고압 환경하에서 탄화수소 연료 액적의 기화특성 연구

김성엽†·윤웅섭*

Vaporization of Hydrocarbon Fuel Droplet in High Pressure Environments

Sung-Yup Kim, Woong-Sup Yoon

Key Words: droplet(액적), supercritical(초임계), vaporization(기화), equation of state(상태 방정식)

Abstract

A study of high-pressure n-heptane droplet vaporization is conducted with emphasis placed on equilibrium at vapor-liquid interface. General frame of previous rigorous model[1] is retained but tailored for flash equilibrium calculation of vapor-liquid interfacial thermodynamics. The model is based on complete time-dependent conservation equations with a full account of variable properties and vapor-liquid interfacial thermodynamics. The influences of high-pressure phenomena, including ambient gas solubility, thermodynamic non-ideality, and property variation on the droplet evaporation are investigated. The governing equations and associated moving interfacial boundary conditions are solved numerically using a implicit scheme with the preconditioning method and the dual time integration technique. And a parametric study of entire droplet vaporization history as a function of ambient pressure, temperature has been conducted. Some computational results are compared with Sato's experimental data for the validation of calculations. For low ambient temperatures, the droplet lifetime first increases with pressures, then decreases for high pressures. For higher ambient temperatures, the droplet lifetime increase with less amplitude than that of low ambient temperatures, which then decreases with more amplitude than that of low temperatures. The solubility of nitrogen can not be neglected in the high pressure and it becomes higher as the pressure goes up.

기호설명

f : 퓨개시티

u_r : 구형좌표계의 반경방향 속도

u_g : 격자이동 속도

P : 압력

T : 온도

r : 액적 중심에서 반경방향의 거리

Y_i : 질량 분율

ρ : 밀도

상첨자

v : 기상

l : 액상

하첨자

i : 화학종

r : 반경방향

† 연세대학교 대학원 기계공학과
E-mail : entropy1999@empal.com
TEL : (02)2123-4812
* 연세대학교 기계공학과

g : 격자

1. 서 론

디젤 엔진이나 가스터빈 엔진, 액체 로켓 등과 같은 액체연료를 사용하는 연소 장치들은 대부분 고압의 환경에서의 액적 기화와 분무 연소 문제를 포함하고 있다. 액체 연료를 사용하는 연소기에서 연료는 분사기를 통해 연소실 내부로 들어가서 분열과 미립화의 과정을 거쳐서 수십㎛의 반경을 가지는 단위 액적들이 생겨나게된다. 개개의 액적들은 고온 고압의 환경에서 기화, 연소의 과정을 거치게 되며, 이러한 과정은 연소기의 성능에 큰 영향을 미치게 된다. 따라서 단일 액적의 기화특성을 파악하는 것은 분무연소에서 가장 기본적이고 중요한 문제이다. 그러한 연구의 필요성으로 지난 수십년간 액적의 기화와 연소가 연구되어 왔는데, 초기 기화 모델들은 준정상 상태의 가정을 사용하여 고압에서 나타나는 대표적인 현상인 비이상성, 물성치의 변화, 기상의 액상으로의 용해등이 나타나는 고압 환경하에서는 맞지 않았다. 그 후 Spalding[1]을 시작으로 고압상태에서의 액적기화모델이 연구되어, Lazar와 Faeth[2]등은 RK-EOS를 도입하여 고압상태에서 탄화수소 연료의 정상상태 기화와 연소를 연구하였다. Curtis와 Farrel[3]은 PR-EOS를 도입하여 기화율과 임계혼합상태를 예측하였다. Hsieh[4], Shuen[5]등은 SRK-EOS를 사용하여 고압기화 모델을 포괄적으로연구하여아임계와 초임계상태에서 n-pentane액적의 연소거동을 고찰하여 압력이 높을수록 액적의 기화율은 증가하고 임계점에 가까울수록 그러한 경향이 더 뚜렷해진다는 사실을 밝혔다. Lafon[6]등은 공기 중에 세종류의 탄화수소 액적의 기화를 계산하였는데, 주위온도가 고온일때와 저온일때가 다른 기화 특성을 보인다는 것을 밝혀냈다.

