

論文

DOI:10.5139/JKSAS.2010.38.4.363

AP추진제의 연소면 형성 및 전파 모델링 연구

정태용*, 도영대**, 유지창**, 여재익***

A phase transformation model for burning surface in AP/HTPB propellant combustion

Taeyong Jung*, Young-Dae Doh**, Ji-Chang Yoo** and Jack Jai-ick Yoh***

ABSTRACT

In the solid rocket propellant combustion, the dynamic phase change from solid to liquid to vapor occurs across the melt layer. During the surface burning, liquid and gas phases are mixed in the intermediate zone between the propellant and the flame to form micro scale bubbles. The known thickness of the melt layer is approximately 1 micron at 10^5 Pa. In this paper, we present a model of the melt layer structure and the dynamic motion of the melt front derived from the classical phase field theory. The model results show that the melt layer grows and propagates uniformly according to $\exp(-1/T_s)$ with T_s being the propellant surface temperature.

초 록

고체추진제의 연소가 진행될 때, 고체상에서 액체상으로, 액체상에서 기체상으로의 상변화가 일어난다. 이 때 추진제 표면에서는 액체상, 기체상이 동시에 존재하게 된다. 액체상과 기체상의 중간에서는 액체상과 기체상의 혼합으로 인하여 거품이 형성되는데, 이 구간을 용융층(Melt Layer)이라고 한다. 용융층의 윗부분, 즉 액체상과 기체상 사이에는 연소면(Burning Surface)이 존재한다. 일반적으로 고체추진제가 연소될 때 생성되는 용융층의 두께는 1기압에서 약 1마이크론 정도이다. 본 연구에서는 물리적인 상변화 현상을 상방정식을 이용하여 액체에서 기체로의 상변화 현상을 모사하였다. 이를 통하여 연소면의 두께, 형성과 전파를 모사하였다.

Key Words : Ammonium Perchlorate(과염소산암모늄), Burning Surface(연소면), Melt Layer(용융층), Phase Equation(상방정식), Burning Rate(연소율), Solid Propellant(고체추진제)

기 호

AP : Ammonium Perchlorate	ρ : Density
HTPB : Hydroxyl-terminated polybutadiene	u : Velocity
	T : Temperature
	P : Pressure
	e : Internal energy
	T_m : Melting temperature
	T_v : Vaporization temperature
	R_l : Gas constant at liquid phase

† 2010년 1월 5일 접수 ~ 2010년 3월 23일 심사완료

* 정회원, 서울대학교 기계항공공학부 대학원

** 정회원, 국방과학연구소

*** 정회원, 서울대학교 기계항공공학부

교신저자, E-mail : jjyoh@snu.ac.kr

서울시 관악구 관악로 599

R_g : Gas constant at gas phase	c_v : Specific heat capacity
φ : Phase variable	κ : Thermal conductivity
Ψ : Phase well depth	Q_m : Heat of melting
B_φ : Multiplication factor	Q_v : Heat of vaporization

I. 서 론

AP(Ammonium Perchlorate) 기반 복합 추진제는 소형 미사일이나 큰 추진제의 부스터 등 고체 로켓 시스템에 널리 사용되고 있다. 그 이유는 AP의 연소 안정성이 높기 때문이고, 입자의 크기에 따라 연소 속도가 다르기 때문에 연소 속도를 제어하기가 용이하기 때문이다. 보통 AP그레인의 입자는 20~200 μm 의 크기를 갖기 때문에 마이크로 스케일의 연소현상에 대한 많은 연구가 진행되었다.

Hermance는 충전된 고체상태의 AP 복합추진제의 표면이 균질하지 않다는 것을 밝히며 통계적 연소 모델을 시도하였다[1]. Beckstead 등은 Hermance의 모델을 수정 보완하여 연소시 발생 화염을 예혼합화염, 초기확산화염, 최종확산화염의 3가지 화염으로 설명한 다중화염모델인 BDP(Beckstead, Derr, Price)모델을 제안하였다.[2]. 이 다중화염모델은 많은 연소성질 외에도 연소속도-압력의 관계를 설명하는데 경계면 반응(Interfacial Reaction)의 중요성을 제시하였다. 고체추진제가 가열되어 기체상으로 발전할 때 용융상(Condensed-phase)이 존재하는데 이 구간을 용융층(Melt Layer) 혹은 거품층(Foam Layer)라고 한다. BDP모델의 예혼합화염은 용융층이 존재했을 때 생성되는 화염으로 알려져 있다. 용융층의 두께는 추진체 내부의 압력에 영향을 받게 되는데, 챔버 내압이 높을 때는 얇게 형성되고 내압이 낮을 때는 두껍게 형성된다.

