

論文

J. of The Korean Society for Aeronautical and Space Sciences 44(4), 333-342(2016)

DOI:http://dx.doi.org/10.5139/JKSAS.2016.44.4.333

ISSN 1225-1348(print), 2287-6871(online)

평형상수를 이용한 액체로켓 추진제의 화학반응 수치연구

장요한*, 이균호**

Numerical Study of Chemical Reaction for Liquid Rocket Propellant Using Equilibrium Constant

Yo Han Jang* and Kyun Ho Lee**

Agency for Defense Development, Korea*

Department of Aerospace Engineering, Sejong University, Korea**

ABSTRACT

Liquid rocket propulsion is a system that produces required thrust for satellites and space launch vehicles by using chemical reactions of a liquid fuel and a liquid oxidizer. Monomethylhydrazine/dinitrogen tetroxide, liquid hydrogen/liquid oxygen and RP-1/liquid oxygen are typical combinations of liquid propellants commonly used for the liquid rocket propulsion system. The objective of the present study is to investigate useful design and performance data of liquid rocket engine by conducting a numerical analysis of thermochemical reactions of liquid rocket propellants. For this, final products and chemical compositions of three liquid propellant combinations are calculated using equilibrium constants of major elementary equilibrium reactions when reactants remain in chemical equilibrium state after combustion process. In addition, flame temperature and specific impulse are estimated.

초 록

액체로켓 추진시스템은 액체 추진제와 액체 산화제의 화학반응을 통해 추력을 발생하는 방식으로써 우주발사체 및 인공위성을 포함한 우주비행체에 광범위하게 적용되고 있다. 일반적으로 사용되는 액체로켓 추진제로는 모노메틸하이드라진/사산화이질소, 액체수소/액체산소 및 RP-1/액체산소 조합 등이 있다. 본 연구의 목적은 액체로켓 추진제의 열화학적 반응을 수치적으로 분석함으로써, 이를 통해 궁극적으로 액체로켓엔진의 설계와 성능에 필요한 유용한 정보를 예측하고자 하는 데 있다. 이를 위해 앞서 언급한 3가지 조합의 연료와 산화제에 대하여 연소반응 후 화학평형상태에 도달했을 때 주요 요소평형반응들의 평형상수 값들을 이용해 최종 생성물의 성분과 화학조성을 계산하였고 그 결과를 이용해 단일화염온도와 로켓성능변수인 비추력을 예측하는 연구를 진행하였다.

Key Words : Liquid Rocket Propellant(액체로켓 추진제), Chemical Equilibrium(화학평형), Equilibrium Constant(평형상수), Adiabatic Flame Temperature(단열화염온도), Specific Impulse(비추력), Monomethylhydrazine(모노메틸하이드라진), Dinitrogen Tetroxide(사산화이질소)

† Received : February 26, 2015 Revised : March 9, 2016 Accepted : March 11, 2016

* Corresponding author, E-mail : khlee0406@sejong.ac.kr

I. 서 론

액체로켓 추진시스템은 액체 연료와 액체 산화제가 보유하고 있는 화학 에너지를 이용해 추력을 발생시키는 방식이다. 즉, 액체 추진제간의 화학반응 과정을 거쳐 고온 고압의 가스를 얻은 후, 노즐을 통해 열역학적 에너지를 운동 에너지로 변환하여 외부로 팽창시킴으로써 추력을 발생시키는 방식이다. 이원추진제 액체로켓 추진시스템은 하나의 액체연료만 사용하는 단일추진제 시스템에 비해 상대적으로 높은 비추력 특성과 연료 대비 높은 추력을 발생시킬 수 있는 등 다양한 장점이 있다. 또한 이원추진제 액체로켓 추진시스템은 동일한 연료와 산화제를 사용하여 수십 N급의 위성체 자세제어용 추력기와 수백 N급의 궤도전이용 액체원지점엔진(LAE, Liquid Apogee Engine)을 동시에 운영할 수 있으므로 중대형 정지궤도 위성, 행성탐사선, 인공위성, 우주발사체 등 다양한 우주비행체용 추진시스템으로서 현재 광범위하게 적용되고 있다[1]. 일반적으로 사용되는 액체로켓엔진의 연료로는 모노메틸하이드라진(Monomethylhydrazine, MMH, CH_6N_2)과 액체 수소(LH_2) 그리고 로켓엔진용 정제된 등유인 RP-1(Rocket Propellant-1)이 있다. 실제로 모노메틸하이드라진/사산화이질소(Dinitrogen Tetroxide, NTO, N_2O_4) 추진제 조합을 응용한 사례로는 Ariane 5호 발사체의 Aestus 상단 엔진이 있으며, 장거리 이동을 요하는 우주 왕복선 메인 엔진, Saturn 5호와 Ariane 4호의 상단 엔진에는 액체수소와 액체산소(LOX) 조합이 응용되어 이원추진제로 사용된 바 있다. 또한, RP-1과 산소는 Zenit 2단 발사체 RD-120 엔진에 활용되었다[2]. 특히 모노메틸하이드라진/사산화이질소 추진제의 경우 비추력은 최대 330초 정도로 단일추진제로 사용되는 과산화수소나 하이드라진 보다 추진제 무게 절감 효과가 크며, 상온에서도 액체 상태로 유지되는 특성을 가지고 있기 때문에, 해외 우주선진국에서는 발사체 상단 엔진, 인공위성용 궤도 진입 및 자세제어 추력기, 전략무기용 자세제어 추진시스템 등의 주 추진제로 광범위하게 사용 중이다[3,4]. 그러나 해외 우주선진국으로부터 기술이전이 극도로 제한되는 분야일 뿐만 아니라, 추진제의 유독성과 복잡한 시스템 구성 및 운영 등으로 인해 아직까지 국내에서는 모노메틸하이드라진/사산화이질소 추진제를 사용한 추진시스템의 개발이 요원한 실정이다[5]. 하지만 근래에 국내에서도 현재 정지궤도 복합위성, 달 탐사선 및 달착륙선 개발이 진행됨에 따라 무게

