

## 고압에서의 액적의 증발현상에 관한 연구

이현창\* · 백승욱\*\*†

### Investigation of Droplet Vaporization Phenomena in High Pressure Environments

Hyunchang Lee, Seungwook Baek

#### ABSTRACT

The spray combustion and spray cooling depends on droplet evaporation. So, evaporation model for spray has been requested and lots of investigation has been done and various reliable models have been developed also for last few decades. In the present study, One dimensional quasi-steady spherically symmetric droplet evaporation model for micro-gravity is developed. The gas phase was assumed as steady state and the thermophysical properties are calculated as a function of temperature, pressure and composition and the properties used in the model was validated by NIST web data and overall evaporation history results was compared with experimental results by Nomura and Qasim and gave satisfactory agreements.

Through this model, diverse phenomenon was investigated, especially regarding the effects of ambient pressure and temperature. The effects of pressure for the droplet evaporation time were studied. The high pressure increased the droplet surface temperature and made effect on the evaporation time depend on atmospheric temperature. The role of the ambient temperature was investigated and explained. The basic investigation for the evaporation process according to variation of droplet diameter and surface temperature were also investigated and the well-known phenomena, like D-square-law, were reported, too.

**Key Words** : Droplet evaporation, high pressure

#### 기 호 설 명

<p><math>C_p</math> 정적비열  <math>\rho</math> 밀도  <math>k</math> 열전도도  <math>D</math> 확산계수  <math>T</math> 온도  <math>t</math> 시간  <math>r</math> 액적반경 좌표  <math>Y</math> 질량분율  <math>x</math> 몰분율  <math>L</math> 잠열  <math>f</math> 퓨게시터  <math>P</math> 압력  <math>R</math> 액적 반지름</p>	<p><math>Z</math> 압축도  <math>Nu_d</math> 넛셀수  <math>\dot{q}</math> 열유속  <math>\dot{m}</math> 질량유속</p> <p><b>하첨자</b>  <math>i, j</math> 화학종  <math>g</math> 기체상  <math>l</math> 액체상  <math>\infty</math> 무한경계점  <math>s</math> 액적표면  <math>m</math> 혼합물  <math>c</math> 임계점</p>
---	--

\* 한국과학기술원 기계항공시스템공학부 대학원

† 연락처, E-mail : swbaek@kaist.ac.kr

\*\* 한국과학기술원 기계항공시스템공학부

## 1. 서 론

액적의 증발은 현대 공학에서 사용되는 분무기술

의 해석을 위한 기초적이며 기본적인 단계이다. 또한, 기술의 발달과 함께 효율을 증가시키기 위해 자동차 엔진 등은 동작이 되는 압력을 점점 높이고 있다. 실제로 이미 연료의 임계압력을 훨씬 넘는 상황에서 연소가 일어나고 있으므로 고압 환경을 고려하지 않을 수 없다. 고압 환경이 이루어지면, 더 이상 이상기체 상태를 가정할 수 없으므로, 실기체 효과를 고려한 상태방정식이 필요하게 된다. 또 고압에서 기체가 액체로 녹아 들게 되므로, 액적은 순수물질이 아니라 혼합물의 현상을 띠게 된다. 액적이 증발함에 따라 액적 주변의 기체도 기화된 연료로 인해 혼합물의 성질을 갖게 되므로, 혼합에 의한 상태량의 변화도 고려해주어야 한다.