실험적 근거에 의하면 AP의 용융층은 두께가 매우 얇기 때문에 육안으로 관측하기는 어렵다[3]. 고체추진제의 산화제로 사용되는 니트라민 계열의 RDX나 HMX의 경우 용융층의 두께는 1기압에서 약 100 μm 정도이지만, AP의 경우는 1기압에서 약 1 μm 정도의 매우 얇은 두께를 갖는다[4,5]. 용융층의 두께는 연소 불안정성에 영향을 미치며, 용융층의 두께가 두꺼울수록 연소 불안정성이 커진다[6]. 용융층의 아랫부분, 즉 고체추진체와 액체상 사이에는 녹고 있는 상면(Melting Front)이 존재하고, 거품층의 윗부분,

즉 액체상과 기체상 사이에는 연소면(Burning Surface)이 존재한다.

상변화가 있는 반응을 모사하기 위해서는 상변화를 모사할 수 있는 상방정식(Phase Equation)이 필요하다. 본 논문에서는 Ruderman 등이 검증한 상방정식을 사용하고, 이를 위하여 상방정식을 간략하게 설명한다[7]. 상방정식을 포함한 지배방정식을 이용하여 연소면의 형성 및 전파를 모사하였다. 상방정식을 통해 얻어진 연소면 모델은 연소면의 전파속도와 연소율(Burning rate)의 속도가 같음을 통하여 타당성을 입증하였다.

II. 본 론

2.1 연소면의 구조

연소면의 구조를 모사하기 위한 지배방정식은 정상상태에서의 질량, 운동량, 에너지 보존식과 상방정식이다. 본 논문에서는 1차원(One-dimensional)으로 모사를 수행하였다. 지배방정식은 다음과 같다.

$$\rho u = m \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho u e + \rho u)}{\partial x} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \rho T \left(\beta_m \frac{Q_m}{T_m} + \beta_v \frac{Q_v}{T_v} \right) \dot{\varphi} + Q_k \beta_k \quad (3)$$

$$B_\varphi \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = -\rho \left(\frac{1}{2} \Psi \frac{\partial F}{\partial \varphi} + \beta_m(\varphi) \frac{T - T_m}{T_m} Q_m + \beta_v(\varphi) \frac{T - T_v}{T_v} Q_v \right) \quad (4)$$

$\frac{\partial T}{\partial x} = H$ 로 정의하면, Eq. 3의 확산항을 1차 미분방정식으로 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial T}{\partial x} = H \quad (5)$$

$$\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{1}{\kappa} \left\{ \frac{\partial(\kappa x T + mKT)}{\partial x} - \rho T \left(\beta_m \frac{Q_m}{T_m} + \beta_v \frac{Q_v}{T_v} \right) \dot{\varphi} - Q_k \beta_k \right\} \quad (6)$$

Equation 3을 Eq. 5와 Eq. 6으로 나누는 이유는 지배방정식을 $y' = Ay + g$ 의 시스템으로 표현하기 위함이다. φ 는 상의 상태를 표현하는 변수로써, $\varphi=1$ 에서는 액체, $\varphi=2$ 에서는 기체를 나타낸다($\dot{\varphi} = \partial\varphi/\partial x$).

