

고압에서의 분무의 증발 및 연소 현상에 관한 연구

왕태중* · 백승욱**†

Study on Spray Vaporization and Combustion in High Pressure Environment

Taejoong Wang, Seungwook Baek

ABSTRACT

The present study is mainly motivated to investigate the vaporization, autoignition, and combustion of liquid fuel spray injected into high pressure environment. In order to represent these phenomena realistically, discrete droplet model (DDM) which simulates the spray using finite number of representative droplets was adopted for detailed consideration of the finite rate of transport between liquid and gas phases. The Eulerian-Lagrangian formulation was used to analyze the two-phase interactions. The high pressure vaporization model was applied using the thermodynamic and phase equilibrium at droplet surface. The high pressure effect as well as high temperature effect was considered in the calculation of liquid and gas properties. The characteristics of spray in high pressure environment were explained by comparison with normal pressure case.

Key Words : vaporization, autoignition, combustion of liquid fuel spray, discrete droplet model, high pressure vaporization model

기 호 설 명	
n	수밀도 (number density)
p	압력
r	액적 반경
R_{μ}	일반기체상수
t	시간
T	온도
u	축방향 속도
v	반경방향 속도
W	분자량
x	축방향 거리
y	반경방향 거리
μ	점성계수

1. 서 론

분무 연소는 액체 상태의 화학 연료로부터 동력을 얻는 수단으로써 다양한 연료에 대한 적용성, 높은 응답성, 고부하 연소 구현 등의 이유로

수많은 실용적 시스템에서 광범위하게 이용되어 왔으며, 앞으로도 산업 사회의 분무 연소에 대한 의존은 계속될 것이다. 특히, 자동차용 내연(internal combustion) 엔진 및 항공용 추진 시스템에서 연료의 증발 및 연소는 성능과 효율의 극대화를 위해 고온, 고압의 환경에서 일어나게 되는데 사회의 발전에 따라 고출력, 저소음, 배기가스 규제 등 해결해야 할 문제는 점점 더 복잡하고 어려워지고 있다. 물론, 분무 연소 시스템에서 발생하는 여러 문제점들과 관련하여 제반 기술

* 한국과학기술원 기계공학과 항공우주공학전공

† swbaek@sorak.kaist.ac.kr

** 한국과학기술원 기계공학과 항공우주공학전공

또한 빠르게 발전하고 있기는 하지만 동력원으로서의 잘 제어된 분무 연소를 구현함에 의해 문제점의 발생 자체를 줄인다는 것은 가장 근본적이고 중요한 해결책임에 틀림없다. 따라서 고온, 고압 환경에서의 분무 연소 현상에 대한 정확한 해석은 시스템에 대한 이해 및 최적의 설계, 나아가 제반 문제점들의 해결책 모색을 위해 반드시 필요한 연구 과제라 하겠다.

현재 이용되는 대부분의 실용적 분무 연소 시스템이 고압의 환경 하에서 작동하고 있음에도 불구하고 종래의 분무 연소에 대한 연구의 대부분은 상압 (normal pressure) 또는 저압의 환경 하에서 수행되어 왔다. 이는, 낮은 압력 환경 하에서는 해석을 단순화할 수 있는 적절한 가정들이 가능하여 상대적으로 다른 실제적 측면에 관심과 노력을 집중시킬 수 있기 때문이다. 상압 환경 하에서의 분무 거동에 대한 연구를 그 초점에 따라 살펴보면, 실제 분무 거동에 대한 사실적 모사를 위하여 분무를 수많은 액적들의 집합으로 보아 액상 (liquid phase)과 기상 (gas phase) 사이의 교환 현상에 초점을 둔 연구, 집단 연소 모델 (group combustion model)을 도입하여 분무 내 액적들 상호 간의 부딪힘, 깨어짐 등 복잡한 상호 작용에 대해 사실적 모사를 수행한 연구, 다양한 화학종 및 다단계 반응을 고려하여 실제 연소 화학 반응에 가깝게 모사한 연구 등으로 분류해 볼 수 있다[1-4].

또한, 단일 액적의 증발 및 연소에 대한 연구는 분무의 거동을 예측함에 있어서 그 기본이 된다 할 수 있는데, 고압 환경에서의 단일 액적에 대한 수치적 연구는 전통적으로 실험과 병행하여 많은 연구자들에 의해 수행되어 왔으며 이들 연구를 통해 단일 액적의 거동에 미치는 고압의 효과에 대한 충분한 이해를 가능하게 하였다[5-8].

고압 환경 하에서의 분무 거동에 관한 연구는 전술한 상압에서의 분무 연소에 대한 연구와 고압에서의 단일 액적에 대한 연구가 결합된 형태로 생각해 볼 수 있는데, 이들 연구에서는 고압에서의 분무 거동 특성에 내재된 복잡성과 난해함으로 인해 주로 자신들의 목적에 맞도록 단순화한 모델을 사용하고 있다. 발표된 연구를 살펴보면, 이상 (two phase) 간 전달 현상의 복잡성을 배제하기 위해 분무 유동을 관심 있는 국소 지역에서 단상 (single phase)으로 단순화시킨 Locally Homogeneous Flow (LHF) 모델을 이용한 연구, 실 기체 효과 (real gas effect) 등의 고압 효과를 고려하지 않으므로 고압 환경 하에서의 분무의 증발을 사실적으로 예측하는데 다소 무리가 있는 상압 증발 모델을 적용한 연구 등으로 분류해 볼 수 있다[9-14].

이와 같이 현재까지의 고압 환경 하에서의 분

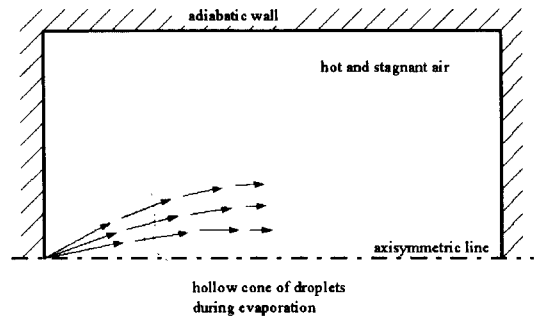


Fig. 1 Schematic of the liquid fuel spray and axisymmetric combustor

무 거동에 대한 수치적 연구는 여러 단순화 모델을 사용할 뿐더러 수많은 가정들을 포함하고 있기 때문에 실제 현상의 사실적 예측이라는 측면에 있어서 아직은 초기 단계라 할 수 있겠다.

따라서 본 연구에서는 이상 간 전달 현상 및 고압 효과 고려의 두 측면 모두에 초점을 두어 해석을 수행하였다. 분무의 사실적 모사를 위해서는 분무가 많은 수의 액적들에 의하여 대표되는 Discrete Droplet Model (DDM)을 사용하였으며, 고압 환경에서의 분무 거동에 대한 모사를 위해서는 실 기체 효과 및 고압 효과를 고려한 고압 증발 모델의 도입 및 온도뿐 아니라 압력에 대해서도 특성을 달리하는 기상, 액상의 물성치 계산에 중점을 두었다.

본 연구의 개략도를 Fig. 1에 나타내었는데, 액체 연료 분무는 2 차원, 비정상 (unsteady), 축대칭, 정적 (closed volume) 연소기 내 정지된 고온, 고압의 공기 중으로 분사되는 것으로 모사된다. 분사된 액적들은 시간이 경과함에 따라 증발, 혼합, 점화, 연소 등의 현상을 겪게 되는데, 이에 대한 해석을 통해 분무 거동 시에 나타나는 액적들 간 상호 작용을 이해하고, 특히 상압과의 비교를 통하여 고압 환경이 분무의 거동에 미치는 영향에 대해 중점적으로 살펴보고자 한다.

2. Models

분무의 증발, 혼합, 점화 및 연소 현상을 수치적으로 정확하게 모사하기 위해서는 복잡하고 다양한 고려가 요구되는데, 특히 분무와 주변 기체장의 서로 다른 두 상 (phase)을 어떻게 연관 시키는가 하는 것이 가장 기본적이고도 중요한 문제라 할 수 있다. 또한, 고압 환경 하에서의 분무의 거동을 정확하게 모사하기 위한 증발 모델이 적용되어야 하는데, 본 장에서는 본 연구에 사용한 분무 모델, 고압 증발 모델, 화학 반응 모델에 대하여 기술하였다.

2.1 분무 모델

연소기 내로 분사된 분무는 불연속적인 액적군의 형태로 연속적인 기체장 속을 지나가는 유동 형태를 갖는데, 이를 모사하는 대표적인 방법으로는 Locally Homogeneous Flow (LHF) 모델과 Separated Flow (SF) 모델을 들 수 있다.

