

퍼라이트 비등온 팽창 모델 및 전산모사

김지환·함영민[†]

단국대학교 화학공학과
(2008년 4월 18일 접수, 2008년 6월 10일 채택)

Modelling and Simulation on Non-isothermal Expansion of Water Oversaturated Perlite

Ji-Hwan Kim and Yeong-Min Hahm[†]

Department of Chemical Engineering, Dankook University, Gyeonggi-do 448-701, Korea
(Received April 18, 2008; accepted June 10, 2008)

본 연구에서는 용암석상의 무기물인 퍼라이트의 팽창에 관한 비등온 상태 전산 모사를 수행하여 실험 결과와 비교하여 모델의 유효성을 검증하고자 하였다. 기존의 연구를 기반으로 에너지 수지식을 적용하였고 이에 따른 물성값의 온도에 따른 변화를 적용하였다. 비등온 팽창에서 버블 부피의 변화, 수분 증발에 의한 변화 그리고 열 플럭스의 버블내로의 유입에 따라 버블의 온도 변화를 고려하였으며 이에 따른 용융 퍼라이트의 온도 분포 형성 또한 고려되었다. 이의 결과로 1100 K 이하에서 5% 이내의 정확성을 가지는 예측 모델 및 동특성 해석 코드를 개발하였고 1100~1400 K 범위에서도 7% 이내의 오차를 가지고 팽창도를 예측할 수 있었다.

To verify model adaptation and flexibility, non-isothermal simulation for perlite expansion has been carried out. Temperature-dependent perlite properties are applied to energy equations for bubble temperature change and perlite melt temperature gradient. Bubble temperature is changed with volume change, water evaporation, and heat flux from melt. Temperature gradient of perlite melt is affected by decreasing bubble temperature. As a result, prediction model and code have been developed below 1100 K with 5% accuracy. At 1100~1400 K, lower 7% accuracy has been obtained from the calculation results.

Keywords: perlite, simulation, Non-isothermal, expansion

1. 서 론

퍼라이트는 용암석상의 무기물로 고온에서 팽창된 퍼라이트는 내부에 동공을 가지는 특징 때문에 단열재 및 흡음재 등으로 각광 받고 있다. 그러나 퍼라이트의 팽창은 매우 빠른 속도로 이루어지며 또 미소 부피에서 진행됨으로 인해 팽창도를 실험적으로 정량화한다는 것은 거의 불가능하다. 따라서 이를 예측하기 위한 수학적 모델이 요구된다.

기존의 연구[1]에서 퍼라이트의 팽창에 대해 용융 퍼라이트 내의 버블-분산체 모델을 상정하고 버블 내로 수분이 확산되어 버블이 성장하는 동적현상을 모사하였다. 이는 등온 상태 모델을 기반으로 하였으며 부피 변화에 의한 용융 퍼라이트 내의 온도 분포는 없는 것으로 가정하였다. 이때 퍼라이트 팽창은 접도의 영향이 가장 지배적인 것으로 파악되었으며 실험 결과와 충전 밀도를 비교함으로써 퍼라이트 등온 팽창 동특성 코드의 유효성을 살펴보았다.

그러나 모사 결과와 실험 결과가 큰 차이를 보여 모델의 보완이 필요하였다. 즉, 버블의 온도의 변화와 용융 퍼라이트의 온도 분포의 형성은 팽창에 저항 요소로 작용하여 실험 결과에서 낮은 팽창도를 나타내었다. 이에 기존의 전산 모사 모델에 에너지 방정식을 추가하여

팽창시 버블의 온도 변화 및 용융 퍼라이트 내의 온도 분포를 고려하였고 이의 결과를 실험 값과 비교하여 모델 및 코드의 유효성을 검증하였다.

