

액체추진제 로켓엔진의 연소해석 프로그램

정태규*

Combustion Analysis Program of Liquid Propellant Rocket Engine

Taekyu Jung*

Abstract

This study introduce a newly developed program to calculate the combustion process of combustion chamber and gas generator of liquid rocket engine by use of Gibbs free energy minimization method based on chemical equilibrium. The simulation results of the new program and CEA code of NASA were compared and showed good agreement, thus proving the validity of the newly developed in-house program for combustion analysis.

초 록

본 연구에서는 액체로켓엔진의 가스발생기와 연소기의 연소현상을 화학평형의 관점으로 접근하여 주어진 압력과 혼합비 하에서 연소가스의 화학조성을 Gibbs 자유에너지 최소화 기법을 이용하여 계산할 수 있는 프로그램의 개발을 다루었다. 기존에 개발되어 연소해석에 광범위하게 사용되고 있는 NASA의 CEA code와의 해석결과 비교를 통하여 새로 개발된 연소해석 프로그램의 정확성을 검증하였다.

키워드 : Liquid Rocket Engine(액체로켓엔진), Combustion(연소), Chemical equilibrium(화학평형)

1. 서 론

액체로켓엔진의 설계를 위해서는 엔진시스템 해석을 통해 각 구성 요소의 최적 설계 규격을 결정해야 한다. 특히 가스발생기, 연소기 및 터빈의 설계를 위해서는 유량, 압력 그리고 추진제 혼합비에 따른 연소가스 온도, 비열비, 기체상수와 같은 열역학적 물성치를 예측할 수 있는 방법이 필요하다. 로켓엔진 연소기에서의 연소현상을 예측하기 위해 NASA에서 개발한 CEA[1]라는

화학평형 해석코드가 주로 사용되어 왔다. CEA에 사용된 Gibbs 자유에너지 최소화 기법은 1958년에 White, Johnson, Dantzig[3]에 의해 개발되었는데, 기존의 화학평형 계산에 사용되는 평형상수법은 추진제가 바뀔 경우, 지배방정식 자체가 바뀌기 때문에 범용 프로그램 개발이 매우 어려웠으나 Gibbs 자유에너지 최소화 기법은 동일한 지배방정식을 사용하기 때문에 범용 프로그램 개발이 용이하므로 1958년 이후에 개발되는 연소해석 프로그램은 대부분 이 방식을 사용하고 있다.[4]

접수일(2007년12월7일), 수정일(1차 : 2008년 10월 23일, 2차 : 2008년 10월 27일, 게재 확정일 : 2008년 11월 1일)

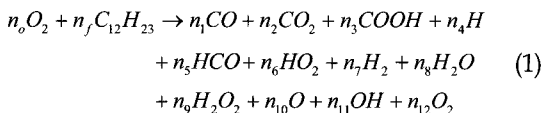
* 발사체미래기술연구실/tkjung@kari.re.kr

CEA는 로켓엔진 연소기뿐만 아니라 여러 연소현상을 해석할 수 있도록 개발된 범용 프로그램이다. 보통 로켓 엔진시스템 해석 code와 같은 in-house program에서 연소 해석을 위해 CEA code를 불러 사용하는데, 두 code간 프로그래밍 언어가 다르고 이로 인한 데이터의 인터페이스 등에 어려움이 있다. 이러한 불편함을 해결하기 위해 로켓엔진의 연소 현상만을 해석할 수 있는 전용 in-house code를 Gibbs 자유에너지 최소화 기법을 사용하여 개발하였으며 엔진시스템 해석 code와 같은 in-house program에 쉽게 적용이 가능하도록 하였다. 또한 Kerosene-Lox 연소 생성물의 99.9%에 해당하는 분자만을 고려하여 계산의 효율성을 증가시켰다. 또한 CEA 계산결과와 비교를 통해 새로운 연소해석 code의 정확성을 검증하였다.

2. 지배방정식 및 해석 방법

2.1 입력 데이터

본 연구에서는 추진제로 JetA-1과 Lox를 사용하는 경우를 고려하였다. JetA-1의 화학식은 CEA code에서 사용하는 화학식인 $C_{12}H_{23}$ 을 사용하였다.[2] 화학 반응식은 다음과 같다.



식(1)에서 좌변의 반응물과 우변의 생성물을 각각 1kg이라고 가정하고 생성물은 모두 12종이라고 가정한다.