G.S.Zhu et al.[1](1998)은 액상과 기상에 대해서 spherical 대칭 모델을 적용하여 풀었으며, 특히 Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong, 그리고 Peng-Robinson 상태방정식을 각각 적용하여 표면에서의 물분율에 대한 결과를 각각 실험결과와 비교하고, 비임계상태와 임계상태에서 액적의 증발율과 증발시간을 비교하였다. Changlin Yan et al.[2](2006)은 기체상을 준정상상태로 가정하였고, 비정상상태의 결과와 비교하였다. Jia, H et al.[3](1993)은 고압에서 대기의 용해가 증발에 미치는 영향에 대해 연구하였다. Nomura et al.[4](1996)은 무중력 상태에서 헵탄 액적의 증발에 관해 0.1MPa부터 5MPa까지 그리고 400K에서 800 K까지 실험을 수행하였다. Ghassemmi et al.[5]은 증력이 있는 상황에서 헵탄과 헥사데칸 그리고 두 연료의 혼합연료에 대한 증발실험에 대한 해석을 수행하였다. 그는 헵탄의 증발실험을 통해서 대기압력이 1기압으로 낮을 경우엔, 온도가 증가함에 따라 액적의 증발시간이 짧아지는 것을 보였고, 대기온도가 700℃로 비교적 높을 경우엔 압력이 증가함에 따라 증발시간은 오히려 줄어드는 것을 보였다.

## 2. 모델

### 2.1 지배방정식

정지해 있는 대기의 경우, 액적 내부의 순환은 없거나 그 크기가 매우 작다. 그러므로 액적 내부 유동은 없다고 가정한다. 액적의 온도가 공간과 시간에 대해 모두 변화한다는 finite conductivity 모델을 도입하였다.

$$r^2 \frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left( kr^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \sum_i \rho r^2 D_{im} C_{pi} T \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right] \quad (1)$$

액적 내부에서는 fluid element간의 conduction, 그리

고 농도차로 인한 mass diffusion에 의한 에너지 이동에 의해 지배를 받는다.

$$r^2 \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left( \rho D_{im} r^2 \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) \quad (2)$$

액적내부의 화학종은 농도차에 의한 mass diffusion에만 지배를 받는다.

넛셀수는 유동이 없을 때, 구 주변으로 일어나는 열전달에 대하여 많이 적용하는 가정을 사용하였으며, 실험상에서 electric furnace에서 일어나는 복사열을 고려해주었다. 복사열을 구하는 과정은 부록에 자세히 실었다.

$$\dot{q}'' = \dot{q}''_{convection} + \dot{q}''_{radiation}$$

$$\dot{q}''_{convection} = \frac{k_g}{2r_s} Nu_d (T_\infty - T_s)$$

여기에서,  $Nu_d = 2$ . 그러므로,

$$\dot{q}''_{convection} = \frac{k_g}{r_s} (T_\infty - T_s) \quad (3)$$

$$\dot{q}''_{radiation} = 0.011\sigma(T_\infty^4 - T_s^4) \quad (4)$$

$$\therefore \dot{q}'' = \frac{k_g}{r_s} (T_\infty - T_s) + 0.011\sigma(T_\infty^4 - T_s^4) \quad (5)$$

증발 질량유속

1) 끓는점 도달이전

$$\dot{m}_s'' = \frac{\rho D \ln(1+B)}{r_s} \quad (6)$$

$$\text{여기에서, } B = \frac{Y_{fs} - Y_{f\infty}}{1 - Y_{fs}} \quad (7)$$

2) 끓는점 도달이후

$$\dot{m}_s'' = \frac{\dot{q}''}{L} \quad (8)$$

액적 직경의 결정

$$-\rho_l \dot{r}_s = \dot{m}_s'' + \int_0^{R^{(t)}} \left( \frac{r}{R} \right)^2 \frac{\partial \rho(r,t)}{\partial t} dr \quad (9)$$

기체장의 평균온도 및 평균 물분율

$$\phi_{avg} = \phi_s + \beta(\phi_\infty - \phi_s) \quad (10)$$

여기에서,  $\beta = \frac{1}{3}$ ,  $\psi$ 는 온도 또는 물분율

### 2.2 Peng-Robinson 상태방정식

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v^2 + 2bv - b^2} \quad (11)$$

$$a(T) = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} [1 + \kappa(1 - T_r^{1/2})]^2 \quad (12)$$

여기에서,  $\kappa = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$

$\omega_{heptane} = 0.349$ ,  $\omega_{nitrogen} = 0.039$

$$b = 0.07780 \frac{RT_c}{P_c} \quad (13)$$

혼합기체에서의 mixing-rule은 다음과 같다.