Equation 3에서 끝에 있는 항 $Q_k\beta_k$ 는 추진제의 연소를 풀 때 기화열과 반응속도의 곱으로 표현되는 화학반응항 $Q_i r_i$ 을 대체하는 항이다. 이는 화학반응을 풀었을 때의 경직성문제(Stiffness)를 해결하여 계산을 용이하게 하였다. $Q_k\beta_k$ 에서 β_k 는 상변수의 함수로써 연소의 경우와 유사하게 온도를 증가시키는 함수로 표현된다(Fig. 1).

$$\beta_k(\varphi) = (\varphi - 1)^2(5 - 2\varphi) \quad (7)$$

Equation 4에서 F는 고체, 액체, 기체일 때 안정값(Stable root)을 갖게 하는 함수이고, β_m 는 추

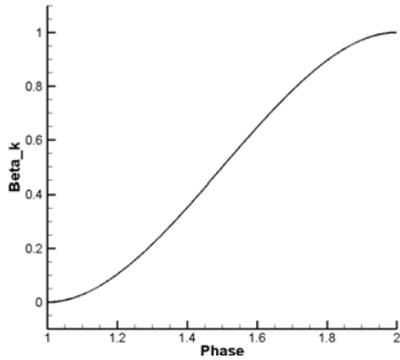


Fig. 1. A Transfer Function of Enthalpy of Phase Transformation

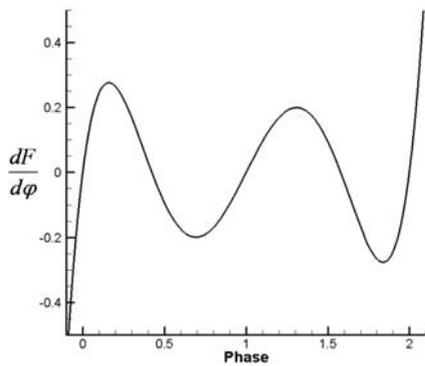


Fig. 2. Differential Triple Well Function

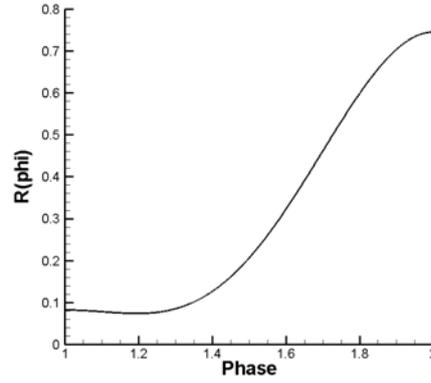


Fig. 3. Plot of Gas Constant R

진제의 온도가 용융점 보다 높을 때 상 변수가 고체에서 액체로 바뀔 수 있도록 제한하는 함수이고, β_v 는 추진제의 온도가 끓는점 보다 높을 때 액체에서 기체로 바뀔 수 있도록 제한하는 함수이다. Figure 2을 통하여 φ 가 0, 1, 2이외에도 0.42와 1.57부분에서 안정값을 갖는 것을 확인할 수 있다. 이는 $\varphi = 0.42, 1.57$ 에서 준 평형상태임을 예측할 수 있는 근거이다.

$$F = (\varphi(\varphi - 1)(\varphi - 2))^2 \quad (8)$$

$$\beta_m(\varphi) = \begin{cases} 6\varphi(1 - \varphi) & \text{for } 0 \leq \varphi \leq 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (9)$$

$$\beta_v(\varphi) = \begin{cases} 6(\varphi - 1)(2 - \varphi) & \text{for } 1 \leq \varphi \leq 2 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

연소면의 경우 φ 가 1과 2 사이의 함수이므로 β_m 값은 항상 0이다. 상태방정식의 기체상수 R은 상변수에 관한 함수이고 Eq. 11-13과 같이 정의한다(Fig. 3).

$$R(\varphi) = 2(R_{liquid} - R_{gas})(\varphi - 1)^3 - 3R_{liquid} - R_{gas})(\varphi - 1)^2 + R_{liquid} \quad (11)$$

$$R_{liquid}(\varphi) = 2R_l(\varphi - 1)^3 - 3R_l(\varphi - 1)^2 + R_l \quad (12)$$

$$R_{gas}(\varphi) = -2R_g(\varphi - 1)^3 + 3R_g(\varphi - 1)^2 \quad (13)$$

2.2 연소면의 형성 및 전파

연소면의 형성 및 전파를 모사하기 위하여 풀어야 할 질량, 운동량, 에너지 보존식, 상 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{14}$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0 \tag{15}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u e + p u)}{\partial x} \\ & = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \rho T \left(\beta_m \frac{Q_m}{T_m} + \beta_v \frac{Q_v}{T_v} \right) \dot{\phi} + Q_k \beta_k \end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned} & B_\phi \left(\frac{d\phi}{dt} + u \frac{d\phi}{dx} \right) = \\ & -\rho \left(\frac{1}{2} \Psi \frac{\partial F}{\partial \phi} + \beta_m(\phi) \frac{T - T_m}{T_m} Q_m + \beta_v(\phi) \frac{T - T_v}{T_v} Q_v \right) \end{aligned} \tag{17}$$

