

고온 고압 유동장에서 헵탄 액적의 기화 특성

Characteristics of Heptane Droplet Vaporization in High-Pressure and Temperature Flow Field

고 정 빈* · 구 자 예**

Jung-Bin Ko and Ja-Ye Koo

Abstract

Vaporization characteristics of a liquid heptane droplet in high-pressure and temperature flow field are numerically studied. Variable thermodynamic and transport properties and high-pressure effects are taken into account in order to consider real gas effects. Droplet vaporization in convective environments was investigated on the basis of droplet vaporization in quiescent and convective environment. In quiescent environments, droplet lifetime is directly proportional to pressure at the subcritical temperature range but it is inversely proportional to pressure at the supercritical temperature range. In convective environment, droplet deformation becomes stronger by increasing Reynolds number due to increase of velocity while droplet deformation is relatively weak at a higher pressure for the same Reynolds number cases.

주요기술용어(Key Words): vaporization characteristics(기화특성), droplet(액적), high-pressure effects(고압효과), critical temperature(임계온도), droplet deformation (액적변형)

1. 서 론

대부분의 고성능 연소 시스템은 연료 액적의 임계점 이상에서 작동된다. 임계 온도와 임계 압력을 초과하여 초임계 상태가 되면 액적의 표면 장력이 사라지게 되고, 보통의 온도와 압력조건에 나타나는 기화와는 전혀 다른 특성들이 나타난다. 즉 저압 상태에서의 액적 기화에서는 물성치들을 온도만의 함수라 가정하여 구하는 것이 타당하지만 초임계 상태에 들어서면 증발 잠열이나 상간의 열역학적 이송 물성치 등이 온도뿐만 아니라 압력에 따라서도 변하기 때문에 Soave-Redlich-Kwong(SRK) 상태방정

식과 같은 실제기체 효과가 고려된 상태방정식이 적용되어야한다. 또한 액적 주위에 유동이 있으면 주위 기체가 액적 표면에 전단력을 걸어주어 액적 내부의 순환을 야기하게 된다. 이러한 순환은 액적 내부로의 열전달을 가속화하여 액적의 기화를 촉진하게 된다.

Manrique와 Borman은 이산화탄소의 정상상태 기화를 해석하기 위해 액적내부의 온도는 일정하고, 초기 가열기간을 무시한 준정상 모델을 사용하여 수치계산에 처음으로 고압에 의한 실제기체 효과를 고려하였다.⁽¹⁾

초임계 상태의 대류 유동하에서의 탄화수소 연료 액적의 기화에 관한 연구는 찾아보기 어렵다. 단지 열전달이 없다고 가정한 저압 유동장에서의 기화 연구가 몇몇 있을 뿐이다.^{(2) (4)}

C.G.Hsiao는 초임계의 압력 변화에 따른 물

* 한국항공대학교 대학원

** 한국항공대학교 항공우주 및 기계공학부

상지들의 계산에 주의를 기울이면서 초임계 상태의 유동이 있는 수소 환경에서 산소 액적의 기화를 연구하였다.⁽⁵⁾ 이후 Hua Meng은 액적의 변형에 대한 개선된 수치 알고리즘을 적용하여 C.G.Hsiao와 비슷한 연구를 하였다.⁽⁶⁾

본 연구에서는 실제 고성능 연소 장치의 내부 환경에 근거하여 주위 조건을 적절히 조절하여 초임계 상태가 되도록 하여 주위 유동이 없는 경우와 주위 유동이 있을 때 헵탄 액적의 기화 특성을 조사하였다.

2. 본론

2.1 가정 및 경계조건

주위가 정지해 있는 경우의 액적 기화에서는 헵탄 액적을 구형대칭이라 보고 1차원으로 해석하였으며 주위유동이 있는 경우의 액적 초기에는 구형이라 가정하고 2차원으로 해석하였다. 계산 초기의 액적은 기상과 완전히 분리되어 있으며 상변화는 액적 표면에서 급격한 열 및 물질전달이 일어난다. 표면 전후를 통해 질량, 에너지 및 화학종이 보존된다.

