

# 플래쉬 상평형 계산에 의한 고압 액적기화의 수치적 연구

이강원\* · 채종원\*\* · 윤웅섭\*\*\*

## High-Pressure Droplet Vaporization with Emphasis on the Vapor-Liquid Equilibrium Calculation

Kang-Won Lee, Jong-Won Chae and Woong-Sup Yoon

Key Words: 액적기화, 고압 기-액상평형, 플래쉬 계산.

### Abstract

A rigorous study of single droplet vaporization under quiescent high pressure atmosphere is attempted adopting method of flash evaporation calculation for vapor-liquid equilibrium. Results due to flash method shows excellent agreement with measurement. Also shown is the present model fairly capable of depicting transients of droplet vaporization under high pressure environment, such as ambient gas solubility, property variation, and multicomponent transports. Systematic treatment of these effects with emphasis on vapor-liquid phase equilibrium revealed; conventional treatment for subcritical droplet vaporization, such as  $d^2$ -law, leads to erroneous prediction of droplet history, augmented gas solubility is significant under supercritical pressure, and vaporization rate proportionally increase with pressure.

### 기호설명

$D_{im}$ : 유효 확산계수

$f$ : 퓨개시티

$h$ : 엔탈피

$\Delta h_{v,i}$ : 증발잠열

$\dot{m}_v$ : 액적 기화율

$u_r$ : 구형좌표계의 반경방향 속도

$u_g$ : 격자이동속도

$p$ : 압력

$q_e$ : 에너지 확산 플럭스

$q_{m,i}$ : 질량 확산 플럭스

$r$ : 액적 중심으로부터 반경방향의 거리

$\dot{R}$ : 액적 반경 감소율

$R$ : 액적 반경, 기체상수

$R_s$ : 기상의 액적 표면

$R_v$ : 액상의 액적 표면

$R_g$ : 일반 기체상수

$T$ : 온도

$T^*$ : 특성 온도

\* 연세대학교 기계공학과 대학원

\*\* 연세대학교 기계공학과 대학원

\*\*\* 연세대학교 기계공학과

$V^*$ : 특성 부피(characteristic volume)

$V_f$ : 질량분율

$Z$ : 압축성 인자

$\lambda$ : 열전도도

$\mu$ : 점성계수

$\rho$ : 밀도

상점자

$v$ : 기상(vapor phase)

$l$ : 액상(liquid phase)

\*: 특성값(characteristic value)

o: 표준상태(reference state)

하점자

$c$ : 임계점(critical point)

$m$ : 혼합물(mixture), 질량(mass)

$i$ : 화학종(species index)

$r$ : 반경방향(radial direction)

$g$ : 격자(grid)

## 1. 서론

디젤엔진이나 가스터빈엔진, 액체로켓 등과 같은 액체연료를 사용하는 연소장치들은 대부분 고압의 환경에서의 액적 기화와 분무연소문제를 포함하고 있다. 이들 연소기에서 액적의 기화특성은 연료 소비율, 연소효율, 열 방출량, 오염물질의 생성 등과 같은 연소기의 성능에 큰 영향을 미치게 된다. 개개의 액적들은 고온 고압의 환경에서 기화, 점화의 과정을 거치게 된다. 여기서 유사 습구상태(Pseudo-wet bulb state)에 이른 액적들은 준정상적인 기화율을 보이게 되는데, 이러한 유사 습구상태는 주변기체의 압력이 낮을수록 더욱 뚜렷하게 나타나며 압력이 높아질수록 그 시간이 짧아지는 경향을 보인다. 그러나 이러한 준 정

적인 상태에 항상 도달하는 것은 아니다. 주변 압력이 높아짐에 따라 이러한 정상적인 상태는 짧아지게 되고 결국에는 없어지게 된다. 액적이 점차 가열되어 압력과 온도가 임계값을 넘어서면 액적의 표면장력은 없어지게 되고 액적은 분열하게 된다. 결국 농후한 유체의 퍼프(puff)상태가 된다. 이렇게 되면 온도, 밀도 그리고 그것들의 구배가 액적 표면을 통해 연속적이 되고 두 상간의 경계를 명확히 구분할 수 없다. 액적의 수명 시간내에 표면온도가 임계혼합온도에 도달하게 되면 액상과 기상을 분리해서 해석할 수 없고 하나의 단일 상으로 해석해야 된다. 이 때에 액적의 기화율은 임계혼합온도에 도달한 표면의 움직임으로 결정할 수 있다. 그러나 액적의 내부는 여전히 아임계 온도분포를 가지는 액상으로 남아있거나 지속적인 열전달에 의해 완전히 초임계화 될 수도 있다.

