

액적 배열의 증발과 착화에 관한 수치해석적 연구
 Numerical Study of Evaporation and Ignition
 of in-line Array of Liquid Droplets

김충익* 송기훈**
 Kim Choong-Ik* · Song Ki-Hoon**

Abstract

The spreading fire of very small floating particles after they are ignited is fast and therefore dangerous. The research on this area has been limited to experiments and global simulations which treat them as dusts or gaseous fuel with certain concentration well mixed with air. This research attempted micro-scale analysis of ignition of those particles modeling them as liquid droplets. For the beginning, the in-line array of fuel droplets is modeled by two-dimensional, unsteady conservation equations for mass, momentum, energy and species transport in the gas phase and an unsteady energy equation in the liquid phase. They are solved numerically in a generalized non-orthogonal coordinate. The single step chemical reaction with reaction rate controlled by Arrhenius' law is assumed to assess chemical reaction numerically. The calculated results show the variation of temperature and the concentration profile with time during evaporation and ignition process. Surrounding oxygen starts to mix with evaporating fuel vapor from the droplet. When the ignition condition is met, the exothermic reactions of the premixed gas initiate and burn intensely. The maximum temperature position gradually approaches the droplet surface and maximum temperature increases rapidly following the ignition. The fuel and oxygen concentration distributions have minimum points near the peak temperature position. Therefore the moment of ignition seems to have a premixed-flame aspect. After this very short transient period minimum points are observed in the oxygen and fuel distributions and the diffusion flame is established. The distance between droplets is an important parameter. Starting from far-away apart, when the distance between droplets decreases, the ignition-delay time decreases meaning faster ignition. When they are close and after the ignition, the maximum temperature moves away from the center line of the in-line array. It means that the oxygen at the center line is consumed rapidly and further supply is blocked by the flame. The study helped the understanding of the ignition of droplet array and opened the possibility of further research.

* 중앙대학교 기계공학부

** Pennsylvania State University 기계공학과 대학원

국문 요약

부유중인 분진의 화재 및 용기 또는 파이프의 미세한 균열에서 비산되는 가연성 액체의 분무 화재의 위험성은 착화후의 고속 확산과 높은 열방출율로 인하여 매우 높은 것으로 알려졌다. 이에 대한 연구는 주로 실험적으로나 또는 거시적인 관점의 해석으로 제한되어 왔다. 본 연구는 미시적인 관점의 해석으로서 분진 및 분무를 가연성 미세 액적으로 가정하여 그의 증발과 착화에 대하여 연구하였다. 첫 단계로서 일열의 액적 배열을 계산영역으로 하여, 비정상 이차원 보존방정식들을 적용하였다. 수치해석은 일반화된 비직교 좌표계를 사용하였고, 화학반응은 Arrhenius의 법칙에 의하여 반응속도가 제어되는 일단계 반응을 고려하였다. 계산결과는 액적 주위의 온도와 반응물질의 농도분포를 시간에 따라 보여준다. 주위의 산소가 증발하는 액적의 연료와 섞이기 시작하고 착화 조건에 다르면, 급격한 발열반응이 예혼합된 가스로부터 일어나기 시작한다. 최대온도 영역은 점차적으로 액적 표면으로 이동하며 최대온도는 착화이후 급격히 상승한다. 연료와 산소의 농도는 최대온도 영역 근처에서 최소값을 보인다. 따라서 착화순간에는 예혼합연소의 양상을 띠는 것으로 나타났다. 이후에는 예혼합 가스의 소멸로 확산연소의 양상을 띠게 된다. 액적간의 거리는 중요한 요소로서 멀리 떨어져 있는 경우부터 액적간의 거리가 가까워지면 착화지연 시간이 줄어들어 착화가 빨리 일어나는 것으로 관찰되었다. 또한 착화 후에는 최대온도 영역이 일열의 중심선으로부터 멀어지는 것으로 나타났는데 이것은 중심부근의 산소가 먼저 소모되고 외부로부터의 산소공급도 화염에 의해 차단되어 나타나는 현상이다. 이번 연구로 미세적인 착화현상에 대한 이해를 높이게 되었고 추후 복잡한 배열에 대한 연구도 가능할 것이다.