질량 전달이 이루어지는 주위gas와 액적 사이의 반경방향 속도는 매우 작고 부력은 무시한다. 압력은 전 계산 영역에서 일정하다. 따라서 전체 에너지 계산은 단순히 내부에너지와 같다고 할 수 있다.

초임계 상태에 놓인 액적은 유동이 없을 때의 액적 수명이 임계 상태보다 매우 짧고 경계면에서의 열 및 물질전달이 계산 초기부터 급격히 일어나므로 주위 유동이 있을 때에는 헵탄 액적이 주위 환경에 노출되자마자 임계 상태에 도달한다고 가정하였다. 또한 유동은 레이놀즈수가 300이하로써 층류이고 구형의 액적에 대하여 축대칭을 가정하였다.

2.2 격자의 구성

주위가 정지해 있는 경우 구형대칭을 가정하였으므로 1차원 격자를 구성하였다. Fig. 1은 액적 모델을 나타내고 있다. 기화의 수치 계산

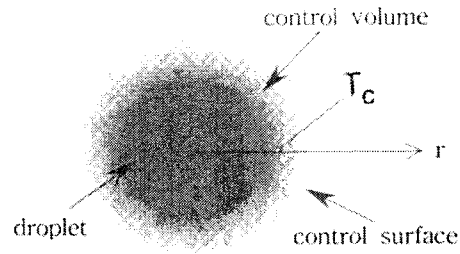


Fig. 1 Schematic of spherical droplet

제어 표면은 동심을 이루고 있고, 액적 표면에서는 구배가 크기 때문에 격자를 조밀하게 하였다. 기화가 진행될수록 액적반경은 작아지므로 액적표면을 따르는 이동격자를 적용하였다.

주위 유동이 있는 경우에는 액적의 기화 과정동안 액적의 모양이 임의적으로 변하기 때문에 액적의 표면을 따르는 구성하는 것은 불가능하다. 이 경우에는 고정 격자계를 사용하여 액적 주변과 액적의 예상 이동 경로를 따라 조밀한 격자를 구성하였으며 2차원으로 해석하였다. 외부경계가 수치계산에 미치는 영향을 최소화하기 위해 r방향으로는 액적초기 위치에서 외부 경계까지의 거리를 액적 반경의 15배 이상을 부여하였다.

2.3 지배 방정식

첫째로 주위 유동이 없는 경우는 액적의 기화 과정동안 액적 표면의 감소율을 나타내기 위해서 액상의 액적과 기상의 주위 기체 모두에 대해서 비정상 연속방정식, 에너지보존식, 화학종보존식을 표현해야 한다.⁽⁷⁾

또한 압력변화에 따라 액적에 녹는 용해율과 증발엔탈피를 계산하기 위한 분열엔탈피를 계산해야 한다. 또 임계영역부근에서 압력 변화에 따른 열역학적 물성치를 구해야 한다.

다음은 질량 보존식, 운동량 보존식, 에너지 보존식 그리고 화학종 보존식이다.

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV + \int_{A_s(t)} \rho(v-v_s) \cdot dA = 0 \quad (1)$$

$$\nabla p=0 \tag{2}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho e dV + \int_{A_s(t)} \rho e (v-v_s) \cdot dA \\ = - \int_{A_s(t)} p v dA - \int_{A_s(t)} q_c \cdot dA \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} \int_{A_s(t)} \rho Y_i dV + \int_{A_s(t)} \rho Y_i (v-v_s) \cdot dA \\ = - \int_{A_s(t)} q_i \cdot dA \end{aligned} \tag{4}$$

여기서 액적은 구형의 제어 체적을 갖고 물리적 변수들 ρ, v, p 그리고 Y_i 는 각각 밀도, 반경방향 속도, 압력 화학종 i 의 질량비를 나타낸다. v_s 는 격자 이동속도이다.