기상 (gas phase)과 액상 (liquid phase) 간의 전달 현상의 속도가 유동장의 전개 속도에 비해 매우 빨라서 국소적인 위치에서 두 상이 동적, 열적으로 평형 상태에 있다고 보는 LHF 모델은 유동의 각 지점에서 두 상이 동일한 속도와 온도를 지니는 물론, 상 평형 (phase equilibrium) 상태에 있음을 가정한다. 따라서 분무 유동은 기체와 액체의 물성치가 적절히 평균된 단상 (single phase) 유동으로 취급되며, 분무 액적의 크기가 매우 작거나 기체와 액체 사이의 밀도 차이가 적어서 액적이 기체 유동을 잘 따라가는 제한적인 경우에만 합리적인 모델이라 할 수 있다 [4, 15].

이에 반하여, 두 상간의 유한한 열 및 물질 전달을 고려하는 SF 모델은 LHF 모델에 비해 액적의 존재를 고려하여 발생하는 추가적인 방정식들에 의한 복잡성에도 불구하고 실제적인 분무 액적의 정량적 예측을 가능케 한다.

본 연구에서는 SF 모델 가운데에서도 분무가 개별적인 액적들에 의해 대표되어 모사되는 Particle Source In Cell (PSIC) 모델을 사용하였는데, 연속상 (continuous phase)인 기체장은 오일러리안 관점 (Eulerian approach)에서 분산상 (dispersed phase)인 분무 액적은 라그랑지안 관점 (Lagrangian approach)에서 기술하였으며 액적과 기체장 사이의 상호 작용은 기체장의 지배 방정식에 나타나는 생성항 (source term)에 의하여 고려되었다[16].

2.2 고압 증발 모델

고온의 기체장 내로 분사된 분무 내의 각 액적들은 시간이 경과함에 따라 기체장으로의 증발을 시작하는데 이러한 연료 액적의 증발 현상은 액적 표면에서와 주변 기체장과의 농도 구배 (concentration gradient)에 의해 일어나게 된다. 따라서 액적 증발율의 사실적 예측을 위해서는 액적 표면에서의 연료 농도를 정확하게 얻어내야 하는데, 상압 환경 하에서는 이상기체 가정을 통하여 액적 표면에서의 연료 농도를 간단하게 얻을 수 있지만 고압 환경에서는 이상기체 상태 방정식을 사용할 수 없으며 실 기체 효과 (real gas effect)를 고려하여 이를 구해야 한다.

본 연구에서는 실 기체 효과를 고려한 열역학적 평형 (thermodynamic equilibrium) 조건과 상 평형 조건을 이용하여 액적 표면에서의 연료 농도를 얻었으며 이로부터 액적의 증발율을 구하였

다. 이 때, 실 기체 효과를 고려하기 위해 Redlich-Kwong 상태 방정식을 사용하였으며 온도, 압력 및 조성에 따른 액적 증발열의 변화를 고려하였다. 본 연구에 적용한 고압 증발 모델에 대해서는 다음에 나타내었다.

액적 표면에서 열역학적 평형 상태가 만족되기 위해서는 액적 표면에서의 온도, 압력 및 각 화학종의 플게시티 (fugacity) 사이에 다음의 조건들이 성립해야 한다.

$$T^v = T^l ; \quad p^v = p^l ; \quad f_i^v = f_i^l$$

여기서, 상첨자 v 와 l 은 각각 기상과 액상을 의미한다. 이 때, 주변 기체의 연료 액적으로의 용해 (solubility)를 무시한다면 기상과 액상 간의 상 평형 관계식은 앞의 플게시티 관계식을 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$X_{f,i}(p, T) = \frac{p_{vp,i}(T)}{p} \frac{\phi_{f,i}^v(T)}{\phi_{f,i}^l} \exp\left(\int_{p_{v,i}}^p \frac{v_i^l(T, p)}{R_u T} dp\right)$$

여기서, 하첨자 f 는 연료 증기에 대한 것임을 의미하며, $X_{f,i}$ 는 액적 표면에서의 물 분율, $p_{vp,i}$ 는 포화 증기 압력, $\phi_{f,i}^v$ 는 포화 상태에서의 플게시티 상수 (fugacity coefficient), v_i^l 은 액체 상태의 몰 체적을 의미한다. 위 관계식에서 플게시티 상수는 다음 식으로부터 구할 수 있다.

$$R_u T \ln \phi_{f,i} = \int_v^\infty \left[\left(\frac{\partial p}{\partial N_i} \right)_{T, v, N_i} - \frac{R_u T}{v} \right] dv - R_u T \ln Z$$

여기서, N_i 는 각 화학종의 몰수, v 는 몰 체적, Z 는 압축성 인자 (compressibility factor)를 나타낸다. 또한, 액적의 상변화 시에 필요한 에너지는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\Delta h = \sum_i X_i^l \overline{H}_i^l(T, p, X_i^l) - \sum_i X_i^v \overline{H}_i^v(T, p)$$

여기서, X_i^l 과 X_i^v 는 각각 액체 상태와 기체 상태에서의 물 분율을, \overline{H}_i^l 은 액체 상태에서 각 성분의 엔탈피를 나타내며, \overline{H}_i^v 는 다음의 관계식에 의하여 결정한다.

$$(\overline{H}_i^v - H_i^0)_{T,p} = -R_u T^2 \left(\frac{\partial \ln \phi_{f,i}}{\partial T} \right)_{p, X_i^v}$$

여기서, H_i^0 는 동일한 온도에서의 이상 기체 상태의 엔탈피를 의미한다.

2.3 화학 반응 모델

본 연구에서 연소 현상은 2차 (second-order) 단단계 (single-step) 비가역 화학 반응으로 가정하였으며 아레니우스 (Arrhenius) 형태의 연소 반응률을 사용하였다.

연료를 n-heptane (C_7H_{16}), 산화제를 공기로 하여 당량비 (equivalent ratio) 1일 때의 화학 반응식은 다음과 같다.



또한, 연소 반응률은 다음과 같은 아레니우스 형태로 쓸 수 있다.

$$R_f = A [C_{C_7H_{16}}]^a [C_{O_2}]^b \exp\left[-\frac{E_a}{R_u T}\right]$$

여기서, $C_{C_7H_{16}}$ 와 C_{O_2} 는 각각 연료와 산소의 농도 (concentration)를 의미하고, A 는 아레니우스 상수 (Arrhenius factor), E_a 는 활성화 에너지 (activation energy), a 와 b 는 연료와 산소에 대한 각각의 농도 지수 (concentration exponent)를 나타낸다. 본 연구에서의 연료인 n-heptane에 대한 이 값들은 Table 1에 나타내었다 [17].

3. 지배 방정식

3.1 기체장에 대한 지배 방정식

분무의 거동과 관련된 기체장 내 모든 종속 변수들에 대한 일반적인 형태의 지배 방정식은 다음과 같은 기본 형태로 나타내어진다.

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{U}\phi) - \text{div}(\Gamma\text{grad}\phi) = S_\phi$$

여기서, ρ 는 기체의 밀도, ϕ 는 일반화된 종속 변수, \vec{U} 는 속도 벡터, Γ 는 일반화된 확산 계수, S_ϕ 는 관련 종속 변수의 생성항으로써 실제 물리적인 생성항 외에 위식의 좌변에서 고려하지 않은 모든 항들을 포함한다. 위식의 좌변 첫 항은 ϕ 의 시간에 대한 증가율을 나타내며, 둘째 항은 질량 유량에 의한 ϕ 의 전달을 의미하는 대류항, 셋째 항은 ϕ 의 공간적 구배에 의한 확산항, 우변은 ϕ 의 생성과 소멸을 나타내는 생성항을 의미한다.

또한, 앞의 식을 원통형 좌표계로 나타내면 다음과 같다.

Table 1 Properties of n-heptane

Property	Value
A	$5.1 \times 10^{11} [cm^3/mol]^{0.75} [sec]^{-1}$
E_a	$30 [kcal/mol]$
a	0.25
b	1.5

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi - \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y}(\gamma \rho v\phi - y\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}) = S_{\phi,g} + S_{\phi,l}$$

여기서, $S_{\phi,g}$ 는 기체장에 의한 생성항, $S_{\phi,l}$ 은 액적에 의한 생성항을 의미한다. 각 방정식에서의 변수 및 생성항은 Table 2에 나타내었다.

3.2 액적에 대한 지배 방정식

연소기 내부로 분사된 액적들은 기체장 내 질량의 생성 또는 소멸의 형태로 나타나는 증발 및 응축, 기체장과의 운동량 교환에 따른 가속 및 감속, 기체장과의 열 에너지 교환으로 인한 가열 및 냉각 과정 등 다양한 경험을 하게 된다. 이러한 액적들의 거동은 라그랑지안 접근 방법을 적용하여 다음의 지배 방정식들에 의해 해석이 수행된다.