1. 서 론

부유중인 분진의 화재 및 용기의 미세한 균열에서 비산되는 가연성 액체의 분무화재는 착화후의 고속 확산으로 매우 위험하다. 이에 대한 연구는 그 현상의 복잡성으로 인하여 실험적 연구 및 거시적인 관점의 해석 연구가 주를 이루어 왔다[1-2]. 분진과 분무의 연소는 그 입자들이 고체와 액체로 물질은 서로 다르나, 연소현상은 그 입자들이 외부로의 열전달에 의하여 가연 가스가 표면으로부터 분출되어 대기중의 산소와 혼합되어 착화된 후 그에 의한 방출열이 더해져 연소를 촉진시키는 것이므로 해석적으

로 동일시 할 수 있다. 따라서 본 연구는 초기 착화현상의 구체적인 해석을 위하여 미시적인 관점으로 분진 및 분무를 해석이 용이한 가연성 미세 액적으로 가정하여 그의 증발과 착화에 대하여 연구하였다. 단일 액적의 연소에 대한 모델은 Spalding[3]에 의해 시작되었다. 그는 기상과 액상이 준정상상태의 원구 형태로 가정하여 액적의 온도와 물성치가 일정할 때 액적의 직경에 대한 d^2 -law를 구하였다. Law[4]는 기상은 준정상 상태이며 액적의 온도는 내부의 신속한 혼합으로 인하여 공간적으

로는 균일하고 시간적으로만 변한다고 가정하여 해석하였는데, 기상으로부터 액적으로 열전달에 의한 액적의 가열이 비정상 연소 현상에 중요한 변수임을 보여 주었다. Prakash와 Sirignano[5]는 무한대 열전도도 모델은 액적 내부의 순환속도가 아무리 빠르더라도 액적이 소멸에 이르는 긴 시간 동안 액적 내부의 온도가 균일할 수 없기 때문에 오차가 발생할 수밖에 없는 것을 증명하였다. 그리고 열전도 모델을 사용하여 Law와 Sirignano[6]는 액적의 증발은 비정상 현상이며 기상의 온도 변화보다 액상의 온도변화가 천천히 일어나며 제한된 열전도도의 영향으로 액상의 온도가 균일하지 않음을 보여 주었다. 이 열전도 제한 모델은 액적 내부로의 열전달은 열전도에 의해서 이루어지는 것으로 가정한 것으로 액적 주위의 총체적 유동이 없고 액적이 구대칭인 경우에 잘 맞는 것으로 평가된다.

단일 입자가 아닌 미립자군이 있는 경우의 연소에 대한 실험적 연구[7, 8]는 발표된 바 있으나 이에 대한 해석적 연구는 극히 미흡하였다. 따라서 그 첫 단계로서 본 연구에서는 일열의 액적 배열(Figure 1)을 계산영역으로 하여 수치적으로 해석을 진행하였다.

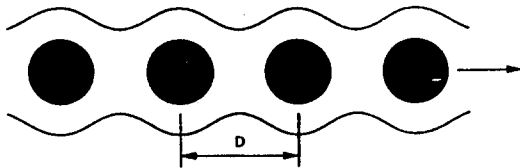


Figure 1. In-line Liquid Droplet Array.

2. 수치해석 모델

2.1 가정

액적 배열과 기상의 해석에 있어 해석 영역에 대한 기하학적 모형은 Figure 2에 나와 있는 바와 같다. 일열의 중심축에 대하여는 축대칭이며 모든 액적간의 거리가 일정하므로 액적간의 중간에 대칭면이 존재하는 것으로 생각할 수 있다. 다음은 해석을 위한 가정들이다.

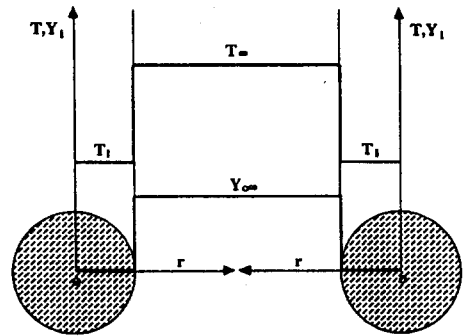


Figure 2. Schematic of Physical Model.

- (1) 액적 내부로의 열전달은 열전도에 의한 것만 고려하였으며 대류에 의한 영향은 미미한 것으로 가정하였다.
- (2) 액적의 모양은 완전한 구형이며 증발과 연소과정에서 변형은 무시한다.
- (3) 복사열전달과 점성소산은 무시한다.
- (4) 액적 내부에서의 액체의 유동은 액적이 작고 유동의 시간 스케일이 기상의 시간 스케일보다 크므로 고려하지 않는다.
- (5) Lewis수는 1로 가정한다.
- (6) Dufour와 Soret효과는 무시한다.