$$a_m = \sum_j \sum_i x_i x_j a_{ij} \quad (14)$$

$$b_m = \sum_i x_i b_i \quad (15)$$

$$a_{ij} = (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2} a_j^{1/2} \quad (16)$$

여기에서  $\delta_{i,j} : 0.1441$  [8]

### 2.3 퓨게시티를 통한 상평형의 계산

$$f_i^s(x_{i,s}) = f_i^l(x_{i,l})$$

이때 퓨게시티 상수 (fugacity coefficient)  $\phi_i$ 를 다음과 같이 정의하면 Peng-Robinson 상태방정식으로 이를 구할 수 있다.

$$\phi_i = \frac{f_i}{P x_i}; \text{ 퓨게시티 상수 (fugacity coefficient)}$$

$$\ln \phi_i = \frac{b_i}{b_m} (Z-1) - \ln(Z-B) + \frac{A}{B\sqrt{u^2-4w}} \left( \frac{b_i}{b_m} - \delta_i \right) \ln \frac{2Z+B(u+\sqrt{u^2-4w})}{2Z+B(u-\sqrt{u^2-4w})} \quad (17)$$

이 때, 
$$\delta_i = \frac{2a_i^{1/2}}{a_m} \sum_j x_j a_j^{1/2} (1-k_{ij}) \quad (18)$$

액적표면에서 두 개의 화학종을 고려하면

$$x_1^l + x_2^l = 1 \quad (19)$$

$$x_1^g + x_2^g = 1 \quad (20)$$

$$f_1^g(x_1^g) = f_1^l(x_1^l) \quad (21)$$

$$f_2^g(x_2^g) = f_2^l(x_2^l) \quad (22)$$

4개의 미지수  $x_1^g, x_1^l, x_2^g, x_2^l$ 에 방정식이 4개이므로 액적표면에서의 조성을 구할 수 있다.

### 2.4 고압에서 물성치의 계산

고압에서 물성치의 변화를 다음 Table 1에 나타내었다. 한편, 잠열은 액상과 기상의 partial enthalpy 차이를 이용하여 구한다.

$$\Delta H = \frac{h_i^g - h_i^l}{W_i} = -\frac{RT^2}{W_i} \frac{\partial}{\partial T} \left[ \ln \left( \frac{\phi_i^g}{\phi_i^l} \right) \right]_{P,T} \quad (23)$$

## 3. 결과 및 토의

### 3.1 액적표면에서의 상평형

Table 1 Property variaton in high pressure

	이상기체	혼합효과	실기체
밀도	Peng Robinson 상태방정식[7]		
비열	AICHE[11]	질량분율	무시
열전도도 (기체)	AICHE[11]	Wassiljewa equation and Mason & Saxena modification[8]	Stiel&Thodos modification[8]
열전도도 (액체)	AICHE[11]	없음	무시

위에서 제시한 퓨게시티 관계식과 Peng-Robinson 상태방정식을 이용하여, 온도와 압력에 따른 표면에서 헵탄과 질소의 상평형 상태를 구하였고, 이를 G.S.Zhu가 제시한 수치값과 Knapp et al.이 제시한 실험값과 각각 비교하여 Fig.1에 나타내었다. 450K 부근에서 실험값과 오차를 보이고 있지만, 실험 자체적인 오차가 존재할 수 있고, 인증된 계산결과와 잘 맞고 있으므로, 전체적으로 만족할만한 결과를 보이고 있다.

### 3.2 실험결과와의 비교

개발된 코드를 Nomura[4]의 실험과 비교하여 Fig.2에 나타냈다.