3.2.1 액적의 질량 보존 방정식

본 연구에서 분무 액적들은 정지된 공기와 상대 속도를 가지고 움직이므로 액적의 증발 시 강제 대류 (forced convection) 효과를 고려해야 한다. 액적의 질량 보존에 대한 식은 Reynolds 수와 Prandtl 수를 적용한 다음의 Ranz-Marshall의 실험식을 사용하였다[20].

$$\frac{dm_d}{dt} = \dot{m}_s(1 + 0.3Re^{0.5} Pr^{0.33})$$

여기서, 액적이 항상 구형을 유지하고 준평형 상태로 가정하면 위식에 나타나는 정지 상태에서의 액적 증발율은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\dot{m}_s = 2\pi d\rho D \ln(1+B)$$

여기서, d 는 액적 직경, D 는 확산 계수이며, B 는 Spalding의 전달 수 (transfer number)로써 다음과 같이 표현된다.

$$B = \frac{Y_{fs} - Y_f}{1 - Y_{fs}}$$

여기서, Y_{fs} 는 열역학적 평형 및 상 평형 관계식으로부터 얻어지는 액적 표면에서 연료의 질량 분율을, Y_f 는 액적 주변 기체의 연료 질량 분율을 의미한다.

3.3.2 액적의 운동량 보존 방정식

중력, Basset 힘, 액적 간의 충돌 등을 무시한 액적의 운동량 보존에 관한 식은 다음과 같다.

$$m_d \left(\frac{du_d}{dt} \right) = \frac{1}{2} \rho C_D (u - u_d) |u - u_d| A_d - \left(\frac{m_g}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right)$$

여기서, m_d 는 액적의 질량, u_d 는 액적의 속도, A_d 는 액적의 단면적, m_g 는 액적의 부피에 해당하는 주변 기체의 질량을 나타낸다. 또한, C_D 는 증발하지 않고 남아있는 액적의 항력 계수로써 액적의 Reynolds 수가 1000 이하이면 다음과 같이 나타낸다.

$$C_D = 24(1 + 0.15Re^{0.687})/Re$$

앞의 액적 운동량 보존 방정식에서 우변 첫째 항은 항력에 의한 효과를 나타내며, 둘째 항은 주변 기체의 정압력 구배의 효과를 의미한다. 또한, 식의 좌변을 Runge-Kutta 방법으로 적분을 수행함으로써 액적의 속도 및 궤적을 얻을 수 있다.

3.3.3 액적의 에너지 보존 방정식

액적의 에너지 보존 방정식은 다음과 같다.

$$m_d \frac{dT_d}{dt} = \frac{N\pi k d}{c_{pd}} (T - T_d) - \frac{L}{c_{pd}} \dot{m}_d$$

여기서, k 는 기체의 열전도 계수, c_{pd} 는 액적의 비열, L 은 증발 잠열을 나타내며, 무한대 전도 모델 (infinite conduction model)을 이용한 액적 표면에서의 Nusselt 수는 다음과 같이 나타낸다.

$$N = 2 + 0.6Re^{0.5} Pr^{0.33}$$

앞의 에너지 보존 식에서 좌변은 액적의 온도 증가를 나타내고, 우변의 첫째 항은 액적과 기체장 사이의 온도 차에 의한 열 에너지의 이동을, 둘째 항은 액적의 증발에 필요한 에너지를 의미한다. 즉, 기체장이 액적보다 고온일 경우 액적으로 유입되는 열이 액적의 증발 및 온도 증가에 쓰임 을 수학적으로 기술하고 있다.

3.3.4 액적의 직경 변화율 관계식

액적의 직경 변화율은 다음에 의하여 결정되는 데, 이 식에서 우변 항은 액적의 질량 보존식에서 얻은 값을 사용한다.

$$-\frac{d}{dt} \left(\frac{\rho_d \pi d^3}{6} \right) = \dot{m}_d$$

Table 2 Variables and source terms appearing in gas field governing equation

Equation	ϕ	Γ_ϕ	$S_{\phi,g}$	$dV_\phi S_{\phi,t}$
Continuity	1	0	0	$\sum n \dot{m}$
Axial momentum	u	μ	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right)$	$\sum \left(n \dot{m} u - \frac{4}{3} \pi \rho_d r^3 \dot{m} F_\phi \right)$
Radial momentum	v	μ	$-\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{2uv}{y^2} + \frac{\rho w^2}{y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right)$	$\sum \left(n \dot{m} v - \frac{4}{3} \pi \rho_d r^3 \dot{m} F_\phi \right)$
Energy	h	Γ	$\frac{\partial p}{\partial t} + \mu G + W_i Q R_i$	$\sum \{ -n \dot{m} c_p (T_i - T_d) + L \}$
Mass fraction (fuel)	Y_f	Γ	$-W_i R_i$	$\sum n \dot{m}$
Mass fraction (others)	Y_i	Γ	$\mp \nu_i W_i R_i$ (- for O_2 , + for products)	0

where, $\Gamma = \frac{\mu}{Pr}$, $G = 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{v}{y} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2$, $F_\phi = \frac{\partial \phi_d}{\partial t}$

4. 수치해석 기법

4.1 유한 차분 방정식

기체장에 대한 지배 방정식의 유한 차분화를 위해서 TEACH 코드[18]를 수정하여 적용하였다. 본 연구에 사용된 수정된 TEACH 코드에서 대류항은 국소 제어 체적의 Peclet 수에 따라 적절한 차분 방법을 사용하였으며, 확산항은 중앙 차분 하였다. 또한, 반복 계산 시마다 질량 보존이 만족 되도록 하는 Weak 압력 방정식을 운동량 방정식과 연계하여 풀이하였으며, 수렴성을 좋게 하기 위하여 생성항은 선형화하여 중앙 차분 하였다.

4.2 수치 해법 알고리즘

기체장의 지배 방정식 풀이를 위하여 SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) 알고리즘[19]을 적용하였으며, 최종 유한 차분 방정식은 Tri-Diagonal Matrix Algorithm (TDMA)을 이용하여 해를 구하였다.

전체 계산 알고리즘은 Fig. 1에 나타내었는데, 최초, 액적과의 관련을 배제한 상태로 기체장을 충분히 수렴할 때까지 계산한다. 다음으로, 얻어진 기체장의 속도, 압력, 온도 등의 정보를 고려하여 각 액적들을 계산한다. 이 때, 액적들이 경험하는 항력, 온도 증가 및 증발에 의해 나타나는 생성항을 고려하게 되고 이 생성항들은 기체장의 지배 방정식에 추가되어 두 상을 연결하게 된다. 마지막으로, 이렇게 액적에 의한 생성항이 고려된 기체장을 풀게 되고 모든 변수들이 충분히 수렴되었으면 다음 시간 단계로 이동하여 앞의 과정을 반복한다.

5. 물성치

고압 환경에서는 이상기체 상태 방정식을 사용할 수 없다. 또한, 열전도도, 열용량, 점성계수,

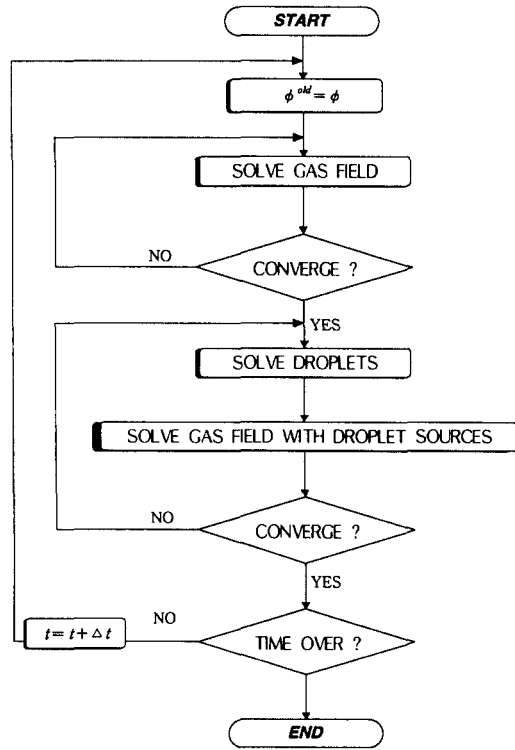


Fig. 2 Computational flow chart

확산계수 등의 물성치들은 고온, 고압의 환경에서 온도, 압력 및 조성에 따라 민감하게 변화하므로 상수 값으로 두거나 상압, 상온에서의 값을 사용하게 되면 그 만큼 수치적인 오차를 포함하게 된다. 따라서 실 기체 효과 및 물성치의 고온, 고압 효과를 고려해주어야 한다.

본 연구에서는 Redlich-Kwong 상태 방정식을 이용하여 실 기체 효과를 나타내었으며, 기상 및 액상의 물성치에 대한 고온, 고압 효과는 Table 3에 나타낸 바와 같이 고려하였다.