[반응물의 엔탈피]

반응물 1kg의 엔탈피[J/kg]는 JetA-1과 Lox의 엔탈피의 합으로서 식(2)와 같다.

$$h^o = h_{o_2} + h_{C_{12}H_{23}} = -\frac{12,979 \times 10^3 \times O/F}{32(O/F+1)} - \frac{303,403 \times 10^3}{167(O/F+1)} \quad (2)$$

[반응물에서 기본원자 C,O,H의 개수]

반응물 1kg에 있는 기본원자 C,O,H의 개수 b_1^o, b_2^o, b_3^o 는 식(3)과 같다. 이때 N_A 는 아보가드로 수이고 O/F는 추진제 혼합비이다.

$$\begin{aligned} b_1^o &= 12 \times n_f \times N_A = \frac{12N_A}{167(O/F+1)} [k \cdot atom / kg] \\ b_2^o &= 2 \times n_o \times N_A = \frac{O/F \times N_A}{16(O/F+1)} \\ b_3^o &= 23 \times n_f \times N_A = \frac{23N_A}{167(O/F+1)} \end{aligned} \quad (3)$$

2.2 화학평형 계산

주어진 반응물에 대한 화학평형 계산을 위해 다음과 같이 가정하였다.

- 연소가스는 이상기체이다.
- 엔탈피는 온도만의 함수이다.
- 생성물은 모두 기체이다. 즉, 응축 현상은 고려하지 않는다.

[연소가스의 분자량]

연소가스는 12종의 분자로 구성된 혼합물이다. 이러한 혼합물의 분자량은 식(4)와 같이 평균값으로 정의한다.

$$M = \frac{\sum_{j=1}^{12} n_j M_j}{\sum_{j=1}^{12} n_j} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{12} n_j} [kg / k \cdot mole] \quad (4)$$

[Gibbs free energy minimization]

연소가스 1kg의 Gibbs energy, g 는 식(5)와 같다.

$$g = \sum_{j=1}^{12} \mu_j n_j [J/kg] \quad \text{where, } \mu_j = \left(\frac{\partial g}{\partial n_j} \right)_{T,P} \quad (5)$$

연소는 일종의 화학반응으로서 화학평형이 이뤄지는 조건은 Gibbs 자유에너지가 최소가 되는 경우이다. 단, 식(6)과 같이 반응물과 생성물간의 각 기본 원자의 개수도 같아야 한다.(질량보존의 법칙)

$$\sum_{j=1}^{12} a_{ij} n_j - b_i^o = 0 \quad (i=1,2,3) \quad (6)$$

이때 a_{ij} 는 stoichiometric coefficient로서 다음과 같다.

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \dots & a_{1,12} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \dots & a_{2,12} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \dots & a_{3,12} \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \times N_A$$

식(5),(6)의 두 식을 동시에 만족시키면서 최소값 또는 최대값을 가지는 경우를 계산하기 위해 Lagrange multiplier method를 사용한다. 식(6)을 구속조건으로 하여 Lagrange 식을 구성하면 다음과 같다.

$$G = \sum_{j=1}^{12} \mu_j n_j + \sum_{i=1}^3 \lambda_i (\sum_{j=1}^{12} a_{ij} n_j - b_i^o) \quad (8)$$

식(8)에서 생성물의 Gibbs free energy가 구속조건인 식(6)을 만족하면서 최소값을 가질 조건은 다음과 같다.

$$\delta G = \sum_{j=1}^{12} (\mu_j + \sum_{i=1}^3 \lambda_i a_{ij}) \delta n_j + \sum_{i=1}^3 (\sum_{j=1}^{12} a_{ij} n_j - b_i^o) \delta \lambda_i = 0 \quad (9)$$

상기 식으로부터 다음 두 개의 식을 얻는다.

$$\mu_j + \sum_{i=1}^3 \lambda_i a_{ij} = 0 \quad (j=1 \sim 12) \quad (10)$$

$$\sum_{j=1}^{12} a_{ij} n_j = b_i^o \quad (i=1 \sim 3) \quad (11)$$

식(10)에서 μ_j 는 식(12)와 같다.[5]

$$\mu_j = \mu_j^o + R_u T \ln \frac{n_j}{n} + R_u T \ln P \quad (12)$$

이때 μ_j^o 는 기준상태, 즉 압력 1bar, 생성물 온도 T에서의 값이다. 따라서 압력 P(bar)와 온도 T(Kelvin)가 주어진다면 식(10),(11)을 사용하여 열역학적 평형상태에서의 화학조성을 구할 수 있다. 본 연구에서 다루는 로켓엔진에서의 연소는 등압연소이므로 P는 알고 있는 값이다. 따라서 연소온도 T가 미지수이므로 식 한 개가 더 필요하다. 에너지 보전법칙으로부터 식(13)과 같은 에

너지 관계식을 구할 수 있다.

$$h^o = \sum_{j=1}^{12} n_j H_j^o = h \quad (13)$$

참고로 연소가스의 몰수 n과 연소가스 각 구성분자의 몰수 n_j 는 다음과 같은 관계를 가진다.

$$n = \sum_{j=1}^{12} n_j \quad (14)$$

2.3 화학평형 수치해석

식(10),(11),(13)은 모두가 선형 방정식은 아니므로 계산을 위해서는 수치 해석적 방법을 동원해야한다. 이를 위해 Newton-Raphson method를 적용하였다. 식(10),(11),(13),(14)를 무차원화하고 이를 다시 대수학을 이용하여 방정식 수를 세 개로 줄이면 식(15),(16),(17)이 된다.