고성능의 고압 연소장치의 개발을 위해서 분무연소의 기본이 되는 액적의 기화와 연소는 지난 수십 년 간 주된 관심의 대상이 되어왔다.[1, 2] 기존의 액적 기화모델들은 준정상상태의 가정을 사용하여 저압상태를 기준으로 만들어진 것들이다.  $d^2$ -법칙이 그 대표적인 예이다. 저압 기화모델에서는 액적 표면에서의 증기압이 포화압력과 같은 이상기체로 가정하고 기체상태를 해석하였다. 이러한 모델은 약 10기압 이하의 비교적 낮은 압력에서는 그 오차가 무시할 수 있을 정도로 작지만 그 이상의 높은 압력에서의 적용은 열역학적인 관점에서 보았을 때 타당하지 않게 된다.[3] 저압의 기화모델에서는 기상의 지배방정식에서 이상기체 상태방정식을 사용하기 때문에 압축 인자(Compressibility factor)를 고려하지 않는다. 그러나 고압의 상황에서는

분자간의 평균거리가 작아지게 되어 압축 인자가 1보다 큰 값을 가지게 되고 더 이상 이상기체가정을 사용할 수 없게 된다. 그리고 저압기화모델에서는 물성치를 계산할 때 온도에 관한 함수로만 관계식을 정의하고 압력에 대한 보정은 하지 않는다. 그러나 질량확산계수와 같은 물성치들은 압력에 따라 그 값의 변화량이 크기 때문에 물성치 계산에서 고압의 효과를 고려해주어야 정확하게 물리적인 현상을 모델링할 수 있게 된다.

고압상태에서의 액적기화모델의 효시는 Spalding[4]에 의해 수행된 초임계 영역에서는 액적기화와 연소에 관한 연구이다. 정지한 유체에서 고립된 연료 액적의 연소를 농후한 기체의 점 생성항(Point source)으로 가정하고 문제를 해결하였다. 그러나 지배방정식들이 단순화된 1차원적인 식들이고 각종 물성치들은 상수 값을 취하여 실제기체의 효과를 고려하지 못하였고 밀도의 변화특성도 무시한 단점이 있다. 이러한 액적기화모델은 차후에 Rosner[5]에 의해서 하나의 생성항이 아닌 유한개의 분산된 생성항으로 모델링하는 방법으로 확장되었다. 이상과 같은 액적연소문제는 액적 연소시에 대류의 효과, 밀도의 변화, 반응특성에 대한 연구는 Brzustoski[6], Chervinski[7], 그리고 Polymeropoulos와 Peskin등[8]에 의해서 수행되어왔다. 근래에는 Lee등[9]에 의해서 초임계 조건에서 액체연료의 정체점 증발현상(Stagnation point evaporation)이 연구되었다. 그러나 문제의 복잡성 때문에 액상으로의 주변기체의 용해도, 열역학적 비이상성, 물성치의 변화 등의 중요한 고압 현상들을 다루지 못했다. Wieber[10]는 저압의 준정상 기화모델에서와 같이 액적이 임계혼합점에 도달하기 전에도 일정량의 기

화가 일어날 수 있다는 사실을 제시하였다. 이러한 현상은 이후의 Faeth등[11]에 의한 초임계 상태 이원추진제(bipropellant) 액적의 연소에 관한 실험적인 연구에서 입증되었다. Manrique와 Borman[12]은 준 정상 모델에 기초한 초임계 상태 액적기화모델의 방법론을 제시하였다. 그들의 기화모델에서는 Redlich-Kwong 상태방정식(RK-EOS)이 실제기체의 효과를 나타내는데 사용되었다. 그러나 기상의 기화과정들이 준정상상태로 가정되었고 액적내부의 가열효과도 무시되었다. 이후의 Savery와 Borman[13]의 연구에서는 열역학적인 비이상성과 물성치의 변화효과가 심도 있게 다루어졌다. Lazar와 Faeth[14] 그리고 Canada와 Faeth[15]도 역시 고압상태에서 hydrocarbon 연료의 정상상태 기화와 연소를 연구하기 위하여 RK-EOS를 도입하였다. 그들은 연료액적의 연소율 예측이 기존의 저압모델과 흡사하다는 사실을 밝혀내었고 실험치들과 비교하여 검증하였다. Matlosz등[16]은 기상의 비정상성(unsteadiness)과 실제기체 효과를 포함한 고압 액적 기화모델을 개발하였다. 그러나 액적내부로의 주변기체의 용해현상은 무시하였다. 그들은 기상의 비이상성(nonideality)들이 액적의 온도와 기화특성에 중요한 영향을 미치는 것을 발견하였다. Curtis와 Farrell[17]은 Peng-Robinson 상태방정식(PR-EOS)을 사용하여 고압 기화모델을 만들었고 기화율과 액적의 온도 그리고 임계혼합상태를 예측하였다. 그리고 실제 디젤엔진에서와 같은 고압상황에서의 액적기화현상을 예측하였다. Hsieh등[18]은 온도 2000K에서 binary와 ternary system의 고압상태 액적기화현상을 포괄적으로 연구하였다. 여기서는 Soave-Redlich-Kwong 상태방정식

(SRK-EOS)이 액적기화 해석에 사용되었다. 이에 뒤따른 연구로 Shuen등[19]은 고압기화모델을 아입계와 초입계 상태에서 n-pentane액적의 연소거동을 고찰하였다. 압력이 높을수록 액적의 기화율은 증가하고 이러한 경향은 입계혼합점 근처에서 뚜렷하게 나타남을 보였다.

본 연구에서는 고온 고압의 질소 환경에 갑자기 방출된 n-pentane액적의 기화 과정을 열역학적 비이상성, 물성치의 변화 및 증발잠열의 변화 등을 고려한 비정상기화모델을 플래쉬 상평형 계산 방법을 사용하여 수치모사 하였다.