2. 이 론

퍼라이트의 팽창은 용융 퍼라이트 내의 버블-분산체 모델을 상정하고 버블 내로 수분이 확산되어 버블이 성장하는 모델을 이용하였다. 등온 팽창 모델에서는 용융 퍼라이트 내의 온도 변화는 없고 또한 버블의 팽창에 따른 온도 변화는 없다고 가정하였다. 그러나 본 연구에서 실제적인 현상에 접근하기 위하여 비등온 팽창 모델을 적용하여 버블의 온도 및 분산체의 온도가 변화하여 팽창에 미치는 영향을 보기로 하였다.

$$dH_g + dH_{e, xp} + dH_{e, v} + dH_{cond} = 0 \tag{1}$$

$$m_g c_{Pg} dT - V_g dP + \frac{\Delta H_{e, v}}{Mw} dm_g + s J dt = 0 \tag{2}$$

[†] 교신저자 (e-mail: yhahm@dankook.ac.kr)

Table 1. Analytical System of Equations

Process	Equation
Hydrodynamics of melt surrounding the bubble Combined equation of momentum and continuity	$P_g - P_{amb} = \frac{2\sigma}{R} - 12R^2 u_R \int_R^s \frac{\eta(r)}{r^4} dr$
Mass balance at the bubble interface Diffusive bubble growth	$\frac{d}{dt} \left(\frac{P_g R^3}{T_g} \right) = 3 \frac{R}{Mw} R^2 D \rho_l \left. \frac{\partial x_w}{\partial r} \right _{r=R}$
Volatile Diffusion in the melt Initially uniform volatile distribution No permeation of outer cell border Henry's law of gas solubility on the bubble interface	$\frac{\partial x_w}{\partial t} + v_r \frac{\partial x_w}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (Dr^2 \frac{\partial x_w}{\partial r})$ <p>Boundary and initial conditions</p> $x_w(r, 0) = x_0 \text{ at } r > R_0 \text{ and } t = 0$ $\left(\frac{\partial x_w}{\partial r} \right)_{r=s} = 0 \text{ at } t > 0$ $x_w(R, t) = x_R = (k_h^{np} P_g)^{1/n} \text{ at } r = R \text{ and } t > 0$
Heat balance at the bubble interface and within it include: 1. $P dV$ work heat 2. Vaporization heat 3. Heat flux from the melt	$\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{3R T_g}{P_g R c_{P_g} Mw} \left[\lambda_l \left. \frac{\partial T_g}{\partial r} \right _{r=R} - \frac{\Delta H_{ev}}{Mw} D \rho_l \left. \frac{\partial x_w}{\partial r} \right _{r=R} + \frac{R}{3} \frac{\partial P_g}{\partial t} \right]$
Temperature Diffusion in the melt Initially uniform temperature distribution No permeation of outer cell border Bubble interface temperature	$\frac{\partial T_l}{\partial t} + u_r \frac{\partial T_l}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\lambda_l}{\rho_l c_{P_l}} \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) + 12u_R^2 \frac{\eta}{\rho_l c_{P_l}} \frac{R^4}{r^6}$ <p>Boundary and initial conditions</p> $T_l(r, 0) = T_0 \text{ at } r \geq R_0 \text{ and } t = 0$ $\left(\frac{\partial T_l}{\partial r} \right)_{r=s} = 0 \text{ at } t > 0$ $T_l(R, t) = T_g \text{ at } r = R \text{ and } t > 0$

식 (1)에서 용융 퍼라이트 내의 버블의 에너지 보존에 관한 수지식을 정리하였으며 식 (2)는 이를 전개하였다[6]. 즉, 전체 버블의 에너지는 버블 팽창에 의한 엔탈피 변화, 수분 증발에 의한 엔탈피 변화 그리고 용융 퍼라이트에서의 열 플럭스의 합으로 나타난다. 여기서 용융 퍼라이트의 결정화, 유리화 그리고 균열에 의한 영향은 없다고 보았다.

이를 재정리하면 다음과 같은 식을 얻을 수 있다[8].

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{3R T_g}{P_g R c_{P_g} Mw} \left(\lambda_l \left. \frac{\partial T_g}{\partial r} \right|_{r=R} - \frac{\Delta H_{ev}}{Mw} D \rho_l \left. \frac{\partial x_w}{\partial r} \right|_{r=R} + \frac{R}{3} \frac{\partial P_g}{\partial t} \right) \quad (3)$$

이와 함께 용융 퍼라이트 내의 온도 분포를 계산하기 위하여 다음의 식과 경계 조건을 사용하였다.