#### 3.2.1 복사열의 영향

Ghassemi[5]의 실험에서 일어나는 복사열을 구하였고, 복사열을 고려했을 때와 고려하지 않았을 때, 액적의 증발 history를 Fig.3에 나타내었다. 복사열이 액적의 증발에 미치는 영향은 아주 미미하다. 이는 전기로에 비해 액적의 크기가 때

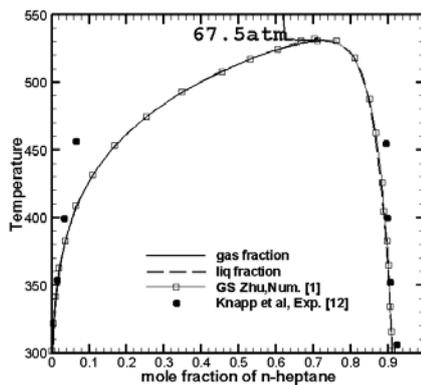


Fig. 1 Mole fraction of n-heptane at the surface at 67.5atm

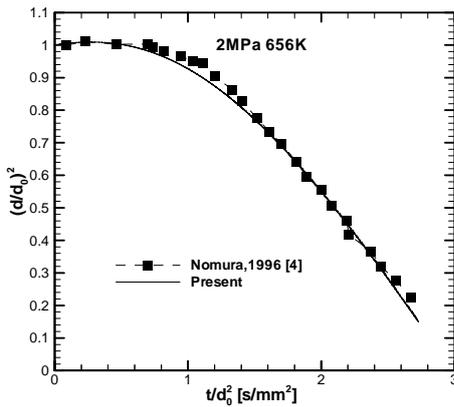


Fig. 2 Comparison with experimental data at 2MPa and 656K

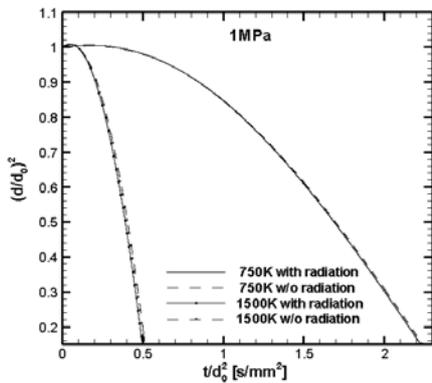


Fig. 3 Droplet evaporation history with and without radiation

우 작기 때문에 복사열이 액적 방향으로 가지 못하고, 다른 부분으로 새어나갔기 때문인 것으로 생각된다.

### 3.3 압력이 액적의 증발에 미치는 영향

압력이 액적의 증발에 미치는 영향은 대기온도가 높을 때와 낮을 때가 각각 다르다. 대기 온도가 낮을 때는 압력이 증가함에 따라 증발시간이 순차적으로 길어지지만, (Fig.4) 대기온도가 높을 때는 어느 압력 이상이 되면 압력이 증가함에 따라 증발시간이 오히려 더 줄어들게 된다. (Fig.5) 이때 액적 표면온도의 변화를 Fig.6과 7에 나타내었고, 이 때의 증발질량유속을 Fig.8과 9에 나타내었다.