Table 3 Calculation methods for gas and liquid properties

Phase	Property	Baseline method	High pressure correction
Gas	Heat capacity	3rd-order polynomial of temperature	
	Thermal conductivity	3rd-order polynomial of temperature	Stiel and Thodos, 1964
	Viscosity	Chung et al., 1986	Reichenberg, 1975
	Diffusivity	Fuller et al., 1969	Takahashi, 1974
Liquid	Density	Exponential function of temperature	
	Heat capacity	Rowlinson, 1969	

(Baseline method means that properties are calculated at 1 atm.)

6. 결과 및 토의

본 연구에서의 결과에 대한 계산 조건은 특별한 언급이 없는 한 다음의 표와 같다. 여기서, 액체 연료는 초기 1 [ms] 동안에 분사가 완료되는데, 0.25 [ms] 마다 한 번씩 총 40 번에 걸쳐 분무가 분사되는 것으로 모사하였다.

Fuel	n-heptane
Oxidizer	Air
Initial gas temperature	1000 [K]
Initial droplets temperature	300 [K]
Initial droplets diameter	100 [μm]
Spray injection velocity	15 [m/s]
Fuel inflow rate	0.001 [kg/s]
Injection time duration	1 [ms]

Table 4 Operating conditions

6.1 점화 기준

점화란 외부의 열화학적 자극에 의한 화학적인 무반응 상태에서 반응 상태로의 천이를 말한다. 점화는 매우 복잡한 물리적, 화학적인 단계를 거쳐서 일어나기 때문에 현재까지도 점화 시점에 대한 정확한 기준은 없으며 여러 연구자들에 의한 다양한 기준들이 제시되었을 뿐이다. 수치적 연구에 있어서는 기체 온도의 시간에 대한 변곡점, 반응물의 시간에 대한 변곡점, 기체장 내 임의 지점의 온도가 주변 온도보다 일정량만큼 높아지는 시점 등이 점화 시점으로 사용되고 있다. 본 연구에서는 최대 반응물의 시간에 대한 변곡점, 즉 기체장 내 최대 반응물의 시간에 대한 2차 미분 값이 영 (zero)이 될 때를 점화 시점으로 설정하였으며, 이의 타당성을 검토하기 위하여 기체장 내 최대 온도의 변화를 확인하였다.

Fig. 3과 Fig. 4는 기체장의 압력이 5 기압일 때 기체장 내 최대 반응물의 시간에 대한 2차 미분 값의 변화 및 최대 온도의 변화를 나타내고 있다. 여기서, 결과 값들이 연속적이지 못하고 진동하는 이유는 기체장 내 한 점에서의 값을 시간의 경과에 따라 얻은 것이 아니라 동일 시간대에서 기체장의 모든 위치 중 최대의 값을 취하였기 때문이다.

우선, Fig. 3에서 볼 수 있듯이 유동장 내 최대 반응물의 시간에 대한 변곡점이 나타나는 시점은 대략 1.3 [ms] 부근임을 알 수 있으며, 따라서 주어진 작동 조건에서의 분무의 점화시기를 1.3 [ms]로 볼 수 있다. 또한, Fig. 4로부터 확인할

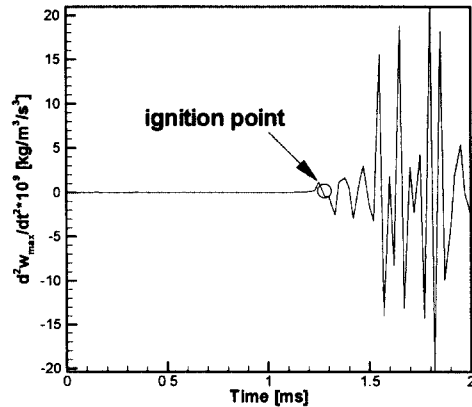


Fig. 3 History of 2nd-order time derivative of maximum reaction rate

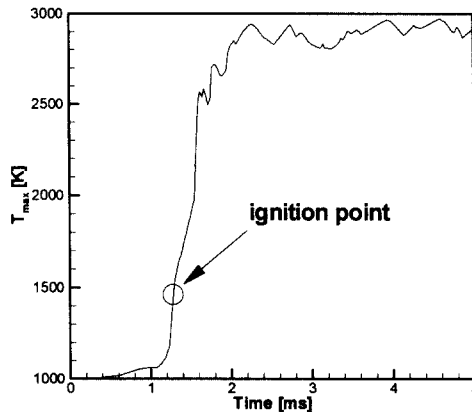


Fig. 4 History of maximum temperature

수 있듯이 대략 1.3 [ms] 부근에서 기체장 내의 최대 온도가 급격히 증가하고 있는데, 이는 예측한 점화 시점이 합리적임을 나타낸다.

6.2 증발

고온의 공기 중으로 분사된 분무 내의 각 액적들은 시간이 경과함에 따라 기체장으로의 증발을 시작하게 된다. 이 때, 액적의 증발과 관계되는 요인으로 액적의 증발열 (heat of vaporization), 기체장과 액적 사이의 확산계수 (diffusivity), 액적 표면에서 연료의 질량 분율 (mass fraction), 정지된 기체장과 액적 사이의 상대 속도로 인한 강제 대류 (forced convection) 효과 등을 생각해 볼 수 있다.

본 절에서는 단일 액적 증발과의 비교를 통하

여 분무의 증발 현상에 대해 살펴보았으며, 또한 기체장의 압력이 액적 증발에 미치는 영향에 대해 알아보았다. 이 때, 단일 액적은 중심축으로부터 0.10 [mm]의 위치에서 10 [°]의 각도로 분사되는 것으로 모사하였으며, 분무는 중심축으로부터 세 위치 (0.10, 0.25, 0.40 [mm])에서 각각 네 방향 (10, 12, 14, 16 [°])으로 분사되는 12개의 액적들에 의해 대표되는 것으로 모사하였다.

Fig. 5와 6에 기체장이 상압 ($P_{\infty} = 1$ [atm])과 고압 ($P_{\infty} = 20$ [atm])인 경우 각각에 대하여 분무 내 액적들과 단일 액적의 증발 현상에 대한 비교 결과를 도시하였으며, 이들 결과로부터 다음의 사항을 생각해 볼 수 있다.

첫째, Fig. 5와 6의 결과에서 볼 수 있듯이 액적의 온도가 끓는점에 도달하기 전에는 액적 직경이 완만하게 감소하다가 액적이 끓는점에 도달하고 나면 액적 직경이 급격하게 감소한다. 즉, 액적 증발의 대부분은 액적이 끓는점에 도달한 이후에 일어남을 알 수 있다. 이는 다음으로 생

각해 볼 수 있는데, 고온의 기체장으로부터 액적으로 유입되는 열은 최초 액적의 증발과 온도 증가의 두 부분에 쓰이다가 액적이 끓는점에 도달하고 나면 유입되는 열 모두가 액적의 증발에만 사용되기 때문이다.

둘째, 시간에 따른 액적 직경의 변화를 나타내는 Fig. 5로부터 기체장이 상압인 경우에는 단일 액적이 분무보다 생존 시간이 짧지만 고압인 경우에는 분무의 생존 시간이 더 짧음을 알 수 있다. 기체장의 압력이 1 기압인 경우에 대한 결과에서 단일 액적이 분무보다 생존 시간이 더 짧게 나타나는 이유는 다음으로 설명할 수 있다. 분무의 경우는 단일 액적만이 분사되는 경우에 비하여 동일한 공간 내에 더 많은 액적들이 상호 인접하여 존재하게 되는데, 그러므로 분무 내 각각의 액적들은 단일 액적의 경우보다 고온의 기체장으로부터 더 적은 양의 열을 전달받게 된다. 따라서 Fig. 6에서 볼 수 있는 바와 같이 단일 액적의 경우에 비해 분무 내 액적들은 온도 상승