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} + u_r \frac{\partial T_l}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\lambda_l}{\rho_l c_{P_l}} \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) + 12u_R^2 \frac{\eta}{\rho_l c_{P_l}} \frac{R^4}{r^6} \quad (4)$$

$$T_l(r, 0) = T_0 \text{ at } r \geq R_0 \text{ and } t = 0 \quad (5a)$$

$$\left(\frac{\partial T_l}{\partial r} \right)_{r=s} = 0 \text{ at } t > 0 \quad (5b)$$

$$T_l(R, t) = T_g \text{ at } r = R \text{ and } t > 0 \quad (5c)$$

위의 정리된 식을 기존의 모델에 추가하여 Table 1에 나타내었다. Table 1의 식에서 용융 퍼라이트의 물성, 즉 점도, 확산계수, 열전도도, 열용량 그리고 표면장력 등은 모두 온도의 함수로 온도의 변화에 따라 변화한다. 이에 다음의 식을 이용하여 온도에 따라 각각의 물성값이 변화하도록 하였다. 단, 밀도는 온도에 따라 민감하지 않으므로

2350 kg/m³ 값으로 고정하였다[2].

$$\ln \eta_s = s(10^4/T[K]) - c_T s + c_\eta \quad (6)$$

$$\lambda_l = 1.173571 + 0.065649 \times \exp(T/427.333981) \quad (7)$$

$$c_{P_l}(0\%H_2O) = (24.25 + 4.66 \times 10^{-3} T - 6.62 \times 10^5 T^{-2}) \times 41.868 \quad (8a)$$

$$c_{P_l} = (1 - Y(H_2O)) \times c_{P_l}(0\% H_2O) + Y(H_2O) c_{P_g} \quad (8b)$$

$$\sigma = 0.09317 + 1.971 \times 10^{-4} T[\text{°C}] \quad (9)$$

$$\ln D = -14.59(\pm 1.59) - \frac{103000(\pm 5000)}{RT} \quad (10)$$

식 (6)은 Shaw[3]가 제시한 점도 계산식으로 수분 및 퍼라이트의 조성, 그리고 온도에 따른 변화를 나타낼 수 있는 식이다. SiO₂를 기준으로 각각의 조성비에 따른 s, 즉 기울기를 계산하여 정확한 점도를 예측할 수 있는 식으로 알려져 있다. 여기서 c_T와 c_η는 각각 1.5 K⁻¹과 6.4이다. 식 (7)은 Murase and McBirney[2]가 퍼라이트와 유사한 조성을 가지는 흑요석의 열전도도를 300~1600 K에서 측정하여 제시한 값으로 용융 퍼라이트에 대한 데이터가 없어 대안적으로 적용하였다. 식 (8a)은 King, Todd and Kelley[4]에 의해 제시된 실험식으로 수분을 제거한 뒤 측정된 값이다. 이에 본 연구에서는 H₂O의 조성에 따른 변화를 적용하기 위하여 식 (8b)를 이용하였다. 식 (9)는 흑요석의 표면장력의 온도에 따른 변화를 Murase and McBirney[2]가 1000~1400 °C에서 측정한 값으로 퍼라이트의 데이터가 없어 대신 이용하였다. 식 (10)은 Zhang *et al.*[5]이 유문암질 광석에 대해 673~1123 K에서 측정한 값으로 이용하였다.

이와 함께 수분의 용융 퍼라이트 내에서의 증발열(ΔH_{ev})은 온도와 압력의 함수로서 적용되어야 한다. 따라서 다음의 식[6]을 이용하였다.

Table 2. Coefficients for Equation of Heat of Vaporization[6]

Index	i = 0	i = 1	i = 2	i = 3	i = 4	i = 5
j = 0	6.736e + 04	2.470e + 03	-2.349e + 03	-1.131e + 03	2.591e + 02	-1.089e + 01
j = 1	-7.185e + 01	-3.534e + 00	3.650e + 00	1.639e + 00	-4.865e - 01	2.939e - 02
j = 2	2.365e - 02	1.744e - 03	-1.594e - 03	-6.038e - 04	1.984e - 04	-1.270e - 05