연소면의 형성 및 전파를 모사하기 위하여 사용되는 함수 $F(\phi), \beta_m(\phi), \beta_v(\phi), \beta_k(\phi), R(\phi)$ 은 2.1장에 사용된 함수와 같다.

수치해석방법으로는 대류항은 ENO scheme을, 전도항은 RK3 scheme을 사용하였다.

III. 결 과

3.1 연소면의 구조

용융층의 두께가 약 $0.1\mu\text{m}$ 이기 때문에 연소면의 두께는 더 얇을 거라는 추측이 가능하다. 상방정식을 이용한 모델링에서는 약 10nm 정도의 연소면이 형성되었다. 연소면을 경계로 급격한 밀도의 변화와 속도의 변화가 존재하며, 연소면을 경계로 좌측엔 상변수가 1인 액체구간이, 우측엔 상변수가 2인 기체구간이 존재한다. 액체에서는 AP의 밀도 1800kg/m^3 을 갖고, 기체에서는 AP의 밀도 8kg/m^3 을 갖는다(Fig. 4). 연소면의 구조를 모사하는데 사용된 값들은 Table 1에 정리하였고, 하첨자 1은 초기조건을 의미한다.

Table 1. Parameters for Burning Surface Structure Modeling

ρ_1	1800 kg/m^3	Q_m	-300 kJ/kg
u_1	0.001 m/s	Q_v	-1800 kJ/kg
T_1	865 K	c_v	1 kJ/kg-K
ϕ_1	$1+10^{-4}$	κ	0.4 W/m-K
T_m	580.1 K	Ψ	550
T_v	865.6 K	B_ϕ	1.5
R_l	0.0824	Q_k	10^{28} kJ/kg
R_g	0.745		

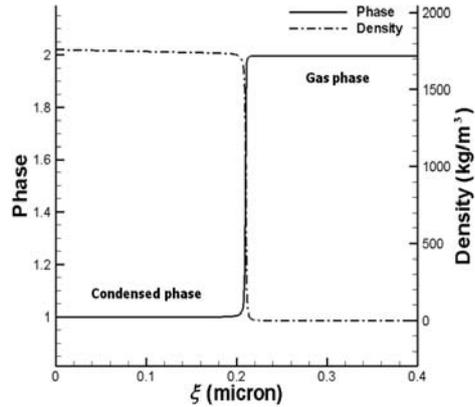


Fig. 4. Structure of Phase Change Zone

3.2 연소면의 형성 및 전파

Figures 5-7는 액체에서 기체로의 상변화를 수반한 상방정식을 이용하여 모사한 결과이다. 초기 고체추진제를 점화하여 가열하면 액체 및 기체상으로 추진제의 상이 변환된다. 액체상($\phi=1$)의 AP기반 복합추진제를 화염이 가열하였을 때, 연소면이 생성되기 시작한다(Fig. 5). 이 때 약 1.5부근에서 약간 완만하게 변하는 구간이 생기는데, 그 이유는 함수 F 의 5개의 안정값 중 하나인 1.57부근에서 준평형상태가 생기기 때문이다. 계속해서 화염을 통하여 열을 공급받게 되면 기체상으로 상이 변환되며 이 때 기체상과 액체상 사이에 분명한 연소면 형성되는 것을 확인할 수 있다(Fig. 6-7).

