

초임계 압력에서 기체수소/액체산소의 연소과정 해석

김태훈* · 김성구** · 김용모†

Analysis of Gaseous Hydrogen/liquid Oxygen Combustion Processes at Supercritical State

Taehoon Kim, Seong-Ku Kim and Yongmo Kim

Key Words: Supercritical pressure(초임계 압력), Flamelet model(화염편모델), Real fluid effects(실체유체 효과), Liquid rocket injector(액체로켓 분사기)

Abstract

This study has been mainly motivated to numerically model the transcritical mixing and reacting flow processes encountered in the liquid propellant rocket engines. In the present approach, turbulence is represented by the extended $k-\epsilon$ turbulence model. To account for the real fluid effects, the propellant mixture properties are calculated by using SRK (Souve-Redlich-Kwong) equation of state model. In order to realistically represent the turbulence-chemistry interaction in the turbulent non-premixed flames, the flamelet approach based on the real fluid flamelet library has been adopted. Based on numerical results, the detailed discussions are made for the real fluid effects and the precise structure of the transcritical cryogenic liquid nitrogen jet and gaseous hydrogen/liquid oxygen coaxial jet flame.

1. 서 론

친환경적인 연소와 빠른 반응속도로 수소는 로켓의 추진제로 널리 활용되고 있다. 수소 로켓 엔진은 높은 연소실 압력을 가지게 되면 연소실 크기를 줄여 노즐비율을 증가시켜서 엔진성능을 향상시킬 수 있다⁽¹⁾. 이런 이유로 대부분의 수소 로켓 엔진은 수소와 산화제인 산소의 임계압력보다 높은 초임계 압력에서 작동한다. 이런 초임계 영역에서는 기존의 아임계의 영역과는 다른 유체의 특성을 보여주는데, 열역학적 물성치와 수송 물

성치들이 기체와 액체의 특성을 부분적으로 가지면서 변화하게 된다. 특히 압력은 임계압력 이상이고 온도는 임계온도 이하인 초월임계 영역에서는 유체의 표면장력이 거의 무시되고 용해도가 기체와 비슷해지면서 밀도와 열전도도는 액체와 비슷한 값을 가지는 특성을 보인다⁽²⁻¹⁰⁾. 따라서 이러한 초임계 영역에서의 연소는 액체의 미립화, 액적분열, 기화되는 일련의 아임계 분무 연소특성이 사라지고 난류 확산과 높은 밀도 구배, 이상기체로부터 벗어난 열역학적 및 수송 물성치들에 의하여 지배된다. 이러한 특성을 보이는 초임계 분무 연소는 이전의 실험적인 연구성과⁽²⁻⁸⁾를 바탕으로 다상이 아닌 밀도가 높은 기체의 단상으로 다루어질 수 있다고 거론되어 왔다.

따라서 본 연구에서는 초임계 상태의 극저온 추진제의 난류 분무 연소특성을 기존의 화염편 모델에 실제 유체의 특성을 고려한 모델과 이전의 이상기체 기반의 난류 연소 모델과의 비교를 통하여 살펴보았다.

(2010년 10월 04일 접수~2010년 12월 13일 심사완료, 2010년 12월 16일 게재확정)

*한양대학교 기계공학과

**한국항공우주연구원 연소기팀

†책임저자, 한양대학교 기계공학부

E-mail: ymkim@hanyang.ac.kr

TEL: (02)2220-0428 FAX: (02)2297-0339

2. 수치 및 물리 모델

본 연구에서는 로켓엔진 내 고압의 초임계 연소를 표현하기 위하여 기존의 화염편 모델을 통하여 검증된 난류 연소모델을 초임계 유체의 혼합과 연소반응을 Soave-Redlich-Kwon(SRK)^(11,12) 상태방정식을 적용하여 개선하였다. SRK의 상태 방정식의 경우 또 다른 상태 방정식인 Peng-Robinson(PR)에 비하여 탄소가 적게 포함된 연료, 또는 산화제에서 그 정확도가 검증된 상태 방정식이다. 이상기체방정식으로 표현되는 정압 비열을 비롯한 일부 열역학적 상태량들이 압력에는 상관없이 온도에 따른 변화만을 보여주는 반면에, SRK 방정식은 온도와 압력의 영향을 반영하면서 임계점 근처에서 나타나는 급격한 변화를 표현할 수 있다. 따라서 SRK 상태 방정식은 이상기체 방정식이 고려하지 못하는 극저온 유체의 열역학적 상태량들을 표현할 수 있다. 내부에너지, 엔탈피, 비열과 같은 열역학적 물성치들은 기본적으로 열역학적 이론을 바탕으로 계산되었고 초임계 상태의 열역학적 물성치들은 SRK 상태 방정식을 이용하여 이상기체 상태를 벗어난 정도를 고려하여 개선하였다.