초임계상태가 되면 완전기체 법칙이 성립하지 않으므로 실제기체 효과가 고려된 열역학적 물성치와 이송 물성치등의 계산이 수반된^(7,10) 수정 Soave-Redlich-Kwong 상태 방정식을 사용한다.

$$P = \frac{\rho R_u T}{(M_w - b\rho)} + \frac{a\rho}{M_w} \frac{\rho^2}{(M_w + b\rho)} \tag{5}$$

여기서 R_u 는 일반 기체상수이며, 매개변수 a 와 b 는 분자간의 흡착 및 반발력의 효과를 나타낸다.

주위 유동이 있는 경우의 지배방정식들은 축대칭 좌표계에 대해 보존형으로 나타내었다.⁽⁸⁾

이 경우는 액적에 의한 항력 때문에 액적 전방부근에 저마하수의 유동 영역이 생긴다. 이는 압축성 Navier-Stokes 방정식을 풀 때 고유치의 강직성 때문에 수치코드의 수렴성이 크게 저하된다. 이 문제를 해결하기 위해 예조건화를 도입하였다.⁽⁹⁾

다음은 수정된 예조건과 지배방정식이다.

$$\begin{aligned} \Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{E}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{F}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left[r R_{rr} \frac{\partial \bar{Q}_c}{\partial x} + r R_{rr} \frac{\partial \bar{Q}_c}{\partial r} \right] \\ - \frac{\partial}{\partial r} \left[r R_{rx} \frac{\partial \bar{Q}_c}{\partial x} + r R_{rx} \frac{\partial \bar{Q}_c}{\partial r} \right] = \bar{H} \end{aligned} \tag{6}$$

3. 결과 및 고찰

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

Species	Mw (g/mole)	Tc (K)	Pc (bar)	Vc (cm ³ /mole)
C ₇ H ₁₆	100	540.2	27.4	432.0
N ₂	28	126.2	33.9	89.8
O ₂	31	154.6	50.4	73.4

Table 1의 임계 물성치들을 참고로 하여 주위 가스의 온도와 압력을 변화시켜가면서 액적의 기화 특성을 파악하기 위해 액적 수명, 물분율, 상평형 조건 등의 데이터를 뽑아냈다. 액적 기화에 영향을 주는 열전달 효과는 기준 압력에서 주위 온도에는 비례적으로 작용하였고 액적의 직경에는 반비례적으로 작용하였다.⁽¹¹⁾

주위 유동이 있는 경우는 주위 가스를 질소로 가정하여 헵탄 액적의 주위 가스에 노출되자마자 임계상태에 도달하도록 주위 온도 압력 조건들을 적절히 조절하였다. 초기 액적 직경은 50μm이고 초기 액적 온도는 300K이다. Table 2에서 보는 바와 같이 다른 조건들은 모두 동일하게 두고 주위 유동 속도, 즉 레이놀즈수가 액적의 기화에 어떠한 영향을 주는지 알아보기 위해서 주위 압력 조건이 100atm일 때 주위 유동 속도가 10m/sec이고 Re가 150인 경우와 20m/sec, Re 300인 경우에 대해서 계산하였고, 주위 압력 조건이 400atm일 때 주위 유동 속도가 2.5m/sec, Re가 150인 경우와 5.0m/sec, Re 300인 경우를 비교하였다. 또한 동일 레이놀즈수에 대해서 주위 압력이 액적 기화에 미치는 영향을 알아보기 위해서 100atm, 10m/sec인 경우와 400atm, 2.5m/sec인 경우를 비교하였고, 100atm, 20m/sec인 경우와 400atm, 5.0m/sec인 경우를 비교하였다.

Ranger 과 Nicholls⁽¹²⁾ 그리고 Wierzba 과 Takayama⁽¹³⁾는 액적의 변형에 관여하는 주된 인자로서 무차원화된 Weber수와 Ohnesorge수의 조합인 $We^{1/2}/Oh$ 를 이용하였다. 이 새로운 무차원 변수는 공기역학적힘과 점성력의 비이다.

$$\frac{We^{1/2}}{Oh} = Re \frac{\mu_s}{\mu_d} \sqrt{\frac{\rho_d}{\rho_s}} \quad (7)$$

여기서 Re 는 레이놀즈수이고 μ 는 점성계수, ρ 는 밀도이다. 하첨자 s 는 주위가스를 나타내고 d 는 헵탄 액적을 나타낸다.