2.2 보존방정식

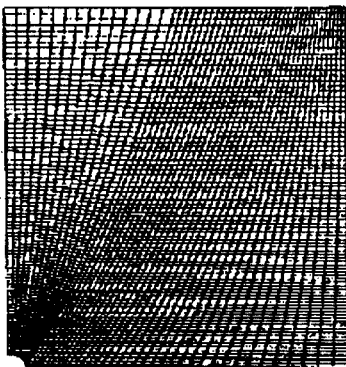
액적과 기상에 대한 이차원적인 보존방정식은 액적과 기상으로 나누어 도입되었다. 액상 ($r > R(t)$)에 대하여는 완전한 구형이고 변형되지 않는 것으로 가정하였으므로 좌표계를 도입하였다. 에너지 보존식은 다음과 같다.

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \nabla^2 T \quad (2.1)$$

여기서,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (2.2)$$

기상에 대하여는 ($r > R(t)$), Figure 3에 나타낸 바와 같이 비직교 좌표계를 이용하여 해석하였다. 여기에 적용된 보존방정식은 다음과 같다.



Spherical particle

Figure 3. Non-orthogonal Grid System.

연속방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (J\rho) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [Ja_m^j (\rho U_m)] = 0 \quad (2.3)$$

여기서 U_i 는 Cartesian 좌표계의 속도이며 J 는 비직교좌표계로의 변환에 의한 Jacobian이다.

α_m^j 은 base vector e^j 와 Cartesian unit vector i_m 의 contravariant의 내적으로 다음과 같이 나타낸다.

$$\alpha_m^j = \vec{i}_m \cdot \vec{e}^m \quad (2.4)$$

운동량 보존방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (J\rho U_i) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [Ja_m^j (\rho U_m U_j - \tau_{mi} + P\delta_m^i)] = 0 \quad (2.5)$$

에너지 보존방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (J\rho T) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [Ja_m^j (\rho U_m T - \Gamma_\phi \frac{\partial T}{\partial x^n} \alpha_m^n)] = S \quad (2.6)$$

여기서 $\Gamma_\phi = \frac{\lambda}{C_P}$, $S_\phi = \nu_F M_F Q \dot{\omega}$

화학종 보존방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (J\rho Y_i) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [Ja_m^j (\rho U_m Y_i - \Gamma_\phi \frac{\partial Y_i}{\partial x^n} \alpha_m^n)] = S_i \quad (2.7)$$

$i = O, F$

여기서 $\Gamma_\phi = \rho D$, $S_\phi = \nu_F M_F \dot{\omega}$, $\dot{\omega}$ 는 화학종 i 의 반응속도이며 일방향의 2차원적인 Arrhenius 식을 도입하였다.

$$\dot{\omega} = \frac{B \rho^2 Y_O Y_F}{M_O M_F} \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right) \quad (2.8)$$

초기 조건은 Figure 2에 나와 있는 것과 같고 경계조건은 다음과 같다.

액적의 중심에서 종속변수인 온도의 gradient

는 구대칭에 의하여 다음과 같다.

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{at} \quad r=0 \quad (2.9)$$

액적의 표면은 기상과 액상의 경계를 이루는 면으로서 에너지와 질량 전파가 서로 일어나는 곳이다.

이 경계면에서 질량보존식을 적용하면,

$$u_s = \frac{dR}{dt} \left(1 - \frac{\rho_l}{\rho}\right) \quad (2.10)$$

또한 이 경계면에서 에너지보존식과 화학종의 보존식을 적용하면 다음과 같이 나타내어진다.

$$\rho_l L \frac{dR}{dt} = k_l \frac{\partial T}{\partial r} - k \frac{\partial T}{\partial r} \quad (2.11)$$

$$-\rho D \frac{\partial Y_F}{\partial r} = \rho u_s (1 - Y_{FS}) \quad (2.12)$$

$$\rho D \frac{\partial Y_O}{\partial r} = \rho u_s Y_{OS} \quad (2.13)$$

표면에서의 연료의 농도(Y_{FS})를 계산하기 위하여, 증발된 연료와 공기가 연속적으로 상평형 상태에 있고 이는 Clausius-Clapeyron식으로 다음과 같이 나타낼 수 있다[9].

$$Y_{FS} = \exp\left[-\frac{M_F L}{R_u T_b} \left(\frac{T_b}{T_s} - 1\right)\right] \quad (2.14)$$

액적들 사이에서는 대칭에 의한 경계조건이 주어졌으며, 액적으로부터 멀리 떨어진 far field($r \rightarrow \infty$)에서는 초기에 주어진 온도와 농도로 유지되는 것으로 해석하였다.