수송 물성치의 정확한 예측은 화염장 해석의 필요조건으로 지금까지 사용되어왔던 액체와 기체를 구분하여 접근하는 방식으로는 초임계 상태 유체의 연속적인 물성치 변화를 고려하기에 적합하지 않다. 따라서 여기에서는 화학종 및 혼합물의 점성 계수, 열전도 계수와 물질 확산 계수와 같은 수송 물성치의 모델로 Chung, Ely, Hanley 그리고 Takahasi의 모델을 사용하여 초임계 상태인 유체의 수송 물성치를 다루었다⁽¹³⁻¹⁹⁾.

난류 확산 화염은 1차원의 구조를 가지는 층류 화염편들의 집합체로 볼 수 있다. 이때 난류 유동은 화염편들을 신장시키거나 주름지게 함으로서 화염편 내부에서 분자 단위의 물질 및 열 확산을 지배하고 비평형 화학 반응에 영향을 미치게 된다. 이 층류 화염편을 해석하는 방법으로는 대항류 확산화염 해석으로부터 구하거나⁽²⁰⁾, Peters에 의하여 제시된 화염편 방정식을 이용하여 해석할 수 있다⁽²¹⁾. 해석결과를 다시 혼합분율 공간으로 사상(mapping)해야 하는 대항류 확산화염과는 달리, 화염편 방정식을 이용하는 해석방법은 훨씬 직접적이고 다양한 형태로 유동해석코드와 결합할 수 있기 때문에 정상상태 연소유동뿐만 아니라 자연발화와 화염전파의 비정상 현상이 중요한 디젤분무연소와 같은 폭넓은 연구 분야에 적용되어 왔다⁽²²⁾. 이러한 이점을 바탕으로 본

연구에서는 화염편 방정식을 이용하여 국소화염구조를 해석하였고 이를 이용하여 혼합분율과 스키타소산율에 따라 미리 lookup table을 구축하여 난류 연소 유동장과 결합시켜 난류 확산 화염을 해석하였다.

모든 지배방정식의 해는 유한 체적법 기반으로 구하였고 원통 좌표계와 함께 non-staggered 격자를 사용하였다. 난류 모델로는 extended $k-\epsilon$ 을 이용하여 속도장을 예측하였다⁽²³⁾. 압력과 속도의 상호 결합은 PISO 알고리즘을 사용하였고⁽²⁴⁾ 2차 정확도를 가지도록 확산항과 대류항을 차분하였다. 유동 알고리즘의 자세한 설명은 다음의 참고문헌^(24,25)에 나와있다.

3. 결과 및 고찰

지금까지는 고압의 액체 로켓 연소 조건에서 해석모델의 검증에 필요한 데이터가 존재하는 구체적인 실험은 고온, 고압의 연소 조건으로 인하여 활발하게 이루어지고 있지 않다. 따라서 초임계 영역에서의 혼합과 연소의 물리 및 수치 모델을 검증하기 위하여 본 연구에서는 RCM-3로 불리는 단일 분사기 연소시험⁽²⁶⁾을 해석대상으로 선정하였다. RCM-3는 액체산소/기체수소 엔진에 일반적으로 적용되는 동축 전단 분사기를 대상으로 중앙에는 85K의 극저온 액체산소가 4.35 m/s로 분사되고 바깥 쪽 환형 유로를 통해서 287K의 기체 수소가 236 m/s로 분사된다. 이때 연소실의 압력은 60 bar로 유지되며 연료와 산화제의 질량 혼합비는 1.43 이다. 이때 화학반응식은 고압에서 그 메커니즘이 검증된 Dryer의 메커니즘을 사용하였고^(27,28) 연소실 및 인젝터의 자세한 구조 및 수치는 아래의 Fig. 1에 나타나있다.

