

## DME 액적의 증발특성 해석

유용욱<sup>1)</sup> · 류종혁<sup>1)</sup> · 김용모<sup>\*2)</sup>

한양대학교 대학원<sup>1)</sup> · 한양대학교 기계공학부<sup>2)</sup>

### Numerical Study on the Droplet Vaporization Characteristics of Dimethyl Ether(DME) Droplet

Yongwook Yu<sup>1)</sup> · Jongheuk Ryu<sup>1)</sup> · Yongmo Kim<sup>\*2)</sup>

<sup>1)</sup>School of Mechanical Engineering, Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

<sup>2)</sup>Department of Mechanical Engineering, Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

(Received 11 July 2003 / Accepted 27 January 2004)

**Abstract** : The present study is numerically investigated for the high pressure effects on the vaporization process of the DME droplet. The evaporation rate of DME droplets is about twice that of dodecane droplets at the same chamber condition. The DME droplet vaporization characteristics is parametrically studied for the wide range of the operating conditions encountered with the high pressure combustion process.

**Key words** : Droplet vaporization(액적증발), Equation of state(상태방정식), Phase equilibrium(상평형), DME(디메틸에테르)

#### Nomenclature

$B_M$	: mass transfer number
$B_T$	: heat transfer number
$c_p$	: specific heat at constant pressure
$f$	: fugacity, bar
$h$	: enthalpy, cal/g
$L$	: latent heat of vaporization, cal/g
$\dot{m}$	: droplet mass evaporation rate, g/s
$P$	: pressure, bar
$P_r$	: reduced pressure, bar
$T$	: temperature, K
$X_i$	: mole fraction of the i-th species
$Y_i$	: mass fraction of the i-th species

$\rho$  : mass density, g/cm<sup>3</sup>

#### Subscripts

$c$	: critical state
$F$	: fuel vapor
$L$	: liquid phase
$s$	: droplet surface

#### 1. 서론

DME(dimethyl ether: 화학식 CH<sub>3</sub>-O-CH<sub>3</sub>)는 가장 간단한 에테르이다. 또한 분자량도 46g/mole로 작은 편에 속한다. 하지만 분자량이 작은 다른 연료들과는 다르게 DME는 자발화 온도가 낮아서 압축착화 엔진에 적당하다. 무엇보다도 DME의 큰 장점은 C-C 연결이 없고, 산소원자의 함유량이 크다는 것

\*To whom correspondence should be addressed.  
ymkim@hanyang.ac.kr

이다. 이로 인해 DME를 연료로 사용한 연소에서는 soot을 거의 배출하지 않을 뿐만 아니라, NO<sub>x</sub> 발생량도 디젤연료에 비해 20%나 급감시킬 수 있다. 또한 세탄가가 높고 연료특성도 좋기 때문에 새로운 연료로서 많은 연구가 활발히 이루어지고 있다.<sup>1,2)</sup> 그러나 DME는 기존 디젤연료에 비해 매우 빠르게 증발하기 때문에 분무침투 길이가 짧아 공기와 연료의 혼합이 원활하지 못한 단점을 가지고 있다.

일반적으로 고압상태에서의 연료액적의 증발현상을 잘 모사할 수 있는 증발모델의 개발은 고압상태에서 분무 연소과정의 예측을 위한 선결과제이다. 따라서 본 연구에서는 DME 액적의 증발시 고압상태에서 일어날 수 있는 실제 기체의 거동, 온도, 압력에 따른 상태량 및 증발잠열의 변화, 주위기체가 액적으로 용해되는 현상 등, 고압상태에서 액적 증발특성에 중요한 영향을 미치는 효과들을 고려하여 수치적으로 연구하였다.

## 2. 지배방정식

액적증발모델을 개발함에 있어서 본 연구에서 기본적으로 설정한 가정들은 다음과 같다.

(1) 연료액적은 완전한 구의 연속체라고 가정한다. (2) 기체상태는 구대칭으로 해석하고 여기에 대류효과를 고려하기 위하여 막이론에 근거한 수정관계식을 사용한다. (3) 액체상태도 역시 구대칭으로 해석한다. (4) 기상 - 액상의 경계면은 상평형 조건에 의해서 계산한다. (5) 기체상태는 매순간마다 주어진 경계조건에 대해 정상상태의 구조로 조절되는 준정상 기체상태로 가정한다. (6) 기체상태의 평균상태량을 계산하기 위해서는 1/3법칙을 적용하고, 액체상태의 경우 시간과 공간에 따라 변하는 상태량을 고려한다. (7) 주위의 압력은 일정하다고 가정한다. (8) 복사의 영향은 무시한다. (9) Dufour 효과나 점성소산은 무시한다.

