

# 케로신/액체산소의 고압 연소해석을 위한 열역학/전달 물성치 해석 패키지 개발

김성구\* · 최환석\*

## Development of Real-Fluid Package Compatible with Chemkin for High-Pressure Kerosene/LOx Combustion

Seong-Ku Kim\* · Hwan-Seok Choi\*\*

### ABSTRACT

The modeling of thermodynamic non-idealities and transport anomalies is a crucial prerequisite to realistically simulate the mixing and combustion processes of liquid propellants injected above critical pressures. This study has developed a specific set of subroutines to calculate the thermodynamic and transport properties based on the generalized cubic equation of state (EoS) in a coupled manner with the standard chemical kinetics packages (Chemkin). The existing flamelet analysis code is extended with the real-fluid package and applied to numerical investigation of local flame structures of kerosene and liquid oxygen at high pressure conditions relevant to the actual rocket engines.

### 초 록

초임계 압력 조건에서 분사된 액체추진제의 혼합 및 연소 현상을 해석하기 위해서는 열역학적 비이상성과 전달 물성치의 특이성을 예측하는 것이 선행되어야 한다. 본 연구에서는 일반화된 3차 상태방정식(cubic EoS)을 기반으로 실제유체의 열역학/전달 물성치를 계산하는 서브루틴들을 개발하였으며, 표준 화학반응 패키지인 Chemkin과 쉽게 연동될 수 있도록 하였다. 실제유체 해석 패키지를 이용하여 기존의 층류화염편 코드를 확장하였으며, 실제 로켓엔진이 갖는 고압 연소조건하에서 케로신과 액체산소의 국소화염구조에 대한 수치해석 연구를 수행하였다.

Key Words: Supercritical Pressure(초임계 압력), Kerosene/LOx(케로신/액체산소), Cubic EoS(삼차 상태방정식), Real Fluid(실제유체), Flamelet Model(화염편 모델)

### 1. 서 론

액체로켓엔진의 분사기는 연소 성능, 열전달 특성, 그리고 연소불안정성을 지배하는 가장 중요한 요소이다. 지금까지 분사기의 설계 방식은 각국마다 고유한 개발 방식에 따라 경험적으로 수행되어 왔으며, 많은 시제품에 대한 연소시험

\* 한국항공우주연구원 연소기팀  
교신저자, E-mail: kimsk@kari.re.kr

을 통해 검증되어야 한다. 이로 인해 수반되는 시행착오와 개발 비용을 절감하기 위해 미국과 유럽을 중심으로 액체산소/기체수소 동축 전단 분사기의 고압 연소 현상에 대한 실험적 연구와 해석 모델링이 활발히 진행되고 있다[1-3]. 많은 실험적 연구들[1]에서 밝히고 있듯이 초임계 압력하에 분사된 액체 추진제의 연소현상이 이전까지 아임계 조건에서 통용되던 개념과는 현저히 다른 특성을 갖는다. 이러한 실험적 연구결과를 통해 최근의 해석적 연구 동향 역시 초임계 연소 현상을 열역학적 비이상성과 전달 물성치의 특이성이 수반되고 난류 확산이 혼합 특성을 지배하는 단상(single-phase)의 화염 구조로 이해하고, 이를 바탕으로 해석모델을 개발하는 것으로 연구 방향이 모아지고 있다[2,3]. 액체 추진제의 고압 연소 과정에서 나타나는 실제유체 거동을 예측하기 위해 대부분의 연구자들은, 계산 효율과 공학적 정확도를 동시에 만족하는 SRK (Soave-Redlich-Kwong) 또는 PR(Peng-Robinson) 방정식과 같은 cubic EoS를 사용해 왔다. 저자들은 최근 연구를 통해 SRK와 PR EoS 보다 향상된 적용성을 갖는 새로운 RK-PR cubic EoS를 바탕으로 열역학 모델을 유도하였다[4]. 본 연구에서는 이를 바탕으로 실제유체 혼합기의 열역학/전달 물성치를 계산하는 서브루틴들을 개발하였으며, 표준 화학반응 패키지인 Chemkin과 쉽게 연동될 수 있도록 하였다. 실제유체 해석 패키지를 이용하여 기존의 튜브화염편 코드를 확장하였으며, 실제 로켓엔진이 갖는 고압 연소조건하에서 케로신과 액체산소의 국소화염구조에 대한 수치 해석 연구를 수행하였다.