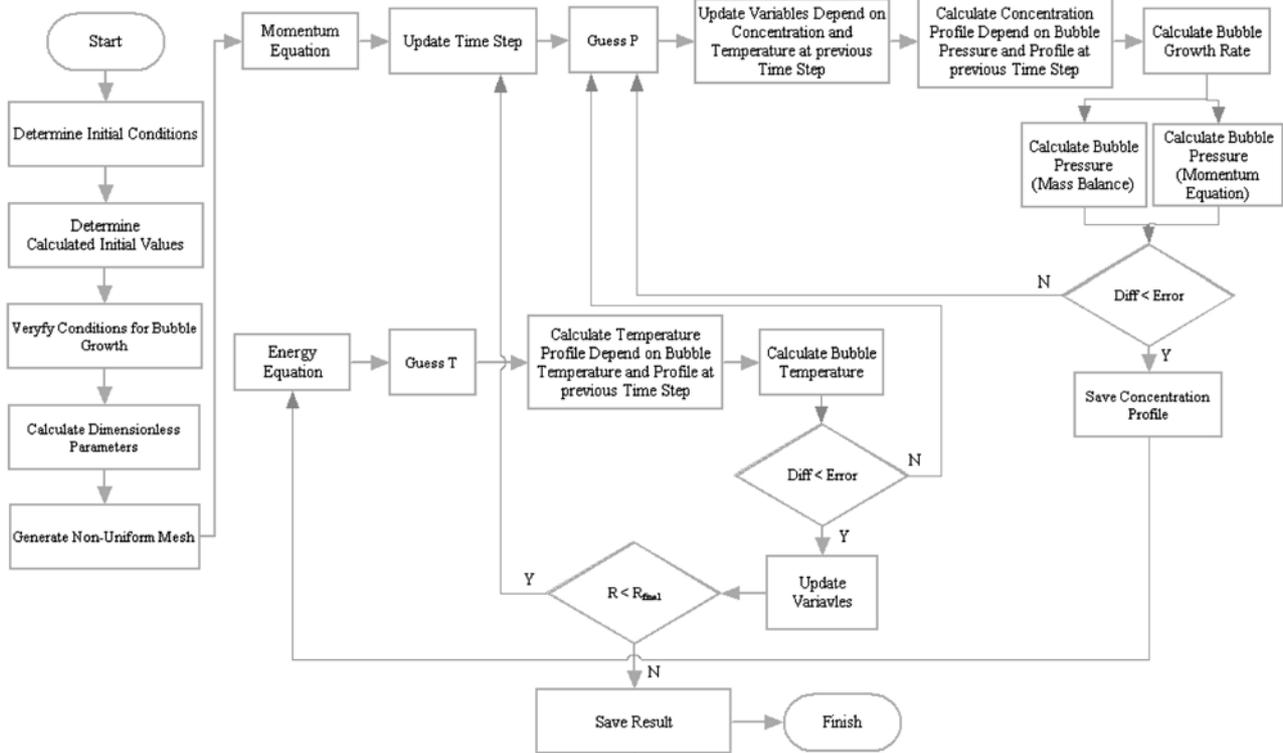


Figure 1. Flowchart for numerical scheme.

$$\Delta H_{ev} = \sum_{i=0}^5 [(\ln P_g)^i \sum_{j=0}^2 k_{ij} T_g^j] \quad (11)$$

식 (11)에서 k_{ij} 는 Table 2에 나타내었다.

Figure 1은 본 연구에서 MatLab으로 코딩된 프로그램의 흐름도를 나타내었다. 좌측의 수직 흐름은 초기조건 설정 부분이며 우측 상단은 모멘텀 식으로부터 수분 확산에 의한 팽창도 계산 부분이다. 우측 하단은 이의 계산 결과를 에너지 수지식을 계산하여 비교하는 부분으로 최종적인 계산 결과를 출력한다. 우측 상·하단 부분은 연속적으로 계산되며 결과의 정확성 및 코드의 유연성을 위하여 개별적으로 코딩되었다.