### 2.1 기체상태 지배방정식

액적의 증발시 대류 영향을 고려했을 때 열전달 및 물질전달은 다음의 식에 의해 결정된다.

$$Nu^* = 2 + \frac{(Nu_0 - 2)}{F(B_T)} \quad (1)$$

$$Sh^* = 2 + \frac{(Sh_0 - 2)}{F(B_M)} \quad (2)$$

강제대류나 자연대류가 없을 경우라 하더라도 증발하는 액적의 경우는 반지름방향의 유동이 항상 존재하게 된다. 막이론(film theory)의 입장에서 보면 이러한 Stefan유동은 막의 두께를 증가시키는 역할을 한다. Sirignano<sup>3)</sup>는 이러한 막두께의 변화가 Reynolds수나 Prandtl 혹은 Schmidt 수의 함수라기보다는 Spalding전달수  $B$ 에 더 큰 영향을 받는다고 하였다.

$$F(B) = (1 + B)^{0.7} \frac{\ln(1+B)}{B} \quad (3)$$

본 연구에서는 증발이 없는 경우, 구형입자와 유동유체사이의 대류에 의한 열 및 질량전달에서의 Nusselt 수와 Sherwood 수를 Ranz와 Marshall의 관계식으로부터 계산하였다.

$$\begin{aligned} Nu_0 &= 2 + 0.6 \sqrt{Re} Pr^{1/3} \\ Sh_0 &= 2 + 0.6 \sqrt{Re} Sc^{1/3} \end{aligned} \quad (4)$$

여기서 계산에 사용된 열역학적 및 물리적 상태량들은 1/3법칙을 따라 막에서의 기준온도 및 농도에서 계산된 값을 사용하나, Reynolds 수에 사용되는 밀도만은 자유유동조건에서 계산한다.

또한 막이론에 의해서 다음의 증발률식을 얻을 수 있다.

$$\dot{m} = 2\pi r_s \rho_g D_g Sh^* \ln(1 + B_M) \quad (5)$$

$$\dot{m} = 2\pi r_s \frac{k_g}{C_{p_f}} Nu^* \ln(1 + B_T) \quad (6)$$

여기서 첨자 's'는 액적의 표면을 나타내고, 'f'는 기체연료의 값이라는 것을 나타낸다. 여기서,  $B_M$ ,  $B_T$ 는 각각 Spalding의 질량전달수 및 열전달수로 다음과 같이 정의된다.

$$B_M = \frac{Y_{F_i} - Y_{F_\infty}}{1 - Y_{F_i}} \quad (7)$$

$$B_T = \frac{C_{p_f}(T_\infty - T_s)}{L(p, T_s) + Q_L/\dot{m}} \quad (8)$$

여기서  $L(p, T_s)$ 은 연료의 증발잠열을 나타내고,  $Q_L$ 은 액적 속으로 전달된 열로 다음과 같다.

$$Q_L = 4\pi r_s^2 \left( k \frac{dT}{dr} \right)_s \quad (9)$$

식 (5)와 식 (6)의 두 식으로부터 Spalding의 질량 전달수  $B_M$ 과 열전달수  $B_T$  사이에 다음의 관계식이 성립함을 알 수 있다.

$$B_T = (1 + B_M)^\phi - 1 \quad (10)$$

where,  $\phi = \frac{C_{p_f} \rho_g D_g}{k_g} \frac{Sh^*}{Nu^*}$

식 (10)과 식 (1), (2)의 반복계산을 통해 수렴된 전달수로부터 Sherwood 수 및 Nusselt 수가 계산되면 액적의 증발률은 식 (5)로부터 얻을 수 있고, 또 기체 상태에서 Stefan유동 및 대류효과를 포함하는, 액적 표면으로의 열전달률을 다음 식으로 계산할 수 있다.

$$Q_g = 2\pi r_s k_g (T_\infty - T_s) Nu \quad (11)$$

액적표면에 전달된 열의 일부는 액적의 증발열로 사용되고 나머지는 액적내부로 전달되어 액적의 가열에 관여하게 되므로 다음과 같이 액적내부로의 열전달률을 계산할 수 있다.

$$Q_L = Q_g - \dot{m} h_{vap} \quad (12)$$

### 2.2 액체상태 지배방정식

내부유동이 없는 경우 액적의 질량과 액적내부온도분포는 다음의 지배방정식으로 서술된다.