Fig.8을 보면, 증발질량유속은 압력이 높을수록 작고, 이는 증발시간 내내 변화하지 않는다. 그

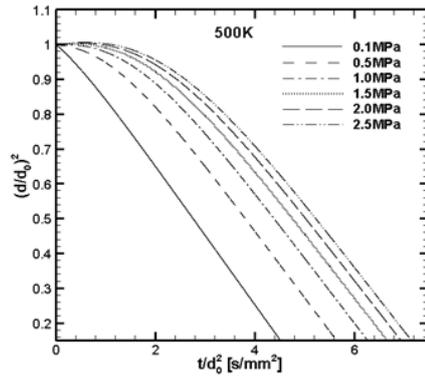


Fig. 4 Droplet evaporation history at 500 K and different ambient pressures

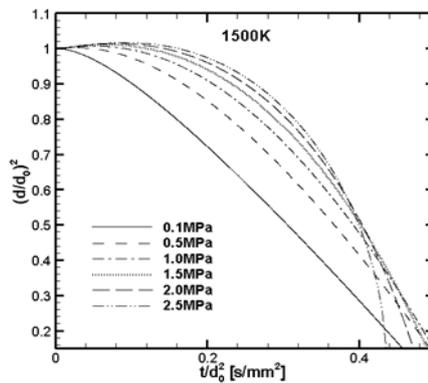


Fig. 5 Droplet evaporation history at 1500 K and different ambient pressures

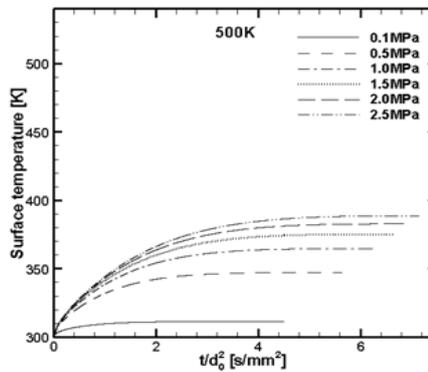


Fig. 6 The droplet surface temperature at 500 K and different ambient pressures

러나 Fig.9에서 확인할 수 있듯, 일정한 시간이 지나면, 고압에서의 증발질량유속이 저압에서의 그것을 따라잡는 것을 볼 수 있다. 1000 K과

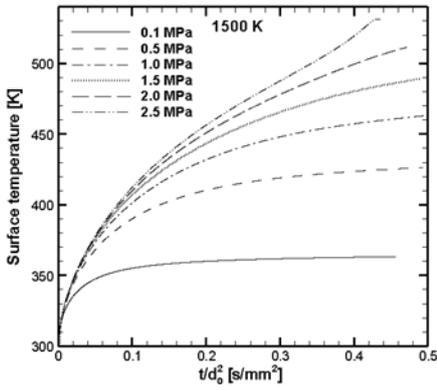


Fig. 7 The droplet surface temperature at 1500 K and different ambient pressures

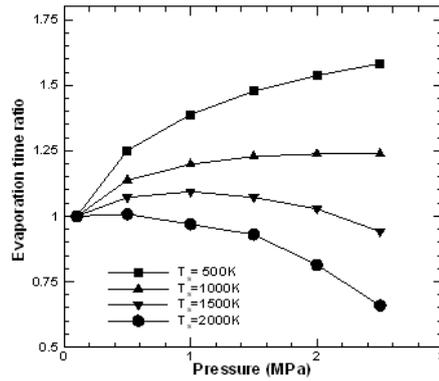


Fig. 10 The effect of pressure at evaporation time

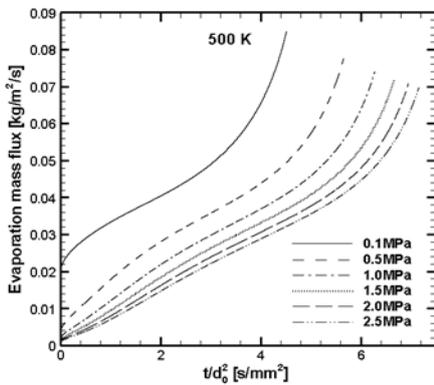


Fig. 8 Evaporation mass flux at 500 K and at different pressures

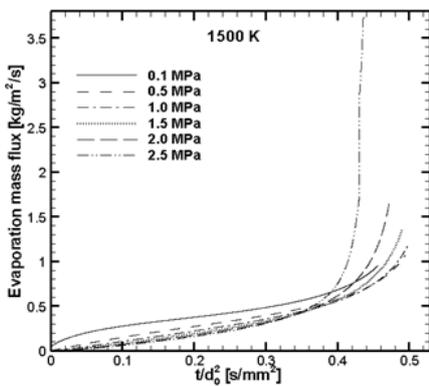


Fig. 9 Evaporation mass flux at 1500 K and different pressures

2000 K에서도 동일한 계산을 수행하여, 액적 증발시간비율과 압력과의 관계를 Fig.10에 나타내었다. 여기서 액적 증발시간 비율(evaporation

time ratio)은 계산시 가장 낮은 압력이었던 0.1MPa에서의 증발시간(evaporation time)으로 각각의 압력에서의 증발시간을 나누어준 비율이다. 이때 압력의 증발시간은 액적 직경의 초기 액적 직경에 대한 비의 제곱이 0.15가 될 때의 시간으로 구했다.