절감 효과가 큰 모노메틸하이드라진/사산화이질소 추진시스템의 필요성이 점차 확산되고 있다. 이러한 추세에 맞춰 본 논문에서는 사전연구로서 모노메틸하이드라진과 사산화이질소의 기본적인 화학반응을 이해하고 그로인한 추진제의 성능특성을 파악하기 위해 기존 연구결과들을 토대로 화학평형을 계산할 수 있는 코드를 개발하였다. 또한 다양한 추진제 조합의 화학평형반응에도 추가적으로 적용함으로써 개발된 코드의 범용성과 확장성을 시험해보기 위해 액체수소/액체산소(LH_2/LOX) 및 RP-1/산소(RP-1/ O_2)의 화학평형반응도 고려하고자 하였다. 이를 위해 3가지 추진제 조합에 대하여 연소반응 후 화학평형상태에 도달했을 때 주요 요소평형반응들(Elementary Equilibrium Reactions)의 평형상수 값(Equilibrium Constant)들을 이용해 특정 온도와 압력 및 혼합비 조건에서 최종 생성물의 성분과 화학조성을 계산하였다. 이를 토대로 수치해석을 이용해 동결유동 조건이 적용된 노즐 내부에서 이들 세 종류의 연료/산화제 질량 혼합비에 따른 단일화염온도와 로켓엔진 성능 변수인 비추력을 예측하고자 하였다. 또한 본 연구의 평형상수를 이용한 액체추진제 화학평형반응 계산코드에 대한 신뢰도를 검증하기 위해 화학평형 계산에 일반적으로 사용되는 NASA의 CEA(Chemical Equilibrium with Applications) 계산 결과와 정확도를 비교하였다. 이와 같이 다양한 액체로켓 추진제의 열화학적 반응을 수치적으로 분석하고 그 결과를 검증함으로써, 궁극적으로는 모노메틸하이드라진과 사산화이질소의 화학평형반응에 대한 근본적인 이해와 더불어 본 추진제를 사용하는 액체로켓엔진의 설계와 성능특성 해석에 유용한 기본정보를 확보할 수 있는 화학평형 코드의 검증과 적용 가능성을 확인한 것이 본 연구를 통해 얻고자 하는 주된 의의라고 할 수 있다.

II. 이원추진제 특징

본 연구에서 고려한 액체추진제들의 물리적 특성을 Table 1에 정리하였다[1]. 우선, 모노메틸하이드라진은 하이드라진(Hydrazine, N_2H_4)과 혼합하거나 대용으로 사용되며, 하이드라진보다 넓은 온도범위에서 우주 공간에서의 저장성이 우수하다. 이러한 장점들 때문에 미국을 포함한 우주선진국에서는 우주비행체 로켓엔진 연료로 모노메틸하이드라진을 광범위하게 사용한다. 하지만 인체에 대한 독성이 강하므로 취급시 안전에 대한 상당한 주의가 필요하다[1,6]. 반면에 액체수

Table 1. Physical properties of liquid propellants[1,6]

Propellant	LH ₂	MMH	RP-1	Dinitrogen Tetroxide	LOX
Chemical formula	H ₂	CH ₆ N ₂	CH _{1.95}	N ₂ O ₄	O ₂
Molecular mass	2.016	46.072	175	92.016	32.00
Melting point (K)	14.0	220.7	225	261.95	54.4
Boiling point (K)	20.4	360.6	460-540	294.3	90.0
Heat of vaporization (kJ/kg)	446	875	246	413	213

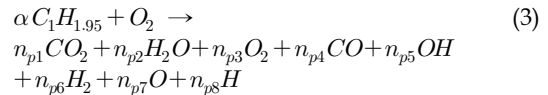
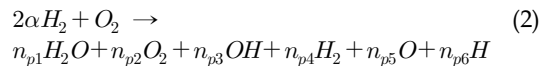
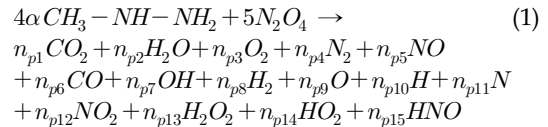
소는 추진제 중 가장 가벼울 뿐만 아니라 극저온 상태의 액체 연료로서 액체산소와 반응시켜 연소시키면 높은 비추력 특성을 나타낼 수 있는 장점이 있다. 그러나 밀도가 작다는 단점으로 인해 상대적으로 다른 연료에 비해 탱크용적이 증가하게 되며 최종적으로 우주비행체의 중량 및 비용을 증가시키는 요인이 된다. 또한 액체산소와 접촉시 폭발하는 형태로 연소하기 때문에 취급 및 저장에 주의할 필요가 있다. 주로 장거리용 대형 로켓의 메인 엔진 또는 상단엔진에 액체산소와 조합하여 사용된다[1,6].

마지막으로 RP-1은 탄화수소계열 연료로서 등유 혹은 케로신과 거의 같은 성질을 가지고 있다. RP-1은 안정된 상태로 저장이 가능하며 취급이 쉽고 가격이 저렴하다는 장점이 있다. 주로 대형로켓의 1단용 연료로서 사용된다[1,6]. 한편, 하이드라진 계열 연료의 산화제로서 보편적으로 사용되는 사산화이질소는 비등점이 비교적 낮은 황갈색의 고밀도 액체 산화제로서 그 증기는 적갈색으로 독성이 강하다는 특징이 있다. 하이드라진 계열 연료와 접촉시 자연점화적인 특성이 있기 때문에 자발적으로 점화가 발생한다. 사산화이질소는 저장성이 우수하나 상온에서 증기압이 비교적 높기 때문에 탱크의 내압을 주의해야 하며 일산화질소를 첨가하면 동결온도를 조절할 수 있다[1,6]. 반면에 액체산소는 가장 많이 사용되고 있는 액체로켓엔진의 산화제중 하나로서 저온에서 부식성도 독성도 없는 장점이 있다. 그러나 연료와의 접촉에 의해 격렬한 폭발을 일으키기 때문에 저장에 주의해야 한다[1,6].

III. 화학평형반응 이론

3.1 화학평형반응식

본 연구에서는 액체 연료와 액체 산화제는 화학반응 후에 기체 생성물로 모두 변환되었다고 가정했으며, 생성물을 이상기체로 모델링함으로써 표준엔탈피가 온도만의 함수가 되도록 단순화하였다. 노즐 내부에서는 동결유동(Frozen Flow)으로 가정하여 연소기에서의 생성물이 노즐 목, 노즐 출구의 화학 조성과 동일하도록 하였다. 기존 연구결과들을 토대로 본 연구에서 적용한 모노메틸하이드라진/사산화이질소(MMH/NTO), 액체수소/액체산소(LH₂/LOX) 및 RP-1/산소(RP-1/O₂)의 화학반응식은 식 (1)~(3)과 같다[2,7,8].