질량보존방정식 :

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{4}{3} \pi r_s^3 \rho_L \right) = - \dot{m} \quad (13)$$

에너지방정식:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_L \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \left( \frac{2}{r} + \frac{1}{k} \frac{\partial k}{\partial r} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \right] \quad (14)$$

초기조건 및 경계조건:

$$T(r, 0) = T_o(r), \quad \left( \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \quad (15)$$

$$4\pi r_s^2 \left( k \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=r_s(t)} = Q_L \quad (16)$$

반지름의 변화율은 다음 식에 의해서 밀도의 변화와 증발량을 고려하게 된다.

$$\frac{dr}{dt} = - \frac{1}{\rho(r_{s,t}) r_s^2} \left( \frac{\dot{m}}{4\pi} + \int_0^{r_s(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} r^2 dr \right) \quad (17)$$

여기서 우변의 첫째항은 증발에 의한 반지름의 감소를 나타낸 것이고 두 번째 항은 밀도의 변화에 의한 반지름의 변화를 고려한 것이다.

### 2.3 상평형 조건

각 성분에 대한 증기 - 액체 평형조건은 다음과 같이 기술할 수 있다.

$$T^v = T^l; \quad P^v = P^l; \quad f_i^v = f_i^l \quad (18)$$

여기서 첨자  $v, l$ 은 각각 증기와 액체상태를 나타내고  $f_i$ 는  $i$ -성분의 퓨가시티로 다음 관계식으로부터 계산할 수 있다.

$$R_u T \ln \left( \frac{f_i}{X_i P} \right) = \int_V^\infty \left\{ \left( \frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_j} - \frac{R_u T}{V} \right\} dV - R_u T \ln Z \quad (19)$$

여기서,  $X_i$ 는  $i$ -성분의 몰분율,  $V$ 는 전체부피, 그리고  $Z$ 는 압축계수이다.

### 2.4 증발엔탈피

순수 물질에 대한 증발 잠열과 혼합기의 증발 엔탈피 간의 차이는 Peng-Robinson 상태방정식을 사용하여 결정한다. 상변화에 필요로 하는 에너지는 다음과 같이 나타난다.

$$\Delta h = \sum_{i=1,2} Y_i^v \bar{H}_i(T, P, Y_i^v) - \sum_{i=1,2} Y_i^l \bar{H}_i(T, P) \quad (20)$$

$\bar{H}_i$ 는 성분  $i$ 의 부분 엔탈피이고, 같은 온도에서의 이상기체 엔탈피  $H_i^0$ 는 다음의 열역학적 관계에 의해서 나타난다.

$$(\bar{H}_i - H_i^0)_T = - R_u T^2 \left( \frac{\partial \ln \phi_i}{\partial T} \right) \quad (21)$$

$\phi_i$ 는 퓨가시티 계수로서 아래와 같이 정의 된다.

$$\phi_i = \frac{f_i}{Y_i P} \quad (22)$$

그 밖에 기체상태 및 액체상태에서 각 성분의 상태량은 온도와 압력의 함수로써 계산하였다. 혼합물의 상태량은 적절한 혼합법칙<sup>4)</sup>을 사용하여 계산하였다.

### 3. 해석 결과 및 고찰

DME는 대기압의 상온에서 기체상태로 존재하고, 또한 증발이 매우 빠르기 때문에 증발과정을 실험을 통해 측정한다는 것이 매우 어렵고, 그래서 현재까지 DME 액적증발에 대한 실험결과를 얻을 수가 없다. 따라서 Teng et al.의 수치해석 결과<sup>1)</sup>와 비교를 통해서 DME의 증발 특성을 알아보려고 한다.