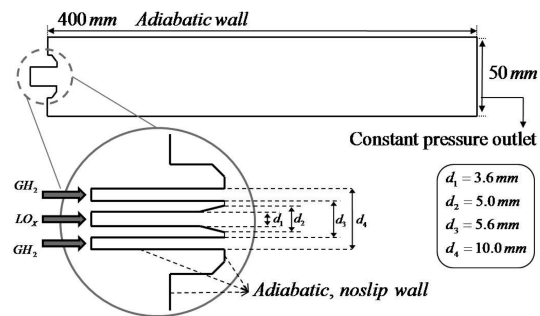


Fig. 1 Schematic geometry of injector and chamber for RCM-3 test case.

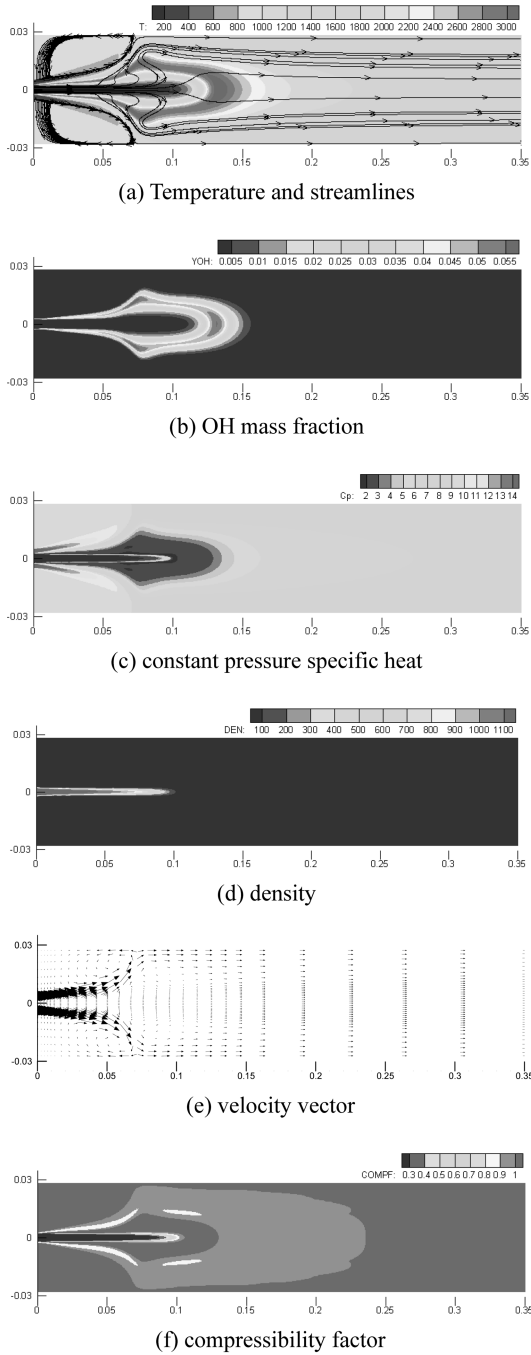


Fig. 2 RCM-3 Temperature, streamlines, OH mass fraction, constant pressure specific heat and compressibility factor with real fluid model