3. 결과 및 토론

수 많은 입자로 구성되어 있는 분진의 착화 및 연소특성을 이해하기 위한 중간단계로서 고온의 정체환경하에 놓인 액적의 증발과 연소현상에 대해 비직교좌표계를 이용하여 서로

연계되어 있는 질량, 운동량, 에너지, 그리고 화학종 보존방정식들을 충분히 작은 시간간격으로 나누어 반복적으로 해를 구하였다. 액적에서의 에너지 보존방정식은 TDMA방법을 이용하였고 기상의 경우 모든 지배방정식을 차별화시켜 최종적으로 5개의 대각렬을 갖는 행렬식을 만든 후 이를 SIP(Strongly Implicit Procedure)방법으로 해를 구하였다. 해석에 이용한 액적은 n-heptane을 사용하였으며 이에 대한 물리 화학적 물성치는 Table 1에 나와 있다. 액적의 직경은 $100 \mu\text{m}$, 주위환경은 1기압, 1000K로 가정하여 해석하였으며 기상에서의 속도, 온도, 농도장의 시간에 따른 변화를 결과로 얻었으며 또한 액상에서의 시간에 따른 온도장을 구하였다.

Table 1. Physical and Chemical Properties of n-heptane.

	Value
ρ_l	680 kg/m^3
λ_l	0.126 J/m sec K
B	$5108 \text{ m}^3/\text{kmol sec}$
c_{pl}	2142 J/kgK
E	8.4107 J/kmol
L	316680 J/kg
Q	4.473107 J/kg
T_b	371.4 K

Figure 4는 액적 표면에서 증발하고 있는 연료증기의 속도 벡터를 표시하고 있다. 액적 표면에서의 연료증기의 증발은 액적 표면에 수직한 방향으로만 이루어지고 그러한 연료증기는 주위로 퍼지면서 고온의 산소를 포함한 공기와 섞이게 된다.

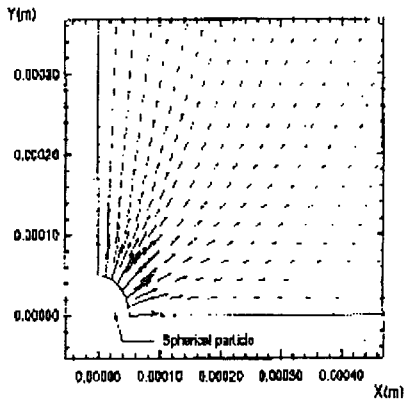
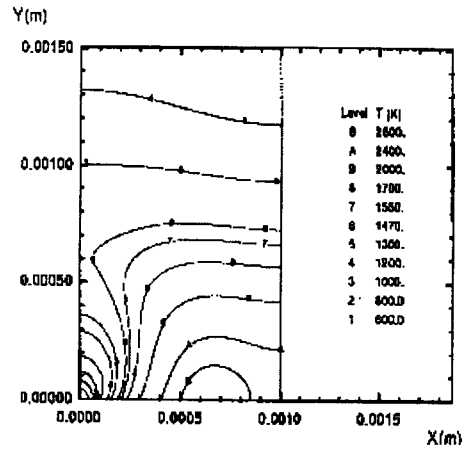
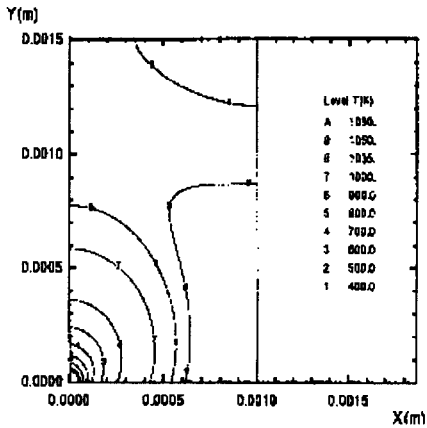


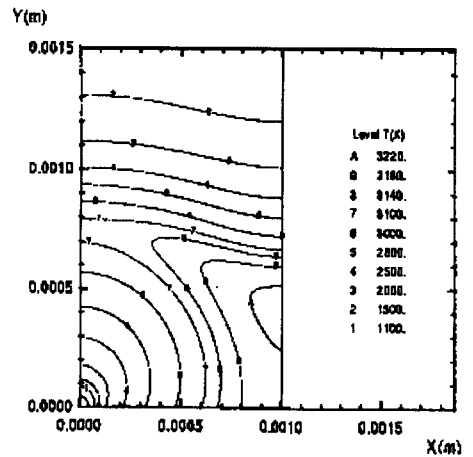
Figure 4. Velocity Profile of Gas Vapor.