## 2. 지배방정식

### 2.1. 정지한 액적의 지배방정식

기상 공간내에서 정지하고 있는 액적에 대한 기상 및 액상의 질량, 운동량, 에너지, 화학종 보존방정식을 보존형으로 표현하면 식(2-1)과 같다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial r} - \frac{\partial E_v}{\partial r} - u_r \frac{\partial Q}{\partial r} = S \quad (2-1)$$

여기서  $Q$ 는 1차원 구형좌표계에서의 유동변수벡터,  $E$ 와  $E_v$ 는 각각 1차원 비점성 및 점성유속벡터이다. 여기서 체력

(Body force), 점성 소산(Viscous dissipation), 복사열전달, 화학반응을 무시한다.  $S$ 는 생성벡터이다. 위의 (2-1)식에서 쓰인 변수벡터들은 식(2-2)~(2-4)와 같다.

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_r \\ \rho e_i \\ \rho Y_i \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} \rho u_r \\ \rho u_r^2 + p \\ (\rho e_i + p)u_r \\ \rho u_r Y_i \end{bmatrix}, \quad E_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{rr} \\ -q_e \\ -q_{m,i} \end{bmatrix}, \quad (2-2)$$

$$S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2-2)$$

$$e_i = h - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}u_r^2 \quad (2-3)$$

$$\tau_{rr} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) - \frac{2\mu u_r}{r^2} \quad (2-4)$$

열확산과 화학종 질량확산은 Fourier의 법칙과 Fick의 법칙을 사용하여 식(2-5), (2-6)과 같이 표현된다.

$$q_e = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} - \rho \sum_{i=1}^N h_i D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \quad (2-5)$$

Table 1 Methods for evaluating thermodynamic and transport properties

Property	Baselin method	High-Pressure Correction	Mixing or Combining Rule
Liquid Density	Hankinson & Thomson (1979)	Thomson et al. (1982)	Hankinson & Thomson (1979)
Gas Specific Heat	4th-Order Polynomial of Temperature	Lee & Kesler (1975)	Mass Fraction Weighting
Liquid Specific Heat	Rowlinson (1969)	-	Mass Fraction Weighting
Gas Viscosity	Lucas (1980)	Lucas (1980)	Lucas (1980)
Liquid Viscosity	Stephan & Lucas (1979)	Lucas (1980)	Chung et al. (1986)
Gas Thermal Conductivity	4th-Order Polynomial of Temperature	Stiel & Thodos (1964)	Yorizane et al. (1983)
Liquid Thermal Conductivity	4th-Order Polynomial of Temperature	Missenard (1970)	Li (1976)
Binary Liquid Diffusivity	Hayduk & Minhas (1982)	-	Perkins & Geankoplis (1969)

$$q_{m,i} = -\rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \quad (2-6)$$

시간의 변화에 따른 액적 직경의 감소율을 나타내기 위하여 이동격자계를 사용하였다. 기상에서는 모든 격자들이 액적의 중심을 향해  $u_g$ 의 일정한 속도로 이동하게 된다. 여기서  $u_g$ 는 액적직경의 감소율이며  $u_g = dR/dt$ 로 나타낸다. 액상에서는 연료 액적의 직경이 순간적으로 일정하기 때문에 시간변화격자계를 사용하였다. 액상과 기상 모두를 구대칭 1차원으로 계산하므로 액적내부에서 유동은 존재하지 않는 것으로 가정되며 액적내부의 격자이동속도는 각 지점에서의 반경방향의 유동속도와 같은 값을 가지게 된다.

## 2.2. 경계조건

액적이 임계혼합점에 도달하기 전까지 액적의 표면은 액상과 기상을 구분 짓는 명확한 경계로 작용하게 된다. 그리고 각상에서의 물리적인 제반 현상들은 액적 표면에 수치적인 경계조건을 만들어 주기 위하여 서로 결합되어야 한다. 본 연구에서는 액적의 중심과 주변기체의 가장자리 부분 그리고 액적의 표면이 수치적인 해를 구하기 위한 경계조건으로 설정되었다. 액적의 중심과 주변기체의 가장자리에는 유속 경계조건을 부여하였다.

## 2.3 조화조건

액적의 표면이 임계혼합점에 도달하기 전에는 기상과 액상은 액적표면에서 서로 조화되어야 한다.

## 혼합물의 질량 수지

$$\dot{m}_v^a = \rho(u_r - u_{g,s}) \Big|_{r=R_s} \quad (2-7)$$

## 화학종의 질량 수지

$$\left[ \dot{m}_v^a Y_i - \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right]_{r=R_s} = \left[ \dot{m}_v^a Y_i - \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right]_{r=R_c} \quad (2-8)$$

## 에너지 수지

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_s} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_c} + \sum_{i=1}^N \left[ \dot{m}_v^a Y_i - \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right]_{r=R_c} \Delta h_{v,i} \quad (2-9)$$

상평형이 성립되는 액상과 기상 경계면에서의 온도, 압력, 각 화학종의 푸개시티는 액상, 기상의 값이 동일하게 된다.

$$T^l = T^v \quad (2-10)$$

$$f_i^l = f_i^v \quad (2-11)$$

$$p^l = p^v \quad (2-12)$$

푸개시티는 압력의 차원을 가지면서 실제기체의 거동특성을 나타내는 인위적인 변수이다. 혼합물에서 각 구성성분의 푸개시티는 온도, 압력, 혼합물조성의 함수로 나타내어 질 수 있다[21].