실제 유체의 영향을 포함한 해석결과는 Fig. 2에 온도 및 유선, OH 질량 분율, 정압 비열, 혼합물의 밀도, 속

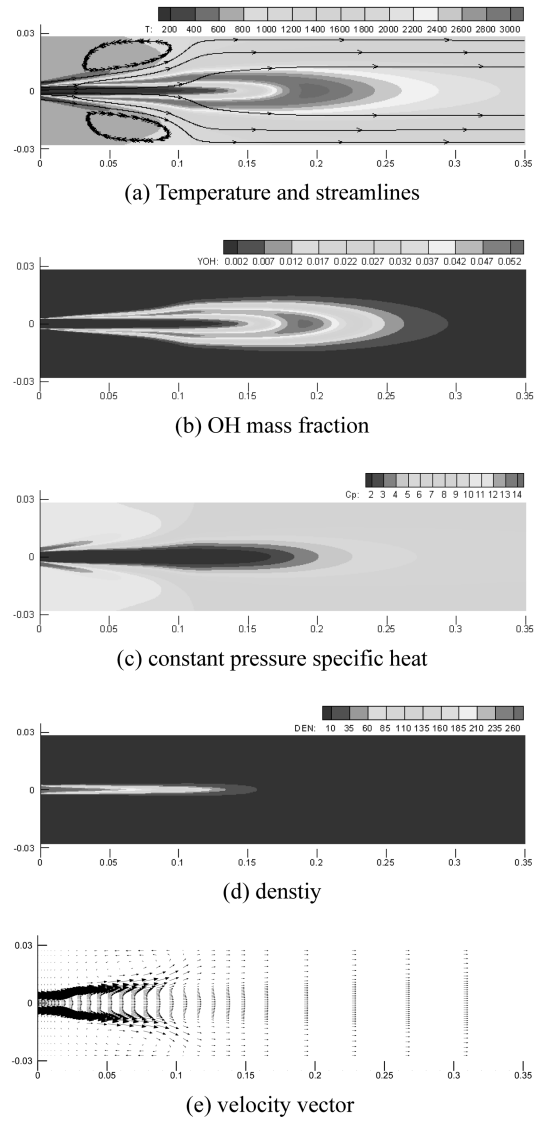


Fig. 3 RCM-3 Temperature, streamlines, OH mass fraction, constant pressure specific heat and compressibility factor with ideal gas model.

도 벡터 그리고 압축계수의 분포로 나타나있다. 이와 비교하여 Fig. 3는 압축계수를 제외한 온도 및 유선, OH 질량 분율, 정압 비열, 혼합물의 밀도, 속도 벡터가 기존의 이상기체모델을 이용한 결과로부터 나타나있다. 이상기체를 기반으로 한 화염면 모델과 비교했을 때 본 연구의 실제 유체 화염면 모델은 유동 패턴, 화염 길이, OH 라디칼의 퍼짐 그리고 정압 비열의 분포에서 상당히 다른 화염 구조를 보여주는 것을 알 수

있으며, 이는 실험적으로 나타난 OH 라디칼의 분포⁽²⁶⁾는 물론 이전의 해석결과들⁽²⁹⁾과도 정성적으로 유사하게 나타났다.

실제 유체 화염편 모델로 예측된 화염 패턴은 중심부의 극저온 액체 산소의 급격한 팽창을 보다 확실하게 확인할 수 있다. Fig. 2의 (c)에 나타났듯이 기체 상태로 분사되는 수소의 정압비열을 제외하면 정압 비열은 중심부의 극저온 액체 산소 주변을 둘러싸면서 아주 좁은 지역에서 큰 값을 가진다. 이 영역에서 주변의 수소나 화염으로부터 극저온 액체 산소로 전달되는 열 에너지는 높은 정압비열 때문에 액체 산소의 온도를 증가시키는데 사용되지 못하고 그 에너지가 체적비열을 급격하게 증가시키는데 사용된다. 이러한 영향은 노즐로부터 50.0 mm 떨어진 근방에서부터 100.0 mm 지점까지 보다 더 확연하게 나타난다.

Fig. 2의 (a)에서 나타난 유선과 (e)의 속도 벡터장을 화염이 반경방향으로 급격하게 퍼지는 영역($50.0 \text{ mm} < x < 100.0 \text{ mm}$, $10.0 \text{ mm} < r < 25.0 \text{ mm}$)에서 보다 자세히 살펴보면 중심부 극저온 액체 산소의 갑작스런 팽창으로 작은 선회유동이 나타나는 것을 확인할 수 있다. 이러한 작은 선회유동영역은 Fig 3의 (a)에서 볼 수 있는 연소실의 구조상에서 나타나는 제트화염의 선회유동과는 다르게 초임계 액체 추진제 연소 유동의 퍼짐 정도와 화염길이에 상당히 영향을 주는 중요한 특징이다. 반면에 이상기체 화염편 모델은 Fig. 3의 (a), (e)에서 나타났듯이 이러한 실제 유체 효과를 전혀 나타내지 못하고 있으며 일반적인 제트 화염 구조를 보여주면서 화염길이를 과대 예측하는 경향을 보인다.