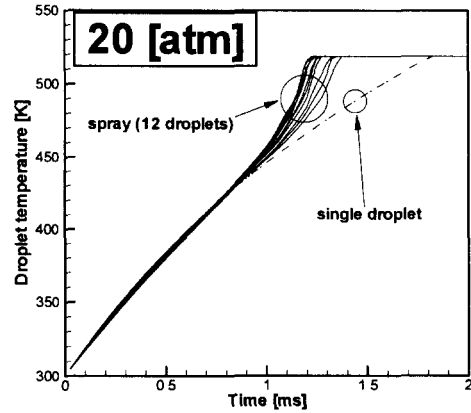
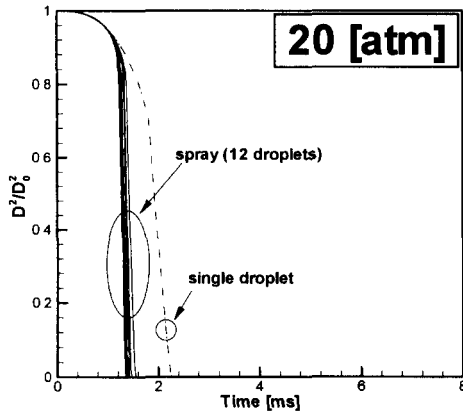
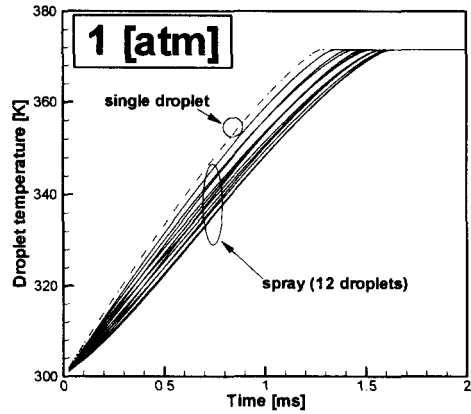
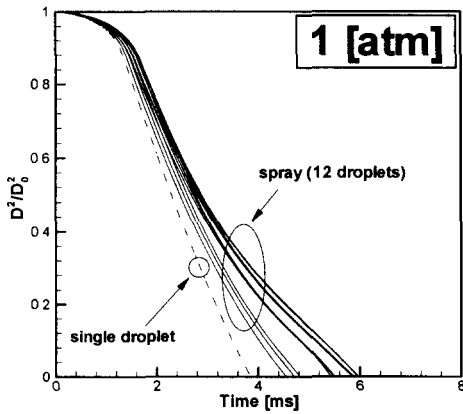


Fig. 5 Evaporation history

Fig. 6 Temperature history

이 더디게 되며 끓는점에 더 늦게 도달하게 된다. 결과적으로 이는 분무 내 액적들이 단일 액적의 경우에 비해 생존 시간이 더 길어지는 원인이 된다. 또한, 분무의 경우에 상호 인접하여 존재하는 액적들로부터 증발된 연료 증기들이 기체장 내에 더 많이 존재하게 되므로 단일 액적의 경우에 비하여 기체장과 액적 사이에 더 작은 연료 농도 구배를 갖게 되고, 따라서 분무 내 액적들의 생존 시간이 더 길어지는 원인이 된다.

다음으로, Fig. 5의 압력이 20 기압인 결과에서 나타나는 것처럼 기체장이 고압인 경우에는 상압의 경우와 반대로 분무 내 액적들이 단일 액적의 경우에 비해 생존 시간이 더 짧다. 이는 Fig. 6의 20 기압에 대한 결과로부터 볼 수 있는 바와 같이 분무 내 액적들이 더 빨리 끓는점에 도달하기 때문이며, 이에 대한 원인은 고압 환경에서 반응물이 크므로 가열 초기동안 증발된 연료에 대한 연소가 빠르고 급격히 일어나게 되어 분무 액적들 주변으로 화염대가 형성되고, 따라서 액적들이 위치하는 지역에 기체장의 온도가 급격히 증가하여 액적으로 유입되는 열이 많아지기 때문이다. 또한, 20 기압에서의 분무 내 액적들에 대한 온도 변화 결과에서 온도가 다소 불연속적으로 증가하는 모습을 보이는데, 이는 액적들 주변 기체장의 온도가 불연속적으로 증가하기 때문이다.

6.3 분무 침투 깊이

분무 침투 깊이 (spray penetration depth)란 정지된 기체장 내로 분사된 액체 분무의 선단이 도달하는 최대 거리를 의미한다. 분무 침투 깊이는 액적의 운동 에너지와 주변 기체장에 의한 공기역학적 저항의 상대적 크기에 의해서 결정되는데, 특히 엔진 내부에서의 액체 연료의 증발 및 연소와 같은 경우에 침투 깊이가 너무 길면 증발되지 못한 연료가 엔진 실린더의 벽면을 적시게 되어 불완전 연소의 원인이 되며, 반면 침투 깊이가 너무 작은 경우에는 증발된 연료와 실린더 내 기체 산화제와의 혼합이 충분히 이루어지지 않게 되므로 이 역시 불완전한 연소가 일어나게 된다. 따라서 분무의 침투 깊이는 내연 기관과 같은 연소 시스템의 최적 설계 시에 중요하게 고려되어야 할 사항이다.

Fig. 7과 Fig. 8은 상압 ($P_{\infty} = 1$ [atm])과 고압 ($P_{\infty} = 20$ [atm]) 환경에서의 분무 침투 깊이를 나타내고 있다. 두 경우의 비교로부터 동일한 속도로 분사된 분무에 대하여 기체장이 고압일 때 분무 침투 깊이가 짧음을 볼 수 있는데, 이에 대해서는 다음의 요인을 생각해 볼 수 있다.

첫째, 앞에서의 결과로부터 기체장이 고압일 때 분무 내 액적들의 더 빠르게 증발함을 확인하였는데, 액적들이 빨리 증발되면 그 만큼 멀리

다다를 수 없음을 자명하며, 따라서 고압의 경우 분무의 침투 거리가 짧은 원인으로 액적들의 생존 시간이 짧기 때문임을 생각할 수 있다.

둘째, 기체장 내로 분사된 액적들에 작용하는 항력에는 기체장과 액적의 여러 요인들이 관계한

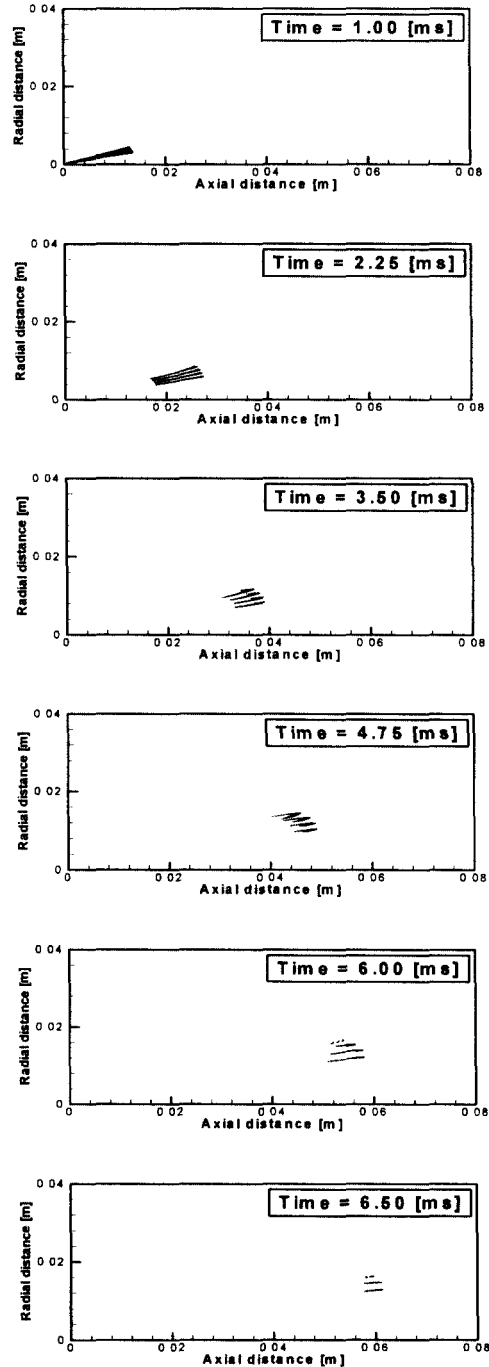


Fig. 7 Trajectory of spray ($P_{\infty}=1$ [atm])

다. 특히, 액적들의 직경이 크게 변화하지 않는 분사 초기에는 기체장의 밀도가 가장 큰 영향을 미치게 되는데, 액적에 작용하는 항력은 기체장의 밀도에 비례하여 증가하게 된다. 따라서 동일한 온도에서 기체장이 고압일 때 그 밀도 또한

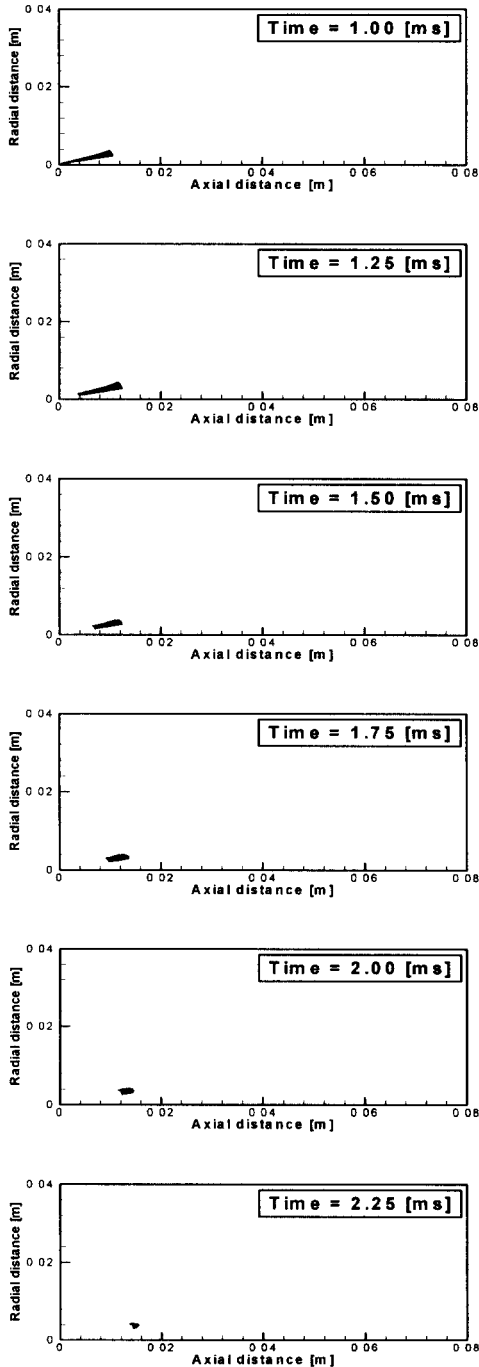


Fig. 8 Trajectory of spray ($P_{\infty}=20$ [atm])

크므로 분사 초기에 액적에 작용하는 상대적으로 큰 항력이 분무 침투 거리를 짧게 하는 요인이 된다.