본 연구는 액적 표면에서 기-액 상평형 계산시 Hsieh[4]등에의해 제시된 Newton-Rhapson 반복법을 사용하지 않고 Lee[8]등에 의해 상평형 해의 정확성이 개선된 플래쉬 상평형 계산 방법을 이용하여 고압 환경하에서의 탄화수소 액적의 기화를 계산하였다. 천이적이고 구대칭 액적 기화모델을 사용하였으며, 기상의 비이상성, 기상의 액상으로의 용해, 물성치의 변화, 액상과 기상의 평형과 같은 고압 효과는 다 조성 혼합물의 혼합법칙과 더불어 Soave-Redlich Kwong 상태 방정식을 사용하여 구했다.

2. 지배방정식 및 수치기법

본 연구는 액적이 초임계 상태에 도달하기 전의 아임계 상태를 다루므로 액적의 표면은 잘 정의된 경계를 가지고있다. 따라서 액적 내부와 외부를 나누어서 공식화하고 액적의 표면에서 상평형, 질량 유량과 열 유량의 연속 조건 등의 조화조건(matching condition)을 이용하여 연결시킨다. 이러한 조화 조건이 만족되었을때 표면에서 화학종들의 몰분율을 구할 수 있게되며, 액상과 기상의 경계 조건 들로부터 액적 내부와 외부의 모든 영역에 걸쳐 문제를 풀 수 있게 된다. 체적력, 점성 소산, 복사 열 전달을 무시한다면 유동장은 아래와 같이 표현할 수 있다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t}+\frac{\partial E}{\partial r}-\frac{\partial E_v}{\partial r}-u_g\frac{\partial Q}{\partial r}=S \qquad (1)$$

$$Q=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u_r\\ \rho e_t\\ \rho Y_1\end{bmatrix}\quad E=\begin{bmatrix}\rho u_r\\ \rho u_r^2+p\\ (\rho e_t+p)u_r\\ \rho u_r Y_i\end{bmatrix}\quad E_v=\begin{bmatrix}0\\ \tau_{rr}\\ -q_e\\ -q_{m,1}\end{bmatrix}\quad S=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\end{bmatrix} \qquad (2)$$

여기서 ρ, u_r, u_g, p 와 Y_i 는 각각 밀도, 반경방향 속도, 격자속도, 압력, i 화학종의 질량분율을 각각 의미한다. e_t 는 내부에너지, τ_{rr} 는 수직응력을 나타낸다. 열과 화학종의 질량 확산은 각각 포리에와 픽의 법칙을 따른다. 식(1)은 유동방정식의 고유치들의 큰 차이와 압력항이 잘 결합되어있지 않으므로 풀기가 매우 어렵다. 이러한 문제점을 보완하기 위해서 식(1)은 예조건화 기법과 함께 이중시간 전진기법을 사용하여 완전히 결합시킨 내재적인 수치기법을 사용한다.

3. 열역학적 모델링

기-액 경계면에서의 상평형은 임계상태가 발생하기 전의 액적표면 거동을 확인하는데 결정적 역할을 한다. 계산 과정은 대개 두 단계로 이루어진다. 첫 번째로 Soave-Redlich-Kwong 상태 방정식을 사용하여 기상과 액상의 퓨개시티를 계산한다. 두 번째 단계는 각 상에 포함된 각 화학종

의 퓨개시티가 같게 되는 열역학적 평형상태를 결정하는 것이다. 액상과 기상의 여러 성분의 평형은 열적,기계적,상평형을 만족하면이루어진다 ($T_L = T_v, P_L = P_v, f_{iL=} f_{iV}$). 여기서 아랫첨자 V와 L은 기상과 액상을 나타내고, f_i는 각 화학종의 퓨개시티를 나타낸다. 액적 표면에서 각 조성들에 의한 혼합물의 상평형 상태를 결정하는데는 플래쉬 평형기화 방법이 사용되었다[7]. 분리와 혼합 공정에서의 해석을 위해서는 각 상의 평형을 구하여야 하고 최종 혼합물에서의 평형조성의 구성은 평형율(equivalence ratio)를 사용하여 나타낼 수 있다. 여기서 상평형을 위한 플래쉬 방정식은 전체적 그리고 각 조성물의 상평형 조건으로부터얻을수있다. 등온플래쉬계산법에서는 Rachford-Rice[9]에 의한 시행 착오법을 사용하는데 $\sum_i (x_i - y_i) = 0$과 같은 질량 보존식을 제한 조건으로 다음의 식이 만족되면 평형상태가 된다.[7]

$$f(L^*) = \sum_i \frac{z_i(1-K_i)}{K_i + L^*(1-K_i)} = 0 \qquad (3)$$

여기서 x_i, y_i, 와 z_i는 i 화학종 각상의 몰분율, Ki 는 i 성분의 평형율, L* 는 액상의 분율을 나타낸다.