다음으로 실제 유체 화염편 모델을 이용하여 얻은 Fig. 2의 (d)에서 나타난 혼합물의 밀도 분포를 보면 Fig. 3의 (d)에서 보이는 이상기체 모델의 밀도와 비교하여 그 크기가 4배 이상의 차이를 보이는데 이는 초기 노즐 부근에서의 밀도 차이로 인한 혼합특성과, 같은 질량 유량 조건이라면 전혀 다른 속도 분포를 가지게 되는 원인이 된다.

마지막으로 Fig. 2의 (f)에서 보여지는 압축계수를 보면 알 수 있듯이 화염이 존재하는 영역에서는 이상기체로 가정하여도 무방한 압축계수가 분포하는 반면에 노즐 중심부 근처에서의 극저온 액체 산소 근방에서는 압축계수가 '1'에서 상당히 벗어나있는 것을 확인할 수 있다. 따라서 화염이 존재하는 구간에서는 이상기체로 가정하여 접근하는 것이 공학적인 관점에서는 크게 무리가 없지만 노즐 근방에서의 정확한 혼합특성과 속도 분

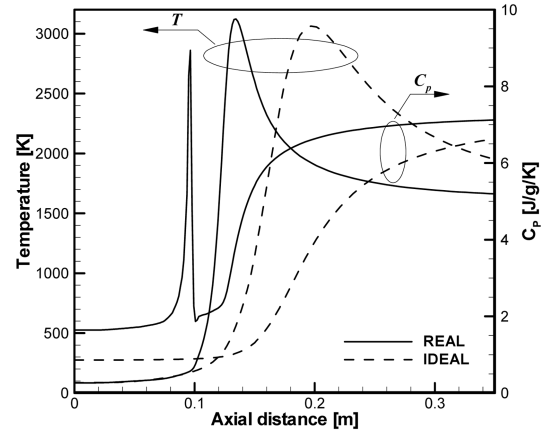


Fig. 4 Axial profile of constant pressure specific heat and temperature

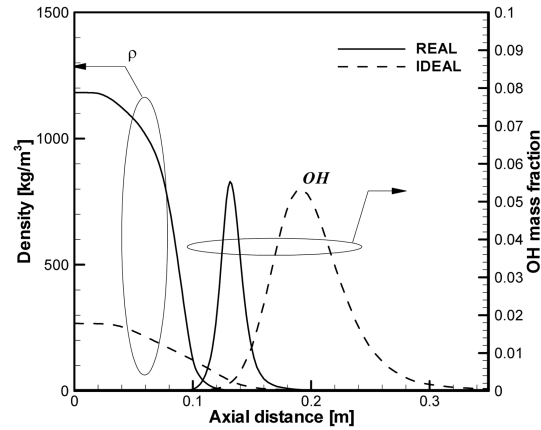


Fig. 5 Axial profile of density and OH mass fraction.

포가 중요한 난류 확산 화염에서는 비교적 온도가 낮은 상류쪽의 실제 유체 효과가 반드시 고려되어야 하는 것을 알 수 있다

다음으로 Fig. 4와 5에서는 각각 온도와 정압 비열, 혼합물의 밀도와 OH 라디칼의 질량 분율을 축 방향에 따라 $y=0$ 인 지점에서의 값을 나타내었다. 먼저 Fig. 4에서 각각 실제 유체 모델과 이상 기체 모델을 이용한 RCM-3의 해석 결과로 온도와 정압 비열을 보면 실제 유체 모델로 계산한 정압비열은 100 mm 근방에서 급격한 증가를 보이는데 이는 임계압력 근방에서 낮은 온도로 분사되던 액체 산소가 287K의 기체 수소와 혼합되면서 온도가 상승하면서 나타나는 임계압력 근방에서의 실제 유체의 특징적인 거동으로 이상 기체의 결과는 이러한 특성을 전혀 나타내지 못하고 있다. 이에 따라 혼합 특성이 전혀 다르게 예측되므로 온도가 상승하는 기

울기와 위치가 다르게 나타나는데 이는 Fig. 5의 OH 라디칼의 분포를 보면 보다 확실하게 확인할 수 있다.

