

## 과산화수소 촉매분해 모델링을 이용한 추력기 촉매대 최적설계

정상우\* · 최석민\* · 권세진\*†

### Optimization of Thruster Catalyst Beds using Catalytic Decomposition Modeling of Hydrogen Peroxide

Sangwoo Jung\* · Sukmin Choi\* · Sejin Kwon\*†

#### ABSTRACT

High test hydrogen peroxide has been widely developed as green propellant for thrusters. Hydrogen peroxide is decomposed in the catalyst bed to produce the thrust. Catalyst bed design optimization is considered through existing model for catalyst beds. To verify the model, static firing tests were conducted under various conditions using a 100 N scale  $H_2O_2$  monopropellant thruster. Temperature and pressure estimations from the model were well correlated to the experimental data. The model is used to obtain optimal design parameters by analyzing the catalyst capacity and pressure drop data for various simulated conditions. Catalyst beds can be optimized from the analysis of the catalyst capacity and pressure drop correlation through catalyst bed modeling.

#### 초 록

최근 고농도 과산화수소는 추력기의 친환경 추진제로 연구가 활발히 진행되고 있다. 과산화수소는 추력기의 촉매대에서 촉매분해되어 추력을 발생시킨다. 촉매대의 최적화 된 설계를 위하여 기존에 존재하는 촉매대 모델을 활용하였다. 모델의 검증은 위하여 100 N 과산화수소 단일추진제 추력기를 사용하여, 다양한 설계 조건들에 대해 실험을 진행하였다. 모델의 예측결과를 실험결과와 대조하여 다양한 조건들에서도 비교적 높은 정확도를 보임을 확인하였다. 검증된 모델을 이용하여 다양한 설계조건들에 대해 최적화된 Catalyst Capacity값과 압력강하량을 계산하였으며, 이를 분석하여 압력강하량과 유량 및 세장비 사이의 관계식을 도출 할 수 있었다. 최적화된 Catalyst Capacity값과 압력강하량 관계식을 이용하여 최적화된 촉매대를 설계할 수 있다.

Key Words: Modeling(모델링), Hydrogen Peroxide(과산화수소), Monopropellant Thruster(단일추진제 추력기), Catalyst Beds(촉매대), Catalytic Decomposition(촉매분해), Optimization(최적설계)

\* 한국과학기술원 항공우주공학과

† 교신저자, E-mail: trumpet@kaist.ac.kr

우주 비행체의 기동을 위해 쓰이는 추력기는 주로 하이dra진 및 사산화질소와 같은 독성 물질을 추진제로 사용하고 있다. 높은 성능을 가지지만 독성으로 인한 환경오염 및 운영비용 증가 등의 문제로 이를 대체하기 위한 연구가 최근 활발히 이루어지고 있다. 특히 고농도 과산화수소는 유독성을 보이지 않으며, 분해생성물이 산소와 수증기라 친환경적이고, 기술의 발전으로 인해 생산성과 저장성이 우수해지는 등 많은 장점을 가지고 있어 독성 추진제의 대체제로 주목받고 있다[1-2].

고농도 과산화수소는 추력기의 촉매대에서 촉매분해 되어 고온의 산소와 수증기를 발생시키며 이를 이용하여 추력을 발생시키게 된다. 따라서 주입된 추진제를 전부 분해시킬 수 있으며, 마찰로 인한 유동의 압력손실이 과도하게 발생하지 않는 촉매대를 설계하는 것이 중요하다. 현재까지는 Catalyst Capacity와 같은 실험적으로 구할 수 있는 설계인자를 이용하여 설계를 진행해 왔다. Catalyst Capacity는 단위 촉매대 부피당 분해할 수 있는 추진제 유량을 나타낸다. 그러나 Catalyst Capacity는 완전분해를 목표로 하여 촉매대의 크기가 과도하게 설계되는 경향이 존재하였으며, 이로 인해 촉매대에서의 압력강하량 또한 필요 이상으로 발생하였다. 따라서 이를 방지하기 위하여 촉매대의 최적화가 고려된 설계 방법이 필요하다.

촉매대의 설계 과정에서 모델링을 활용한다면 분해율과 압력강하 등의 성능 예측이 가능하며, 실제 실험과는 달리 쉽게 다양한 조건에서의 결과를 얻을 수 있어 시간과 비용을 줄일 수 있다. 따라서 모델링을 이용한다면 촉매대의 최적설계에 유용하게 쓰일 수 있을 것이다.