Table 2 Test matrix

	convective velocity (m/sec) (Reynolds No.)	
100atm	10 (150)	20 (300)
400atm	2.5 (150)	5.0 (300)

식(1)의 우변을 보면 다시 두 개의 무차원수로 나누어 생각할 수 있다. 하나는 Re 이고 다른 하나는 $(\mu_s/\mu_d) \cdot (\sqrt{\rho_d/\rho_s})$ 이다. 레이놀즈수는 주위 유동 속도가 변함에 따라 변하는 값이고 $(\mu_s/\mu_d) \cdot (\sqrt{\rho_d/\rho_s})$ 는 주위 압력에 따라 변하는 값이다. 액적의 기화는 무차원매개 변수 $We^{1/2}/Oh$ 의 값이 커질수록 활발히 일어나며 레이놀즈수의 증가로 인한 주위 압력의 감소에 따른 $(\mu_s/\mu_d) \cdot (\sqrt{\rho_d/\rho_s})$ 의 값의 증가가 액적의 기화를 촉진시키고 있다.

Fig. 2는 헵탄의 초임계 영역과 아임계 영역의 구분을 나타내었다. 임계 압력, 임계 온도를 넘어서면 초임계 상태 영역으로 들어서는 것을 알 수 있다.

Fig. 3은 액적 경계에서의 압력 변화에 따른

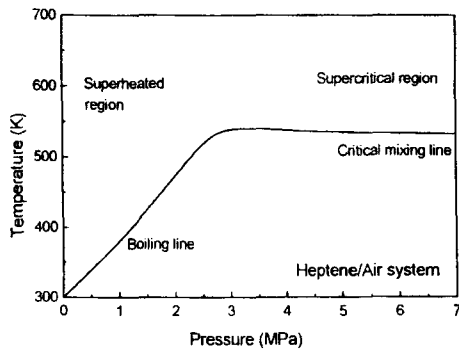


Fig. 2 Phase equilibrium on Heptane/Air system

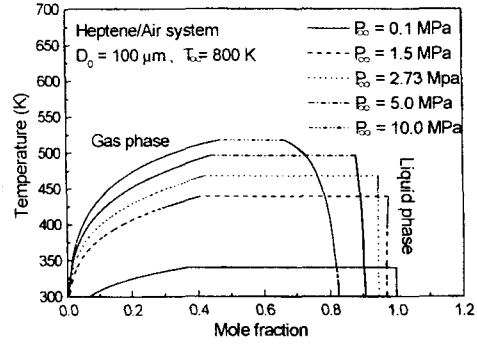


Fig. 3 Vapor-Liquid phase equilibrium with pressure at droplet surface

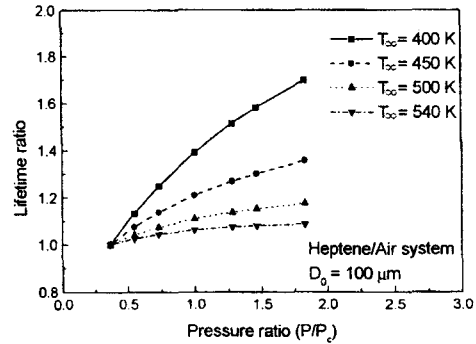


Fig. 4 Lifetime ratio at different temperature in subcritical condition

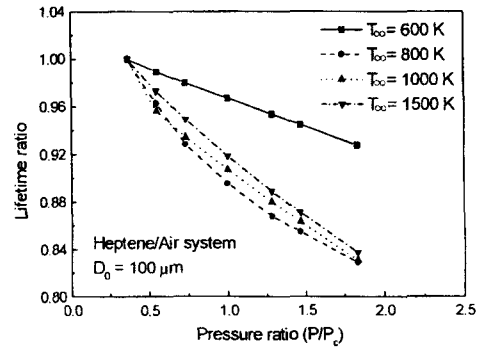


Fig. 5 Lifetime ratio at different temperature in supercritical condition

액상과 기상의 물분율의 변화를 보여주고 있다. 액상의 물분율은 압력이 낮을 때 변화가 적었으며 임계 압력을 넘어서면서부터 급격한 변화를 보였다. 또한 압력이 증가함에 따라 기상의 온도 변화가 임계 온도에 도달하는 것을 알 수 있다.