또한, Fig. 7의 결과에서 뒤따르는 액적들이 먼저 분사된 액적들을 역전하는 모습을 볼 수 있다. 이는, 먼저 분사된 액적들이 증발하면서 기체장의 온도를 낮아지게 하므로 뒤따르는 액적들은 상대적으로 저온의 지역을 지나게 되고 결과적으로 뒤따르는 액적들의 증발률이 먼저 분사된 액적들보다 작아지게 된다. 따라서 먼저 분사된 액적들의 직경이 더 빨리 감소하므로 기체장으로부터 받는 항력에 대한 관성력 (inertia force)의 크기가 뒤따르는 액적들보다 작아지게 되어 결국 그림에서와 같이 역전되는 모습을 보이게 된다.

6.4 연소

본 절에서는 상압 ($P_{\infty} = 1$ [atm])과의 비교를 통한 고압 ($P_{\infty} = 20$ [atm]) 환경에서의 분무의 점화 및 연소 특성에 대해 살펴보았는데, 이는 기체장 내의 속도, 온도 및 반응률 분포 등에 대한 해석을 통하여 수행되었다.

6.4.1 기체장 내의 속도 분포

기체장은 최초 정지 상태에 있다가 유입되는 분무 액적들에 의해 유동이 발생하게 된다. Fig. 9의 처음 두 결과는 액적들의 분사에 의해 기체장 내에 유도되는 유동의 모습을 보여주고 있다. 5.75 [ms]의 결과에서는 화염에 의한 팽창의 영향을 보여주고 있으며, 이로 인해 화염 영역에서 무질서한 유동이 나타나고 있다. 또한, 7.75 [ms]의 결과에서는 분무 액적들의 진행 경로 주변으로 순환 영역이 나타나고 있음을 관찰할 수 있으며, 이후 시간의 경과에 따라 유동이 점차 약해지는 모습을 볼 수 있다.

Fig. 10은 기체장의 압력이 20 기압일 때의 결과로써 상압에서의 결과에 비해 속도 벡터의 크기가 상대적으로 작으며, 또한 유동 영역이 좁게 나타나고 있음을 볼 수 있다. 이는, 고압 환경에서의 빠른 액적 증발에 의한 짧은 분무 침투 거리를 그 원인의 하나로 생각할 수 있으며, 동일한 온도에서 고압일수록 기체장의 밀도가 큰 것도 분무 액적들에 의해 발생하는 기체장의 유동 속도가 작게 되는 원인으로 작용한다. 이렇게 고압 환경에서는 속도의 크기가 작고 유동 영역이 좁기 때문에 고온의 화염 영역에서 상대적으로 저온인 주변 영역으로의 대류 (convection)에 의한 열전달이 상압에 비해 제한되는 결과를 낳는다.

6.4.2 기체장 내의 온도 분포

Fig. 11과 Fig. 12는 기체장 내 온도 분포 변화를 나타내고 있는데, 이로부터 전형적인 분무 연

소의 모습을 관찰할 수 있다.

Fig. 11의 처음 두 결과는 기체장보다 낮은 온도를 가지고 분사되는 분무의 모습을 나타내고 있으며, 3.75 [ms] 결과에서는 저온의 분무 영역

후방에서 점화에 의한 고온 영역이 발생하고 있음을 보여주고 있다. 이후 시간이 흐르면서 저온의 분무 영역을 따라가며 화염이 성장하고 있는데, 이렇게 화염이 분무의 뒤에서 전파되어 오는

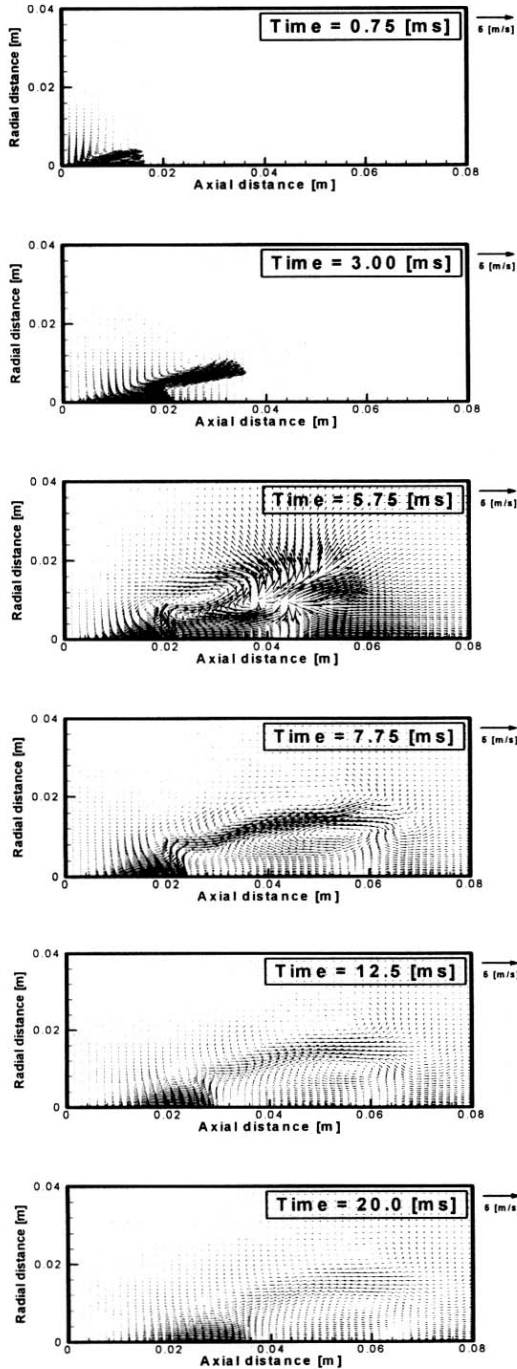


Fig. 9 Velocity distribution in gas field ($P_{\infty}=1$ [atm])

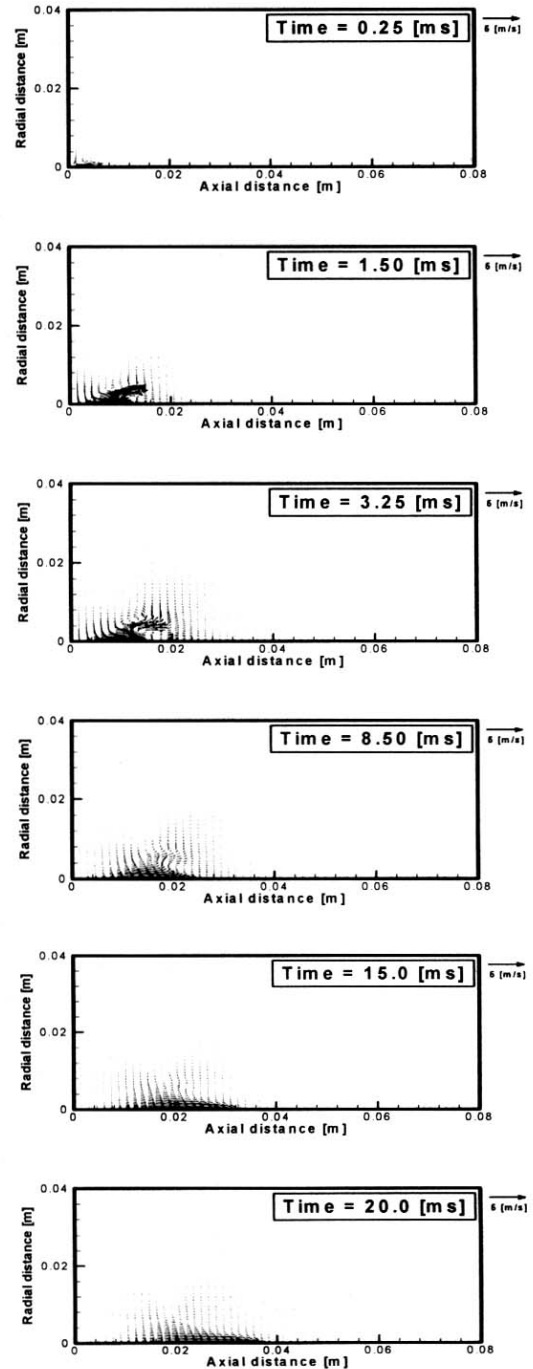


Fig. 10 Velocity distribution in gas field ($P_{\infty}=20$ [atm])

모습을 갖는 이유는 증발된 연료와 주변 공기가 섞여서 가연 혼합기 상태가 되는데 시간이 소요되기 때문이며, 이는 분무 연소의 전형적 특성인 확산 화염 (diffusion flame)을 나타내고 있다.