(c)



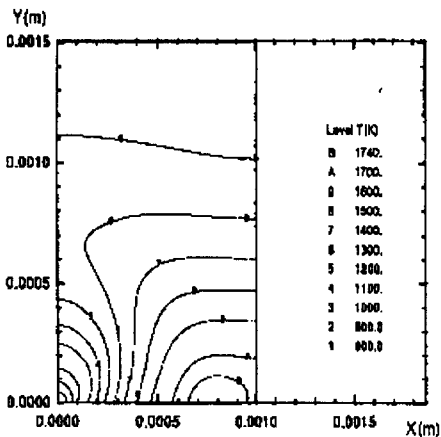
(a)



(d)

Figure 5. Contour Plot of Gas Phase Temperature with Time.

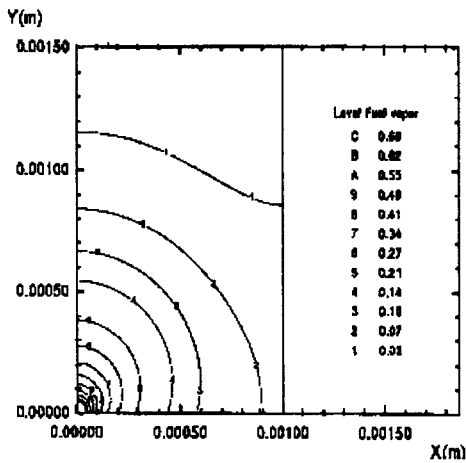
(a) 2.2 msec (b) 2.9 msec (c) 2.98 msec (d) 3.2 msec



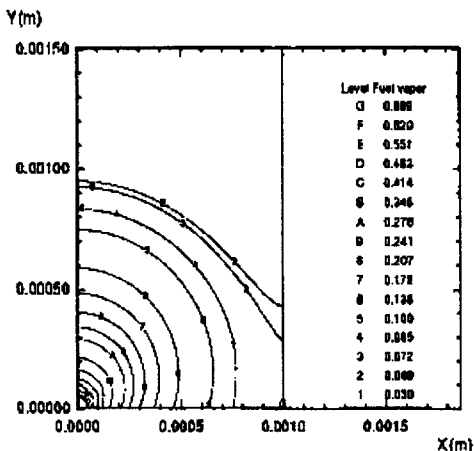
(b)

Figure 5는 착화, 연소하고 있는 액적 주위의 유동장에 의하여 영향을 받는 온도장을 나타내고 있다. Figure 5(a)를 보면 아직 온도가 높은 부분이 없고 액적 표면에서의 blowing 효과로 인해 등온선이 비교적 고르게 분포되어 있다. Figure 5(b)는 $t=2.9$ msec에서의 온도장을 보여주는데 온도가 1800K를 넘는 부분이 인접해 있는 다른 액적의 영향을 받는 동쪽 경계 근처에서 발생하였으며 본격적으로 착화

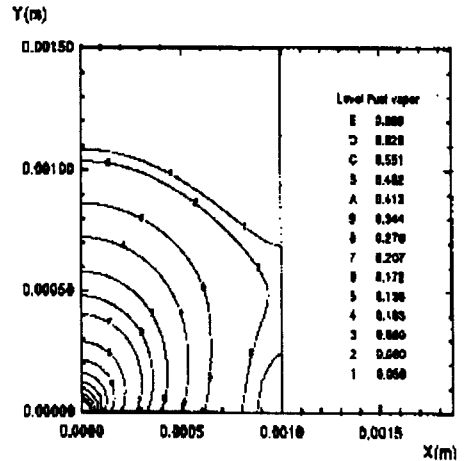
가 시작되었음을 나타낸다. Figure 5(c)는 $t=2.98$ msec에서의 온도장의 분포이다. 불과 0.08 msec 사이에 온도가 1000K가량 급격히 상승하면서 착화지점이 액적 표면 쪽으로 접근하였음을 알 수 있다. 이와 같이 연료 증기와 산화제의 예혼합 기체에 의한 착화 및 연소가 진행되어 $t=3.1$ msec가 넘으면(Figure 5(c)) 연소과정은 확산에 의해 지배되면서 등온선은 다시 고르게 분포되고 있음을 알 수 있다.



