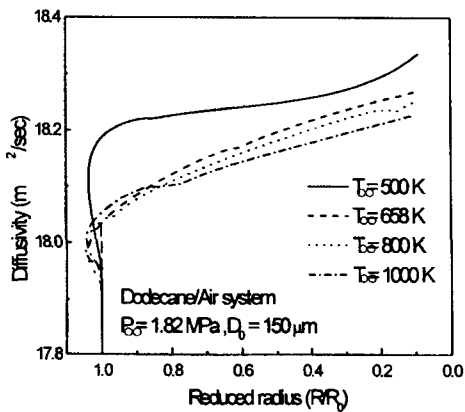


Fig 6. Vaporization diffusivity for various temperatures at critical pressure

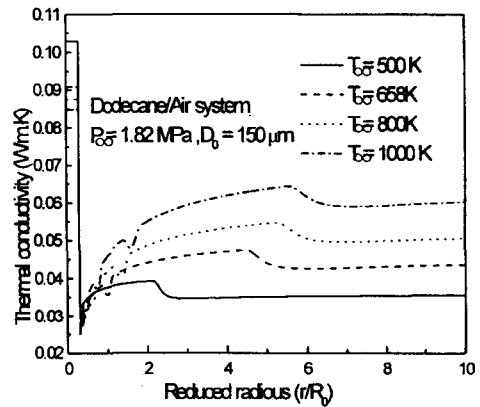


Fig 8. Thermal conductivity of dodecane droplet for various temperatures

그림 5는 각각 화학종의 몰 비율을 나타내었다. 표면 온도가 증가함에 따라 액적의 기상 상태의 비율이 증가하는 것을 볼 수 있다. 즉, 연료 액적의 몰 비율은 온도의 증가와 함께 감소하며 외기와의 상호 열 전달에 의해 기상과 액상의 몰 비율이 변화하는 결과를 나타내었다.

그림 6과 7은 각각 온도 변화와 압력 변화에 의한 확산 계수를 나타내었다. 초임계의 고압상태에서 보존식들을 풀기 위해서는 내부에너지, 엔탈피, 엔트로피, 비열, 화학포텐셜, 온도, 압력 등의 열역학적 물성치를 알아야 한다. 편미분항은 수정 Soave-Redlich-Kwong[2] 식에서 구한다. 온도변화에 의한 기화 확산의 계수를 보면 확산 인

자들의 혼합물의 가임계 상태량들에 대한 다음 결합법칙으로 Takahashi에 의해 수표화[3]되어있어 결과에서 외기 온도에 의한 확산 보다 압력 변화에 의한 확산 속도의 효과가 크다고 할 수 있다.

열전도도는 온도에 의해서 그림8에서 나타나듯이 현저히 증가함을 알 수 있다. 고압에서의 열전도도는 Stiel and Thodos의 식[4]을 사용하였다. 표면에서 외기로 증가하다가 어느 지점에 이르면 더 이상 증가하지 않는다.

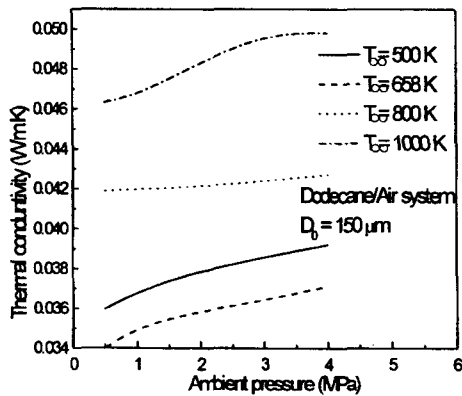


Fig 9. Thermal conductivity for various temperatures at droplet surface

열전도도와 점성을 계산하기 위해서 우선 상압에서의 각 화학종의 계수 값을 구한 후에 혼합기에 대한 값을 계산하고 다음으로 상압에서 구한 값을 고압 효과를 고려하여 수정하는 방법으로 계산을 해야한다. 상압에서의 점성은 Wilke의 공식[5]을 사용하여 계산하였으며 상압에서의 열전도율을 구하기 위해서 Eucken의 식[6]을 사용하였다.

그림 9는 액적의 표면에서 주위 압력

변화에 따라 열 전달 계수의 변화를 나타내었다. 열 전달계수는 아임계일때 임계 온도 및 압력의 경우까지 낮아지다가 초임계 상태가 되면 급증하게 된다. 특히 아임계 상태에서는 거의 선형적으로 증가하지만 초임계 상태가 되면 열 전달 계수의 변화는 임계 압력을 지나며 급증하는 것을 알 수 있다.