3. 결과 및 고찰

본 연구에서는 비등은 상태 퍼라이트 팽창을 전산 모사하여 실험 결과와 비교함으로써 모델 및 코드의 유효성 검증을 실시하였다. 실험은 퍼라이트의 팽창이 길어야 수조 내로 이루어지므로 팽창전과 팽창후의 퍼라이트를 비교함으로써 온도에 따른 팽창도를 측정하였다.

3.1. 전산 모사 결과

Figure 2은 1200 K에서 4 μm 크기의 버블과 17 μm 크기의 분산체 내에서의 버블의 팽창을 나타낸 것으로 약 0.09~0.11 sec까지 팽창이 급속도로 진행되며 이후 점진적인 팽창으로 전환되는 것을 알 수 있다. 즉 팽창은 초기에 일어나며 이때 수분의 버블 내로의 유입이 가장 많을 것으로 예측되었다. Figure 3은 버블과 용융 퍼라이트 간의 계면의 수분 농도와 용융 퍼라이트 내의 수분의 평균 농도의 차를 시간에 따라 도시한 것으로 0.11 sec 이전에 대부분의 수분이 버블 내로 유입됨을 알 수 있다. 이에 수분의 확산에 의한 버블 팽창과 열역학적 평형 관계에 의한 버블 팽창으로 구분될 수 있다. 따라서 열역학적 평형 관계에 의해 과포화된 수분이 버블로 유입됨에 따라 버블 계면에서 수분 농도가 평형을 이루는 것을 의미한다.

3.2. 전산모사와 실험 결과의 비교

Figure 4는 퍼라이트의 팽창 온도에 따른 단면의 전자현미경 사진으로 온도가 증가함에 따라 팽창도가 증가함을 육안으로 구별할 수 있었다. 그러나 이를 정량적으로 분석하는 것은 버블 크기의 균일도가 매우 낮아 불가능할 것으로 파악되었다. 이에 결과를 비교하기 위하여 충전 밀도를 측정하였고 퍼라이트 원석의 공극율은 원석의 충전 밀도와 진밀도의 비로 계산하였으며 이는 약 0.45~0.49이다. Figure

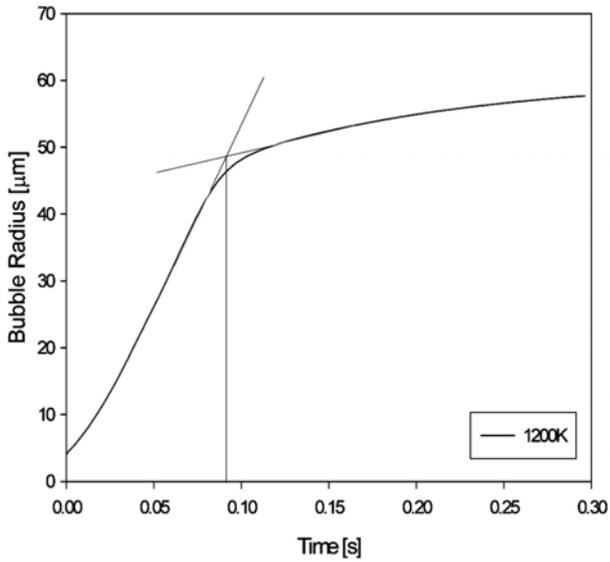


Figure 2. Radius ratio changes with time (1200 K, 3 wt% water).

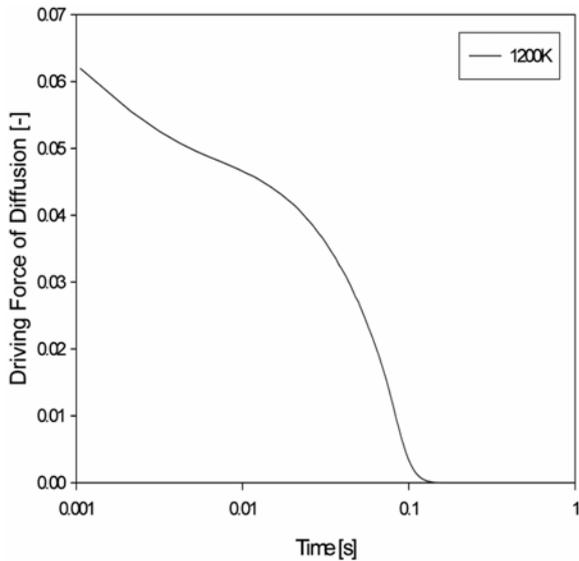


Figure 3. Driving force of volatile diffusion, $D. F. = x(R, t) - x_{average}$ (1200 K, 3 wt% water).