점화 후 액체 상태일 때의 AP추진제가 기체상태로 변하여 연소면이 생성될 때의 두께가 연소면이 전파될 때 보다 좀 더 두꺼운 것을 확인할 수 있는데 이는 용융층의 두께가 압력에 따라 영

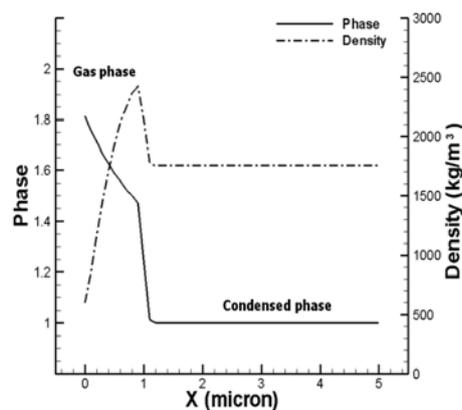


Fig. 5. Initiation of melt layer

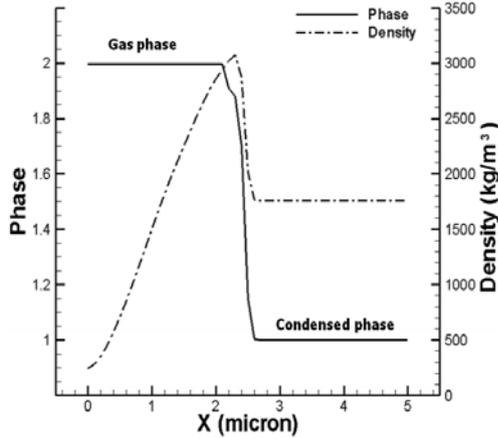


Fig. 6. The Growth of Burning Surface

Table 2. Parameters for Burning Surface Growth and Propagation

ρ_1	1800 kg/m ³	Q_m	-300 kJ/kg
u_1	0 m/s	Q_v	-1800 kJ/kg
T_1	865 K	c_v	1 kJ/kg-K
ϕ_1	$1 + 10^{-14}$	κ	0.4 W/m-K
T_m	580.1 K	Ψ	550
T_v	865.6 K	B_ϕ	1.5
R_l	0.0824	Q_k	3×10^{15} kJ/kg
R_g	0.745		

향을 받기 때문이다. 연소가 계속 진행됨에 따라 화염부분의 온도가 상승하고 이는 압력을 증가시킨다. 주위의 압력이 높을 때 용융층은 얇게 형성되고 압력이 낮을 때 용융층은 두껍게 형성되는데, 위의 결과를 통하여 용융층의 두께가 압력에 영향을 받는다는 것을 확인할 수 있다. 연소면의 형성 및 전파를 모사하는데 사용된 값들은 Table 2에 정리하였다.

Hegab 등의 연구에 의하면, 전파되는 속도는 표면 온도의 영향을 받는다[8].

$$r_{AP} = A_{AP} \exp(-E_{AP} / R_u T_{AP,s}) \quad (18)$$

전파될 때의 표면온도를 통하여 전파속도를 확인할 수 있다. 전파될 때의 표면온도 1150K를 Eq. 18에 대입하여 AP의 전파속도를 구하여 보면 A_{AP} 는 9.82×10^4 이고 E_{AP} 는 22kcal/mol일 때 약 6.4cm/s의 속도를 갖는다. 이는 이미 알려진 연소율의 값들[9,10]로부터 88% AP의 연소율

Table 3. Computed and experimental burning rates at 100 bars

77.5% AP, Calculated[9]	3.0 cm/s
80% AP, Experiment[10]	4.5 cm/s
88% AP, Calculated[in this work]	6.4 cm/s