$$\ln \left( \frac{f_i}{p X_i} \right) = \frac{1}{R_u T} \int \left[ \left( \frac{\partial p}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_{j \neq i}} - \frac{R_u T}{V} \right] dV - \ln Z \quad (2-13)$$

$$p = \frac{R_u T}{\bar{v} - b} - \frac{aa}{\bar{v}(\bar{v} + b)}$$

$$(2-14)$$

$$\alpha a = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j \alpha_{ij} a_{ij}, \quad b = \sum_{i=1}^N x_i b_i \quad (2-15)$$

$$\alpha_{ij} a_{ij} = \sqrt{\alpha_i \alpha_j a_i a_j} (1 - k_{ij}) \quad (2-16)$$

Soave-Redlich-Kwong 상태방정식을 이용하면 각 성분의 퓨개시티에 대하여 다음과 같이 적분되어 양함수의 식으로 표현될 수 있다.

$$\ln(f_i / pX_i) = \frac{b_i}{b} (Z - 1) - \ln(Z - B) - \frac{A}{B} \left[ \frac{2 \sum_{j=1}^N x_j \alpha_{ij} a_{ij}}{\alpha a} - \frac{b_j}{b} \right] \ln \left( 1 + \frac{B}{Z} \right) \quad (2-17)$$

$$A = \frac{\alpha a p}{R_u^2 T^2}, \quad B = \frac{bp}{R_u T} \quad (2-18)$$

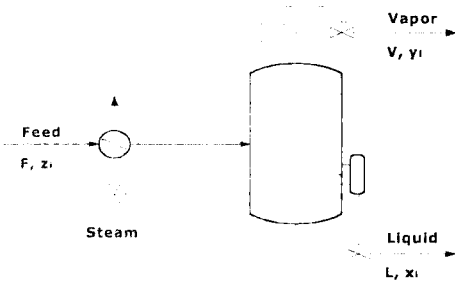


Fig. 2-1 Continuous equilibrium flash vaporization

본 연구에서 nitrogen/n-pentane 혼합물의 기-액 상평형은 단순 평형분리공정 (simple equilibrium separation process)에 근거하여 계산하였다[22]. Fig. 2.1은 평형분리공정의 개략도이다. 온도와 압력이 주어진 경우 액체와 기체의 물분율을 반복적인 계산에 의해서 구하였다. 계산 절차는 아래와 같다.

1. 액체 분율(fraction liquid)은  $L = 0.5$ 로 가정하고  $x_i = y_i = z_i$ 으로 설정
2. 액상과 기상에서의 압축 인자  $Z^L$ 와  $Z^V$ 를 계산(상태방정식 이용)
3. 퓨개시티 계수  $\phi_i^L$ 와  $\phi_i^V$ 를 계산
4.  $K_i = \phi_i^L / \phi_i^V$ 로 정의된 K 인자를 계산
5.  $x_i = z_i / [K_i + L(1 - K_i)]$ 이고  $y_i = K_i x_i$ 일 때에  $\sum (x_i - y_i) = 0$  만족여부를 확인
6.  $\sum (x_i - y_i) = 0$ 을 만족하지 않으면 L 값을 조정

$$L_{new} = L_{old} - \frac{\sum_i \{z_i (K_i - 1) / [K_i + L(1 - K_i)]\}}{\sum_i \{z_i (K_i - 1)^2 / [K_i + L(1 - K_i)]^2\}} \quad (2-17)$$

7. 2번 단계로 돌아가서  $\sum (x_i - y_i) = 0$ 를 만족할 때까지 반복계산을 수행

## 2.4 수치기법

액적기화의 수치적인 해석을 위해서 액상과 기상에 대한 지배방정식의 해를 구해야한다. 기상 대류는 배제되었으나 밀도의 변화를 모사하기 위하여 압축성 유동의 해석을 위한 알고리즘을 바탕으로 수치적인 해를 구하였다. 액적의 기화에서 유동장의 속도는 음속에 비하여 무시할 수 있을 정도의 아주 작은 값을 가지게 된다. 즉, 이러한 저마하수의 유동은 비교적 높은 마하수에서 수렴성이 좋은 압축성 알고리즘으로는 그 해를 구하기가 어렵다. 이와 같은 저마하수의 유동에서 고유치의 stiffness에 의한 수렴성의 저하 문제를 해결하기 위한 방법으로는 지배방정식의 시간미분항에 인공적인 예조건행렬을 곱하여 수식이 고유치들을 바꾸어서 해의 수렴성을 향상시키

는 예조건화 방법(preconditioning method)이 있다. 사용되어지는 예조건 행렬에 따라 여러 가지 방법이 있으나 본 연구에서는 Shuen[23]등에 의해 제시된 예조건 행렬을 사용하였다.

### 3. 결과 및 고찰

고온 고압의 질소환경에서 정지한 n-pentane액적의 기화과정을 수치적인 방법으로 해석하였다. Fig. 3.1 에서 액적기화모델의 개략도를 보여주고 있다. 여기서 +와 -는 각각 기상과 액상을 의미하며  $\Delta V$ 는 검사체적(Control volume)을 나타낸다.