마찬가지로 Fig. 5에서 나타나듯이 실제 유체 모델과 이상기체 모델은 혼합물의 밀도가 노즐 출구에서부터 4 배 이상의 차이를 보이면서 분사되는 것을 알 수 있다. 이는 앞에서 언급했듯이 같은 질량유동을 가진다면 전혀 다른 노즐 출구 속도를 예측하게 되므로 속도 분포와 혼합특성이 중요한 난류 확산 화염에서는 정확한 실제 유체 모델이 반드시 고려되어야 한다는 것을 뒷받침 해준다.

결 론

본 연구에서는 실제 유체 효과가 고려된 화염편 모델을 이용하여 초임계 영역에서의 기체 수소/액체 산소 동축 전단 단일 분사기의 난류 확산 화염을 해석하였다. 수치해석 결과를 통하여 아래와 같은 결론에 도달할 수 있다.

1) 본 연구에서의 실제 유체 기반 화염편 모델은 유동 패턴, 화염길이, 반경방향으로의 퍼짐 정도, OH 라디칼과 정압 비열의 분포를 봤을 때 이상기체 모델이 예측하지 못하는 실제 유체의 거동 특성을 잘 나타낸다.

2) 실제 유체 기반 화염편 모델로 예측한 온도와 OH 라디칼 분포를 보면 노즐로부터 멀어지면서 극저온 액체 산소 제트의 급격한 팽창을 확인할 수 있다.

3) 화염의 반경 방향으로의 급격한 팽창이 있는 지역을 보면 약한 선회 유동이 극저온 액체 산소의 급격한 팽창으로부터 유도되는 것을 확인할 수 있다. 이러한 선회 유동은 초임계 액체 추진제 연소 유동에서 반경 방향으로의 퍼짐 정도와 화염 길이에 상당한 영향을 준다.

4) 혼합물의 밀도 분포로부터 이상기체 모델의 밀도와 비교하여 그 크기가 최대 4배 이상의 차이를 보여주고 있고 이는 초기 노즐 부근에서의 밀도 차이로 인한 혼합특성과 같은 질량 유량 조건이라면 전혀 다른 속도 분포를 가지게 되는 원인이 된다.

5) 화염이 존재하는 구간과는 다르게 노즐 출구 및 근방에서는 압축 개수가 이상기체의 값에서 멀어지기 때문에 속도 분포와 혼합특성이 중요한 난류 확산 화염에서는 정확한 실제 유체 모델이 반드시 고려되어야 한다.

후 기

본 연구는 한국연구재단을 통해 교육과학기술부의 우주기초원천기술개발 사업(NSL, National Space Lab)으로부터 지원받아 수행되었습니다(No.20090091793).

참고문헌

- (1) G. P. Sutton, "History of liquid propellant rocket engines", American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- (2) J. Telaar, G. Schneider, J. Hussong and W. Mayer, "Cryogenic jet injection: Description of test case RCM 1", in: Proceedings 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling, Lampoldshausen, Germany, March, 2001, pp. 25~27.
- (3) M. Oschwald and M. M. Micci, "Spreading angle and centerline variation of density of supercritical nitrogen jets", Atomization and Sprays, 2002, pp. 1191~106.
- (4) W. Mayer, J. Telaar, R. Branam, G. Schneider and J. Hussong, "Raman measurement of cryogenic injection at supercritical pressure", Heat and Mass Transfer, Vol. 39, 2003, pp. 709~719.
- (5) R. Branam and W. Mayer, "Characterisation of Cryogenic Injection at Supercritical pressure", Journal of Propulsion and Power, Vol. 19, No. 3, 2003, pp. 342~355.
- (6) M. Oschwald, J. J. Smith, R. Branam, J. Hussong, A. Shick, B. Chehroudi and D. Talley, "Injection of Fluids into Supercritical Environments", Combustion Science and Technology, Vol. 178, 2006, pp. 49~100.
- (7) S. Candel, M. Juniper, G. Singla, P. Scoufflaire and C. Rolon, "Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure", Combustion Science and Technology, Vol. 178, 2006, pp. 161~192.
- (8) M. Juniper, "Structure et stabilisation des flammes cryotechniques", Ph.D. thesis, Ecole Centrale de Paris, 2001.
- (9) M. Habiballah, M. Orain, F. Grisch, L. Vingert and P. Gicquel, "Experimental studies of high-pressure cryogenic flames on the Mascotte facility", Combustion Science and Technology, Vol. 178, 2006, pp. 101~128.
- (10) L. Vingert, A. Nicole and M. Habiballah, "The Mascotte single injector 60 bar hot test for code validation - test-case specifications and some more experimental data" in: Proceedings of the 3rd International Work-