고압 연소의 환경에서는 열역학적 상태량이 압력, 온도, 그리고 조성에 따라서 급격하게 변화하고 따라서 이것들은 매우 정밀하게 계산되어야 한다. 또한 열역학적 상태량은 일반적으로 불규칙적으로 변화되며, 임계점 부근에서는 온도와 압력 모두에 민감하다. 따라서 고온, 고압 상태의 액적의 거동을 다루기 위해서 갖춰야 하는 전제조건은 그 시스템의 열역학적 상태량과 압축 유체부터 희석된 기체까지 모든 유체의 열역학적 상태를 구성하는 성분을 포괄하는 상태량 계산 방법의 정립이다. 다성분 조합을 대상으로 하는 열역학적 상태량과 물질, 열전달을 정의하려면, 액체와 기체의 평형에서의 온도와 압력에 따른 각 조성물의 데이터를 취합하고, 혼합물의 상태량은 혼합법칙에 의해 계산한다. 본 연구에서의 열물리적 상태량 계산은 Takahasi [10]에 의한 압력확산 보정을 제외하고는 Hsieh[4] 의 방법과 동일하다.

4. 결과 및 고찰

계산에 사용된 탄화수소 연료액적은 n-heptane이고 주위기체는 질소로 하였다. 계산은 연료액적의 초기 직경을 0.1mm, 액적의 초기온도를 300K로 하고, 주위 온도 및 압력등의 조건을 변화시켜 가면서 액적의 기화현상에 대한 액적 수명, 기화열, 경계면에서의 화학종의 분포등의 데이터를 구하였다. 연구의 타당성을 검증하기 위해 Sato에 의해 수행된 n-heptane의 기화실험 데이터와 연구결과를 비교하엿다. Table1은 계산에 사용된 화학종 들의 임계 물성치이다.

Table1. Critical properties of constituent species

	Mw (g/mole)	Tc (K)	Pc (bar)	Vc (cm^3/mole)
C_7H_{16}	100	540.3	27.4	432.0
N_2	28	126.2	33.9	89.8

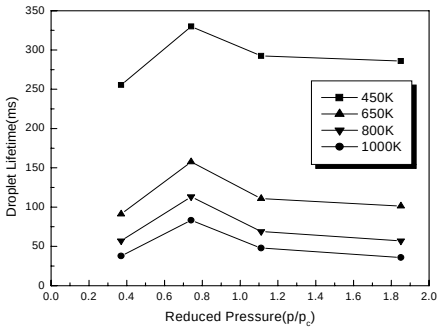
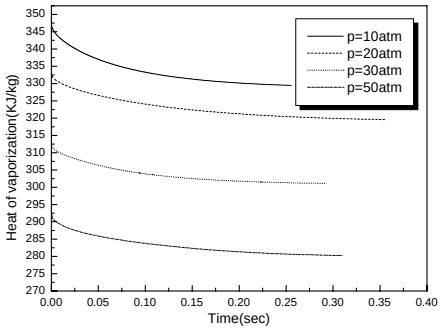


Fig.1 Droplet lifetime as a function of the reduced pressure for different ambient temperatures; T_0=300K;D_0=100㎛