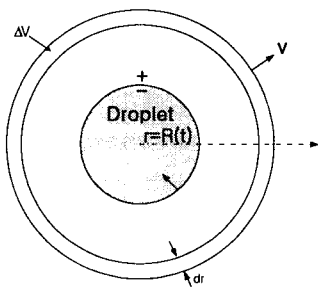


Fig. 3.1 Schematic of droplet vaporization

Figure 3.2 에서는 서로 다른 두 온도에 대한 n-pentane/carbon-dioxide의 상평형 계산결과를 보여주고 있다. 본 연구에서 사용된 이론적인 계산결과와 Hsieh와 Shuen[18]의 계산결과 그리고 Poettmann과 Katz[20]의 실험결과를 비교하고 있다. 본 연구의 계산결과와 실험결과는 거의 일치함을 볼 수 있는 반면, Hsieh와 Shuen[18]의 결과는 기상에서는 거의 일치하는 경향을 보이지만 액상에

서는 실험결과와 상당한 차이를 보이고 있다. 그들의 연구에서는 액상에서의 어긋남이 상평형 계산에 사용된 van der Waals 형식의 입방 상태방정식(Cubic equation of state)의 본질적인 한계와 상평형 계산시에 사용되는 2종 상호작용 계수(Binary interaction coefficient)에 대한 실험결과의 부재에 기인한 것이라고 기술하고 있다. 본 연구의 상평형 계산결과를 Hsieh와 Shuen[18]의 상평형 계산결과와 비교하였을 때, 액상의 영역에서의 정확도가 향상된 사실을 확인할 수 있다. 이것은 상평형 계산 방법의 차이에 기인한 것으로 생각되며, 여기서 사용된 평형 플래쉬 계산(Equilibrium flash calculation)[22] 방법이 상평형 계산시 해의 정확도가 기존의 Newton-Raphson 방법에 의한 복잡한 반복계산 보다 높은 것으로 판단된다.

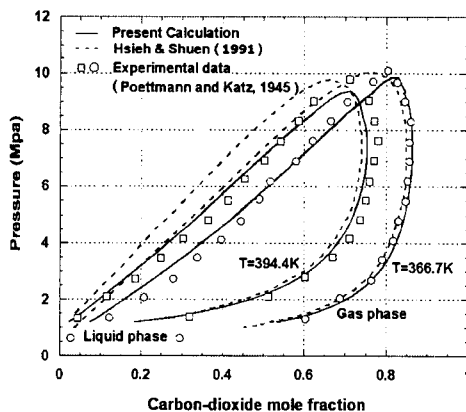


Fig. 3.2 Comparison of calculated and measured results for phase equilibrium

압력에 따른 각상의 평형조성을 살펴보고자 환산압력(Reduced pressure) 0.5~4.0까지의 범위에서 상평형 계산을 하였다. Fig. 3.3 에서 그 결과를 보여주고 있다. 여기서  $p_r$ 은 n-pentane의 환산압력을

의미한다. 아임계 상태에서는 액상에서는 거의 대부분의 조성이 n-pentane이다. 즉, 비교적 저압상태에서는 연료액적으로 용해되는 질소의 양이 극히 적음을 알 수 있다. 그리고 아임계 상태에서는 연료액적의 온도가 높아질수록 용해되는 질소의 양이 줄어드는 것을 볼 수 있다. 액적의 온도가 끓는점에 도달하게 되면 액적으로 용해된 질소의 양도 0이 되고 있다. 그러나 초임계 상태에서는 상황이 바뀌게 된다. 압력이 높아지면 액적으로 질소의 용해도가 중요해지고 온도가 증가함에 따라 용해도도 증가하게 된다. Fig. 3.3 에서 환산압력이 4.0일 때에는 액적에 용해된 질소의 양이 온도에 따라 물분율로 약 20~50%임을 알 수 있다. 용해된 질소의 물분율은 고압상태에서 비교적 큰 값을 가지지만 질소의 분자량이 n-pentane에 비하여 아주 작기 때문에 질량분율은 그다지 큰 값을 가지지는 않는다. 또 한가지 상평형도에서 알 수 있는 것은 임계 혼합온도가 압력이 증가함에 따라서 감소한다는 것이다. 결과적으로 압력이 높을수록 액적이 임계혼합점에 더 쉽게 도달함을 알 수 있다.

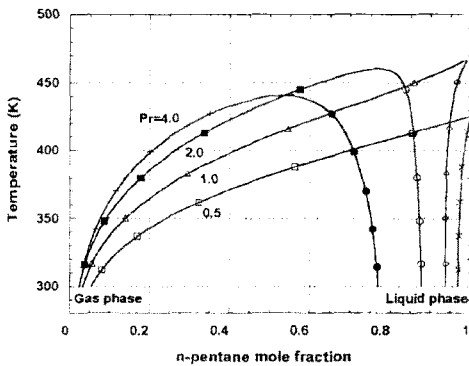


Fig. 3.3 Phase equilibrium calculation for n-pentane/nitrogen system

Figure 3.4 에서는 압력과 온도변화에 따른 n-pentane액적의 밀도변화를 보여주고 있다. 액적의 밀도는 온도가 증가함에 따라 감소하고 임계 혼합점 근처에서는 감소율이 더 커지게 된다. 압력이 높아지면 밀도가 더 커질 것으로 생각되지만 임계 혼합온도에 가까워질수록 압력이 증가함에 따라 밀도는 감소하는 경향을 보인다. 이러한 현상은 연료인 n-pentane과 주변기체인 질소의 밀도차이에 기인한 결과이다. 질소의 밀도가 n-pentane의 밀도보다 훨씬 작기 때문에 연료액적에 용해된 질소가 액적의 밀도를 감소시키는 역할을 하게된다. 이러한 경향은 압력이 높아질수록 용해된 질소의 양이 많아지기 때문에 임계 혼합점 근처에서의 밀도 감소율은 더 커지게 된다. 따라서 아임계상태의 압력에서는 액적의 밀도가 순수 연료의 밀도와 비슷하지만 초임계 상태의 높은 압력하에서는 액적내부로 용해된 질소의 영향을 고려해서 혼합물의 밀도를 구하여야 한다.