본 연구에서는 Pasini 등의 촉매대 모델을 다양한 조건에서 수행한 실제 추력기의 실험 결과와 비교하여 검증할 것이다. 이후 검증된 모델을 이용하여 여러 가지 촉매대 조건에서의 최적 catalyst capacity와 압력강하량을 계산할 것이며, 이를 촉매대의 최적화된 설계에 유용하게 사용하고자 한다.

## 2. 촉매대 모델

### 2.1 내부 유동 모델

Pasini 등의 촉매대 모델은 균질 이상유동 모델을 사용하였으며, 촉매대 내부를 Fig. 1과 같이 1차원 다공성의 매질로 가정하였고, 내부 유동은 정상상태이며 단열된 스톱스 유동으로 가정하였다[3].

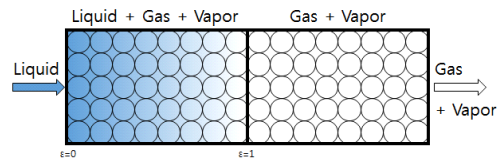


Fig. 1 Schematic of homogeneous two-phase flow model in catalyst bed( $\epsilon=0$  : pure liquid,  $\epsilon=1$  : pure gas and vapor)

이때 화학종 보존 방정식을 정리하면 molar flux 변화량을 Eq. 1과 같이 나타낼 수 있으며, 이를 사용하여 각 화학종의 위치에 따른 molar flux를 Eq. 2-4와 같이 나타낼 수 있다[3].

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{\dot{V}_l + \dot{V}_g}{u} r \quad (1)$$

$$\dot{n}_{H_2O_2} = \dot{n}_{H_2O_2}^{(i)} - \lambda \quad (2)$$

$$\dot{n}_{H_2O} = \dot{n}_{H_2O}^{(i)} + \lambda \quad (3)$$

$$\dot{n}_{O_2} = \frac{1}{2}\lambda \quad (4)$$

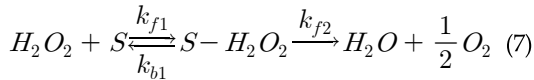
위치에 따른 온도와 증발률을 결정하기 위해 Eq. 5와 같이 동적평형을, Eq. 6과 같이 엔탈피 보존을 고려하였다[3].

$$\left[1 - \frac{\dot{n}_{O_2}}{\dot{n}_{O_2} + \epsilon(\dot{n}_{H_2O_2} + \dot{n}_{H_2O})}\right]p = \frac{\dot{n}_{H_2O_2} p_{s_{H_2O_2}}(T) + \dot{n}_{H_2O} p_{s_{H_2O}}(T)}{\dot{n}_{H_2O_2} + \dot{n}_{H_2O}} \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
& [\dot{n}_{H_2O_2} \bar{h}_{H_2O_2} + \dot{n}_{H_2O} \bar{h}_{H_2O}]_{(l), initial} \quad (6) \\
& = \dot{n}_{O_2} h_{O_2}(T) \\
& \quad + \epsilon [\dot{n}_{H_2O_2} \bar{h}_{H_2O_2}(T) + \dot{n}_{H_2O} \bar{h}_{H_2O}(T)]_{(g)} \\
& \quad + (1 - \epsilon) [\dot{n}_{H_2O_2} \bar{h}_{H_2O_2}(T) + \dot{n}_{H_2O} \bar{h}_{H_2O}(T)]_{(l)}
\end{aligned}$$

## 2.2 과산화수소 촉매반응 모델 및 압력강하 모델

촉매 표면에서의 과산화수소 흡착/탈착 모델은 Langmuir adsorption model을 사용하였으며, 흡착된 과산화수소의 분해를 1차 반응으로 가정하였다. 이때 반응식은 Eq. 7과 같이 나타낼 수 있으며, 분해속도식은 Eq. 8과 같이 나타낼 수 있다[3-4].



$$\dot{r} = A_{f2} e^{\frac{-E_{f2}}{RT}} N_s \frac{K_1 C_{H_2O_2}^{(s)}}{1 + K_1 C_{H_2O_2}^{(s)}} \quad (8)$$

촉매대 내부의 압력강하량을 계산하기 위해 다공성 매질에서 마찰에 의한 유동의 압력손실을 나타내는 경험식인 Ergun Equation을 사용하였다[5].

$$\frac{dp_{loss}}{dx} = (1.75 + 150 \frac{1 - \tilde{\epsilon}}{Re_p}) \frac{1 - \tilde{\epsilon}}{\tilde{\epsilon}^3} \frac{\rho u^2}{D_p} \quad (9)$$

## 3. 실험을 통한 모델 검증

### 3.1 추력기 실험 조건 및 모델 해석 조건

모델의 검증을 위해 100 N 과산화수소 단일추진제 추력기를 사용하여 실제 실험을 수행하였다. 모델과의 비교를 위하여 Fig. 2와 같이 인젝터 직후, 촉매대 중간, 촉매대 끝, 챔버에서 온도와 압력을 측정하였다.