Fig. 4와 5는 아임계 온도 영역에서와 초임계 영역에서의 액적 수명율을 나타내었다. 기체가 액적에 용해되는 용해도는 압력에 비례하여 증가하므로 온도가 낮은 아임계 영역에서는 액적 수명 증가하다가 임계 압력을 넘어서면 증가율이 감소하였고, 초임계 온도 영역에서는 표면 장력이 없어지며 용해보다 기화가 빠르게 일어나므로 액적 수명이 감소하다가 임계 압력을 넘어서면 감소율이 감소하였다.

Fig. 6은 시간 경과에 따른 밀도의 변화를 정성적으로 보여주고 있다. (a)의 그림을 살펴보면 시간이 지남에 따라 헵탄 액적 표면에서 기화된 헵탄이 주위 gas와 혼합되어 밀도가 작아지고 액적 중심부보다 상대적으로 작은 관

성으로 인해 주위 유동의 영향을 받아 후방으로 밀려나게 된다. 초임계 상태이므로 주위 gas의 액적으로의 용해도 더불어 일어날 것이다. (b)의 그림은 그림 (a)와 다른 조건들은 모두 같고 주위 유동 속도가 10m/sec에서 20m/sec로, 즉 레이놀즈수가 150에서 300으로 증가한 경우로서 액적 기화에 대한 레이놀즈수의 영향을 살펴볼 수 있다. 액적의 기화는 (a)의 경우와 비슷한 경향을 보이고 있다. 그림 (a)와 (b)의 $t=20\mu\text{sec}$ 일 때를 비교해보면 레이놀즈수가 큰 (b)의 경우가 액적의 기화가 더 많이 진행되었음을 볼 수 있다.

Fig. 7은 시간 경과에 따른 밀도의 변화를 보여주고 있다. 여기서 (a)와 (b)는 레이놀즈수는 300으로서 같고 주위 압력이 다른 경우로서 액적 기화에 대한 주위 압력의 영향을 알 수 있다. 동일한 시간상인 $t=15\mu\text{sec}$ 에서 액적 기화 정도를 비교해 보면 주위 압력이 낮은 경우에 액적 기화가 더 활발히 일어남을 알 수 있다.