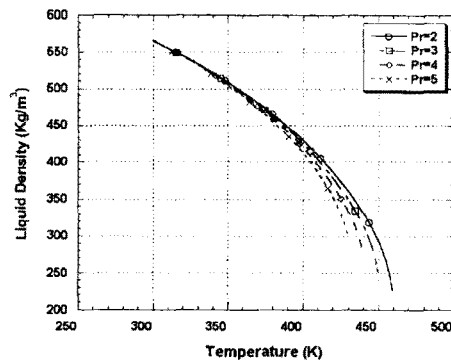


Fig. 3.4 Density of n-pentane droplet with nitrogen dissolution

시간에 따른 n-pentane 액적 표면적의 변화를 Fig. 3.5에서 보여주고 있다. 액적의 초기직경은  $100\mu m$ , 초기온도는 300



$K$ , 주변기체의 온도는  $1500\text{ K}$  이다. 주변기체의 압력이 높아짐에 따라 액적의 기화율이 증가되어 수명이 짧아지게 된다. 이는 압력이 높아짐에 따라 연료액적의 증발잠열이 감소하기 때문이다. 물론 압력이 높아질수록 질량확산계수가 작아지게 되지만 이러한 효과는 증발잠열의 감소에 비하면 극히 미미하기 때문에 고압상태에서 액적의 기화율 증가에 가장 큰 영향을 미치는 요인은 증발잠열의 감소로 보아도 무방하다. 그리고 액적의 기화 초기에는 급작스런 온도증가에 의한 액적의 밀도 감소로 인하여 액적의 부피가 증가하게 된다. 그림에서와 같이 기화 초기에는 액적이 약간 팽창하는 것을 알 수 있다.

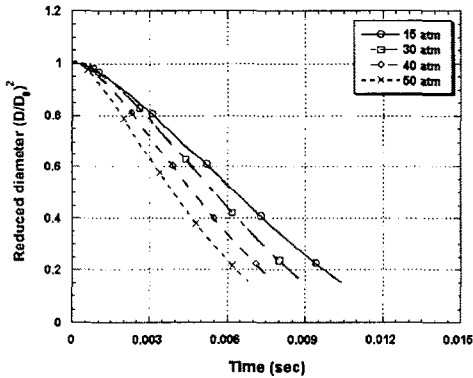


Fig. 3.5 Time variation of the reduced droplet diameter at various pressures

Figure 3.6 에서는 시간에 따른 액적 표면온도의 변화를 나타내고 있다. 압력이 높을수록 액적의 표면온도도 높은 값을 가지는 것을 알 수 있다. 액적의 기화 초기에 주변기체의 온도와 액적의 초기온도의 큰 차이로 인하여 액적의 표면온도가 급격하게 증가하는 것을 알 수 있다. 압력이 높아질수록 증발잠열값이 줄어들므로 표면온도는 상승한다. 기화

가 진행되면서 표면온도의 변화는 점차적으로 둔화되고 거의 일정한 온도를 유지하는 것을 알 수 있다.

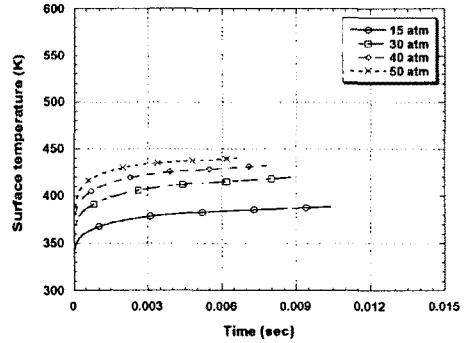


Fig. 3.6 Time variation of droplet surface temperature at various pressures

시간에 따른 액적 표면에서의 증발잠열의 변화를 Fig. 3.7에서 보여주고 있다. 주변기체의 압력이 높을수록 증발잠열이 작은 값을 가지고 서서히 감소해 가는 것을 볼 수 있다. 이는 Fig. 3.6에서 액적 표면 온도의 변화가 완만히 상승하기 때문이다.

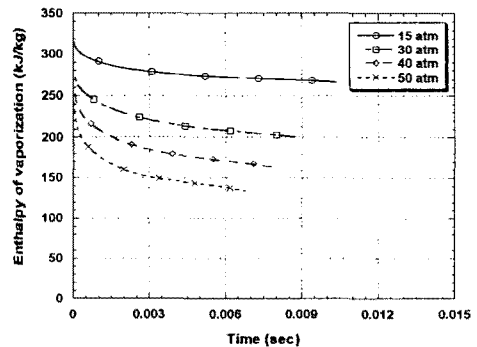


Fig. 3.7 Time variation of enthalpy of vaporization at various pressures

액적이 증발하는 동안 액적내부의 밀도와 온도 분포의 변화 양상을 Fig. 3.8-3.9에서 보여주고 있다. 증발 초기에

급격한 온도구배에 의한 열팽창으로 액적의 표면에서 밀도가 상당히 감소하게 된다. 그 결과 증발 초기에 액적의 직경이 증가하는 현상을 일으킨다. 하지만 증발이 연속적으로 일어나고 열전달이 이루어지므로 시간이 지날수록 내부의 온도도 증가가 되고 상평형 계산에서 보는 것처럼 주변의 밀도가 낮은 기체의 용해가 더 많이 일어나므로 밀도도 점차적으로 감소하게 된다.

