

Soot 생성을 고려한 가스발생기의 Kerosene/LOx의 비평형 화학반응 모델링

유정민* · 이창진**

Modeling of Non-Equilibrium Kinetics in Gas Generator including Soot Formation

Jungmin Yu* and Changjin Lee**

ABSTRACT

Gas generator should be adopted either fuel rich or oxidizer rich combustion because of the temperature restriction to avoid any possible thermal damages to turbine blade. This study focuses to model the non-equilibrium chemical reaction of kerosene/LOx with detailed kinetics developed by Dagaut using Perfectly stirred reactor(PSR) assumption. To predict more reliable species fraction and other gas properties, Frenklach's soot model was added to Dagaut's detailed kinetics.

초 록

액체 로켓 엔진의 가스발생기는 터빈 블레이드의 열적 손상을 막기 위해 온도의 제한이 있으며 이를 위해 농후 또는 희박 연소를 하게 된다. 따라서 비평형 화학 반응이 주로 발생하며 이를 해석하는 것은 매우 어렵다. 본 연구에서는 케로신과 액체산소를 추진제로 하는 가스발생기에 대하여 Dagaut이 제안한 상세 화학 반응 단계를 사용하여 완전 혼합 반응기 연소 모델의 수정을 통해 계산하였으며, Frenklach의 soot 모델을 적용하여 예측 결과의 물 분율, 가스 물성치 등의 결과에 대한 개선 방향을 제시하였다.

Key Words: Gas Generator(가스발생기), Non-equilibrium(비평형 반응), Perfectly Stirred Reactor(완전 혼합 반응기), Gas properties (가스 물성치), soot(매연), PAH(다중 고리 방향족 탄화수소)

1. 서 론

가스발생기는 액체 로켓 엔진의 터보-펌프 시

스템에서 터빈 구동을 위한 장치로 주 추진제의 일부를 사용하여 고-엔탈피 연소가스를 생성시킨다. 하지만 터빈 블레이드의 재질로 인한 온도의 제약조건이 있으며 이를 위해 농후 또는 희박 연소를 시켜 연소온도를 800~1,200K로 유지한다 [1]. 터보 펌프 시스템을 설계하고 그 성능을 예측하기 위해서는 복잡한 비평형 화학반응이 지

* 건국대학교 대학원 항공우주공학과

** 건국대학교 기계항공공학부

연락처, E-mail: cjlee@konkuk.ac.kr

배하는 가스발생기의 연소 특성 및 물성치의 예측이 매우 중요한데 추진제로 주로 사용되는 탄화수소 계열의 혼합 연료의 연소 예측은 매우 어렵다. 본 연구에서는 Dagaut[2]이 제안한 케로신의 상세 화학반응과 완전 혼합 반응기(Perfectly Stirred Reactor) 모델의 수정을 통하여 가스발생기의 연소 계산을 하여 실험값과 비교하였다. 또한 Frenklach[3]의 soot 모델의 적용방법에 대한 연구를 진행하여 결과에 미치는 영향을 알아보았다.

2. 케로신의 상세 화학반응 모델

Dagaut는 복합 탄화수소 연료에 대하여 상세 화학반응 모델을 제시하여 그 타당성을 검증하였다[2]. Dagaut 모델의 케로신 모델 연료는 n-Decane(74%), n-Propylbenzene(15%) 그리고 Propylcyclohexane(11%)로 구성되어 있으며 207개 화학종과 1592개의 가역반응으로 구성된다.

3. 완전 혼합 반응기

완전 혼합 반응기는 연료와 산화제가 반응기 내부로 유입되면 순간적으로 완전한 혼합 상태가 되어 반응하여 연소가 발생하는 가상의 반응기이다. 따라서 연소기 내부의 온도 및 물성치에 대하여 시간과 공간에 대한 구배가 존재하지 않으며 액적 연료의 증발도 고려되지 않는다. 완전 혼합 반응기의 질량 보존식은

$$\dot{m}(Y_k - Y_k^*) - \dot{\omega}_k W_k V = 0 \quad (1)$$

이며, 에너지 보존 방정식은

$$\dot{m} \sum_{k=1}^K (Y_k h_k - Y_k^* h_k^*) + Q = 0 \quad (2)$$

이다. 여기서 위 첨자(*)는 입구 조건이다.

완전 혼합 반응기는 시간에 대한 의존성이 없지만 해를 추측하고 수렴하는 과정에서 의도적인 시간 증속 문제를 풀어 그 해를 초기 추정치로 사용한다. 그리고 지배방정식은 k+1개의 비선형 대수 방정식을 구성하며 추정치 계산을 위한 비-정상 방정식은 k+1개의 비선형 미분방정

식을 구성한다. 본 연구의 계산을 위하여 PSR 코드를 사용하였으며[3] 이 코드는 지배방정식 (1), (2)의 해를 구하기 위하여 수정된 Newton 알고리즘을 사용한다.

완전 혼합 반응기의 체류시간(residence time)은 아래와 같이 구하게 되며 실제 가스발생기의 인젝터에서 분사된 액적은 산화제에 비하여 증발시간이 길기 때문에 이를 고려하였다.

$$\tau = \frac{\rho V}{\dot{m}} \quad (3)$$

혼합기가 반응하는 순 시간은 총 체류시간에서 연료 증발에 필요한 증발시간(evaporation time)을 뺀 시간이 이며 다음과 같이 구해진다.

$$\tau = \tau_0 - \tau_l^* \quad (4)$$

액적 증발시간을 구하기 위하여 Spalding이 제안한 모델을 사용하였으며, 액적 증발시간은 다음과 같다.

$$\tau_l = \frac{c_p \rho_l d_o^2}{8 \lambda \ln(1+B)} \quad (5)$$

증발시간은 케로신의 3가지 모델 연료 구성성분의 값이 다른데 그 중에서 가장 큰 값을 나타내는 것으로 사용하였다.

한편, 화학종 생성 항($\dot{\omega}_k$)은 화학종의 순 생성을 의미하며 화학 반응은 다음과 같이 표현된다.

$$\sum_{k=1}^K v'_{ki} \chi_k \square \quad \sum_{k=1}^K v''_{ki} \chi_k \quad (7)$$

여기서 화학종 생성 항($\dot{\omega}_k$)과 순 몰수 변화, 그리고 진행 변수에 대한 관계식은 다음과 같다.

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^I v_{ki} q_i \quad (8)$$

$$v_{ki} = (v''_{ki} - v'_{ki}) \quad (9)$$

$$q_i = k_{fi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v_{ki}'} - k_{ri} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v_{ki}''} \quad (10)$$

위의 반응식들에서 정반응 상수인 k_{fi} 는 식 (11)의 Arrhenius 법칙에 의하여 구하며, 역반응 상수는 주어진 온도, 압력에서 구해지는 평형상수와 정반응 상수를 이용하여 구한다.

$$k_f = A_f T^{b_f} \exp\left(-\frac{E_f}{R_f T}\right) \quad (11)$$

위 식에서 온도는 인젝터 근방의 고온 영역의 화학 반응 온도(T_{HOT})를 사용하며 에너지 방정식으로 부터 구한 연소기의 출구 온도(T_c)와 구분하였다. 이와 같은 방법은 이미 다른 연구에서 검증된 방법이다[4].

4. 계산 결과

계산의 조건은 NASA[5]의 실험 조건에 대하여 수행하였으며 연소 온도 및 물성치의 값을 비교하였다. 아래의 Fig. 1은 연소 온도를 비교한 것인데 실험의 온도 분포와 거의 일치하는 것을 알 수 있다.

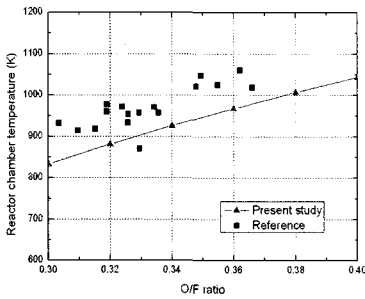


Fig. 1 combustion temperature

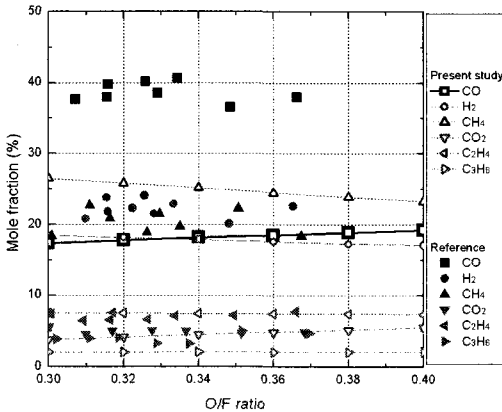


Fig. 2 Comparison of mole fraction: calculation vs. experimental data

Figure. 2에서는 연소 생성물 중에서 대표적인 화학종의 몰분율에 대해 계산과 실험의 결과를 비교하였다. CO_2 , C_2H_4 , C_3H_6 의 경우는 거의 일치하며, H_2 , CH_4 는 약간의 차이를 보여준다. 하

지만 CO 의 경우 계산의 결과는 약 20%로 실험의 약 40%와 두 배의 차이가 난다. 또한 Fig. 3, 4에서 분자량과 비열비의 결과 값의 차이는 작지만 경향성에 있어서 그 기울기가 다르게 나타나는 것을 알 수 있다. 이러한 결과들의 차이는 soot을 고려하지 않았기 때문으로 예상할 수 있는데 이는 다른 연구에서도 soot을 고려하였을 경우 결과가 개선되는 것을 검증하였다[5]. 따라서 본 연구에서는 CO 의 몰 분율과 분자량, 비열비와 같은 결과의 정확도를 위해 soot 모델을 적용하였으며 그 타당성을 검토하였다.

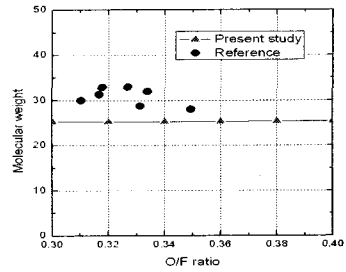


Fig. 3 Comparison of molecular weight

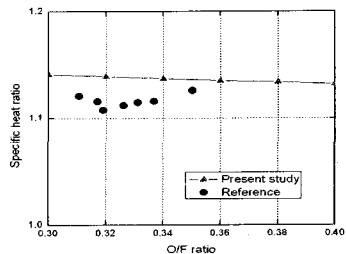


Fig. 4 Comparison of species heat ratio

5. soot 모델

soot의 발생은 탄화수소 계열 연료의 불완전 연소에 의해 생성되며 soot을 해석하기 위하여 많은 연구들이 있어왔다. 본 연구에서 완전 혼합 반응기에 적용하기 위한 soot 모델은 Frenklach가 제안한 방법을 사용하였다[6]. Frenklach는 soot 이전의 전구체를 PAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbon)로 가정하였으며 최초의 soot 발생은 두 개의 PAH가 충돌하여 하나의 이합체가 될 때 형성된다고 가정하

였다. PAH의 성장과 고리화는 HACA(H-Abstraction-C₂H₂-Addition) 과정의 반응을 통해 진행된다. 이 과정에서 아세틸렌(C₂H₂)이 매우 중요한 역할을 하며 다른 연구에서는 soot의 전구체로 아세틸렌을 이용하기도 한다.

한편, PAH의 성장은 linear lumping[6]의 방식이 사용되며 여기서의 방정식들은 아래의 식과 같이 농도 모멘트(concentration moments)와 크기 모멘트(size moments)로 나타낼 수 있다. 여기서 m_i^r 는 PAH의 질량을, N_i 는 같은 크기 입자의 수 밀도를 나타낸다.

$$M_r^{\text{PAH}} = \sum_{i=l_0}^{\infty} m_i^r N_i^{\text{PAH}} \quad (12)$$

$$\mu_r^{\text{PAH}} = \frac{M_r^{\text{PAH}}}{M_0^{\text{PAH}}} \quad (13)$$

soot 모델의 완전 혼합 반응기 모델에 대한 적용에 앞서 soot 모델이 결과에 미치는 영향을 알아보기 위하여 C₂H₄/Air의 premix 계산[7]을 통해 soot 모델의 고려 여부에 따른 결과의 차이를 알아보았다.

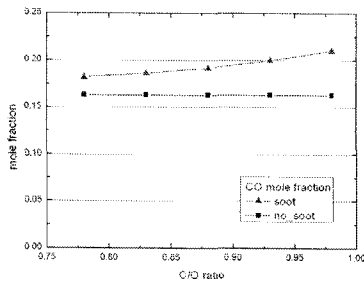


Fig. 5 CO mole fraction

Figure 5의 몰 분율 결과를 보면 soot 모델을 사용하였을 경우 soot 모델을 포함하지 않은 계산에 비하여 CO의 몰분율이 높게 나타나며, C/O ratio가 높아질 경우 더 큰 폭으로 발생하는 것을 알 수 있다. 따라서 soot 생성을 고려하였을 경우 CO의 몰 분율에 영향을 준다는 것을 알 수 있으며 케로신에 대한 완전 혼합 반응기의 경우에도 적용시키기 위한 연구가 계속되고 있다. soot의 생성과 관련된 반응식은 101개의 화학종과 544개의 반응 단계[7]로 구성되어 있으며 케로신에 대한 Dagaut 모델과의 연계를 고려하여 재구성하였으며 타당성을 검증하는 중에 있다.

6. 결론 및 향후 계획

Kerosene과 LOx를 추진제로 하는 농후 연소 가스발생기를 완전 혼합 반응기 연소 모델을 사용하여 계산하였다. 화학 반응 모델은 Dagaut이 제안한 모델을 사용하였으며 나아가 Frenklach의 soot 모델의 적용에 대한 방법을 연구하고 있다. 이를 통해 연소가스 성분 중에서 CO의 몰 분율과 다른 몰 성치들의 정확도를 높일 수 있을 것으로 기대된다.

참고 문헌

- Huzel, D. K. and Huang, D. H., Modern engineering for design of liquid propellant rocket engine, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol 147, AIAA, pp.53-55, 155-218.
- Dagaut, P., "On the Kinetics of Hydrocarbons Oxidation from Natural Gas to Kerosene and Diesel Fuel." Phys. Chem. Chem. Phys., Vol. 4, pp. 2079-2094, 2002.
- Garborg, P., Kee, R. J., Grcar, J. F., Miller, J. A., "PSR: A FORTRAN Program for Modeling Well-Stirred Reactors", Sandia National Laboratories, SANDIA REPORT No 86-8209 (1990)
- Foelsche, R. O., Keen, J. M., Solomon, W. C., Burckley, P. L. and Corporan, E., "Nonequilibrium Combustion Model for Fuel-Rich Gas Generators." Journal of Propulsion and Power, Vol. 10, No. 4, pp. 461-471, 1994.
- Lawver, B., R., "Testing of Fuel/ Oxidizer-Rich, High-Pressure preburners." NASA CR-165609, NASA-Lewis Research Center, March 1982.
- M. Frenklach, H. Wang, Soot Formation In Combustion, Mechanisms and Models, Bockhorn, H., Ed., Springer Series in Chemical Physics 59, Springer-Verlag, pp.165-192. 1994.
- J. Appel, H. Bockhorn, M. Frenklach, "kinetic Modeling of Soot Formation with Detailed Chemistry and Physics: Laminar Premixed Flames of C₂ Hydrocarbons." Combust. and Flame, Vol. 121, pp.122-136, 2000.