먼저 고압의 영향을 제대로 예측하는지 확인하기 위하여 압력의 영향을 많이 받는 액상과 기상간의 상평형 및 증발엔탈피를 계산하여 보았다. Fig. 1은  $P_r=0.5, 1.0, 1.5$  ( $P_c=54\text{bar}$ )에 대해서 DME와 질소간

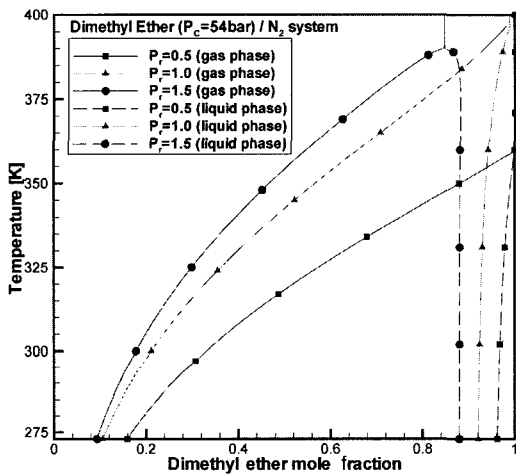


Fig. 1 High pressure phase equilibrium, DME/nitrogen system

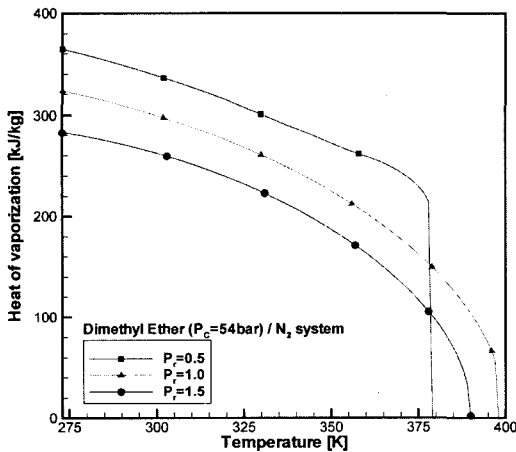


Fig. 2 Effect of pressure on latent heat of vaporization of DME in an equilibrium mixture of DME and nitrogen

의 상평형을 온도에 따라 나타내었다. 여기서 왼쪽 부분이 기체상태이고, 오른쪽 부분이 액체상태이다. 온도가 올라감에 따라 기체량이 증가하는 것을 알 수 있으며, 압력이 임계값을 넘지 않는 상태에서는 액체가 모두 기체로 변하는 것을 잘 나타내고 있고,  $P_r=1$ 일 때는 임계온도( $T_c=400.1\text{K}$ )도 제대로 예측하고 있다. 또한 임계압력을 넘어선 상태 ( $P_r=1.5$ )에서는 액체 상태와 기체 상태가 붙는 것을 볼 수 있는데 이는 임계상태에 도달하여 액상과 기상의 구분이 없어졌음을 뜻한다. Fig. 2는 온도변화에 따른 증발엔탈피를  $P_r=0.5, 1.0, 1.5$ 에 대해서 나타내 보았다. 증발엔탈피란 액체가 기화할 때 필요한 에너지를 말하는 것으로 온도 또는 압력이 올라감에 따라 작아지고, 임계상태를 넘어서게 되면 액상과 기상의 구분이 없어지므로 0이 된다. 저압에서는 압력의 영향이 거의 무시될 정도이지만 압력이 올라감에 따라 오차를 많이 내포하게 되므로 퓨가시티를 이용하여 증발엔탈피를 계산하여야 한다. 온도와 압력이 증가함에 따라 증발엔탈피는 점점 줄어들다가 임계상태에 도달하거나, 끓는점에 도달하게 되면 증발엔탈피는 0이 된다.

위의 고압에서의 계산의 정확성을 바탕으로 Teng et al.의 수치결과와 비교하여 보았다. 0.05mm 지름을 가진 초기온도 293K의 DME 액적이 40bar, 773K의 질소 기체장에 초기상대속도 1m/s의 속도로 낙하한다고 가정하여 저압모델과 고압모델을 이용하여 계산하였다.<sup>5)</sup> 여기서 모델 구분은 상평형 계산시 Clausius-Clapeyron 방정식을 이용했는지 퓨가시티를 이용했는지에 따라 구분한다. 일반적으로 압력이 올라감에 따라 주위 기체가 액적내부로 녹아들어가는 현상이 발생한다. 고압모델은 이를 예측해낼 수 있는데 반하여 저압모델은 액적내부에는 오직 연료성분만 존재한다고 가정한다. 모든 계산에 대해서 액적내부에는 51개의 격자를 사용하였다. Fig. 3과 같이 두 모델은 증발시간에는 큰 차이가 없지만 습구온도에서 큰 차이를 나타낸다. 습구온도란 증발이 거의 끝났을 때의 액적의 온도를 말한다. Teng et al.은 0.005, 0.01, 0.015mm 지름을 가진 293K의 DME 액적이 40bar, 773K의 기체장에서 증발한다는 조건에서 355K의 습구 온도를 얻었다. 저