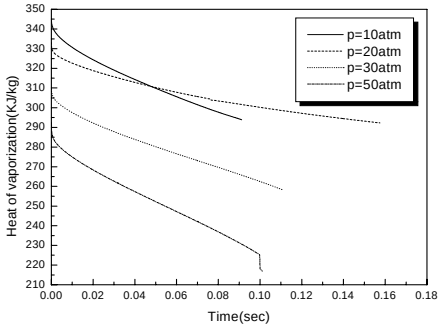
Fig.1은 n-heptane액적의 주위 온도에 대하여 환산 압력 변화에 따른 액적 수명 시간을 나타낸 것이다. 그림에서 보면 전반적으로 압력이 높아질수록 액적 수명시간이 증가했다가 감소하는 것을 볼 수 있다. 그러나 낮은 온도에 비해 높은 온도에서는 환산압력 0.8에서 액적수명이 증가하는 크기도 작아졌으며, 환산압력 0.8이상에서 압력이 증가함에따라 액적수명이 줄어드는 비율도 낮은온도에 비해 커져서 1000K의 경우 환산압력 1.8이상일때는 환산압력 0.4이하일때보다 액적수명이 작아졌음을 확인할 수 있다.

그와 같은 현상이 나타나는 이유는 기화에 관련된 두가지 중요한 인자인 기화잠열과 확산계수의 상관관계에서 살펴볼 수 있다. Fig.2에서 보면 온도가 낮은 경우와 높은 경우 모두 압력이 높아

질수록 기화잠열은 감소하나 낮은 경우에는 시간이 지남에따라 기화잠열의 차는 거의 일정해지고, 높은 경우에는 시간이 지날수록 기화잠열의 차는 더 커진다.



(a) T=450K

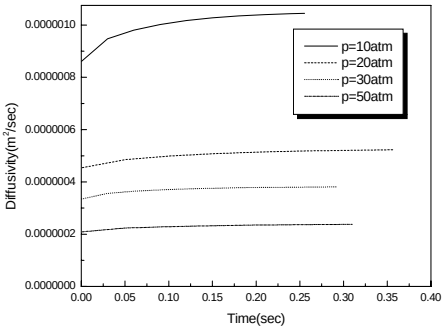


(b) T=650K

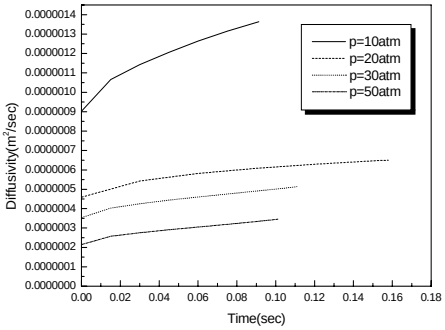
Fig2. Time variation of latent heat of vaporization at various pressures

Fig.3에서 보면 온도가 낮은경우와 높은 경우 모두 압력이 높을수록 확산계수는 낮아지는 것을 볼 수 있고 높은 온도의 경우 10기압과 20기압의 확산계수의 차이를 제외하고는 온도가 낮은 경우와 높은 경우 모두 시간이 지나도 확산계수의 차는 거의 일정하다고 볼 수 있다. 따라서 20기압의 경우, 기화잠열도 높고 확산계수도 낮기 때문에 액적수명이 긴 것으로 해석할 수 있고 높은 온도, 높은 압력일수록 액적 수명이 짧아진다고 결론 지을 수 있다.

Fig.4에서 보면 온도가 같을 때 압력이 10기압일때와 50기압일때의 액적내부에서 n-heptane의 질량 분율을 나타낸 것이다. 두 경우 모두 시간이 지날 수록 액적 내부로 용해되는 질소의 양이 증가하는 것을 볼 수 있지만 저압보단 고압에서 액적 내부로 용해되는 질소의 양이 월등히 많음을 알 수 있다.