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^{12} a_{ij} a_{ij} n_j \pi_i + \left[\sum_{j=1}^{12} a_{ij} n_j \right] \Delta \ln n + \left[\sum_{j=1}^{12} \frac{a_{ij} n_j H_j^o}{R_u T} \right] \Delta \ln T \quad (15)$$

$$= b_k^o - b_k + \sum_{j=1}^{12} \frac{a_{kj} n_j \mu_j}{R_u T} \quad \text{where, } k=1 \sim 3$$

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^{12} a_{ij} n_j \pi_i + \left[\sum_{j=1}^{12} n_j - n \right] \Delta \ln n + \left[\sum_{j=1}^{12} \frac{n_j H_j^o}{R_u T} \right] \Delta \ln T \quad (16)$$

$$= n - \sum_{j=1}^{12} n_j + \sum_{j=1}^{12} \frac{n_j \mu_j}{R_u T}$$

$$\sum_{i=1}^3 \left[\sum_{j=1}^{12} \frac{a_{ij} n_j H_j^o}{R_u T} \right] \pi_i + \left[\sum_{j=1}^{12} \frac{n_j \sigma_{p,j}}{R_u} + \sum_{j=1}^{12} \frac{n_j (H_j^o)^2}{(R_u T)^2} \right] \Delta \ln n \quad (17)$$

$$+ \left[\sum_{j=1}^{12} \frac{n_j H_j^o}{R_u T} \right] \Delta \ln T = \frac{h^o - h}{R_u T} + \sum_{j=1}^{12} \frac{n_j H_j^o \mu_j}{(R_u T)^2}$$

식(15)에서 μ_j 는 엔탈피와 엔트로피 관계식과 식(12)로부터 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\frac{\mu_j}{R_u T} = \frac{H_j^o}{R_u T} - \frac{S_j^o}{R_u} + \ln \frac{n_j}{n} + \ln P \quad (18)$$

또한 π_i 는 다음과 같다.

$$\pi_i = -\frac{\lambda_i}{R_u T} \quad (19)$$

식(15)~(17)로부터 $\pi_1, \pi_2, \pi_3, \Delta \ln n, \Delta \ln T$ 를 구할 수

있다. 한편 연소가스 각 분자의 열역학적 변수는 다음과 같이 온도의 함수로 표시한다.[1]

$$\frac{c_p^o}{R_u} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \quad (20)$$

$$\frac{H^o}{R_u T} = -a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} \ln T + a_3 + a_4 T / 2 + a_5 T^2 / 3 + a_6 T^3 / 4 + a_7 T^4 / 5 + a_8 T^{-1} \quad (21)$$

$$\frac{S^o}{R_u} = -a_1 T^{-2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln T + a_4 T + a_5 T^2 / 2 + a_6 T^3 / 3 + a_7 T^4 / 4 + a_8 \quad (22)$$

상기 식들에서 계수 a_i 는 온도범위에 따라 달라지는데 그 값들은 참고문헌[2]에서 알 수 있다.

[정적, 정압비열]

계산된 연소가스의 화학 조성을 이용하여 다음과 같이 연소가스의 정압비열(C_p)과 정적비열(C_v)을 계산할 수 있다.

$$C_p = C_{p, frozen} + C_{p, reaction} = \sum_{j=1}^{12} n_j \frac{dH_j^o}{dT} + \sum_{j=1}^{12} n_j \frac{H_j^o}{T} \left(\frac{\partial \ln n_j}{\partial \ln T} \right)_p \quad (23)$$

$$C_v = C_p + \frac{\frac{PV}{T} \left(\frac{\partial \ln V}{\partial \ln T} \right)_p^2}{\left(\frac{\partial \ln V}{\partial \ln P} \right)_T} \quad (24)$$

3. 해석결과 및 고찰

본 연구를 통해 개발된 화학평형 해석 code (KCEA)의 정확성을 검증하기 위해 CEA code와 해석결과를 비교하였다. 연소압력을 50bar로 하고 혼합비를 2.6에서 120까지 변화시키면서 계산한 결과를 비교하였다. 표 1은 일반적인 로켓엔진 연소기의 혼합비와 유사한 2.6에서의 연소가스 생성물을 비교한 것이다. 연소생성물의 몰수는 상대오차 1%이내의 정확도로 일치하고 있다. 단, CEA 계산결과와 유효숫자가 맞지 않는 4개의 분자는 오차계산을 하지 않았다.