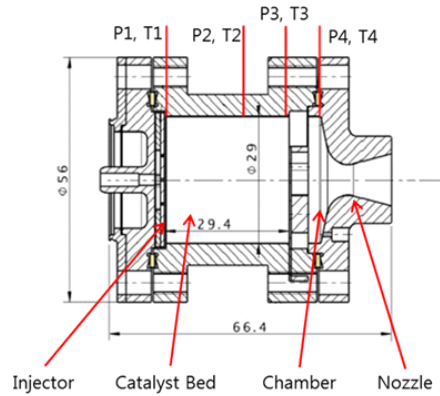


Fig. 2 Schematic of 100 N H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> thruster[6]

실험은 Table 1에 나타난 설계조건을 기준조건으로 설정하고, 유량 및 추진제 농도, 촉매 크기, 촉매대 크기를 달리 하여 실험을 진행하였다 (기준유량의 50% 및 140% 유량조건, 80 wt% 및 95 wt% 농도조건, 8-10 mesh 및 16-18 mesh 촉매 크기조건, 4.58 cm \* 3.3 cm 촉매대 크기조건).

모델의 해석 조건 또한 실험 조건과 동일하게 설정하였으며, 반응속도의 계산을 위한 반응상수는 기준 조건에서의 실험 결과와 모델 해석 결과가 일치하게 되는 값을 사용하였다.

Table 1. Standard experiment condition for 100 N H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> thruster

Parameter	Value
추진제	90 wt% H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
촉매	MnO <sub>2</sub> /PbO/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
촉매 크기	10-16 mesh
촉매대 직경	2.9 cm
촉매대 길이	2.94 cm
유량	68 g/s

### 3.2 실험 결과 및 모델 해석 결과

기준 조건에서의 실험 결과와 모델 해석 결과를 입구에서 출구까지의 축 방향 분포에 따라 Fig. 3에 나타내었으며, 위는 온도, 아래는 압력 분포를 나타낸다. 모델의 반응속도 상수를 기준

조건 실험결과를 토대로 설정하였기 때문에, 모델이 예측한 온도의 축방향 분포의 경우 실험결과와 매우 비슷함을 확인할 수 있다. 압력분포의 경우 모델이 촉매대 중간에서는 더 낮게, 끝에서는 더 높게 예측하였다. 온도분포와 비교하면 오차가 크지만, 그럼에도 실험과 모델의 결과가 비슷함을 확인할 수 있다.

다른 실험 조건인 16-18 mesh 촉매를 사용한 경우의 결과를 Fig. 4에 나타내었다. 기준 조건의 결과와 마찬가지로 동일한 분포양상을 보이며, 실험과 모델의 온도분포 및 압력분포 결과가 비슷함을 확인할 수 있다.

기준 조건 및 16-18 mesh 촉매 조건을 비롯하여 다른 조건들에서도 동일하게 모델이 온도와 압력 분포를 비교적 정확하게 예측함을 확인할 수 있었다. 따라서 검증된 모델을 이용하여 촉매대의 최적설계에 이용할 수 있을 것이다.

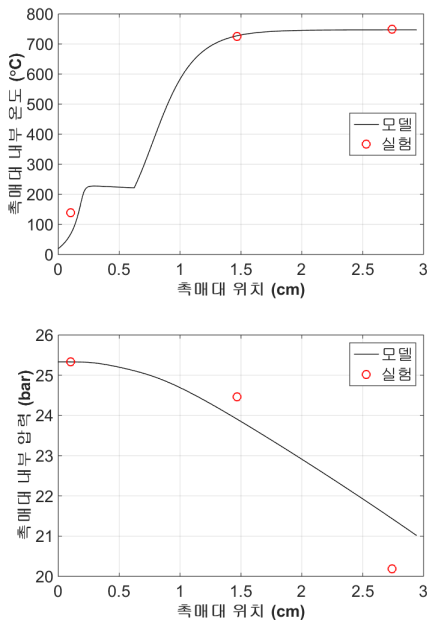


Fig. 3 Axial profile of temperature(up) and pressure(down) comparison with experiment result at standard condition