여기서 n_{pi} 는 각 생성물들의 몰수, α 는 1몰의 연료에 대해 반응에 참여하는 산화제의 몰수인 이론반응계수(Stoichiometric Coefficient)를 나타내며, 이론반응계수를 조절함으로써 그에 따른 연료와 산화제의 몰수와 식 (4)에 정의된 질량 혼합비(Mixture Ratio)를 계산하였다[2,7,8].

$$\frac{m_{oxidizer}}{m_{fuel}} = \frac{MW_{oxidizer} \times n_{oxidizer}}{MW_{fuel} \times n_{fuel}} \quad (4)$$

이때, m 은 질량, MW 는 분자량, n 은 몰수를 각각 의미한다. 한편, 상기 화학반응식들로부터 생성되는 가스성분들로 CO₂, H₂O, O₂, N₂, NO, CO, OH, H₂, O, H, N, NO₂, H₂O₂, HO₂, HNO(화학종 번호 $i=1\sim 15$)를 고려했으며, 각 생성물들의 독립적인 요소평형반응식들을 Table 2와 같이 가정하였다[2,7,8]. 이때, 개별 요소평형반응에 대한 평형상수들은 $K_{pi}(i=1\sim 11)$ 정의에 따라 계산이 가능하다[2,7~9]. 즉, 화학반응식 (1)~(3)으로부터 각 생성물들의 몰수 n_{pi} 는 반응 전후 C, O, H, N 원자들의 질량 보존방식과 Table 2의 11가

Table 2. Elementary Equilibrium Reactions[2,7,8]

No.	Elementary Equilibrium Reactions
1	$2CO_2 \rightleftharpoons 2CO + O_2$
2	$2H_2O \rightleftharpoons 2OH + H_2$
3	$2H_2O \rightleftharpoons 2H_2 + O_2$
4	$H_2 \rightleftharpoons 2H$
5	$O_2 \rightleftharpoons 2O$
6	$N_2 \rightleftharpoons 2N$
7	$N_2 + O_2 \rightleftharpoons 2NO$
8	$N_2 + 2O_2 \rightleftharpoons 2NO_2$
9	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons H_2O_2$
10	$H_2 + 2O_2 \rightleftharpoons 2HO_2$
11	$N_2 + H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2HNO$

지 개별 요소평형반응에 대한 평형상수들을 동시에 계산함으로써 얻을 수 있다. 기존 연구결과들을 토대로 3가지 추진제에 대한 질량보존식 및 화학평형식으로부터 구성한 최종 비선형 연립방정식 결과물 식 (5)~(7)과 같이 정리하였다[2,7,8].

모노메틸하이드라진/사산화이질소(MMH/NTO)

$$\begin{aligned}
 n_{p1} + n_{p6} - 4\alpha &= 0 & (5) \\
 2n_{p2} + n_{p7} + 2n_{p8} + n_{p10} - 24\alpha &= 0 \\
 2n_{p1} + n_{p2} + 2n_{p3} + n_{p5} + n_{p6} + n_{p7} + n_{p9} - 20 &= 0 \\
 2n_{p4} + n_{p5} + n_{p11} - 8\alpha - 10 &= 0 \\
 n_{p5}^2 - K_{p7}n_{p4}n_{p3} &= 0 \\
 n_{p6}^2n_{p3}P_r - K_{p1}n_{p1}^2n_t &= 0 \\
 n_{p7}^2n_{p8}P_r - K_{p2}n_{p2}^2n_t &= 0 \\
 n_{p8}^2n_{p3}P_r - K_{p3}n_{p2}^2n_t &= 0 \\
 n_{p9}^2P_r - K_{p5}n_{p3}n_t &= 0 \\
 n_{p10}^2P_r - K_{p4}n_{p8}n_t &= 0 \\
 n_{p11}^2P_r - K_{p6}n_{p4}n_t &= 0 \\
 n_{p12}^2n_t - K_{p8}n_{p4}n_{p3}^2P_r &= 0 \\
 n_{p13}^2n_t - K_{p9}n_{p8}n_{p3}^2P_r &= 0 \\
 n_{p14}^2n_t - K_{p10}n_{p8}n_{p3}^2P_r &= 0 \\
 n_{p15}^2n_t - K_{p11}n_{p4}n_{p8}n_{p3}^2P_r &= 0 \\
 n_{p1} + n_{p2} + n_{p3} + n_{p4} + n_{p5} + n_{p6} + n_{p7} + n_{p8} + n_{p9} \\
 + n_{p10} + n_{p11} + n_{p12} + n_{p13} + n_{p14} + n_{p15} - n_t &= 0
 \end{aligned}$$

액체수소/액체산소(LH₂/LOX)

$$\begin{aligned}
 2n_{p1} + n_{p3} + 2n_{p4} + n_{p6} - 4\alpha &= 0 & (6) \\
 n_{p1} + 2n_{p2} + n_{p3} + n_{p5} - 2 &= 0 \\
 n_{p3}^2n_{p4}P_r - K_{p2}n_{p1}^2n_t &= 0 \\
 n_{p4}^2n_{p2}P_r - K_{p3}n_{p1}^2n_t &= 0 \\
 n_{p5}^2P_r - K_{p5}n_{p2}n_t &= 0 \\
 n_{p6}^2P_r - K_{p4}n_{p4}n_t &= 0 \\
 n_{p1} + n_{p2} + n_{p3} + n_{p4} + n_{p5} + n_{p6} - n_t &= 0
 \end{aligned}$$

RP-1/산소(RP-1/O₂)

$$\begin{aligned}
 n_{p1} + n_{p4} - \alpha &= 0 & (7) \\
 2n_{p2} + n_{p5} + 2n_{p6} + n_{p8} - 1.95\alpha &= 0 \\
 2n_{p1} + n_{p2} + 2n_{p3} + n_{p4} + n_{p5} + n_{p7} - 2 &= 0 \\
 n_{p4}^2n_{p3}P_r - K_{p1}n_{p1}^2n_t &= 0 \\
 n_{p5}^2n_{p6}P_r - K_{p2}n_{p2}^2n_t &= 0 \\
 n_{p6}^2n_{p3}P_r - K_{p3}n_{p2}^2n_t &= 0 \\
 n_{p7}^2P_r - K_{p5}n_{p3}n_t &= 0 \\
 n_{p8}^2P_r - K_{p4}n_{p6}n_t &= 0 \\
 n_{p1} + n_{p2} + n_{p3} + n_{p4} + n_{p5} + n_{p6} + n_{p7} \\
 + n_{p8} - n_t &= 0
 \end{aligned}$$