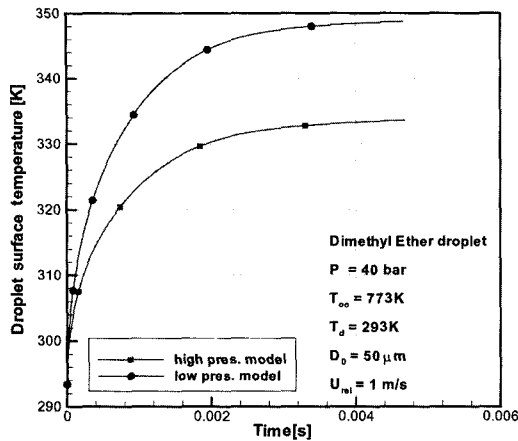


Fig. 3 Comparison of low pressure model and high pressure model for droplet surface temperature history of DME droplet evaporating in nitrogen atmospheres

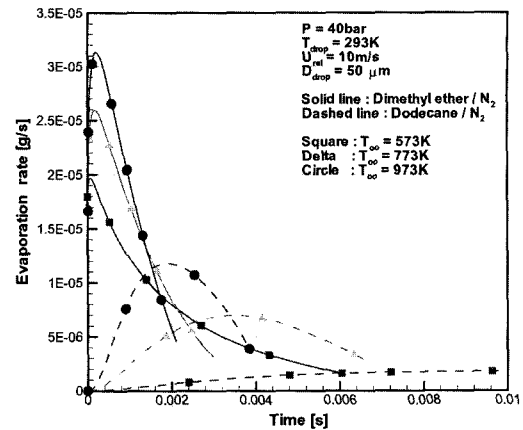


Fig. 5 Calculated evaporation rates of DME and dodecane droplets evaporating in nitrogen atmospheres at different temperatures

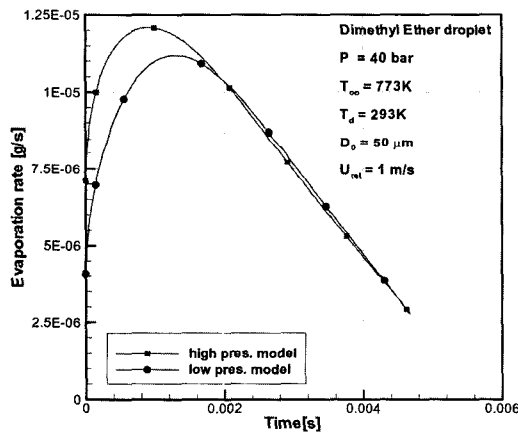


Fig. 4 Comparison of low pressure model and high pressure model for evaporation rate history of DME droplet evaporating in nitrogen atmospheres

압모델은 Teng et al.의 결과와 비슷한 온도로 습구 온도를 높게 예측함에 반해서 고압모델은 보다 낮게 예측하고 있다. 이는 상평형을 정확히 예측하지 못함으로 인해 상평형 결과에 매우 민감한 액적내부로의 열전달량을 제대로 계산하지 못한 결과로 사료된다. Fig. 4에서는 위 결과를 잘 뒷받침 해준다. 저압모델은 열전달량을 작게 예측하다보니 증발량이 초기에는 작게 나타난다. 이에 비해서 고압모델은 액적증발이 증발 초기에 주로 일어남을 보여주고 있다. 이러한 결과는 액적 개개로 볼 때는 양이 적을지 몰라도 엔진 내에서의 분무 연소 차원에서

볼 때는 연소결과에 많은 차이를 가지고 올 수 있다. 즉, 액적 하나 하나라도 제대로 예측을 하여야 분무 연소라는 큰 시스템도 비교적 정확히 예측할 수 있는 것이다.