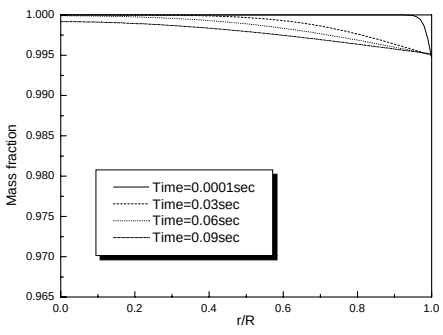


(a) T=450K

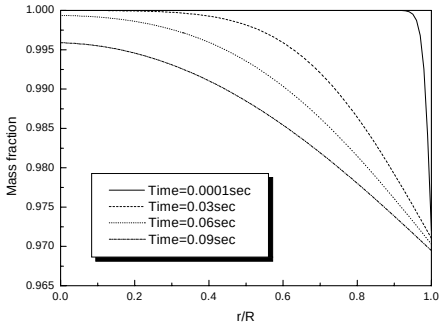


(b) T=650K

Fig3. Time variation of diffusivity at various pressures

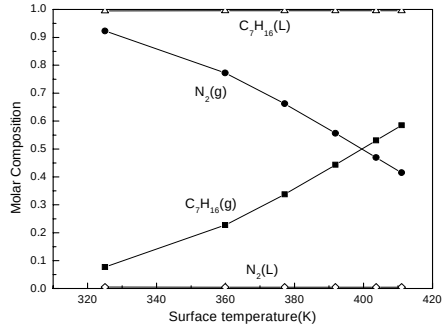


(a) P=10atm, T=650K

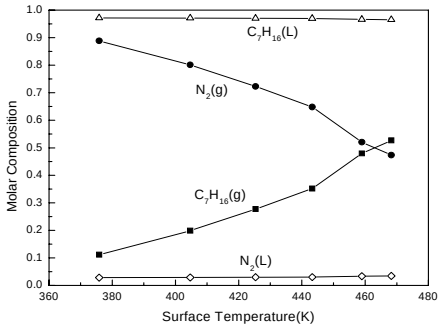


(b) P=50atm, T=650K

Fig4. Time variation of n-heptane mass fraction in the droplet at different pressure



(a) P=10atm, T=800K

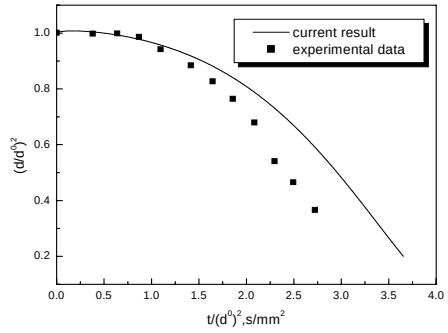


(b) P=50atm, T=800K

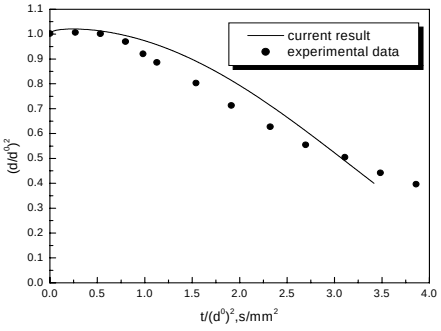
Fig5. Variation of liquid and gas species mole fraction with surface temperature at droplet surface

Fig.5는 주위온도가 800K일때 압력이 낮을때랑 높을때의 액적표면온도의 변화에따라 표면에서 화학종 몰분율을 나타낸 것이다. 역시 압력이 높을때가 낮을때보다 주위 질소의 용해량이 커진다는 것을 알수있다. 그리고 두 경우 모두 액적표면에서 기체상태의 n-heptane의 몰분율은 증가하는 반면 기체상태의 질소의 몰분율은 감소하고 액적 표면온도가 상승할수록 기상의 화학종들의 구성비가 비슷해지는 것을 알 수있다.

Fig.6은 압력이 10기압, 온도가 669K일때와 압력이 50기압 온도가 493K일때의 액적반경의 줆어듦을 계산결과와 실험결과를 시간에따라 나타낸 것이다. 실험데이터는 Sato에 의해 수행된 미소중력 하에서의 n-heptane의 기화실험 데이터를 사용하였다.[9-10] 액적의 기화초기에는 계산결과와 실험 데이터 모두 액적의 직경이 늘어난 것을 볼 수 있는데, 이는 기화초기의 급격한 온도 구배로 인한 체적 팽창이 주된 요인이다. 또한 계산 결과와 실험데이터가 기화초기에는 비교적 잘 일치 하였으나 후반부에는 그 차이가 커지는 것을 확인할 수있다. 이것은 계산시 사용된 상태방정식에서의 오차, 실험에 사용된 quartz fiber의 열전달에 의해 발생한 오차 등의 결과라고 해석된다.



(a) P=10atm,T=669K



(b) P=50atm, T=493K

Fig.6 Comparisons of numerical and experimental results of n-heptane droplet vaporization in nitrogen environments

5. 결 론

실제기체 효과를 고려한 Soave-Redlich Kwong 상태 방정식과 플래쉬상평형 계산 방법을 사용하여 다양한 온도와 압력하에 탄화수소 연료액적의 기화를 수치 실험하여 다음의 결론을 얻었다.