혼합비 변화에 따른 연소가스의 열역학적 물성치인 비열비(k), 기체상수(R)와 연소가스 온도 (T , Kelvin) 비교는 그림 1,2,3과 같다.

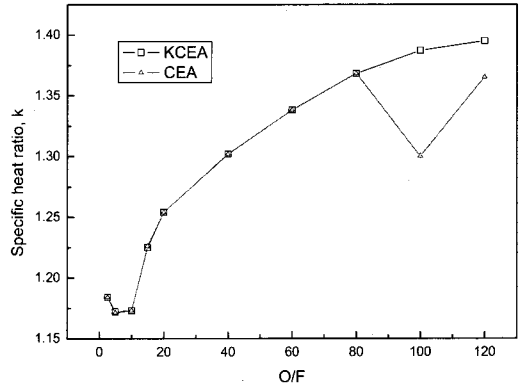


그림 1. 혼합비 변화에 따른 비열비 비교

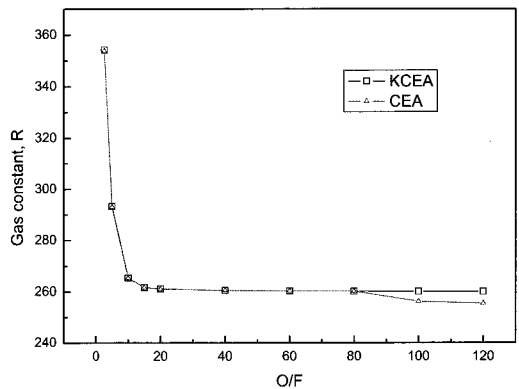


그림 2. 혼합비 변화에 따른 기체상수 비교

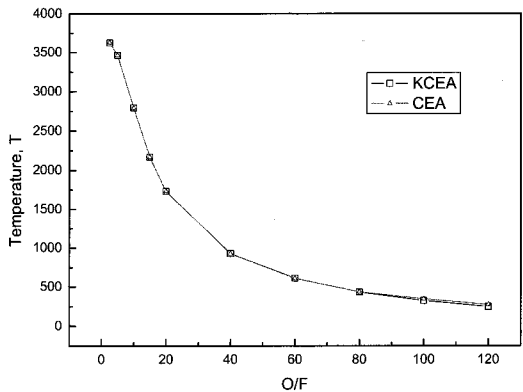


그림 3. 혼합비 변화에 따른 연소가스 온도 비교

표 1 연소가스 구성성분 해석결과 비교

	CO	CO ₂	COOH	H	HCO	HO ₂	H ₂	H ₂ O	H ₂ O ₂	O	OH	O ₂
KCEA	0.3183	0.1503	1.62e-5	0.0307	2.21e-5	9.28e-5	0.0803	0.3206	1.24e-5	0.0136	0.0651	0.0207
CEA	0.3175	0.1508	2e-5	0.0310	2e-5	9e-5	0.0798	0.3206	1e-5	0.0137	0.0655	0.0209
error(%)	-0.25	0.33	-	0.97	-	-	-0.63	0	-	0.73	0.61	0.96

혼합비가 80까지는 KCEA와 CEA의 해석결과가 거의 일치하는 것을 볼 수 있다. 그러나 혼합비가 100, 120에서는 오차가 점점 커지는 것을 볼 수 있는데, 이는 H₂O의 응축여부와 관계있다. CEA는 수증기의 응축도 계산하나 KCEA는 응축을 고려하지 않는다. 따라서 이로 인한 오차가 발생한다. 그러나 액체로켓엔진에서 혼합비가 이렇게 높은 영역까지는 사용되지 않으므로 H₂O의 응축은 고려하지 않아도 무방하다.

Applications, NASA RP-1311, Part II, 1994.

3. W.B. White, S.M. Johnson and G.B.Dantzig, J. Chem. Phys., Vol. 28, p.751, 1958.
4. K.K. Kuo, Principles of Combustion, John Wiley & Sons, 1986.
5. S.R. Turns, An Introduction to Combustion, McGraw-Hill, 1999.

4. 결 론

본 연구를 통해 로켓엔진의 연소기 또는 가스 발생기(산화제 과잉)의 연소압력이 주어졌을 때, 연소가스의 열역학적 물성치(온도, 기체상수, 비열비)와 화학조성을 계산하는 화학평형 코드 KCEA를 개발하였다. 압력 50bar에서 혼합비를 2.6~120까지 변화시켜 계산한 결과, NASA의 CEA code 계산결과와 거의 일치하는 값을 얻었다. 따라서 KCEA는 엔진시스템 해석 프로그램과 같은 in-house program에서 연소해석을 위한 sub-program으로서 활용이 가능하다.

참 고 문 헌

1. S. Gordon and B.J. McBride, Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications, NASA RP-1311, Part I, 1994.
2. S. Gordon and B.J. McBride, Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and