## 2. 해석 모델

### 2.1 Generalized cubic equation of state(EoS)

RK-PR cubic EoS는 아래와 같이 일반화된 식으로 표현된다[4].

$$p = \frac{\rho R_u T}{M_w - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{(M_w + \delta_1 b\rho)(M_w + \delta_2 b\rho)} \quad (1)$$

이때  $\delta_2 = (1 - \delta_1)/(1 + \delta_1)$ 이다.  $\delta_1$ 은 유체의 임계 압축계수(critical compressibility factor)에 따라 결정되는 계수이다. 만약  $\delta_1$ 의 값이 1 또는  $1 + \sqrt{2}$ 의 값으로 고정되면, 식(1)은 각각 SRK와 PR EoS와 동일한 방정식이 된다. 식(1)을 임의 개수의 화학종으로 구성된 혼합기로 확장하기 위해 mixing rule을 적용하였으며, 연소 유동 해석에 필요한 모든 열역학적 물성치들은 참고문헌[4]에 자세히 유도되어 있다. 점성계수와 열전도계수는 Chung 등이 제안한 모델[5]에 의해 계산하였으며, 물질확산계수는 Takahashi의 방법을 통해 예측하였다.

### 2.2 실제유체 해석 패키지의 구조

상세화학반응식을 다루는 대부분의 연소해석 코드들은 Sandia 연구소에서 개발한 표준화된 해석 패키지인 Chemkin을 기반으로 작성되어 있다. 따라서 본 연구에서는 실제유체 패키지를 Fig. 1과 같이 Chemkin과 연동되는 구조의 서브루틴 라이브러리(Chem-RF)로 개발하였다.

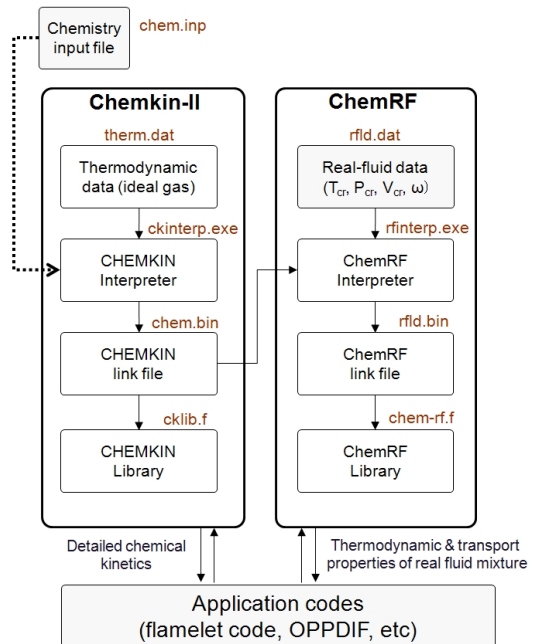


Fig. 1 Development of Real-fluid calculation package (ChemRF) compatible with Chemkin

먼저 Chem-RF의 interpreter는 Chemkin에서 사용될 화학종들을 파악하고 각각의 화학종에 대한 임계 물성치, acentric factor, dipole moment, 그리고 극성에 따른 correction factor를 찾아 데이터 파일(rfld.bin)을 출력한다. 연소해석코드에서 Chemkin과 마찬가지로 Chem-RF를 초기화하는 서브루틴에서 rflid.dat를 읽어 들이게 되고, 각각의 Chem-RF 서브루틴들은 혼합기의 화학 조성, 온도, 그리고 압력에 따라 밀도, 내부에너지, 엔탈피, 엔트로피, 정압 및 정적 비열, 음속, 점성계수, 열전달율, 그리고 물질확산계수를 계산한다.