1) n-heptane액적의 기화시 주위압력이 높아짐에따라 액적 수명 시간이 늘어났다가 임계압력 이상에서는 줄어드는 것을 볼 수있는데 그러한 경향은 주위 온도가 높아질수록 둔화되고 본 연구에서는 확인하지 못했지만 극 고온이되면 압력이 증가함에 따라 액적수명은 계속 감소할 것으로 예상해 볼 수 있다.

2) 압력이 높아질수록 기화잠열은 줄어들고, 낮은 온도에서는 시간이 지남에따라 기화잠열이 줄어드는 것이 둔화되지만 높은 온도에서는 시간이 지남에따라 계속 줄어드는 것을 확인할 수 있다.

3) 압력이 높아질수록 확산계수는 줄어들고, 낮은 온도에서는 시간이 지남에따라 확산계수가 늘어나는 것이 둔화되지만 높은 온도에서는 시간이 지남에따라 계속 늘어나는 것을 확인할 수 있다.

4) 주변기체의 압력이 높을수록 액적내부로 용해되는 질소의 양이 증가되는 것을 볼 수있다.

5) 상평형이 이루어졌을때 같은 온도에서 높은 압력일때 기상과 액상의 몰분율의 차가 작아지는 것을 확인할 수 있었다

참고문헌

(1)Spalding,D.B.,1959“Theory ofParticle Combustion at high pressures.” ARS journal, Vol. 29, pp. 828

(2)Lazar, R. S., and Faeth, G. M.,1971, "Bipropellant Droplet Combustion in the Vicinity of the Critical Point." Proceedings of Thirteenth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute. Pittsburgh. PA. , pp. 801-811

(3)Curtis,E.W.andFarrell.P.V.,1987,"Droplet Vaporization in a Supercritical Microgravity Environment." IAF Paper 87-384, 36th Congress of the International Astronautical Federation.

(4)Hsieh.K.C., Shuen. J.S. and Yang.V.,1991 "Droplet Vaporization in high pressure environments,I:Near-CriticalConditions." Combustion Science and Technology, Vol.76. . pp. 111-132

(5)Shuen.J.S.,Yang.V.andHsiao.C.C.,1992, "Combustion of LiquidFuel Droplets in supercritical Conditions." Combustion and Flame, Vol.89., pp. 299-319

(6)Patrick Lafon, Vigor Yang, 1998, "Effects of Pressure on HydrocarbonFuel Droplet Vaporization in Air", International journal of heat and mass transfer

(7)King,C.J.1980,SeparationProcesses(2nd.ed) McGraw-Hill, New York, p. 64-80

(8)K.W.Lee, J.W.Chae, J.Y.Lee,W.S.Yoon, 2003, "Analysis of high pressure drop vaporization with flash vapor liquid equilibrium calculation", Int.Comm.Heat and Mass Transfer, vol.30, 633-641

(9)Rachford,H.H.Jr., Rice, J.D.,1952, Tech,4,No.10.

(10)Takahashi,S., J. Chem. Eng. (Japan) :417 (1974)

(11)Vigor Yang, George C. Hsiao, 1995, "Droplet Behavior at Supercritical Conditions", AIAA

(12)C.C.Hsiao, 1995, "Supercritical droplet vaporization and combustion in quiescent and forced convective environments" Ph.D. Thesis, The Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania

(13)Haldenwang,P.,Nicoli,C.,andDaou,J.,1996, Int.J.Heat Mass Transfer38,3453

(14)Hyunho Shin, Kang won Lee, Woong sub Yoon, 2003,"High pressure vaporization of burning droplet with flash vapor liquid equilibrium calculation", Int.Comm.Heat Mass Transfer, vol.30, No.4, 465-474 vol.26, 1675-1706

(15)Shuen, J. S., Chen, K. H., and Choi, Y., 1993,"A Coupled Implicit Method for Chemical Non-equilibrium Flows at All Speeds." J. of Comp. Phys., No. 2, pp. 306

(16)Venkateswaren, S., and Merkle, C. L., 1995, "Dual Time-Stepping and Preconditioning for Unsteady Computations." American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc.