

단일 알루미늄 입자 연소 모델에 따른 2상 알루미늄 분말 연소장 시물레이션

김상민* · 양희성* · 윤웅섭**

Numerical Analysis of Two-Phase Aluminum Dust Combustion according to Single Aluminum Particle Combustion Model

Sangmin Kim* · Heesung Yang* · Woongsup Yoon**

초 록

단일 알루미늄의 연소 모델을 사용하여 알루미늄 분말의 점화 과정에 대한 전산유체 해석 기법을 개발하였다. 유동의 계산은 Reynolds averaged Navier-Stokes식을 사용하였으며, $k-\epsilon$ 난류모델을 적용하였다. 입자는 Eulerian-Lagrangian 방법을 사용하여 유동과 독립적으로 계산을 수행하였으며 상용 전산유체해석 프로그램인 Fluent 6.3을 사용하여 해석을 수행하였다. 단일 모델에서 사용한 대류 및 복사 열전달, 표면이상반응, 알루미늄의 용융열을 입자 가열원으로 고려하였다. 같은 조건을 사용하여 단일 입자 모델 계산과 전산유체해석을 수행하였으며, 두 결과는 5% 이내로 잘 일치 하였다. 이를 통해 전산유체해석에서 알루미늄의 점화를 모사할 수 있음을 확인하였다.

Key Words: Metal Particle Combustion(금속 입자 연소), Aluminum Dust Combustion(알루미늄 분말 연소), Computational Fluid Dynamics(전산유체역학)

1. 서 론

알루미늄은 고에너지 밀도를 갖는 금속 연료로서 구하기 쉽고 높은 연소열을 갖는다는 장점이 있다. 알루미늄 입자의 점화과정은 일반적인 액적의 연소와 같이 가열, 점화, 준정상 연소 단계로 진행되나 알루미늄 입자가 가지고 있는 산화막으로 인해 점화 지연, 비대칭 연소 등 일반

적인 액적의 연소보다 복잡한 연소 과정을 거친다[1,2].

Figure 1은 알루미늄 입자의 연소 과정을 나타내는 그림이며, (a)는 점화과정을, (b)는 준정상 연소 과정 나타낸다. 초기 알루미늄은 산화 피막에 의해 둘러 쌓여있다. 외기의 높은 온도에 따른 대류 열전달과 복사 열전달에 의해 입자의 온도는 상승하고, 산화막의 용융점보다 알루미늄의 용융점이 낮기 때문에 알루미늄은 산화막 내부에서 액체로 상변화 한다. 알루미늄 산화막은 온도의 상승에 따라 무결정에서 alpha-state로의 변화가 발생하며, 그에 따라 밀도가 상승하여 틈

* 연세대학교 기계공학과

** 연세대학교 기계공학부

연락처, E-mail: wsoon@yonsei.ac.kr

이 생기게 되고, 국부적으로 액체의 알루미늄이 산화제와 접촉하게 된다. 이러한 국부적인 영역에서 알루미늄과 산화제와의 표면이상반응 (heterogeneous surface reaction, HSR)이 발생하고 반응열로 인해 입자의 가열은 더욱 가속된다. 입자의 온도가 산화막의 녹는점에 도달하면 산화막은 용융이 되고, 높은 표면장력으로 인해 알루미늄 표면상의 일정 부분에 모여 산화캡(oxide cap)을 형성한다. 준정상 연소 과정은 일반 액적의 연소와 유사하지만, 내부로 유입되는 산화물이 입자 표면에 부착되어 산화캡이 점점 자라게 되며, 연소가 종료될 때 알루미늄 산화물로 이루어진 입자가 남게 된다.

액적의 연소와 달리 산화막으로 인해 발생하는 복잡한 연소과정으로 인해 현재까지 대부분

의 연구들이 알루미늄 입자의 특성과 연소 메커니즘을 파악하기 위해 진행 되었다. 이러한 연구들을 통해 해석적인 방법 및 실험적인 방법, 그리고 몇 가지의 수치 모델을 통해 제시되었다. 대부분의 해석 및 실험 연구는 점화[4-9]나 준정상 연소 (Quasi-Steady Combustion, QSC) [7-10] 중 하나의 과정에 치중하여 수행되었다. Baduk[11]과 Fabignon[12] 등은 고체 로켓 모터의 추진제 내에 포함된 알루미늄 연소에 관한 수치 연구를 진행하였지만 알루미늄 산화막의 모사를 위해 높은 계산 비용이 요구되었다 [11,12].

양희성 등은 점화와 준정상 연소에 대한 별도의 모델을 구성한 후 이를 통합하여 단일 알루미늄의 연소과정 전체에 대한 단순 모델을 개발

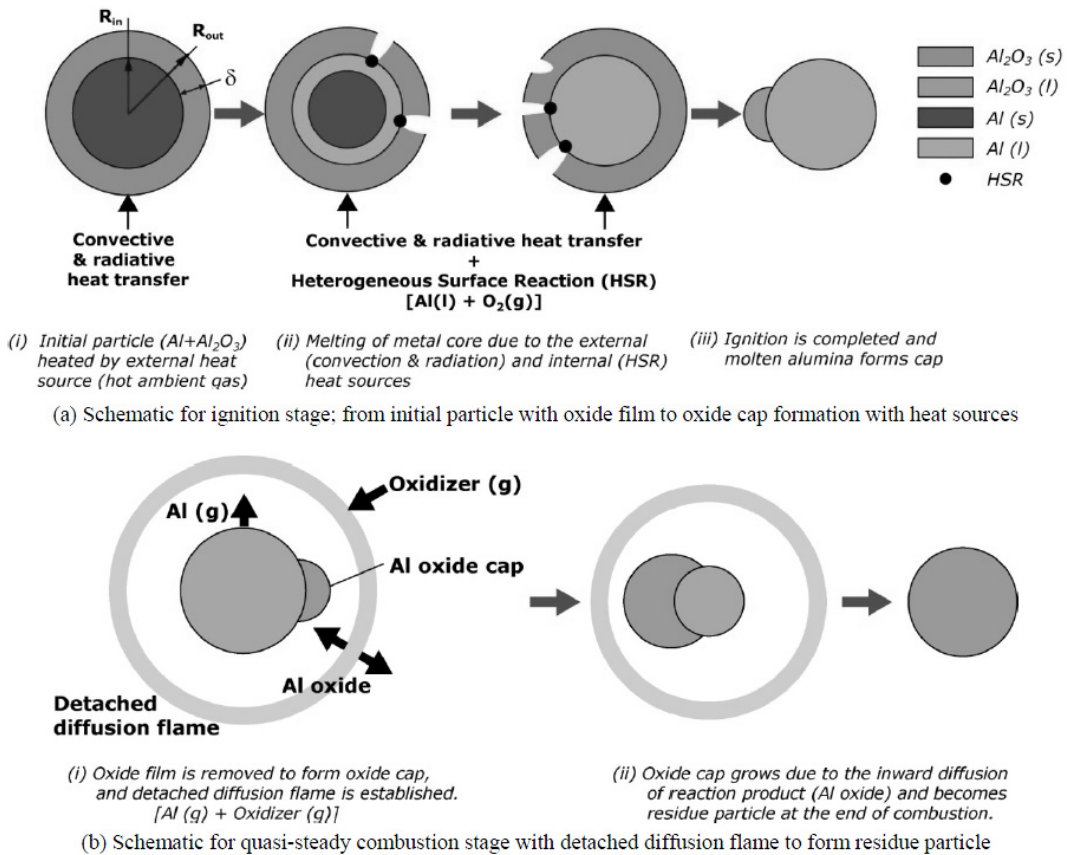


Fig. 1 Schematic for Ignition and Quasi-Steady Combustion Stage[3].

하였으며, 이를 실험 결과와 비교하여 검증하였다[13].

반면 아직까지 입자군(분무)과 유동의 상호작용, 온도 분포에 따른 영향, 입자와 입자간의 상호 작용 등을 고려한 알루미늄 분말의 연소장에 대한 연구는 거의 이루어지지 않았다. Zenin[14] 등은 유동의 변화에 따른 실험적 연구를 수행하였지만 이는 균일한 유동 내에서 단일 알루미늄 입자에 대한 연소특성을 파악하기 위한 연구였으며, Fabignon[12]과 Beckstead[15] 등은 외기의 온도에 따른 실험적 연구를 진행하였지만, 이는 유동이 없는 상태에서 단일 입자의 연소특성을 파악하기 위해 수행한 것이다.

Huang 등은 알루미늄 균 연소에 대한 해석을 수행하였으나 유동이 고려되지 않은 1차원의 수치 연구였으며[16], 알루미늄을 연료로 하는 연소장에 대한 연구는 아직 발표된 바가 없다.

따라서 본 연구는 알루미늄 연소장에 대한 해석적 연구를 수행하기 위해 양희성 등이 개발한 단일 알루미늄 입자의 연소모델을 전산유체해석에 적용하는 것을 목표로 하며, 그 중에서 점화 과정의 적용에 관한 연구이다.

2. 단일 알루미늄 연소 모델[3]

알루미늄 입자의 산화막으로 인해 산화제와 직접적인 접촉이 방해되므로 입자의 점화를 위해 산화막이 제거되어야 한다. 개발된 모델은 구체적인 산화막의 제거과정에 대한 해석을 배제하고, 열전달 및 이상표면반응 (heterogeneous surface reaction, HSR)에 의한 입자의 온도 상승을 모사하여 입자의 온도가 산화막의 용융온도보다 높으면 점화하는 것으로 구성하였다. 점화 단계가 완료되면 준정상 연소단계로 바로 넘어가는 것으로 가정하였다.

준정상 연소단계에서는 내부 금속 액적, 액적 표면과 화염 사이, 화염면 외부로 구분하여 모델을 구성하였다. 내부 금속 액적에서 일반적인 액적 기화의 해석에 사용되는 conduction limit model을 사용하였고, 액적 표면과 화염 사이는 산화막의 용융으로 생성되는 산화캡에 의한 비대칭 기화와 연소, 여러 물질의 혼합에 의한 물질치 변화 예측, homogeneous 반응에 대한 화염위치 결정 및 생성물의 재부착에 의한 산화캡의 성장 등을 포함하였다. 화염면 외부는 생성물의 확산 및 화염면 근처에서의 oxide smoke에 대한 해석으로 구성하였다.

점화 과정의 주요 현상은 입자의 초기 상태에서 대류 및 복사 열전달, 용융열, 표면이상반응에 의한 점화 온도까지의 온도 상승으로, 이는 Eq. 1과 같이 나타낼 수 있다. 여기서 m 은 질량, \dot{m} 은 질유량, c_p 는 정압비열, T 는 온도, r 은 반지름, μ 는 점성, ϵ 은 emissivity, σ 는 볼츠만 상수, A 는 입자의 표면적을 나타낸다. 아래첨자 p 는 입자, g 는 외기, HSR은 표면이상반응을 의미한다. $\dot{m}_{Al,sl}$ 은 용융되는 알루미늄의 시간에 따른 질량이며, $\dot{m}_{Al,HSR}$ 은 표면이상반응에 의한 알루미늄의 질량 변화율, $\dot{h}_{Al,sl}$ 은 알루미늄의 용융열이며, $\dot{h}_{Al,HSR}$ 는 표면이상반응에 의해 발생하는 열을 나타낸다.

단일 연소 모델은 0차원의 결정 모델이기 때문에 외기의 온도가 공간적인 구배를 갖지 않고, 항상 일정하며, 외기와 온도가 같은 벽으로 둘러싸여 있다고 가정한다. 따라서 복사 열전달은 외기와 입자 온도의 4승의 차에 비례하는 단순 복사 식을 사용하였다.

높은 외기 온도 환경에서 입자가 가열되면서 산화막과 알루미늄 입자의 용융점 차이에 의해 내부의 알루미늄이 먼저 녹게 된다. 내부의 알루

$$m_p c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = \dot{Q}_{conv} + \dot{Q}_{rad} - \dot{Q}_{melt} + \dot{Q}_{HSR} \quad (1)$$

$$= 2\pi r_p \frac{\mu_g c_{p,g}}{Pr_g} (T_g - T_p) Nu_p + \epsilon_{Al} \sigma (T_g^4 - T_p^4) A_p - \dot{m}_{Al,sl} h_{Al,sl} - \dot{m}_{Al,HSR} h_{r,HSR}$$

미늄이 녹을 때까지 입자의 온도는 상승하지 않으며, 알루미늄의 용융열 고려하여 알루미늄 입자의 온도 계산을 수행하였다.

알루미늄을 둘러싸고 있는 알루미늄 산화막이 온도 상승으로 인해 크랙이 생겨 그 사이로 산화제인 산소가 유입되어 알루미늄 표면에서는 이상표면반응이 일어난다. 이를 Arrhenius 형식으로 반응률을 구하여 이상표면반응을 모사하고, 반응을 통해 발생한 에너지로 인한 입자 가열을 고려하였다.

점화 단계에서 입자의 온도는 300 K에서 2200 K 까지 크게 변한다. 따라서 점화 과정에서 알루미늄 및 산화막의 물성치가 변한다는 것을 쉽게 예측할 수 있으며, 정확한 해석을 위해 물성치를 온도의 함수로 나타내어 사용하였다. 다만 데이터의 부족으로 인해 알루미늄의 용융열과 알루미늄, 알루미늄 산화물의 밀도는 상수로 가정하였다. 비열과 다른 수송물성치를 위해 Natinal Institute of Standard and Technology (NIST) 데이터와 Chapman-Enskog Kinetic theory를 사용하였다.

Equation (2)는 입자의 운동을 나타내는 식으로 저항($F_D(u - u_p)$) 및 중력(F_g)에 의한 입자의 속도 변화를 나타낸다. 여기서 u 는 속도이며 아래 첨자가 없는 것은 유동, p 는 입자를 나타낸다.

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + F_g \quad (2)$$

3. 전산유체해석을 통한 알루미늄 점화 시뮬레이션

3.1 유동장 해석 방법

유동장 해석을 위해 Reynolds Averaged Navier Stokes 식에 대표적인 와점성 난류 모델인 standard $k - \epsilon$ 모델을 사용하였다. 대류항은 2차 Upwind를 사용하였으며, 점성항은 central differenced scheme을 사용하였다. 시간 차분은 multi-stage Runge-Kutta explicit time integral을 사용 하였으며, 비정상 계산을 위해 이중시간 전

진 기법을 사용하였다. 유동 solver는 범용의 전산유체해석 툴인 Ansys 사의 Fluent 6.3을 사용하였다.

3.2 입자 해석 방법

입자들의 거동을 예측하기 위해 Fluent의 discrete phase model을 사용하였다. 이 모델은 Eulerian- Lagrangian 방법으로 유동은 연속체로 취급하여 Navier-Stokes 식을 통해 해석하고, 다수의 입자, 기포 및 액적 등은 Lagrangian 방법을 사용하여 독립적으로 해석하며, 유동과의 질량, 운동량, 에너지의 교환을 고려한다[17].

Equation 3은 전산유체해석에서 입자의 운동을 나타내는 식으로 Eq. 2와 유사하나, 부력($g_x(\rho_p - \rho)/\rho_p$) 및 추가적인 가속요소(F_x)를 고려하여 입자의 속도 변화를 나타낸다. 단일 연소 모델에서는 유동에 의한 입자의 속도 변화만을 고려하였지만 전산유체해석에는 입자에 의한 유동의 속도 변화도 고려되었다.

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g_x(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_x \quad (3)$$

알루미늄 입자의 점화까지를 고려하므로 외부 에너지원에 의한 입자의 가열만을 모사한다. 2장에서 설명한 것과 같이 입자 가열을 위해 대류 및 복사, 이상표면반응, 용융열을 고려하였으며, 이를 Fluent에 적용하기 위해 User Defined Function(UDF)을 사용하였다. UDF에는 Fluent 내의 데이터들과의 호환을 위해 여러 매크로가 정의되어 있으며, 입자의 가열, 기화율 등을 조절할 수 있는 DPM_LAW를 사용하여 입자의 가열을 고려하였다[18].

3.3 단일 알루미늄 연소 모델을 통한 검증

전산유체해석을 통한 알루미늄 점화과정 시뮬레이션을 검증하기 위해 Table 1의 조건을 사용하여 해석을 수행하고 단일 알루미늄 연소 모델의 계산 결과와 비교하여, Fig. 2 ~ Fig. 4에 나타내었다.

Table 1. Calculation Condition

Parameters	Default values
Initial particle size (μm)	165
Initial oxide film thickness (nm)	3
Flow velocity (m/s)	0
Particle velocity (m/s)	1
Ambient Pressure (atm)	1
Ambient temperature (K)	3000

Figure 2는 시간에 따른 입자의 온도를 나타낸 그래프이다. solid line과 dash-dot이 해석의 결과이며, dash line이 모델의 계산결과이다. 단일 연소 모델의 경우 시간 간격을 $50 \mu\text{s}$ 로 계산하지만 전산유체해석에서 유동의 시간 간격을 단일 연소 모델과 같은 시간 간격으로 계산할 경우 계산에 소모되는 시간이 커지는 것을 줄이기 위해 시간 간격을 $500 \mu\text{s}$ 로 하여 계산을 수행하였다. 그림에서 보는 것과 같이 solid line과 dash-dot line이 일치하는 것으로 보아 시간 간격에 의한 차이는 발생하지 않음을 알 수 있다.

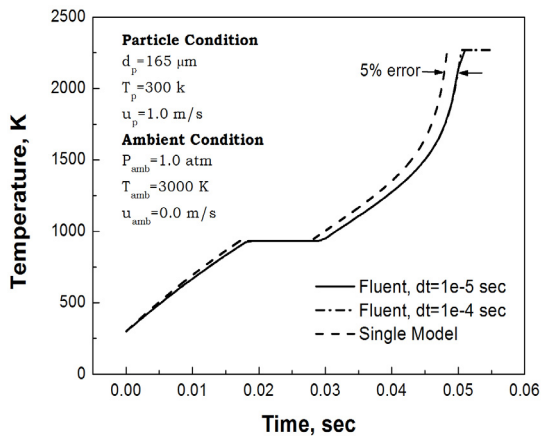


Fig. 2 Transition of the Particle Temperature

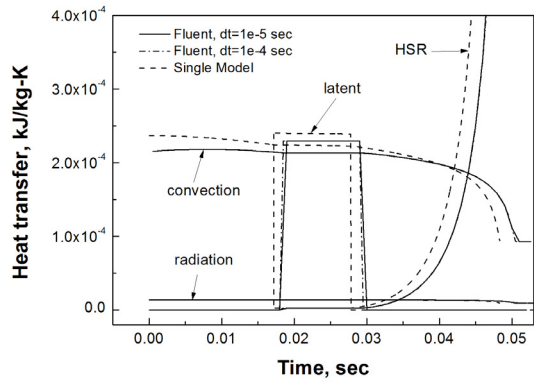


Fig. 3 Transition of Heat Transfer along Particle Heating Source

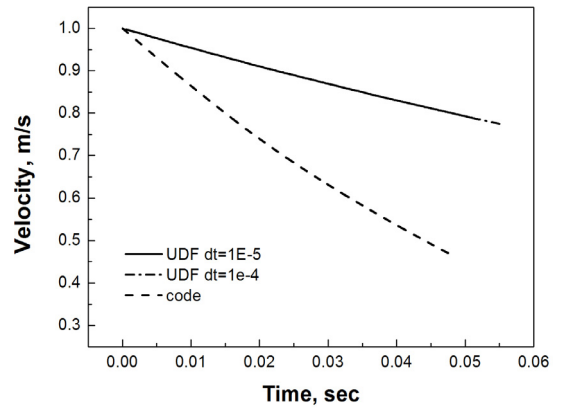


Fig. 4 Transition of the Particle Velocity in a Stationary Fluid

시간이 지남에 따라 입자 가열의 경향성은 두 결과에서 동일하게 나타나지만 전산유체해석 결과가 단일 연소 모델의 계산 결과보다 약 5% 정도 늦게 점화가 일어나는 것으로 나타난다. 이러한 점화 지연의 원인은 Fig. 3에서와 같이 열전달량의 차이에 의한 것으로 보인다. 점화 초기 입자 가열의 최대 에너지원은 대류에 의한 열전달이며, 이 때 전산유체해석에서의 대류 열전달량이 단일 연소 모델의 양보다 작기 때문에 초기의 지연이 발생한다. 이는 입자 내부의 알루미늄이 완전히 녹을 때까지 계속되며, 적은 알루미늄 용융량으로 인해 점화의 지연이 점차 증가하는 것으로 보인다.

Figure 4는 입자의 속도를 나타내는 그래프로 초기 1 m/s의 속도를 가지는 입자가 정지 되어 있는 외기를 지나면서 속도가 감소함을 나타낸다. 그림에서도 볼 수 있듯이 전산유체해석에서의 속도 감소는 단일 연소 모델의 감소보다 적게 나타나며, 사용한 모델이 같다는 것을 고려할 때, 두 계산에 사용된 물성치의 차이인 것으로 판단된다.

1기압 3000 K의 조건에서 공기의 밀도를 확인할 결과 단일 연소 모델에서의 값이 전산유체해석에 사용된 값보다 약 40% 정도 크게 나타난 것을 확인하였다. Eq. 2와 3의 F_D 와 Eq. 1의 Nu_p 는 레이놀즈 수의 함수이며, 외기의 밀도가 증가하면 레이놀즈 수의 증가로 인해 F_D 와 Nu_p 가 증가하므로, 전산유체해석에서의 열전달 감소 및 속도 감소의 차이가 발생하며, 결과적으로 점화의 지연이 발생함을 알 수 있다.

4. 결 론

이전 연구를 통해 개발한 단일 알루미늄 연소 모델을 사용하여 알루미늄 분말의 점화(가열) 과정에 대한 전산유체해석을 수행하였다. 유동의 계산은 상용 전산유체해석 프로그램인 Fluent 6.3을 사용하였으며, 입자의 계산을 Eulerian-Lagrangian 방법을 사용하여 유동과 독립적으로 계산하였다. 입자의 운동은 유동의 저항 및 부력을 고려한 운동 모델을 사용하였으며, 대류 및 복사 열전달, 표면이상반응, 알루미늄의 용융열을 고려하여 입자의 가열을 고려하였다.

전산유체해석을 통한 알루미늄 입자의 점화 과정 시뮬레이션 결과를 단일 연소 모델 결과와 비교하여 검증하였으며, 두 결과는 5% 이내로 잘 일치 하였다. 이를 통해 전산유체해석에서 알루미늄의 점화를 모사할 수 있음을 확인하였다.

앞으로 알루미늄 연소의 전체 과정을 모사하기 위해 단순 모델의 준정상 연소 모델을 적용하여야 하며, 기존의 단순 복사 열전달 모델을 수정하여 시스템 내에서의 복사 열전달을 고려

할 것이다.

후 기

본 연구는 방위사업청과 국방과학연구소의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.
(계약번호 UD100011CD)

참 고 문 헌

1. T. A. Brzustowski and I. Glassman, "Vapor-phase diffusion flames in the combustion of magnesium and aluminum: I. Analytical developments", Heterogeneous Combustion Conference, Palm beach, Florida, 1963, pp.1-14.
2. T. A. Brzustowski and I. Glassman, "Vapor-phase diffusion flames in the combustion of magnesium and aluminum: II. Experimental observations in oxygen atmospheres", Heterogeneous Combustion Conference, Palm beach, Florida, 1963 pp.1-14.
3. H. Yang, W. S. Yoon, "Modeling of aluminum particle combustion with emphasis on the oxide effects and variable transport properties", JMST, Vol. 24, No. 4, 2010, pp.909-921
4. A.V. Fedorov, and Yu. V. Kharlamova "Ignition of an Aluminum Particle", Combustion, Explosion and Shock Waves, Vol. 39, No. 5, 2003, pp. 544-547
5. M.A. Gurevich, E. S. Ozorov, and S. A. Chivilikhin "Flammability limit of a conglomerate of metallic particles", Combustion, Explosion, and Shock Waves, Vol. 8, No. 4, 1972, pp. 432-436.
6. A.A. Razdobreev, A. I. Skorik and Yu. V. Frolov "Ignition and combustion mechanism

- in aluminum particles", *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, Vol. 12, No. 2, 1976, pp. 177-182
7. I. Glassman, "METAL COMBUSTION PROCESSES," pp. 43, Vol. Report No. 473, Aeronautical Engineering Laboratory, 1959.
 8. C.K. Law, "A Simplified Theoretical Model for the Vapor-Phase Combustion of Metal Particles", *Combustion Science and Technology*, Vol. 7, No. 5, 1973, pp. 197-212.
 9. Y. Liang, Numerical Simulation of Unsteady, Single Aluminum Particle Combustion in Air", 34th AIAA/ASME /SAE/ASEE Joint Propulsion, 1998
 10. J.C. Melcher, H. Krier and R. L. Burton, "Burning Aluminum Particles Inside a Laboratory-Scale Solid Rocket Motor", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 18, No. 3, 2002
 11. V.A. Babuk and V. A. Vasilyev, "Model of Aluminum Agglomerate Evolution in Combustion Products of Solid Rocket Propellant", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 18, No. 4, 2002, pp. 814-823.
 12. Y. Fabignon, O. Orlandi, J. F. Trubert, D. Lambert and J. Dupays, "Combustion of Aluminum Particles in Solid Rocket Motors", 39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, 2003
 13. Heesung Yang, Kyungmoo Kim, Woongsup Yoon, "Simplified model for Single Aluminum Particle Combustion," 47th AIAA Aerospace Science Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition Edited AIAA, Orlando, Florida, 2009, pp. 1-9.
 14. A. Zenin, G. Kusnezov, and V. Kolesnikov, "Physics of aluminum particle combustion at convection," 38th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Vol. AIAA-2000-0849, Edited, 2000. pp. 1-12
 15. M.W. Beckstead, "Correlating aluminum burning times," *Combustion Explosion and Shock Waves*, Vol. 41, No. 5, 2005, pp. 533-546.
 16. Y. Huang, G. A. Risha, V. Yang, Richard A. Yetter, "Effect of Particle Size on Combustion of Aluminum Particle Dust in Air", *Combustion and Flame*, 156, 2009, pp.5-13
 17. *Fluent 6.3 User's Guide*, Ansys, 2006
 18. *Fluent 6.3 UDF Manual*, Ansys, 2006