이번에는 디젤 연료와 비슷한 특성을 가지는 도데칸 ( $T_c=658.2K$ ,  $P_c=18.2bar$ )과 비교를 통하여 DME의 증발 특성을 알아보았다. 40bar 압력의 질소 기체장에 지름 0.05mm 연료 액적을 10m/s 속도로 낙하시킨다고 가정하였다. 이때 기체장의 온도를 573K, 773K, 973K로 변화시켜, 온도에 따른 특성을 알아보았다. Fig. 5는 시간에 따른 증발량을 나타내고 있다. 여기서 573K에서 증발하는 도데칸의 경우는 증발시간이 0.025s이지만 편의를 위해 그림을 생략하였다. 도데칸의 경우는 초기에 액적가열 시간이 지난 후 증발량이 증가하지만 DME는 초기부터 폭발적으로 증발이 일어나는 특성을 보이고 있다. 증발량의 최대값도 거의 두 배 이상 나타나고 있다. 이는 임계온도가 디젤연료의 끓는점보다도 낮고, 같은 온도일 때 도데칸보다 표면장력도 작은 DME의 특성에 기인한다. Fig. 6은 이런 특성을 잘 나타내고 있다. 도데칸은 주위 온도가 낮은 상태 ( $T_\infty=573K$ )를 제외하고는, 액적으로 들어간 열이 전부 액적증발에 사용되는, 열평형상태에 도달하지도 못한 채 증발이 끝나고 있는데 반해 DME는 증발이 시작되면서 바로 열평형상태 즉, 습구온도에 도달하여 액적내부로 들어온 열량을 모두 증발에 사용하므로 증

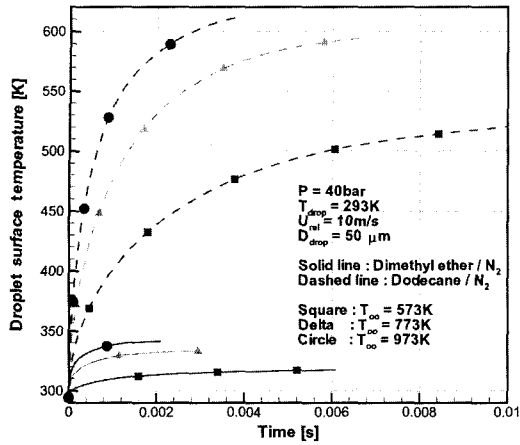


Fig. 6 Calculated droplet surface temperature histories of DME and dodecane droplets evaporating in nitrogen atmospheres at different temperatures

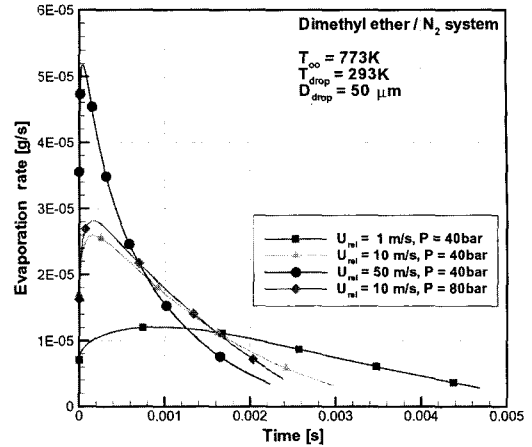


Fig. 8 Calculated evaporation rates of DME droplets evaporating in nitrogen atmospheres at different initial relative velocities

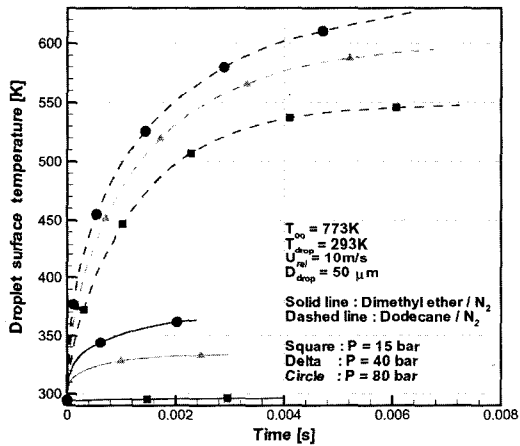


Fig. 7 Calculated droplet surface temperature histories of DME and dodecane droplets evaporating in nitrogen atmospheres at different pressures

발이 빨리 끝나게 된다. Fig. 7은 압력에 따른 증발특성을 나타내었다. 주위 기체장은 773K이고, 압력은 15, 40, 80bar의 세가지로 가정하였다. 그 밖의 조건은 위의 경우와 같다. Fig. 7을 보면 DME와 도데칸간에 큰 차이가 나타남을 알 수 있다. DME의 경우는 압력이 증가함에 따라 증발이 빨리 이루어지는데 반해서 도데칸은 압력의 변화에 둔감하게 나타난다. 이는 압력 변화 때문에 sub-cooling 효과와 습구온도가 변하기 때문이라 사료된다. 즉, 압력이 올라감에 따라 증발을 감소시키는 sub-cooling 효과가 증가함과 동시에 습구온도를 올려주어 증발을 증진