Fig.10에서 확인할 수 있듯이, 500 K에서는 압력이 증가함에 따라 액적의 증발시간이 증가한다. 한편 1500 K과 2000 K에서는 압력이 증가함에 따라 액적의 증발시간이 점점 줄어드는 것을 볼 수 있고, 그보다 낮은 온도인 1000 K에서는 증발시간이 압력이 증가함에 따라 증가하다가 다시 감소하는 포물선 형태를 나타내는 것을 확인할 수 있다. 압력과 증발시간의 관계 그리고 이때 대기온도와의 관계는 압력에 의한 액적의 끓는점과 잠열의 변화가 표면온도에 미치는 영향으로 설명할 수 있다. 압력이 올라감에 따라 액적의 끓는점은 증가하게 된다.(Table 2)

액적의 끓는점이 증가하는 것은 같은 온도에서 압력이 증가함에 따라 액적 표면 헵탄의 기체 분압이 낮다는 것을 의미한다. 한편 잠열은 같은 온도에서 압력이 증가함에 따라 오히려 더 감소하게 된다. 압력이 증가할 경우, 증발질량이 감소하게 되고, 잠열도 감소하게 되므로, 잠열로 인해 잃어버리는 열유속량은 더욱 감소하여 초기 액적 내부로 들어가는 열유속량이 저압에 비해 상당히 크다.

따라서, 액적이, 고압일 때, 저압일 때보다 증발은 덜하고, 큰 열유속에 의해 내부온도 및 표면온도는 빠르게 증가하면서(Fig.6,7), Thermal expansion에 의해 더욱 부풀어 오르게 된다.(Fig.4,5) 이 때 압력이 높을수록 최종적으로 도달한 온도가 더 높기 때문에 이 때 물분율도 크고 따라서 증발량도 크다. 이처럼 압력에 의한

Table 2 Boiling point variation  
accordint to pressure

Pressure(MPa)	Boiling Pt.(K)
0.1	371.09
0.5	437.04
1.0	474.30
1.5	499.18
2.0	518.23
2.5	533.74

잠열과 끓는점의 변화, 곧 표면 물분율의 변화가 액적의 표면온도와 증발량에 미치는 영향을 생각해 볼 수 있다. 대기온도가 충분히 높은 경우, 액적이 빠른 시간 안에 고온에 도달하게 되고, 증발 초기 낮은 증발질량유속으로 뒤쳐졌던 증발량을 후기 높은 증발질량유속으로 따라잡게 되면, 고압으로 갈수록 오히려 증발시간이 줄어들게 된다. 그러나 대기온도가 저온일 경우는, 대기로부터 들어오는 열유속이 상대적으로 작기 때문에, 액적의 표면온도가 증발이 이루어지는 대부분의 시간에서 낮은 온도로 유지된다. 따라서 증발시간 내내 고압에서 낮은 물분율의 영향이 커지게 되고, 압력이 증가할수록 액적의 증발시간은 길어지게 된다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 고압에서의 물성치 변화와 실기체 효과 그리고 중력의 효과를 고려하여 액적의 증발에 대해 수치적으로 해석해 보았다. 압력이 높을수록 동일한 온도에서 상평형을 이루는 물분율이 감소하여 액적의 증발질량유속을 감소시키게 된다. 한편 고압에서 초기 낮은 증발질량유속과 작은 잠열은 잠열로 손실되는 열량을 감소시켜 결과적으로 액적 내부로 들어가는 열유속량을 증가시키게 되고, 따라서 증발 후기 높은 표면온도를 낳게 된다. 결국 높은 압력은 초기의 낮은 증발질량유속과 후기의 높은 증발질량유속을 낳게 된다. 이 때, 대기온도가 낮은 경우, 초기 낮은 증발질량유속이 큰 영향을 미쳐 압력이 증가할수록 증발시간이 길어지게 되고, 반대로 대기온도가 높은 경우, 후기 높은 증발질량유속의 영향이 커져서 압력이 높아질수록 증발시간이 짧아지게 된다.