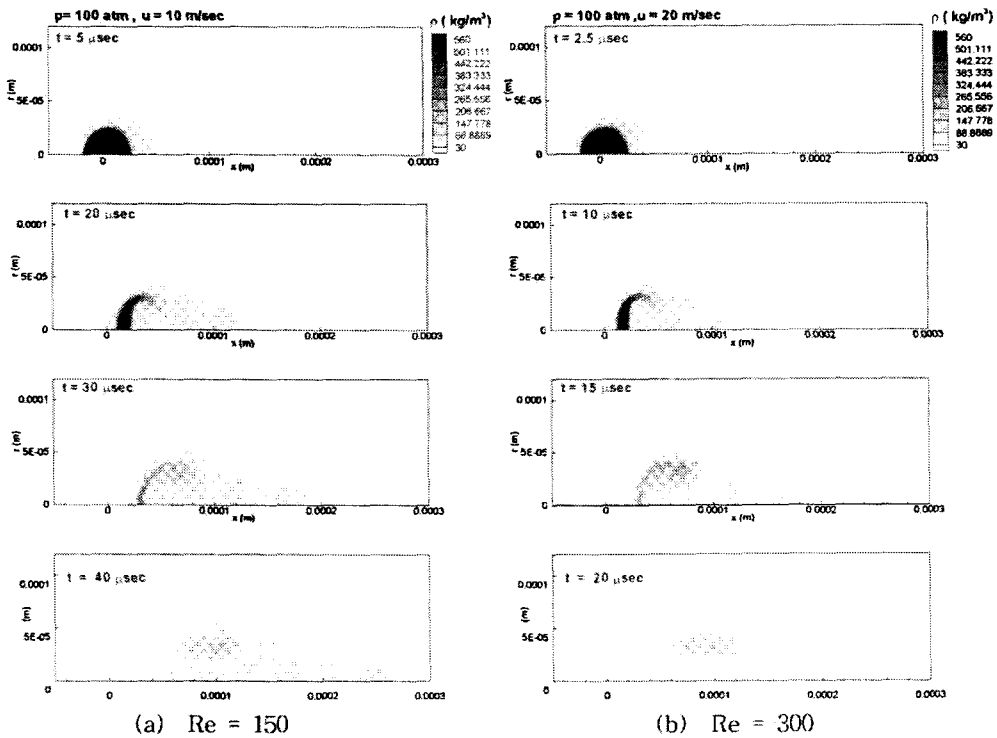


Fig. 6 Transient evolution of density contour at different convective velocity

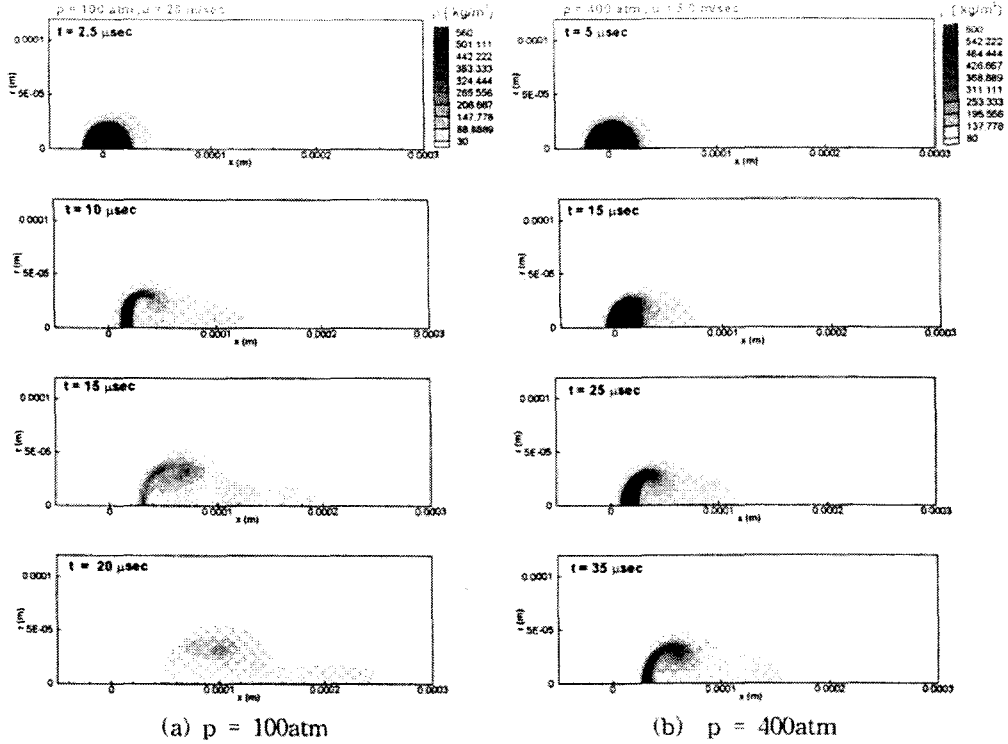


Fig. 7 Transient evolution of density contour at different ambient pressure

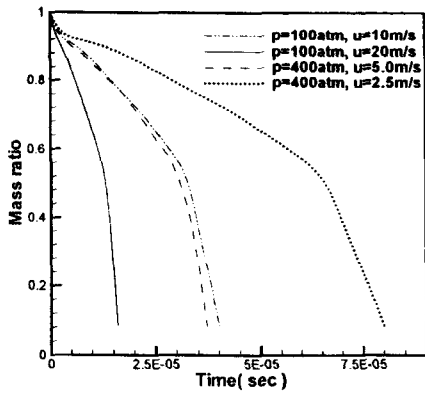


Fig. 8 Influence of convective velocity and ambient pressure on droplet vaporization