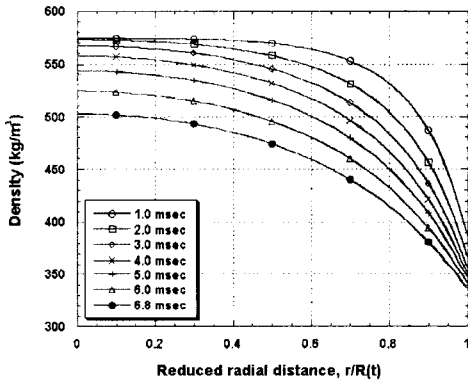


Fig. 3.8 Distribution of liquid-phase density at various times, nitrogen/n-pentane systems at 50 atm

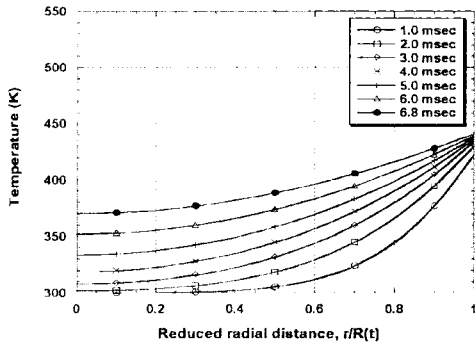


Fig. 3.9 Distribution of liquid-phase temperature at various times, nitrogen/n-pentane systems at 50 atm

여러 가지 압력조건에서 액적의 초기

직경의 제곱에 따른 액적 수명시간의 변화를 Fig. 3.10에서 보여주고 있다. 약 30atm 까지는  $d^2$ -law가 말하는 것처럼 액적의 초기 직경의 제곱과 액적의 수명시간은 거의 비례한다. 하지만 그 이상의 주변기체의 압력이 증가함에 따라서 증발잠열의 현저한 감소로 인해서 액적의 수명시간은 줄어들게 되고, 액적의 초기 직경의 제곱과 액적의 수명시간은 선형적으로 비례하지 않는다.

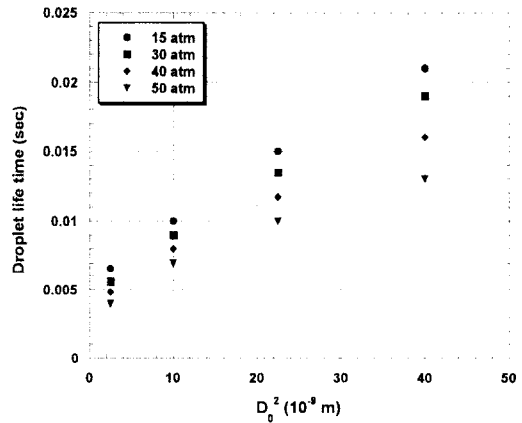


Fig. 3.10 Dependence of droplet lifetime on the square of initial droplet diameter at various pressures,  $T_{\infty} = 1500K$  nitrogen/n-pentane system

#### 4. 결론

고온 고압상태에서 정지한 단일액적의 기화과정을 플래쉬 상평형 계산을 사용하여 수치적으로 계산하였다. 기상과 액상에 대한 각각의 지배방정식을 예조건화방법과 이중시간전진기법을 이용하여 액적의 기화율과 액적의 직경감소율을 계산하였다. Hsieh *et al.*[18]의 결과와 유사하게 주변 압력이 높을수록 주변의 밀도가 낮은 기체가 액적내부로 용해되

는 양이 증가하고 더불어 액적의 밀도가 작아진다. 또한 상평형 계산에서 압력이 높을수록 임계혼합점이 낮아지며, 연료인 n-pentane의 증발잠열은 압력이 높을수록 작은 값을 가지고 임계혼합점 근처에서 그 값이 급격히 감소함을 알 수 있었다. 이러한 현상은 고압상태에서 액적의 기화율을 증가시키는 주된 요인이 된다.

액적의 표면온도는 기화초기에 액적과 주변기체의 큰 온도 구배로 인하여 급격히 증가하다가 주변기체로부터 전달된 열량의 대부분이 액적의 기화에 쓰이게 되는 준 정적인 상태에 도달하게 되고 이러한 준 정적인 상태는 압력이 증가함에 따라 그 기간이 감소하며 결국에는 사라지게 된다.

액적의 수명시간은 주변기체의 압력이 증가함에 따라 감소하고 약 30atm까지는 액적의 초기 직경의 제곱과 액적의 수명시간은 거의 비례하며  $d^2$ -law를 근사하게 만족한다. 압력이 증가함에 따라서 증발잠열의 현저한 감소로 인해서 액적의 수명시간은 줄어들게 되고, 액적의 초기 직경의 제곱과 액적의 수명시간은 선형적으로 비례하지 않는다.