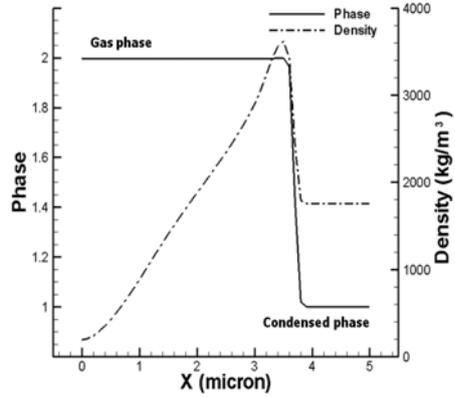


Fig. 7. The Propagation of Burning Surface

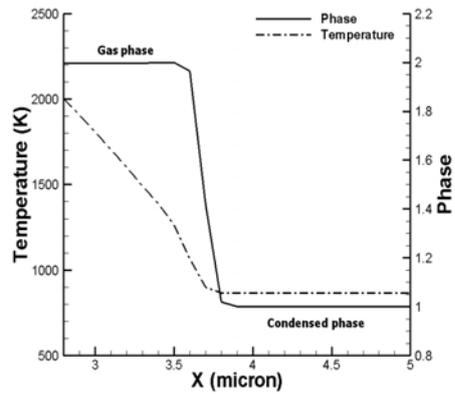


Fig. 8. The Temperature Profile During Propagation of Burning Surface

을 예측하여 보았을 때, 타당한 값을 얻는다 (Table 3). 비정상 상태 방정식 모델링이기 때문에 정상 상태 방정식 모델링보다는 더 낮은 열원에서도 모사가 가능하였다.

이를 통하여서 상방정식을 이용한 상변화 모델링의 타당성을 검증하였다.

IV. 결론

고체, 기체, 그리고 고체와 기체 중간상으로 나누어 고체추진제의 연소현상을 모사하였던 선

행 연구들과는 달리, 본 연구에서는 상변화를 표현할 수 있는 상방정식을 사용하여 추진체의 상이 변하는 동안의 연소면의 형성 및 전파를 한번에 모사하였다. 연소면의 두께가 실험적으로 알려져 있지 않지만 용융면의 두께를 통해 추측 가능한 범위에서 연소면이 형성되었다. 또한 연소면 표면온도를 통하여 얻은 전파속도는 실험적으로 알려진 연소속도와 근사한 결과를 갖는다. 본 연구에서는 액체상에서 기체상으로의 변화만을 고려하였지만, 고체상에서 기체상으로의 추진체의 상변화를 모사할 수 있는 기반을 마련하였다. 이를 통하여서 용융층의 특성과 고체추진체의 연소특성을 명확히 해석할 수 있는 전산 기법을 마련하는데 초석을 쌓았다.

후 기

본 연구는 국방과학연구소 핵심기술 위탁연구의 지원을 받아 수행되었습니다. 지원에 감사 드립니다.

참고문헌

- 1) Hermance, C. E., "A Model of Composite Propellant Combustion Including Surface Heterogeneity and Heat Generation", AIAA Journal, Vol. 4, 1966, pp. 1629-1637.
- 2) Beckstead, M., Derr, R. and Price, C., "A model of composite solid-propellant combustion based on multiple flames", AIAA Journal, Vol. 8, No. 12, 1970, pp. 2200-2207.
- 3) Summerfield, M., Sutherland, G. S., Webb, M. J., Taback, H. J. and Hall, K. P., Solid Propellant Rocket Research, Academic Press, 1960.
- 4) Tanaka, M. and Beckstead, M., "A three-phase combustion model of ammonium perchlorate", 32nd ASME, SAE, and ASEE, Joint Propulsion Conference and Exhibit, 1996.
- 5) Liao, Y-C and Yang, V., "Analysis of RDX monopropellant combustion with two-phase subsurface reactions", Journal of Propulsion and Power, Vol. 11, No. 4, 1995, pp. 729 - 739.
- 6) Lee, H. I., "Effects of a melt-layer on the L^* instability in solid-propellant rockets. I - Linear study", 27th Aerospace Sciences Meeting, 1989.
- 7) Ruderman, G.A., Stewart, D. S. and Yoh, J. J. "A thermomechanical model for energetic materials with phase transformations", SIAM J. Appl. Math., Vol. 63, No. 2, 2002, pp. 510 - 537
- 8) Hegab A., Jackson T. L., Buckmaster J. and Stewart D. S., "Nonsteady burning of periodic sandwich propellants with complete coupling between the solid and gas phases", Combustion and Flame, Vol. 125, Issue 1-2, 2001, pp. 1055-1070.
- 9) Massa L., Jackson T. L. and Buckmaster J., "New Kinetics for A Model of Heterogeneous Propellant Combustion" Journal of Propulsion and Power Vol. 21, No.5, 2005, pp. 914-924.
- 10) Jeppson, M.B., Beckstead, M.W., and Jing, Q., "A Kinetic Model for the Premixed Combustion of a Fine AP/HTPB Composite Propellant," AIAA Meeting&Exhibit, 1998, pp. 1 - 12.