시키게 된다. 이 때 도데칸은 끓는점이 상대적으로 높기 때문에 sub-cooling 효과가 크게 나타나게 되고 따라서 증발이 둔화되지만 습구온도도 같이 높아지게 되어 압력의 변화에 별 영향이 없는 결과가 나타나게 된다. 이에 반해서 DME는 sub-cooling 효과가 그리 크게 나타나지 않고 습구온도 변화에 의한 효과가 크게 나타나게 되어 압력이 커짐에 따라 증발 시간이 많이 단축되게 된다.

마지막으로 초기상대속도의 변화에 따른 증발특성을 알아보았다. 증발시에 상대속도가 존재한다면 액적과 주위 기체 사이에 반류를 방향 외의 대류가 생기게 되고 또한 액적 표면에 전단력이 가해져 액적 내부에 순환 유동이 생기게 된다. 따라서 상대속도에 의해 증발 특성이 많이 틀려지게 된다. DME 액적이 1, 10, 50m/s의 초기속도로 40bar의 질소 기체장에 자유낙하 한다고 가정하였고 그 밖의 조건은 위의 경우와 같다. Fig. 8에서 보는 바와 같이 초기속도를 증가시키기에 따라 증발량은 크게 증가하는 것을 알 수 있다.

#### 4. 결론

Soot 및 NOx의 배출을 크게 저감시킬 수 있는 차세대 연료 중의 하나인 디메틸에테르에 대해서 고온, 고압하에서 증발특성을 수치적으로 해석하였고, 도데칸과 비교를 통해서 다음의 결론을 도출하

였다.

- 1) 본 액적증발모델은 고압상태에서 알칸 계열의 연료액적 증발을 예측할 뿐만 아니라 에테르 계열의 연료액적의 증발특성도 비교적 잘 예측하고 있다.
- 2) 분무 연소장을 제대로 예측하기 위해서는 고압 상태에서의 액적증발을 정확히 예측할 수 있는 모델이 필요하다.
- 3) 디메틸에테르는 상대적으로 임계온도 및 끓는점이 낮고, 표면장력이 작음으로 인해 증발초기에 폭발적인 증발특성을 나타낸다.
- 4) 도데칸은 주위 기체장의 온도가 높더라도 습구 온도에 도달하지 못한채 액적이 모두 증발함에 반해, 디메틸에테르는 증발초기에 바로 습구 온도에 도달하여 빠른 증발특성을 나타낸다.
- 5) 도데칸은 끓는점이 높기 때문에 압력이 올라감에 따라 과냉 효과가 크게 나타나지만 디메틸에테르는 끓는점이 상대적으로 낮기에 과냉 효과가 크게 나타나지는 않는다.
- 6) 동일한 상대속도에서 압력이 높을수록 디메틸에테르 액적의 증발율이 증가하는 특성을 보인다.

## References

- 1) H. Teng, J. C. McCandless, J. B. Schneyer, "Compression Ignition Delay (Physical + Chemical) of Dimethyl Ether - An Alternative Fuel for Compression-Ignition Engines," SAE 2003-01-0759, 2003.
- 2) HKK Corp., Environmental Business - DME Project, 2000 (available via <http://www.nkk.co.jp/en/environment>).
- 3) B. Abramzon, W. A. Sirignano, "Approximate Theory of a Single Droplet Vaporization in a Convective Field: Effects of Variable Properties, Stefan Flow and Transient Liquid Heating," Proceedings of Second ASME-JSME Thermal Engineering Joint Conference, Vol.1, pp.11-18, 1987.
- 4) R. C. Reid, J. M. Prausnitz, B. E. Poling, The Properties of Gases & Liquids, Forth Edition, McGraw - Hill, New York, 1987.
- 5) Y. W. Moon, Y. W. Yoo, Y. M. Kim, S. W. Kim, "Fuel Spray Dynamics and Vaporization Characteristics in High-Pressure and High-Temperature Environment," Transactions of KSAE, Vol.7, No.2, pp.107-115, 1999.