기-액 상평형을 계산할 때, 기존의 Newton-Raphson 방법에 기초한 복잡한 반복적인 계산보다는 평형 플래쉬 계산(Equilibrium flash calculation)을 이용하는 것이 액상에서의 해의 정확도를 높일 수 있는 방법으로 생각된다. 입방 상태방정식의 본질적인 한계와 상평형 계산시에 사용되는 2종 상호작용 계수(Binary interaction coefficient)에 대한 실험결과의 부재로 인해서 액상에서 기존의 Newton-Raphson 방법은 실험결과와 차이를 내타낸다. 플래쉬 계산에서는 SRK 상태방정식이 단순히 물성치를 구하는데

사용되기 때문에 SRK 상태방정식의 약점이 상평형 계산에서 배제된다.

고압 상태 액적기화모델이 실제 연소장치에서의 분무연소현상을 해석하는데 사용되기 위해서는 강제대류의 영향, 압력 증가에 따른 액적의 표면장력의 변화와 주변압력의 섭동을 고려해야 하고, 액적간의 상호작용 그리고 단일 액적의 계산시간의 단축에 대한 연구가 필요할 것으로 생각된다.

## 참고문헌

- (1) Law, C. K., "Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion." Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 8, 1982, pp. 171-201
- (2) Faeth, G. M. "Current status of droplet and liquid combustion." Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 3, 1977, pp. 191-224
- (3) Hubbard, G. L., Denny, V. E., and Mills, A. F., "Droplet Evaporation: Effects of Transitions and Variable Properties" Intl. J. of Heat Mass Transfer Vol. 3, 1975, pp. 1003-1008
- (4) Spalding, D. B., "Theory of Particle Combustion at high pressures." ARS journal, Vol. 29, 1959, pp. 828
- (5) Rosner, D. E., "On Liquid Droplet Combustion at High Pressures." AIAA Journal, Vol. 5, No. 1, 1967, pp. 163
- (6) Brzustowski, T. A., "Chemical and Physical Limits on Vapor-phase Diffusion Flame of Droplets." Canadian Journal of chemical engineering, Vol. 43, 1965, pp. 30-36

- (7) Chervinsky, A., "Supercritical Burning of Liquid Droplets in a Stagnant Environment." *AIAA Journal*, Vol. 7., 1969. pp. 1815-1817
- (8) Polymeropoulos, C. E., and Peskin, R. L., "Combustion of Fuel Vapor in a Hot Stagnant Oxidizing Environment." *Combustion Science and Technology*. Vol. 5, 1972, pp. 165-174
- (9) Lee, H. S., Fernandez-Pello, A. C., and Oppenheim, A. K., "Stagnation Point Evaporation of a Liquid Fuel at Near and Supercritical Conditions." *ASME Paper 86-WA/HT-15*, 1986
- (10) Wieber, P. R., "Calculated Temperature Histories of Vaporizing Droplets to the Critical Point." *AIAA Journal*, Vol. 1, No. 12, 1963, pp. 2764-2770.
- (11) Faeth, G. M., Dominics, D. P., Tulpinsky, J. F., and Olson, D. R., "Supercritical Bipropellant Droplet Combustion." *Proceedings of twelfth symposium (International) on combustion*. The Combustion Institute. Pittsburgh, PA. 1969, pp. 9-18
- (12) Manrique, J. A. and Borman, G. L., "Calculation of Steady State Droplet Vaporization at High Ambient Pressures." *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 12, 1969, pp. 1081-1094
- (13) Savery, W., and Borman, G. L., "Experiments on Droplet Vaporization at Supercritical Pressures." *AIAA Paper No. 70-6*, 1970
- (14) Lazar, R. S., and Faeth, G. M., "Bipropellant Droplet Combustion in the Vicinity of the Critical Point." *Proceedings of Thirteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute. Pittsburgh. PA. 1971, pp. 801-811
- (15) Canada, G. S., and Faeth, G. M., "Combustion of Liquid Fuels in a Flowing Combustion Gas Environment at High Pressures." *Proceedings of Fifteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute. Pittsburgh. PA. 1975, pp. 418-428
- (16) Matlosz, R. L., Leipziger, S., and Tosda, T. P., "Investigation of Liquid Drop Evaporation in a High Temperature and High Pressure Environment." *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 15, 1972, pp. 831-852
- (17) Curtis, E. W. and Farrell, P. V., "Droplet Vaporization in a Supercritical Microgravity Environment." *IAF Paper 87-384*, 36th Congress of the International Astronautical Federation. 1987.
- (18) Hsieh, K. C., Shuen, J. S. and Yang, V., "Droplet Vaporization in High-Pressure Environments, I: Near-Critical Conditions." *Combustion Science and Technology*, Vol.76. 1991. pp. 111-132
- (19) Shuen, J. S., Yang, V. and Hsiao, C. C., "Combustion of Liquid-Fuel Droplets in Supercritical Conditions." *Combustion and Flame*, Vol.89., 1992, pp. 299-319
- (20) Poettmann, F. H., and Katz, D. L., "Phase Behavior of Binary Carbon Dioxide-Paraffin Systems." *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 37,

No. 9, 1945, pp. 847

- (21) Prausnitz, J. M., Lichtenthaler, R. N., and de Azevedo, E. G. 1986, *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- (22) King, C. J., *Separation Processes*, second edition, University of California, Berkeley
- (23) Shuen, J. S., Chen, K. H., and Choi, Y., "A Coupled Implicit Method for Chemical Non-equilibrium Flows at All Speeds." *J. of Comp. Phys.*, No. 2, 1993, pp. 306