이때, n_t 는 생성물들 몰수의 총 합을, P_r 은 기준 압력(=1.013 bar)에 대한 연소실 압력의 비를 의미한다[2]. 한편, Gibbs의 자유에너지를 이용한 평형상수식은 다음과 같이 정의된다[2,10].

$$K_p = \exp\left(-\frac{\Delta G^o}{RT}\right) \quad (8)$$

$$\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o \quad (9)$$

이때, Gibbs의 자유에너지는 식 (9)와 같이 특정 온도에서의 엔탈피와 엔트로피 그리고 온도의 대수적 관계식으로 정의될 수 있다[2,9]. 또한 본 연구에서는 연소기에서 이상기체를 가정하였으므로 표준 엔탈피와 엔트로피의 경우 온도의 함수로 가정하였다[2,7]. 그러므로 특정 온도 조건에서 엔탈피와 엔트로피를 계산한 후 이어서 Gibbs 자유 에너지를 도출하며 최종적으로 평형상수식을 계산할 수 있다. 이때 정압비열, 엔탈피 그리고 엔트로피를 온도에 대한 다항식 형태로서 식 (10)~(12)와 같이 정의하였다[2,7~9,11].

$$\frac{C_p^o}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (10)$$

$$\frac{H^o}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (11)$$

$$\frac{S^o}{R} = a_1 \ln T + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7 \quad (12)$$

위 식의 다항식 계수 $a_1 \sim a_7$ 은 NASA에서 제공하고 있는 데이터를 이용하였다[11]. 연소기에서의 온도가 주어지면 엔탈피, 엔트로피와 더불어 Gibbs 자유에너지와 함께 식 (8)의 평형상수식을 유도할 수 있으며 궁극적으로 원자보존식과 연립하여 화학 반응에 대한 생성물을 도출할 수 있게 된다. 종합하면, 기존에 화학평형 수치계산코드로 일반적으로 사용되는 NASA의 CEA 코드는 화학평형 조건인 Gibbs 자유에너지가 최소값을 가지

는 조건에 대해 질량보존식을 구속조건으로 하여 라그랑주 승수법(Lagrange Multiplier Method)을 이용한다. 이와 달리 본 연구에서는 기존 연구결과들을 토대로 Table 2의 11개 화학평형반응의 생성물을 포함하는 주요 요소평형반응들로부터 평형상수들을 도출한 후에 질량보존식과 결합하여 화학평형반응의 생성물 조성을 계산하였다. 이러한 두 코드를 비교한 결과 계산용 컴퓨터의 성능과 수치계산 알고리즘의 비약적인 발전 덕분에 두 코드 간에 속도와 시간 등과 같은 계산 성능의 차이는 그리 크지 않는 것으로 확인되었다. CEA의 주요 특징으로는 범용성에 비중을 두었기 때문에 다양한 추진제에 대해 적용이 용이하다는 점을 꼽을 수 있다. 이에 비해 본 연구에서 적용한 코드는 화학평형반응식을 직접적으로 다루기 때문에 추진제 반응 및 특성에 대한 기초연구를 수행하는데 밀바탕이 되는 기본 화학평형반응 메커니즘을 본질적으로 이해하는데 도움을 준다는 점에서 활용 가치가 있다고 사료된다.

3.2 화염온도 및 비추력 계산

식 (5)~(7)의 비선형 연립방정식으로부터 계산한 화학평형반응 생성물 조성 결과를 식 (13)의 에너지방정식에 대입한 후 양변의 값이 등가가 성립하도록 반복계산 함으로써 로켓엔진의 연소실이 외부와의 열손실이 없는 단열상태에서 이론적으로 얻을 수 있는 최대 연소온도인 단열화염온도(Adiabatic Flame Temperature)를 예측할 수 있다[2,9].

$$\begin{aligned} \Delta H_r^0 + \sum_i n_{pi,reactants} \int_{298}^{T_{int}} C_{pi} dT & \quad (13) \\ & = \sum_i n_{pi,products} \int_{298}^{T_{ad}} C_{pi} dT \end{aligned}$$

식 (13)에서 T_{int} 는 반응물의 초기 온도, T_{ad} 는 생성물의 단열화염온도를 나타낸다. 에너지방정식으로부터 예측된 단열화염온도와 그 때의 생성물들의 몰수를 아래의 식 (14)~(16)에 대입함으로써 연료와 산화제의 이론적인 총괄화학반응으로부터 생성된 연소가스 혼합물의 열역학적 물성치인 분자량(M), 정압비열(C_p), 비열비(k) 값들을 단열화염온도로부터 추정할 수 있게 된다[2,9].

$$M = \frac{\sum n_i M_i}{\sum n_i} \quad (14)$$

$$C_p = \frac{\sum n_i C_{pi}^0}{\sum n_i} \quad (15)$$

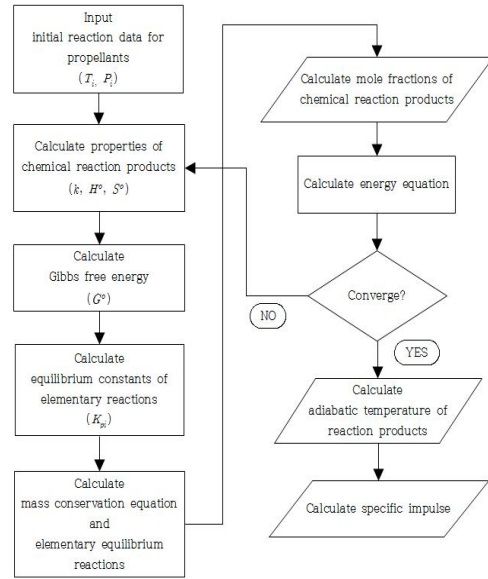


Fig. 1. Flow chart of chemical equilibrium reaction analysis

$$k = \frac{C_p}{C_p - R} \quad (16)$$

최종적으로는 식 (17)을 이용해 비추력(Specific Impulse)을 계산함으로써 연료와 산화제를 사용하는 이원추진제 로켓엔진의 성능을 이론적으로 예측할 수 있게 된다[1].

$$I_{sp} = \frac{\sqrt{\frac{2k}{k-1} \frac{RT_0}{M} \left[1 - \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{(k-1)}{k}} \right]}}{g_0} \quad (17)$$

여기서 g_0 는 중력가속도(9.807 m/s^2), R 은 일반기체상수($8.31441 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$), p_1 은 연소실 압력, p_2 는 노즐 출구 압력, T_0 는 연소실 내부의 전온도인 단열화염온도를 나타낸다.