### 3. 결과 및 고찰

#### 3.1 액체산소와 케로신 surrogate의 물성치 예측

RK-PR EoS와 기존의 cubic EoS와의 예측 정확도를 비교하기 위해, 액체산소와 세 가지 성분의 케로신 surrogate에 대한 1단계 무한속도 화학반응을 가정하고 각각의 혼합 조건에서 밀도의 예측결과를 NIST의 SUPERTRAPP 결과와 비교하였다(Fig. 2). SRK와 PR EoS는 특성이 상이한 액체산소와 고탄화수소에 대해 각각 하나의 영역에서만 정확도를 가지는 반면에, RK-PR EoS는 모든 혼합 영역에 대해 NIST의 database와 잘 일치하였다. Figs. 3과 4는 각각 산소와 케로신의 정압비열과 점성계수를 비교한 결과이며, 본 연구의 해석 패키지가 공학적 범위 내에서 정확도를 가지고 있음을 확인할 수 있었다.

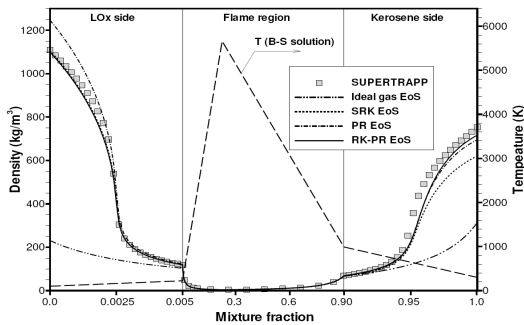


Fig. 2 Comparison of density for a Burke-Schumann flame sheet of oxygen (100K) and kerosene surrogate (300K) at 60 bar

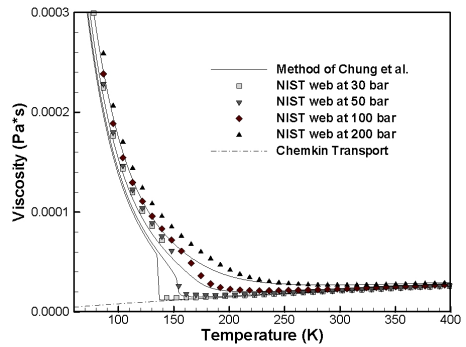
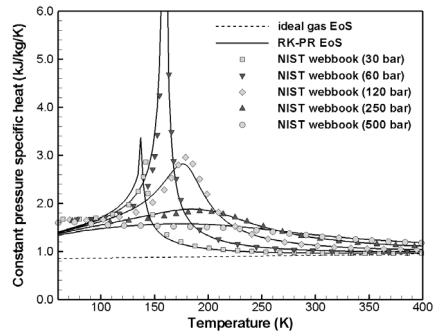


Fig. 3 Constant-pressure specific heat and viscosity of oxygen

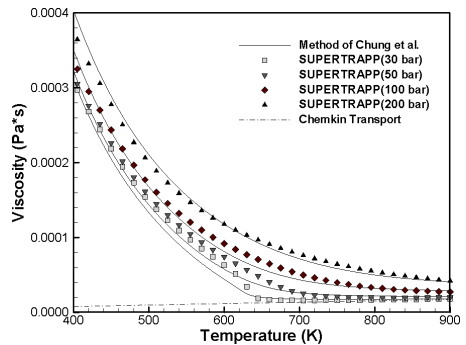
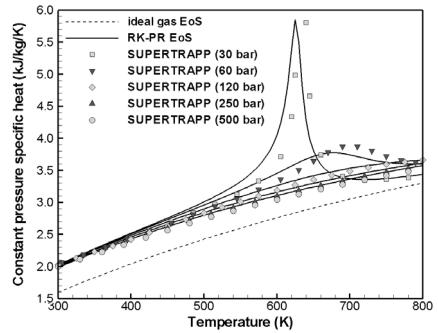