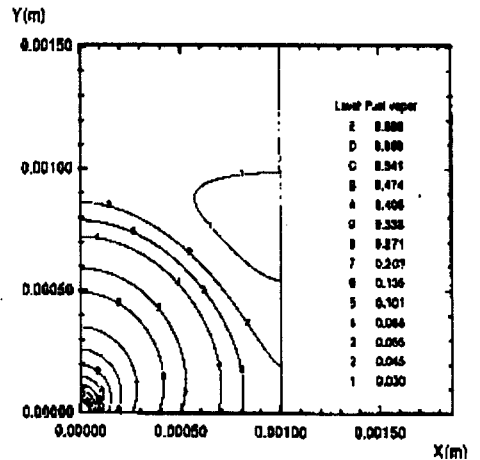
(a)



(b)



(c)

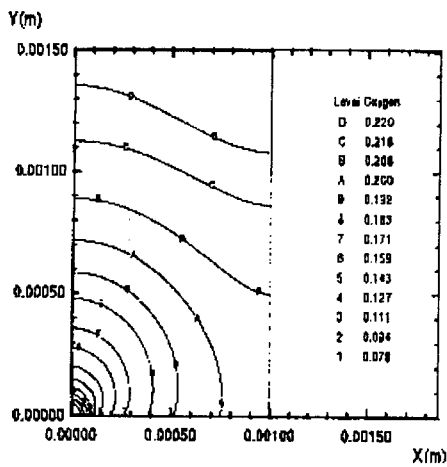


(d)

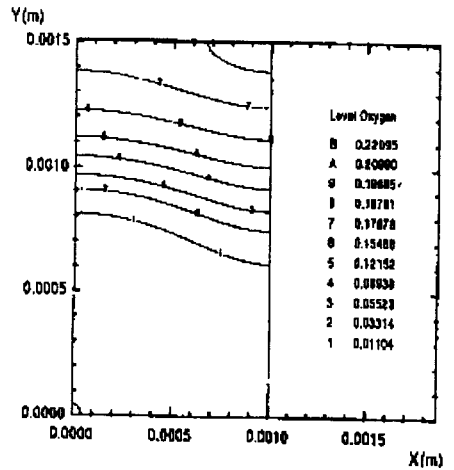
Figure 6. Contour Plot of Fuel Mass Fraction in the Gas Phase with Time.

(a) 2.2 msec (b) 2.9 msec (c) 2.98 msec (d) 3.2 msec

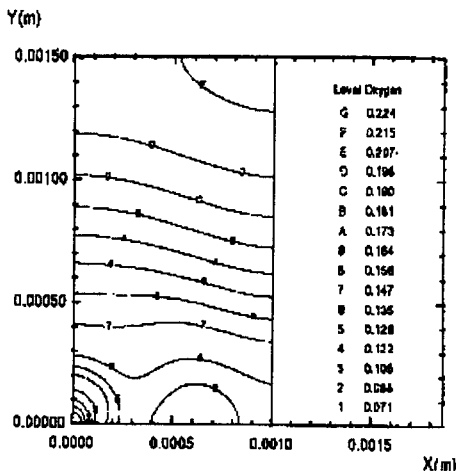
Figure 6와 7은 연료 증기와 산소의 질량분율을 시간에 따라 나타낸 결과이다. 본격적으로 착화와 연소가 일어나기 전까지 연료 증기는 계속적으로 증발하여 주위의 산화제와 혼합되게 된다. 이렇게 미리 혼합되어져 있는 예혼합 기체영역에서 착화와 연소가 시작되면서 착화지점에서의 연료 증기와 산화제의 농도가



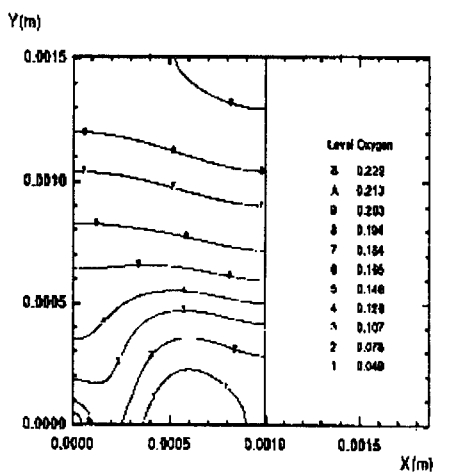
(a)



(d)



(b)



(c)

Figure 7. Contour Plot of Oxidizer Mass Fraction in the Gas Phase with Time.