결론적으로 단열화염온도와 그 온도에서의 생성물들의 몰수를 동시에 계산하기 위해서는 평형상수들과 각 원자들의 몰수의 함수로 구성된 식 (5)~(7)의 비선형 연립방정식들과 식 (13)의 에너지방정식을 반복적으로 계산하여 수렴시켜야 한다. 이를 위해 뉴턴법(Newton Method)과 같은 수치해석 기법[12]을 이용하여 액체연료와 산화제의 이론적인 총괄화학 평형반응과 액체로켓엔진의 이론 성능을 예측할 수 있는 코드를 구현하였으며, 간략한 계산절차를 Fig. 1에 나타내었다.

IV. 해석 결과

상기에 설명한 방정식들로 구현한 수치해석 코드를 사용하여 화학평형반응 이후 생성된 기체 성분들의 조성과 더불어 단일화염온도 및 액체로켓엔진의 비추력을 계산하였다. 도출된 해석결과와 신뢰성을 검증하기 위해 NASA에서 개발한 CEA 코드[11] 계산결과와 함께 비교분석을 수행하였다.

4.1 화학평형반응 생성물 조성 예측

MMH/NTO, LH₂/LOX 및 RP-1/LOX의 화학평형반응식 (1)~(3)에서 수치해석을 통해 구해야 될 미지수는 각 생성물의 몰수(n_{pi})와 총 몰수(n_t)를 포함하여 각각 16, 7, 9개이다. MMH/NTO인 경우 생성물 화학 조성을 계산하기 위한 최종식은 식 (5)에 제시되어 있으며, 구체적으로 살펴보면 위에서부터 차례로 식 (1)의 화학평형반응식에 포함된 원자 C, H, O, N에 대한 4개의 질량보존방정식, Table 2의 개별 요소평형반응에 대한 11개의 평형상수식 및 생성물들의 총 몰수 보존식 1개를 포함해 총 16개의 식으로 구성됨을 알 수 있다. 이들 식들은 비선형 연립방정식으로 구성되므로 본 연구에서는 비선형 연립방정식을 풀기 위해 수치해석기법인 뉴턴법을 이용하였다. LH₂/LOX와 RP-1/LOX 추진제 조합에 대해서도 동일한 절차를 거쳐 생성물 기체성분의 몰분율을 계산하였으며, 본 연구의 평형상수를 이용한 액체추진제 화학평형반응 계산코드로부터 얻은 결과의 타당성을 검증하기 위해 NASA의 CEA 코드로부터 얻은 몰분율 결과와 비교하였다. Fig. 2에는 연료와 산화제의 혼합비가 2.5일 때 MMH/NTO의 화학평형반응식으로 계산된 생성물의 몰분율 결과를, Fig. 3과 4에는 혼합비가 3.0 및 2.4일 때 LH₂/LOX 및 RP-1/LOX에 대한 결과를 각각 제시하였으며, 이때 기존 연구결과의 계산조건을 토대로 연소실 압력을 34.5 bar로 가정하였다[2]. 각 그림에서 보듯이 세 가지 추진제 모두 생성물 기체들의 몰분율 차이가 약 5% 이내에서 일치하는 것으로 분석되었다. Table 3에 대표적으로 기체 H₂와 H₂O의 생성물에 대해 CEA로부터 계산한 몰수를 본 연구에서 예측한 결과와 비교, 정리하였으며, 그 결과 세 가지 추진제 조합 모두 1%이내의 상대오차가 발생하는 것으로 나타났다. 따라서 본 연구에서 구현한 코드가 NASA의 CEA 코드와 비교했을 때 거의 동일한 결과를 도출하므로, 높은 신뢰성을 가지는 것으로 판단되었다.

한편, Fig. 2의 결과를 통해 MMH/NTO 화학평형반응으로부터 생성된 총 15가지의 기체성분 중에서는 기체 H₂O와 N₂가 약 70% 정도로 상당히 많은 비중을 차지하는 것으로 확인된 반면 N, NO₂, H₂O₂, HO₂, HNO 화학종의 경우에는 거의 0에 가까운 비중이 나타나고 있어 이들이 관여한 요소평형반응이 활발히 발생하지 않음을 예측할 수 있었다.

Table 3. Prediction of H₂ and H₂O mole fractions

	MMH/NTO		LH ₂ /LOX		RP-1/LOX	
	CEA Result (%)	Present Result (%)	CEA Result (%)	Present Result (%)	CEA Result (%)	Present Result (%)
H ₂	4.015	4.039	61.992	61.991	10.569	10.562
H ₂ O	36.823	36.948	37.708	37.707	31.378	31.561
Relative Error (%)	0.937		0.004		0.650	