#### 후기

이 연구는 산업자원부 지원의 "미래형 자동차 배기가스 제로화 기술개발"과제의 일부로 수행되었으며, 연구비 지원에 감사드립니다.

#### 참고문헌

- [1] Zhu, G. S., and S. K. Aggarwal. "Transient Supercritical Droplet Evaporation with Emphasis on the Effects of Equation of State." *International Journal of Heat and Mass Transfer* Vol.43, No.7, 2000 pp.1157-1171.
- [2] Yan, C., and S. K. Aggarwal. "A High-Pressure Droplet Model for Spray Simulations." *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* Vol. 128, No.3, 2006 pp. 482-492.
- [3] Jia, H., and G. Gogos. "High Pressure Droplet Vaporization; Effects of Liquid-Phase Gas Solubility." *International Journal of Heat and Mass Transfer* Vol.36, No.18, 1993, pp.4419-4431.
- [4] Nomura, Hiroshi, et al. "Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions" *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, 1, 1996, pp.1267-1273.
- [5] H.Ghassemmi., et al. "Experimental Study on Binary Droplet Evaporation at Elevated pressure and Temperature" *Combustion Science and Technology*, Vol.178, No.9, 2006, pp.1669-1684.
- [6] <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>
- [7] Peng D-, Robinson DB. "A new two-constant equation of state. " *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals* Vol.15, No.1, 1976, pp.59-64.
- [8] Reid, R. C., Prausnitz, J. M. and Polling, B. E. "the Properties of Gases and Liquids (4th Edn) " McGraw-Hill, New York, 1987
- [9] Oxtoby et al., "현대일반화학 제5판" 자유아카데미, 2003
- [10] 강상훈, "고압에서의 액적의 증발 및 연소현상에 관한 연구", 석사논문, 한국과학기술원, 2000
- [11] T.E.Daubert et al. "Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals" Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1988

#### 부 록

##### 1. 복사열의 계산

$$\dot{q}_{radiation} = F_{d1-2} \frac{\sigma(T_{\infty}^4 - T_s^4)}{\frac{1}{\epsilon_1} + \frac{1}{\epsilon_2} - 1}$$

여기에서  $\epsilon_1 = 0.8$ ,  $\epsilon_2 = 0.9$

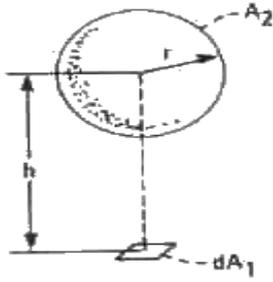


Fig. 11 Sphere and infinitesimal plate

Fig. 11과 같이 미소 평판  $dA_1$ 이 구를 바라보는 configuration factor는 다음 식과 같이 주어진다.

$$F_{d1-2} = \left(\frac{r}{h}\right)^2$$

평판과 구 사이의 configuration factor를 찾기 위해, 면적  $A_1$ 에 대해 적분하기 위해 면적  $A_1$ 을 곱해준다.

$$F_{1-2} = \left(\frac{r}{h}\right)^2 A_1$$

구와 평판사이의 거리는 3cm, 구의 지름은 0.1cm, 가로는 4.5cm, 세로는 12cm이므로, 면적은 45 이 된다.

그러면,

$$F_{1-2} = \left(\frac{r}{h}\right)^2 A_1 = \left(\frac{0.05}{3}\right)^2 \times 54 = 0.015$$

그러므로,

$$\dot{q}_{radiation}'' = 0.015 \times 0.735 \times \sigma (T_{\infty}^4 - T_s^4) = 0.011025 \sigma (T_{\infty}^4 - T_s^4)$$