(a) 2.2 msec (b) 2.9 msec (c) 2.98 msec (d) 3.2 msec

매우 희박해진다. 그러므로 그 지점은 산화제와 연료 증기의 분포가 매우 낮은 환경이 되며 계속해서 증발하는 연료증기에 의해 화염은 바깥 쪽으로 밀려 나면서 확산화염을 이루게 된다.

Figure 8는 기상을 30° 각도로 자른 단면에서의 시간에 따른 온도분포를 나타낸 것으로 단일액적의 결과[10]와 유사한 분포를 보이고 있다. Figure 9는 최고 온도의 변화에 대한 단일액적의 결과[10]와 본 연구의 결과를 비교한 것이다. 단일액적에 비해 액적배열의 경우가 점화지연 시간이 짧은 것으로 계산되었는데 이는 액적간의 상호작용에 의하여 착화농도가 생성되는 영역이 생기는데 걸리는 시간이 짧은 것으로 생각된다. Figure 10는 액적이 착화, 연소하는 과정 중에 액적표면과 중심에서의 시간에 따른 온도변화를 나타낸다. 외부 온도장과 비교해 볼 때 착화가 발생한 후 상당한 시간이 지났음에도 액적 표면과 중심의 온도차가 존재하고 있음을 보여준다. 이로부터 무한 열전도도 모델은 오차를 내포하고 있음을 확인할 수 있으며 액적 내부의 온도장은 상당시간 비정상 상태를 유지하는 것을 알 수 있다.

4. 결 론

고온의 정체환경하에 놓인 액적 배열의 증발과 착화 및 연소현상에 대해 비직교좌표계를 이용하여 해석하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- (1) 고온의 주위 기체로부터의 열전달에 의해 증발한 연료 증기는 외부의 산화제와 섞이게 되고 이 예혼합 기체(premixed gas)의 발열반응이 시작되면서 착화가 일어나게 된다. 매우 짧은 시간동안 급격한 온도 상승이 일어나며 착화지점에서 연료증기와 산화제의 농도는 희박하게 되어 거의 0(zero)에 가까워진다. 그러므로 초기의 점화화 연소현상은 예혼합 기체에 의해 발생하지만 그 이후에는 확산에 의해 연소과정이 이루어짐을 알 수 있다.
- (2) 단일 액적의 연소와 비교하여 액적간의 상호 작용에 의하여 착화시간이 단축되었다.
- (3) 착화가 시작되고 기체의 온도가 급격히 상승한 후 액적내의 온도 분포를 계산한 결과 시간이 흐를수록 액적내로의 열전도율이 감소하고 착화가 일어난 후에도 상당기간동안 액적내의 온도 분포가 불균일하다. 이는 기상에서의 열전달에 비해 액적내로의 열전달이 매우 느림을 의미하며 이는 액적내의 온도분포가 공간적으로는 균일하고 시간에 따라서만 변한다는 무한대 전도 모델의 가정은 오류를 포함하고 있음을 나타낸다.
- (4) 수많은 미립자가 부유하는 분진 연소 및 가연성 액체 연료의 비산 화재 현상을 해석하기 위한 첫 단계로서 더욱 복잡한 액적 배열에 대한 해석을 가능케 하는 기초 기술과 결과를 얻게 되었다.

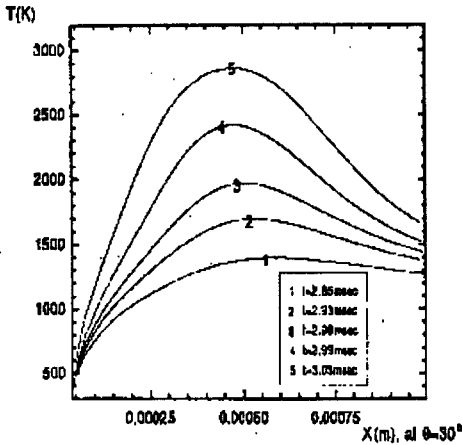


Figure 8. Variation of Temperature Profile with Time.