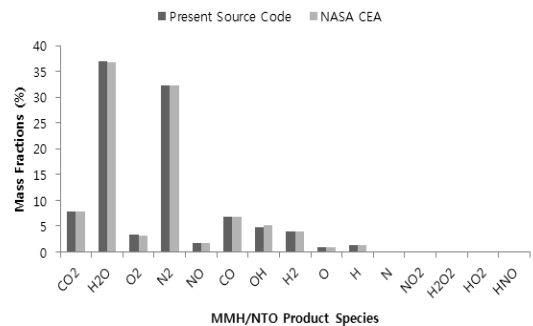


Fig. 2. Mole fraction result of MMH/NTO gas products at mixture ratio of 2.5

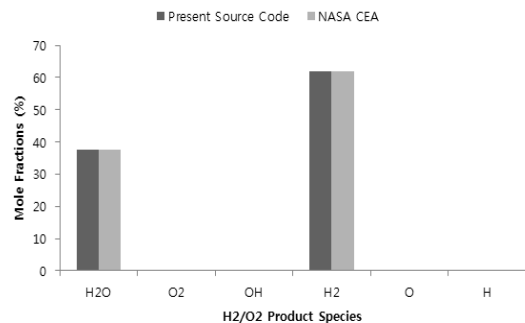


Fig. 3. Mole fraction result of LH₂/LOX gas products at mixture ratio of 3.0

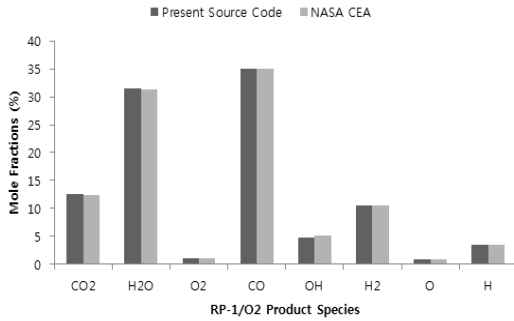


Fig. 4. Mole fraction result of RP-1/LOX gas products at mixture ratio of 2.4

LH₂/LOX 연소반응에서는 기체 H₂와 H₂O의 비중이 95%이상으로 화학평형반응으로 발생하는 생성물의 대부분을 차지하는 것을 알 수 있다. RP-1/LOX의 추진제 조합에서는 앞의 두 경우와 동일하게 기체 H₂O가 상대적으로 높게 예측되었으며, RP-1 연료가 탄화수소계열이므로 C가 포함된 기체 CO와 CO₂ 성분이 크게 증가하는 것으로 확인되었다.

4.2 단열화염온도 예측

Figure 5부터 7에는 수치해석의 입력조건으로 연소실 압력을 34.5 bar, 노즐 출구압력을 13,800 Pa로 적용하였을 때[2], 연료/산화제의 혼합비 변화에 따른 MMH/NTO, LH₂/LOX 및 RP-1/LOX 화학평형반응의 단열화염온도 분포를 그래프로 나타내었다. 우선 본 연구에서 적용한 수치방법의 신뢰성을 검증하기 위해 CEA 코드 해석 데이터와 비교하였으며, Fig. 5~7을 분석한 결과

2.7%의 오차범위를 가지는 것으로 확인되었다. 대표적으로 최대 단열화염온도 값의 비교 결과를 Table 4에 정리했으며, 1% 이내에서 일치하는 것을 알 수 있다. 반면에 기존 연구결과[2]는 CEA와의 오차가 상대적으로 큰 것으로 확인되었으며, 그 원인으로는 사용한 입력데이터에 오류가 있을 것으로 추정되었다.

한편, 연료/산화제 혼합비에 따른 전반적인 단열화염온도 변화는 세 추진제 모두 혼합비가 증가할수록 단열화염온도가 증가하다가 이론반응 혼합비(Stoichiometric Mixture Ratio)에 도달한 이후부터는 단열화염온도가 점차 감소하는 것을 결과 그래프를 통해 예측되었다. 이는 이론반응 혼합비보다 많은 산화제가 공급되더라도 실제 화학반응에 참여할 수 있는 연료의 양은 한정되어 있기 때문에 기존의 이론과 일치함을 알 수 있다[1].

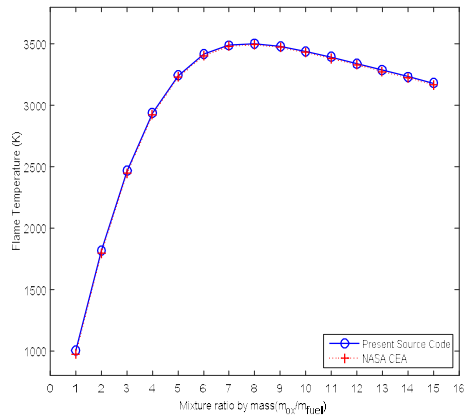


Fig. 6. Flame temperatures of LH₂/LOX as a function of mixture ratio

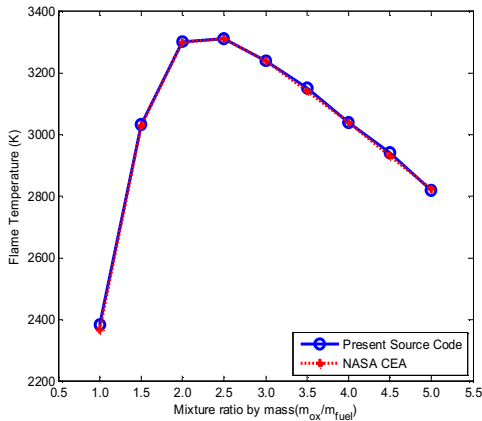


Fig. 5. Flame temperatures of MMH/NTO as a function of mixture ratio

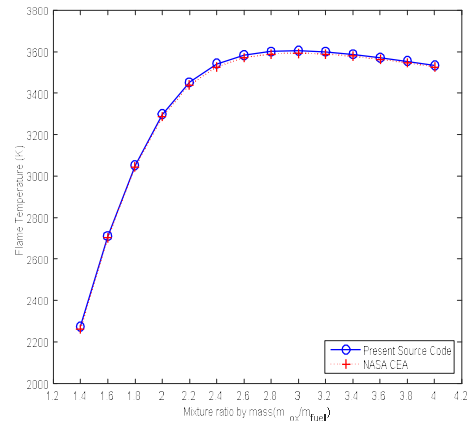


Fig. 7. Flame temperatures of RP-1/LOX as a function of mixture ratio

Table 4. Prediction of max. adiabatic flame temperatures with various mixture ratios

	MMH/NTO	LH ₂ /LOX	RP-1/LOX
Mixture Ratio	2.5	8.0	3.0
CEA Result (K)	3308.470	3495.010	3593.760
Present Result (K)	3310.800	3525.863	3604.674
Relative Error (%)	0.070	0.883	0.304

4.3 비추력 예측

Figure 8부터 10에는 연료/산화제의 혼합비 변화에 따른 MMH/NTO, LH₂/LOX 및 RP-1/LOX 화학평형반응의 비추력 분포를 그래프로 나타내었다. 단일화염온도와 마찬가지로 신뢰성 검증을 위해 CEA 코드 해석 데이터와 비교하였으며, Fig. 8~10을 분석한 결과 1.5%의 오차범위를 가지는 것으로 확인되었다. 대표적으로 최대 비추력 값의 비교 결과를 Table 5에 정리했으며, 1% 이내에서 일치하는 것을 알 수 있다. 반면에 기존 연구결과[2]는 CEA와의 오차가 상대적으로 큰 것으로 확인되었으며, 그 원인으로는 사용한 입력데이터에 오류가 있을 것으로 추정되었다.