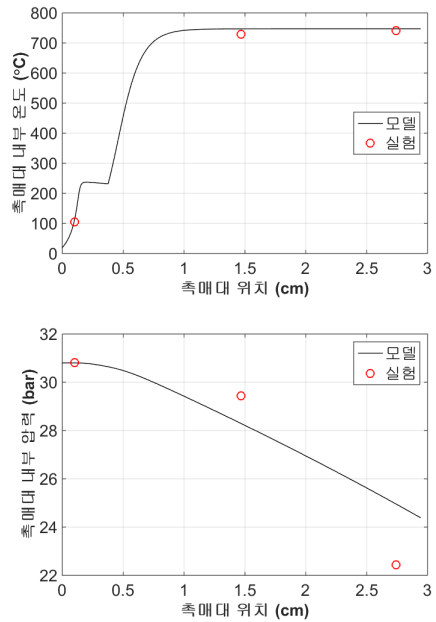


Fig. 4 Axial profile of temperature(up) and pressure(down) comparison with experiment result at 16-18 mesh condition

#### 4. 모델링을 이용한 촉매대의 최적설계

##### 4.1 최적화된 Catalyst Capacity 및 압력강하량 계산

실험을 통해 검증된 모델을 이용하여 추력기 촉매대의 최적화된 설계인자를 제시할 것이다. 최적화된 설계인자를 찾기 위해 추진제의 유량, 주입압력, 촉매의 크기를 고정하고 촉매대의 크기를 변화시켜가며 추진제가 완전 분해되는 시점을 찾아, 그때의 Catalyst Capacity 값과 촉매대에서 발생하는 압력강하량을 모델을 사용하여 계산할 것이다. 이를 분석하여 촉매의 크기와 추진제의 촉매대 주입 압력에 따른 최적화된 Catalyst Capacity 값과 촉매대에서의 압력강하량을 제시할 것이다.

모델 계산을 위해 과산화수소의 농도는 90 wt.%, 촉매의 크기는 10-16 mesh, 촉매대 주입압력은 30 bar로 설정하였다. 이 때 유량과 촉매대의 세장비(촉매대 길이/촉매대 지름)에 따라

촉매대 끝에서 추진제의 완전분해시점에 도달하는 촉매대 크기를 구하여 Catalyst Capacity값과 압력강하량을 계산하였다. 유량은 기준조건인 67 g/s, 기준조건과 유량조건\_L의 중간값인 50.25 g/s, 유량조건\_L의 34 g/s 세 경우에 대해 계산하였고, 세장비는 1, 0.75, 0.5 세 경우에 대해 계산하였다. 완전분해의 기준은 촉매대 끝에서 과산화수소의 분해율이 99.99% 가 되는 때이다.

위 조건에서의 모델 계산결과를 Table 2와 Table 3에 나타내었다. Table 2는 최적화된 Catalyst Capacity값을, Table 3은 압력강하량을 나타낸다. 세장비와 유량이 증가할수록 Catalyst Capacity의 경우 감소하였으며, 압력강하량의 경우 감소하였다. Catalyst Capacity값은 유량과 세장비에 따라 큰 차이를 보이지 않고 거의 비슷하였으며, 어떠한 규칙을 갖는 것을 볼 수 없었다. 그러나 압력강하량의 경우 유량에 비례하며 또한 세장비의 제곱에 비례함을 확인할 수 있었다.

따라서 압력강하량의 경우 촉매의 크기 및 촉매대의 주입압력 조건마다 Eq. 9와 같이 상수 형태로 나타낼 수 있으며, 이를 이용하여 유량 및 촉매대의 세장비에 따라 간편하게 압력강하량을 예측할 수 있다.

$$\frac{\Delta p}{\dot{m}} \left( \frac{L}{D} \right)^{-2} = const. \quad (9)$$

다른 촉매크기와 주입압력인 16 - 18 mesh와 20 bar에서 또한 동일한 결과를 얻을 수 있었다. 따라서 촉매의 크기 및 추진제 주입압력에 따라 최적화된 catalyst capacity 값을 사용하여 촉매대의 부피를 결정할 수 있으며, 세장비에 따라 대략적인 압력강하량의 예측이 가능하므로 원하는 촉매대의 압력강하에 맞추어 촉매대의 세장비를 결정할 수 있을 것이다.