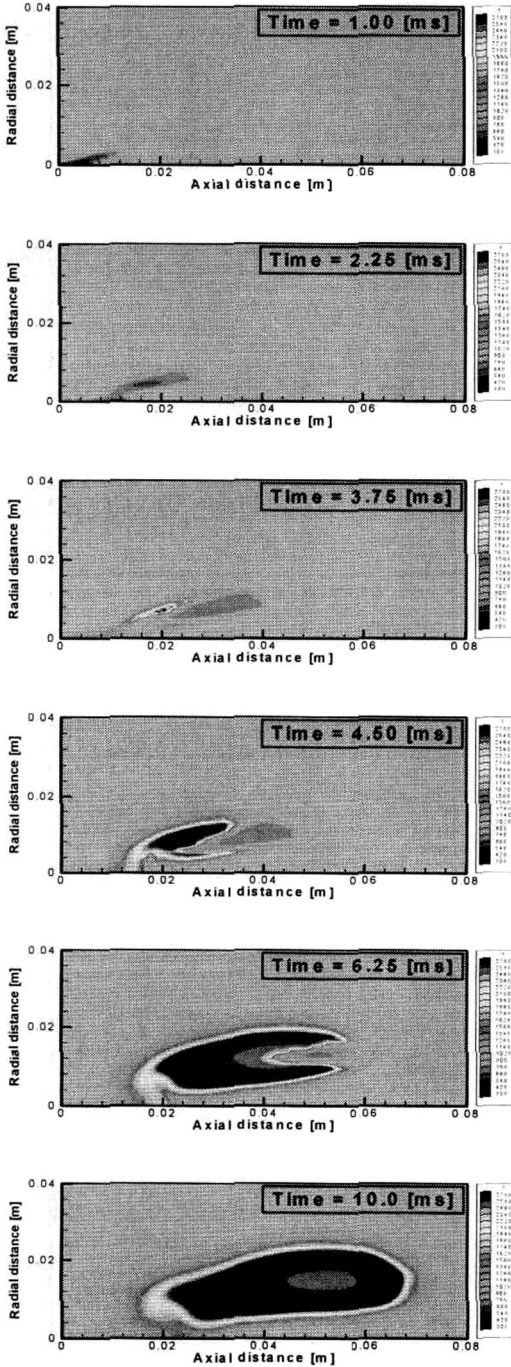


Fig. 11 Temperature distribution in gas field ($P_{\infty}=1$ [atm])

Fig. 12는 주변 압력이 20 기압일 때의 결과를 도시하고 있는데, 1.00 [ms]에서 이미 점화가 시작되어 고온의 영역이 나타나고 있다. 즉, 상압에서의 점화 시간과 비교할 때 고압 환경에서 분무

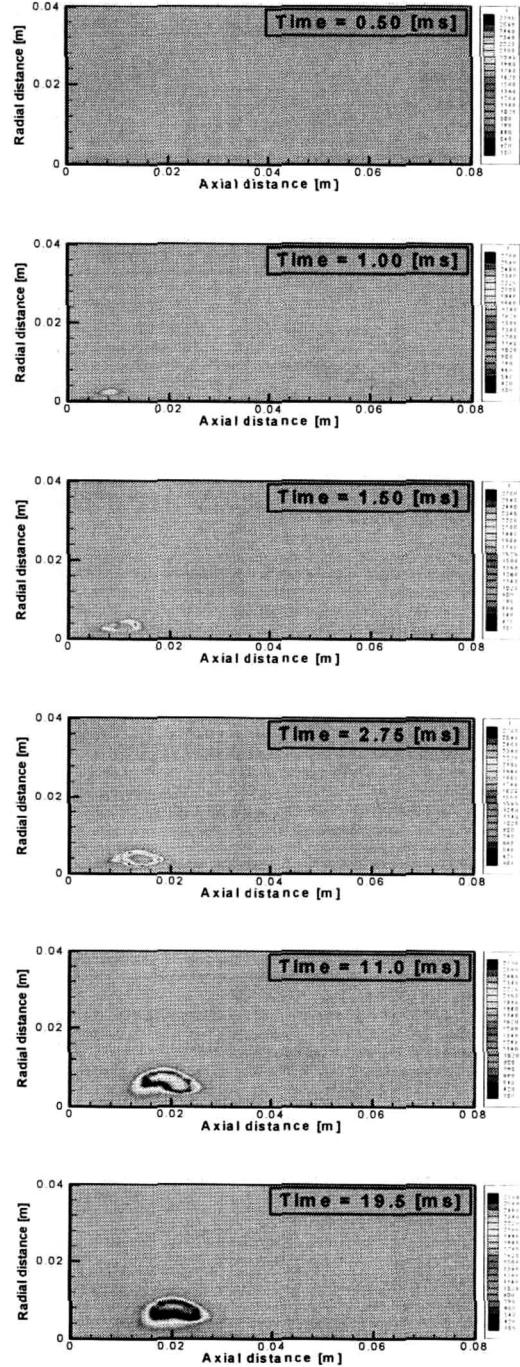


Fig. 12 Temperature distribution in gas field ($P_{\infty}=20$ [atm])

의 점화가 더 빨리 발생한다. 이는 앞에서 살펴본 바와 같이 고압 환경에서의 액적의 빠른 증발과 큰 반응률 때문이다. 또한, 이후 결과들에서 볼 수 있듯이 연소가 진행되는 모습도 상압의 경

우와는 다르게 나타나는데, 연소가 분무 액적들을 둘러싸면서 일어나고 있음을 볼 수 있다. 이는 고압 환경에서 상대적으로 공기의 밀도가 크기 때문에 증발된 연료 증기와 주변 공기와의 가

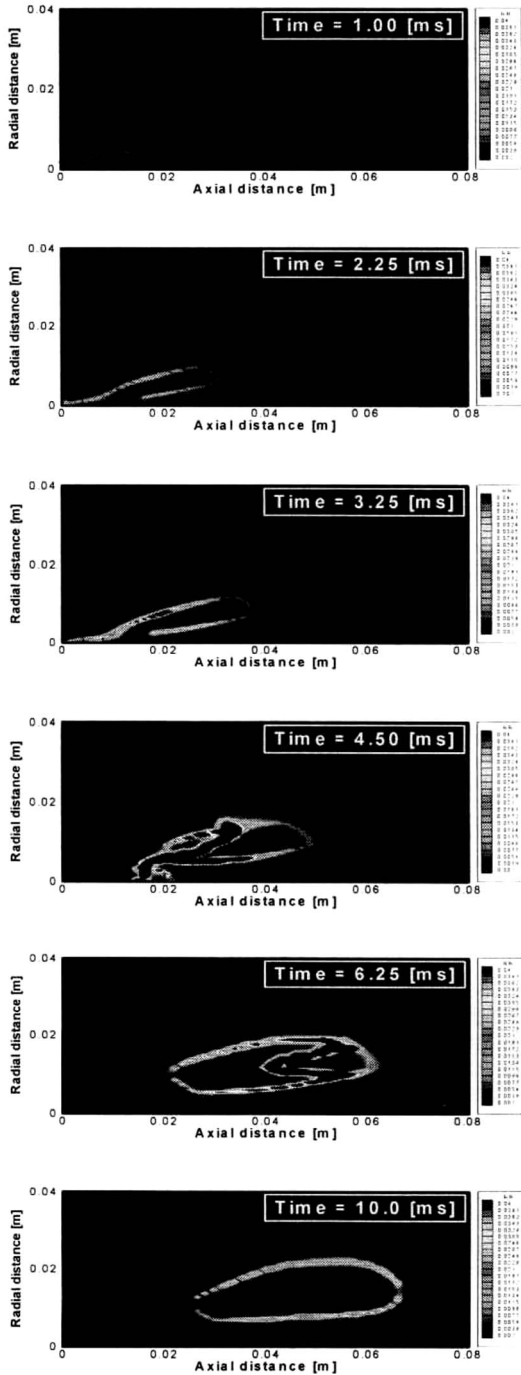


Fig. 13 Reaction rate distribution in gas field ($P_{\infty}=1$ [atm])