혼합비에 따른 비추력의 경향성은 앞서 언급한 단일화염온도 분포와 유사하게 혼합비가 증가할수록 비추력 값이 증가하다가 특정 혼합비에

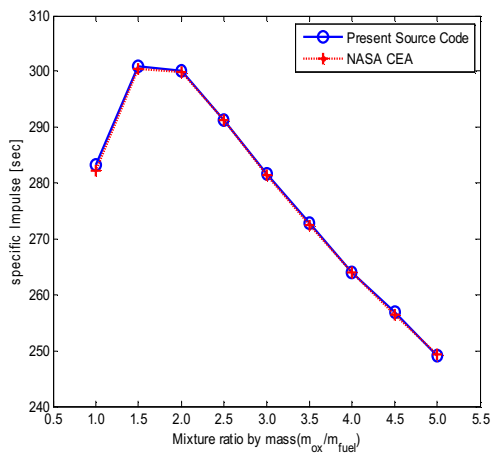


Fig. 8. Specific impulses of MMH/NTO as a function of mixture ratio

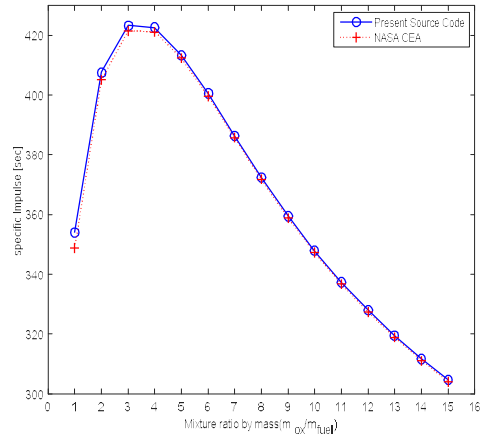


Fig. 9. Specific impulses of LH₂/LOX as a function of mixture ratio

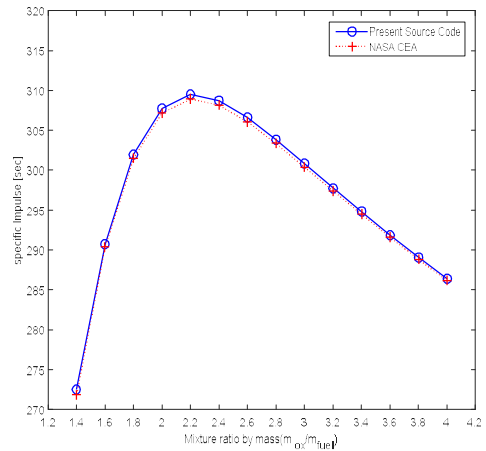


Fig. 10. Specific impulses of RP-1/LOX as a function of mixture ratio

Table 5. Prediction of max. specific impulses with mixture ratio

	MMH/NTO	LH ₂ /LOX	RP-1/LOX
Mixture Ratio	1.5	3.0	2.2
CEA Result (sec)	300.580	421.477	308.903
Present Result (sec)	300.842	423.444	309.499
Relative Error (%)	0.087	0.657	0.193



도달한 이후부터는 감소하는 것으로 예측되었다.

하지만 최대 단열화염온도가 발생하는 이론반응 혼합비보다는 낮은 혼합비에서 최대 비추력이 발생하는 것을 확인할 수 있다. 그 이유로는 최대 비추력이 산화제보다 연료가 과잉공급(Fuel Rich)되는 조건에서 얻어지기 때문이다. 즉, 연료 과잉조건인 낮은 이론반응 혼합비에서는 산화제보다 연료가 상대적으로 많기 때문에 연료에 포함된 H₂와 같은 가벼운 분자들이 산화제와 반응하지 않은 상태로 생성물 연소가스에 포함된다. 따라서 식 (14)로 정의된 생성물 연소가스의 평균 분자량이 작아지게 되므로, 그 결과 식 (17)에 따라 비추력은 생성물 연소가스의 물질량에 반비례하여 증가하게 된다. 반면에 혼합비가 높은 조건, 즉 연료 희박 조건에서는 앞서 언급한 가벼운 분자들이 모두 화학반응에 참여하여 분자량이 큰 생성물로 전환되기 때문에 생성물의 평균 물질량은 증가하게 되므로, 결국 비추력을 감소시키는 결과를 가져오게 된다. 따라서 로켓엔진의 성능을 증가시키기 위해 이론반응에 해당하는 양만큼 연료와 산화제를 반응시키는 것이 아니라 실제로는 연료 과잉공급 조건에서 연소반응이 발생되도록 로켓엔진의 작동조건을 설정한다. 일례로, 액체수소와 액체산소를 이원추진제로 사용하는 로켓엔진의 경우 일반적으로 이론반응 혼합비인 8보다 낮은 4.5에서 6사이의 범위에서 반응하도록 산화제 양을 제한하여 공급한다. 이를 통해 미처 반응에 참여하지 못하고 남은 H₂ 성분이 최종 생성된 연소가스에 그대로 잔류하게 함으로써 전체 연소가스의 평균 분자량이 감소되는 효과를 유발한다. 그 결과 식 (17)에 의거해 추진제의 비추력이 증가하게 되므로 보다 향상된 로켓엔진의 성능을 얻을 수 있다[1].

4.4 실제 적용결과

앞 절에서 설명한 방법의 타당성을 검증해보기 위해 실제 인공위성의 자세제어와 궤도 조정에 사용되고 있는 로켓엔진에 대해 적용을 해보았다[13]. Table 2에 제시된 모노메틸하이드라진/사산화이질소의 요소평형반응을 고려하여 모노메틸하이드라진/사산화이질소 추진제를 사용하는 10 N급 자세제어 추력기 및 400 N급 액체원지점엔진의 단열화염온도를 구해 CEA와 비교한 결과, Table 6에서 보듯이 약 0.16% 이내의 오차를 보이는 것으로 확인되었다. 이를 토대로 본 논문의 연구결과가 실제 사용 중인 로켓엔진의 성능해석에 대해서도 신뢰성 있는 결과를 도출할 수 있는 것으로 검증되었다.

Table 6. Prediction of adiabatic flame temperatures for 10N and 400N rocket engines

Thrust	10 N	400 N
Configuration		
Fuel / Oxidizer	MMH / NTO	
Combustion Pressure	9 bar	10 bar
Present Result	3056.1 K	3064.3 K
CEA Result	3051.4 K	3059.5 K
Relative Error (%)	0.15	0.16

본 연구의 결과는 현재 모노메틸하이드라진/사산화이질소 10 N급 자세제어 추력기 및 400 N급 액체원지점 로켓엔진의 내부 열유동장 해석 연구를 위한 입력조건으로 활용하고 있으며, 상세 연구결과는 내부 열유동장 결과와 함께 후속 논문에서 소개할 계획이다.