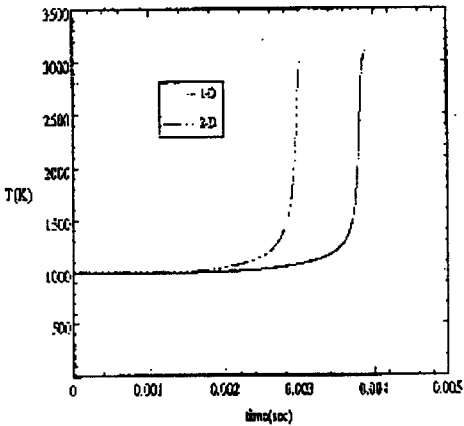


Figure 9. Comparison of Single Droplet and Droplet Array for Maximum Temperature Variation.

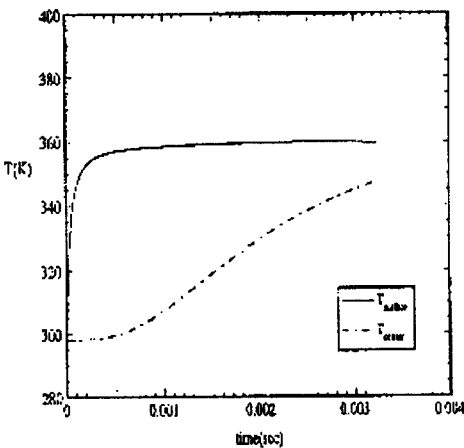


Figure 10. Variation of Droplet Surface and Center Temperature with Time.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단 지원과제 KOSEF (핵심)951-1007-052-2의 연구결과로 관계자 여러분께 감사드립니다.

참고문헌

- 1) 小野尙道, “미립자군의 화염전파속도에 관한 연구”, 일본 東北大學 機械工學部 碩士 논문, 1993.
- 2) 현성호, 김정환, 이창우, “Hartman식 장치에 의한 Carbon Black 분진의 부유중 폭발 위험성 평가”, 한국화재소방학회지 Vol. 12, No. 4, 1998.
- 3) D.B. Spalding, Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 847-864, 1953.
- 4) C.K. Law, Unsteady Droplet Combustion with Droplet Heating, Combustion and Flame, Vol. 26, pp. 17-22, 1976.
- 5) S. Prakash and W.A. Sirignano, Liquid Fuel Droplet Heating with Internal Circulation, Int’nl J. of Heat and Mass Transfer, Vol. 28, pp. 175-186, 1977.
- 6) C. K. Law and W.A. Sirignano, Unsteady Droplet Combustion with Droplet Heating - II : Conduction Limit, Combustion and Flame Vol. 28, pp. 175-186, 1977.
- 7) T. Kadowaki, K. Maruta, S. Hasegawa, H. Kobayashi, and T. Niioka, 微小重力場에서의 液滴의 着火實驗”, 日本 Microgravity應用學會誌, Vol. 14, No. 1, 1997.
- 8) 박정, H. Kobayashi, T. Niioka, “일차원

액적 배열의 화염 퍼짐에 있어서 연료의 혼합 효과에 관한 연구”, 한국연소학회지, Vol. 3, No. 2, 1998.

- 9) S. R. Turns, “An Introduction to Combustion, Concepts and Applications,” McGraw-Hill, Inc., 1996.
- 10) 송기훈, “연료액적의 비정상 증발과 연소에 관한 수치해석적 연구”, 중앙대학교 기계공학과 석사논문, 1995.

NOMENCLATURE

a	thermal diffusivity (m ² /s)
B	frequency factor (m ³ /kmole-sec)
C_p	constant pressure specific heat (kJ/kg-K)
D	diffusion coefficient (m ² /s)
e^i	contravariant base vectors
e_i	covariant base vectors
E	activation energy (kJ/kmole)
L	latent heat (kJ/kg)
M	molecular weight (kg/kmole)
P	pressure (Pa)
Q	heat of reaction (J/kg)
R	droplet radius (m)
R_u	universal gas constant (kJ/kmol-K)
r	radial distance (m)
u	velocity (m/s)
T	temperature (K)
t	time (s)
U	cartesian velocity component
x^j	non-orthogonal coordinate

Y_i mass fraction

y^m cartesian coordinate

Greek

ρ density (kg/m³)

$\dot{\omega}$ reaction rate (kmol/m³-sec)

λ conductivity (kJ/m-sec-K)

τ shear stress

Subscript

F fuel

i oxygen or fuel

l liquid

s surface

ϕ scalar