Table 3. Final Packing Density Comparison

	Non-isothermal [kg/cm ³]	Experimental [kg/cm ³]	error [%]
1000 K	84.3324	81.0959	3.99
1100 K	95.0016	90.3060	5.20
1200 K	97.5398	91.7912	6.26
1300 K	98.7199	92.5846	6.63
1400 K	99.5129	92.7014	7.35

5는 각 온도에서 원석의 충전 밀도가 1.063 g/cm³ 및 1.140 g/cm³일 때 팽창된 페라이트의 충전 밀도를 나타낸 것으로 온도가 증가할수록 감소하는 경향이 있다. 또한 온도가 증가할수록 구형도는 증가하며 내부 버블의 크기와 공극의 크기가 거의 같아 높은 온도에서 충전 밀

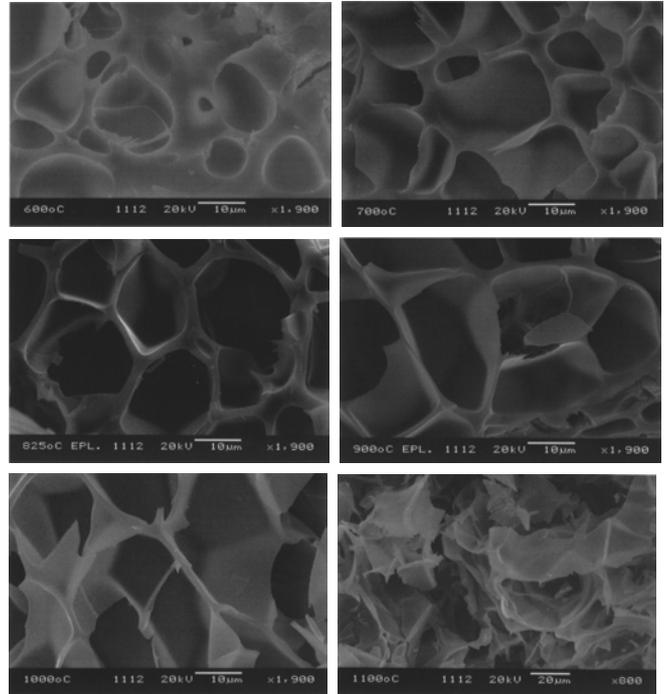


Figure 4. Cross sections of perlite heated at various temperature.

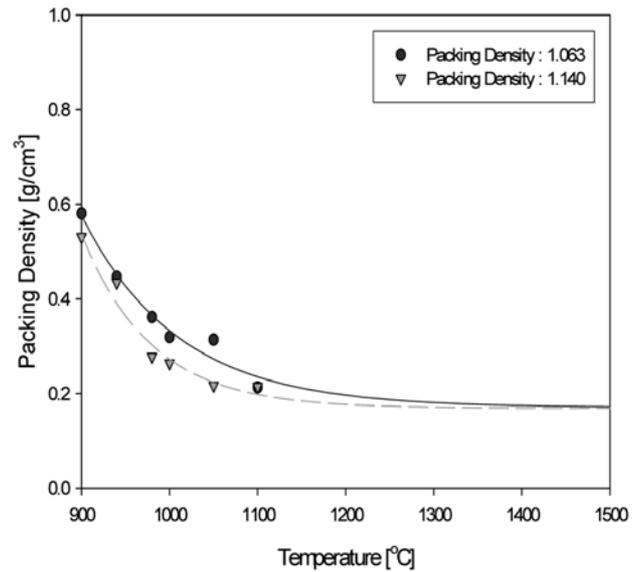


Figure 5. Packing density of perlite particle with various heating temperature.