Fig. 8은 동일한 레이놀즈수에서 시간 경과에 따른 액적의 기화 정도를 정량적으로 나타내고 있다. 여기서 세로축은 남아있는 액적질량비율을 나타내며 다음과 같이 정의된다.

$$\text{액적질량비율} = \frac{\text{남아있는액적의질량}}{\text{초기액적의질량}} \quad (2)$$

주위 압력이 100atm으로서 같고 주위 유동 속도가 각각 10m/sec, 20m/sec인 경우를 살펴 보면 주위 유동 속도가 더 큰, 즉 레이놀즈수가 더 큰 경우가 동일 시간상에서 액적질량비율이 더 작음을 볼 수 있다. 이는 액적의 기화가 더 많이 진행되었음을 나타낸다. 동일한 레이놀즈수에 대해서 주위 압력의 영향을 알아보기 위해서 실선과 점선으로 나타낸 100atm, 20m/sec인 경우(Re=300)와 400atm, 5.0m/sec인 경우(Re=300)를 비교해보면 압력이 낮은 경우에 액적질량비율이 더 작다. 즉 압력이 낮은 경우에 액적의 기화가 더 활발함을 알 수 있다.

4. 결론

고온, 고압 효과를 고려하여 헵탄 액적의 기

화에 대한 다음과 같은 결론을 얻었다.

- (1) 임계점을 넘어서 액적이 초임계 영역으로 가게 되면 압력이 증가함에 따라 액상의 물분율이 증가한다.
- (2) 압력이 증가할수록 액적의 수명은 아임계 온도영역에서는 증가하지만 초임계 온도영역에서는 감소한다.
- (3) 주위 유동 속도의 증가로 인한 레이놀즈수의 증가는 액적의 기화를 촉진한다.
- (4) 레이놀즈수가 같을 때에는 압력이 낮은 경우에 액적의 기화가 더 활발하다.

후기

본 연구는 2004년도 한국항공대학교 교비 연구비 지원으로 수행된 연구결과의 일부이며, 지원에 감사드립니다.

참고 문헌

1. Manrique, J.A. and Borman, G.L., "Calculations of steady state droplet vaporization at high pressures", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 12, pp. 1081-1095, 1969
2. Hinze, J.O., "Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes", *A. I. Ch. E. Journal*, Vol. 1, No. 3, pp. 289-295, 1995
3. Pilch, M. and Erdman, C.A., "Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop". *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 13, No. 6, pp. 741-757, 1987
4. Hsiang, L.P. and Faeth, G.M., "Near-limit drop deformation and secondary breakup".

International Journal of Multiphase Flow, Vol. 18, No. 5, pp. 635-652, 1992

5. Hsiao, G.C., "Supercritical droplet vaporization and combustion in quiescent and forced-convective environments", Ph. D. thesis, The Pennsylvania State University, University Park, PA, 1995
6. Hua Meng, "Liquid-fuel droplet vaporization and cluster behavior at supercritical conditions", Ph. D. thesis, The Pennsylvania State University, 2001
7. 이경재, 이봉수, 김종현, 구자예, "아임계 및 초임계 탄화수소 연료 액적의 기화 특성 연구," *한국항공우주학회지*, 제31권, 제7호, pp. 85-93, 2003
8. 임종혁, 이봉수, 구자예, "유동이 있는 초임계 질소 환경에서 탄화수소 연료 액적의 기화 특성", *대한기계학회논문B권*, 제28권, 제10호, pp. 1279-1287, 2004
9. Choi, Y.H. and Merkle, C.L., "The application of viscous flows", *Journal of Computational Physics*, Vol. 105, pp. 207-223, 1993
10. 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*, Vol. 17, No. 4, pp. 443-448, 1978
11. 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
12. Ranger, A.A. and Nicholls, J.A., "Aerodynamic shattering of liquid drops", *AIAA Journal*, Vol. 7, No. 2, pp. 285-290, 1969
13. Wierzba, A. and Takayama, K., "Experimental investigation of the aerodynamic breakup of liquid drops", *AIAA Journal*, Vol. 26, No. 11, pp. 1329-1335, 1988