- shop Rocket Combustion Modeling, Snecma, March, 2006.
- (11) G. Soave, *Chemical Engineering Science* 37, 1972, pp. 1197~1203.
- (12) M. S. Graboski and T. E. Daubert, *Ind. Engineering Chemical Process* 17, 1978, pp. 443~450.
- (13) A. Congiunti, C. Bruno and E. Giacomazzi, "Supercritical combustion properties", *American Institute of Aeronautics and Astronautics AIAA-0478*, 2003.
- (14) L. Pons, N. Darabiha, S. Candel, G. Ribert and V. Yang, "Mass transfer and combustion in transcritical non-premixed counterflows", *Combustion Theory and Modeling*, Vol. 13, 2009, pp. 57~81.
- (15) T. Chung, M. Ajlan, L. Lee and K. Starling, "Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties", *Ind. Engineering Chemistry Res.*, Vol. 27, 1988, pp. 671~679.
- (16) J. Ely and H. Hanley, "Prediction of transport properties 1, Viscosity of fluids and mixtures", *Ind. Engineering Chemistry*, Vol. 20, 1981, pp. 323~332.
- (17) J. Ely and H. Hanley, "Prediction of transport properties 2, Thermal conductivity of pure fluids and mixtures", *Ind. Engineering Chemistry*, Vol. 22, 1983, pp. 90~97.
- (18) E. N. Fuller, P. D. Schettler and J. C. Giddings, *J. Physical Chemistry* Vol. 58, No.5, 1966, pp. 18.
- (19) S. Takahashi, "Preparation of a generalized chart for the diffusion coefficient of gases at high pressures", *J. Chemical Engineering (Japan)*, Vol. 7, 1974, pp. 417~420.
- (20) A. Lutz, R. J. Kee, J. F. Grcar and F. M. Rupley, "OPP-DIF: A Fortran Program for Computing Opposed-Flow Diffusion Flames", *Sandia Report. SAND96-8243*. Livermore.
- (21) H. Pitsch and N. Peters, "A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects", *Combustion and Flame*, Vol. 114, 1998, pp. 26~40.
- (22) J. C. Ferreira, "Flamelet Modeling of Stabilization in Turbulent Non-premixed Combustion", PhD Thesis, ETHZ Zuerich Switzerland.
- (23) Y. S. Chen and S. W. Kim, "Computation of turbulent flows using an extended k-epsilon turbulence closure model", *National Aeronautics and Space Administration, National Technical Information Service*, 1987.
- (24) G. H. Kim, S. M. Kang, Y. M. Kim, R. W. Bilger and M. J. Cleary, "Conditional moment closure and transient flamelet modeling for detailed structure and NOx formation characteristics of turbulent nonpremixed jet and recirculating flames", *Combustion Theory and Modeling*, Vol. 11, 2007, pp. 527~552.
- (25) S. M. Kang, "Parallel unstructured-grid finite-volume method for chemically reacting flows at all speeds", Ph.D. thesis, 2002, Hanyang University.
- (26) *Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling*, DLR, Lampoldshausen, Germany, 2001
- (27) J. Li, Z. Zhao, A. Kazakov and F. L. Dryer, "An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion", *International J. Chemical Kinetics*, Vol. 36, 2004, pp. 566~575.
- (28) M. A. Muller, T. J. Kim, R. A. Yetter and F. L. Dryer, *International J. Chemical Kinetics*, Vol. 31, 1998, pp. 113~125.
- (29) G. C. Cheng and R. Farmer, "Real Fluid Modeling of Multiphase Flows in Liquid Rocket Engine Combustors", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 22, No. 6, 2006, pp. 1373~1381