도는 팽창 페라이트의 밀도와 같아질 것이라고 예측하였다. 이에 최종 밀도는 약 0.17에 접근하며 공극율은 1에 접근할 것으로 보였다. Figure 6은 전산 모사 결과와 실험 결과를 비교한 것으로 실험값이 차이를 나타내었다. 이를 정량적으로 Table 3에 나타내었다. 팽창 온도가 증가할수록 오차는 증가하였지만 1100 K 이하에서 5% 이내의 매우 정확한 결과를 얻을 수 있었고 1100~1400 K에서도 약 7% 정도의 오차를 가진다. 즉 본 연구에서 사용된 모델 및 코드를 적용하여 페라이트의 팽창 정도를 예측하는데 이용할 수 있을 것으로 사료되었다.

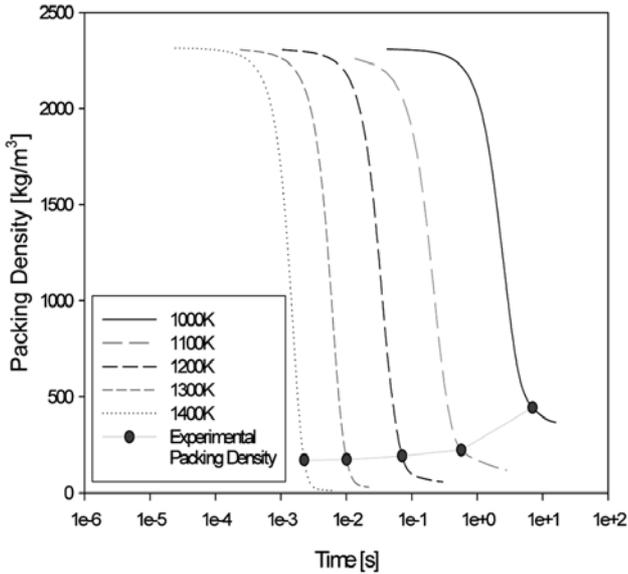


Figure 6. Experimental packing densities compared with non-isothermal results.

4. 결 론

본 연구를 통해 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- 1) 퍼라이트 비등은 팽창 모델을 개발하였고 이의 동적 모사 프로그램을 코딩하였다.
- 2) SEM 분석을 통하여 온도의 증가에 따른 팽창도의 증가를 확인하였다.
- 3) 팽창 온도의 증가에 따라 충전 밀도는 0.17 g/cm³에 접근할 것으로 예측되었다.
- 4) 팽창 크기를 예측하는데 있어 1100 K 이하에서 5% 이내의 오차를 가지며 1100~1400 K 범위에서도 약 7% 정도의 오차를 보였다.
- 5) 비등은 팽창 모델을 적용함으로써 퍼라이트의 팽창도를 정확히 예측할 수 있다.

사 용 기 호

- x_w^m : Water mole fraction in silicate melt
 K_w^m : Henry's law analogue constant for water in substance i

- R : Radius of bubble
 S : Radius of shell
 ρ_l : Density of perlite melt
 v_R : bubble growth rate
 P_{amb} : Ambient pressure
 P_g : Bubble pressure
 σ : Surface tension of perlite
 η : Viscosity of perlite
 m_g : Mass of water vapor in bubble
 V_g : Volume of bubble
 ρ_g : Density of bubble
 D : Diffusivity of water in perlite melt
 x_w : Water mole fraction in perlite melt
 x_R : water mole fraction at bubble/melt interface
 K_w^{mp} : Henry's law analogue constant for perlite melt
 E_a : activation energy

감 사

이 연구는 2007년도 단국대학교 대학연구비 지원으로 연구되었음.

참 고 문 헌

1. Y. M. Hahm and J. H. Kim, *J. Korean Ind. Eng. Chem.*, **18**, 424 (2007).
2. T. Murase and A. McBirney, *Geol. Soc. of Am. Bulletin*, **84**, 3563 (1973).
3. H. R. Shaw, *Am. J. of Science*, **272**, 870 (1972).
4. E. King, S. Todd, and K. Kelley, Bureau of Mines Report, R. I. 4394 (1948).
5. Y. Zhang, E. Stolper, and G. Wasserburg, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **55**, 441 (1991).
6. A. A. Proussevitch, D. L. Sahagian, and A. T. Anderson, *J. Geophys. Res.*, **98**, 22283 (1993).