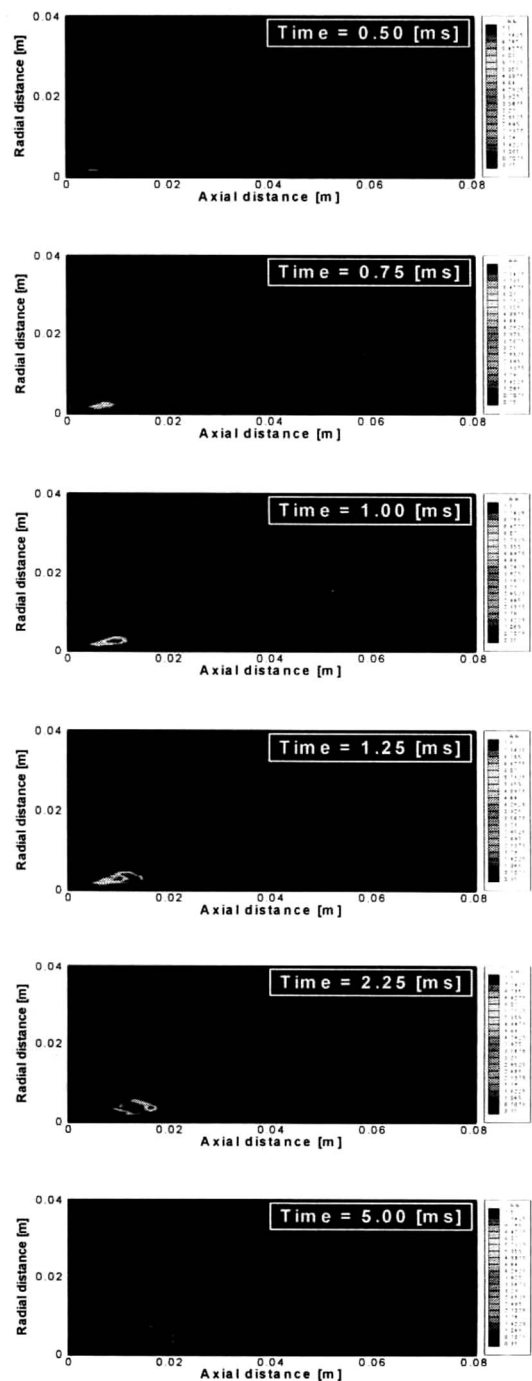


Fig. 14 Reaction rate distribution in gas field ($P_{\infty}=20$ [atm])

연 혼합기 상태로의 혼합에 소요되는 시간이 짧으며, 또한 반응물이 커서 분무 액적들의 증발 직후에 연소가 일어나기 때문으로 생각해 볼 수 있다.

6.4.3 기체장 내의 반응을 분포

고온의 연소실 내로 분사된 분무 액적들은 공기중으로 증발되어 가연 혼합기를 이룬 후 반응을 시작하게 된다. Fig. 13은 주변 압력 1 기압에서의 반응을 분포를 나타내고 있는데, 최초 분무 액적들을 둘러싸서 약한 반응이 있는 모습을 볼 수 있다. 이는 고온의 기체장과 접하는 분무의 가장자리를 따라서 증발이 시작되고 혼합이 이루어지기 때문으로 생각해 볼 수 있다. 3.25 [ms]에서는 비로소 점화라 할 수 있는 강한 반응이 분무의 후방 영역에서 나타나고 있으며, 이후 분무를 따라가면서 반응이 진행되어 가는데, 이 역시 전형적인 확산 연소의 모습이라 하겠다.

Fig. 14의 고압 환경에서는 1.00 [ms]에서 이미 강한 반응이 나타나는데, 이는 분무의 증발이 상대적으로 빠른 시간 안에 완료되며, 공기의 밀도가 크므로 산화제의 양이 많아 가연 혼합기가 빨리 형성되기 때문에 설명할 수 있다. 또한, 앞에서도 살펴본 것처럼 분무 도달 거리가 짧기 때문에 반응 영역이 좁게 형성되고 있으며, 상압에 비해 반응이 일찍 종료되고 있다.

7. 결론

이상으로부터 분무의 거동에 대한 수치적 모사를 수행하였으며, 또한 상압 환경과의 비교를 통하여 고압 환경에서의 분무 거동 특성을 알아보았다. 본 연구를 통하여 얻어진 결론은 다음과 같다.

1. 단일 액적만이 분사되는 경우와의 비교를 통하여 분무 액적들의 증발 현상에 있어서 액적들 간의 상호 작용을 볼 수 있었으며, 주변 압력의 차이에 따라 이러한 액적들 간의 상호 작용은 다르게 나타남을 관찰할 수 있었다. 즉, 상압 환경에서는 단일 액적이 분무보다 생존 시간이 짧지만, 고압인 경우에는 반대의 현상이 나타난다.
2. 분무 침투 깊이는 액적의 운동 에너지와 공기역학적 항력의 상대적 크기에 의해 결정되는데, 상압에 비하여 고압 환경에서 액적의 짧은 생존 시간과 분사 초기 액적에 미치는 큰 항력으로 인해 고압 환경에서의 분무 침투 깊이가 더 짧게 나타난다.
3. 고압 환경에서 분무의 점화 및 연소는 분사

초기의 짧은 시간 동안에 상대적으로 빠르고 급격히 일어난다.

참고문헌

- [1] H.H. Chiu, "Advances and challenges in droplet and spray combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 26, 2000, pp. 381-416.
- [2] S. K. Aggarwal, "A review of spray ignition phenomena : present status and future research", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 24, 1998, pp. 565-600.
- [3] G. M. Faeth, "Mixing, transport and combustion in sprays", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 13, 1987, pp. 293-345.
- [4] G. M. Faeth, "Evaporation and combustion of sprays", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 9, 1983, pp. 1-76.
- [5] J.-P. Delplanque and W. A. Sirignano, "Numerical study of the transient vaporization of an oxygen droplet at sub- and super-critical conditions", *AIAA 91-0075*.
- [6] H. Jia and G. Gogos, "Investigation of liquid droplet evaporation in subcritical and supercritical gaseous environments", *Journal of Thermodynamics and Heat Transfer*, Vol. 6, No. 4, 1992.
- [7] A. S. Yang, W. H. Hsieh, K. K. Kuo and J. J. Brown, "Evaporation of LOX under supercritical and subcritical conditions", *AIAA 93-2188*.
- [8] D. F. Wang and B. D. Shaw, "Droplet combustion in a simulated reduced gravity environment", *Combust. Sci. Tech.*, Vols. 113-114, 1996, pp. 451-470.
- [9] Joseph C. Oefelein and Vigor Yang, "Modeling high pressure mixing and combustion processes in liquid rocket engines", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 14, No. 5, 1999, pp. 843-857.
- [10] Yongwook Yu, Seongku Kim and Yongmo Kim, "Numerical modeling for auto-ignition and combustion processes of fuel sprays in high pressure environment", *Combust. Sci. Tech.*, Vols. 168, 2001, pp. 85-112.
- [11] Vigor Yang, "Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems", *28th Symposium (International) on Combustion*, 2000, pp. 925-942.
- [12] H. Barths, C. Hasse, G. Bikas and N.

- Peters, "Simulation of combustion in direct injection diesel engines using a Eulerian particle flamelet model", *28th Symposium (International) on Combustion*, 2000, pp. 1161-1168.
- [13] J. Bellan, "Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling : drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 26, 2000, pp. 329-366.
- [14] P. Stapf, H. A. Dwyer and R. R. Maly, "A group combustion model for treating reactive sprays in I.C. engines", *27th Symposium (International) on Combustion*, 1998, pp. 1857-1864.
- [15] K. K. Kuo, *Principles of Combustion*, John Wiley and Sons.
- [16] C. T. Crowe, M. P. Sharma, D. E. Stock, "The particle-source-in cell (PSI-Cell) model for gas-droplet flows", *Journal of Fluids Engineering*, 1977, pp. 325-332.
- [17] C. K. Westbrook and F. L. Dryer, "Chemical kinetics modeling of hydrocarbon combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 10, 1984, pp. 1-57.
- [18] A. D. Gosman and F. J. K. Ideriah, *TEACH-T : A General Computer Program for Two-Dimensional Recirculating Flow*, Imperial College, London, U. K., 1976.
- [19] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Pub. Co. New York, 1980.
- [20] W. E. Ranz and W. R. Marshall, "Evaporation from drops", *Chemical Engineering progress*, Vol. 48, No. 3, 1952, pp. 141-146.