Fig. 4 Constant-pressure specific heat and viscosity of kerosene surrogate

### 3.2 액체산소와 케로신 surrogate의 층류화염편 해석

실제유체 해석 패키지를 이용하여 이상기체 기반으로 작성된 층류화염편 해석 코드를 확장하였으며, 액체산소와 케로신의 국소화염구조를 해석하였다. 케로신은 부피비로 74% n-decane, 11% n-propylcyclohexane, 15% n-propylbenzene 인 혼합물로 가정하였으며 208개 화학종간의 1673개 가역반응식[6]을 사용하였다. Fig. 5는 층류화염편 해석결과의 예를 보여주고 있으며, Fig. 6과 같이 다양한 범위의 스칼라 소산율과 압력에 대해 얻은 층류화염편 결과는 lookup table로 구축되어 난류화염 해석을 위한 연소모델로 사용될 수 있다[7,8]. 실제유체 기반의 층류화염편 모델은 탄화수소의 연료 과잉 영역에서 나타나는 비평형 화학반응의 영향과 액체 추진제의 천이입계 영역에서 중요해지는 실제유체 거동을 동시에 고려할 수 있는 장점이 있다.

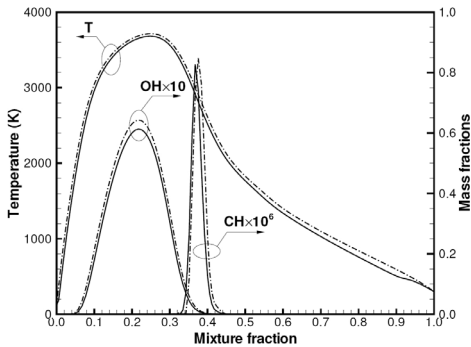


Fig. 5 Steady flamelet of oxygen and kerosene surrogate at 60 bar and  $\chi_{st}=100 \text{ s}^{-1}$

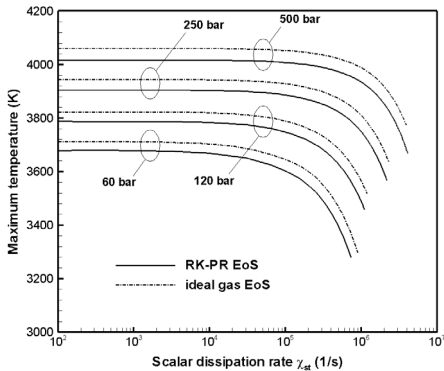


Fig. 6 Effects of scalar dissipation rate and pressure on steady flamelets

### 4. 결 론

본 연구에서 개발된 실제유체 해석 패키지는 액체산소와 고탄화수소의 케로신에 대해 공학적으로 정확한 예측결과를 보여주었다. 또한 Chemkin 패키지와 연동되어 기존에 이상기체를 기반으로 개발된 연소해석 코드들을 손쉽게 확장할 수 있으므로, 향후 액체 추진제의 고압 연소 연구에 유용하게 활용될 것으로 기대된다.

### 참 고 문 헌

- Oefelein, J. C. and Yang, V. (eds.), "Supercritical Fluid Transport and Combustion," Combustion Science and Technology, Vol. 178 (special issue), 2006
- Ribert, G. et al., "Counterflow diffusion flames of general fluids: oxygen/hydrogen mixtures," Combustion and Flame, Vol. 154, 2008, pp. 319-330.
- Cutrone, L. et al., "A RANS flamelet-progress-variable method for computing reacting flows of real-gas mixtures," Computers & Fluids, Vol. 39, 2010, pp. 485-498.
- Kim, S.-K., Choi, H.-S. and Kim, Y., "Thermodynamic modeling based on a generalized cubic equation of state for kerosene/LOx rocket combustion," submitted to Combustion and Flame
- Reid, R. C. et al., Properties of Gases and Liquids, 4th ed., McGraw-Hill, 1987
- Dagaut, P. and Cathonnet, M., "The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling," Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 32, 2006, pp. 48-92.
- 김성구, 최환석, 박태선, "액체로켓분사기 해석을 위한 실제유체 기반의 난류연소모델 개발," 제34회 한국추진공학회 춘계학술대회, 2010.
- 김성구, 최환석, "케로신/액체산소 동축 와류형 분사기에 대한 수치해석 모델 고찰," 제35회 한국추진공학회 추계학술대회, 2010.