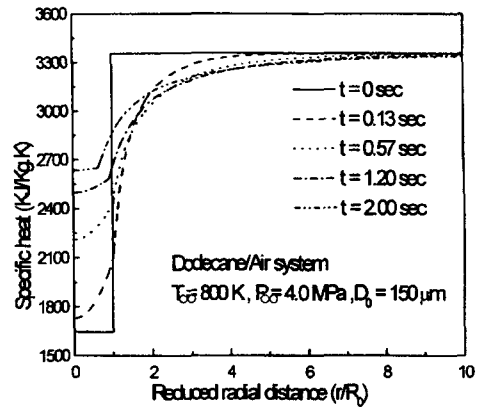


Fig 10. Variation of specific heat versus reduced radius with time at supercritical condition

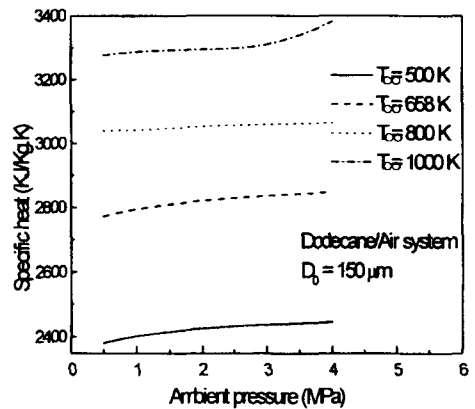


Fig 11. Variation of specific heat versus pressure and temperature at droplet surface

그림 10과 11은 비열에 관하여 시간에 따라 반경 방향의 변화와 액적 표면에서 온도에 의한 변화를 나타내었다. 시간이 지남에 따라 액적 내부로 온도가 침투하여 액적 내의 비열의 변화를 일으킨다. 액적 중심부의 비열의 변화가 큰 것으로 보아 내부 온도의 변화가 크다는 것을 알 수 있으며 온도가 점차 증가하여 외기의 비열과 같아지는 것을 알 수 있다. 정상 상태에서 표면에서의 변화를 보면 비열의 압력에 의한 변화보다는 온도에 의한 변화가 크다는 것을 알 수 있다. 그러나 임계 온도 이후의 변화는 그 이전 보다 작다는 것을 결과를 통해 알 수 있다.

#### 4. 결론

아임계 및 초임계 조건에서의 압력, 온도 변화에 대한 기화 현상을 수치해석 하였고 두 영역에서 모두 약간의 오차는 있지만 도데케인 연료 액적의 기화 특성을 예측하였다.

1. 아임계 온도에서는 압력이 높을수록 액적수명이 길어지며 반대로 초임계 온도에서는 압력이 높을수록 액적수명이 짧아진다.
2. 초임계 온도에서 기화 확산 계수는 압력이 높을수록 증가한다.
3. 열전도도와 비열은 임계압력보다 큰 압력에서, 온도에 비례하여 증가한다.

#### 후 기

본 연구는 2003년도 한국항공대학교 교비 특별연구비 지원으로 수행된 연구 결과의 일부이며, 지원에 감사드립니다.

. . . . .

- (1) Morin. C., Chauveau. C. and Gökalp. I., "Vaporization of n-Alkane Droplets at High Temperature and Pressure" ,Eighth International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Pasadena, CA, USA, 2000
- (2) Graboski, M. S. and Daubert, T. E., "A Modified Soave Equation Of State for Phase Equilibrium Calculation", 1. Hydrocarbon Systems, Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, 17(4), 443-448 , 1978
- (3) Polling, B. E., Prausnitz, J. M. and O'Connell, J. P., "The Properties of Gases and Liquids", 5th edition, MacGraw-Hill, pp. 11.15 , 2001
- (4) Polling, B. E., Prausnitz, J. M. and O'Connell, J. P., "The Properties of Gases and Liquids", 5th edition, MacGraw-Hill, pp. 10.35, 2001
- (5) Perry. R. H. and Chilton. C. H. "Chemical Engineers' Handbook". Mac Graw Hill, New York, fifth edition, 1973
- (6) Polling, B. E., Prausnitz, J. M. and O'Connell, J. P., "The Properties of Gases and Liquids", 5th edition, MacGraw-Hill, pp. 10.3, 2001