V. 결 론

해외 우주선진국에서는 모노메틸하이드라진/사산화이질소(MMH/NTO) 추진제를 발사체 상단 엔진, 인공위성용 궤도 진입 및 자세제어 추력기, 전략무기용 자세제어 추진시스템 등의 주 추진제로 광범위하게 사용 중이다. 근래에 국내에서도 현재 정지궤도 복합위성, 달탐사선 및 달 착륙선 개발이 진행되면서 모노메틸하이드라진/사산화이질소를 사용하는 추진시스템의 필요성이 점차 확산되고 있다. 이러한 추세에 맞춰 본 논문에서는 사전연구로서 모노메틸하이드라진과 사산화이질소의 기본적인 화학반응을 이해하고자 열화학적 반응을 수치적으로 분석함으로써, 궁극적으로 모노메틸하이드라진/사산화이질소 로켓엔진의 설계와 성능에 필요한 유용한 정보를 예측하고자 하였다. 이를 위해 기존의 연구결과를 토대로 Gibbs 자유에너지를 최소화 하는 NASA의 CEA 코드와 달리 본 연구에서는 주요 요소 평형반응들의 평형상수 값을 이용하여 추진제의 화학평형반응을 이해하고자 하였다. 또한 다양한 추진제 조합의 화학평형반응에도 추가적으로 적용함으로써 개발된 코드의 범용성과 확장성을 시

험해보기 위해 모노메틸하이드라진/사산화이질소 외에 액체수소/액체산소(LH₂/LOX) 및 RP-1/산소(RP-1/O₂)로 구성된 3가지 추진제 조합에 대하여 화학평형상태에 도달했을 때 주어진 온도와 압력 및 혼합비 조건에서 최종 생성물의 성분과 화학조성을 계산하였다. 또한 동결유동 조건이 적용된 노즐 내부에서 이들 3 종류의 연료/산화제 질량 혼합비에 따른 단열화염온도와 로켓엔진 성능 변수인 비추력을 예측하였다. 개발된 화학평형반응 계산코드의 신뢰도를 검증하기 위해 NASA의 CEA 코드해석 결과와 비교를 수행하였으며, 그 결과 상대오차가 최대 2.7% 이내의 차이를 보이는 것으로 분석됨으로써, 비교적 높은 정확도를 가지는 것으로 확인되었다. 또한, 본 연구에서 고려한 추진제 조합 외에도 다른 조합의 액체로켓 추진제의 화학평형반응 해석 및 로켓엔진의 이론 성능예측에도 적용할 수 있을 것으로 기대된다. 이와 같이 다양한 액체로켓 추진제들의 화학평형반응식을 통해 열화학적 반응을 수치적으로 분석하고 그 결과를 검증함으로써, 궁극적으로는 모노메틸하이드라진과 사산화이질소의 화학평형반응에 대한 근본적인 이해와 더불어 본 추진제를 사용하는 액체로켓엔진의 설계와 성능 특성 해석에 유용한 기본정보를 확보할 수 있는 화학평형 코드의 검증과 적용 가능성을 확인한 것이 본 연구를 통해 얻고자 하는 주된 의의라고 할 수 있다.

후속연구로서 본 논문에서 제시한 방법과 결과를 국내에서 개발 중인 정지궤도복합위성용으로 사용될 모노메틸하이드라진/사산화이질소 10 N급 자제제어 추력기 및 400 N급 액체원자점 로켓엔진의 내부 열유동장 해석 연구를 위한 입력조건으로 현재 활용하고 있으며, 이에 대한 추가 연구결과는 후속 논문에서 상세하게 다룰 계획이다.

후 기

본 연구는 미래창조과학부 한국연구재단의 우주핵심기술개발사업의 일환으로 수행되었습니다. (과제번호 : NRF-2013M1A3A3A02042426)

References

- 1) Sutton, G. P., Rocket Propulsion Elements, John Wiley & Sons Inc., 2010.
- 2) Amri, R., Rezoug, T., "Numerical Study of

Liquid Propellants Combustion for Space Applications", *Acta Astronautica*, Vol. 69, Sept. 2011, pp.485~498.

- 3) Han, C. Y., "Types and Characteristics of Chemical Propulsion Systems for Representative Korean Satellites," *Journal of the Korean Society for Aeronautical & Space Sciences*, Vol. 35, No. 8, 2007, pp.747~752.

- 4) Jang, Y. H. and Lee, K. H., "A Development Trend Study of Bipropellant Rocket Engine for Orbit Transfer and Attitude Control of Satellite," *Journal of The Korean Society of Propulsion Engineers*, Vol. 19, No. 1, 2015, pp.50~60.

- 5) Han, C. Y. and Chae, J. W., "Bipropellant Liquid Apogee Engine for a GEO Satellite", *Proceedings of 2014 KSAS Spring Conferences*, 2014, pp.429~433.

- 6) Yoon, W. S., Kim, Y. S., Rocket Engineering, Kyungmoon Publisher, 2004.

- 7) Jang, Y. H. and Lee, K. H., "Numerical Analysis of Chemical Equilibrium for MMH/NTO and H₂/O₂", *KSPE Spring Conference*, 2014, pp.107~110.

- 8) Lee, K. H. and Jang, Y. H., "Chemical Equilibrium Reaction Analysis of Liquid Rocket Propellants," *8th Asian-Pacific Conference on Aerospace Technology and Science*, 2015, pp.852~856.

- 9) Turns, S. R., An Introduction to Combustion: Concepts and Applications, McGraw Hill, 2012.

- 10) Humble, R. W., Henry, G. N., Larson, W. J., Space Propulsion Analysis and Design, McGrawHill, 1995.

- 11) McBride, B. J., Gordon. S., Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications, NASA RP-1311, NASA Lewis Research Center, OH, 1996.

- 12) Chapra, S. C., Applied Numerical Methods with Matlab, McGraw-Hill, 2008.

- 13) Jang, Y. H. and Lee, K. H., "Numerical Analysis of Chemical Equilibrium for 10N and 400N MMH/NTO Bipropellant Rocket Engine", *Proceedings of 2014 KSAS Fall Conferences*, 2014, pp.1550~1553.