Table 2. Model calculation result - Optimized Catalyst Capacity at 30 bar, 10-16 mesh condition

유량 (g/s)	Catalyst Capacity (g/s · cm <sup>3</sup> )		
	세장비 (L/D)		
	1	0.75	0.5
67 (100%)	4.69	4.81	4.88
50.25 (75%)	4.75	4.85	4.88
34 (50%)	4.81	4.87	4.93

Table 3. Model calculation result - Pressure drop across the catalyst bed at 30 bar, 10-16 mesh condition

유량 (g/s)	압력강하량 (bar)		
	세장비 (L/D)		
	1	0.75	0.5
67 (100%)	4.3	2.43	1.09
50.25 (75%)	3.13	1.78	0.8
34 (50%)	2.03	1.16	0.53

#### 4.2 촉매대의 최적설계 과정

촉매의 크기와 추진제의 촉매대 주입 압력에 따른 최적화된 Catalyst Capacity 값을 구할 수 있었으며, 이 때 Eq. 9와 같이 압력강하량이 상수로 표현될 수 있음을 보였다. 이를 이용한 촉매대의 최적설계 과정을 Fig. 5에 나타내었다

사용하는 촉매의 종류 및 크기, 추진제의 유량, 추진제의 촉매대 주입압력이 주어지면 그에

따른 최적화된 Catalyst Capacity값을 사용하여 촉매대의 부피를 결정할 수 있다. 이때 추진제의 촉매대 주입압력은 설계 챔버압 + 원하는 압력강하량 임을 이용하여 결정할 수 있다. 이후 설계 조건에 따른 압력강하 상수값을 사용하여 원하는 압력강하량을 갖는 세장비를 찾을 수 있다. 이때 원하는 압력강하량을 갖는 설계가 불가능한 경우 다른 크기의 촉매를 사용하여 처음부터 다시 반복한다. 이러한 과정을 통해 최적화된 촉매대의 크기 설계를 완료할 수 있다.

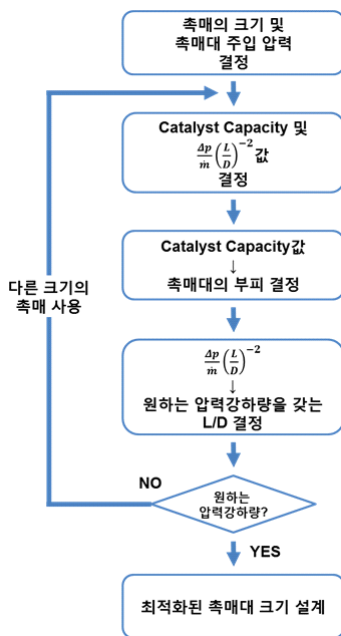


Fig. 5 Schematic process diagram for the optimized catalyst bed design

## 5. 결 론

본 연구에서는 촉매대의 최적설계를 위해 모델링을 활용하였다. 기존에 존재하는 촉매대 모델을 검증하기 위해 100 N 과산화수소 단일추진제 추력기를 이용하여 다양한 조건에서 실험하였다. 다양한 조건에서 모델 예측결과와 실험 결과가 비교적 일치함을 확인하였다. 검증된 모델

을 통해 최적화된 Catalyst Capacity값과 이때의 압력강하량이 유량과 세장비의 제공에 비례하여 이를 상수로 나타낼 수 있음을 도출하였다. 이를 통해 최적화된 Catalyst Capacity값과 압력강하 상수값을 사용하는 촉매대의 최적설계 과정을 제시하였다. 향후 더 큰 스케일을 가진 추력기를 사용한 모델 검증을 수행할 것이며, 모델을 발전시켜 압력강하 예측의 정확도를 높일 것이다.

## 사 사

이 논문은 2016년도 정부(미래창조과학부)의 지원으로 한국연구재단과 한국항공우주연구원의 지원을 받아 수행된 연구임(No. NRF-2016M1A3A1A02021169)

## 참 고 문 헌

1. Ventura, M., Mullens, P., "The Use of Hydrogen Peroxide for Propulsion and Power," 35th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, AIAA, 1999-2880.
2. Musker, A., J., Rusek, J., J., Kappenstein, C., and Roberts, G., T., "Hydrogen Peroxide - From Bridesmaid to Bride," 3<sup>rd</sup> ESA International Conference on Green Propellants for Space Propulsion, Poitiers, France, Sep 2006.
3. A. Pasini, L. Torre, L. Romeo, A. Cervone, L. d'Agostino, "Reduced-Order Model for H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Catalytic Reactor Performance Analysis," Journal of Propulsion and Power, Vol. 26, No. 3, 2010, pp. 446-453.
4. R.-J. Koopmans, J. S. Shrimpton, G. T. Roberts, A. J. Musker, "Dependence of Pellet Shape and Size on Pressure Drop in H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Thrusters," Journal of Propulsion and Power, Vol. 30, No. 3, 2014, pp. 775-789.

5. Ergun, S., "Fluid Flow Through Packed Columns," Chemical Engineering Progress, Vol. 48, American Institute of Chemical Engineers, New York, 1952, pp. 89-94.
6. 허선욱, "드리블 볼륨이 단일추진제 추력기의 응답특성에 미치는 영향," 석사학위논문, 2014.